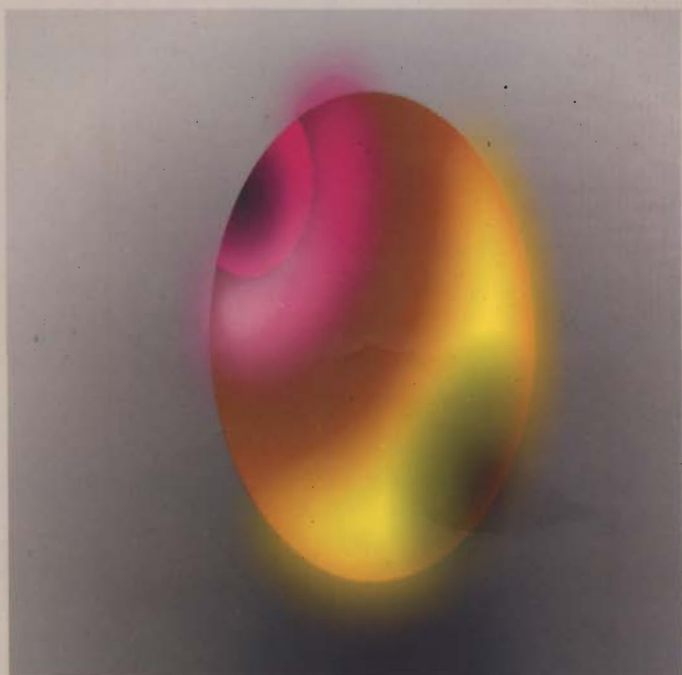
NGUYỄN HOÀNG PHƯƠNG

LÝ THUYẾT NHÓM VÀ ỨNG DỤNG VÀO VẬT LÝ HỌC LƯỢNG TỬ



NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

NGUYỄN HOÀNG PHƯƠNG

LÝ THUYẾT NHÓM VÀ ỨNG DỤNG VÀO VẬT LÝ HỌC LƯỢNG TỬ

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT
HÀ NỘI - 2002

Mở đầu

Khi nghiên cứu các đối tượng vật lý, chúng ta gặp phải một tính chất rất đặc biệt – tính chất đối xứng. Nói cụ thể hơn, đó là:

1. Tính chất đối xứng của không gian và thời gian trong các hệ quy chiếu quán tính, dẫn đến những định luật bảo toàn quen thuộc (định luật bảo toàn năng lượng, xung lượng, mômen xung lượng v.v...);

2. Tính chất đối xứng của các cấu trúc vật chất như tinh thể, phân tử, các hạt cơ bản, dẫn đến những phương pháp phân loại các mức (mức năng lượng, mức "khối lượng"), hay một số đại lượng khác.

Tính chất đối xứng của các đối tượng tự nhiên có thể "tính toán" bằng một bộ môn toán học trừu tượng gọi là lý thuyết nhóm. Nói chung, lý thuyết nhóm đã cung cấp cho vật lý học một phương pháp gọn, chính xác, bổ sung cho các phương pháp khác. Trong một số bài toán đặc biệt, có thể nói rằng một số mặt của vấn đề chỉ có thể giải quyết bằng công cụ lý thuyết nhóm.

Do đó, với sự phát triển hiện nay của vật lý học, phương pháp lý thuyết nhóm dần dần trở thành một phương pháp khá thông dụng, nói chung không thể thiếu được.

Cuốn sách này có mục đích giới thiệu với bạn đọc những điểm cơ sở nhất của lý thuyết nhóm và lý thuyết biểu diễn nhóm, cần thiết cho các lĩnh vực ứng dụng quan trọng nhất trong vật lý học lượng tử.

Trước khi đi vào phần chính tác giả xin phép nhắc lại sơ lược một số điểm cơ sở về toán học, có liên quan đến sự trình bày sau này.

Tập hợp và ánh xạ

Có thể nhận thức khái niệm **tập hợp** một cách trực giác, hay dựa trên khái niệm một số tập hợp cụ thể quen thuộc, như tập hợp số, tập hợp hàm số v.v...

Từ nhiều tập hợp giống nhau hay khác nhau, có thể kiến thiết các tập hợp tích có nội dung như sau: nếu $x \in \mathscr{X}$ và $y \in \mathscr{Y}$ thì tập hợp tích, ký hiệu là $\mathscr{X} \otimes \mathscr{Y}$ hay $\mathscr{X}\mathscr{Y}$ sẽ gồm những phần tử dạng (x, y). Chẳng hạn, mặt phẳng (x, y) là tập hợp tích của đường thẳng (x) và đường thẳng (y).

Ngoài ra, có thể định nghĩa khái niệm hợp và giao của hai tập hợp. **Hợp** của hai tập hợp với ký hiệu $\cup$ là tập hợp gồm những phần tử của cả hai tập hợp. **Giao** của hai tập hợp với ký hiệu $\cap$ là tập hợp chỉ gồm những phần tử chung của hai tập hợp đó. Có thể định nghĩa hợp và giao của nhiều tập hợp.

Mặt khác, trong một tập hợp xác định, có thể xuất hiện những quan hệ nào đó giữa các phần tử khác nhau có các tính chất phản xạ, đối xứng và bắc cầu và gọi là **quan hệ tương đương**. *Cụ thể hơn, x là tương đương với x (tính chất phản xạ). Nếu x tương đương với y thì y cũng tương đương với x (tính chất đối xứng). Cuối cùng, nếu x tương đương với y và y tương đương với z, thì x cũng tương đương với z (tính chất bắc cầu). Chẳng hạn, quan hệ bằng nhau giữa các số của tập hợp số là một quan hệ tương đương.* **Quan hệ đồng dạng** *(hai ma trận A và A' gọi là đồng dạng với nhau nếu $A' = SAS^{-1}$ với S là một ma trận nào đó) giữa các ma trận cũng là một quan hệ tương đương. Theo lệ thường, các phần tử có quan hệ tương đương với nhau làm thành một* **lớp**, *chẳng hạn là lớp các ma trận đồng dạng với nhau. Lớp các phần tử bằng nhau là loại đơn giản nhất, mỗi lớp chỉ gồm một phần tử. Như thế, với một quan hệ tương đương xác định, tập hợp chia thành nhiều lớp không giao nhau.*

Tiếp theo là khái niệm ánh xạ: giữa các tập hợp khác nhau hoặc giống nhau có thể có những sự tương ứng nào đó, gọi là **ánh xạ**. *Khái niệm hàm là một ví dụ. Cho hai tập hợp $\mathcal{X}$ và $\mathcal{Y}$ và một ánh xạ f;*

$$y = f(x)\ ,\ x \in \mathcal{X},\ y \in \mathcal{Y}.$$

Phần tử y gọi **ảnh** *của x. Nếu tất cả $y \in \mathcal{Y}$ đều là ảnh, thì ánh xạ f gọi là* **ánh xạ lên**. *Trong trường hợp trái lại, ánh xạ f gọi là* **ánh xạ vào**. *Mọi ánh xạ lên và một đối một đều nhận một ánh xạ ngược, ký hiệu là f^{-1}.*

$$x = f^{-1}(y).$$

Cấu trúc đại số

Với các khái niệm tập hợp và ánh xạ, ta có thể xác định một số phép tính đại số (hay luật hợp thành) như phép cộng, phép nhân, có những tính chất nào đó (kết hợp, giao hoán, phân bố v.v...). Từ đó, có thể xây dựng được những cấu trúc đại số cơ bản như sau:

Cấu trúc nhóm, cấu trúc trường, cấu trúc thể, cấu trúc vành, cấu trúc không gian tuyến tính, cấu trúc đại số kết hợp, cấu trúc đại số Lie v.v...

Trong số các cấu trúc trên, quen thuộc nhất là cấu trúc **trường**. *Chẳng hạn là trường số thực R, hay trường số phức C. Một đặc điểm chủ yếu của trường số phức là kín đại số: mọi phương trình đại số có hệ số phức luôn luôn có nghiệm là số phức. Trái lại, trường số thực không có tính chất kín đại số đó. Chẳng hạn phương trình đại số có hệ số thực $x^2 + 1 = 0$, không có nghiệm là số thực.*

Với cấu trúc trường $\mathcal{K}$, có xác định hai phép tính sau:

I - Phép cộng (ánh xạ từ $\mathcal{K} \otimes \mathcal{K}$ lên $\mathcal{K}$) có các tính chất:

a) Giao hoán: $a + b = b + a$ với mọi $a, b \in \mathcal{K}$.

b) Kết hợp: $a + (b + c) = (a + b) + c$ với mọi $a, b, c \in \mathcal{K}$.

c) Mọi phần tử đều có phần tử nghịch đảo tương ứng $-a$.

II - Phép nhân (ánh xạ từ $\mathcal{K} \otimes \mathcal{K}$ lên $\mathcal{K}$) có các tính chất sau:

a) Giao hoán: $ab = ba$ với mọi $a, b \in \mathcal{K}$.

b) Kết hợp: $a(bc) = (ab)c$ với mọi $a, b, c \in \mathcal{K}$.

c) Mọi phần tử a đều có phần tử nghịch đảo tương ứng a^{-1}, trừ phần tử không.

III - Giữa hai phép tính trên, có tính chất phân bố

$$a(b + c) = ab + ac \text{ với mọi } a, b, c \in \mathcal{K}.$$

Sự mở rộng trực tiếp của khái niệm trường là khái niệm thể, trong đó phép nhân là không giao thoa. Ví dụ điển hình là thể quaternion.

Trong khái niệm cấu trúc ***vành,*** *khác với cấu trúc trường, không có xác định "phép chia" (nói chính xác hơn, trong cấu trúc vành không đưa ra khái niệm nghịch đảo của các phần tử đối với phép nhân). Các ví dụ về vành là vành đa thức, vành ma trận.*

Cấu trúc ***không gian tuyến tính*** *được xác định bởi phép cộng giữa các phần tử của tập hợp và phép nhân các phần tử với những số phức (trường hợp thông dụng nhất), thỏa mãn những tính chất quen thuộc nào đó. Không gian ba chiều thông thường, không gian Minkovski của lý thuyết tương đối, không gian $2l + 1$ chiều của các hàm cầu Y_l^m $(-l \leq m \leq l)$, các không gian hàm số khác nhau, các không gian ma trận là những ví dụ về không gian tuyến tính. Khái niệm về không gian tuyến tính là cơ sở của môn đại số tuyến tính.*

Nếu trong cấu trúc không gian tuyến tính n chiều, ta định nghĩa thêm một phép nhân kết hợp giữa các phần tử, thì không gian tuyến tính biến thành một ***đại số kết hợp****. Ví dụ điển hình là đại số kết hợp các số phức, đại số kết hợp các ma trận, các toán tử.*

Về cấu trúc ***nhóm và đại số Lie,*** *chúng ta sẽ trình bày trong phần sau.*

Đại số tuyến tính

Đại số tuyến tính nghiên cứu các tính chất của đại số các toán tử tuyến tính, tác dụng trong không gian tuyến tính nói chung, và trong không gian Hilbert nói riêng. Không gian Hilbert là những không gian tuyến tính $\mathcal{M}$ trong đó có xác định một tích vô hướng, thỏa mãn các tính chất sau:

$$(x,y + z) = (x,y) + (x,z) \text{ với mọi } x,y,z \in \mathcal{M}.$$

$$(\lambda x, y) = \lambda^*(x,y) \text{ với mọi } x, y \in \mu, \ \lambda \in C,$$

$$(x,y) = (y,x)^*, \text{ với mọi } x, y \in \mathcal{M}, \text{ dấu } * \text{ trỏ liên hợp phức.}$$

$$(x,x) \geq 0, \text{ và chỉ bằng không khi } x = 0.$$

Một toán tử A gọi là tuyến tính nếu

$$A(\lambda x + \mu y) = \lambda Ax + \mu Ay \text{ với mọi } \lambda, \mu \in C, \ x, y \in \mathcal{M}$$

Các toán tử tuyến tính A thỏa mãn tính chất:

$$(Ax, y) = (x, Ay) \text{ với mọi } x, y \in \mathcal{M}$$

gọi là ***hecmitic.***

Một toán tử U gọi là ***unita*** *nếu*

$$(Ux, Uy) = (x,y) \text{ với mọi } x, y \in \mathcal{M}$$

Nếu

$$Ax = ax, \ x \neq 0. \ a \in C$$

thì a gọi là trị riêng của A, còn x gọi là vectơ riêng tương ứng (bài toán trị riêng). Bài toán trị riêng là tương đương với bài tính chéo hóa toán tử A. Các ma trận unita và hecmitic đều có thể chéo hóa bằng ma trận unita.

Các toán tử hecmitic có các tính chất chủ yếu sau:

– Các trị riêng là thực.

– Các vectơ riêng làm thành một hệ trực chuẩn,

– Hai toán tử hecmitic giao hoán với nhau có hàm riêng chung và ngược lại.

Đại số tuyến tính còn nghiên cứu bài tính đưa các dạng toàn phương về dạng chính tắc. Ở đây định luật quán tính được tôn trọng.

Một vấn đề tối quan trọng trong đại số tuyến tính là vấn đề cơ sở. Cơ sở là những phương tiện ta cần dùng để biểu diễn các vectơ của không gian tuyến tính, các toán tử tác dụng trong không gian đó. Khi thay đổi cơ sở thì ma trận toán tử biến thành ma trận đồng dạng, tức là các ma trận biểu diễn một toán tử xác định trong những cơ sở khác nhau làm thành một lớp. Nhưng do phương tiện có thể chọn tùy ý, nảy ra vấn đề tìm các đại lượng không phụ thuộc vào cách chọn cơ sở, các đại lượng này gọi là bất biến. Các trị riêng và vết các toán tử là những bất biến.

Về mặt lý vật lý, với tích vô hướng đại số tuyến tính tiếp cận và đi sâu vào vật lý học, vì những đại lượng cơ bản nhất của vật lý như chiều dài, xác suất đều có thể mô tả bằng những tích vô hướng nào đó.

Mặt khác, do những tính chất nói trên, các toán tử hecmitic đã trở thành những đại lượng vật lý cơ sở của vật lý học lượng tử: tính bất biến của các trị riêng các toán tử biểu hiện tính độc lập giữa các tính chất chủ yếu của các hiện tượng vật lý đối với các phương tiện của người nghiên cứu.

Cuối cùng, các dạng toàn phương trong vật lý học là bình phương chiều dài, bình phương khoảng, động năng, thế năng (tại vị trí cân bằng bền).

Bài toán quy đồng thời một số dạng toàn phương về dạng chéo có ứng dụng trực tiếp trong khi nghiên cứu dao động của một hệ nhiều hạt, như dao động của các hạt nhân phân tử, tinh thể.

Trong lần tái bản này của cuốn sách, tác giả có thêm ý kiến sau:

Nếu theo tuyến toán học về tính chất: ***Giao hoán, Kết hợp*** *của các luật hợp thành thì, khi Lý thuyết Nhóm nói chung phá vỡ được tính giao hoán mà còn giữ được tính kết hợp của phép nhân, Lý thuyết Octonion (hay là số Cayley 8 chiều) lại phá vỡ nốt tính chất kết hợp của phép nhân.*

Và điều rất đáng ngạc nhiên là

** Một số thuyết Đông phương, như Bát Hướng, Bát Môn... chính lại là Lý thuyết Nhóm.*

** Kinh Dịch Đông phương một phần lớn lại chính là một Lý thuyết Octonion với tính không kết hợp của nó và Bát Quái là một Octonion cơ sở Tám chiều, một sự gặp gỡ lạ lùng giữa Đông và Tây.*

** Mặt khác, theo cách nhìn riêng của tác giả thì ngay Kinh Dịch cũng có nhiều triển vọng mở được nhiều phương hướng mới trong Lý thuyết các Hạt cơ bản, chẳng hạn là trên Hình Vuông Mặt Trời, mỗi hạt là một tích trực tiếp giữa Tứ Tượng và Bát Quái.*

Các điều nói trên đây đã được tác giả trình bày trong Hội thảo Quốc tế về Việt Nam học tại Hà Nội, tháng 7 năm 1998.

Hà Nội tháng 07 năm 2001

NGUYỄN HOÀNG PHƯƠNG

KÝ HIỆU

Nói chung, các tập hợp được ký hiệu bằng các chữ hoa như $\mathscr{G}$, $\mathscr{H}$ (nhóm), $\mathscr{M}$, $\mathscr{N}$ (không gian), $\mathscr{D}$ (biểu diễn) v.v... trừ các trường hợp rất thông dụng như nhóm SU (n), SO (n) v.v...

Các vectơ được ký hiệu bằng các chữ in đậm.

ab, **a** . **b**, (**a**,**b**) = tích vô hướng các vectơ **a** và **b**.

[**a** × **b**] = tích vectơ các vectơ **a** và **b**.

$\mathscr{G} \downarrow \mathscr{H}$ = phép biểu diễn hạ cảm từ nhóm $\mathscr{G}$ xuống nhóm $\mathscr{H}$.

$\mathscr{H} \uparrow \mathscr{G}$ = phép biểu diễn thượng cảm từ nhóm $\mathscr{H}$ lên nhóm $\mathscr{G}$.

$\mathscr{G} \otimes \mathscr{H}$ = tích trực tiếp các nhóm $\mathscr{G}$ và $\mathscr{H}$.

$\mathscr{G} \otimes \mathscr{H}$ = tích nửa trực tiếp các nhóm $\mathscr{G}$ và $\mathscr{H}$.

$\mathscr{A} \oplus \mathscr{B}$ = tổng trực tiếp các đại số Lie $\mathscr{A}$ và $\mathscr{B}$.

$\mathscr{A} \oplus \mathscr{B}$ = tổng nửa trực tiếp các đại số Lie $\mathscr{A}$ và $\mathscr{B}$.

Về cách đọc các chương xem hướng dẫn, cuối mỗi chương.

CHƯƠNG I

ĐẠI CƯƠNG VỀ NHÓM

§1. CẤU TRÚC NHÓM

Định nghĩa nhóm

Cho một tập hợp $\mathcal{G}$, trong đó có xác định một luật hợp thành nào đó, gọi là *phép nhân*, cho phép lập từ mỗi cặp phần tử x, y $\in \mathcal{G}$ một đại lượng xác định nào đó, gọi là *tích* và ký hiệu là xy.

Nếu phép nhân có các tính chất sau:

Tính kín

$$xy \in \mathcal{G} \text{ với mọi } x, y \in \mathcal{G}.$$

Tính kết hợp

$$x(yz) = (xy)z \text{ với mọi } x, y, z \in \mathcal{G}. \tag{1-1}$$

Tính có đơn vị

Có tồn tại một phần tử e $\in \mathcal{G}$ gọi là *đơn vị*, có tính chất

$$ex = xe = x \text{ với mọi } x \in \mathcal{G}. \tag{1-2}$$

Tính có nghịch đảo

Với mọi phần tử $x \in \mathcal{G}$, có tồn tại một phần tử xác định $x^{-1} \in \mathcal{G}$, có tính chất

$$xx^{-1} = x^{-1}x = e, \text{ với mọi } x \in \mathcal{G}, \tag{1-3}$$

thì tập hợp $\mathcal{G}$ gọi là một *nhóm* (hay cấu trúc nhóm).

Nhóm con

Mọi tập con $\mathcal{H}$ của nhóm $\mathcal{G}$, cũng làm thành một nhóm đối với phép nhân của nhóm $\mathcal{G}$, gọi là *nhóm con* của $\mathcal{G}$.

Tất nhiên đơn vị e và toàn bộ nhóm $\mathcal{G}$ đều là những nhóm con của $\mathcal{G}$. Hai nhóm con này gọi là nhóm con *tầm thường*. Những nhóm con không tầm thường gọi là nhóm con *thực sự*.

Nhóm giao hoán

Nếu

$$xy = yx, \ x, y \in \mathcal{G} \tag{1-4}$$

thì hai phần tử x và y gọi là *giao hoán* với nhau.

Nếu (1-4) đúng với mọi x và y, thì nhóm $\mathcal{G}$ gọi là một nhóm *giao hoán* hay nhóm *Abel*.

Với nhóm giao hoán, phép nhân thường gọi là phép *cộng*. Đơn vị ký hiệu là 0, nghịch đảo của x ký hiệu là — x. Nhóm gọi là nhóm *cộng*.

Nhóm tuần hoàn

Ký hiệu

$$\underbrace{x\,x \ldots x}_{\text{n lần}} = x^n ;$$

phần tử x^n gọi là *lũy thừa bậc* n của x.

Một nhóm trong đó các phần tử đều là những lũy thừa khác nhau của cùng một phần tử gọi là *nhóm tuần hoàn*.

Một nhóm tuần hoàn tất nhiên là giao hoán.

Nhóm hữu hạn, vô hạn và liên tục

Số phần tử của một nhóm gọi là *cấp* của nhóm. Nếu cấp là một số giới nội, nhóm gọi là *hữu hạn*. Trong trường hợp trái lại, nhóm gọi là *vô hạn*. Một nhóm *vô hạn* có các phân tử biến thiên liên tục gọi là *nhóm liên tục*.

§2. MỘT SỐ VÍ DỤ

Nhóm $\mathcal{C}_i$

Tập hợp

$$\mathcal{C}_i = \{e, I\},$$

với I là phép nghịch đảo không gian

$$I\,\mathbf{r} = -\mathbf{r},$$

rõ ràng làm thành một nhóm, phép nhân nhóm là phép thực hiện liên tiếp các phép biến đổi của nhóm (cụ thể là phép biến đổi đơn vị e và phép nghịch đảo không gian I). Nhóm này là một nhóm tuần hoàn, hữu hạn, cấp hai. Ta có

$$I^2 = e, \; I^{-1} = I.$$

Nhóm $\mathcal{C}_s$

Tập hợp

$$\mathcal{C}_s = \{e, \sigma\},$$

với σ là phép phản chiếu qua một mặt phẳng nào đó, (cũng ký hiệu là σ), rõ ràng cũng là một nhóm tuần hoàn, hữu hạn, cấp hai. Phép nhân ở đây cũng hiểu theo nghĩa thực hiện liên tiếp các phép biến đổi thuộc nhóm (phép biến đổi đơn vị và phép phản chiếu σ). Ta có

$$\sigma^2 = e, \; \sigma^{-1} = \sigma.$$

Nhóm $\mathcal{C}_n$

Tập hợp

$$\mathcal{C}_n = \{e, C_n, C_n^2, \ldots, C_n^{n-1}\},$$

với C_n là phép quay trong mặt phẳng với góc $\varphi = 2\pi/n$, làm thành một nhóm. Phép nhân là phép thực hiện liên tiếp các phép quay trong mặt phẳng.

Phần tử nghịch đảo:

$$(C_n^k)^{-1} = C_n^{n-k}, \tag{2-1}$$

do $C_n^n = e$.

Nhóm này là một nhóm hữu hạn tuần hoàn cấp n.

Nhóm Z_n

Tập hợp tất cả các căn bậc n của đơn vị cũng làm thành một số nhóm tuần hoàn, gọi là nhóm $Z_n^{(m)}$:

$$Z_n^{(m)} = \{e, \omega_n^{(m)} \omega_n^{(m)2}, \ldots, \omega_n^{(m)^{n-1}}\}, \tag{2-2}$$

$$\omega^{(m)} = \exp \frac{i\, 2\pi\, m}{n}, \quad (m = 0, \ldots, n-1).$$

Phép nhân là phép nhân thông thường các số phức.

Nhóm $Z_n \equiv Z_n^{(1)}$ là nhóm tuần hoàn điển hình, cấp n.

Nhóm $\mathcal{D}_2$

Tập hợp

$$\mathcal{D}_2 = \{e, a, b, c\},$$

với e là đơn vị và phép nhân xác định như sau

$$a^2 = b^2 = c^2 = e, \quad ab = ba = c, \quad bc = cb = a, \quad ac = ca = b, \tag{2-3}$$

và giả sử là kết hợp, rõ ràng làm thành một nhóm. Các phần tử nghịch đảo tương ứng là

$$a^{-1} = a, \quad b^{-1} = b, \quad c^{-1} = c,$$

Nhóm $\mathcal{D}_2$ là một nhóm hữu hạn, cấp bốn giao hoán

Nhóm $\mathcal{D}_3$

Tập hợp

$$\mathcal{D}_3 = \{e, a, b, c, d, f\},$$

với e là đơn vị phép nhân xác định như sau

$$a^2 = b^2 = c^2 = e, \quad ab = ca = bc = f^2 = d, \quad ac = ba = cb = d^2 = f, \; ad =$$
$$= cf = dc = fa = b, \quad af = bd = da = fb = c, \quad bf = cd = db = fc = a, \tag{2-4}$$

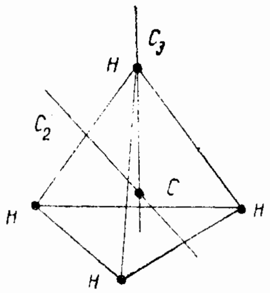
và giả thiết là kết hợp, rõ ràng làm thành một nhóm. Các phần tử nghịch đảo tương ứng là

$$a^{-1} = a, \quad b^{-1} = b, \quad c^{-1} = c, \quad d^{-1} = f, \quad f^{-1} = d.$$

Nhóm $\mathcal{D}_3$ là một nhóm hữu hạn, cấp sáu, không giao hoán.

Nhóm $\mathcal{C}$

Ta hãy xét phân tử CH_4, ở đó hạt nhân C nằm ở tâm của một tứ diện đều và bốn hạt nhân H nằm ở bốn đỉnh của tứ diện. Các phép quay làm cho phần tử trùng với chính nó (cũng như làm cho tứ diện đều trùng với chính nó), rõ ràng làm thành một nhóm, gọi là nhóm $\mathcal{T}$. Nhóm $\mathcal{T}$ gồm các nhóm con sau:



Hình 1-1

Bốn nhóm con $\mathcal{C}_3$, gồm những phép quay C_3, C_3^2, $C_3^3 = e$ quanh bốn trục đi qua một đỉnh và tâm điểm của mặt đối diện.

Ba nhóm con $\mathcal{C}_2$, gồm những phần tử C_2, $C_2^2 = e$, quanh ba trục đi qua tâm điểm những cạnh đối diện.

Nhóm $\mathcal{T}$ là một nhóm hữu hạn, cấp 12 (thuộc một loại nhóm gọi là nhóm điểm, như sẽ thấy sau này).

Nhóm $\mathbf{R}^3$

Tập hợp tất cả các vectơ **a** của không gian ba chiều với phép cộng thông thường, làm thành một nhóm liên tục, giao hoán, ký hiệu là $\mathbf{R}^3$.

Đơn vị: vectơ **0**.

Phần tử nghịch đảo: $\mathbf{a}^{-1} = -\mathbf{a}$.

Nói riêng, ta có

Nhóm R

Là nhóm các số thực, với phép cộng thông thường.

Nhóm tịnh tiến T_3

Ta xét tập hợp tất cả các phép tịnh tiến T_a trong không gian ba chiều thông thường. Các phần tử của tập hợp được xác định bằng vectơ tịnh tiến **a**.

Phép nhân xác định như sau: $T_aT_b = T_{a+b}$.

Đơn vị: $e = T_0$.

Phần tử nghịch đảo: $T_a^{-1} = T_{-a}$.

Rõ ràng tập hợp này làm thành một nhóm liên tục, giao hoán, ký hiệu là T_3.

Tương tự như thế, tập hợp tất cả các phép tịnh tiến trong các không gian tuyến tính n chiều cũng làm thành những nhóm liên tục, giao hoán, ký hiệu là T_n.

Nhóm SO(2)

Ta xét tập hợp tất cả các phép quay $g(\varphi)$ trong mặt phẳng. Các phần tử được xác định bằng góc quay $\varphi (0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi)$.

Phép nhân xác định như sau: $g(\psi)\, g(\varphi) = g(\psi + \varphi)$. (2-5)

Đơn vị: $e = g(0)$.

Phần tử nghịch đảo: $g^{-1}(\varphi) = g(-\varphi)$.

Rõ ràng tập hợp trên làm thành một nhóm liên tục, giao hoán, ký hiệu là SO(2). Nhóm $\mathcal{C}_n$ là nhóm con của nhóm SO(2).

Nhóm SO(3)

Tập hợp tất cả các phép quay trong không gian ba chiều quanh một điểm cố định nào đó rõ ràng cũng làm thành một nhóm — ký hiệu là SO(3) — với phép nhân quan niệm là sự thực hiện hai phép quay liên tiếp nhau. Các phần tử của nhóm ký hiệu là $g_k(\varphi)$ với **k** là trục quay và φ là góc quay.

Đơn vị: $e = g_k(0)$, với mọi **k**.

Phần tử nghịch đảo: $g_k^{-1}(\varphi) = g_k(-\varphi)$.

Nhóm SO(3) là một nhóm liên tục, không giao hoán.

Rõ ràng các nhóm $\mathcal{C}$ và SO(2) là những nhóm con của nhóm SO(3).

Nhóm ma trận

Tập hợp tất cả các ma trận cấp n xác định trên C với phép nhân ma trận thông thường có các tính chất sau:

a) Phép nhân ma trận là kín,

b) Phép nhân có tính chất kết hợp,

c) Có tồn tại đơn vị của phép nhân, là ma trận đơn vị I_n,

d) Trừ các ma trận kỳ dị, tức là có định thức bằng không, tất cả các ma trận cấp n đều có nghịch đảo, tính theo phương pháp thông thường.

Như vậy, tập hợp tất cả các ma trận cấp n xác định trên C và có định thức khác không làm thành một nhóm liên tục, không giao hoán với phép nhân ma trận thông thường.

Nhóm này gọi là *nhóm ma trận cấp n*. Nhóm ma trận là nhóm điển hình nhất.

§ 3. BẢNG NHÓM

Bảng nhóm

Với các nhóm hữu hạn, một cách trình bày cụ thể phép nhân nhóm là dùng bảng nhóm ở đó phép nhân biểu thị theo sơ đồ sau

$$\mathcal{G}: \quad \begin{array}{c|c} e & \dots b \\ \hline \vdots & \vdots \\ a & \dots ab \end{array}$$

Tất nhiên việc cho bảng nhóm của một nhóm là tương đương với định nghĩa nhóm đó.

Ví dụ

$$\mathcal{C}_i: \begin{array}{c|c} e & I \\ \hline I & e \end{array} \qquad \mathcal{C}_2: \begin{array}{c|c} e & C_2 \\ \hline C_2 & e \end{array} \qquad \mathcal{C}_s: \begin{array}{c|c} e & \sigma \\ \hline \sigma & e \end{array} \qquad (3\text{-}1)$$

$\mathcal{D}_2$:

e	a	b	c
a	e	c	b
b	c	e	a
c	b	a	e

(3-2)

$\mathcal{D}_3$:

e	a	b	c	d	f
a	e	d	f	b	c
b	f	e	d	c	a
c	d	f	e	a	b
d	c	a	b	f	e
f	b	c	a	e	d

(3-3)

Nhóm quaternion Q

Q:

e	$-e$	i	$-i$	j	$-j$	k	$-k$
$-e$	e	$-i$	i	$-j$	j	$-k$	k
i	$-i$	$-e$	e	k	$-k$	j	$-j$
$-i$	i	e	$-e$	$-k$	k	$-j$	j
j	$-j$	$-k$	k	$-e$	e	i	$-i$
$-j$	j	k	$-k$	e	$-e$	$-i$	i
k	$-k$	j	$-j$	$-i$	i	$-e$	e
$-k$	k	$-j$	j	i	$-i$	e	$-e$

(3-4)

Nhóm quaternion là nhóm gồm 8 phần tử e, $-e$, i, $-i$, j, $-j$, k, $-k$ mà phép nhân kết hợp xác định theo bảng trên. Trong đại số học, người ta thường gọi số quaternion là tổ hợp tuyến tính

$$ae + bi + cj + dk\ ;\ a, b, c, d \in R,\ R = \text{trường số thực}$$

Tập hợp các số quaternion với phép nhân xác định theo bảng trên, làm thành một cấu trúc đại số gọi là thể quaternion.

§ 4. NHÓM ĐỐI XỨNG

Định nghĩa

Cho một tập hợp n vật 1, 2,..., n. Dễ thấy rằng tập hợp tất cả các hoán vị n vật đó, với phép nhân hiểu theo nghĩa thực hiện các hoán vị liên tiếp nhau, làm thành một nhóm gọi là nhóm *đối xứng*, ký hiệu là S_n. Các phần tử của nhóm có thể ký hiệu như sau

$$g = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{bmatrix},$$

với nghĩa là vật 1 biến thành vật p_1, vật 2 biến thành vật p_2, v.v...

Đơn vị: $$e = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{bmatrix}.$$

Phần tử nghịch đảo: $$g^{-1} = \begin{bmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{bmatrix}.$$

Nhóm S_n là một nhóm hữu hạn, không giao hoán. Cấp của nhóm bằng $n!$.

Chu trình

Cách ký hiệu trên có ưu điểm là cụ thể, nhưng không nêu được cấu trúc của các hoán vị, một điều rất cần thiết cho sự nghiên cứu các đặc tính của nhóm đối xứng. Cần đưa ra khái niệm chu trình. Để được cụ thể, ta lấy ví dụ sau ($n = 8$).

Cho hoán vị
$$g = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 2 & 4 & 7 & 5 & 1 & 6 & 8 & 3 \end{bmatrix}.$$

Trước hết, ta lấy phần tử 1, phần tử này biến thành phần tử 2, phần tử 2 lại biến thành phần tử 4, phần tử 4 biến thành phần tử 5, phần tử 5 lại biến thành phần tử xuất phát là phần tử 1. Ta nói đã đóng kín một *chu trình*. Chu trình này ký hiệu là (1, 2, 4, 5). Tiếp theo, ta chọn trong hàng trên của hoán vị một phần tử không có mặt trong chu trình trên, chẳng hạn phần tử 3. Xuất phát từ phần tử này, tiến hành như trên, ta sẽ được chu trình (3, 7, 8). Cuối cùng, chỉ còn lại phần tử 6, làm thành một chu trình. Như thế, ta có thể viết hoán vị trên dưới dạng tích
$$g = (1,\ 2,\ 4, 5)\ (3,\ 7,\ 8).$$

(Các chu trình chỉ gồm một phần tử để gọn thường ta không viết). Theo cách tiến hành trên, ta thấy các chu trình khác nhau không có phần tử chung. Do đó, thứ tự viết các chu trình không quan trọng.

Ta cần lưu ý rằng trong mọi chu trình, ta có thể bắt đầu bằng bất kỳ phần tử nào của chu trình. Chẳng hạn, ta có thể viết
$$(1,\ 2,\ 4,\ 5) = (4,\ 5,\ 1,\ 2)$$

Số phần tử của chu trình gọi là *chiều dài* của chu trình.

Chuyển vị

Một chu trình có chiều dài bằng hai gọi là *chuyển vị*.

Mọi chu trình đều có thể viết dưới dạng tích nhiều chuyển vị, vì dễ thấy rằng
$$(s_1,\ s_2, \dots,\ s_p) = (s_1 s_p) \dots (s_1,\ s_3)\,(s_1,\ s_2). \qquad (4\text{-}1)$$

Do các chuyển vị khác nhau trong (4-1) có phần tử chung (là s_1), cần tôn trọng thứ tự các chuyển vị trong biểu thức phân tích trên. Chẳng hạn $(1, 2)\ (1, 3) = = (1,\ 3,\ 2) \neq (1,\ 3)(1,\ 2) = (1,\ 2,\ 3)$.

Các kết quả vừa tìm được cho thấy rằng tất cả các hoán vị đều có thể phân thành tích nhiều chuyển vị.

Hoán vị chẵn, lẻ

Một hoán vị gọi là chẵn (lẻ), nếu số chuyển vị của hoán vị là chẵn (lẻ). Dễ thấy rằng tập hợp tất cả các hoán vị chẵn làm thành một nhóm con của nhóm S_n, ký hiệu là A_n, và gọi là nhóm *thay dấu*. Nhóm A_n có cấp bằng $n!/2$.

Chẳng hạn, ta có

$$A_3 = \{e, (1, 2, 3), (1, 3, 2)\}$$

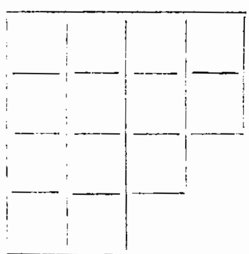
Nhóm thay dấu có ý nghĩa rất lớn trong lý thuyết biểu diễn một số nhóm quan trọng và trong việc lập các hàm sóng phản xứng của hệ nhiều hạt đồng nhất.

Sơ đồ Young

Ta hãy phân số nguyên n thành tổng có dạng

$$n = n_1 + n_2 + \dots, \quad n_1 \geqslant n_2 \geqslant n_3 \geqslant \dots \tag{4-2}$$

với n_i là những số nguyên không âm. Sau đó ta lấy n ô và xếp như sau



n_1 ô ở hàng đầu

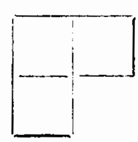
n_2 ô ở hàng thứ hai

n_3 ô ở hàng thứ ba

Các sơ đồ thu được tương ứng với những biểu thức phân tích khác nhau (4-2), gọi là *sơ đồ Young* của nhóm đối xứng S_n.

Sơ đồ Young ký hiệu là $\{n_1, n_2, \dots\}$.

Chẳng hạn, với $n = 3$, ta có các sơ đồ Young sau



$\{3\} \equiv \{3, 0, 0\}$ $\qquad$ $\{2, 1\} \equiv \{2, 1, 0\}$ $\qquad$ $\{1^3\} \equiv \{1, 1, 1\}$

Bảng Young

Điền các số 1, 2, 3,..., n vào các ô của các sơ đồ Young, ta thu được những bảng gọi là *bảng Young* của nhóm S_n.

Một bảng Young trong đó các số tăng dần khi chuyển từ trái sang phải và trên xuống dưới, gọi là *chuẩn*.

Chẳng hạn, ta có các bảng Young chuẩn sau :

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} \end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} \end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} \qquad (n=3)$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \text{v.v...} \qquad (n=4)$$

Toán tử Young (đối xứng hóa tử Young)

Các hoán vị trong mỗi hàng của bảng Young gọi là hoán vị *ngang*, ký hiệu là *p*. Các hoán vị trong mỗi cột gọi là *hoán vị dọc*, ký hiệu là q.

Ta lập tổng tất cả các hoán vị ngang theo mỗi hàng rồi lấy tích của các tổng ấy, kết quả thu được – ký hiệu là P – có dạng

$$P = \prod_{\text{hàng}} \sum p.$$

Tương tự như thế, ta lấy tổng các hoán vị dọc, mỗi hoán vị nhân với số

$$\delta_q = \begin{cases} 1 \text{ nếu } q \text{ là chẵn,} \\ -1 \text{ nếu } q \text{ là lẻ.} \end{cases}$$

Sau đó lấy tích như trên, kết quả thu được — ký hiệu là Q — có dạng

$$Q = \prod_{\text{cột}} \sum \delta_q q.$$

Thế thì, lượng

$$Y = QP$$

gọi là *toán tử Young* (hay đối xứng hóa tử Young), tương ứng với bảng Young đang xét.

Chẳng hạn với bảng Young

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array}$$

ta được

$$P = [e + (1,3)]\,[e + (2,4)],$$

$$Q = [e - (1,2)]\,[e - (3,4)],$$

$$Y = QP = [e - (1,2)]\,[e - (3,4)]\,[e + (1,3)]\,[e + (2,4)].$$

Sơ đồ Young liên hợp.

Hai sơ đồ Young gọi là *liên hợp* với nhau nếu các hàng của sơ đồ này bằng các cột của sơ đồ kia. Đối với các bảng Young cũng thế.

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

Hai bảng Young ở trên là liên hợp với nhau.

Một sơ đồ Young trùng với liên hợp của nó gọi là *tự liên hợp*. Chẳng hạn, sơ đồ Young $\{2^2\}$ là tự liên hợp.

§5. TÍNH ĐỒNG CẤU VÀ ĐẲNG CẤU GIỮA CÁC NHÓM

Định nghĩa

Cho hai nhóm $\mathcal{G}$ và $\mathcal{G}'$. Mọi ánh xạ f từ $\mathcal{G}$ vào $\mathcal{G}'$: $x \xrightarrow{f} f(x)$ thỏa mãn điều kiện

$$f(xy) = f(x)\,f(y) \text{ với mọi } x,\ y \in \mathcal{G}, \tag{5-1}$$

gọi là một *phép đồng cấu* từ $\mathcal{G}$ vào $\mathcal{G}'$.

Trong (5-1), cho $y = e$ (e là đơn vị của nhóm $\mathcal{G}$), dễ thấy rằng

$$f(e) = e' \text{ (e' là đơn vị của nhóm } \mathcal{G}'). \tag{5-2}$$

Tương tự như thế, cho $y = x^{-1}$, ta được từ (5-1)

$$f(x^{-1}) = f^{-1}(x) \text{ với mọi } x \in \mathcal{G}. \tag{5-3}$$

Nếu ánh xạ f là ánh xạ lên và một đối một: $x \leftrightarrow f(x)$ thì phép đồng cấu gọi là phép *đẳng cấu* và ta ký hiệu $\mathcal{G} \approx \mathcal{G}'$.

Khái niệm đẳng cấu cho phép đồng nhất những nhóm có cấu trúc như nhau, mặc dù các phần tử của các nhóm đó có thể có bản chất khác nhau (hoán vị, phép quay, số, ma trận...). Các định lý đại số cho các nhóm đẳng cấu với nhau đều như nhau.

Rõ ràng các nhóm hữu hạn với bảng nhóm giống nhau là đẳng cấu với nhau.

Ví dụ

$$\mathscr{C}_2 \approx \mathscr{C}_i \approx \mathcal{C}_s \approx S_2\,;$$

$$\mathcal{D}_3 \approx S_3 : \begin{cases} e \overset{f}{\leftrightarrow} e, \quad (1,2) \overset{f}{\leftrightarrow} a, \\ (1,2,3) \overset{f}{\leftrightarrow} d,\ (1,3) \overset{f}{\leftrightarrow} b, \\ (1,3,2) \overset{f}{\leftrightarrow} f,\ (3,2) \overset{f}{\leftrightarrow} c\,; \end{cases}$$

$$\mathcal{C}_n \approx Z_n : C_n \overset{f}{\leftrightarrow} \omega_n^{(\ )},\ \ \omega_n^{(1)} = \exp\frac{i2\pi}{n}\,;$$

$$T_3 \approx R^3 : T_{\mathbf{a}} \overset{f}{\leftrightarrow} \mathbf{a}\,;$$

R đồng cấu với SO(2): $\varphi + 2k\pi \overset{f}{\leftrightarrow} g(\varphi)$, k là số nguyên.

Các nhóm Aut$\mathcal{G}$, Int$\mathcal{G}$

Một phép đẳng cấu từ $\mathcal{G}$ lên chính nó gọi là một phép *tự đẳng cấu.*

Ta hãy chứng minh rằng tập hợp tất cả các tự đẳng cấu của một nhóm cũng lập thành một nhóm. Nhóm này gọi là *nhóm tự đẳng cấu* của $\mathcal{G}$ và ký hiệu là Aut $\mathcal{G}$.

Quả vậy, ta hãy đánh dấu các phép tự đẳng cấu A_i bằng chỉ số i. Trước hết, vì phép tương ứng

$$x \leftrightarrow x'_i = A_i x \quad x \in \mathcal{G}$$

là một phép tương ứng một đối một của $\mathcal{G}$ lên $\mathcal{G}$, nên phép tương ứng

$$x \leftrightarrow (A_i A_j)\, x$$

cũng là một sự tương ứng một đối một của $\mathcal{G}$ lên $\mathcal{G}$.

Tiếp theo, vì A_j là một tự đẳng cấu nên, theo (5-1), ta có

$$A_j(xy) = (A_j x)\,(A_j y), x, y \in \mathcal{G}.$$

Từ đó, với mọi phép tự đẳng cấu A_i và A_j, ta được.

$$(A_i A_j)\,(xy) = A_i[(A_j x)\,(A_j y)] = A_i(x'_j y_j') = (A_i x'_j)\,(A_i y_j') = (A_i A_j)\,x\,(A_i A_j)\,y.$$

Như thế $A_i A_j$ cũng là một phép tự đẳng cấu, phép nhân như thế là kín.

Đơn vị là phép tự đẳng cấu không làm thay đổi mọi phần tử của $\mathcal{G}$, còn phần tử nghịch đảo của A_i là phép tự đẳng cấu A_i^{-1} xác định bởi đẳng thức

$$A_i^{-1}\, x'_i = x,$$

nếu

$$x_i' = A_i x.$$

Như thế, tập hợp tất cả các phép tự đẳng cấu làm thành một nhóm.

Trong hàng ngũ các tự đẳng cấu, các tự đẳng cấu xác định bởi công thức

$$x \leftrightarrow x' = axa^{-1}, x \in \mathcal{G}$$

trong đó a là một phần tử xác định của $\mathcal{G}$, gọi là các *tự đẳng cấu trong.* Các tự đẳng cấu trong lập thành một nhóm, ký hiệu là Int$\mathcal{G}$. Các tự đẳng cấu khác các tự đẳng cấu trong gọi là *tự đẳng cấu ngoài.*

Chẳng hạn, với nhóm $\mathcal{D}_2$ có bảng nhóm (3-2)

e	a	b	c
a	e	c	b
b	c	e	a
c	b	a	e

thì nhóm gồm 6 hoán vị khác nhau sau đây giữa các phần tử a, b, c chính là nhóm tự đẳng cấu của $\mathcal{D}_2$:

$$e' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & a & b & c \end{bmatrix}, \; a' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & a & c & b \end{bmatrix},$$

$$b' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & c & b & a \end{bmatrix}, \; c' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & b & a & c \end{bmatrix},$$

$$d' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & b & c & a \end{bmatrix}, \; e' = \begin{bmatrix} e & a & b & c \\ e & c & a & b \end{bmatrix},$$

Nhóm tự đẳng cấu này chính là nhóm đối xứng S_3. Như thế ta có

$$\mathrm{Aut}\,\mathcal{D}_2 \approx S_3\ (\approx \mathcal{D}_3).$$

Sự nhúng nhóm

Khi một nhóm $\mathcal{G}$ đẳng cấu với một nhóm con nào đó của một nhóm khác $\mathcal{G}'$ thì ta nói rằng nhóm $\mathcal{G}$ có thể *đặt vào* (hay *nhúng vào*) nhóm $\mathcal{G}'$. Một nhóm $\mathcal{G}$ có thể đặt vào một nhóm $\mathcal{G}'$ khác bằng nhiều cách khác nhau. Chẳng hạn, nhóm đối xứng S_{n-1} là đẳng cấu với nhiều nhóm con khác nhau của nhóm S_n, các nhóm con này thu được bằng cách lần lượt để nguyên phần tử thứ i, $(i = 1,..., n)$ trong các hoán vị. Như thế là nhóm S_{n-1} có thể đặt trong nhóm S_n bằng nhiều cách khác nhau.

Một trong những vấn đề lớn đặt ra là xét cấu trúc của tất cả các nhóm hữu hạn. Nhóm đối xứng S_n đóng vai trò quan trọng trong vấn đề này, như sẽ thấy ở định lý sau

Định lý Cayley

Mọi nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$ đều có thể nhúng vào trong một nhóm đối xứng S_n nào đó.

Chứng minh

Quả vậy, cho một nhóm $\mathcal{G}$ hữu hạn nào đó, giả thiết gồm các phần tử khác nhau a_i:

$$\mathcal{G} = \{a_1, a_2, ..., a_n\}.$$

Ta hãy lấy một phần tử tùy ý $g \in \mathcal{G}$ và xét tất cả các tích

$$b_i = ga_i \in \mathcal{G}, \ (i = 1, ..., n).$$

Các b_i $(i = 1, ..., n)$ đều là khác nhau vì, nếu $b_j = b_k$, $j \neq k$, thì hóa ra $a_j = a_k$ với $j \neq k$, là một điều trái với giả thiết. Thành thử, tập hợp $\{b_1, b_2, ... b_n\}$ chính là nhóm $\mathcal{G}$ và chỉ khác tập hợp $\{a_1, a_2, ... a_n\}$ ở thứ tự các phần tử. Như thế, ứng với mỗi phần tử $g \in \mathcal{G}$ ta có một hoán vị xác định có dạng

$$P_g = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \dots a_n \\ b_1 & b_2 \dots b_n \end{pmatrix}$$

thuộc nhóm S_n.

Các hoán vị P_g và P_n tương ứng với hai phần tử khác nhau g và $h \in \mathcal{G}$ là khác nhau, vì nếu $P_g = P_h$ thì, từ các đẳng thức $ga_i = ha_i$ $(i = 1, ... n)$ hóa ra ta được $g = h$. Tiếp theo, giả sử

$$P_h = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \dots b_n \\ c_1 & c_2 \dots c_n \end{pmatrix}.$$

Thế thì tương ứng với tích hg là hoán vị

$$P_{hg} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \dots a_n \\ c_1 & c_2 \dots c_n \end{pmatrix} = P_h P_g.$$

Như thế, nhóm $\mathcal{G}$ được ánh xạ đẳng cấu, tức là được đặt vào trong nhóm S_n. Ảnh $f(\mathcal{G})$ của $\mathcal{G}$ là một nhóm con cấp n của nhóm S_n. Định lý Cayley được chứng minh.

Từ định lý Cayley ta rút ra được kết luận rất quan trọng sau. Vì nhóm S_n là một nhóm hữu hạn, nên nó chỉ có một số giới nội nhóm con. Do đó, số nhóm hữu hạn cùng cấp không đẳng cấu với nhau là giới nội.

§6. TẬP HỢP SINH

Định nghĩa

Gọi $\mathcal{X}$ là một tập hợp con của nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$. Thế thì tập hợp tất cả các tích mà các nhân tử là các phần tử của $\mathcal{X}$ gọi là *tập hợp sinh* bởi $\mathcal{X}$ và ký hiệu là $<\mathcal{X}>$. Trong $<\mathcal{X}>$, các tích khác nhau cho một kết quả như nhau đều xem như một phần tử duy nhất. Các phần tử của $\mathcal{X}$ gọi là *phần tử sinh.*

Nếu $<\mathcal{X}> = \mathcal{G}$, thì $\mathcal{X}$ gọi là *tập hợp sinh của nhóm* $\mathcal{G}$.

Hạng của nhóm

Số phần tử độc lập của $\mathcal{X}$ khi $<\mathcal{X}> = \mathcal{G}$ gọi là *hạng* của nhóm $\mathcal{G}$ (một phần tử nào đó gọi là độc lập với một số phần tử khác, nếu phần tử này không thể biểu diễn được theo các phần tử đó). Chẳng hạn các nhóm tuần hoàn $\mathcal{C}_n$ đều có hạng 1, vì mọi phần tử của $\mathcal{C}_n$ đều là lũy thừa của một phần tử nào đó (chẳng hạn phần tử C_n) của $\mathcal{C}_n$.

Nhóm $\mathcal{D}_3$ có hạng 2, vì tập hợp sinh có thể chọn là a và d (a với d độc lập với nhau). Ta có

$$b = ad,\ c = ad^2,\ f = d^2,\ e = a^2.$$

Nhóm cộng các số nguyên có hạng bằng 1, phần tử sinh là e = 1, các phần tử khác nhau của nhóm có dạng ne.

Nói chung, nếu $\mathcal{G}$ là một nhóm Abel có k phần tử sinh $e_1, \ldots, e_k$ thì mọi phần tử x của $\mathcal{G}$ đều có dạng

$$x = n_1e_1 + \ldots + n_ke_k,\ (n_1, \ldots, n_k \text{ là số nguyên}).$$

§7. CÁC LỚP KỀ VÀ ĐỊNH LÝ LAGRANGE

Định nghĩa

Cho $\mathcal{H}$ là một nhóm con nào đó của nhóm $\mathcal{G}$ và $a \in \mathcal{G}$. Thế thì tập hợp $a\mathcal{H}$ gọi là *lớp kề trái* của nhóm $\mathcal{G}$ theo nhóm con $\mathcal{H}$, xác định bởi phần tử a.

Tất nhiên, vì $e \in \mathcal{H}$, nên $a \in a\mathcal{H}$.

Mặt khác, nếu $b \in a\mathcal{H}$, tức là $b = ah_1$, $h_1 \in \mathcal{H}$, thì

$$b\mathcal{H} = ah_1\mathcal{H} = a\mathcal{H}$$

do $h_1\mathcal{H} = \mathcal{H}$. Như thế, mọi phần tử tùy ý của lớp kề trái đều có thể đại diện cho cả lớp kề đó, và hai lớp kề trái hoặc hoàn toàn trùng nhau hoặc không có phần tử chung.

Thành thử, nhóm $\mathcal{G}$ được phân thành một tập hợp nhiều lớp kề trái không giao nhau theo nhóm con $\mathcal{H}$. Ta nói có sự *phân tích Lagrange trái* của nhóm $\mathcal{G}$ theo nhóm con $\mathcal{H}$. Một trong các lớp kề trái chính là $\mathcal{H}$ khi $a \in \mathcal{H}$.

Sự *phân tích Lagrange phải* cũng định nghĩa tương tự như thế. Ví dụ

$$S_3 = \mathcal{H} + (1, 3)\,\mathcal{H} + (2, 3)\,\mathcal{H},$$

với

$$\mathcal{H} = \{e, (1, 2)\},$$

$$(1, 3)\mathcal{H} = \{(1, 3), (1, 2, 3)\},\ (2, 3)\mathcal{H} = \{(2, 3), (1, 3, 2)\}.$$

$$S_3 = \mathcal{H} + \mathcal{H}(1, 3) + \mathcal{H}(2, 3).$$

với

$$\mathcal{H}(1, 3) = \{(1, 3), (1, 3, 2)\}, \mathcal{H}(2, 3) = \{(2, 3), (1, 2, 3)\}.$$

Chỉ số của một nhóm con

Số lớp kề phải hay trái trong biểu thức phân tích Lagrange của $\mathcal{G}$ theo nhóm con $\mathcal{H}$ gọi là *chỉ số* của nhóm đó trong nhóm $\mathcal{G}$, và ký hiệu là h.

Chẳng hạn, nhóm con $\mathcal{H}$ nói trên có chỉ số bằng ba. Nhóm con $\{e, d, f\}$ của nhóm $\mathcal{D}_3$ có chỉ số bằng hai, vì

$$\mathcal{D}_3 = \{e, d, f\} + a\{e, d, f\}.$$

Định lý Lagrange

Cấp và chỉ số của mọi nhóm con của một nhóm hữu hạn là các ước số của cấp của nhóm đó.

Điều này thấy khá rõ vì mọi lớp kề đều có số phần tử như nhau và bằng cấp của nhóm con $\mathcal{H}$.

Hệ quả

Một nhóm hữu hạn có cấp bằng một số nguyên tố không thể có những nhóm con thực sự được.

§ 8. LỚP CÁC PHẦN TỬ LIÊN HỢP

Phần tử liên hợp

Định nghĩa. Nếu $b = xax^{-1}$, a, b, $x \in \mathcal{G}$ thì b gọi là *liên hợp với* a *do* x.

Tính phản xạ : a liên hợp với a (cho $x = e$).

Tính đối xứng : a liên hợp với b, khi b liên hợp với a, vì $a = yby^{-1}$ với $y = x^{-1}$.

Tính bắc cầu: nếu c liên hợp với b và b liên hợp với a thì c liên hợp với a. Quả vậy, từ $b = xax^{-1}$, $c = zbz^{-1}$, ta suy ra ngay $c = (zx)a(zx)^{-1}$.

Lớp các phần tử liên hợp

Quan hệ giữa hai phần tử liên hợp với nhau thỏa mãn ba tính chất của *quan hệ tương đương*. Theo thường lệ, quan hệ tương đương này dẫn đến sự phân nhóm thành từng lớp không giao nhau, mỗi lớp gồm những phần tử liên hợp với nhau và gọi là *lớp các phần tử liên hợp*.

Nói tóm lại, lớp các phần tử liên hợp chứa a, ký hiệu là [a], gồm tất cả các phần tử có dạng xax^{-1} khi x chạy khắp nhóm. Mọi lớp đều được xác định bởi đại biểu a của nó. Ta lưu ý rằng a có thể là bất kỳ phần tử nào của lớp.

Theo định nghĩa ta có $[e] = e$.

Với các nhóm giao hoán, theo định nghĩa ta có $[a] = a$, tức là số lớp bằng cấp của nhóm.

Các lớp của nhóm $\mathcal{D}_2$

Nhóm $\mathcal{D}_2$ là một nhóm giao hoán. Như thế, nhóm này có bốn lớp là e, a, b và c.

Các lớp của nhóm $\mathcal{D}_3$

Nhóm $\mathcal{D}_3$ phân thành ba lớp

$$[e] = e,\ [a] = \{a, b, c\} \text{ và } [d] = \{d, f\}$$
$$\text{do } b = faf^{-1},\ c = bab^{-1},\ f = ada^{-1}.$$

Các lớp của nhóm $\mathcal{C}$

Tương tự như thế, có thể chứng tỏ rằng các phần tử của nhóm $\mathcal{C}$ (xem I, §2) phân thành bốn lớp sau:

Phần tử đơn vị e làm thành một lớp,
Bốn phép quay C_3 quanh bốn trục C_3 làm thành một lớp,
Bốn phép quay C_3^2 quanh bốn trục C_3 làm thành một lớp,
Ba phép quay C_2 quanh ba trục C_2 làm thành một lớp.

Các lớp của nhóm S_n

Nhóm đối xứng S_n phân thành nhiều lớp, mỗi lớp có những hoán vị cùng cấu trúc chu trình.

Quả vậy, cho hai hoán vị a và x thuộc nhóm S_n

$$a = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{bmatrix},$$

$$x = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ xp_1 & xp_2 & \dots & xp_n \end{bmatrix},$$

với x_{p_i} là ảnh của phần tử p_i qua hoán vị x. Ta có

$$x^{-1} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & & q_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{bmatrix}.$$

Từ đó ta được

$$xax^{-1} = \begin{bmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ xp_1 & xp_2 & \dots & xp_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{bmatrix} =$$
$$= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \\ xp_1 & xp_2 & \dots & xp_n \end{bmatrix}$$

Ta thấy rằng hàng trên và hàng dưới của hoán vị liên hợp xax^{-1} của a là các *kết quả của hoán vị x tác dụng lên hàng trên và hàng dưới của a.*

Ví dụ, nếu

$$a = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix},$$

và

$$x = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix},$$

thì

$$xax^{-1} = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}.$$

Khi viết hoán vị a dưới dạng tích nhiều chu trình, thì phần tử liên hợp xax^{-1} sẽ là *kết quả thu được bằng cách tác dụng hoán vị x cho mỗi chu trình của a.*

Ví dụ nếu

$$a = (1, 2)(3, 4, 5) \text{ và } x = (2, 4, 1, 3, 5)$$

thì dưới tác dụng của x, chu trình (1, 2) biến thành chu trình (3, 4), còn chu trình (3, 4, 5) biến thành chu trình (5, 1, 2), tức là

$$xax^{-1} = (3, 4)(5, 1, 2).$$

Như thế, các phần tử liên hợp với nhau của nhóm S_n *có cùng cấu trúc chu trình.*

Chẳng hạn, với nhóm S_3 ta có ba lớp sau

$$[e] = e, \quad [(1, 2)] = \{(1, 2), (2, 3), (1, 3)\},$$
$$[(1, 2, 3)] = \{(1, 2, 3,), (1, 3, 2).\}$$

Vấn đề quan trọng đặt ra cho nhóm đối xứng S_n là tìm số lớp của nó. Ta hãy phân tích một hoán vị nào đó thuộc nhóm S_n thành chu trình. Giả sử có ν_1 chu trình có chiều dài bằng 1, ν_2 chu trình có chiều dài bằng 2,..., ν_n chu trình có chiều dài bằng n. [Chú ý rằng ν_n chỉ có thể bằng 1 khi $\nu_1 = \nu_2 = \dots = \nu_{n-1} = 0$, hoặc bằng 0].

Như thế ta có đẳng thức

$$\nu_1 + 2\nu_2 + \dots + n\nu_n = n, \qquad (8.1)$$

và ta nói rằng hoán vị nói trên có cấu trúc chu trình $(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \dots, n^{\nu_n})$ hay, vắn tắt hơn, có cấu trúc chu trình $(\nu) \equiv (\nu_1, \dots, \nu_n)$. Vì các phần tử của S_n có cùng cấu trúc chu trình làm thành một lớp, nên số lớp của S_n đúng là bằng số cách khác nhau phân chia số nguyên n theo công thức (8-1). Tiếp theo, nếu đặt

$$\nu_1 + \nu_2 + \dots \nu_n + = \lambda_1,$$
$$\nu_2 + \nu_3 + \dots + \nu_n = \lambda_2,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\nu_n = \lambda_n$$

ta được

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = n, \; \lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \dots \geqslant \lambda_n \geqslant 0. \qquad (8\text{-}2)$$

Cách phân tích số n theo công thức (8-2) gọi là một *phân hoạch* của n và ký hiệu là $\{\lambda\}$. Như thế, tương ứng với mỗi cấu trúc chu trình (ν) là một phân hoạch xác định $\{\lambda\}$ của số n. Ngược lại, ứng với mỗi phân hoạch $\{\lambda\}$ của n là một cấu trúc chu trình xác định (ν), trong đó

$$\nu_1 = \lambda_1 - \lambda_2,$$
$$\nu_2 = \lambda_2 - \lambda_3, \dots,$$
$$\nu_n = \lambda_n.$$

Như thế, ta thấy rằng *số lớp s của nhóm S_n bằng số phân hoạch khác nhau của số nguyên n.* Ví dụ với n = 1, 2, 3, 4 ta có các phân hoạch sau

$$n = 1 : \{\lambda\} = \{1\}, \; s = 1,$$
$$n = 2 : \{\lambda\} = \{2\}, \{1^2\}, \; s = 2,$$
$$n = 3 : \{\lambda\} = \{3\}, \{2, 1\}, \{1^3\}, \; s = 3,$$
$$n = 4 : \{\lambda\} = \{4\}, \{3, 1\}, \{2^2\}, \{2, 1^2\}, \{1^4\}, \; s = 5.$$

trong đó ta đã ký hiệu

$$\{2^2\} = \{2, 2\}, \{2, 1^2\} = \{2, 1, 1\} \text{ v.v...}$$

Do đó, nhóm S_1 có một lớp, nhóm S_2 có 2 lớp, nhóm S_3 có 3 lớp, nhóm S_4 có 5 lớp.

§ 9. CHUẨN HÓA TỬ

Định nghĩa

Tập hợp những phần tử $g \in \mathcal{G}$ giao hoán với một phần tử nào đó $a \in \mathcal{G}$

$$\mathcal{N}_a = \{g \mid ga = ag, \ g \in \mathcal{G}\},$$

gọi là *chuẩn hóa tử* của phần tử a đó.

Dễ chứng minh rằng $\mathcal{N}_a$ là một nhóm con của $\mathcal{G}$. Cấp của $\mathcal{N}_a$ bằng G/h. với G là cấp của nhóm $\mathcal{G}$ và h là chỉ số của $\mathcal{N}_a$ (theo định lý Lagrange).

Định lý

Số phần tử của lớp các phần tử liên hợp chứa a bằng h.

Chứng minh

Ta xét tập hợp tất cả các phần tử có dạng $x^{-1}ax$, trong đó x lần lượt chạy khắp tất cả các lớp kề của biểu thức phân tích Lagrange của nhóm $\mathcal{G}$ theo nhóm con $\mathcal{N}_a$, trước hết là lớp kề $\mathcal{N}_a b_1, = \mathcal{N}_a e$ sau đó là $\mathcal{N}_a b_2$ v.v... Khi x chạy khắp lớp kề $\mathcal{N}_a$ thì, theo định nghĩa của chuẩn hóa tử, lượng x^{-1} ax sẽ lấy giá trị a, n lần, với n là cấp của nhóm $\mathcal{N}_a$. Khi x chạy khắp lớp kề thứ hai $\mathcal{N}_a b_2$, $x = gb_2$, $g \in \mathcal{N}_a$, $x^{-1} = b^{-}_2 g^{-1}$, thì lượng x^{-1}ax sẽ lấy giá trị $b^{-1}_2 g^{-1} agb_2 = b^{-1}_2 ab_2$ cũng n lần... Như thế, nếu h là chỉ số của nhóm con $\mathcal{N}_a$ ta sẽ thu được lớp chứa phần tử a, tức là [a], h lần. Từ đó, do G/n = h, ta chứng minh được định lý.

Với các nhóm giao hoán $\mathcal{N}_a = \mathcal{G}$, h = 1, [a] = a.

§ 10. NHÓM CON BẤT BIẾN

Định nghĩa

Mỗi nhóm con $\mathcal{H}$ của một nhóm $\mathcal{G}$ gọi là *bất biến*, nếu

$a\mathcal{H}a^{-1} = \mathcal{H}$ với mọi $a \in \mathcal{G}$. (10-1)

Đẳng thức trên có thể viết dưới dạng sau

$$a\mathcal{H} = \mathcal{H}a,$$

tức là các lớp kề trái và phải theo một nhóm con bất biến là như nhau.

Theo định nghĩa, ta thấy ngay rằng nhóm con bất biến khi đã chứa phần tử nào đó, sẽ chứa mọi phần tử liên hợp với phần tử đó hay nói cách khác, nếu đã chứa một phần tử của lớp [a] thì phải chứa cả toàn thể lớp [a].

Nhóm con bất biến tầm thường: e và bản thân $\mathcal{G}$.

Tất cả các nhóm con của nhóm giao hoán đều bất biến.

Tính bất biến của nhóm con không phải là một tính bắc cầu: nhóm con bất biến $\mathcal{F}$ của một nhóm con bất biến $\mathcal{H}$ của $\mathcal{G}$ không nhất thiết là một nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$.

Nhóm đơn nhóm nửa đơn

Một nhóm gọi là *đơn* nếu nó chỉ chứa các nhóm con bất biến tầm thường.

Tất nhiên các nhóm hữu hạn có cấp bằng một số nguyên *tố* đều là đơn (vì không chứa một nhóm con nào cả). Các nhóm $\mathcal{C}_2$, $\mathcal{C}_5$, $\mathcal{C}_7$... đều đơn.

Một nhóm gọi là *nửa đơn* nếu nó không có nhóm con bất biến giao hoán nào, kể cả chính nó.

Nhóm con có chỉ số hai

Với nhóm con $\mathcal{H}$ của $\mathcal{G}$ có chỉ số hai, ta có biểu thức phân tích Lagrange

$$\mathcal{G} = \mathcal{H} + a\mathcal{H} = \mathcal{H} + a$$

tức là

$$a\mathcal{H} = \mathcal{H}a:$$

Các nhóm con có chỉ số hai đều là nhóm con bất biến.

Chẳng hạn đó là nhóm con $\{e, d, f\}$ của $\mathcal{D}_3$, hay nhóm con A_n của S_n.

Tâm một nhóm

Tập hợp tất cả các phần tử của một nhóm $\mathcal{G}$ giao hoán với mọi phần tử của nhóm gọi là *tâm* của $\mathcal{G}$. Tâm ký hiệu là $\mathcal{C}$:

$$\mathcal{C} = \{c \mid cx = xc \text{ cho mọi } x \in \mathcal{G}\}.$$

Dễ thấy rằng *tâm là một nhóm con bất biến của nhóm.*

Chẳng hạn, nếu c_1 và $c_2 \in \mathcal{C}$ thì, theo định nghĩa, ta có

$$(c_1c_2)x = c_1(c_2x) = (c_1x)c_2 = x(c_1c_2),$$

điều này chứng tỏ rằng $c_1c_2 \in \mathcal{C}$. Mặt khác, do $a\mathcal{C} = \mathcal{C}a$ với mọi phần tử $a \in \mathcal{G}$ tất cả các tập hợp kề phải và trái tương ứng với nhau đều như nhau, một điều chứng tỏ rằng $\mathcal{C}$ là một nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$.

Tâm là chuẩn hóa tử của toàn bộ nhóm.

Chẳng hạn tâm của nhóm quaternion Q là $z_2 = \{e, -e\}$.

Nhân đồng cấu

Cho một phép ánh xạ đồng cấu f từ một nhóm $\mathcal{G}$ lên một nhóm $\mathcal{G}'$. Tập hợp tất cả các phần tử của $\mathcal{G}$ được ánh xạ qua đơn vị e' của $\mathcal{G}'$, ký hiệu là

$$\ker f = \{x \mid f(x) = e'\} \text{ hay } f(\ker f) = e',$$

gọi là *nhân đồng cấu* của f.

Dựa vào định nghĩa có thể thấy rằng *kernf là một nhóm con bất biến* của nhóm.

Chẳng hạn kernf của $S_3 \xrightarrow{f} Z_2$ là A_3, kernf của $R \xrightarrow{f} SO(2)$ là $(2k\pi$, k nguyên)

Các nhóm con, nhóm con bất biến của một nhóm cho sẵn quyết định cấu trúc của nhóm đó. Từ đó, ta thấy vị trí cơ bản của khái niệm nhóm con trong vấn đề nghiên cứu cấu trúc của các nhóm.

Định nghĩa

Cho một nhóm $\mathcal{G}$ và giả sử $\mathcal{H}$ là một nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$ có chỉ số h. Ta hãy xét biểu thức phân tích Lagrange:

$$\mathcal{G} = \mathcal{H}a_1 + \mathcal{H}a_2 + \dots + \mathcal{H}a_h, \ (a_1 = e).$$

Ta hãy chứng minh rằng tập hợp mà các phần tử là các lớp khác nhau của phân tích trên làm thành một nhóm.

Quả vậy, tập hợp này gồm h phần tử khác nhau (các lớp kề khác nhau không có phần tử chung và hoàn toàn vét cạn các phần tử khác nhau của nhóm). Phép nhân trong tập hợp này là một phép nhân kín vì, theo định nghĩa của nhóm con bất biến, ta có:

$$(\mathcal{H}a_i)(\mathcal{H}a_j) = (\mathcal{H}\mathcal{H})(a_ia_j) = \mathcal{H}a_k$$

với $a_k = a_ia_j$ (phần tử a_k có thể không trùng với một trong các phần tử $a_1, a_2, \dots, a_h$ ở trong biểu thức phân tích trên). Nhưng vì a_k buộc phải nằm trong một các lớp kề nào đó, nên $\mathcal{H}a_k$ phải trùng với một trong các lớp kề nói trên, tức là phép nhân có tính chất kín.

Thứ nữa, phép nhân có tính chất kết hợp vì

$(\mathcal{H}a_i)\,[(\mathcal{H}a_j)(\mathcal{H}a_l)]$ và $[(\mathcal{H}a_i)(\mathcal{H}a_j)]\,(\mathcal{H}a_l)$ đều bằng $\mathcal{H}a_ia_ja_l$.

Tiếp theo, phần tử đơn vị là $\mathcal{H}$ ($\mathcal{H}\mathcal{H} = \mathcal{H}$) vì với mọi a_i, ta có

$$\mathcal{H}(\mathcal{H}a_i) = (\mathcal{H}a_i)\mathcal{H} = \mathcal{H}a_i.$$

Cuối cùng phần tử nghịch đảo của $\mathcal{H}a_i$ là $\mathcal{H}a_i^{-1}$. Nhóm thu được gọi là *nhóm thương* của $\mathcal{G}$ theo $\mathcal{H}$ và ký hiệu là $\mathcal{G}/\mathcal{H}$.

Ví dụ

Với nhóm con bất biến A_3 của nhóm S_3, ta có thể lập nhóm thương:

$$S_3/A_3 = \{A_3, (1, 2)A_3\}.$$

Nhóm này có cấp bằng hai.

Định lý về phép đồng cấu

Cho một phép đồng cấu f từ một nhóm $\mathcal{G}$ lên một nhóm $\mathcal{G}'$. Như đã biết, kernf là một nhóm con bất biến của nhóm $\mathcal{G}$. Từ đó, ta có thể lập nhóm thương $\mathcal{G}$/kernf. Nhóm này gồm các phần tử của biểu thức phân tích

$$\mathcal{G} = a_1\mathrm{kernf} + a_2\mathrm{kernf} + \dots + a_h\mathrm{kernf},\ a_i \in \mathcal{G}.$$

với h là chỉ số của nhóm con kernf ($a_1 = e$).

Nhưng vì

$$f(a_k\mathrm{kernf}) = f(a_k).f(\mathrm{kernf}) = f(a_k).e' = f(a_k)$$

nên, khi vận dụng ánh xạ f lên nhóm thương $\mathcal{G}$/kernf, ta được

$$f[(a_i\mathrm{kernf})(a_j\mathrm{kernf})] = f(a_ia_j\mathrm{kernf}) = f(a_ia_j) = f(a_i)f(a_j) = f(a_i\mathrm{kernf})f(a_j\mathrm{kernf}),$$

điều này chứng tỏ rằng ánh xạ

$$\mathcal{G}/\mathrm{kernf} \xrightarrow{f} \mathcal{G}',$$

là một phép đồng cấu. Nhưng vì nhân đồng cấu ở đây chỉ gồm có phần tử duy nhất kernf (đơn vị của nhóm thương nói trên), nên phép đồng cấu trên chính là một phép đẳng cấu. Thành thử ta có

Định lý

Trong phép đồng cấu f từ $\mathcal{G}$ lên $\mathcal{G}'$, thì

$$\mathcal{G}/\mathrm{kernf} \approx \mathcal{G}'.$$

Định lý này đưa phép đồng cấu về phép đẳng cấu.

Nói riêng, phép đồng cấu f với kernf $= \mathcal{C}$(tâm của $\mathcal{G}$) gọi là phép *chia nhóm $\mathcal{G}$ cho tâm $\mathcal{C}$* của nó.

Chẳng hạn với nhóm Q có $\mathcal{C} = Z_2 = \{e, -e\}$, ta có

$$Q/\mathcal{C} = Q/Z_2 \approx \mathcal{D}_2.$$

Nhóm phủ

Giả sử $\mathcal{W}$ là một nhóm con của tâm $\mathcal{C}$ của một nhóm $\mathcal{G}$. Vì $\mathcal{W}$ là một nhóm con bất biến của nhóm $\mathcal{G}$, nên ta có thể lập nhóm thương

$$\mathcal{R} = \mathcal{G}/\mathcal{W}.$$

$\mathcal{G}$ gọi là *nhóm phủ* của $\mathcal{R}$. Nói riêng $\mathcal{G}$ là nhóm phủ của $\mathcal{G}/\mathcal{C}$.

Chẳng hạn Q là nhóm phủ của nhóm $\mathcal{D}_2$.

§ 12. GIAO HOÁN TỬ. NHÓM DẪN XUẤT

Định nghĩa

Phần tử

$$c = a^{-1}b^{-1}ab,\ a,\ b \in \mathcal{G}$$

gọi là *giao hoán tử* của các phần tử a và b.

Nếu c là một giao hoán tử thì $c^{-1} = b^{-1}a^{-1}ba$ cũng là một giao hoán tử của b và a và mọi phần tử liên hợp với c :

$$xcx^{-1} = (xax^{-1})^{-1}(xbx^{-1})^{-1}(xax^{-1})(xbx^{-1}),\ x \in \mathcal{G}$$

cũng là những giao hoán tử (của xax^{-1} và xbx^{-1}). Đơn vị e luôn luôn là một giao hoán tử (của a và a). Nhóm con bé nhất của $\mathcal{G}$ chứa tất cả các giao hoán tử của $\mathcal{G}$ (tức là nhóm con sinh bởi tất cả các giao hoán tử) gọi là ***nhóm dẫn xuất*** của $\mathcal{G}$, ký hiệu là $\mathcal{H}_{dx}$.

Tính chất

Có thể chứng minh rằng nhóm $\mathcal{H}_{dx}$ là một nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$ và nhóm thương $\mathcal{G}/\mathcal{H}_{dx}$ là một nhóm giao hoán.

§ 13. TÍCH TRỰC TIẾP

Định nghĩa 1

Một nhóm $\mathcal{G}$ gọi là *tích trực tiếp* của hai nhóm con $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ khác nhau của nó nếu

1. Các phần tử của các nhóm con khác nhau giao hoán với nhau.
2. Mỗi phần tử của $\mathcal{G}$ đều có thể phân tích một cách duy nhất dưới dạng

$$g = g_1 g_2 \text{ với } g_1 \in \mathcal{G}_1,\ g_2 \in \mathcal{G}_2.$$

Tích trực tiếp ký hiệu là

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2.$$

Các nhóm con $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ gọi là các *nhân tử trực tiếp* của nhóm $\mathcal{G}$ và chỉ có phần tử chung là đơn vị e của nhóm. Có thể mở rộng định nghĩa này cho trường hợp nhiều nhân tử.

Các nhóm con $\mathcal{G}_i$ là những nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$. Quả vậy, với mọi $g \in \mathcal{G}$ và $h_1 \in \mathcal{G}_1$ ta có

$$gh_1g^{-1} = (g_1g_2)\, h_1\, (g_1g_2)^{-1} = (g_1g_2)\, h_1\, (g_2^{-1}g_1^{-1}) = g_1(g_2g_2^{-1})h_1g_1^{-1} = g_1h_1g_1^{-1} \in \mathcal{G}_1,$$

tức là

$$g\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_1 g.$$

Tương tự như thế, ta có

$$g\mathcal{G}_2 = \mathcal{G}_2 g.$$

Rõ ràng các tính trực tiếp không phải là những nhóm đơn (xem § 10).

Ví dụ. Nhóm

$$\mathcal{C}_6 = \{e,\ C_6,\ C_6^2, \ldots, C_6^5\}$$

là tích trực tiếp

$$\mathcal{C}_6 = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2,$$

với

$$\mathcal{G}_1 = \{e,\ C_6^2,\ C_6^4\},\ \mathcal{G}_2 = \{e,\ C_6^3\}.$$

Định nghĩa 2

Cho hai nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ tùy ý. Tập hợp tất cả các cặp (g_1, g_2) với phép nhân

$$(g_1, g_2)\,(g'_1, g'_2) = (g_1g'_1,\ g_2g'_2)\quad g_1, g'_1 \in \mathcal{G}_1,\ g_2, g'_2 \in \mathcal{G}_2$$

làm thành một nhóm, với đơn vị

$$e = (e_1, e_2),\ (e_1 \text{ là đơn vị của } \mathcal{G}_1,\ e_2 \text{ là đơn vị của } \mathcal{G}_2)$$

và phần tử nghịch đảo

$$(g_1, g_2)^{-1} = (g_1^{-1},\ g_2^{-1}).$$

Nhóm này gọi là *tính trực tiếp* của hai nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ và cũng ký hiệu như trên. Các nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ biến thành các nhóm con bất biến của $\mathcal{G}$. Tất nhiên định nghĩa này bao trùm định nghĩa trên. Cấp của tích trực tiếp bằng tích cấp các nhân tử.

Ví dụ $$\mathcal{D}_2 = \mathcal{C}_2 \otimes \mathcal{C}_2,$$

cấp của $\mathcal{D}_2$ là $4 = 2 \times 2$.

Tích trực tiếp hai nhóm ma trận

Cho hai nhóm ma trận $\mathcal{A}$ và $\mathcal{B}$ tương ứng gồm các ma trận A cấp n và các ma trận B cấp m. Ta xác định cặp

$$(A, B) \equiv A \otimes B = B \otimes A,\ A \in \mathcal{A},\ B \in \mathcal{B},$$

với phép nhân trực tiếp thông thường giữa các ma trận:

$$(A \otimes B)_{ij,kl} = A_{ik}B_{jl}. \qquad (13\text{-}1)$$

Để được cụ thể, ta lấy n = 2, m = 3. Ta có

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{bmatrix},$$

hay

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} B_{11}A & B_{12}A & B_{13}A \\ B_{21}A & B_{22}A & B_{23}A \\ B_{31}A & B_{32}A & B_{33}A \end{bmatrix}.$$

Hai cách nhân trực tiếp tương ứng với các cách đếm khác nhau của các hàng (ij) và các cột (kl) ở định nghĩa (13-1).

Từ (13-1) ta thấy rằng tích trực tiếp hai ma trận có tính chất

$$(A \otimes B)(A' \otimes B') = AA' \otimes BB'. \qquad (13\text{-}2)$$

Tính chất này chứng tỏ rằng tập hợp tất cả các tích trực tiếp $A \otimes B$ làm thành nhóm (tích trực tiếp) $\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}$.

Nhóm O(3)

Các nhận định về hình học cho thấy rằng

$$Ig = gI \text{ với mọi } g \in SO(3),\ I \in \mathcal{C}_i. \qquad (13\text{-}3$$

Từ đó, ta có thể lập tích trực tiếp

$$O(3) = SO(3) \otimes \mathcal{C}_i, \qquad (13\text{-}4)$$

gọi là nhóm *trực giao ba chiều*, ký hiệu là O(3).

Nhóm này là một nhóm vô hạn, không giao hoán.

§ 14. TÍCH NỬA TRỰC TIẾP

Định nghĩa

Cho một nhóm $\mathcal{G}$ và giả sử $\mathcal{A}$ là một nhóm con của nhóm Aut$\mathcal{G}$. Ta hãy xét tập hợp tất cả các cặp có dạng

$$(A \mid x), \text{ với } A \in \mathcal{A},\ x \in \mathcal{G},$$

và xác định phép nhân trên tập hợp đó như sau

$$(A \mid x)(B \mid y) = (AB \mid (Ay)\,x). \qquad (14\text{-}1)$$

Các tính chất của phép nhân (14-1):

— Tính kín (theo định nghĩa).

— Tính kết hợp (dễ suy từ định nghĩa).

— Tính có đơn vị:

Nếu A_0 là phép tự đẳng cấu đơn vị và e là đơn vị của $\mathcal{G}$ thì, theo (14-1), ta được

$$(A_0 | e)(A | x) = (A | x)(A_0 | e) = (A | x) \text{ với mọi } (A | x).$$

Như thế, $(A_0 | e)$ là đơn vị.

— Tính có nghịch đảo: dễ thấy rằng

$$(A | x)^{-1} = (A^{-1} | A^{-1}x^{-1}). \quad (14\text{-}2)$$

Như thế, tập hợp các cặp $(A | x)$ làm thành một nhóm, gọi là *tích nửa trực tiếp* của nhóm $\mathcal{G}$ với nhóm $\mathcal{A}$ và ký hiệu là

$$\mathcal{S} = \mathcal{G} \otimes \mathcal{A}.$$

Dễ thấy rằng tập hợp tất cả các cặp $(A | e)$ làm thành một nhóm con của tích nửa trực tiếp $\mathcal{S}$, nhóm này đẳng cấu với $\mathcal{A}$. Còn tập hợp tất cả các cặp $(A_0 | x)$ làm thành một nhóm con bất biến của $\mathcal{S}$, nhóm con này đẳng cấu với $\mathcal{G}$. Các tích nửa trực tiếp không phải là nhóm đơn.

Cấp của tích nửa trực tiếp bằng tích các cấp của các nhóm $\mathcal{A}$ và $\mathcal{G}$.

Tích nửa trực tiếp

$$\mathcal{G} \otimes \mathrm{Aut}\mathcal{G}$$

gọi là *nhóm toàn hình* của nhóm $\mathcal{G}$.

Nếu $\mathcal{G}$ là một nhóm giao hoán thì luật hợp thành (14-1) lấy dạng

$$(A | x)(B | y) = (AB | Ay + x), \quad (14\text{-}3)$$

và phần tử nghịch đảo có dạng

$$(A | x)^{-1} = (A^{-1} | -A^{-1}x). \quad (14\text{-}4)$$

Ví dụ

Ta biết rằng nhóm tự đẳng cấu của nhóm $\mathcal{D}_2$ là $\mathrm{Aut}\,\mathcal{D}_2 \approx S_3$. Nhóm toàn hình của $\mathcal{D}_2$ là tích nửa trực tiếp $\mathcal{D}_2 \otimes S_3$.

Nếu lấy $\mathcal{A}$ là nhóm con bất biến A_3 (nhóm thay dấu) thì ta có tích nửa trực tiếp $\mathcal{S} = \mathcal{D}_2 \otimes A_3$, có cấp bằng 12.

§ 15. MỘT SỐ NHÓM MA TRẬN QUAN TRỌNG

Các nhóm ma trận có thể xem là những nhóm gồm các phép biến đổi tuyến tính trong những không gian tuyến tính nào đó. Các nhóm ma trận quan trọng là những nhóm sau.

Nhóm GL (n, C) [GL (n, R)]

Là nhóm gồm tất cả các ma trận phức (thực) cấp n, có định thức khác không (không kỳ dị).

Nhóm SL (n, C) [SL (n, R)]

Là nhóm gồm tất cả các ma trận phức (thực) cấp n, có định thức bằng đơn vị.

Nhóm U (p, q)

Là nhóm gồm tất cả các ma trận cấp $n = p + q$ thuộc nhóm GL (n, C), làm bất biến dạng hecmitic z^+gz (z^i là phức số), với

$$z = \begin{bmatrix} z^1 \\ z^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ z^{p+q} \end{bmatrix}, z^+ = (z^{1*}, z^{2*}, \ldots, z^{p+q*}),$$

$$g = \begin{bmatrix} -I_p & 0 \\ 0 & I_q \end{bmatrix} = -I_p \oplus I_q \text{ [1]} \qquad (15\text{-}1)$$

với I_r là ma trận đơn vị cấp r.

Gọi A là phép biến đổi đang xét, theo điều kiện bất biến, ta có

$$(Az)^+ g(Az) = z^+(A^+gA)z = z^+gz,$$

từ đó, ta được điều kiện cho các ma trận A thuộc nhóm

$$A^+gA = g. \qquad (15\text{-}2)$$

Nhóm các ma trận thỏa mãn điều kiện (15-2) gọi là *nhóm g-unita n chiều.*

Nói riêng, khi $p = 0$ hay $q = 0$, ta có nhóm

$$U(n) \equiv U(0, n) \equiv U(n, 0)$$

làm bất biến dạng hecmitic z^+z và thỏa mãn điều kiện

$$A^+A = AA^+ = I_n. \qquad (15\text{-}3)$$

Nhóm này gọi là *nhóm unita n chiều.*

Nhóm SU (n)

$$SU(n) = U(n) \cap SL(n, C).$$

Đó là nhóm các ma trận unita n chiều, có định thức bằng đơn vị.

Điều kiện :

$$A^+A = AA^+ = I_n, \det A = 1. \qquad (15\text{-}4)$$

Nhóm này gọi là *nhóm unita, đơn môdula n chiều.*

Các nhóm SU(2) và SU(3) có những ứng dụng vật lý rất quan trọng.

---

1) Nói chung, nếu một ma trận D có dạng gần chéo

$$D = \begin{bmatrix} D_1 & & 0 \\ & D_2 & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix}$$

thì D gọi là *tổng trực tiếp* của các ma trận D_1, D_2, v.v... và ký hiệu là

$$D = D_1 \oplus D_2 \oplus \ldots$$

Nhóm SU(p, q)

$$SU(p, q) = U(p, q) \cap SL(p + q, C).$$

Điều kiện:

$$A^+gA = g, \ \det A = 1, \tag{15-5}$$

với g ở (15-1).

Nhóm S ($U_p \otimes U_q$)

Là nhóm gồm các phép biến đổi có dạng

$$\begin{bmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{bmatrix}, \ g_1 \in U(p), \ g_2 \in U(q),$$
$$\det g_1 \det g_2 = 1.$$

Nhóm O(n, C)

Là nhóm gồm tất cả các phép biến đổi thuộc nhóm GL(n, C), làm bất biến dạng toàn phương $z^C z$, với

$$z^C = (z^1, z^2, \ldots, z^n), \ (z^i \text{ là số phức}).$$

Điều kiện:

$$A^C A = AA^C = I_n. \tag{15-6}$$

Nhóm này gọi là *nhóm trực giao phức, n chiều.*

Nhóm O(p, q)

Là nhóm gồm tất cả các phép biến đổi thuộc nhóm GL(p + q, R), làm bất biến dạng toàn phương $x^C g x$, với x là vectơ n chiều thực, còn g là ma trận (15-1).

Điều kiện:

$$A^C g A = g \tag{15-7}$$

Nhóm này gọi là *nhóm g-trực giao thực, n chiều.*

Nói riêng, khi p = 0 hay q = 0, ta có nhóm

$$O(n) \equiv O(O, n) \equiv O(n, O),$$

làm bất biến dạng toàn phương $x^C x$.

Điều kiện:

$$A^C A = AA^C = I_n. \tag{15-8}$$

Nhóm này gọi là *nhóm trực giao thực, n chiều.*

Nhóm trực giao thực ba chiều O(3) đã xét trước đây là một trường hợp riêng của nhóm này. Vị trí của nhóm O(3) rất quan trọng trong vật lý học.

Nhóm SO(p, q)

$$SO(p, q) = O(p, q) \cap SL(p + q, R).$$

Điều kiện:

$$A^C g A = g, \ \det A = 1. \tag{15-9}$$

Nhóm này gọi là *nhóm g-trực giao thực, đơn môđula.*

Nói riêng, ta có nhóm

$$SO(n) \equiv SO(O, n) \equiv SO(n, O),$$

làm bất biến dạng toàn phương $x^C x$ và có định thức bằng đơn vị.

Điều kiện :

$$A^c A = A A^c = I_n \text{ , det } A = 1. \qquad (15\text{-}10)$$

Nhóm này gọi là *nhóm trực giao thực n chiều, đơn môđula* hay là *nhóm quay trong không gian n chiều.*

Các nhóm SO (2) và SO (3) đã xét trước đây là những trường hợp riêng của nhóm này.

Nhóm SP (2n, C)

Là nhóm gồm các phép biến đổi phức thuộc nhóm GL (2n, C), làm bất biến dạng $z^c hz$, với z là vectơ phức 2n chiều và

$$h = \begin{bmatrix} 0 & -I_n \\ I_n & 0 \end{bmatrix}. \qquad (15\text{-}11)$$

Điều kiện :

$$A^c h A = h. \qquad (15\text{-}12)$$

Nhóm này gọi là *nhóm symplectic phức, 2n chiều.*

Nhóm Sp (2n, R):

Là nhóm gồm các phép biến đổi thực thuộc nhóm GL (2n, R), làm bất biến dạng toàn phương $x^c hx$, với x là vectơ thực 2n chiều và h là ma trận (15-11).

Điều kiện :

$$A^c h A = h. \qquad (15\text{-}13)$$

Nhóm này gọi là *nhóm symplectic thực 2n chiều.*

Nhóm Sp (2p, 2q)

Là nhóm gồm tất cả các phần tử của nhóm SU (2p, 2q) là bất biến dạng toàn phương phản xứng nói trên.

Nói riêng, ta có nhóm

$$Sp(2n) \equiv Sp(2n, R) \equiv Sp(2n, 0) \equiv Sp(0, 2n)$$

§ 16. CÁC NHÓM CHUYỂN ĐỘNG

Ký hiệu R^{p+q} là không gian tuyến tính p + q chiều, thực với métric (15-1). Các không gian này còn gọi là *không gian giả Euclid p + q chiều.* Với phép cộng vectơ thông thường, không gian này làm thành một nhóm liên tục, giao hoán.

Định nghĩa

Vì nhóm O (p + q) là một nhóm con của nhóm Aut R^{p+q}, nên theo định nghĩa, ta có thể lập tích nửa trực tiếp

$$\mathcal{S} = R^{p+q} \otimes O(p, q) \text{ ,} \qquad (16\text{-}1)$$

gồm các phần tử

$$(A \mid u) \quad , \quad A \in O(p, q) \quad , \quad u \in R^{p+q} \quad ,$$

với luật hợp thành có dạng (14-3).

Tích nửa trực tiếp (16-1) gọi là *nhóm chuyển động mở rộng* của không gian giả Euclid R^{p+q}.

Nếu hạn chế trong nhóm SO (p, q), ta được một tích nửa trực tiếp gọi là *nhóm chuyển động* của không gian đó.

Các nhóm chuyển động cơ bản trong vật lý học.

Nhóm Poincaré.

Là tích nửa trực tiếp.

$$P = R^{3+1} \otimes 0(3;1) . \tag{16-2}$$

Theo định nghĩa, ta thấy rằng các phần tử của nhóm Poincaré gồm những phép biến đổi thuộc nhóm Lorentz 0(3,1) và các phần tử thuộc nhóm tịnh tiến trong không gian Minkovski R^{3+1}.

Nhóm R^3_M

Là tính nửa trực tiếp

$$R^3_M = R^3 \otimes 0(3) . \tag{16-3}$$

Theo định nghĩa, ta thấy rằng các phần tử của nhóm R^3_M, gồm những phép trực giao của nhóm 0(3) và các phần tử của nhóm tịnh tiến R^3.

Nhóm Galileo

Nhóm Galileo là một tích nửa trực tiếp đặc biệt, loại R^3_M, trong đó các phần tử tịnh tiến có dạng $\mathbf{v}t$, $\mathbf{v} = \text{const}$, còn t là thời gian. Các phần tử của nhóm này có dạng

$$\mathbf{r}' = g(\varphi)\,\mathbf{r} + \mathbf{v}t \quad , \quad g(\varphi) \in 0(3) \quad , \quad (t' = t) .$$

Với $g(\varphi) = A_0$ (phép tự đẳng cấu đơn vị), phép biến đổi

$$A^{(0)} : \mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{v}t \quad , \quad (t \to t' = t) , \tag{16-4}$$

gọi là *phép biến đổi Galileo thuần túy.* Nhóm thu được gọi là *nhóm Galileo thuần túy.*

Biểu diễn các phần tử của tích nửa trực tiếp bằng ma trận.

Các phần tử của tích nửa trực tiếp (16-1) có thể biểu diễn dưới dạng ma trận sau

$$(A \mid u) = \begin{bmatrix} A & u \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \tag{16-5}$$

trong đó A là ma trận cấp n , u là ma trận cột n hàng.

Quả vậy, ta có

$$(A' \mid u')\,(A \mid u) = \begin{bmatrix} A' & u' \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & u \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A'A & A'u + u' \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \tag{16-6}$$

kết quả này phù hợp với (14-3).

§ 17. CÁC TÍNH CHẤT ĐỐI XỨNG, CƠ SỞ CỦA VIỆC ỨNG DỤNG LÝ THUYẾT NHÓM

Trong khoa học tự nhiên, rất có nhiều biểu hiện khác nhau về tính đối xứng. Những tính chất này dẫn đến những nhóm khác nhau trong từng lĩnh vực hay trong từng loại vấn đề.

Tính đối xứng trong hình học.

Hình học nghiên cứu những tính chất hình học của các không gian. Những tính chất này rõ ràng không phụ thuộc vào cơ sở chọn trong các không gian đó. Nói cách khác, các cơ sở của không gian là tương đương với nhau hay đối xứng với nhau, sự biến đổi cơ sở không ảnh hưởng đến các tính chất của không gian. Nói theo ngôn ngữ của Klein, hình học là khoa học về các bất biến đối với nhóm các phép biến đổi cơ sở (điều này thường gọi là chương trình Erlangen của Klein).

Chẳng hạn:

Hình học xạ ảnh là khoa học về các bất biến của không gian đối với nhóm các phép biến đổi xạ ảnh.

Hình học aphin là khoa học về các bất biến của không gian đối với nhóm các phép biến đổi aphin.

Hình học Euclid là khoa học nghiên cứu các bất biến của không gian đối với nhóm các phép biến đổi trực giao.

Với không gian ba chiều thông thường, nhóm cơ sở của hình học Euclid là nhóm O(3), làm bất biến dạng toàn phương

$$x^2 + y^2 + z^2 = \text{inv} .$$

Bất biến này có thể mở rộng thành bất biến

$$(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2 = \text{inv} ,$$

Trong điều kiện này, rõ ràng nhóm cơ sở là nhóm chuyển động R^3_M ở (16-3).

Bây giờ ta chuyển sang nghiên cứu các nhóm đối xứng trong vật lý.

Tính chất đối xứng của không gian và thời gian.

Chúng ta biết rằng trong các hệ quy chiếu quán tính, không gian và thời gian có các tính chất đối xứng sau: *thời gian là đồng chất, không gian là đồng chất và đẳng hướng*. Các tính chất này dẫn đến các nhóm sau: nhóm tịnh tiến T trong thời gian, nhóm tịnh tiến T_3 trong không gian và nhóm quay SO(3) trong không gian ba chiều.

Ngoài ra, trong một mức độ gần đúng nào đó, có thể kể đến tính chất đối xứng phải-trái, tức là tính chất đối xứng với phép nghịch đảo không gian, dẫn đến nhóm trực giao ba chiều o(3).

Tính đối xứng giữa các hệ quy chiếu quán tính.

Nguyên lý tương đối mà thực chất là tính chất đối xứng giữa các hệ quy chiếu quán tính cũng dẫn đến những nhóm cơ sở của vật lý học.

Với cơ học kinh điển, trong đó thời gian là độc lập với không gian, các phép biến đổi hệ quy chiếu là các phép biến đổi Galileo. Như thế: nhóm cơ sở của cơ học kinh điển là *nhóm Galileo.*

Với lý thuyết tương đối Einstein, các phép biến đổi tọa độ là các phép biến đổi Lorentz, làm bất biến khoảng

$$c^2t^2 - r^2 = inv.$$

Thành thử: Nhóm cơ sở của lý thuyết tương đối là *nhóm Lorentz 0(3,1).* Nếu xét khoảng

$$c^2(t - t')^2 - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 = inv \quad ,$$

thì nhóm cơ sở của lý thuyết tương đối là *nhóm Poincaré P.*

Tính đối xứng của các cấu hình không gian của vật chất.

Các cấu tạo vật chất như nguyên tử và phân tử, tinh thể, có những cấu hình không gian đối xứng. Chẳng hạn, phân tử OsF_8 có chín hạt nhân, một hạt nhân Os nằm ở tâm của hình lập phương, còn tám hạt nhân F đều nằm ở các đỉnh của hình đó. Như thế, cấu hình không gian này sẽ không thay đổi khi ta thực hiện những phép quay hay phép phản chiếu, phép nghịch đảo không gian làm cho hình lập phương trùng với chính nó. Những phép biến đổi này là những phần tử của nhóm 0(3) và làm thành một nhóm nào đó, gọi là nhóm đối xứng của phân tử OsF_8.

Nói chung, tất cả các phân tử, tinh thể đều có những nhóm đối xứng tương tự như trên. Các nhóm này là những nhóm con của nhóm 0(3) hay nhóm con của nhóm R^3_M mà ta gọi là nhóm điểm hay nhóm không gian. Ta sẽ xét các nhóm này trong các chương sau.

Tính đối xứng giữa các hạt cơ bản.

Trong số các hạt cơ bản, có những họ hạt, trong đó các hạt có khối lượng xấp xỉ nhau và một số tính chất nào đó gần giống nhau (như prôtôn và nơtrôn chẳng hạn). Tính chất đối xứng này sẽ dẫn đến một số nhóm nào đó cho phép xem các hạt trong mỗi họ là như nhau hay là đối xứng với nhau theo ngôn ngữ lý thuyết nhóm, như các biểu hiện khác nhau của một đối tượng vật chất nào đó. Sẽ xét vấn đề này ở cuối sách.

Tính đối xứng có liên quan đến các phép tính gần đúng.

Ngoài các tính chất đối xứng nói trên có ý nghĩa sâu xa, hoặc về phương diện vật lý, hoặc về phương pháp nhận thức, còn có thể xuất hiện những tính chất đối xứng khác có liên quan đến các phép tính gần đúng nào đó. Ta sẽ bàn đến vấn đề này trong khi nghiên cứu hệ nhiều hạt.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [8] [10], [11], [14].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử.

Đọc các tiết § 1 ÷ § 4; § 5 (không đọc các nhóm Aut $\mathcal{G}$, Int $\mathcal{G}$); § 7; § 8; § 10 (không đọc nhân đồng cấu); § 11 (không đọc định lý về phép đồng cấu); § 13; § 17 (không đọc tính đối xứng trong hình học.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể.

Đọc như A. Đọc thêm nhóm Aut ở § 5 và § 14.

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử.

Đọc các tiết § 1 ÷ § 5 ; § 7 ; § 8 ; § 10 ÷ 15 ; § 17.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân.

Đọc các tiết § 1 ÷ § 5 ; § 7 ; § 8 ; § 10 ÷ § 17.

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản.

Đọc toàn chương

CHƯƠNG II

ĐẠI CƯƠNG VỀ LÝ THUYẾT BIỂU DIỄN NHÓM

§ 1. PHÉP BIỂU DIỄN NHÓM

Phép biểu diễn nhóm

Cho một không gian tuyến tính n chiều $\mathcal{M}_n$ và một nhóm $\mathcal{D}$ các phép biến đổi nào đó trong không gian đó. Lại cho một nhóm $\mathcal{G}$ nào đó. Phép đồng cấu

$$\mathcal{G} \to \mathcal{D}$$

gọi là một *phép biểu diễn* của nhóm $\mathcal{G}$ trong không gian $\mathcal{M}_n$. Ta gọi $\mathcal{M}_n$ là *không gian biểu diễn*, n là *chiều biểu diễn*, gọi là *phép biểu diễn tuyến tính*, nếu $\mathcal{D}$ là nhóm biến đổi tuyến tính (hay nhóm ma trận — nhóm điển hình —). Trái lại, biểu diễn gọi là *phi tuyến*. Từ nay về sau, ta chủ yếu chỉ xét các biểu diễn tuyến tính.

Theo định nghĩa, ta có [xem I (5-1), I (5-2) và I (5-3)]

$$D(gh) = D(g)\,D(h),\ g,\ h \in \mathcal{G},\ D(g),\ D(h) \in \mathcal{D} \tag{1-1}$$

$$D(e) = I_n\,, \tag{1-2}$$

$$D(g^{-1}) = [D(g)]^{-1}. \tag{1-3}$$

Phép biểu diễn đơn vị

là phép biểu diễn đặc biệt khi

$$D(g) \equiv 1,\ \text{với mọi}\ g \in \mathcal{G}. \tag{1-4}$$

Phép biểu diễn trung thành

là phép biểu diễn khi $\mathcal{D}$ là một phép đẳng cấu, tức là khi

$$\mathcal{G} \approx \mathcal{D}\ ,\ \text{kern}\ \mathcal{D} = e$$

Nhưng nếu $\mathcal{D}$ là một phép đồng cấu thì, theo định lý về sự đồng cấu (I § 10), ta có

$$\mathcal{G}/\text{kern}\ \mathcal{D} \approx \mathcal{D}\ ,$$

tức là $\mathcal{D}$ là biểu diễn trung thành của nhóm thương $\mathcal{G}/\text{kern}\ \mathcal{D}$.

Biểu diễn nhóm SO(2)

Các ánh xạ

$$D\,[g(\varphi)] = \exp(-\,im\varphi)\,,\ g \in SO\,(2)\ (\text{m là số nguyên}) \qquad (2\text{-}1),$$

Ký hiệu là $\mathcal{D}_2^{(m)}$, rõ ràng là các biểu diễn một chiều của nhóm SO (2), vì định nghĩa (1-1) được thỏa mãn. Tập hợp các lượng $\exp(-im\varphi)$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$, làm thành một nhóm con của nhóm ma trận cấp một. Các biểu diễn này là trung thành.

Ánh xạ

$$D\,[g(\varphi)] = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix},\ g \in SO(2) \qquad (2\text{-}2)$$

là một phép biểu diễn hai chiều của nhóm SO(2), vì định nghĩa (1-1) được thỏa mãn. Thực vậy, ta có theo I (2-4)

$$D\,[g(\varphi)]\,D\,[g(\psi)] = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\psi & -\sin\psi \\ \sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \cos(\varphi+\psi) & -\sin(\varphi+\psi) \\ \sin(\varphi+\psi) & \cos(\varphi+\psi) \end{bmatrix} = D\,[g(\varphi+\psi)] = D\,[g(\varphi)\,g(\psi)].$$

Biểu diễn này là trung thành.

Biểu diễn nhóm tuần hoàn $\mathcal{C}_n$

Các ánh xạ

$$\mathcal{D}^{(m)}:\ D\,(C_n^k) = \omega_n^{(m)k},\ C_n^k \in \mathcal{C}_n,\ \omega_n^{(m)k} \in Z_n^{(m)}, \qquad (2\text{-}3)$$

$$(k = 0, 1, 2, \dots, n-1)\ (m = 0, 1, 2, \dots, n-1)$$

từ nhóm $\mathcal{C}_n$ lên các nhóm ma trận cấp một $Z_n^{(m)}$ là m biểu diễn một chiều của nhóm $\mathcal{C}_n$. Các biểu diễn này nói chung là không trung thành.

Biểu diễn nhóm $\mathcal{D}_3$

Ánh xạ

$$\mathcal{D}^{(2)}:\ D(e) = 1\,,\ D(d) = 1\,,\ D(f) = 1,$$

$$D(a) = -1\,,\ D(b) = -1\,,\ D(c) = -1\,, \qquad (2\text{-}4)$$

từ nhóm $\mathcal{C}_3$ lên nhóm Z_2 là một biểu diễn một chiều của nhóm $\mathcal{D}_3$. Biểu diễn này là không trung thành vì kern $\mathcal{D}^{(2)} = \{e,d,f\} \neq e$.

nh xạ

$$\mathcal{D}^{(3)}:\ D(e) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},\ D(a) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$D(b) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix},\qquad D(c) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix},$$

$$D(d) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix},\ D(f) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \qquad (2\text{-}5)$$

cũng là một biểu diễn nhóm $\mathcal{D}_3$ (chúng ta có thể chứng minh điều này bằng cách tính trực tiếp). Biểu diễn này là hai chiều và là trung thành, do kern $\mathcal{D}^{(3)} = e$.

Các biểu diễn đối xứng và phản xứng của nhóm S_n

Biểu diễn đơn vị (1-4) của nhóm S_n gọi là *biểu diễn đối xứng* của nhóm đó.

Biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(2)}: D(g) = \delta_g = \begin{cases} 1, & \text{với g là hoán vị chẵn (kể cả đơn vị e),} \\ -1, & \text{với g là hoán vị lẻ,} \end{cases}$$

từ nhóm S_n lên nhóm Z_2 gọi là *biểu diễn phản xứng* của nhóm. Hai biểu diễn này là không trung thành.

Các biểu diễn của nhóm quaternion Q

Có thể chứng tỏ rằng chúng ta có các biểu diễn sau đây của nhóm quaternion Q (xem I § 3) :

Biểu diễn một chiều không trung thành $Q \to Z_2$:

$$\{e, -e, k, -k\} \to 1, \{i, -i, j, -j\} \to -1,$$

$$\text{Kern } \mathcal{D} = \{e, -e, k, -k\}$$

Biểu diễn hai chiều :

$$\pm e \to \pm I_2, \pm i \to \pm \sqrt{-1}\, \sigma_1,$$

$$\pm k \to \pm \sqrt{-1}\, \sigma_3, \pm j \to \pm \sqrt{-1}\, \sigma_2$$

trong đó σ_1, σ_2 và σ_3 là các ma trận Pauli.

§ 3. BIỂU DIỄN $\mathcal{T}_g$

Không gian đồng nhất

Cho một nhóm $\mathcal{G}$ các phép biến đổi tuyến tính trong một không gian $\mathcal{M}$ nào đó. Nếu với mọi cặp điểm x và y của không gian $\mathcal{M}$, ta luôn luôn tìm được một phần tử g của nhóm sao mà $gx = y$, thì nhóm $\mathcal{G}$ gọi là *nhóm bắc cầu* của không gian $\mathcal{M}$ và không gian $\mathcal{M}$ gọi là *không gian đồng nhất* của nhóm $\mathcal{G}$. Tất nhiên, nhóm SO(3) chẳng hạn không phải là một nhóm bắc cầu của không gian Euclid ba chiều thông thường, vì rằng không có một phần tử nào của nhóm có thể chuyển một điểm của không gian đó thành một điểm khác cách gốc O gần hơn hoặc xa hơn. Trái lại, mặt cầu là một không gian đồng nhất của nhóm SO(3). Ta chú ý rằng toàn bộ không gian Euclid ba chiều thông thường như thế chia thành những không gian đồng nhất của nhóm SO(3), các không gian này là những mặt cầu có bán kính khác nhau.

Biểu diễn $\mathcal{T}_g$

Tiếp theo, cho một không gian đồng nhất nào đó $\mathcal{M}$ của nhóm $\mathcal{G}$, và gọi $\mathcal{L}$ là tập hợp tất cả các hàm $\psi(x)$ có đối số $x \in \mathcal{M}$. Thế thì không gian $\mathcal{L}$ gọi là *bất biến* đối với nhóm $\mathcal{G}$ nếu, khi đã chứa hàm $\psi(x)$, nó sẽ chứa mọi hàm $\psi(gx)$, $g \in \mathcal{G}$.

Bây giờ, giả sử không gian $\mathcal{L}$ là bất biến đối với nhóm $\mathcal{G}$ và đặt

$$T_g\psi(x) = \psi(g^{-1}x), \quad g \in \mathcal{G}, \quad x \in \mathcal{M}. \tag{3-1}$$

Theo định nghĩa này, ta có

$$T_{g_1} T_{g_2} \psi(x) = T_{g_1} \psi(g_2^{-1} x) = \psi(g_2^{-1} g_1^{-1} x) = \psi[(g_1 g_2)^{-1} x],$$

tức là, theo (3-1),

$$T_{g_1} T_{g_2} = T_{g_1 g_2},$$

điều này chứng tỏ rằng các toán tử T_g làm thành một biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$ trong không gian $\mathcal{L}$ các hàm ψ, và ký hiệu là $\mathcal{T}_g$.

Theo định nghĩa chung của ma trận toán tử, nếu ψ^i là cơ sở của không gian $\mathcal{L}$, ta có

$$T_g\psi^i = D_{ji}(g)\,\psi^j, \tag{3-2}$$

$D_{ji}(g)$ là ma trận của toán tử T_g.

Vi tử

Trong đa số trường hợp thường gặp trong cơ học lượng tử, nhóm $\mathcal{G}$ là một nhóm liên tục có một số tham số hữu hạn $\mathbf{a} = \{a^\rho\}$, ρ là số thứ tự các tham số ($\mathcal{G}$ gọi là nhóm Lie, mà chúng ta sẽ đề cập đến một cách đầy đủ ở chương VII). Chẳng hạn, đó có thể là nhóm tịnh tiến trong không gian ba chiều thông thường mà ba tham số là ba thành phần của vectơ tịnh tiến $\mathbf{a}$, hay là nhóm SO(2) có tham số là góc φ, hay là nhóm SO(3) mà ba tham số là các thành phần của vectơ quay trên ba trục tọa độ. Trong các trường hợp này, T_g phụ thuộc một cách liên tục vào các tham số của nhóm và các lượng

$$I_\rho = \frac{\partial}{\partial a^\rho} T_g\Big|_{a=0} \tag{3-3}$$

Gọi là các *vi tử* của biểu diễn T_g.

Số vi tử bằng số tham số của nhóm.

Khi

$$T_g : g \leftrightarrow g$$

tức là khi có *biểu diễn đồng nhất* (thường gọi là *biểu diễn định nghĩa*), thì các vi tử I_ρ gọi là các *vi tử của nhóm*.

§4. ĐẶC BIỂU

Biểu diễn tương đương

Nếu thay đổi cơ sở trong không gian $\mathcal{M}_n$ thì, như đã biết, các ma trận D(g) thực hiện biểu diễn $\mathcal{D}$ của nhóm $\mathcal{G}$ biến thành các ma trận đồng dạng

$$D'(g) = SD(g)S^{-1}$$

với S là ma trận thực hiện phép biến đổi (khả nghịch) của cơ sở. Dễ thấy rằng các ma trận D'(g) cũng làm thành một biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$, gọi là *biểu diễn* *tương đương với* $\mathcal{D}$. Vì quan hệ đồng dạng là một quan hệ tương đương, nên các biểu diễn tương đương làm thành một lớp và tất cả các thành viên thuộc lớp đều xem như nhau. Thành thử, về phương diện biểu diễn, tất cả các biểu diễn tương đương với nhau đều xem là như nhau.

Nguyên nhân sâu xa của vấn đề là ở chỗ cơ sở chỉ là phương tiện để nghiên cứu: khi nghiên cứu, về nguyên tắc, ta có thể tùy ý dùng mọi cơ sở.

Đặc biểu

Có hai vấn đề tự nhiên đề ra ở đây:

1. Vì các biểu diễn thuộc cùng một lớp được xem như nhau, nên cần nêu lên các đặc trưng nội tại cho *toàn lớp biểu diễn*, nghĩa là tìm các đại lượng liên quan đến biểu diễn, nhưng bất biến đối với các phép biến đổi (khả nghịch) cơ sở của không gian biểu diễn.

2. Trong một lớp biểu diễn xác định, chọn biểu diễn nào thuận lợi nhất.

Trước hết, ta hãy giải quyết vấn đề thứ nhất. Một trong những đặc trưng nêu lên ở trên chính là vết

$$\mathrm{Sp}\,D(g) \equiv \sum_{i=1}^{n} D_{ii}(g).$$

Quả vậy, vì giá trị của vết không thay đổi khi hoán vị vòng quanh các nhân tử có mặt trong biểu thức của vết, nên ta có:

$$\mathrm{Sp}\,D'(g) = \mathrm{Sp}\,[SD(g)S^{-1}] = \mathrm{Sp}\,[S^{-1}SD(g)] = \mathrm{Sp}\,D(g),$$

đó là điều phải chứng minh.

Vết của biểu diễn gọi là *đặc biểu* của biểu diễn và ký hiệu là $\chi(g)$:

$$\chi(g) = \mathrm{Sp}\,D(g).$$

Bây giờ cho hai phần tử h và g của nhóm, liên hợp với nhau $h = x^{-1}gx$, $h, g, x, \in \mathcal{G}$. Theo (4-1), ta có

$$\mathrm{Sp}\,D(h) = \mathrm{Sp}\,D(x^{-1}gx) = \mathrm{Sp}\{D(x^{-1})\,D(g)\,D(x)\} =$$
$$= \mathrm{Sp}\,\{D(x)^{-1}D(g)\,D(x)\} = \mathrm{Sp}\,\{D(x)\,D(x)^{-1}D(g)\} = \mathrm{Sp}\,D(g).$$

từ đó, theo (3-1), ta có

$$\chi\,(x^{-1}gx) = \chi(g),$$

tức là các phần tử thuộc cùng một lớp của nhóm $\mathcal{G}$ cho cùng một giá trị của đặc biểu. Ta nói đặc biểu *là một hàm của lớp*. Thành thử, nếu nhóm có s lớp $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2, \ldots, \mathcal{K}_s$, thì đặc biểu là một tập hợp của s lượng

$$\chi_i \equiv \chi(\mathcal{K}_i), \; (i = 1, 2, \ldots, s).$$

Như thế, đặc biểu của mỗi biểu diễn có thể xem như một vectơ trong một không gian s chiều nào đó.

Tất nhiên, với biểu diễn đơn vị (1-4) ta luôn luôn có:

$$\chi_i = 1, \; (i = 1, \ldots, s).$$

Ta lưu ý rằng vì $D(e) = I_n$, nên

$$\chi\,(e) = n. \tag{4-2}$$

Đặc biểu các biểu diễn của nhóm $\mathcal{D}_3$

Nhóm $\mathcal{D}_3$ chia thành ba lớp ($s = 3$)

$$\mathcal{K}_1 = \{e\}, \quad \mathcal{K}_2 = \{d, f\}, \quad \mathcal{K}_3 = \{a, b, c\},$$

đặc biểu của các biểu diễn của nhóm là những vectơ ba chiều. Với các biểu diễn cụ thể ở § 2, đặc biểu của biểu diễn một chiều là vectơ

$$\chi_1^{(2)} = 1, \quad \chi_2^{(2)} = 1, \quad \chi_3^{(2)} = -1,$$

còn đặc biểu của biểu diễn hai chiều (2, 5) là vectơ

$$\chi_1^{(3)} = 2, \quad \chi_2^{(3)} = -1, \quad \chi_3^{(3)} = 0$$

Tất nhiên với biểu diễn đơn vị (1-4) ta có

$$\chi_1^{(0)} = 1, \quad \chi_2^{(0)} = 1, \quad \chi_3^{(0)} = 1$$

§ 5. BIỂU DIỄN KHẢ QUY VÀ BẤT KHẢ QUY

Nói chung, một nhóm có vô số biểu diễn. Vấn đề là tìm các biểu diễn « đơn giản » nhất. Muốn giải quyết vấn đề này, ta đưa vào các khái niệm sau

Hệ khả quy và bất khả quy

Cho một không gian tuyến tính $\mathcal{M}_n$ và một hệ ma trận (phép biến đổi tuyến tính) $\mathcal{A}$. Hệ $\mathcal{A}$ gọi là *khả quy* trong không gian $\mathcal{M}_n$ nếu có một không gian con $\mathcal{M} \subset \mathcal{M}_n$, $\mathcal{M} \neq 0$, sao mà

$$A\mathcal{M} \subset \mathcal{M} \quad \text{với mọi } A \in \mathcal{A},$$

tức là

$$\mathcal{A}x \in \mathcal{M} \quad \text{với mọi } x \in \mathcal{M},\ A \in \mathcal{A}.$$

Không gian con $\mathcal{M}$ gọi là *bất biến* đối với hệ $\mathcal{A}$.

Trái lại, nếu mọi không gian con bất biến của $\mathcal{M}_n$ hoặc bằng 0 hoặc trùng với $\mathcal{M}_n$, thì hệ $\mathcal{A}$ gọi là *bất khả quy* và không gian $\mathcal{M}_n$ cũng gọi là *bất khả quy* đối với hệ $\mathcal{A}$.

Nếu không gian con bất biến $\mathcal{M}$ có r chiều và nếu ta chọn r vectơ cơ sở của $\mathcal{M}$ làm các vectơ cơ sở đầu tiên của không gian $\mathcal{M}_n$, thì mọi vectơ $x \in \mathcal{M}$ đều có biểu diễn

$$x = \begin{bmatrix} * \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ * \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \left.\vphantom{\begin{matrix} * \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ * \end{matrix}}\right\} r \\ \left.\vphantom{\begin{matrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{matrix}}\right\} n-r \end{matrix}$$

Các $*$ ở ma trận cột trỏ những phần tử nói chung khác không. Từ đó, theo giả thiết $\mathcal{M}$ bất biến đối với hệ $\mathcal{A}$, ta có

$$x \to x' = Ax = \begin{bmatrix} * \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ * \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \left.\vphantom{\begin{matrix} * \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ * \end{matrix}}\right\} r \\ \left.\vphantom{\begin{matrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{matrix}}\right\} n-r \end{matrix}, \ A \in \mathcal{A}.$$

Như thế, theo các biểu diễn của x và x', tất cả các ma trận $A \in \mathcal{A}$ đều có dạng

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & K \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}, \ A \in \mathcal{A},$$

trong đó A_1 là ma trận con vuông cấp r, A_2 là ma trận con vuông cấp $n - r$, K là ma trận con chữ nhật $r \times (n - r)$.

Hệ phân giải được

Một trường hợp hết sức quan trọng là ngoài $\mathcal{M}$, không gian $\mathcal{M}_n$ có một không gian con thứ hai bất biến $\mathcal{N}$ sao mà $\mathcal{M}_n = \mathcal{M} + \mathcal{N}$. Thế thì chọn $n - r$ vectơ cơ sở của $\mathcal{N}$ làm các vectơ cơ sở còn lại của $\mathcal{M}_n$, ta thấy rằng tất cả các A phải có dạng

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix} = A_1 \oplus A_2, \ A \in \mathcal{A}.$$

Trong trường hợp này, hệ $\mathcal{A}$ gọi là *phân giải* thành hai hệ con khác

$$\mathcal{A}_1 = \{A_1\},$$
$$\mathcal{A}_2 = \{A_2\},$$

và ta viết $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2$.

Hệ hoàn toàn khả quy

Một hệ $\mathcal{A}$ gọi là *hoàn toàn khả quy* nếu hoặc $\mathcal{A}$ là bất khả quy, hoặc $\mathcal{A}$ có thể phân giải thành nhiều hệ con bất khả quy. Tương ứng, không gian $\mathcal{M}_n$ phân thành tổng trực tiếp nhiều không gian con bất khả quy.

Biểu diễn khả quy, bất khả quy và hoàn toàn khả quy

Nếu biểu diễn $\mathcal{D}$ là một hệ khả quy, bất khả quy hay hoàn toàn khả quy thì biểu diễn đó tương ứng gọi là *khả quy, bất khả quy* hay *hoàn toàn khả quy*.

Theo nghĩa trên, các biểu diễn bất khả quy là những biểu diễn đơn giản nhất.

Ví dụ

Biểu diễn (2-2) của nhóm SO(2) là hoàn toàn khả quy, vì biểu diễn tương đương

$$D'[g(\varphi)] = S^{-1}D[g(\varphi)]S$$

với

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & -i\\ -i & 1\end{bmatrix},$$

có dạng hoàn toàn khả quy sau

$$D_1[g(\varphi)] = \begin{bmatrix}e^{i\varphi} & 0\\ 0 & e^{-i\varphi}\end{bmatrix} = e^{i\varphi} \oplus e^{-i\varphi}.$$

§ 6. CÁC BỔ ĐỀ SCHUR

Vấn đề tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của một nhóm là vấn đề chủ yếu nhất của lý thuyết biểu diễn. Muốn giải quyết vấn đề này, cái chìa khóa là hai bổ đề Schur sau

Bổ đề Schur thứ nhất

Cho $\mathcal{A}$ và $\mathcal{B}$ là hai hệ phép biến đổi tuyến tính bất khả quy, tương ứng tác dụng trong hai không gian tuyến tính $\mathcal{M}_n = \{x\}$ và $\mathcal{M}_m = \{y\}$. Giả sử có một ma trận chữ nhật $P(n \times m)$ thực hiện một phép biến đổi tuyến tính từ $\mathcal{M}_n$ vào $\mathcal{M}_m$, sao mà với mỗi $A \in \mathcal{A}$ ta tìm được một $B \in \mathcal{B}$ — và ngược lại — với tính chất

$$PA = BP. \tag{6-1}$$

Thế thì, có hai khả năng loại trừ nhau: hoặc $P = 0$, hoặc P là không kỳ dị, Trong trường hợp thứ hai, ta có $m = n$ và hai hệ $\mathcal{A}$ và $\mathcal{B}$ gọi là đồng dạng với nhau.

Chứng minh

Ta ký hiệu $\mathcal{M}$ là không gian con của không gian $\mathcal{M}_n$ được ánh xạ vào phần tử 0 của không gian $\mathcal{M}_m$, tức là

$$P\mathcal{M} = 0,\ Px \neq 0 \text{ với } x \in \mathcal{M}. \tag{6-2}$$

Theo giả thiết (6-1), với mọi $x \in \mathcal{M}$, ta có

$$P(Ax) = B(Px) = B0 = 0,$$

tức là khi $x \in \mathcal{M}$ thì $Ax \in \mathcal{M}$ với mọi $A \in \mathcal{A}$, điều này chứng tỏ rằng không gian con $\mathcal{M}$ là bất biến đối với hệ $\mathcal{A}$. Nhưng vì hệ $\mathcal{A}$ là bất khả quy theo giả thiết nên hoặc $\mathcal{M} = \mathcal{M}_n$, hoặc $\mathcal{M} = 0$.

Nếu ta có khả năng thứ nhất $\mathcal{M} = \mathcal{M}_n$, thì, vì $P\mathcal{M}_n = P\mathcal{M} = 0$, theo (6-2), nên ta phải có $P = 0$.

Còn nếu $\mathcal{M} = 0$, thì rõ ràng ánh xạ P là một ánh xạ một đối một của không gian $\mathcal{M}_n$ vào không gian $\mathcal{M}_m$ (vì nhân ánh xạ $\mathcal{M} = 0$!).

Tiếp theo gọi

$$\mathcal{N} = P\mathcal{M}_n,$$

là ảnh của không gian $\mathcal{M}_n$ trong không gian $\mathcal{M}_m$. Ảnh này là bất biến đối với hệ $\mathcal{B}$. Quả vậy, với mọi $y \in \mathcal{N}$, $y = Px$, $x \in \mathcal{M}_n$, ta có theo (6-1)

$$By = BPx = PAx = Px' \in \mathcal{N},$$

với $x' = Ax$ là một vectơ nào đó của không gian $\mathcal{M}_n$. Như thế, không gian con $\mathcal{N}$ là bất biến đối với hệ $\mathcal{B}$. Nhưng vì hệ $\mathcal{B}$ là bất khả quy, nên hoặc $\mathcal{N} = 0$, hoặc $\mathcal{N} = \mathcal{M}_m$. Trong trường hợp thứ nhất, do $P\mathcal{M}_n = 0$, ta phải có $P = 0$. Trong trường hợp thứ hai, do $\mathcal{M}_m = P\mathcal{M}_n$, ánh xạ P là một ánh xạ lên. Mặt khác, như đã chứng tỏ ở trên, ánh xạ P lại là một đối một. Thành thử, ta phải có $m = n$ và có tồn tại một P^{-1}. Theo (6-1), ta có thể viết $A = PBP^{-1}$, tức là hai hệ $\mathcal{A}$ và $\mathcal{B}$ là đồng dạng với nhau. Bổ đề thứ nhất chứng minh xong.

Bây giờ giả sử $\mathcal{M}_n = \mathcal{M}_m$ và $\mathcal{A} = \mathcal{B}$. Thế thì ta có

Bổ đề Schur thứ hai

Mọi ma trận P có tính chất giao hoán với mọi phần tử A của một hệ bất khả quy $\mathcal{A}$ phải là bội của đơn vị.

Chứng minh

Quả vậy vì P giao hoán với mọi A, nên ta có với mọi A: $(P - cI)\,A = A\,(P - cI)$, với mọi $c \in C$, (C là trường số phức).

Nhưng theo bổ đề thứ nhất thì có hai khả năng loại trừ nhau, hoặc $P - cI = 0$, hoặc có tồn tại $(P - cI)^{-1}$ với mọi c. Nhưng vì trường số phức C là kín đại số nên ít nhất có một số phức λ sao mà phương trình đại số $\det | P - \lambda I | = 0$ được thỏa mãn. Thành thử $P - \lambda I$ không có nghịch đảo, và chỉ còn lại khả năng thứ nhất, tức là

$$P = \lambda I$$

Bổ đề thứ hai chứng minh xong.

Từ các bổ đề Schur trên, ta suy ra ngay

Định lý

Các biểu diễn bất khả quy của các nhóm giao hoán đều một chiều.

Chứng minh

Quả vậy, vì các phần tử của nhóm giao hoán với nhau nên, theo (1-1), tất cả các ma trận biểu diễn đều giao hoán với nhau. Thành thử, theo bổ đề Schur thứ hai, ta có $D(g) = \lambda I_n$, $\lambda \in C$. Các biểu diễn này rõ ràng chỉ là bất khả quy khi $n = 1$.

Với các nhóm hữu hạn ta có định lý rất quan trọng sau :

§ 7. ĐỊNH LÝ MASCHKE

Trung bình bất biến

Cho một hàm P xác định trên $\mathcal{G}$, $P = P(g)$, $g \in \mathcal{G}$, cấp của nhóm $\mathcal{G}$ bằng G. Lượng

$$M\{P\} = \frac{1}{G}\sum_g P(g), \tag{7-1}$$

nếu có nghĩa gọi là *trung bình bất biến* của hàm P theo nhóm $\mathcal{G}$. Vì khi g chạy khắp $\mathcal{G}$, các phần tử g_0g, gg_0, g^{-1}, g_0g^{-1}, $g^{-1}g_0$, trong đó g_0 là một phần tử cố định của $\mathcal{G}$, cũng chạy khắp $\mathcal{G}$, nên ta có :

$$M\{P\} = \frac{1}{G}\sum_g P(g) = \frac{1}{G}\sum_g P(g_0g) = \frac{1}{G}\sum_g (P\,gg_0) =$$

$$= \frac{1}{G}\sum_g P(g^{-1}) = \frac{1}{G}\sum P(g_0g^{-1}) = \frac{1}{G}\sum P(g^{-1}g_0). \tag{7-2}$$

Vì lý do này, lượng $M\{P\}$ gọi là trung bình bất biến theo nhóm $\mathcal{G}$. Đối với các nhóm hữu hạn, vì tổng ở đẳng thức (7-2) là một tổng hữu hạn, nên luôn luôn có tồn tại trung bình bất biến. Nhưng đối với các nhóm vô hạn, tổng vô hạn có thể không có giá trị giới nội tức là không có nghĩa, do đó không phải bất kỳ nhóm vô hạn nào cũng nhận trung bình bất biến.

Định lý Maschke

Mỗi biểu diễn khả quy của các nhóm hữu hạn đều có thể phân giải được.

Chứng minh

Quả vậy, cho biểu diễn khả quy $\mathcal{D}$:

$$D(g) = \left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(g) & K(g) \\ \hline 0 & D^{(2)}(g) \end{array}\right), \quad g \in \mathcal{G},$$

trong đó $D^{(1)}(g)$ và $D^{(2)}(g)$ là những ma trận vuông tương ứng có cấp n_1 và n_2, còn $K(g)$ là ma trận chữ nhật $n_1 \times n_2$.

Từ đó, theo định nghĩa

$$D(hg) = D(h)\,D(g)$$

và quy tắc nhân ma trận hộp, ta được

$$\begin{bmatrix} D^{(1)}(hg) & K(hg) \\ 0 & D^{(2)}(hg) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D^{(1)}(h) & K(h) \\ 0 & D^{(2)}(h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D^{(1)}(g) & K(g) \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} D^{(1)}(h)\,D^{(1)}(g) & D^{(1)}(h)K(g) + K(h)\,D^{(2)}(g) \\ 0 & D^{(2)}(h)D^{(2)}(g) \end{bmatrix}$$

Từ đó, ta suy ra các đẳng thức sau

$$D^{(1)}(hg) = D^{(1)}(h)\;D^{(1)}(g),$$

$$D^{(2)}(hg) = D^{(2)}(h)\;D^{(2)}(g),$$

$$K(hg) = D^{(1)}(h)\;K(g) + K(h)\;D^{(2)}(g). \tag{7-3}$$

Như thế, $D^{(1)}(g)$ và $D^{(2)}(g)$ là những biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$ và, do đó, tập hợp các ma trận

$$D^{(3)}(g) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{bmatrix}$$

cũng làm thành một biểu diễn của $\mathcal{G}$, ký hiệu là $\mathcal{D}^{(3)}$. Định lý Maschke được chứng minh nếu ta chứng tỏ được biểu diễn $\mathcal{D}$ là tương đương với biểu diễn $\mathcal{D}^{(3)}$.

Gọi

$$S = \begin{bmatrix} I_{n_1} & X \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix}, \quad S^{-1} = \begin{bmatrix} I_{n_1} & -X \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix},$$

trong đó X là một ma trận sẽ được xác định sau, ta được

$$SD(g)\,S^{-1} = \begin{bmatrix} D^{(1)}(g) & D^{(1)}(g)X + K(g) - XD^{(2)}(g) \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{bmatrix}.$$

Ta hãy xem trong trường hợp nào ta có thể chọn ma trận X sao cho

$$D^{(1)}(g)X + K(g) - XD^{(2)}(g) = 0, \tag{7-4}$$

tức là sao cho D (g) là tương đương với $D^{(3)}$:

$$SD(g)S^{-1} = D^{(3)}(g).$$

Nếu $\mathcal{G}$ là một nhóm hữu hạn ở đó có tồn tại trung bình bất biến, thì ta sẽ thấy rằng

$$X = M\{KD^{(2)}(g^{-1})\} = \frac{1}{G}\sum_u K(u)\, D^{(2)}(u^{-1}) \tag{7-5}$$

là nghiệm của (7-4).

Quả vậy, nhân phải hai vế của đẳng thức (7-3) với $D^{(2)}(g^{-1})$, ta được

$$K(hg)\, D^{(2)}(g^{-1}) = D^{(1)}(h)\, K(g)\, D^{(2)}(g^{-1}) + K(h).$$

Tiếp theo, lấy trung bình hai vế của đẳng thức này theo g và chú ý đến tính chất (7-2), ta được ở vế trái

$$\frac{1}{G}\sum_g K(hg)\, D^{(2)}(g^{-1}) = \frac{1}{G}\sum_u K(u)\, D^{(2)}(u^{-1}h) =$$

$$= \left\{\frac{1}{G}\sum_u K(u)\, D^{(2)}(u^{-1})\right\} D^{(2)}(h) = XD^{(2)}(h).$$

và ở vế phải

$$D^{(1)}(h)\left\{\frac{1}{G}\sum_g K(g)\, D^{(2)}(g^{-1})\right\} + K(h) = D^{(1)}(h)X + K(h).$$

Như thế là lượng X, xác định bởi đẳng thức (7-5), thỏa mãn phương trình (7-4). Định lý Maschke được chứng minh.

Theo định lý Maschke, nếu không gian biểu diễn $\mathcal{M}_n$ của một nhóm hữu hạn là khả quy thì không gian đó sẽ phân thành tổng trực tiếp hai không gian bất biến nào đó $\mathcal{M}^{(1)}$ và $\mathcal{M}^{(2)}$. Điều này cho phép đi đến một sự phân tích hoàn toàn các biểu diễn. Quả vậy, không gian biểu diễn $\mathcal{M}_n$ hoặc là bất khả quy, hoặc là khả quy và phân thành tổng trực tiếp $\mathcal{M}^{(1)} \oplus \mathcal{M}^{(2)}$. Trong trường hợp thứ nhất, biểu diễn $\mathcal{D}$ là bất khả quy. Trong trường hợp thứ hai, không gian con $\mathcal{M}^{(1)}$ ($\mathcal{M}^{(2)}$) hoặc là bất khả quy hoặc là khả quy và, như thế, với khả năng thứ hai đến lượt $\mathcal{M}^{(1)}$ ($\mathcal{M}^{(2)}$) lại phân thành tổng trực tiếp hai không gian con khác. Do không gian $\mathcal{M}_n$ là hữu hạn, quá trình này sẽ kết thúc sau một số bước hữu hạn, khi tất cả các không gian thu được đều là bất khả quy.

Như thế ta có

Định lý 2 *(Định lý về tính chất hoàn toàn khả quy)*

Mỗi biểu diễn hữu hạn của các nhóm hữu hạn hoặc là bất khả quy, hoặc là hoàn toàn khả quy, tức là phân giải được thành tổng nhiều biểu diễn bất khả quy.

Các ma trận biểu diễn như thế sẽ có dạng gần chéo, tức là có dạng khối, ở đó tất cả các khối không nằm trên đường chéo chính đều bằng không.

Chú ý

Với các nhóm vô hạn, tính chất hoàn toàn khả quy không phải luôn luôn đúng cho mọi biểu diễn. Chẳng hạn, như ta đã thấy ở I(15-5), nhóm tịnh tiến tức là tích nửa trực tiếp $R^1 \otimes e$

$$T_a : x \to x' = x + a, \; -\infty < a < \infty,$$

có biểu diễn hai chiều khả quy dạng

$$D(T_a) = \begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Nhưng biểu diễn này là không hoàn toàn khả quy vì nó không thể chéo hóa được. Bạn đọc tự tính lấy.

Như thế, đối với các nhóm hữu hạn, bài toán biểu diễn là tìm những biểu diễn bất khả quy của nhóm (không tương đương với nhau). Nội dung bài toán này trước hết là tìm hệ thống tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm, trong đó có vấn đề tiêu chuẩn bất khả quy, chiều biểu diễn, số biểu diễn. Sau đó là xét cấu trúc của một biểu diễn (khả quy) cho sẵn. Nhưng trước khi thực hiện chương trình này, ta hãy giải quyết vấn đề thứ hai đặt ra ở §4.

§8. BIỂU DIỄN UNITA

Định lý 1

Mỗi biểu diễn của các nhóm hữu hạn đều tương đương với một biểu diễn unita nào đó.

Một biểu diễn $\mathcal{D}$ gọi là *unita*, nếu tất cả các ma trận D(g) đều unita.

Chứng minh

Quả vậy, cho một biểu diễn $\mathcal{D}$ xác định nào đó của nhóm. Trong lớp tất cả các biểu diễn $SD(g)S^{-1}$ tương đương với D(g) (tức là tương đương với nhau) ta hãy tìm cách xác định ma trận S sao mà tất cả các ma trận

$$SD(g)S^{-1},\ D\in\mathcal{D},\ g\in\mathcal{G}$$

đều unita.

Trước hết, ta hãy lấy ma trận R bằng trung bình bất biến của hàm $P = DD^+$ (trung bình bất biến này tồn tại vì nhóm $\mathcal{G}$ là hữu hạn!):

$$R = M\{D(g)\,D^+(g)\} = \frac{1}{G}\sum_g D(g)\,D^+(g). \tag{8-1}$$

Ma trận R là hermitic, $R = R^+$, đồng thời là xác định dương. Theo (1-1) và (8-1), ma trận R còn thỏa mãn tính chất

$$D(g_o)\,RD^+(g_o) = \frac{1}{G}\sum_g D(g_og)\,D^+(g_og) = R, \tag{8-2}$$

suy từ tính chất (7-2) của trung bình bất biến. Vì R là hermitic nên nó có thể chéo hóa bởi một ma trận unita U nào đó (ma trận unita có tính chất $U^{-1} = U^+$)

$$R \to U^+RU = T = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix},\ \text{(n là chiều biểu diễn)} \tag{8-3}$$

trong đó các trị riêng $\lambda_i > 0$ ($i = 1,..., n$), do tính chất xác định dương của ma trận R. Từ đó, ta có thể định nghĩa các ma trận

$$T^{1/2} = \begin{bmatrix} \lambda_1^{1/2} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n^{1/2} \end{bmatrix}, \quad T^{-1/2} = \begin{bmatrix} \lambda_1^{-1/2} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n^{-1/2} \end{bmatrix}.$$

Tiếp theo, ta hãy thực hiện phép biến đổi đồng dạng sau với $T = UT^{1/2}$

$$D(g) \rightarrow D'(g) = S^{-1} D(g) S = T^{-1/2}U^{-1} D(g)\, UT^{1/2} = T^{-1/2}\, U^{+} D(g)\, UT^{1/2}.$$

Biểu diễn với các ma trận $D'(g)$ là unita. Quả vậy, với mọi $g \in \mathcal{G}$, theo (8-2) và (8-3), ta có

$$\begin{aligned} D'(g)D'^{+}(g) &= (T^{-1/2}U^{+} D(g)UT^{1/2})\,(T^{1/2}\, U^{+}\, D^{+}(g)\, UT^{-1/2} = \\ &= [T^{-1/2}\, U^{+}\, D(g)]\, [UTU^{+}]\, [D^{+}(g)\, UT^{-1/2}] = \\ &= [T^{-1/2}\, U^{+}]\, [D(g)\, RD^{+}(g)]\, [UT^{-1/2}] = \\ &= T^{-1/2}U^{+} RUT^{-1/2} = T^{-1/2}TT^{-1/2} = I_n, \end{aligned}$$

đó là điều phải chứng minh.

Như thế, với các nhóm hữu hạn, ở đó có tồn tại trung bình bất biến, mọi biểu diễn đều tương đương với một biểu diễn unita. Chính biểu diễn unita này là biểu diễn chúng ta cần phải chọn trong lớp tất cả các biểu diễn tương đương với nhau, do các ma trận unita có những đặc tính riêng của nó. Đối với những nhóm vô hạn, có những biểu diễn không tương đương với biểu diễn unita.

Từ nay về sau, khi nói đến biểu diễn các nhóm hữu hạn, ta thường hiểu là biểu diễn unita. Trong trường hợp này, từ tính chất unita và tính chất (1-3), ta có

$$D^{+}(h) = D^{-1}(h) = D(h^{-1}),$$

từ đó ta được đẳng thức sau cho đặc biểu các biểu diễn unita

$$\chi(h^{-1}) = \chi^{*}(h). \tag{8-4}$$

Bây giờ, giả sử lớp $\mathcal{K}_i$ của nhóm $\mathcal{G}$ có tính chất là, đồng thời với phần tử g, nó chứa cả phần tử g^{-1}. Một lớp như thế thì gọi là *tương nghịch* (ambivalent).

Vì đặc biểu là một hàm của lớp nên, theo định nghĩa của lớp tương nghịch và do (8-4), ta được

$$\chi_p(g) = \chi_p(g^{-1}) = \chi_p^{*}(g). \tag{8-5}$$

Như thế, ta có

Định lý 2

Giá trị của đặc biểu tại mỗi lớp tương nghịch là thực.

Các lớp của nhóm $\mathcal{D}_3$ hay các nhóm đối xứng S_n, như đã biết, (dựa vào các cấu trúc chu trình như nhau của các phần tử và các nghịch đảo của chúng), đều tương nghịch. Từ đó, theo định lý 2, đặc biểu của các nhóm đó đều thực.

Bây giờ ta hãy bắt đầu thực hiện chương trình đề ra ở cuối §7, tức là vấn đề tìm hệ thống tất cả các biểu diễn bất khả quy của một nhóm hữu hạn. Đó là các vấn đề về tiêu chuẩn bất khả quy, số biểu diễn bất khả quy, chiều biểu diễn và các vấn đề có liên quan đến cấu trúc của mọi biểu diễn. Cái chìa khóa để giải quyết tất cả các vấn đề trên là các bổ đề Schur.

Trước hết ta hãy trình bày một số tính chất của đặc biểu. Cho $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là một biểu diễn bất khả quy nào đó của nhóm $\mathcal{G}$, ta xét ma trận

$$T = \frac{1}{G} \sum_{h} D^{(\mu)}(h) X D^{(\mu)}(h^{-1}) = M\{D^{(\mu)} X D^{(\mu)-1}\},$$

với X là một ma trận tùy ý.

Ma trận T giao hoán với mọi $D^{(\mu)}(g)$, $g \in \mathcal{G}$. Quả vậy, theo tính chất bất biến (7-1) của trung bình, ta có:

$$TD^{(\mu)}(g) = \frac{1}{G} \sum_{h} D^{(\mu)}(h) X D^{(\mu)}(h^{-1}) D^{(\mu)}(g) =$$

$$= \frac{1}{G} \sum_{h} D^{(\mu)}(h) X D^{(\mu)}(h^{-1}g) = D^{(\mu)}(g) \left\{ \frac{1}{G} \sum_{h} D^{(\mu)}(g^{-1}h) X D^{(\mu)}[(g^{-1}h)^{-1}] \right\} =$$

$$= D^{(\mu)}(g)T.$$

Như thế, theo bổ đề Schur thứ hai, ta có $T = \lambda I_n$; tức là

$$\frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}(g) X D^{(\mu)}(g^{-1}) = \lambda I_n. \tag{9-1}$$

Bây giờ ta chọn $X = E_{lm}$ với E_{lm} là ma trận chỉ có một phần tử khác không, bằng 1, tại hàng l cột m

$$X_{rs} = \delta_{rl} \delta_{sm}$$

và, tương ứng với cách chọn này, ta đặt $\lambda = \lambda_{lm}$.

Tiếp theo, lấy phần tử hàng k cột j của đẳng thức (9-1), ta được

$$\frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{kr}(g) X_{rs} D^{(\mu)}_{sj}(g^{-1}) = \frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{kr}(g) \delta_{rl} \delta_{sm} D^{(\mu)}_{sj}(g^{-1}) =$$

$$= \frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{kl}(g) D^{(\mu)}_{mj}(g^{-1}) = \lambda_{lm} \delta_{kj}. \tag{9-2}$$

Ở (9-2) cho $j = k$ và lấy tổng theo k, ta được

$$\frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{kl}(g) D^{(\mu)}_{mk}(g^{-1}) = \frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{ml}(g^{-1}g) =$$

$$= \frac{1}{G} \sum_{g} D^{(\mu)}_{ml}(e) = \frac{1}{G} \sum_{g} \delta_{ml} = \delta_{ml} = n\lambda_{lm},$$

từ đó ta được giá trị của hằng số λ_{lm}

$$\lambda_{lm} = \frac{\delta_{lm}}{n}. \tag{9-3}$$

Như thế, theo (9-2) và (9-3), ta đã chứng minh rằng biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ thỏa mãn đẳng thức

$$\sum_g D^{(\mu)}_{kl}(g)\, D^{(\mu)}_{mj}(g^{-1}) = \frac{G}{n}\, \delta_{lm}\, \delta_{kj}. \tag{9-4}$$

Tương tự như thế, cho $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(\nu)}$ là hai biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau. Xuất phát từ ma trận

$$S = \frac{1}{G} \sum_g D^{(\mu)}(g) X D^{(\nu)}(g^{-1}), \quad (\mu \neq \nu)$$

thỏa mãn tính chất

$$D^{(\mu)}(g) S = S D^{(\nu)}(g) \text{ với mọi } g \in \mathcal{G},$$

ta được $S = 0$ theo bổ đề Schur thứ nhất, tức là

$$\sum_g D^{(\mu)}(g) X D^{(\nu)}(g^{-1}) = 0, \quad (\mu \neq \nu).$$

Từ đó nếu chọn $X = E_{lm}$ thì, tương tự như trên, ta được

$$\sum_g D^{(\mu)}_{kl}(g)\, D^{(\nu)}_{mj}(g^{-1}) = 0. \quad (\mu \neq \nu). \tag{9-5}$$

Hai đẳng thức (9-4) và (9-5) gộp lại với nhau thành hệ thức

$$\sum_g D^{(\mu)}_{kl}(g)\, D^{(\nu)}_{mj}(g^{-1}) = \frac{G}{n_\mu}\, \delta_{\mu\nu}\, \delta_{kj}\, \delta_{lm}, \tag{9-6}$$

trong đó n_μ là chiều của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$.

Khi biểu diễn $\mathcal{D}^{(\nu)}$ là unita, ta có

$$D^{(\nu)}(g^{-1}) = D^{(\nu)-1}(g) = D^{(\nu)+}(g),$$

tức là

$$D^{(\nu)}_{mj}(g^{-1}) = D^{(\nu)*}_{jm}(g),$$

do đó, hệ thức (9-6) có dạng

$$\sum_g D^{(\mu)}_{kl}(g)\, D^{(\nu)*}_{jm}(g) = \frac{G}{n_\mu}\, \delta_{\mu\nu}\, \delta_{kj}\, \delta_{lm}. \tag{9-7}$$

Như thế, theo (9-7), mỗi biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ cho n_μ^2 vectơ $D^{(\mu)}_{kl}(g)$, $(k, l = 1, ..., n_\mu)$ trực giao với nhau và trực giao với các vectơ tương tự, ứng với các biểu diễn bất khả quy khác $\mathcal{D}^{(\nu)}$. Vì các vectơ này thuộc một không gian G chiều (khi g chạy khắp nhóm $\mathcal{G}$) và, vì tổng số các vectơ trực giao với nhau của một không gian không thể vượt quá số chiều của không gian, nên ta có bất đẳng thức

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 \leqslant G.$$

Sau này ta sẽ chứng minh rằng thực ra ta có đẳng thức

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = G. \tag{9-8}$$

Đẳng thức (9-8) cho thấy rằng số biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau của một nhóm hữu hạn là giới nội.

Bây giờ ta hãy suy các hệ thức trực giao cho các đặc biểu. Ở công thức (9-7), cho $l = k$ và $m = j$, ta được

$$\sum_{g} D_{kk}^{(\mu)}(g)\, D_{jj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \frac{G}{n_{\mu}} \delta_{\mu\nu}\, \delta_{kj}\, \delta_{kj} = \frac{G}{n_{\mu}} \delta_{\mu\nu}\, \delta_{ki}\ (\text{vì } \delta_{kj}\, \delta_{kj} = \delta_{ki}).$$

Từ đó lấy tổng theo k và j từ 1 đến n_{μ}, ta được

$$\sum_{g} \chi^{(\mu)}(g)\, \chi^{(\nu)}(g^{-1}) = G\, \delta_{\mu\nu}, \tag{9-9}$$

hay, nếu biểu diễn $\mathcal{D}^{(\nu)}$ là unita, theo (8-4), ta có định lý sau

Định lý

Đặc biểu các biểu diễn bất khả quy thỏa mãn các hệ thức

$$\sum_{g} \chi^{(\mu)}(g)\, \chi^{(\nu)*}(g) = G\delta_{\mu\nu}, \tag{9-10}$$

hay

$$\sum_{p=1}^{s} \chi_p^{(\mu)}\, \chi_p^{(\nu)*}\, g_p = G\delta_{\mu\nu}, \tag{9-11}$$

với

$$\chi_p^{(\mu)} = \chi^{(\mu)}(\mathcal{K}_p),$$

$\mathcal{K}_p$ là lớp thứ p của nhóm $\mathcal{G}$ còn g_p là số phần tử của lớp đó.

Các hệ thức (9-11) gọi là *hệ thức trực giao loại một.*

Công thức (9-11) có thể viết dưới dạng

$$\sum_{r=1}^{s} \left(\sqrt{\frac{g_r}{G}}\, \chi_r^{(\mu)}\right) \left(\sqrt{\frac{g_r}{G}}\, \chi_r^{(\nu)*}\right) = \delta_{\mu\nu}. \tag{9-12}$$

Từ (9-12) ta thấy rằng các vectơ

$$\sqrt{\frac{g_r}{G}}\, \chi_r^{(\mu)},\ \sqrt{\frac{g_r}{G}}\, \chi_r^{(\nu)},\ (r = 1, \ldots, s)$$

xem là những vectơ của một không gian s chiều nào đó như đã nói ở § 3, là trực giao với nhau khi $\mu \neq \nu$. Thành thử tổng số s' các vectơ đó, tức là tổng số các biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau của một nhóm hữu hạn phải không lớn hơn số lớp s của nhóm

$$s' \leqslant s. \tag{9-13}$$

§ 10. PHÉP PHÂN TÍCH BIỂU DIỄN VÀ TIÊU CHUẨN BẤT KHẢ QUY

Cấu trúc của biểu diễn khả quy

Trong tiết này, từ các hệ thức trực giao (9-10), (9-11) của các đặc biểu, ta sẽ giải quyết hai vấn đề đã đặt ra: tìm tiêu chuẩn bất khả quy của biểu diễn và cấu trúc của một biểu diễn cho sẵn.

Theo định lý về tính chất hoàn toàn khả quy ở § 7 cho các nhóm hữu hạn, mọi biểu diễn $\mathcal{D}$ (hữu hạn chiều) của nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$ đều là tổng trực tiếp của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm đó. Như thế, ta có thể đặt

$$D(g) = \sum_{\mu} \oplus\, a_{\mu} D^{(\mu)}(g), \tag{10-1}$$

trong đó tập hợp $\{a_{\mu}\}$ (số nguyên không âm) trỏ bao nhiêu lần biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ (sai khác một sự tương đương) nằm trong biểu diễn cho sẵn $\mathcal{D}$.

Từ đẳng thức (10-1), ta được hệ thức giữa các đặc biểu

$$\chi(g) = \sum_{\mu} a_{\mu}\, \chi^{(\mu)}(g). \tag{10-2}$$

Nhân hai vế của (10-2) với $\chi^{(\nu*)}(g)$ rồi lấy tổng theo g thì, theo hệ thức trực giao (9-10), ta được

$$\sum_{g} \chi(g)\chi^{(\nu)*}(g) = \sum_{\mu} a_{\mu} \sum_{g} \chi^{(\mu)}(g)\, \chi^{(\nu)*}(g) = G \sum_{\mu} a_{\mu}\, \delta_{\mu\nu},$$

tức là

$$a_{\nu} = \frac{1}{G} \sum_{g} \chi(g)\, \chi^{(\nu)*}(g). \tag{10-3}$$

Vì đặc biểu là hàm của lớp nên ta có thể viết lại (10-3) dưới dạng

$$a_{\nu} = \frac{1}{G} \sum_{p=1}^{s} g_p\, \chi_p\, \chi_p^{(\nu)*}. \tag{10-4}$$

Các công thức (10-3) hay (10-4) cho phép ta xác định được số lần a_{μ} mà biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm nằm trong biểu diễn cho sẵn $\mathcal{D}$ có đặc biểu $\chi = \{\chi_p\}$, tức là cho phép ta xác định được cấu trúc của biểu diễn $\mathcal{D}$ theo các « thành phần sơ cấp » $\mathcal{D}^{(\mu)}$. Các công thức đó cho ta thấy rằng cấu trúc của một biểu diễn được hoàn toàn xác định bởi đặc biểu χ của nó. Thành thử, hai biểu diễn có cùng tập hợp các lượng $\{\chi_p\}$ sẽ có cùng tập hợp các hệ số khai triển $\{a_{\mu}\}$ và, như thế, là tương đương với nhau.

Định lý (tiêu chuẩn bất khả quy)

Điều kiện cần và đủ để một biểu diễn có đặc biểu χ là bất khả quy là

$$\frac{1}{G}\sum_{p=1}^{s} g_p \chi_p \chi_p^* = 1. \qquad (10\text{-}5)$$

Chứng minh

Nhân hai vế của đẳng thức (10-2) với $g_p \chi_p^*$ rồi lấy tổng theo các lớp ta được

$$\sum_{p=1}^{s} g_p \chi_p \chi_p^* = \sum_{\mu} a_\mu \sum_{p=1}^{s} g_p \chi_p^{(\mu)} \chi_p^* ,$$

hay, theo hệ thức (10-4),

$$\frac{1}{G}\sum_{p=1}^{s} g_p \chi_p \chi_p^* = \sum_{\mu} a_\mu^2 . \qquad (10\text{-}6)$$

Theo khai triển (10-1), tất nhiên điều kiện cần và đủ về tính bất khả quy của biểu diễn $\mathcal{D}$ là một hệ số a_μ nào đó bằng 1, còn tất cả các hệ số khác đều bằng không. Định lý chứng minh xong.

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_3$

Như đã biết, nhóm $\mathcal{D}_3$ có ba lớp ($s = 3$)

$$\mathcal{K}_1 = \{e\},\quad \mathcal{K}_2 = \{d, f\},\quad \mathcal{K}_3 = \{a, b, c\}.$$

Ngoài biểu diễn đơn vị $\mathcal{D}^{(1)}$ với đặc biểu

$$\chi_1^{(1)} = 1,\quad \chi_2^{(1)} = 1,\quad \chi_3^{(1)} = 1$$

ta thấy nhóm $\mathcal{D}_3$ còn có hai biểu diễn khác đã trình bày ở §2

$$\mathcal{D}^{(2)}:\ \chi_1^{(2)} = 1,\quad \chi_2^{(2)} = 1,\quad \chi_3^{(2)} = -1,$$

$$\mathcal{D}^{(3)}:\ \chi_1^{(3)} = 2,\quad \chi_2^{(3)} = -1,\quad \chi_3^{(3)} = 0.$$

Hai biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)}$ và $\mathcal{D}^{(2)}$ dĩ nhiên là bất khả quy vì là một chiều. Còn biểu diễn hai chiều $\mathcal{D}^{(3)}$ cũng là bất khả quy vì với nhóm $\mathcal{D}_3$ ta có $g_1 = 1$, $g_2 = 2$, $g_3 = 3$, và tiêu chuẩn bất khả quy (10-5) được nghiệm đúng đối với biểu diễn này.

Theo nhận xét ở cuối §9 (số biểu diễn bất khả quy không vượt quá số lớp của nhóm), ta thấy rằng tập hợp ba biểu diễn trên là toàn bộ hệ thống các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_3$.

§11. BIỂU DIỄN CHÍNH QUY

Biểu diễn chính quy

Bây giờ ta hãy giải quyết các vấn đề còn tồn tại về biểu diễn bất khả quy: số biểu diễn bất khả quy và chiều biểu diễn. Các vấn đề này có liên quan đến một loại biểu diễn gọi là biểu diễn chính quy.

Ta hãy lấy không gian biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$ là tập hợp tất cả các tổ hợp tuyến tính

$$\sum_g a_g g \text{ với } a_g \in C \text{ và } g \in \mathcal{G}. \tag{11-1}$$

Không gian này gọi là không gian đại số nhóm của nhóm $\mathcal{G}$. Như thế, không gian biểu diễn là một không gian G chiều, G là cấp của nhóm $\mathcal{G}$. Cơ sở của không gian này là G phần tử của nhóm. Khi tác dụng mỗi phần tử của nhóm lên các phần tử khác bằng cách nhân nhóm như đã nói ở I §5, ta có một hoán vị của G vật. Vì là những phép biến đổi tuyến tính trong không gian G chiều, các hoán vị này có thể biểu diễn bởi những ma trận G $\times$ G.

Biểu diễn này gọi là *biểu diễn chính quy* của $\mathcal{G}$ và ký hiệu là $\mathcal{D}^{(R)}$. Vì những phần tử khác nhau của $\mathcal{G}$ là tương ứng với những hoán vị khác nhau, tức là tương ứng với những ma trận $D^{(R)}(g)$ khác nhau, nên biểu diễn chính quy là một biểu diễn trung thành.

Đặc biểu

Theo định nghĩa trên, ma trận của biểu diễn chính quy có thể viết dưới dạng

$$hg = \sum_{f \in \mathcal{G}} D^{(R)}_{f,g}(h) f. \tag{11-2}$$

Từ đó, đồng nhất hai vế, ta thấy rằng $D^{(R)}_{f,g}(h) = 1$ khi $f = hg$ và bằng không khi $f \neq hg$, tức là

$$D^{(R)}_{f,g}(h) = \delta_{f,hg}. \tag{11-3}$$

Thành thử, các phần tử chéo của ma trận $D^{(R)}(h)$ có dạng

$$D^{(R)}_{g,g}(h) = \delta_{g,hg}, \tag{11-4}$$

tức là chỉ bằng 1 khi $h = e$ và bằng không khi $h \neq e$. Từ đó ta được tính chất đặc trưng sau của đặc biểu của biểu diễn chính quy:

$$\chi^{(R)}(e) = G, \quad \chi^{(R)}(g) = 0, \quad g \neq e. \tag{11-5}$$

Nếu ký hiệu $\mathcal{K}_1$ là lớp chứa e thì, từ (11-5), ta được đẳng thức

$$\chi^{(R)}_p = G\,\delta_{p,1}. \tag{11-6}$$

Định lý.

Tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm đều chứa trong biểu diễn chính quy với một số lần bằng chiều biểu diễn của mình

$$\mathcal{D}^{(R)} = \sum_\mu \oplus n_\mu \mathcal{D}^{(\mu)}. \tag{11-7}$$

Chứng minh

Ta viết

$$\mathcal{D}^{(R)} = \sum_{\mu} \oplus a_{\mu} \mathcal{D}^{(\mu)}.$$

Theo (10-4), ta có

$$a_{\mu} = \frac{1}{G} \sum \chi_p^{(\mu)*} \chi_p^{(R)} g_p.$$

Từ đó, công thức (11-6) và (4-2) cho ngay $a_{\mu} = n_{\mu}$, vì e làm thành một lớp với $g_1 = 1$.

Định lý Burnside

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = G. \qquad (11\text{-}8)$$

Chứng minh

Theo (11-7), ta có

$$\chi^{(R)}(e) = \sum_{\mu} n_{\mu} \chi^{(\mu)}(e).$$

Từ đó, (4-2) và (11-6) cho ngay hệ thức (11-8).

Ví dụ

Với những nhóm cấp hai hay cấp ba, công thức Burnside cho nghiệm duy nhất $n_1 = n_2 = 1$ hay $n_1 = n_2 = n_3 = 1$. Như thế, với các nhóm này, tất cả các biểu diễn bất khả quy đều một chiều.

Với nhóm $\mathcal{D}_3$ công thức Burnside cho

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = 6.$$

Nhưng, theo hệ thức (9-13), tổng phía trái gồm không quá ba thành phần vì nhóm $\mathcal{D}_3$ có ba lớp. Thành thử phương trình trên chỉ có nghiệm duy nhất

$$n_1 = 1,\ n_2 = 1,\ n_3 = 2,$$

tức là nhóm $\mathcal{D}_3$ chỉ có ba biểu diễn bất khả quy, hai biểu diễn một chiều và một biểu diễn hai chiều, kết quả này đã thấy ở cuối § 10.

§ 12. CÁC HỆ THỨC TRỰC GIAO LOẠI HAI

Để tiếp tục thực hiện chương trình đề ra, ta hãy chứng minh

Định lý 1.

Đặc biểu các biểu diễn bất khả quy thỏa mãn hệ thức

$$\sum_{\mu} \left(\sqrt{\frac{g_p}{G}}\, \chi_p^{(\mu)}\right)\left(\sqrt{\frac{g_q}{G}}\, \chi_q^{(\mu)*}\right) = \delta_{pq}. \qquad (12\text{-}1)$$

Chứng minh

Ta có thể viết

$$\frac{n_\mu}{G}\sum_u \chi^{(\mu)}(hugu^{-1}) = \frac{n_\mu}{G}\sum_u D^{(\mu)}_{kk}(hugu^{-1}) =$$

$$= \frac{n_\mu}{G} D^{(\mu)}_{kl}(h)\, D^{(\mu)}_{mn}(g) \left\{\sum_u D^{(\mu)}_{lm}(u)\, D^{(\mu)}_{nk}(u^{-1})\right\}.$$

Dựa vào đẳng thức (9-6), vế phải trở thành

$$D^{(\mu)}_{kl}(h) D^{(\mu)}_{mn}(g)\, \delta_{mn}\, \delta_{lk} = \chi^{(\mu)}(h)\, \chi^{(\mu)}(g).$$

Do đó ta thu được hệ thức

$$\chi^{(\mu)}(h)\, \chi^{(\mu)}(g) = \frac{n_\mu}{G}\sum_u \chi^{(\mu)}(hugu^{-1}). \tag{12-2}$$

Tiếp theo, trong đẳng thức (12-2) cho $g = f^{-1}$ và lấy tổng theo μ, ta được

$$\sum_\mu \chi^{(\mu)}(h)\, \chi^{(\mu)}(f^{-1}) = \frac{1}{G}\sum_u \sum_\mu n_\mu\, \chi^{(\mu)}(huf^{-1}u^{-1}).$$

Dựa vào (8-4) và (11-7) (tức là $\chi^R(g) = \sum_\mu n_\mu\, \chi^{(\mu)}$), từ đẳng thức trên, ta được

$$\sum_\mu \chi^{(\mu)}(h)\, \chi^{(\mu)*}(f) = \frac{1}{G}\sum_u \chi^{(R)}(huf^{-1}u^{-1}). \tag{12-3}$$

Vế phải ở (12-3), theo (11-5), khác không khi $huf^{-1}u^{-1} = e$, hay $h = u^{-1}fu$, nghĩa là khi h và f thuộc cùng một lớp $\mathcal{K}_p$ nào đó. Trong trường hợp này, ta được

$$\frac{1}{G}\sum_{u^{-1}fu = h} \chi^{(R)}(e) = \frac{G}{g_p},$$

còn trong trường hợp $h \in \mathcal{K}_p$, $f \in \mathcal{K}_q$, $p \neq q$, thì vế phải ở (12-3) bằng 0. Từ đó ta thu được (12-1) và định lý đã chứng minh xong.

Các hệ thức (12-1) gọi là các ***hệ thức trực giao loại hai.***

Với định lý 1, ta đi đến định lý rất quan trọng sau trong lý thuyết biểu diễn

Định lý 2

Số biểu diễn bất khả quy của các nhóm hữu hạn bằng số lớp của nhóm.

Chứng minh

Các lượng

$$\frac{g_p}{G}\, \chi^{(\mu)}_p \quad (p = 1, \ldots, s,\ \mu = 1, \ldots, s')$$

có thể xem là s vectơ có s' chiều, tức là thuộc một không gian có số chiều bằng số biểu diễn bất khả quy s' của nhóm. Theo các hệ thức (12-1) các vectơ này trực giao với nhau. Do đó, tổng số s các vectơ đó không thể vượt quá số chiều s' của không gian

$$s \leqslant s' \qquad (12\text{-}4)$$

So sánh (12-4) với (9-13) ta được

$$s' = s$$

Cách trình bày các bảng đặc biểu

Để kết thúc phần này, ta hãy nói đến cách trình bày các đặc biểu của nhóm Thông thường, các đặc biểu được trình bày dưới dạng một bảng vuông mà các hàng trỏ các biểu diễn khác nhau (hàng đầu dành cho biểu diễn đơn vị), còn các cột trỏ các lớp khác nhau. Trong bảng g_s ký hiệu số phần tử của lớp $\mathcal{K}_s$.

	e	$g_2\mathcal{K}_2$	...	$g_s\mathcal{K}_s$
$\mathcal{D}^{(1)}$	1	1	...	1
$\mathcal{D}^{(2)}$	$\chi_1^{(2)} = n_1$	$\chi_2^{(2)}$	...	$\chi_s^{(2)}$
.	.	.	...	.
.	.	.	...	.
.	.	.	...	.
$\mathcal{D}^{(s)}$	$\chi_1^{(s)} = n_s$	$\chi_2^{(s)}$	...	$\chi_s^{(s)}$

Chẳng hạn với nhóm $\mathcal{D}_3$ xem (4-3), ta có bảng đặc biểu.

$\mathcal{D}_3$	e	2d	3a
$\mathcal{A}_1 \equiv \mathcal{D}^{(1)}$	1	1	1
$\mathcal{A}_2 \equiv \mathcal{D}^{(2)}$	1	1	-1
$\mathcal{E} \equiv \mathcal{D}^{(3)}$	2	-1	0

(12-5)

Trong (12-5) ta đưa vào các ký hiệu mới: $\mathcal{A}$ ký hiệu biểu diễn một chiều, $\mathcal{E}$ ký hiệu biểu diễn hai chiều. Sau này ta thường dùng các ký hiệu này.

§ 13. MỘT CÔNG THỨC BỔ SUNG VỀ ĐẶC BIỂU

Công thức bổ sung

Về mặt tính toán, các hệ thức thu được ở trên (các hệ thức trực giao, tiêu chuẩn bất khả quy, hệ thức Burnside cho giá trị đặc biểu tại đơn vị) cũng chưa cho phép xác định được trọn vẹn đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy của một nhóm hữu hạn. Vì thế, ở đây ta hãy chứng minh thêm một công thức bổ sung về đặc biểu, đôi khi có lợi cho việc tính các lượng đó.

Trước hết, ta hãy chứng minh các hệ thức

$$\mathcal{K}_i\mathcal{K}_j = \sum_{k=1}^{s} h_{ijk}\mathcal{K}_k \ (i,\ j = 1,\dots,\ s) \qquad (13\text{-}1)$$

trong đó $\mathcal{K}_i$ ($i = 1,\dots,$ s) trỏ tổng tất cả các phần tử thuộc lớp $\mathcal{K}_i$ của nhóm $\mathcal{G}$ và các hệ số h_{ijk} là nguyên. Như thế cần phải chứng minh hai điểm :

a) Nếu $g \in \mathcal{K}_i\ \mathcal{K}_j$ và $g \in \mathcal{K}_k$ thì tất cả các phần tử $h^{-1}gh\ (h \in \mathcal{G})$ của lớp $\mathcal{K}_k$ cũng phải thuộc tích $\mathcal{K}_i\ \mathcal{K}_j$.

b) Nếu $g \in \mathcal{K}_k$ nằm trong tích $\mathcal{K}_i\mathcal{K}_j$ p lần thì mọi phần tử khác của $\mathcal{K}_k$ có dạng $h^{-1}gh$ ($h \in \mathcal{G}$) cũng phải nằm trong tích $\mathcal{K}_i\mathcal{K}_j$ p lần, từ đó các hệ số h_{ijk} là nguyên.

Các điểm này rất dễ thấy vì các phần tử cùng một lớp có quan hệ tương đương với nhau, hai điểm nói trên là hai tính chất của lớp, đúng như nhau cho mọi phần tử của cùng một lớp.

Chẳng hạn, cho $g \in \mathcal{K}_k$, $g \in \mathcal{K}_i\mathcal{K}_j$ tức là $g = ab$, $a \in \mathcal{K}_i$, $b \in \mathcal{K}_j$. Thế thì, với mọi $h \in \mathcal{G}$, ta có $h^{-1}gh = (h^{-1}ah)(h^{-1}bh)$. Vì $h^{-1}ah \in \mathcal{K}_i$, và $h^{-1}bh \in \mathcal{K}_j$, nên từ đó ta suy được tính chất a. : $h^{-1}gh \in \mathcal{K}_i\mathcal{K}_j$.

Chẳng hạn cho nhóm $\mathcal{D}_3$ trong đó

$$\mathcal{K}_1 = \{e\},\ \mathcal{K}_2 = \{d,\ f\},\ \mathcal{K}_3 = \{a,\ b,\ c\}.$$

Theo bảng nhóm I (3-3), ta có

$$\mathcal{K}_2^2 = \{d + f\}^2 = 2e + d + f = 2\mathcal{K}_1 + \mathcal{K}_2,$$

tức là $h_{221} = 2$, $h_{222} = 1$.

$$\mathcal{K}_3^2 = \{a + b + c\}^2 = 3e + 3\{d + f\} = 3\mathcal{K}_1 + 3\mathcal{K}_2,$$

tức là $h_{331} = 3$, $h_{332} = 3$.

$$\mathcal{K}_2\mathcal{K}_3 = \mathcal{K}_3\mathcal{K}_2 = \{d + f\}\{a + b + c\} = 2\{a + b + c\} = 2\mathcal{K}_3$$

tức là $h_{233} = h_{323} = 2$.

Tất cả các hệ số khác đều bằng không. Như thế, tất cả các hệ số h_{ijk} đều nguyên.

Bây giờ ta hãy chọn một biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nào đó có chiều bằng n_μ của nhóm $\mathcal{G}$ và lấy tổng tất cả các ma trận $D^{(\mu)}(g)$ tương ứng với các phần tử của lớp $\mathcal{K}_k$, ký hiệu là $D_k^{(\mu)}$:

$$D_k^{(\mu)} = \sum_{g \in \mathcal{K}_k} D^{(\mu)}(g). \qquad (13\text{-}2)$$

Ta có

$$[D^{(\mu)}]^{-1}(h)\, D_k^{(\mu)} D^{(\mu)}(h) = \sum_{g \in \mathcal{K}_k} D^{(\mu)}(h^{-1}gh) = \sum_{g \in \mathcal{K}_k} D^{(\mu)}(g) = D_k^{(\mu)},$$

tức là ma trận $D_k^{(\mu)}$ giao hoán với mọi ma trận của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$. Thành thử, theo bổ đề Schur thứ hai, ta có :

$$D_k^{(\mu)} = \lambda_k 1_n, \qquad (13\text{-}3)$$

hay, lấy vết hai vế, theo (4-2), ta được

$$g_k\chi_k^{(\mu)} = \lambda_k n = \lambda_k \chi_1^{(\mu)}, \ (e \in \mathcal{K}_1, \ \chi_1^{(\mu)} = n),$$

từ đó ta được

$$\lambda_k = \frac{g_k \chi_k^{(\mu)}}{\chi_1^{(\mu)}} . \tag{13-4}$$

Nhưng từ (13-1) ta có

$$D_i^{(\mu)} D_j^{(\mu)} = \sum_k h_{ijk} D_k^{(\mu)},$$

hay, theo (13-3), ta được

$$\lambda_i \lambda_j = \sum_k h_{ijk} \lambda_k .$$

Từ đó, công thức (13-4) cho

$$g_i g_j \chi_i^{(\mu)} \chi_j^{(\mu)} = \chi_1^{(\mu)} \sum_k h_{ijk} g_k \chi_k^{(\mu)} . \tag{13-5}$$

Đó chính là hệ thức bổ sung ta cần tìm. Các hệ số g_i và h_{ijk} không phụ thuộc vào biểu diễn mà chỉ phụ thuộc vào cấu trúc của nhóm.

Ví dụ

Ta hãy ứng dụng công thức (13-5) để tính các đặc biểu của nhóm $\mathcal{D}_3$ ($g_1 = 1$, $g_2 = 2$, $g_3 = 3$).

Với $i = j = 2$, ta được

$$g_2^2 \chi_2^2 = \chi_1 \sum_k h_{221k} g_k \chi_k, 2\chi_2^2 = n(n + \chi_2),$$

tức là

$$\chi_2 = n \text{ hay } \chi_2 = -\frac{n}{2} . \tag{13-6}$$

Với $i = j = 3$, ta được

$$g_3^2 \chi_3^2 = \chi_1 \sum_k h_{33k} g_k \chi_k, 3\chi_3^2 = n(n + 2\chi_2). \tag{13-7}$$

Với $i = 2$, $j = 3$, ta được

$$g_2 g_3 \chi_2 \chi_3 = \chi_1 \sum_k h_{33k} g_k \chi_k, \chi_2 \chi_3 = n\chi_3,$$

tức là

$$\chi_3 = 0 \text{ hay } \chi_2 = n. \tag{13-8}$$

Với các biểu diễn bất khả quy một chiều ($n = 1$) thì $\chi \neq 0$. Thành thử, theo (13-8) và (13-7) ta được

$$\chi_2 = 1, \ \chi_3^2 = \frac{1}{3}(1 + 2) = 1, \ \chi_3 = \pm 1.$$

Đó chính là đặc biểu của các biểu diễn $\mathcal{A}_1$ và $\mathcal{A}_2$ (xem 12-5).

Với n = 2, theo (13-8), ta có thể lấy $\chi_2 = 2$ hoặc $\chi_3 = 0$. Và khả năng thứ nhất, $\chi_2 = 2$ thì, theo (13-7) ta được $\chi_3^2 = 4$. Nhưng kết quả này không thỏa mãn tiêu chuẩn bất khả quy vì

$$\frac{1}{6}\sum_p g_p|\chi_p|^2 = \frac{1}{6}(4 + 2.4 + 3.4) = 4 \neq 1!$$

Thành thử chỉ còn lại khả năng $\chi_3 = 0$ và χ_2 được tính theo (13-6) tức là $\chi_2 = \dfrac{-n}{2} = -1$. Đó chính là đặc biểu của biểu diễn $\mathscr{E}$ (xem 12-5).

TÓM TẮT

Như thế, đến đây đã đạt được một kết quả cơ bản về chương trình đề ra ở trên:

1. Điều kiện cần và đủ để một biểu diễn có đặc biểu χ_p là bất khả quy là

$$\frac{1}{G}\sum_{p=1}^{s} g_p\chi_p\chi_p^* = 1. \qquad (10\text{-}6)$$

2. Số các biểu diễn bất khả quy bằng số lớp của nhóm.

3. Tất cả các biểu diễn bất khả quy đều có mặt trong biểu diễn chính quy với một số lần bằng chiều biểu diễn của mình.

4. Các chiều biểu diễn bất khả quy thỏa mãn hệ thức Burnside

$$\sum_{\mu=1}^{s} n_\mu^2 = G. \qquad (10\text{-}9)$$

5. Các đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy thỏa mãn các hệ thức bậc hai

$$\sum_{r=1}^{s}\left(\sqrt{\frac{g_r}{G}}\,\chi_r^{(\mu)}\right)\left(\sqrt{\frac{g_r}{G}}\,\chi_r^{(\nu)*}\right) = \delta_{\mu\nu}, \qquad (9\text{-}12)$$

$$\sum_{\mu=1}^{s}\left(\sqrt{\frac{g_p}{G}}\,\chi_p^{(\mu)}\right)\left(\sqrt{\frac{g_q}{G}}\,\chi_q^{(\mu)*}\right) = \delta_{pq}, \qquad (12\text{-}1)$$

$$g_i g_j \chi_i^{(\mu)}\chi_j^{(\mu)} = \chi_1^{(\mu)}\sum_k h_{ijk}\, g_k\, \chi_k^{(\mu)}. \qquad (13\text{-}5)$$

Điểm mấu chốt để giải quyết các vấn đề trên là hai bổ đề Schur và phương pháp đã dùng là phương pháp đặc biểu.

Để được đầy đủ, ta nêu thêm một số kết quả sau:

6. $$\frac{1}{G}\sum_{K}\chi(g^2) = \pm 1,0.$$

7. Người ta có thể chứng minh rằng chiều của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$ là ước số của cấp của nhóm và đồng thời là ước số của chỉ số của mỗi nhóm con bất biến Abel cực đại của nhóm $\mathcal{G}$.

8. Số biểu diễn bất khả quy một chiều của một nhóm bằng chỉ số của nhóm dẫn xuất của nó (xem I, § 11).

Ta sẽ chứng minh kết quả 6) ở các tiết sau.

Nhóm Dirac

Giả sử có bốn lượng γ, thỏa mãn các tính chất sau

$$\gamma_i\gamma_j + \gamma_j\gamma_i = 2\delta_{ij}, \ (i, j = 1, 2, 3, 4). \qquad (13\text{-}9)$$

Các lượng này gọi là các *ma trận Dirac*.

Dễ thấy rằng tập hợp 32 lượng

$$a = \pm \gamma_1^{i_1} \gamma_2^{i_2} \gamma_3^{i_3} \gamma_4^{i_4}$$

trong đó các i_k lấy hai giá trị 1 và 2, làm thành một nhóm. Nhóm này gọi là *nhóm Dirac*. Để phân lớp, ta chú ý rằng trừ hai phần tử $+e$ và $-e$ mỗi phần tử làm thành một lớp, tất cả các phần tử khác của nhóm đều có tính chất

$$a^{-1}ba = \pm b,$$

nghĩa là hai phần tử trái dấu nhau cùng làm thành một lớp. Như thế, số lớp, tức là số biểu diễn bất khả quy, bằng

$$s = 1 + 1 + \frac{30}{2} = 17.$$

Theo công thức Burnside ta có

$$\sum_{\mu=1}^{17} n_\mu^2 = 32.$$

Mặt khác, theo tính chất 7) kể ở trên, ta thấy rằng các lượng n_μ thỏa mãn đẳng thức Burnside, có thể có các giá trị 1, 2, 4 (ước số của 32). Nhưng giá trị $n_\mu = 2$ phải bị loại vì trong đẳng thức Burnside phải có 17 số hạng. Thành thử, cuối cùng ta thấy rằng nhóm Dirac có 16 biểu diễn một chiều và một biểu diễn bất khả quy 4 chiều. Các ma trận thực hiện biểu diễn 4 chiều này có thể lấy dạng

$$\vec{\gamma} = i\begin{pmatrix} 0 & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \ \gamma_4 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \qquad (13\text{-}10)$$

trong đó $\vec{\sigma}$ là các ma trận Pauli.

§ 14. BIỂU DIỄN ĐỐI NGẪU (BIỂU DIỄN PHẢN BỘ)

Biểu diễn liên hợp phức

Ta hãy tiếp tục nghiên cứu sâu thêm các tính chất của đặc biểu. Trước hết, ta hãy nói đến khái niệm biểu diễn liên hợp phức. Cho một biểu diễn $\mathcal{D}$ nào đó của một nhóm $\mathcal{G}$, thực hiện bởi các ma trận $D(g)$, $g \in \mathcal{G}$, tác dụng trong một không gian tuyến tính nào đó. Vì

$$D(hg) = D(h)\,D(g)$$

nên, lấy liên hợp phức hai vế, ta được

$$D^*(hg) = D^*(h)\,D^*(g). \tag{14-1}$$

Đẳng thức này chứng tỏ rằng khi $\mathcal{D}$ là một biểu diễn của nhóm thì tập hợp các ma trận $D^*(g)$, $g \in \mathcal{G}$, cũng là một biểu diễn của $\mathcal{G}$. Biểu diễn này gọi là *biểu diễn liên hợp phức* của $\mathcal{D}$ và ký hiệu là $\mathcal{D}^*$.

Dễ thấy rằng biểu diễn $\mathcal{D}^*$ có đặc biểu $\chi^*(g)$, bằng liên hợp phức của đặc biểu $\chi(g)$ của biểu diễn $\mathcal{D}$.

Biểu diễn đối ngẫu

Để nghiên cứu các tính chất « đối xứng » của các bảng đặc biểu ta hãy đưa thêm khái niệm sau.

Lập ma trận

$$\bar{D}(g) \equiv D^c(g^{-1}) = [D^c(g)]^{-1} \tag{14-2}$$

ta được

$$\bar{D}(h)\,\bar{D}(g) = [D^c(hg)]^{-1} = \bar{D}(hg),$$

tức là tập hợp các ma trận $\bar{D}(g)$ làm thành một biểu diễn của $\mathcal{G}$, gọi là *biểu diễn đối ngẫu* (hay phản bộ) đối với $\mathcal{D}$ và ký hiệu là $\bar{\mathcal{D}}$.

Tiếp theo, theo (14-2), ta có

$$\mathrm{Sp}\,\bar{D}(g) = \mathrm{Sp}\,D^c(g^{-1}) = \mathrm{Sp}\,D(g^{-1}).$$

Vì mọi biểu diễn hữu hạn đều tương đương với một biểu diễn unita nào đó, nên ta giả thiết các ma trận biểu diễn đều là unita, do đó

$$\chi(g^{-1}) = \chi^*(g).$$

Vậy đặc biểu của biểu diễn đối ngẫu, ký hiệu là $\bar{\chi}(g)$, bằng

$$\bar{\chi}(g) = \chi(g^{-1}) = \chi^*(g). \tag{14-3}$$

Một biểu diễn $\mathcal{D}$ gọi là *tự đối ngẫu* hoặc nếu $\bar{\mathcal{D}} = \mathcal{D}$ hoặc nếu $\bar{\mathcal{D}}$ là tương đương với $\mathcal{D}$. Ta ký hiện $\bar{\mathcal{D}} \sim \mathcal{D}$. Trong cả hai trường hợp, theo (14-3), ta có

$$\bar{\chi}(g) \equiv \chi^*(g) = \chi(g), \tag{14-4}$$

tức là đặc biểu của một biểu diễn tự đối ngẫu là thực. Ngược lại, nếu đặc biểu của một biểu diễn $\mathcal{D}$ là thực thì, theo (14-3) $\bar{\mathcal{D}}$ và $\mathcal{D}$ có cùng đặc biểu, do đó, hoặc $\bar{\mathcal{D}}$ trùng với $\mathcal{D}$, hoặc $\bar{\mathcal{D}}$ tương đương với $\mathcal{D}$.

Theo tiêu chuẩn bất khả quy (10-5) và theo hệ thức (14-3), ta thấy các biểu diễn $\mathcal{D}$ và biểu diễn $\bar{\mathcal{D}}$ — đối ngẫu đối với nó — hoặc đồng thời là khả quy, hoặc đồng thời là bất khả quy. Thành thử, nếu một biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nào đó không phải là tự đối ngẫu (ký hiệu là $\overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \nsim \mathcal{D}^{(\mu)}$) thì biểu diễn đối ngẫu đối với nó $\overline{\mathcal{D}}^{(\mu)}$ phải tương đương với một biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\nu)}$ nào đó với $\nu \neq \mu$. Ta có

$$\overline{\chi}^{(\mu)} \equiv \chi^{(\mu)*} = \chi^{(\nu)},\ \mu \neq \nu,\ \text{khi}\ \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \nsim \mathcal{D}^{(\mu)}. \tag{14-5}$$

Bây giờ ta hãy tính lượng

$$a = \frac{1}{G} \sum_p g_p\, \chi_p^{(\mu)} \chi_p^{(\mu)*}.$$

Khi $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là một biểu diễn tự đối ngẫu, đặc biểu $\chi^{(\mu)}$ là thực theo đẳng thức (14-4). Do đó, theo tiêu chuẩn bất khả quy ta có $a = 1$. Còn khi biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ không phải là tự đối ngẫu thì, theo (14-5) và các hệ thức trực giao, ta có $a=0$. Tóm lại, ta có

$$\frac{1}{G} \sum_p g_p \left\{\chi_p^{(\mu)}\right\}^2 = \begin{cases} 1 \text{ nếu } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \sim \mathcal{D}^{(\mu)} \\ 0 \text{ nếu } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \nsim \mathcal{D}^{(\mu)} \end{cases}. \tag{14-6}$$

Lấy tổng của đẳng thức (14-6) theo tất cả các biểu diễn bất khả quy và ký hiệu n là tổng số các biểu diễn bất khả quy tự đối ngẫu, ta được

$$\frac{1}{G} \sum_\mu \sum_p g_p \left\{\chi_p^{(\mu)}\right\}^2 = n. \tag{14-7}$$

Mặt khác, ký hiệu $\chi_p'^{(\mu)}$ là đặc biểu của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ tại lớp gồm tất cả các phần tử nghịch đảo của các phần tử của lớp $\mathcal{K}_p$, ta có

$$\chi_p'^{(\mu)} = \chi_p^{(\mu)*}. \tag{14-8}$$

Từ đó, theo (14-8) và (8-5), ta được

$$\chi_p'^{(\mu)} = \begin{cases} \chi_p^{(\mu)}, \text{ nếu } \mathcal{K}_p \text{ là một lớp tương nghịch,}^{1)} \\ \chi_q^{(\mu)}, q \neq p \text{ nếu } \mathcal{K}_p \text{ là không tương nghịch.} \end{cases} \tag{14-9}$$

Thành thử, theo các đẳng thức (14-8), (14-9) và theo công thức trực giao (12-4) ta có thể viết

$$\frac{1}{G} \sum_\mu g_p\, \chi_p^{(\mu)} \chi_p'^{(\mu)} = \frac{1}{G} \sum_\mu g_p\, \chi_p^{(\mu)} \chi_p^{(\mu)*} =$$

$$= \begin{cases} \dfrac{1}{G} \sum_\mu g_p\, \chi_p^{(\mu)} \chi_p^{(\mu)*} = 1 \text{ nếu } \mathcal{K}_p \text{ là một lớp tương nghịch,} \\[2ex] \dfrac{1}{G} \sum_\mu g_p\, \chi_p^{(\mu)} \chi_q^{(\mu)*} = 0 \text{ nếu } \mathcal{K}_p \text{ là một lớp không tương nghịch.} \end{cases} \tag{14-10}$$

---

1) Định nghĩa lớp tương nghịch, xem § 8.

Lấy tổng của hai vế của đẳng thức (14-10) theo tất cả các lớp của các biểu diễn bất khả quy và ký hiệu m là tổng số các lớp tương nghịch của nhóm $\mathcal{G}$, ta được

$$\frac{1}{G}\sum_{p}\sum_{\mu} g_p \left\{ \chi_p^{(\mu)} \right\}^2 = m. \tag{14-11}$$

So sánh các kết quả (14-7) và (14-11) ta thấy rằng m = n tức là ta có

Định lý

Số các biểu diễn bất khả quy tự đối ngẫu bằng số các lớp tương nghịch của nhóm.

Vì đặc biểu của các biểu diễn tự đối ngẫu là thực cũng như đặc biểu tại các lớp tương nghịch là thực nên, theo cách xây dựng bảng đặc biểu, ta thấy rằng trong bảng đặc biểu số hàng thực bằng số cột thực.

§ 15. BIỂU DIỄN HOÀN TOÀN THỰC

Định nghĩa

Một biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{G}$ có thể quy về một biểu diễn tương đương chỉ gồm những ma trận thực, gọi là một biểu diễn *hoàn toàn thực*.

Đây là một vấn đề khá quan trọng.

Sự phân loại biểu diễn của Wigner

Theo § 14, ta có

$$\overline{D}^{(\mu)}(g) = S^{-1} D^{(\nu)}(g) S,$$

với $\qquad \nu = \mu \quad$ nếu $\quad \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \sim \mathcal{D}^{(\mu)},$

và $\qquad \nu \neq \mu \quad$ nếu $\quad \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \nsim \mathcal{D}^{(\mu)}. \qquad$ (15-1)

Tiếp theo, vì theo (14-2), ta có

$$\overline{D}_{kl}^{(\mu)}(g) = D_{lk}^{(\mu)}(g^{-1})$$

nên, từ (15-1), ta có các đẳng thức

$$\sum_h \chi^{(\mu)}(hgh) = \sum_h D_{kk}^{(\mu)}(hgh) =$$

$$= \sum_h D_{kl}^{(\mu)}(h) D_{lk}^{(\mu)}(gh) = \sum_h \overline{D}_{lk}^{(\mu)}(h^{-1}) D_{lk}^{(\mu)}(gh) =$$

$$= \sum_h S_{lm}^{-1} D_{mn}^{(\nu)}(h^{-1}) S_{nk} D_{lp}^{(\mu)}(g) D_{pk}^{(\mu)}(h) =$$

$$= S_{lm}^{-1} S_{nk} D_{lp}^{(\mu)}(g) \sum_h D_{pk}^{(\mu)}(h) D_{mn}^{(\nu)}(h^{-1}) =$$

$$= \frac{G\delta_{\mu\nu}}{n_\mu} S_{lm}^{-1} S_{nk} D_{lp}^{(\mu)}(g)\, \delta_{km}\, \delta_{pn} =$$

$$= \frac{G\delta_{\mu\nu}}{n_\nu} \mathrm{Sp}\,[D^{(\mu)}(g)\, S\, (S^C)^{-1}]. \tag{15-2}$$

Nếu biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là không tự đối ngẫu thì, từ (15-1), ta có $\nu \neq \mu$. Do đó, theo (15-2), ta được

$$\sum_h \chi^{(\mu)}(hgh) = 0, \sum_h \chi^{(\mu)}(h^2) = 0 \text{ khi } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \nsim \mathcal{D}^{(\mu)}. \quad (15\text{-}3)$$

Ta tiếp tục tính lượng $\sum \chi^{(\mu)}(hgh)$ trong trường hợp còn lại, tức là trong trường hợp biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là tự đối ngẫu:

$$\overline{D}^{(\mu)}(g) = S^{-1} D^{(\mu)}(g) S, \ g \in \mathcal{G}. \quad (15\text{-}4)$$

Từ các đẳng thức (15-4) và (14-2) ta có

$$D^{(\mu)} = [\overline{D}^{c(\mu)}]^{-1} = \{[S^{-1} D^{(\mu)} S]^{C}\}^{-1} = \{S^{C} D^{C(\mu)} (S^{C})^{-1}\}^{-1} =$$
$$= S^{C} [D^{C(\mu)}]^{-1} (S^{C})^{-1} = S^{C} \overline{D}^{(\mu)} (S^{C})^{-1} = S^{C} S^{-1} D^{(\mu)} S (S^{C})^{-1} =$$
$$= \{S (S^{C})^{-1}\}^{-1} D^{(\mu)} \{S, (S^{c})^{-1}\}$$

tức là ma trận $S(S^{C})^{-1}$ giao hoán với mọi ma trận $D^{(\mu)}(g)$ của mọi biểu diễn bất khả quy. Thành thử, theo bổ đề Schur thứ hai, ta được

$$S (S^{C})^{-1} = C^{(\mu)} I_n \text{ khi } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \sim \mathcal{D}^{(\mu)}, \quad (15\text{-}5)$$

trong đó $C^{(\mu)}$ là một hằng số nào đó. Tiếp theo lấy định thức hai vế của đẳng thức (15-5) ta được

$$[C^{(\mu)}]^{n_\mu} = 1 \text{ khi } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} \sim \mathcal{D}^{(\mu)}. \quad (15\text{-}6)$$

Như sẽ thấy sau này, chính xác giá trị của hằng số $C^{(\mu)}$ này cho phép ta có những kết luận cuối cùng về tiêu chuẩn của một biểu diễn hoàn toàn thực.

Ta lưu ý rằng khi $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là một biểu diễn tự đối ngẫu theo nghĩa đồng nhất $\overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} = \mathcal{D}^{(\mu)}$, tức là khi trong đẳng thức (15-4) ma trận S bằng ma trận đơn vị thì, theo đẳng thức (15-5), ta có ngay giá trị của $C^{(\mu)}$

$$C^{(\mu)} = 1 \text{ khi } \overline{\mathcal{D}}^{(\mu)} = \mathcal{D}^{(\mu)}. \quad (15\text{-}7)$$

Còn trong trường hợp biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là tự đối ngẫu nói chung, tức là theo (15-1) khi $\mu = \nu$ thì, theo (15-2) và (15-5), ta được

$$\sum_h \chi^{(\mu)}(hgh) = \frac{C^{(\mu)} G}{n_\mu} \chi^{(\mu)}(g). \quad (15\text{-}8)$$

Lấy liên hợp phức hai vế của (15-8) ta được

$$\sum_h \chi^{(\mu)*}(hgh) = \frac{C^{(\mu)*} G}{n_\mu} \chi^{(\mu)*}(g).$$

Vì biểu diễn là tự đối ngẫu nên, theo (14-3), đẳng thức trên trở thành

$$\sum_h \chi^{(\mu)}(h^{-1}g^{-1}h^{-1}) = \frac{C^{(\mu)*} G}{n_\mu} \chi^{(\mu)}(g^{-1}).$$

Vận dụng tính chất bất biến của trung bình, thay $g^{-1} \rightarrow g$, ta được

$$\sum_h \chi^{(\mu)}(hgh) = \frac{C^{(\mu)*} G}{n_\mu} \chi^{(\mu)}(g).$$

So sánh kết quả cuối cùng với (15-8), ta thấy rằng $C^{(\mu)}$ là một số thực thành thử phương trình (15-6) cho ngay các giá trị của $C^{(\mu)}$

$$C^{(\mu)} = \begin{cases} \pm 1 & \text{nếu } n_\mu \text{ là chẵn,} \\ 1 & \text{nếu } n_\mu \text{ là lẻ.} \end{cases} \tag{15-9}$$

Mặt khác, trong đẳng thức (15-8) cho $g = e$, ta được hệ thức

$$C^{(\mu)} = \frac{1}{G} \sum_h \chi^{(\mu)}(h^2). \tag{15-10}$$

Bây giờ ta hãy lợi dụng triệt để hơn tính chất unita của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ để nghiên cứu vấn đề biểu diễn hoàn toàn thực. Như đã biết, trong trường hợp này ta có

$$\bar{D}^{(\mu)} \equiv [D^{G(\mu)}]^{-1} = D^{(\mu)*}, \tag{15-11}$$

tức là biểu diễn đối ngẫu $\bar{\mathcal{D}}^{(\mu)}$ trùng với các biểu diễn liên hợp phức của biểu diễn đó. Do đó, biểu diễn $\bar{\mathcal{D}}^{(\mu)}$ cũng unita như biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$. Từ đó, vẫn giả thiết rằng biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là tự đối ngẫu như trên, theo (15-4), ta được

$$\bar{D}^{(\mu)} = \{[\bar{D}^{(\mu)}]^{-1}\}^{+} = \{S^{-1}[D^{(\mu)}]^{-1}S\}^{+} =$$
$$= S^{+}D^{(\mu)}(S^{-1})^{+} = S^{+}S\bar{D}^{(\mu)}S^{-1}(S^{-1})^{+} = (S^{+}S)\bar{D}^{(\mu)}(S^{+}S)^{-1}$$

tức là khi biểu diễn unita $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là tự đối ngẫu thì ma trận $S^{+}S$ giao hoán với mọi ma trận $\bar{D}^{(\mu)}$. Thành thử, theo bổ đề Schur thứ hai, ta được

$$SS^{+} = \lambda I_{n_\mu}. \tag{15-12}$$

Vì SS^{+} là xác định dương nên $\lambda > 0$, từ đó ta có thể xác định ma trận

$$U = \lambda^{-1/2}S \tag{15-13}$$

có tính chất [suy từ (15-12)] unita $U^{+}U = I_{n_\mu}$. Theo (15-4) và (15-11), ma trận này thực hiện phép biến đổi đồng dạng

$$D^{(\mu)*} = U^{-1}D^{(\mu)}. \tag{15-14}$$

Theo (15-13) và (15-5), ma trận U còn thỏa mãn các tính chất

$$U[U^{C}]^{-1} = UU^{*} = C^{(\mu)}I_{n_\mu}. \tag{15-15}$$

với $C^{(\mu)} = \pm 1$ theo các đẳng thức (15-9).

Như thế, với giả thiết các biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là unita và tự đối ngẫu thì các ma trận $D^{(\mu)*}$ và $D^{(\mu)}$ là đồng dạng unita với nhau. Kết quả này cho phép giải quyết bước cuối cùng của vấn đề đặt ra. Quả vậy, từ đây ta sẽ chứng minh rằng điều kiện cần và đủ để một biểu diễn bất khả quy unita tự đối ngẫu có thể tương đương với một biểu diễn hoàn toàn thực là số $C^{(\mu)}$ phải bằng 1.

Trước hết, nếu biểu diễn bất khả quy unita tự đối ngẫu có tính chất hoàn toàn thực thì, theo (15-11), biểu diễn đó sẽ là tự đối ngẫu theo nghĩa đồng nhất. Từ đó, theo (15-7) ta có ngay

$$C^{(\mu)} = 1.$$

Ngược lại, giả sử biểu diễn bất khả quy unita tự đối ngẫu đang xét có tính chất là $C^{(\mu)} = 1$. Ta sẽ chứng minh rằng biểu diễn này là hoàn toàn thực.

Quả vậy, với một biểu diễn như thế ta đặt

$$D_o^{(\mu)} = (U^*-e^{i\varphi})\, D^{(\mu)}\, (U^*-e^{i\varphi})^{-1}, \tag{15-16}$$

trong đó, theo (15-15), ma trận U thỏa mãn hệ thức

$$U(U^C)^{-1} = UU^* = I_{n_\mu} \tag{15-17}$$

vì $C^{(\mu)} = 1$, theo giả thiết (trong biểu thức (15-16) ta chọn số thực φ sao mà $e^{i\varphi}$ không trùng với các giá trị riêng của ma trận unita U). Thế thì, theo (15-16), (15-17) và (15-14), ta được

$$\begin{aligned} D_o^{(\mu)*} &= (U-e^{-i\varphi})\, D^{(\mu)*}\, (U-e^{-i\varphi})^{-1} = \\ &= (U-e^{-i\varphi})U^{-1}D^{(\mu)}U(U-e^{-i\varphi})^{-1} = \\ &= e^{-i\varphi}(e^{i\varphi}-U^{-1})D^{(\mu)}(e^{i\varphi}-U^{-1})^{-1}e^{i\varphi} = \\ &= (U^{-1}-e^{i\varphi})D^{(\mu)}(U^{-1}-e^{i\varphi})^{-1} = \\ &= (U^*-e^{i\varphi})D^{(\mu)}(U^*-e^{i\varphi})^{-1} = D_o^{(\mu)}. \end{aligned}$$

Thành thử, biểu diễn $D_o^{(\mu)}$ là hoàn toàn thực, đó là điều phải chứng minh.

Tóm lại, tiêu chuẩn hoàn toàn thực của một biểu diễn unita bất khả quy tự đối ngẫu là $C^{(\mu)} = 1$.

Kết hợp kết quả này với kết quả (15-9), ta thấy rằng các biểu diễn unita tự đối ngẫu bất khả quy có chiều n_μ lẻ luôn luôn có thể quy về dạng unita hoàn toàn thực. Đối với các biểu diễn unita tự đối ngẫu có chiều n_μ chẵn, ta chỉ có thể giải quyết vấn đề quy về dạng hoàn toàn thực khi $C^{(\mu)} = 1$ với $C^{(\mu)}$ tính theo công thức (15-10). Nếu theo công thức này ta tính được $C^{(\mu)} \neq 1$, (khi chiều n_μ chẵn) thì biểu diễn đang xét không thể quy về dạng hoàn toàn thực được.

Tất nhiên, muốn biết một biểu diễn nào đó có tự đối ngẫu hay không ta chỉ cần nhìn vào bảng đặc biểu. Khi tất cả các giá trị của đặc biểu là thực, biểu diễn là tự đối ngẫu. Trong trường hợp trái lại, biểu diễn là không tự đối ngẫu và dĩ nhiên không thể nào quy về dạng hoàn toàn thực được.

Như thế, các biểu diễn unita bất khả quy của một nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$ phân thành ba loại:

1. Loại không tự đối ngẫu khi

$$D^{(\mu)*} = \overline{D}^{(\mu)} \text{ không tương đương với } D^{(\mu)}.$$

Ở đây ta có theo (15-3)

$$\frac{1}{G}\sum_h \chi^{(\mu)}(h^2) = 0.$$

2. Loại tự đối ngẫu có tính chất

$$D^{(\mu)*} = \overline{D}^{(\mu)} = D^{(\mu)},$$

tức là loại biểu diễn hoàn toàn thực. Trường hợp này xảy ra khi

a) Chiều biểu diễn n_μ là lẻ

hay khi

b) $$\frac{1}{G}\sum_h \chi^{(\mu)}(h^2) = 1, \ n_\mu \text{ chẵn.}$$

3. Loại tự đối ngẫu có tính chất

$$D^{(\mu)*} = \bar{D}^{(\mu)} = SD^{(\mu)}S^{-1}, \ S \neq I_{n_\mu},$$

tức là loại biểu diễn không hoàn toàn thực. Trường hợp này xảy ra khi

$$\frac{1}{G}\sum_h \chi^{(\mu)}(h^2) = -1, \ n_\mu \text{ chẵn.}$$

Wigner gọi loại biểu diễn thứ hai là *biểu diễn nguyên* và loại thứ ba là *biểu diễn bán nguyên.*

Ví dụ. Ta hãy lấy biểu diễn hai chiều của nhóm quaternion I(3-4) (xem II, §2) Theo bảng nhân nhóm, ta có ngay

$$C^{(\mu)} = \frac{1}{8}\sum_h \chi(h^2) = -1. \quad (n_\mu = 2, \text{ là số chẵn !})$$

Như thế biểu diễn hai chiều này là một biểu diễn bán nguyên, không thể quy về dạng hoàn toàn thực được.

§16. TÍCH BIỂU DIỄN

Đối với các biểu diễn của nhóm, có thể thực hiện các phép tính khác nhau. Như đã biết, từ một biểu diễn cho sẵn có thể thu được các biểu diễn khác như biểu diễn liên hợp phức, biểu diễn đối ngẫu. Nếu cho nhiều biểu diễn khác nhau, ta cũng có thể xác định phép cộng biểu diễn như đã nói trước đây. Bây giờ ta hãy nói đến một phép tính khác rất quan trọng đối với các biểu diễn, đó là phép nhân biểu diễn. Phép nhân biểu diễn rất quan trọng trong các ứng dụng vật lý, chẳng hạn trong vấn đề tìm các quy tắc lọc lựa.

Tích không gian và tích biểu diễn

Cho một nhóm $\mathcal{G}$ và giả sử có hai biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(\nu)}$, tương ứng tác dụng trong hai không gian $\mathcal{X}$ và $\mathcal{Y}$, có n_μ và n_ν chiều :

$$g: \Psi'^i = D^{(\mu)}_{ij}(g)\Psi^j, \tag{16-1}$$

$$g: \Phi'^k = D^{(\nu)}_{kl}(g)\,\Phi^l, \tag{16-2}$$

với

$$g \in \mathcal{G}, \ \{\Psi'^i\}, \ \{\Psi^i\} \in \mathcal{X}, \ \{\Phi'^k\}, \ \{\Phi^k\} \in \mathcal{Y}, \ (i = 1, \ldots, n_\mu;\ k = 1, \ldots, n_\nu).$$

Tiếp theo, nhân hai đẳng thức trên với nhau, ta được

$$\Psi'^i\Phi'^k = D^{(\mu)}_{ij}(g)\,D^{(\nu)}_{kl}(g)\,\Psi^j\Phi^l. \text{ [1]} \tag{16-3}$$

1. Thông thường người ta ký hiệu tích đang xét là $\Psi'^i \otimes \Phi'^k$ hay $\Psi^j \otimes \Phi^l$. Nhưng để đơn giản, ta bỏ dấu $\otimes$.

Đặt

$$T^{ik} = \Psi^i \Phi^k,$$

từ (16-3), ta được

$$T'^{ik} = D^{(\mu\times\nu)}_{ik\,;\,jl}(g)\, T^{jl}, \tag{16-4}$$

với $D^{(\mu\times\nu)}$ là ma trận tích trực tiếp của các ma trận $D^{(\mu)}$ và $D^{(\nu)}$ (xem I(13-1)):

$$D^{(\nu\times\mu)}_{ik\,;\,jl}(g) = D^{(\mu)}_{ij}(g)\, D^{(\nu)}_{kl}(g). \tag{16-5}$$

Tiếp theo, dựa vào tính chất I(13-2) của tính trực tiếp các ma trận, theo (16-5), ta có

$$\begin{aligned} D^{(\mu\times\nu)}(hg) &= D^{(\mu)}(hg) \otimes D^{(\nu)}(hg) = D^{(\mu)}(h)\, D^{(\mu)}(g) \otimes \\ \otimes D^{(\nu)}(h)\, D^{(\nu)}(g) &= \{D^{(\mu)}(h) \otimes D^{(\nu)}(h)\}\, \{D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\nu)}(g)\} = \\ &= D^{(\mu\times\nu)}(h)\, D^{(\mu\times\nu)}(g). \end{aligned}$$

Kết quả này chứng tỏ rằng các ma trận $D^{(\mu\times\nu)}(g)$ làm thành một biểu diễn nào đó của nhóm $\mathcal{G}$. Các vectơ của không gian thực hiện phép biểu diễn này, theo (16-3), có dạng $\Psi^i \Phi^k$. Theo định nghĩa, không gian tuyến tính $\mathcal{M}$ căng bởi các vectơ $T^{ik} = \Psi^i \Phi^k$ gọi là *không gian tích Kronecker,* hay *tích tenxơ* của các không gian $\mathcal{X}$ và $\mathcal{Y}$, và ký hiệu là

$$\mathcal{M} = \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}; \quad \dim \mathcal{M} = \dim \mathcal{X} . \dim \mathcal{Y}.$$

(dim là chữ viết tắt của chữ dimension nghĩa là chiều).

Biểu diễn (16-4) gọi là *tích Kronecker* hay *tích tenxơ* của các biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(\nu)}$, và ký hiệu là

$$\mathcal{D}^{(\mu\times\nu)} = \mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}.$$

Ta lưu ý rằng tích biểu diễn không phụ thuộc vào thứ tự các biểu diễn trong tích.

Ta có thể mở rộng định nghĩa này cho tích nhiều biểu diễn. Chẳng hạn, ta có tích ba biểu diễn thực hiện bởi các ma trận

$$D^{(\mu\times\nu\times\lambda)}(g) = D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\nu)}(g) \otimes D^{(\lambda)}(g),\ g \in \mathcal{G}.$$

Đặc biểu của biểu diễn tích

Từ (16-5) cho $i = j$ và $l = k$ rồi lấy tổng theo j và k, ta có đặc biểu của tích biểu diễn dưới dạng tích

$$\chi^{(\mu\times\nu)}(g) = \chi^{(\mu)}(g)\, \chi^{(\nu)}(g). \tag{16-6}$$

Chuỗi Clebsch-Gordan và các hệ số Clebsch-Gordan

Một điểm quan trọng cần chú ý là tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu\times\nu)}$ lập từ $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(\nu)}$ nói chung là khả quy. Nếu nhóm $\mathcal{G}$ có tính chất hoàn toàn khả quy[1], ta có thể khai triển tích trực tiếp thành tổng các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$

$$\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \sum_{\lambda} \oplus\, (\mu, \nu \mid \lambda)\, \mathcal{D}^{(\lambda)}. \tag{16-7}$$

---

1. Một nhóm gọi là hoàn toàn khả quy nếu mọi biểu diễn của nhóm là hoàn toàn khả quy (xem II § 5).

Vế phải của đẳng thức (16-7) gọi là *chuỗi Clebsch-Gordan* của nhóm $\mathcal{G}$. Tìm chuỗi Clebsch-Gordan là một vấn đề rất quan trọng trong các ứng dụng vật lý. Theo công thức (10-4), các hệ số khai triển $(\mu, \nu \mid \lambda)$ được tính theo công thức

$$(\mu, \nu \mid \lambda) = \frac{1}{G} \sum_{g} \chi^{(\mu \times \nu)}(g)\, \chi^{(\lambda)*}(g),$$

hay, theo (16-6),

$$(\mu, \nu \mid \lambda) = \frac{1}{G} \sum_{g} \chi^{(\mu)}(g)\; \chi^{(\nu)}(g)\; \chi^{(\lambda)*}(g). \tag{16-8}$$

Như đã biết, các tích $\Psi^i \Phi^{ik}$ thực hiện biểu diễn tích $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(\mu \times \nu)}$. Từ đó song song với chuỗi Glebsch-Gordan (16-7) tức là bài toán tìm các hệ số $(\mu, \nu \mid \lambda) = (\nu, \mu \mid \lambda)$ (vì tích biểu diễn không phụ thuộc vào thứ tự các biểu diễn trong tích, ta hãy đặt vấn đề tìm các tổ hợp tuyến tính của các tích $\Psi^i \Phi^k$ thực hiện biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\lambda)}$ của nhóm $\mathcal{G}$ (tất nhiên khi có nhiều hệ số $(\mu, \nu \mid \lambda)$). Vì biểu diễn $\mathcal{D}^{(\lambda)}$ có thể có mặt trong tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$ nhiều lần (khi $(\mu, \nu \mid \lambda) \geqslant 2$), nên các tổ hợp tuyến tính này có thể ký hiệu là

$$\Phi^p{}_{(\lambda, \alpha)} \; (\alpha = 1, 2, \ldots, (\mu, \nu \mid \lambda),\; p = 1, \ldots, (^n\lambda).$$

Như thế, ta có thể viết

$$\Phi^p{}_{(\lambda, \alpha)} = (\mu j, \nu l \mid \lambda, \alpha, p)\; \Psi^j \Phi^l. \tag{16-9}$$

Các hệ số $(\mu j, \nu l \mid \lambda\; \alpha\; p)$ của các tổ hợp tuyến tính (16-9) gọi là *các hệ số Clebsch-Gordan* của nhóm $\mathcal{G}$. Các hệ số này còn mang tên là *hệ số Wigner* hay *hệ số cộng vectơ*.

Ta sẽ trình bày chi tiết hơn các tính chất và biểu thức cụ thể của các hệ số này đối với một số nhóm cụ thể sau này.

Chuỗi Clebsch-Gordan của nhóm $\mathcal{D}_3$

Cho nhóm $\mathcal{D}_3$ và bảng đặc biểu (12-5). Ta hãy tìm chuỗi Clebsch-Gordan chẳng hạn cho tích các biểu diễn $\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2$, $\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{E}$, $\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}$. Theo công thức (16-6), ta có bảng đặc biểu sau đây cho các tích đó

$\mathcal{D}_3$	e	2d	3a
$\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2$	1	1	−1
$\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{E}$	2	−1	0
$\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}$	4	1	0

Từ đó, theo công thức (10-4), ta tính được các hệ số $(\mu, \nu \mid \lambda)$ và, do đó, chuỗi Clebsch-Gordan

$$\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_2, \quad \mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E}, \quad \mathcal{E} \otimes \mathcal{E} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}. \tag{1-10}$$

§ 17. BÌNH PHƯƠNG ĐỐI XỨNG VÀ BÌNH PHƯƠNG PHẢN XỨNG CỦA CÁC BIỂU DIỄN

Định nghĩa

Cho Ψ^i và Φ^j là hai hệ hàm khác nhau (vectơ) thực hiện tương ứng hai biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}_{(\nu)}$ của một nhóm $\mathcal{G}$ nào đó (xem §3):

$$T_g\psi^i = D^{(\mu)}_{ji}(g)\ \psi^j,$$

$$T_g\Phi^l = D^{(\nu)}_{kl}(g)\ \Phi^k.$$

Thế thì, như đã biết ở § 16, tập hợp các tích $T^{ik} = \psi^i\Phi^k$ sẽ tạo nên một không gian $n_\mu\, n_\nu$ chiều thực hiện biểu diễn $\mathcal{D}$ tích $^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$

$$T_gT^{jl} = D^{(\mu)}_{ij}(g)\ D^{(\nu)}_{kl}(g)\ T^{ik}. \qquad (14\text{-}1)$$

Bây giờ ta xét trường hợp đặc biệt: hai biểu diễn nói trên trùng với nhau. Tất nhiên, trong trường hợp này, hai hệ hàm ψ^i và Φ^k có thể khác nhau mà cũng có thể đồng nhất như nhau. Cũng như trong trường hợp chung, biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}$ nói chung là khả quy, thành thử không gian n_μ^2 chiều các tích T^{ik} có thể phân tích thành nhiều không gian con bất biến. Ở đây ta hãy xét hai không gian con bất biến đặc biệt sau.

Ta hãy xét hệ

$$\frac{n_\mu(n_\mu + 1)}{2} \text{ hàm đối xứng } S^{jl} = T^{lj} + T^{jl}, \qquad (17\text{-}2)$$

và hệ

$$\frac{n_\mu(n_\mu - 1)}{2} \text{ hàm phản xứng } A^{lj} = T^{lj} - T^{jl}. \qquad (17\text{-}3)$$

Tiếp theo, trong (14-1) cho $\mu = \nu$, sau đó hoán vị j với l, ta được

$$T_gT^{jl} = D^{(\mu)}_{ij}(g)\ D^{(\mu)}_{kl}(g)\ T^{ik},$$

$$T_gT^{lj} = D^{(\mu)}_{il}(g)\ D^{(\mu)}_{kj}(g)\ T^{ik}.$$

Cộng và trừ hai đẳng thức này với nhau, ta được

$$T_g(T^{jl} \pm T^{lj}) = \{D^{(\mu)}_{ij}(g)\ D^{(\mu)}_{kl}(g) \pm D^{(\mu)}_{il}(g)\ D^{(\mu)}_{kj}(g)\}\ T^{ik} =$$

$$= \frac{1}{2}\{D^{(\mu)}_{ij}(g)\ D^{(\mu)}_{kl}(g) \pm D^{(\mu)}_{il}(g)\ D^{(\mu)}_{kj}(g)\}\ (T^{ik} \pm T^{ki}). \qquad (17\text{-}4)$$

Theo (17-1), rõ ràng không gian con các hàm S^{jl}, cũng như không gian con các hàm A^{jl}, là bất biến (nhưng không nhất thiết là bất khả quy). Nói cụ thể hơn, theo (17-4), khi $n_\mu > 1$ thì tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}$ đã cảm ứng trong hai không gian các lượng S^{ik} và A^{ik} những biểu diễn nào đó. Các biểu diễn này tương ứng gọi là *bình phương đối xứng* và *bình phương phản xứng* của biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và ký hiệu là

$$[\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}]\,,\ \{\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}\}.$$

Như thế, từ biểu thức phân tích duy nhất của không gian tích các

$$T^{ik} = \frac{S^{ik} + A^{ik}}{2}\,,$$

ta được

$$\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)} = [\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}] \oplus \{\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}\}. \tag{17-5}$$

Đặc biểu

Ta hãy tìm đặc biểu của các biểu diễn này, tương ứng ký hiệu là $[\chi^{(\mu)} \otimes \chi^{(\mu)}]\,(g)$ và $\{\chi^{(\mu)} \otimes \chi^{(\mu)}\}\,(g)$. Theo (17-4), ta có

$$[D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\mu)}(g)]_{kl,ij} = \frac{1}{2}\,[D^{(\mu)}_{ki}(g)\, D^{(\mu)}_{lj}(g) + D^{(\mu)}_{li}(g)\, D^{(\mu)}_{kj}(g)],$$

$$\{D^{(\mu)}_{g} \otimes D^{(\mu)}(g)\}_{kl,ij} = \frac{1}{2}\,[D^{(\mu)}_{ki}(g)\, D^{(\mu)}_{lj}(q) - D^{(\mu)}_{li}(q)\, D^{(\mu)}_{kj}(g)],$$

từ đó, cho $k = i$, $l = j$ và lấy tổng theo i và j, ta được các đặc biểu

$$[\chi^{(\mu)} \otimes \chi^{(\mu)}]\,(g) = \frac{1}{2}\,[\chi^{(\mu)2}(g) + \chi^{(\mu)}(g^2)], \tag{17-6}$$

$$\{\chi^{(\mu)} \otimes \chi^{(\mu)}\}\,(g) = \frac{1}{2}\,[\chi^{(\mu)2}(g) - \chi^{(\mu)}(g^2)]. \tag{17-7}$$

Ta chú ý rằng khi hai hệ ψ^i và Φ^i trùng với nhau thì các tích phản xứng $A^{ij} = 0$ và ta chỉ còn lại bình phương đối xứng của biểu diễn.

Các bình phương đối xứng và phản xứng của nhóm $\mathcal{D}_3$

Ta hãy tính các bình phương đối xứng và phản xứng của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_3$ Để tính các giá trị của đặc biểu của các bình phương đối xứng và phản xứng, ta chú ý rằng $\chi(C_3) = \chi(C_3^2)$. Tiếp theo ta hãy tính bình phương đối xứng $[\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}]$. Với biểu diễn $\mathcal{E}$ của nhóm, theo (17-6), ta có

$$[\chi \otimes \chi]\,(e) = \frac{1}{2}\,[\chi^2(e) + \chi(e^2)] = \frac{1}{2}\,(4 + 2) = 3,$$

$$[\chi \otimes \chi](C_3) = \frac{1}{2}\,[\chi^2(C_3) + \chi(C_3^2)] = \frac{1}{2}\,(1 - 1) = 0,$$

$$[\chi \otimes \chi](C_x) = \frac{1}{2}\,[\chi^2(C_x) + \chi\,(C_x^2)] =$$

$$= \frac{1}{2}\,[\chi^2(C_x) + \chi(e)] = \frac{1}{2}\,(0 + 2) = 1.$$

Từ đó, dùng phương pháp đặc biểu thông thường (theo công thức (10-4)), ta có ngay biểu thức phân tích của bình phương đối xứng của biểu diễn $\mathcal{E}$

$$[\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E},$$

và

$$\{\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}\} = \mathcal{E} \otimes \mathcal{E} - [\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_2.$$

Định nghĩa

Cho một nhóm $\mathcal{G}$ và giả sử $\mathcal{H}$ là một nhóm con (thực sự) của $\mathcal{G}$. Tất nhiên, mọi biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$ đồng thời cũng là biểu diễn của nhóm con $\mathcal{H}$, nếu trong số các ma trận D(g) thực hiện phép biểu diễn $\mathcal{D}$ đó ta chỉ xét các phần tử $g = h$ thuộc nhóm con $\mathcal{H}$, hay, như thường nói, nếu ta hạn chế biểu diễn $\mathcal{D}$ trên nhóm con $\mathcal{H}$. Một điểm quan trọng cần lưu ý là ngay khi biểu diễn $\mathcal{D}$ là một biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$, biểu diễn đó hạn chế trên nhóm con $\mathcal{H}$ nói chung là khả quy. Thành thử, nếu nhóm $\mathcal{H}$ có tính chất hoàn toàn khả quy (xem § 16), thì một vấn đề tự nhiên đề ra là tìm cấu trúc của biểu diễn $\mathcal{D}$ đối với nhóm con $\mathcal{H}$, tức là tìm biểu thức khai triển của biểu diễn $\mathcal{D}$ thành tổng các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm con $\mathcal{H}$. Vấn đề này gọi là vấn đề *biểu diễn hạ cảm* và ký hiệu là $\mathcal{G} \downarrow \mathcal{H}$. Vấn đề này rất quan trọng trong các ứng dụng lý thuyết nhóm vào vật lý học, đặc biệt trong vấn đề tách các mức năng lượng của các hệ vi mô trong thuyết nhiễu loạn hay nói chung trong vấn đề phân loại. Đây là vấn đề hạ tính đối xứng của hệ vật lý đang xét.

Đối với các nhóm hữu hạn, bài tính biểu diễn hạ cảm giải quyết khá đơn giản với phương pháp đặc biểu. Quả vậy, ta chỉ cần tìm đặc biểu $\chi(h)$ của biểu diễn $\mathcal{D}$ hạn chế trên nhóm con $\mathcal{H}$, sau đó vận dụng công thức (10-4) để tìm các hệ số khai triển a_μ,

Ví dụ :

Cho nhóm $\mathcal{T}$ với bảng đặc biểu (xem I, § 8)

$\mathcal{T}$	e	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
$\mathcal{A}$	1	1	1	1
$\mathcal{E}$	1	1	ε	ε^2
	1	1	ε^2	ε
$\mathcal{F}$; x, y, z	3	−1	0	0

$$, \quad \varepsilon = e^{2i\pi/3} \qquad (18\text{-}1)$$

Trong bảng đặc biểu này $\mathcal{F}$ trỏ biểu diễn ba chiều, còn (x, y, z) trỏ không gian biểu diễn. Ta lại cho nhóm $\mathcal{D}_2$ với bảng đặc biểu

$\mathcal{D}_2$	e	$a = C_x$	$b = C_y$	$c = C_z$
$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1
$\mathcal{B}_3$; x	1	−1	−1	1
$\mathcal{B}_1$; z	1	1	−1	−1
$\mathcal{B}_2$; xy	1	−1	1	−1

(18-2)

Trong bảng đặc biểu trên, các ký hiệu $\mathcal{A}_1$, $\mathcal{B}_1$, $\mathcal{B}_2$, $\mathcal{B}_3$ trỏ các biểu diễn một chiều thường dùng, còn các ký hiệu x, y, z nằm cạnh các biểu diễn, trỏ các không gian biểu diễn tương ứng. $\mathcal{D}_2$ là một nhóm con của $\mathcal{T}$, các phần tử C_x,

C_y, C_z của nhóm $\mathcal{D}_2$ làm thành ba lớp khác nhau trong nhóm $\mathcal{D}_2$, nhưng lại cùng làm thành một lớp đối với nhóm $\mathcal{T}$, tương ứng với ký hiệu $3C_2$ ở (18-1).

Muốn giải bài toán hạ cảm $\mathcal{T}\downarrow\mathcal{R}_2$ cho biểu diễn $\mathcal{F}$ chẳng hạn, ta hãy tìm bảng đặc biểu hạn chế của biểu diễn $\mathcal{F}$ lên trên nhóm $\mathcal{D}_2$; nói cách khác, ta cần tính các giá trị của $\chi^{(\mathcal{F})}$ tại các phần tử của $\mathcal{D}_2$ mà thôi. Theo (18-1), ta có

$\mathcal{D}_2$	e	C_x	C_y	C_z
$\mathcal{F}$	3	−1	−1	−1

Công thức (10-4) với $G = 4$, $g_1 = g_2 = g_3 = 1$, $s = 3$ cho ngay kết quả của bài toán biểu diễn hạ cảm đặt ra

$$\mathcal{T}\downarrow\mathcal{D}_2 : \mathcal{F} = \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{B}_3 \quad . \tag{18-3}$$

§ 19. PHÉP BIỂU DIỄN THƯỢNG CẢM

Định nghĩa

Bây giờ ta hãy giải bài toán ngược lại với bài toán trên. Cụ thể là: cho một nhóm $\mathcal{G}$ và giả sử $\mathcal{H}$ là một nhóm con của $\mathcal{G}$. Từ một biểu diễn bất khả quy cho sẵn $\mathcal{D}$ của $\mathcal{H}$, ta có thể lập được một biểu diễn Δ của nhóm $\mathcal{G}$ như thế nào? Vấn đề này gọi là bài toán *biểu diễn thượng cảm* cho nhóm $\mathcal{G}$ từ nhóm con $\mathcal{H}$, và ký hiệu là $\mathcal{H}\uparrow\mathcal{G}$.

Để giải bài toán, ta hãy phân nhóm $\mathcal{G}$ thành các lớp kề theo nhóm con $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H}\ ,\ f_1\mathcal{H},\ f_2\mathcal{H}, \ldots,\ f_k\mathcal{H},\ f_j \overline{\in} \mathcal{H} \quad . \tag{19-1}$$

Tiếp theo, giả sử $\mathcal{M}_o$ là không gian thực hiện biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}$ của nhóm con $\mathcal{H}$: (các biểu diễn của các nhóm $\mathcal{G}$ và $\mathcal{H}$ được mô tả bởi ký hiệu chung là T).

$$T(h)\,\mathcal{M}_o = \mathcal{M}_o\ ,\ h \in \mathcal{H} \quad . \tag{19-2}$$

Cho các toán tử $T(f_1), \ldots, T(f_2)$ tác dụng lên không gian $\mathcal{M}_o$, $(f_j \overline{\in} \mathcal{H})$ ta được các không gian

$$T(f_j)\,\mathcal{M}_o \equiv \mathcal{M}_j \quad , \quad (j = 1, \ldots, k) \tag{19-3}$$

Tổng trực tiếp các không gian $\mathcal{M}_i$ và $\mathcal{M}_o$

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_o \oplus \mathcal{M}_1 \oplus \ldots \oplus \mathcal{M}_k \tag{19-4}$$

sẽ là một không gian bất biến đối với toàn bộ nhóm $\mathcal{G}$. Quả vậy, theo (19-3), với mọi phần tử tùy ý $g = f_i h$ của $\mathcal{G}$, ta được

$$T(g)\mathcal{M}_j = T(f_j h)\, T(f_j)\mathcal{M}_o = T(f_j h f_j)\mathcal{M}_o. \tag{19-5}$$

Vì $f_i h f_j \in \mathcal{G}$ nên, theo biểu thức phân tích (19-1), phần tử này phải có dạng

$$f_j h f_j = f_1 h',\quad h' \in \mathcal{H}.$$

Thành thử, theo (19-2), đẳng thức (19-5) cho

$$T(g)\mathcal{M}_j = T(f_1)\, T/h')\mathcal{M}_o = T(f_1)\mathcal{M}_o = \mathcal{M}_1 \subset \mathcal{M},$$

đó là điều phải chứng minh. Như thế, ta được một không gian bất biến đối với nhóm $\mathcal{G}$, thực hiện một biểu diễn Δ nào đó của nhóm đó, xuất phát từ biểu diễn $\mathcal{D}$ trong không gian $\mathcal{M}_o$ của nhóm con $\mathcal{H}$ của nhóm $\mathcal{G}$.

Để xác định biểu diễn Δ ta hãy tìm đặc biểu của nó, trước hết là đặc biểu đó hạn chế trên nhóm con $\mathcal{H}$. Muốn thế, ta hãy xác định điều kiện để không gian con $\mathcal{M}_i$ là bất biến đối với các T(h). Vì, theo (19-3), ta có

$$T(h)\mathcal{M}_j = T(hf_j)\mathcal{M}_o = T(f_j)\,T(f_j^{-1}hf_j)\mathcal{M}_o. \tag{19-6}$$

nên, muốn không gian con $\mathcal{M}_i$ là bất biến, chỉ số j phải thỏa mãn điều kiện

$$f_j^{-1}hf_j \in \mathcal{H}. \tag{19-7}$$

Trong trường hợp này, theo (19-6), ma trận của các biểu diễn cảm ứng $\Delta_j(h)$ trong các không gian con $\mathcal{M}_j$ của biểu diễn hạn chế $\Delta(h)$ của nhóm $\mathcal{G}$ lên trên nhóm con $\mathcal{H}$, là đồng dạng với ma trận $D(f_j^{-1}hf_j)$ của biểu diễn $\mathcal{D}$ trong không gian $\mathcal{M}_o$:

$$\Delta_j(h) \sim D(f_j^{-1}hf_j),\ D \in \mathcal{D}. \tag{19-8}$$

Tiếp theo, giả sử phân tử h thuộc lớp $\mathcal{L}_p$ của nhóm con $\mathcal{H}$ và thuộc lớp $\mathcal{K}_q$ của nhóm $\mathcal{G}$. Vì $f_j \bar{\in} \mathcal{H}$, nên phần tử $f_j^{-1}hf_j$ nói chung không thuộc cùng lớp $\mathcal{L}_p$ với h (nhưng tất nhiên $f_j^{-1}hf_j$ bao giờ cũng thuộc cùng lớp $\mathcal{K}_q$ với phần tử h). Bây giờ ta hãy tính tổng số l_p các không gian con $\mathcal{M}_j$ ở đó $\Delta_j(h)$ đồng dạng với D(h)

$$\Delta_j(h) \sim D(h) \tag{19-9}$$

phần tử h xem như cố định. Theo (19-8) và (19-9), ta thấy rằng muốn thế ta phải có

$$D(f_j^{-1}hf_j) \sim D(h), \tag{19-10}$$

tức là phần tử $f_j^{-1}hf_j$ phải thuộc cùng lớp $\mathcal{L}_p$ với h. Thành thử số l_p nói trên phải bằng số chỉ số j sao mà

$$f_j^{-1}hf_j \in \mathcal{L}_p. \tag{19-11}$$

Nhưng khi đã đúng cho f_j với một chỉ số j nào đó, tính chất (19-11) sẽ đúng cho mọi phần tử thuộc toàn bộ lớp kề $f_j\mathcal{H}$. Từ đó, gọi m_p là số các phần tử có dạng $g^{-1}hg$, và rơi vào lớp $\mathcal{L}_p$ khi g chạy khắp nhóm $\mathcal{G}$, ta được hệ thức

$$l_p = \frac{m_p}{H}, \tag{19-12}$$

với H là cấp của nhóm con $\mathcal{H}$. Nhưng khi g chạy khắp nhóm $\mathcal{G}$, mỗi phần tử của lớp $\mathcal{K}_p$ (chứa phần tử h) sẽ có mặt G/g_q lần trong tập hợp các phần tử $g^{-1}hg$. Thành thử, gọi h_p là số phần tử của lớp $\mathcal{L}_p \subset \mathcal{K}_p$, ta được

$$m_p = \frac{Gh_p}{g_q}. \tag{19-11}$$

Từ đó, theo (19-12), ta được

$$l_p = \frac{Gh_p}{Hg_q}. \tag{19-12}$$

Bây giờ ký hiệu $\chi_q^{(c)}$ là đặc biểu của biểu diễn thượng cảm $\triangle$ tại phần tử g thuộc lớp $\mathcal{K}_q$. Từ cách đặt vấn đề ở trên, ta được $\chi_q^{(c)} = 0$ nếu $\mathcal{K}_q$ không chứa lớp $\mathcal{L}_p$ nào, hoặc

$$\chi_q^{(c)} = \sum_{\mathcal{L}_p \subset \mathcal{K}_q} l_p \chi_p, \tag{19-13}$$

tổng lấy theo tất cả các lớp $\mathcal{L}_p$ được chứa trong lớp $\mathcal{K}_q$, χ_p là đặc biểu của biểu diễn $\mathcal{D}$ tại lớp $\mathcal{L}_p$. Tiếp theo, thay l_p bằng giá trị ở (19-12) vào (19-13), cuối cùng ta được biểu thức của đặc biểu của biểu diễn thượng cảm Δ của nhóm $\mathcal{G}$ trong bài toán biểu diễn thượng cảm

$$\mathcal{H} \uparrow \mathcal{G}:\ \chi_q^{(c)} = \frac{G}{H} \sum_{\mathcal{L}_p \subset \mathcal{K}_q} \frac{h_p}{g_q} \chi_p. \tag{19-14}$$

Bây giờ ta ký hiệu $\chi_q^{(\mu)}$ là đặc-biểu của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{G}$ tại lớp $\mathcal{K}_q$. Theo (10-4), số lần biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nằm trong biểu diễn khả quy $\triangle$ bằng

$$a_\mu = \frac{1}{G} \sum_q g_q \chi_q^{(\mu)} \chi_q^{(c)*}.$$

Nhưng, theo (19-14), ta được

$$a_\mu = \frac{1}{G} \sum_q \sum_{\mathcal{L}_p \subset \mathcal{K}_q} g_q \frac{G}{H} \frac{h_p}{g_q} \chi_p^* \chi_q^{(\mu)} =$$

$$= \frac{1}{H} \sum_p h_p \chi_p \chi_p^{(\mu)*} \tag{19-15}$$

Như thế, với kết quả (19-15), ta có

Định lý Frobénius

Biểu diễn $\triangle$ của nhóm $\mathcal{G}$, thương cảm bởi biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}$ của nhóm con $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$, chứa mỗi biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{G}$ một số lần bằng số lần biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ hạn chế trên nhóm con $\mathcal{H}$ chứa biểu diễn $\mathcal{D}$.

Ví dụ

Ta hãy ứng dụng định lý này để tìm các biểu diễn của các nhóm đối xứng S_n, bắt đầu từ nhóm S_4.

Vì nhóm S_3 đẳng cấu với nhóm $\mathcal{D}_3$, nên ta có bảng đặc biểu

S_3	$1\{1^3\}$	$3\{2,1\}$	$2\{3\}$
$\mathcal{D}_3^{(1)}$	1	1	1
$\mathcal{D}_3^{(2)}$	1	−1	1
$\mathcal{D}_3^{(3)}$	2	0	−1

(19—16)

Tiếp theo để tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm S_4, từ bài tính biểu diễn thượng cảm $S_3 \uparrow S_4$, ta hãy ghi hai biểu diễn đối xứng (biểu diễn đơn vị) và phản xứng cho mọi nhóm S_n (xem ví dụ II, § 2).

S_4	$1\{1^4\}$	$6\{2,1^2\}$	$3\{2^2\}$	$8\{3,1\}$	$6\{4\}$
$\mathcal{D}_4^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\mathcal{D}_4^{(2)}$	1	−1	1	1	−1

(19-17)

Để tìm các biểu diễn bất khả quy khác của nhóm S_4, ta hãy tính thừa số

$$\frac{G}{H} \; \frac{h_p}{g_\sigma}$$

trong công thức (19-14). Dựa vào bảng, ta có thể xác định được các giá trị của $p\,(p = 1, 2, 3)$ tương ứng với các giá trị của q (đi từ 1 đến 5).

Ở bảng (19-16), ta có ba lớp $\mathcal{L}_p$ của nhóm S_3, tương ứng có cấu trúc

$\mathcal{L}_p$. $\mathcal{L}_1 : \{1^3\}$; $\mathcal{L}_2 : \{2,1\}$, $\mathcal{L}_3 : \{3\}$

h_p. $h_1 = 1$, $h_2 = 3$, $h_3 = 2$.

Ở (19-17), ta có năm lớp $\mathcal{K}_q$ của S_4, tương ứng có cấu trúc :

$\mathcal{K}_q$. $\mathcal{K}_1 : \{1^4\}$, $\mathcal{K}_2 : \{2,1\}$, $\mathcal{K}_3 : \{2^2\}$, $\mathcal{K}_4 : \{3,1\}$, $\mathcal{K}_5\ \{4\}$

g_q. $g_1 = 1$, $g_2 = 6$, $g_3 = 3$, $g_4 = 8$, $g_5 = 6$

Rõ ràng cấu trúc $\{1^4\}$ của lớp $\mathcal{K}_1$ chứa cấu trúc $\{1^3\}$ của lớp $\mathcal{L}_1$ và chỉ chứa cấu trúc này. Do đó, ta có

$$p = 1 \text{ khi } q = 1.$$

Tương tự như thế, cấu trúc $\{3,1\}$ của lớp K_4 chỉ chứa cấu trúc $\{3\}$ của lớp $\mathcal{L}_3$. Như thế, ta được

$$p = 3 \text{ khi } q = 4.$$

Tiếp theo, cấu trúc $\{4\}$ của lớp $\mathcal{K}_5$ không chứa cấu trúc nào của các lớp $\mathcal{L}_p$ của nhóm S_3. Các lý luận tương tự như thế dẫn đến các kết quả sau :

q	1	2	3	4	5
p	1	2		3	

Các kết quả này, cùng với các giá trị $G = 24$, $H = 6$ cho phép chúng ta tính đặc biểu của các biểu diễn của nhóm S_4, cảm ứng bởi các biểu diễn bất khả quy của nhóm S_3 trong bài toán biểu diễn thượng cảm $S_3 \uparrow S_4$ (xem 19,14) :

$$S_3 \uparrow S_4 \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_3^{(1)} \to \Delta^{(1)}, \chi^{(1c)} = \{4,\ \ 2, 0,\ \ 1, 0\}, \\ \mathcal{D}_3^{(2)} \to \Delta^{(2)}, \chi^{(2c)} = \{4, -2, 0,\ \ 1, 0\}, \\ \mathcal{D}_3^{(3)} \to \Delta^{(3)}, \chi^{(3c)} = \{8,\ \ 0, 0, -1, 0\} \end{array} \right| \qquad (19\text{-}18)$$

Ở kết quả này, $\Delta^{(i)}$ trỏ biểu diễn thượng cảm của nhóm S_4 lập từ biểu diễn $\mathcal{D}_3^{(i)}$ của nhóm S_3, còn $\chi^{(ic)}$ là đặc biểu của biểu diễn $\Delta^{(i)}$ $(i = 1, 2, 3)$.

Các biểu diễn thu được ở (19-18) là khả quy. Nhưng muốn tìm các biểu diễn bất khả quy từ kết quả này, ta có thể vận dụng định lý Frobenius ở trên. Muốn thế, trước hết ta lập bảng đặc biểu hạn chế trong bài toán biểu diễn hạ cảm $S_4 \downarrow S_3$ cho các biểu diễn bất khả quy sẵn biết ở (19-16) của S_4 (ta ghi thêm trong bảng sau đồng thời các bảng đặc biểu hạn chế cho các biểu diễn bất khả quy khác của S_4 mà chúng ta sẽ lần lượt thu được từ các lý luận dần dần tiến hành về sau).

$S_4 \downarrow S_3$:

S_3	$1\{1^3\}$	$3\{2,1\}$	$2\{3\}$
$\mathcal{D}_4^{(1)}$	1	1	1
$\mathcal{D}_4^{(2)}$	1	-1	1
$\mathcal{D}_4^{(4)}$	3	1	0
$\mathcal{D}_4^{(5)}$	3	-1	0

(19-19)

Bây giờ, ta hãy ứng dụng công thức Frobenius cho biểu diễn $\mathcal{D}_3^{(1)}$ của S_3, bắt đầu bằng bài toán biểu diễn hạ cảm $S_4 \downarrow S_3$ với các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}_4^{(1)}$ và $\mathcal{D}_4^{(2)}$. Theo phương pháp đặc biểu thông thường, từ (19-18), ta được

$$S_4 \downarrow S_3 : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_4^{(1)} = \mathcal{D}_3^{(1)}, \\ \mathcal{D}_4^{(2)} \text{ không chứa } \mathcal{D}_3^{(1)}. \end{array} \right.$$

Thành thử, theo định lý Frobenius, ta được kết quả

$$S_3 \uparrow S_4 \quad : \quad \mathcal{D}_3^{(1)} \rightarrow \Delta^{(1)} = \mathcal{D}_4^{(1)} \oplus \ldots$$

Như thế, từ biểu diễn cảm ứng $\Delta^{(1)}$ ta thu được một biểu diễn khác

$$\mathcal{D}_4^{(4)} = \Delta^{(1)} \ominus \mathcal{D}_4^{(1)}$$

mà đặc biểu, tính theo (19-18) và (19-17), có giá trị

$$\chi^{(4)} = \{3,1,-1,0,-1\} .$$

Biểu diễn này thỏa mãn điều kiện bất khả quy. Vì thế, đó chính là một trong những biểu diễn bất khả quy cần tìm của nhóm S_4. Ta hãy ghi đặc biểu hạn chế của biểu diễn này vào bảng (19-19).

Tiếp theo, tương tự như trên, ứng dụng định lý Frobenius cho biểu diễn $\mathcal{D}_3^{(2)}$, ta được các kết quả

$$S_4 \downarrow S_3 \quad : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_4^{(1)} \text{ không chứa } \mathcal{D}_3^{(2)}, \\ \mathcal{D}_4^{(2)} = \mathcal{D}_3^{(2)}, \\ \mathcal{D}_4^{(4)} \text{ không chứa } \mathcal{D}_3^{(2)}, \end{array} \right.$$

$$S_3 \uparrow S_4 : \mathcal{D}_3^{(2)} \rightarrow \Delta^{(2)} = \mathcal{D}_4^{(2)} \oplus \ldots$$

từ đó, ta thu được một biểu diễn mới

$$\mathcal{D}_4^{(5)} = \Delta^{(2)} \oplus \mathcal{D}_4^{(2)},$$

mà đặc biểu, tính theo (19-18) và (19-17), có giá trị

$$\chi^{(5)} = \{3, -1, -1, 0, 1\}.$$

Biểu diễn này cũng thỏa mãn tiêu chuẩn bất khả quy. Đó là biểu diễn bất khả quy thứ tư của nhóm S_4. Ta ghi đặc biểu hạn chế của biểu diễn này vào bảng (19-19).

Cuối cùng, ứng dụng định lý Frobenius cho biểu diễn $\mathcal{D}_3^{(3)}$ ta được kết quả

$$S_4 \downarrow S_3 : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_4^{(1)} \text{ và } \mathcal{D}_4^{(2)} \text{ không chứa } \mathcal{D}_3^{(3)}, \\ \mathcal{D}_4^{(4)} \text{ và } \mathcal{D}_3^{(3)} \oplus \mathcal{D}_3^{(1)}, \\ \mathcal{D}_4^{(5)} = \mathcal{D}_3^{(3)} \oplus \mathcal{D}_3^{(2)}, \end{array} \right.$$

$$S_3 \downarrow S_4 : \mathcal{D}_3^{(3)} \to \Delta^{(3)} = \mathcal{D}_4^{(4)} \oplus \mathcal{D}_4^{(5)} \oplus \dots$$

Từ đó, ta thu được biểu diễn

$$\mathcal{D}_4^{(3)} = \Delta^{(3)} \ominus \mathcal{D}_4^{(4)} \ominus \mathcal{D}_4^{(5)},$$

có đặc biểu

$$\chi^{(3)} = \{2, 0, 2, -1, 0\}.$$

Tiêu chuẩn bất khả quy cho thấy đó là biểu diễn bất khả quy cuối cùng của nhóm S_4. Bài tính tìm các biểu diễn của nhóm này theo phương pháp biểu diễn thượng cảm kết thúc, vì nhóm này có năm lớp.

Ta tóm tắt các kết quả đã tính được.

S_4	$1\{1^4\}$	$6\{2,1^2\}$	$3\{2^2\}$	$8\{3,1\}$	$6\{4\}$
$\mathcal{D}_4^{(1)}$	1	1	1	1	-1
$\mathcal{D}_4^{(2)}$	1	-1	1	1	1
$\mathcal{D}_4^{(3)}$	2	0	2	-1	0
$\mathcal{D}_4^{(4)}$	3	1	-1	0	-1
$\mathcal{D}_4^{(5)}$	3	-1	-1	0	1

(19-20)

Bây giờ, ta chuyền sang bài toán biều diễn thượng cảm $S_4 \uparrow S_5$.

Cũng như trên, trước hết ta có hai biều diễn đối xứng (đơn vị) và phản xứng của nhóm S_5.

S_5	$1\{1^5\}$	$10\{2,1^3\}$	$15\{2^2,1\}$	$20\{3,1^2\}$	$20\{3,2\}$	$30\{4,1\}$	$24\{5\}$
$\mathcal{D}_5^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1
$\mathcal{D}_5^{(2)}$	1	-1	1	1	-1	-1	1

(19-21)

Các thừa số

$$\frac{G}{H}\ \frac{h_p}{g_q}$$

trong công thức (19-14) ở đây lần lượt có các giá trị

$$5,\ 3,\ 1,\ 2,\ 0,\ 1,\ 0$$

Thành thử, từ công thức đó, ta thu được các biều diễn cảm ứng sau cho nhóm S_5 trong bài toán biều diễn thượng cảm $S_4 \uparrow S_5$:

$$S_4 \uparrow S_5 : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_4^{(1)} \rightarrow \Delta^{(1)}\ ,\ \chi^{(1c)} = \{5, 3, 1, 2, 0, 1, 0\}\ , \\ \mathcal{D}_4^{(2)} \rightarrow \Delta^{(2)}\ ,\ \chi^{(2c)} = \{5, -3, 1, 2, 0, -1, 0\}\ , \\ \mathcal{D}_4^{(3)} \rightarrow \Delta^{(3)}\ ,\ \chi^{(3c)} = \{10, 0, 2, -2, 0, 0, 0\}\ , \\ \mathcal{D}_4^{(4)} \rightarrow \Delta^{(4)}\ ,\ \chi^{(4c)} = \{15, 3, -1, 0, 0, -1, 0\}\ , \\ \mathcal{D}_4^{(5)} \rightarrow \Delta^{(5)}\ ,\ \chi^{(5c)} = \{15, -3, -1, 0, 0, 1, 0\}\ . \end{array} \right.$$

Tiếp theo, vì

$$S_5 \downarrow S_4 : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_5^{(1)} = \mathcal{D}_4^{(1)}\ , \\ \mathcal{D}_5^{(2)} = \mathcal{D}_4^{(2)}\ , \end{array} \right.$$

nên, ứng dụng định lý Frobenius cho các biều diễn $\mathcal{D}_3^{(i)}$ $(i = 1, 2)$, ta được các khai triền sau của các biều diễn cảm ứng $\Delta^{(1)}$, $\Delta^{(2)}$:

$$\Delta^{(1)} = \mathcal{D}_5^{(1)} \oplus \ldots$$

$$\Delta^{(2)} = \mathcal{D}_5^{(2)} \oplus \ldots$$

Từ đó, ta thu được các biểu diễn

$$\mathcal{D}_5^{(3)} = \Delta^{(1)} \ominus \mathcal{D}_5^{(1)}, \ \chi^{(3)} = \{5, 2, 0, 1, -1, 1, -1\},$$

$$\mathcal{D}_5^{(4)} = \Delta^{(2)} \ominus \mathcal{D}_5^{(2)}, \ \chi^{(4)} = \{4, -2, 0, 1, 1, 1, 0, -1\},$$

Các biểu diễn này đều là bất khả quy.

Tiếp theo, ta có

$$S_5 \downarrow S_4 : \left| \begin{array}{l} \mathcal{D}_5^{(3)} = \mathcal{D}_4^{(1)} \oplus \mathcal{D}_4^{(4)}, \\ \mathcal{D}_5^{(4)} = \mathcal{D}_4^{(2)} \oplus \mathcal{D}_4^{(5)}, \end{array} \right.$$

từ đó, ứng dụng định lý Frobenius, ta thấy rằng các biểu diễn

$\Delta^{(3)}$ với đặc biểu $\{10,0,2,-2,0,0,0\}$,

$\Delta^{(4)} \ominus \mathcal{D}_5^{(3)}$ với đặc biểu $\{11,1,-1,-1,1,-1,1\}$,

$\Delta^{(5)} \ominus \mathcal{D}_5^{(4)}$ với đặc biểu $\{11,-1,-1,-1,-1,1,1\}$

chỉ chứa các biểu diễn bất khả quy còn lại của nhóm S_5 (ngoài các biểu diễn $\mathcal{D}_5^{(i)}$ (i= 1, 2, 3, 4) đã biết).

Mặt khác, ứng dụng công thức (II, (10-6))

$$\frac{1}{G} \sum_p g_p \, | \, \chi_q \, |^2 = \sum_\mu a_\mu^2$$

cho các biểu diễn trên, ta thấy rằng ở vế trái ta được kết quả bằng 2, một điều chứng tỏ rằng mỗi một trong ba biểu diễn trên chỉ chứa hai trong ba biểu diễn bất khả quy còn lại nói trên của nhóm S_5. Thành thử, ta có thể viết

$$\Delta^{(3)} = \mathcal{D}_5^{(5)} \oplus \mathcal{D}_5^{(6)},$$

$$\Delta^{(4)} \ominus \mathcal{D}_5^{(3)} = \mathcal{D}_5^{(5)} \ominus \mathcal{D}_5^{(7)},$$

$$\Delta^{(5)} \ominus \mathcal{D}_5^{(4)} = \mathcal{D}_5^{(6)} \oplus \mathcal{D}_5^{(7)}.$$

Từ đó, các phép tính đơn giản cho các đặc biểu sau của các biểu diễn $\mathcal{D}_5^{(i)}$ (i = 5, 6, 7):

$$\chi^{(5)} = \{5, 1, 1, -1, 1, -1, 0\},$$

$$\chi^{(6)} = \{5, -1, 1, -1, -1, 1, 0\},$$

$$\chi^{(7)} = \{6, 0, -2, 0, 0, 0, 1\}.$$

Các biểu diễn này là bất khả quy. Bài tính tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm S_5 bằng phương pháp biểu diễn thượng cảm kết thúc. Ta tóm tắt các kết quả thu được thành bảng đặc biểu sau

S_5	$1\{1^5\}$	$10\{2,1^3\}$	$15\{2^2,1\}$	$20\{3,1^2\}$	$20\{3,2\}$	$30\{4,1\}$	$24\{5\}$
$\mathcal{D}_5^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1
$\mathcal{D}_5^{(2)}$	1	−1	1	1	−1	−1	1
$\mathcal{D}_5^{(3)}$	4	2	0	1	−1	0	−1
$\mathcal{D}_5^{(4)}$	4	−2	0	1	1	0	−1
$\mathcal{D}_5^{(5)}$	5	1	1	−1	1	−1	0
$\mathcal{D}_5^{(6)}$	5	−1	1	−1	−1	1	0
$\mathcal{D}_5^{(7)}$	6	0	2	0	0	0	1

§20. PHÉP PHÂN TÍCH KHÔNG GIAN BIỂU DIỄN THÀNH CÁC KHÔNG GIAN BẤT KHẢ QUY

Toán tử chiếu $P^i_{(\mu)}$.

Cho $\mathcal{M}$ là không gian biểu diễn của một biểu diễn $\mathcal{D}$ nào đó của một nhóm $\mathcal{G}$. Giả sử $\mathcal{D}$ phân tích thành tổng nhiều biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{G}$:

$$\mathcal{D} = \sum_\mu \oplus\, a_\mu\, \mathcal{D}^{(\mu)},\quad \chi = \sum_\mu a_\mu\, \chi^{(\mu)}.$$

Tương ứng với các phân tích này, ta hãy phân tích không gian biểu diễn $\mathcal{M}$ thành tổng trực tiếp của các không gian con bất khả quy $\mathcal{M}_\mu$ tương ứng với các biểu diễn bất khả quy (unita) $\mathcal{D}^{(\mu)}$.

Muốn thế, ta hãy lấy một vectơ tùy ý $\varphi \in \mu$ và xét vectơ

$$\varphi^i_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g D^{(\mu)*}_{ij}(g)\, T_g \varphi. \tag{20-1}$$

Với một giá trị tùy ý xác định của j thì, từ (20-1) với $h \in \mathcal{G}$, ta được

$$T_h \varphi^i_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g D^{(\mu)*}_{ij}(g)\, T_h T_g \varphi = \frac{n_\mu}{G} D^{(\mu)*}_{ik}(h^{-1}) \sum_g D^{(\mu)*}_{kj}(hg)\, T_{hg}\varphi =$$

$$= \frac{n_\mu}{G} D^{(\mu)*}_{ik}(h^{-1}) \sum_k D^{(\mu)*}_{kj}(g)\, T_g\varphi = \sum_g D^{(\mu)}_{ki}(h)\, \varphi^k_{(\mu)},$$

điều này chứng tỏ rằng $\varphi^i_{(\mu)}$ là các vectơ của không gian con bất khả quy $\mathcal{M}_\mu$, thực hiện biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$.

Tiếp theo, ta đưa ra toán tử

$$P^i_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g D^{(\mu)*}_{ii}(g)\, T_g. \tag{20-2}$$

Từ (20-1), ta được

$$P^i_{(\mu)} \varphi = \varphi^i_{(\mu)}. \tag{20-3}$$

Tác dụng toán tử $P^i_{(\mu)}$ vào vectơ $\varphi^j_{(\nu)}$, theo (20-2) và (9-4), ta được

$$P^i_{(\mu)} \varphi^j_{(\nu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g D^{(\mu)*}_{ii}(g)\, T_g\, \varphi^j_{(\nu)} =$$

$$= \frac{n_\mu}{G} \varphi^k_{(\nu)} \sum_g D^{(\mu)*}_{ii}(g)\, D^{(\nu)}_{kj}(g) = \varphi^k_{(\nu)} \delta_{ik} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu},$$

tức là ngoài tính chất (20-3), toán tử $P^i_{(\mu)}$, còn thỏa mãn tính chất

$$P^i_{(\mu)} \varphi^j_{(\nu)} = \varphi^i_{(\nu)} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}. \tag{20-4}$$

Các tính chất (20-3) và (20-4) là các tính chất của một phép chiếu.

Nói cụ thể hơn, theo (20-3), toán tử $P^i_{(\mu)}$ chiếu không gian toàn bộ các vectơ của $\mathcal{M}$ lên không gian con $\mathcal{M}_\mu$ gồm các vectơ $\varphi^i_{(\mu)}$. Mặt khác, theo (20-4), toán tử đó chiếu các không gian $\varphi^j_{(\nu)}$ thành không, $j \neq i$, $\mu \neq \nu$.

Vì thế, các toán tử $P^i_{(\mu)}$ gọi là các *toán tử chiếu*.

Toán tử chiếu $P_{(\mu)}$

Để xác định các toán tử chiếu $P^i_{(\mu)}$, cần phải biết các ma trận $D^{(\mu)}(g)$ của các biểu diễn. Nhưng trong nhiều trường hợp, ta chỉ biết được đặc biểu của các biểu diễn đó. Thành thử, cần tìm một công thức chiếu khác. Muốn thế, trong (20-1) cho $j = i$ và lấy tổng theo i, ta được

$$\varphi_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g \chi^{(\mu)*}(g)\, T_g\, \varphi, \tag{20-5}$$

với

$$\varphi_{(\mu)} = \sum_i \varphi^i_{(\mu)} \in \mathcal{M}_\mu. \tag{20-6}$$

Từ đó, ta có thể viết

$$P_{(\mu)}\varphi = \varphi_{(\mu)}, \tag{20-7}$$

toán tử $P_{(\mu)}$ có dạng

$$P_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g \chi^{(\mu)*}(g)\, T_g. \tag{20-8}$$

Dễ thấy rằng ngoài tính chất (20-7), toán tử $P_{(\mu)}$ còn thỏa mãn tính chất

$$P_{(\mu)}\varphi_{(\nu)} = \varphi_{(\mu)}\delta_{\mu\nu}. \tag{20-9}$$

Vì thế, toán tử này cũng gọi là *toán tử chiếu.*

Hai toán tử chiếu $P^i_{(\mu)}$ và $P_{(\mu)}$ đồng thời có ưu điểm và nhược điểm: Với toán tử $P^i_{(\mu)}$, theo (20-3), ta tìm được tất cả các vectơ cơ sở $\varphi^i_{(\mu)}$ của không gian $\mathcal{M}_\mu$, nhưng cần phải biết các ma trận biểu diễn, như đã nói ở trên. Còn với toán tử $P_{(\mu)}$ chỉ cần biết đặc biểu của các biểu diễn là đủ, nhưng, theo (20-7) ta lại chỉ tìm được vectơ $\varphi_{(\mu)}$ của không gian $\mathcal{M}_\mu$ mà không tính được cả hệ cơ sở của nó.

§21. PHÉP BIỂU DIỄN TÍCH TRỰC TIẾP

Hệ thống các biểu diễn bất khả quy của tích trực tiếp

Cho một tích trực tiếp $\mathcal{G}$ của hai nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2,$$

$$g = g_1 g_2,\ g_1 g_2 = g_2 g_1,\ g_1 \in \mathcal{G}_1,\ g_2 \in \mathcal{G}_2.$$

Giả sử

$$\Psi^i\ (i = 1, \ldots, n_\mu) \text{ và } \Phi^k\ (k = 1, \ldots, n_\nu)$$

là các hệ cơ sở của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(1\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(2\nu)}$ tương ứng của các nhóm con $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$.

Tập hợp $n_\mu \mathbf{n}_\nu$ hàm $\Psi^i \Phi^k$ làm thành cơ sở của một biểu diễn nào đó của nhóm $\mathcal{G}$, ký hiệu là $\mathcal{D}^{(\mu\times\nu)}$. Thực vậy, theo (3-2) ta có,

$$T_{g_1}\Psi^i = D^{(1\mu)}_{ki}(g_1)\Psi^k,$$

$$T_{g_2}\Phi^j = D^{(2\nu)}_{lj}(g_2)\Phi^l,$$

từ đó, ta được biểu diễn cần tìm

$$T_{g_1 g_2}\Psi^i\Phi^j = T_{g_1}\Psi^i T_{g_2}\Phi^j = D^{(1\mu)}_{ki}(g_1)\, D^{(2\nu)}_{lj}(g_2)\,\Psi^k\Phi^l,$$

với ma trận thực hiện biểu diễn có dạng

$$D^{(\mu\times\nu)}_{kl\,;\,ij}(g_1 g_2) = D^{(1\mu)}_{ki}(g_1) D^{(2\nu)}_{lj}(g_2) \tag{21-1}$$

hay là

$$D^{(\mu\times\nu)}(g_1 g_2) = D^{(1\mu)}(g_1) \otimes D^{(2\nu)}(g_2). \tag{21-2}$$

Như thế các ma trận biểu diễn tích trực tiếp hai nhóm bằng tích trực tiếp các ma trận biểu diễn các nhân tử.

Có thể chứng minh rằng biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu\times\nu)}$ của nhóm $\mathcal{G}$ là bất khả quy khi $\mathcal{D}^{(1\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(2\nu)}$ là các biểu diễn bất khả quy tương ứng của các nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$ và, bằng các nhân trực tiếp các biểu diễn bất khả quy như thế của các nhóm $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$, ta sẽ thu được tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$.

Đặc biểu

Trong (21-1) cho k = i và l = j rồi lấy tổng theo i và j, ta được đặc biểu của biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu\times\nu)}$

$$\chi^{(\mu\times\nu)}(g_1g_2) = \chi^{(1\mu)}(g_1)\,\chi^{(2\nu)}(g_2). \tag{21-3}$$

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_{3d} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{C}_i$

Cho nhóm $\mathcal{D}_3$ với các biểu diễn (12-5). Ngoài ra, ta cũng có hệ thống các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{C}_i$ (xem (2-3))

$\mathcal{C}_i$	e	I
$\mathcal{A}_g$	1	1
$\mathcal{A}_u$	1	−1

Mặt khác, do phép I luôn luôn giao hoán với mọi phép quay, nên ta có thể lập tích trực tiếp

$$\mathcal{D}_{3d} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{C}_i\,.$$

Theo kết quả trên, hệ thống các biểu diễn bất khả quy của tích trực tiếp $\mathcal{D}_{3d}$ gồm tích trực tiếp các ma trận thực hiện các biểu diễn bất khả quy của các nhóm $\mathcal{D}_3$ và $\mathcal{C}_i$. Đặc biểu tính theo công thức (21-3), ($a = C_x$, $d = C$).

$\mathcal{D}_{d3}$	e	$2C_3$	$3C^x$	I	$2(S_3 \equiv IC_3)$	$3(\sigma_d \equiv IC_x)$
$\mathcal{A}_{1g}$	1	1	1	1	1	1
$\mathcal{A}_{2g}$	1	1	−1	1	1	−1
$\mathcal{E}_g$	2	−1	0	2	−1	0
$\mathcal{A}_{1u}$	1	1	1	−1	−1	−1
$\mathcal{A}_{2u}$	1	1	−1	−1	−1	1
$\mathcal{E}_u$	2	−1	0	−2	1	0

Trong bảng trên ta đã dùng các ký hiệu:

$$\mathcal{A}_{ig} \equiv \mathcal{A}_i \otimes \mathcal{A}_g\,,\ \mathcal{A}_{iu} \equiv \mathcal{A}_i \otimes \mathcal{A}_u\,,\ (i = 1, 2)$$

$$\mathcal{E}_g \equiv \mathcal{E} \otimes \mathcal{A}_g\,,\ \mathcal{E}_u \equiv \mathcal{E} \otimes \mathcal{A}_u\,.$$

§22. PHÉP BIỂU DIỄN TÍCH NỬA TRỰC TIẾP

Chúng ta chỉ giới hạn ở những tích nửa trực tiếp (I § 14)

$$\mathcal{S} = \mathcal{G} \otimes \mathcal{A},\ \ \mathcal{A} \subset \mathrm{Aut}\mathcal{G}\,, \tag{22-1}$$

$$g = (A \mid x)\,,\ x \in \mathcal{G}\,,\ A \in \mathcal{A},$$

trong đó $\mathcal{G}$ là một nhóm giao hoán.

Trước hết, ta hãy chọn không gian $\mathcal{L}$ các hàm vô hướng ψ thực hiện biểu diễn của nhóm giao hoán.

$$\psi(x_1 + x_2) = \psi(x_1)\,\psi(x_2)\,,\quad \psi \in \mathcal{L}\,. \tag{22-2}$$

Tiếp theo, ta xác định toán tử.

$$T_A \psi(x) = \psi(A^{-1}x)\,,\quad \psi \in \mathcal{L}, \tag{22-3}$$

thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm $\mathcal{A}$ trong không gian $\mathcal{L}$ (xem § 3). Bây giờ, ta hãy phân không gian $\mathcal{L}$ thành các không gian đồng nhất (xem § 3) đối với nhóm các toán tử T_A. Gọi các không gian đó là Φ, cố định một không gian Φ nào đó và ký hiệu các hàm thuộc không gian đó là $\psi = \varphi$. Thế thì, ta định nghĩa toán tử T_g như sau

$$T_g f(\varphi) = \varphi(x) f(T_A^{-1}\varphi),\quad \varphi,\ T_A^{-1}\varphi \in \Phi \subset \mathcal{L} \tag{22-4}$$

tác dụng trong không gian các hàm f xác định trên Φ.

Ta hãy chứng minh rằng các toán tử T_g thực hiện một biểu diễn nào đó của tích nửa trực tiếp $\mathcal{S}$. Quả vậy, theo (22-4), ta có

$$T_{g_1} T_{g_2} f(\varphi) = T_{g_1}[T_{g_2} f(\varphi)] = T_{g_1} F(\varphi), \tag{22-5}$$

với

$$F(\varphi) = \varphi(x_2)\, f(T_{A_2}^{-1}\varphi).$$

Nhưng lại theo (22-4), vế phải của (22-5) bằng

$$T_{g_1} F(\varphi) = \varphi(x_1)\, F(T_{A_1}^{-1}\varphi) = \varphi(x_1)\, T_{A_1}^{-1}\varphi(x_2)\, f(T_{A_2}^{-1} T_{A}^{-1}\varphi). \tag{22-6}$$

Tiếp theo, trong (22-3) đổi $x \to Ax$, ta được

$$T_A^{-1}\varphi(x) = \varphi(Ax).$$

Thành thử, vế phải của (22-6) bằng

$$\varphi(x_1)\,\varphi(A_1 x_2)\, f(T_{A_1}^{-1} T_{A_2}^{-1}\varphi),$$

hay, theo (22-2), ta lại được giá trị

$$\varphi(A_1 x_2 + x_1)\, f(T_{A_1 A_2}^{-1}\varphi).$$

Tóm lại, ta có đẳng thức

$$T_{g_1} T_{g_2} f(\varphi) = \varphi(A_1 x_2 + x_1)\, f(T_{A_1 A_2}^{-1}\varphi). \tag{22-7}$$

Nhưng theo I(14-3), khi nhóm $\mathcal{G}$ có tính chất giao hoán, ta có

$$g_1 g_2 = (A_1 \mid x_1)(A_2 \mid x_2) = (A_1 A_2 \mid A_1 x_2 + x_1),$$

và điều này chứng tỏ rằng vế phải của (22-7) chính là

$$T_{g_1 g_2} f(\varphi),$$

tức là

$$T_{g_1} T_{g_2} = T_{g_1 g_2},$$

đó là điều phải chứng minh.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [9], [10], [11], [14], [17]

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử

Đọc §1 (không đọc phép biểu diễn trung thành); §2; §3 (không đọc không gian đồng nhất, trong phần biểu diễn Tg bắt đầu đọc từ: Gọi $\mathcal{L}$ là tập hợp tất cả các hàm $\psi(x)$ có đối số x thuộc...); §4; §5 §6 (công nhận hai bổ đề Schur); §7 (công nhận định lý Maschke); §8 ÷ §11; §12 (công nhận đẳng thức 12-1); §13 (công nhận hệ thức 13-1); §14 (chỉ cần nắm định nghĩa của các biểu diễn liên hợp phức và đối ngẫu của một biểu diễn nào đó): §16 ÷ §18; §20; §21.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể

Đọc như A

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử

Đọc như A và đọc thêm §19

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân

Đọc toàn chương (trừ tiết §15)

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản

Đọc toàn chương

CHƯƠNG III

CÁC NHÓM ĐIỂM

§1. CÁC PHẦN TỬ CỦA CÁC NHÓM ĐIỂM

Định nghĩa nhóm điểm

Các nhóm con hữu hạn của nhóm trực giao O(3) gọi là các *nhóm điểm*.

Các nhóm điểm xuất hiện khi nghiên cứu tính đối xứng của các phân tử, tinh thể. Sự nghiên cứu này cho phép tiến hành phân loại các mức năng lượng êlectrôn, các mức năng lượng toàn phần của hệ, các dao động vuông góc v.v...

Các phần tử của các nhóm điểm

Các phần tử quay

Do tính chất hữu hạn của các nhóm điểm, rõ ràng ta chỉ có những phép quay với những góc $2\pi/n$, ký hiệu là C_n, (n là số nguyên) và các lũy thừa C_n^k, ($k = 0, 1, \ldots, n-1$). Trục quay cũng ký hiệu là C_n.

Các phép quay có định thức bằng đơn vị.

Các phần tử có chứa I (có chứa phép nghịch đảo không gian)

Ta xét một số phần tử đặc biệt sau:

Phần tử

$$\sigma = Ig(\pi) = g(\pi)I, \tag{1-1}$$

gọi là *phép phản chiếu* qua mặt phẳng σ như đã thấy ở nhóm $\mathcal{C}_s$.

Phần tử

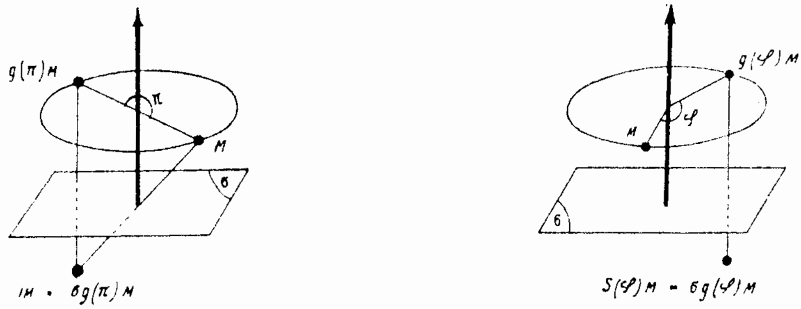
$$S(\varphi) = \sigma g(\varphi) = g(\varphi)\sigma, \tag{1-2}$$

tích của một phép quay quanh một trục thẳng góc với một mặt phẳng σ nào đó và một phép phản chiếu σ qua mặt phẳng đó gọi là *phép quay gương*. Trục quay gọi là trục *quay gương*.

Cho hai trục đối xứng k và l của nhóm $\mathcal{G}$. Nếu có một phần tử $g \in \mathcal{G}$ sao mà $k = gl$, thì hai trục đối xứng k và l gọi là *tương đương* với nhau. Các mặt phẳng *phản chiếu tương đương* với nhau cũng định nghĩa tương tự như thế.

Từ (1-1) và (1-2) suy ra

$$S(\varphi) = g(\varphi + \pi)I = Ig(\varphi + \pi). \tag{1-3}$$



Hình 3-1

Phân lớp các nhóm điểm

Ta xét phần tử sau của nhóm điểm $\mathcal{G}$

$$C_l(\psi) = gC_k(\varphi)g^{-1},\ g \in \mathcal{G} \subset SO(3),$$

liên hợp với $C_k(\varphi)$ do g, các ký hiệu l và k trỏ các trục quay. Chọn một cơ sở e_i nào đó và gọi $\{a_{ik}\}$ là ma trận của $C_k(\varphi)$ theo cơ sở đó:

$$C_k(\varphi)\, e_i = a_{ji}\, e_j.$$

Nếu

$$e'_j = ge_j,\ e_j = g^{-1} e'_j,$$

thì

$$C_l(\psi)\, e'_j = gC_k(\varphi)g^{-1}e'_j = gC_k(\varphi)e_j = ga_{ij}\, e_i = a_{ij}\, e'_j.$$

Như thế, trong cơ sở e_i', phần tử liên hợp C_l có ma trận giống ma trận của phần tử C_k trong cơ sở e_i. Nhưng vì ma trận của phép quay hoàn toàn xác định góc quay và vị trí của vectơ quay so với các vectơ cơ sở, nên kết quả vừa rồi chứng tỏ rằng $\Psi = \varphi$, vị trí của vectơ quay l so với cơ sở e'_j là giống như vị trí của vectơ k so với cơ sở e_j, nghĩa là $l = gk$. Tóm lại, ta có

$$gC_k(\varphi)\, g^{-1} = C_{gk}(\varphi). \tag{1-4}$$

Tiếp theo, với $h = Ig$, $g \in SO(3)$, ta có

$$hC_k(\varphi)h^{-1} = IgC_k(\varphi)g^{-1}I = IC_{gk}(\varphi)I = C_{gk}(\varphi) = C_{hIk}(\varphi)$$

tức là

$$hC_k(\varphi)h^{-1} = C_{-hk}(\varphi), \tag{1-5}$$

do $Ik = -k$.

Từ các kết quả trên, ta kết luận:

Các phép quay cùng một góc quanh những trục tương đương với nhau là thuộc cùng một lớp.

Tương tự như thế, có thể chứng minh rằng

$$gS_k(\varphi)g^{-1} = S_{gk}(\varphi), \tag{1-6}$$

$$hS_k(\varphi)\, h^{-1} = S_{-hk}(\varphi). \tag{1-7}$$

Như thế, các phép quay gương cùng một góc quanh những trục tương đương với nhau là thuộc cùng một lớp. Nói riêng, các phép phản chiếu qua những mặt phẳng tương với nhau là thuộc cùng một lớp.

Tiếp theo, ta nhận xét:

1. Nếu $g = C_2$ mà trục C_2 thẳng góc với k, thì theo (1-4) ta được

$$C_2C_k(\varphi)C_2^{-1} = C_{C_2k}(\varphi) = C_{-k}(\varphi) = C_k(-\varphi) = C_k^{-1}(\varphi),$$

tức là $C_k(\varphi)$ liên hợp với $C_k^{-1}(\varphi)$; nói chung $C_k^m(\varphi)$ liên hợp với $C_k^{-m}(\varphi)$.

2. Nếu có tồn tại một mặt phẳng phản chiếu σ nào đó đi qua trục k thì, theo (1-6), với $h = \sigma$, ta có

$$\sigma C_k(\varphi)\sigma = C_{-\sigma k}(\varphi) = C_{-k}(\varphi) = C_k(-\varphi) = C_k^{-1}(\varphi)$$

tức là

$$C_k^m(\varphi) \text{ liên hợp với } C_k^{-m}(\varphi).$$

Các trục k có các tính chất trên gọi là *trục hai phía*. Từ đó ta kết luận:

Nếu có tồn tại các trục hai phía thì các phần tử quay quanh các trục đó và phần tử nghịch đảo với nó cũng thuộc cùng một lớp.

Phần tử đối xứng

Các trục quay và các mặt phẳng phản chiếu của một nhóm gọi là các *trục đối xứng* và *mặt đối xứng* của nhóm. Ngoài ra, nhóm có thể có tâm đối xứng.

Trục đối xứng C_n cấp cao nhất (tức là có n lớn nhất) thường vẽ thẳng đứng.

Mặt σ đi qua trục cấp cao nhất ký hiệu là σ_v. Mặt σ thẳng góc với trục đó ký hiệu là σ_h.

§ 2. NHÓM $\mathscr{C}_n$

Định nghĩa

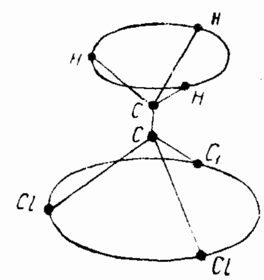
Theo định nghĩa, nhóm $\mathscr{C}_n$ là nhóm gồm tất cả các phép quay làm hình tháp đều đáy có n cạnh trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng

Một trục C_n.

Ví dụ

Như đã định nghĩa ở § 17 chương I, nhóm đối xứng của các phân tử gồm những phép quay làm phân tử trùng với chính nó. Từ đó, dễ thấy rằng phân tử $C_2H_3Cl_3$ với cấu hình không gian ở hình (3-2) có nhóm đối xứng là nhóm $\mathscr{C}_3$.



$C_2H_3Cl_3 : \mathscr{C}_3$

Hình 3-2

Lớp

Nhóm này là một nhóm Abel, nên các lớp trùng với các phần tử của nhóm.

Biều diễn

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm tuần hoàn giao hoán $\mathcal{C}_n$ đều một chiều. Các nhóm thực hiện biểu diễn, như đã thấy ở II (2-3), là n nhóm tuần hoàn điển hình $Z_n^{(m)}$.

Đặc biểu

Ta hãy tìm bảng đặc biểu chẳng hạn cho nhóm $\mathcal{C}_3$. Các nhóm $Z_3^{(m)}$ tương ứng là

$$Z_3^{(0)} = \{1\},\ (m = 0),$$

$$Z_3^{(1)} = \{1, \varepsilon, \varepsilon^2\},\ (m = 1),$$

$$Z_3^{(2)} = 1, \{\varepsilon^2, \varepsilon\},\ (m = 2),\ \varepsilon = \exp 2\pi\, i/3 .$$

$\mathcal{C}_3$	e	C_3	C_3^2
$\mathcal{A}$: z	1	1	1
$\mathcal{E}$: x + iy	1	ε	ε^2
	1	ε^2	ε

Nói chung các biểu diễn liên hợp phức với nhau, bất khả quy về mặt toán học, được gộp lại thành một biểu diễn « bất khả quy » về mặt vật lý và có chiều gấp đôi. Sở dĩ như vậy là do tính chất đối xứng với phép nghịch đảo thời gian $t \to -t$ trong cơ học lượng tử (sẽ xét sau này).

§ 3. NHÓM $\mathcal{C}_{nv}$

Định nghĩa

Theo định nghĩa, nhóm $\mathcal{C}_{nv}$ là nhóm gồm tất cả các phần tử của nhóm O (3) làm hình tháp đều đáy có n cạnh trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng

Một trục C_n,

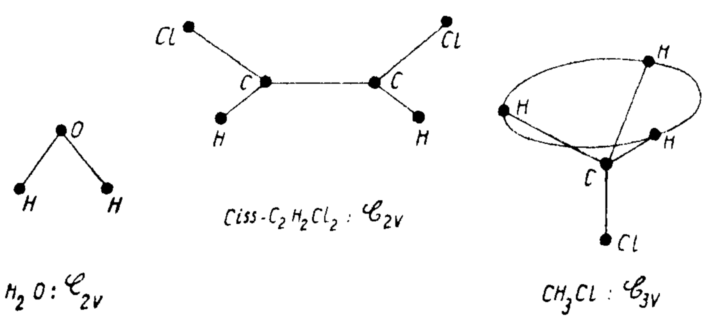
n mặt σ_v cách đều nhau.

Nhóm $\mathcal{C}_{nv}$ là không giao hoán. Quả vậy, có thể chứng minh rằng

$$C_n^k \sigma_v = \sigma_v C_n^{-k}. \tag{3-1}$$

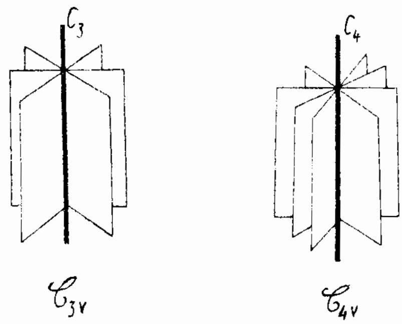
Ví dụ

Phân tử H_2O có nhóm đối xứng gồm nhóm $\mathcal{C}_2$ và hai mặt phẳng phản chiếu σ_v thẳng góc với nhau, nghĩa là một nhóm có một trục đối xứng hạng hai và hai mặt đối xứng thẳng đứng. Nhóm này là nhóm $\mathcal{C}_{2v}$.



Hình 3-3

Tương tự như thế, phân tử CH_3Cl có nhóm đối xứng gồm một trục hạng ba và ba mặt đối xứng thẳng đứng, cách đều nhau, mỗi mặt đều đi qua C, Cl và một H. Nhóm này là nhóm $\mathcal{C}_{3v}$.



Hình 3-4

Lớp

Theo § 1, trục C_n là một trục hai phía.

Nếu $n = 2p + 1$, thì các mặt đối xứng là tương đương với nhau.

Nếu $n = 2p$ thì các mặt đối xứng chia làm hai loại, loại đánh số lẻ tương đương với nhau, loại đánh số chẵn tương đương với nhau.

Thành thử ta được kết quả sau

Nhóm $\mathcal{C}_{2p+1,v}$ có $p + 2$ lớp:

$$e, \quad \{\sigma_v\} \quad \left\{C^{k}_{2p+1}, \; C^{-k}_{2p+1}\right\}, \; (k = 1, 2, \ldots, p).$$

Nhóm $\mathcal{C}_{2p,v}$ có $p + 3$ lớp:

$$e, \{\sigma_{v'}\}, \{\sigma_{v''}\}, C^{p}_{2p}, \left\{C^{p}_{2p}, \; C^{p}_{2p}\right\}, \; (k = 1, 2, \ldots, p - 1).$$

trong đó ký hiệu $\sigma_{v'}$, $(\sigma_{v''})$ đai diện cho lớp các σ_v chẵn (lẻ).

Biểu diễn

Gọi ψ_m là cơ sở của các biểu diễn một chiều của nhóm giao hoán $\mathcal{C}_n$:

$$C^{k}_{n}\psi_m = \exp\frac{2\pi\, kim}{n}\,\psi_m, \; (m = 1, \ldots, n - 1). \tag{2-2}$$

Mặt khác, chọn các vectơ ψ_{-m} có tính chất

$$C^{k}_{n}\psi_{-m} = \exp\left[-\frac{2\pi\, kim}{n}\right]\psi_{-m}. \tag{2-3}$$

Thế thì, theo (2-1), ta có

$$\sigma_v\,\psi_m = \psi_{-m}. \tag{2-4}$$

Như thế, các cặp vectơ $\{\psi_m, \; \psi_{-m}\}$ làm thành những không gian thực hiện những biểu diễn bất khả quy hai chiều của nhóm.

Ta hãy tính số biểu diễn bất khả quy hai chiều này.

Khi $n = 2p$, các vectơ ψ_m và ψ_{-m} là độc lập với nhau, nếu $m \neq 0$ và $m \neq p$. Thành thử, trong trường hợp này, chúng ta có thể lập $2p - 2$ biểu diễn hai chiều có dạng

$$D(e) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},\ D(C_n^k) = \begin{bmatrix} \exp \dfrac{2\pi kim}{n} & 0 \\ 0 & \exp\left[-\dfrac{2\pi kim}{n}\right] \end{bmatrix}$$

$$D(\sigma_v) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{2-5}$$

Nhưng vì các phần tử C_n^k và C_n^{-k} thuộc cùng một lớp, tập hợp các ma trận trên chỉ cho $p - 1$ biểu diễn bất khả quy hai chiều không tương đương với nhau. Vì số lớp bằng $p + 3$ nên còn lại 4 biểu diễn bất khả quy một chiều mà ta có thể tìm bằng các phương pháp khác.

Khi $n = 2p + 1$, các ma trận (2-5) cho phép lập $2p$ biểu diễn hai chiều, trong đó tất cả là p biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau. Vì trong trường hợp này số lớp bằng $p + 2$, nên cần tìm 2 biểu diễn một chiều còn lại bằng các phương pháp khác.

Đặc biểu

Ta hãy lấy bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ để làm ví dụ.

$\mathcal{C}_{3v}$	e	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\mathcal{A}_1$; z	1	1	1
$\mathcal{A}_2$	1	1	−1
$\mathcal{E}$; (x, y)	2	−1	0

§ 4. NHÓM $\mathcal{C}_{nh}$

Định nghĩa

Đó là các nhóm

$$\mathcal{C}_{nh} = \mathcal{C}_n \otimes \mathcal{C}_s. \tag{4-1}$$

Phần tử đối xứng

Một trục C_n,

Một mặt σ_h.

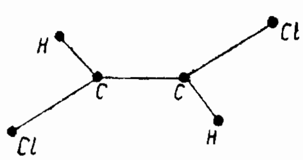
Số phần tử của nhóm: $2n$.

Khi $n = 2p$, do (xem (1-1))

$$C_{2p}^p \sigma_h = C_2 \sigma_h = I,$$

nhóm có chứa phần tử I. Từ đó, ta được

$$\mathcal{C}_{2p,h} = \mathcal{C}_{2p} \otimes \mathcal{C}_i. \tag{4-2}$$



Trans-$C_2H_2Cl_2$: $\mathcal{C}_{2h}$

Hình 3-5

Ví dụ

Phân tử Trans—$C_2H_2Cl_2$ có nhóm đối xứng gồm một trục hạng hai và một mặt đối xứng σ_h (mặt của phân tử)

Lớp

Do tính chất một tích trực tiếp, nhóm $\mathcal{C}_{nh}$ có số lớp bằng hai lần số lớp của nhóm $\mathcal{C}_n$, tức là $2n$ lớp.

Biểu diễn và đặc biểu

Nhóm $\mathcal{C}_{nh}$ có những biểu diễn và đặc biểu của một tích trực tiếp thông thường.

§ 5. NHÓM $\mathcal{S}_{2n}$

Định nghĩa

Nhóm $\mathcal{S}_{2n}$ là nhóm điểm có một trục đối xứng gương hạng 2n. Nhóm này là một nhóm tuần hoàn.

Số phần tử của nhóm : 2n.

Khi $n = 2p + 1$, do

$$(S_{4p+2})^{2p+1} = \sigma_h C_2 = I$$

nhóm có chứa phép I. Từ đó, ta được

$$\mathcal{S}_{4p+2} = \mathcal{C}_{2p+1} \otimes \mathcal{C}_i, \qquad (5\text{-}1)$$
$$\mathcal{S}_2 = \mathcal{C}_i.$$

Biểu diễn

Các biểu diễn bất khả quy tính theo phương thức biểu diễn các nhóm tuần hoàn.

§ 6. NHÓM $\mathcal{D}_n$

Định nghĩa

Nhóm $\mathcal{D}_n$ là nhóm gồm tất cả các phép quay làm hình lăng trụ đều n cạnh trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng

Một trục C_n,

n trục C_2 thẳng góc với C_n và cách đều nhau.

Lớp

Trục C_n là một trục hai phía.

Khi $n = 2p + 1$, các trục C_2 đều tương đương với nhau.

Khi $n = 2p$, các trục C_2 chia làm hai lớp, lớp gồm các trục đánh số chẵn và lớp gồm các trục đánh số lẻ.

Từ đó, ta được các kết quả sau :

Nhóm $\mathcal{D}_{2p+1}$ có $p + 2$ lớp :

$$e, \ \{C^k_{2p+1}, C^{-k}_{2p+1}, (k = 1, 2, \ldots, p)\}, \ \{C_2\}.$$

Nhóm $\mathcal{D}_{2p}$ có $p + 3$ lớp :

$$e, \ C^p_{2p} = C_2, \ \{C^k_{2p}, C^{-k}_{2p}, (k \neq p)\}, \ \{C_2\}, \ \{C_{2'}\}.$$

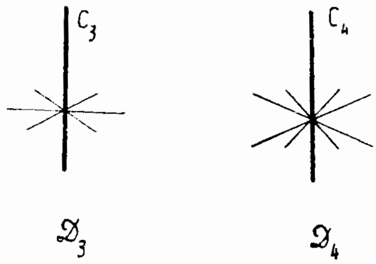
trong đó ký hiệu C_2 ($C_{2'}$) đại diện cho lớp các C_2 chẵn (lẻ).

Biểu diễn

Dễ dàng chứng minh rằng

$$\mathcal{D}_n \approx \mathcal{C}_{nv} : C^k_n \leftrightarrow C^k_n, \ C_2 \leftrightarrow \sigma_v,$$

từ đó, các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_n$ trùng với các biểu diễn của nhóm $\mathcal{C}_{nv}$.



Hình 3-6

Đặc biểu

Với nhóm $\mathcal{D}_2$ chẳng hạn, ta có bảng đặc biểu ở II (18-2).

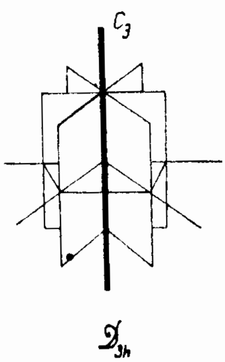
§7. NHÓM $\mathcal{D}_{nh}$

Định nghĩa

Nhóm $\mathcal{D}_{nh}$ là nhóm gồm tất cả các phần tử của nhóm O(3) làm hình lăng trụ đều đáy có n cạnh, trùng với chính nó.

Ta có

$$\mathcal{D}_{nh} = \mathcal{D}_n \otimes \mathcal{C}_s \tag{7-1}$$



Hình 3-7

Phần tử đối xứng

Các phần tử đối xứng của nhóm $\mathcal{D}_n$,

Một mặt đối xứng σ_h.

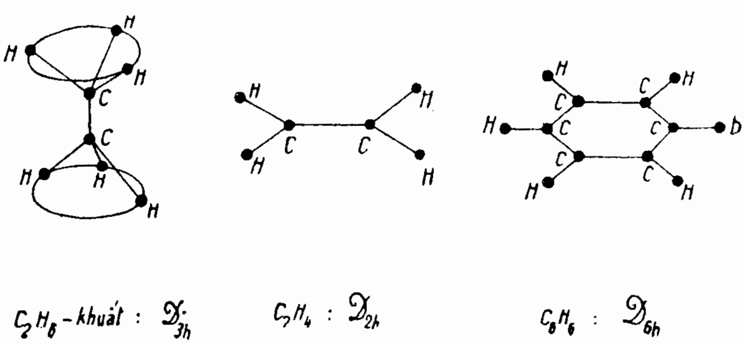
Hai loại phần tử đối xứng trên kéo theo n mặt đối xứng σ_v tương ứng đi qua các trục C_2.

Khi n = 2p dễ thấy rằng nhóm có chứa phần tử I, từ đó ta được

$$\mathcal{D}_{2p'h} = \mathcal{D}_{2p} \oplus \mathcal{C}_i. \tag{7-2}$$

Ví dụ

Phân tử C_2H_6 — khuất có các trục đối xứng của nhóm $\mathcal{D}_3$ và một mặt phẳng đối xứng σ_h. Phân tử C_6H_6 có các trục đối xứng của nhóm $\mathcal{D}_6$ và một mặt đối xứng σ_h. Phân tử C_2H_6 có trục đối xứng của $\mathcal{D}_2$ và một mặt σ_h. Các nhóm đối xứng tương ứng là các nhóm $\mathcal{D}_{3h}$, $\mathcal{D}_{6h}$ và $\mathcal{D}_{2h}$.



Hình 3-8

Lớp

Số lớp của nhóm bằng hai lần số lớp của nhóm $\mathcal{D}_n$.

Biểu diễn

Các biểu diễn tính theo phương thức của biểu diễn tích trực tiếp.

Có thể chứng minh rằng

$$\mathcal{D}_{3h} \approx \mathcal{D}_6 \approx \mathcal{C}_{6v}.$$

§ 8. NHÓM $\mathcal{D}_{nd}$

Định nghĩa

Nhóm $\mathcal{D}_{nd}$ là nhóm gồm các phần tử đối xứng của nhóm $\mathcal{D}_n$ và n mặt đối xứng — ký hiệu là σ_d — làm thành các mặt phân giác của các trục C_2 kề nhau.

Ta hãy chứng minh rằng trục hạng n biến thành trục quay gương hạng 2n. Quả vậy, mọi phép quay C_2 quanh các trục nằm ngang hạng hai đều có thể viết dưới dạng

$$C_2 = \sigma_h \sigma_v,$$

trong đó σ_v là phép phản chiếu qua mặt phẳng thẳng đứng đi qua trục hạng hai đang xét. Thành thử, phần tử $C_2\sigma_d$ có thể viết dưới dạng

$$C_d\sigma_2 = \sigma_h\sigma_v\sigma_d.$$

Nhưng vì các mặt phản chiếu σ_v và σ_d (đi qua trục hạng n) làm với nhau những góc

$$\frac{\pi}{2n}(2k+1) \quad , \quad (k = 1, 2, \ldots, n-1)$$

(do các mặt phẳng phản chiếu σ_d làm với nhau một góc $\pi/2n$), nên ta được

$$\sigma_v\sigma_d = C_{2n}^{2k+1}.$$

Thành thử

$$C_2\sigma_d = \sigma_h C_{2n}^{2k+1} = S_{2n}^{2k+1}.$$

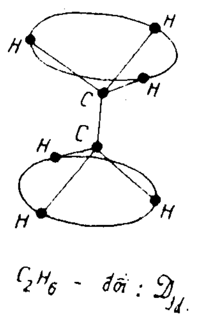
nghĩa là trục hạng n của nhóm biến thành trục quay gương hạng 2n.

Ta lưu ý rằng

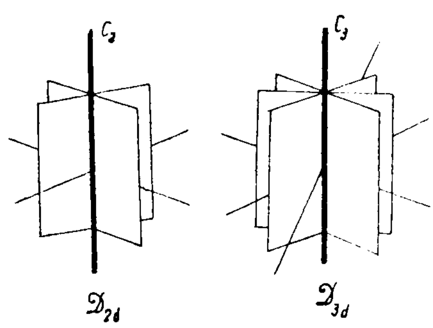
$$\mathcal{D}_{2p+1,d} = \mathcal{D}_{2p+1} \otimes \mathcal{C}_i. \qquad (7\text{-}1)$$

Ví dụ

Phân tử C_2H_6 — đối có nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{D}_{3d}$.



Hình 3-9



Hình 3-10

Lớp

Các trục C_2 là tương đương với nhau (biến thành nhau bởi các σ_d). Trục quay gương lại là một trục hai phía. Như thế, nhóm $\mathcal{D}_{nd}$ có n + 3 lớp

$$e, \{S_{2n}, S_{2n}^{2n-1}\}, ..., \{S_{2n}^{n-1}, S_{2n}^{n+1}\}, S_{2n}^{n}, \{\sigma_d\} \text{ và } \{C_2\}.$$

§ 9. CÁC NHÓM $\mathcal{T}$, $\mathcal{T}_d$ VÀ $\mathcal{T}_h$

Nhóm $\mathcal{T}$

Theo định nghĩa, nhóm $\mathcal{T}$ là nhóm gồm tất cả các phép quay làm hình tứ diện đều trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng:

Bốn trục C_3 đi qua một đỉnh và tâm điểm của mặt đối diện,

Ba trục C_2 đi qua trung điểm các cạnh đối diện,

Số phần tử của nhóm: 12

Các trục C_3 là tương đương với nhau, các trục C_2 cũng thế.

Từ đó, ta thấy nhóm $\mathcal{T}$ có 4 lớp

$$e, 3C_2, 4C_3, 4C_3^2.$$

Nhóm $\mathcal{T}_d$

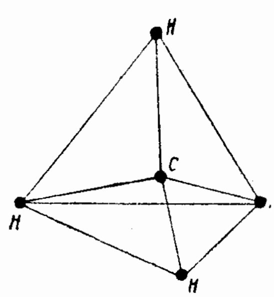
Tập hợp tất cả các phần tử của nhóm O(3) làm tứ diện đều trùng với chính nó làm thành một nhóm gọi là nhóm $\mathcal{T}_d$, có 24 phần tử.

Nhóm $\mathcal{T}_d$ là nhóm đối xứng của các phân tử tứ diện như CH_4.

Nhóm $\mathcal{T}_d$ có 5 lớp:

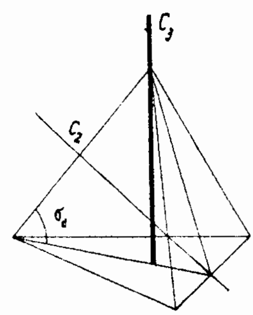
$$e, 8C_3, 3S_4^2, 6\sigma_d, 6S_4.$$

trong đó $8C_3$ là lớp gồm các phép C_3 và C_3^2 quanh bốn trục hai phía C_3 tương đương với nhau, $6\sigma_d$ là lớp gồm sáu phép phản chiếu qua sáu mặt phẳng tương đương với nhau, đi qua một cạnh và tâm điểm của cạnh đối diện. Ngoài ra, nhóm có 3 trục S_4 đi qua tâm điểm các cạnh đối diện, các phần tử tương ứng với các trục này chia làm hai lớp, lớp $3S_4^2$ và lớp $6S_4$ (các trục S_4 đều là trục hai phía)



CH_4 : $\mathcal{T}_d$

Hình 3-11



$\mathcal{T}_d$

Hình 3-12

Nhóm $\mathcal{T}_h$

Theo định nghĩa, đó là tích trực tiếp

$$\mathcal{T}_h = \mathcal{T} \otimes \mathcal{C}_i.$$

§ 10. CÁC NHÓM $\mathcal{O}$, $\mathcal{O}_h$

Nhóm $\mathcal{O}$

Theo định nghĩa, nhóm $\mathcal{O}$ là nhóm gồm tất cả các phép quay làm hình lập phương trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng:

Ba trục C_4 đi qua các mặt đối diện,

Bốn trục C_3 đi qua các đỉnh đối diện,

Sáu trục C_2 đi qua các cạnh đối diện.

Số phần tử của nhóm: 24.

Tất cả các trục đồng danh đều tương đương với nhau và các trục C_3 và C_4 là hai phía.

Từ đó, nhóm $\mathcal{O}$ có 5 lớp:

$$e,\ 8C_3,\ 3C_4^2,\ 6C_2,\ 6C_4.$$

Nhóm $\mathcal{O}$ đẳng cấu với nhóm $\mathcal{T}_d$.

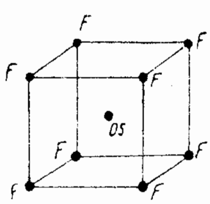
Nhóm $\mathcal{O}_h$

Nhóm $\mathcal{O}_h$ là nhóm gồm tất cả các phần tử của nhóm O(3) làm hình lập phương trùng với chính nó. Có thể chứng minh rằng

$$\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \otimes \mathcal{C}_i.$$

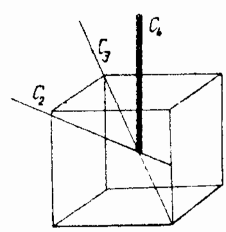
Số phần tử của nhóm: 48.

Phân tử OsF_8 có nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{O}_h$.



$OsF_8 : \mathcal{O}_h$

Hình 3-13



$\mathcal{O}$

Hình 3-14

Nhóm $\mathcal{T}_h$

Theo định nghĩa, đó là tích trực tiếp

$$\mathcal{T}_h = \mathcal{T} \otimes \mathcal{C}_i.$$

§ 10. CÁC NHÓM $\mathcal{O}$, $\mathcal{O}_h$

Nhóm $\mathcal{O}$

Theo định nghĩa, nhóm $\mathcal{O}$ là nhóm gồm tất cả các phép quay làm hình lập phương trùng với chính nó.

Phần tử đối xứng:

Ba trục C_4 đi qua các mặt đối diện,

Bốn trục C_3 đi qua các đỉnh đối diện,

Sáu trục C_2 đi qua các cạnh đối diện.

Số phần tử của nhóm: 24.

Tất cả các trục đồng danh đều tương đương với nhau và các trục C_3 và C_4 là hai phía.

Từ đó, nhóm $\mathcal{O}$ có 5 lớp:

$$e,\ 8C_3,\ 3C_4^2,\ 6C_2,\ 6C_4.$$

Nhóm $\mathcal{O}$ đẳng cấu với nhóm $\mathcal{T}_d$.

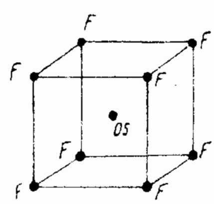
Nhóm $\mathcal{O}_h$

Nhóm $\mathcal{O}_h$ là nhóm gồm tất cả các phần tử của nhóm O(3) làm hình lập phương trùng với chính nó. Có thể chứng minh rằng

$$\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \otimes \mathcal{C}_i.$$

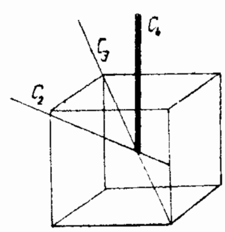
Số phần tử của nhóm: 48.

Phân tử OsF_8 có nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{O}_h$.



OsF_8 : $\mathcal{O}_h$

Hình 3-13



$\mathcal{O}$

Hình 3-14

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [9], [10], [11], [14], [17].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Đọc kỹ toàn chương

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Đọc kỹ toàn chương

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Chỉ cần đọc qua toàn chương để hiểu các ví dụ ở chương sau

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Chỉ cần đọc qua toàn chương để hiểu các ví dụ ở chương sau

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Chỉ cần đọc qua toàn chương để hiểu các ví dụ ở chương sau

CHƯƠNG IV

PHƯƠNG PHÁP IĐEMPÔTEN

Trong chương này, chúng ta hãy dùng một phương pháp tổng quát để tìm các biểu diễn bất khả quy của các nhóm hữu hạn. Phương pháp này dựa trên các tính chất của một loại cấu trúc đại số kết hợp (đại số nửa đơn) và gọi là *phương pháp iđempôten.*

Chúng ta sẽ giới thiệu một số định lý cơ bản, trên cơ sở đó, trình bày phương pháp nói trên.

§ 1. ĐẠI SỐ KẾT HỢP

Đại số kết hợp

Nói chung, cấu trúc của một đại số kết hợp được xác định bằng một phép nhân với số phức, một phép cộng và một phép nhân kết hợp giữa các phần tử của đại số. Các phép tính này có những tính chất quen thuộc như phân bố, giao hoán (cho phép cộng). Đại số học ở các trường trung học là một loại đại số kết hợp. Tất nhiên, đại số là một không gian. Chiều của không gian này gọi là *chiều* của đại số.

Đại số con

Cho một đại số kết hợp $\mathcal{A}$. Mọi không gian tuyến tính $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$ có tính chất

$$\mathcal{B}^2 = \mathcal{B}\mathcal{B} \subset \mathcal{B}$$

gọi là *đại số con* của $\mathcal{A}$.

Iđêan

Mọi tập hợp con $\mathcal{L}$ của $\mathcal{A}$ có tính chất

$$\mathcal{A}\mathcal{L} = \mathcal{L} \ (\mathcal{L}\mathcal{A} = \mathcal{L})$$

gọi là *iđêan trái* (phải) của $\mathcal{A}$. Các iđêan đều là đại số con. Một iđêan vừa trái vừa phải gọi là *iđêan hai phía.* Chiều của iđêan là chiều của không gian tương ứng.

Các iđêan trái (phải, hai phía) không chứa một iđêan nào khác của $\mathcal{A}$ gọi là *iđêan trái (phải, hai phía) tối thiểu.*

Đại số Clifford

Ta xét tập hợp các lượng γ thỏa mãn các hệ thức

$$\gamma_i\gamma_k + \gamma_k\gamma_i = 2\delta_{ik} \ (i, k = 1, 2, \ldots, s),$$

ở đó giả sử phép nhân có tính chất kết hợp. Các tổ hợp tuyến tính của tất cả các tích khác nhau của các γ với hệ số phức làm thành một đại số kết hợp gọi là *đại số Clifford* và ký hiệu là $\mathcal{C}(s)$. Các phép tính cho thấy rằng đại số Clifford $\mathcal{C}(s)$ có 2^s chiều, và các vectơ cơ sở có thể viết dưới dạng

$$e, \gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_s, \gamma_{12}, \gamma_{23}, \ldots, \gamma_{s-1,s}, \ldots, \gamma_{123\ldots s},$$

với

$$\gamma_{ik\ldots m} \equiv \gamma_i \gamma_k \ldots \gamma_m.$$

Ví dụ II (13-9) là một trường hợp riêng của đại số Clifford, $(s = 4)$.

§ 2. ĐẠI SỐ ĐƠN

Định nghĩa

Một đại số không có iđêan hai phía nào (khác không và khác chính nó) gọi là *đại số đơn.*

Đại số kết hợp xây dựng trên tập hợp tất cả các ma trận cấp n, mà các phần tử là những số phức C, gọi là *đại số ma trận toàn phần* cấp n.

Định lý

Đại số ma trận toàn phần cấp n là đơn.

Chứng minh

Tất nhiên, theo định nghĩa, cơ sở của đại số ma trận toàn phần cấp n là tập hợp các ma trận E_{ik} có tính chất

$$E_{ij}E_{kl} = \delta_{jk}E_{il}, \quad (i, k, j, l = 1, 2, \ldots n), \tag{2-1}$$

và mọi phần tử của đại số $\mathcal{A}$ đều có dạng

$$a = a_{ik}E_{ik}, \quad a_{ik} \in C, \quad a \in \mathcal{A}. \tag{2-2}$$

Bây giờ giả sử $\mathcal{A}$ có iđêan hai phía $\mathcal{I}$ và $b \in \mathcal{I}$, $b \neq 0$. Ta có thể viết

$$b = b_{ik}E_{ik}, \quad b_{ik} \in C, \tag{2-3}$$

trong đó ít nhất một thành phần b_{ik} nào đó là khác không, chẳng hạn là $b_{12} \neq 0$. Thế thì, theo (2-1), (2-2) và (2-3), tích

$$b_{12}^{-1} E_{r1} b E_{2s} \in \mathcal{A}\mathcal{I}\mathcal{A} = \mathcal{I}, \text{ (r và s tùy ý)}$$

có thể viết dưới dạng sau

$$b_{12}^{-1} E_{r1} b E_{2s} = b_{12}^{-1} b_{ik} E_{r1} E_{ik} E_{2s} = b_{12}^{-1} b_{ik} \delta_{1i} E_{rk} E_{2s} =$$

$$= b_{12}^{-1} b_{12} E_{rs} = E_{rs}, \quad \text{với mọi r và s},$$

tức là tất cả các ma trận cơ sở E_{rs} đều thuộc iđêan $\mathcal{I}$. Nói cách khác, mọi iđêan của đại số ma trận toàn phần đều trùng với chính đại số đó: Các đại số này đều là đơn.

Cấu trúc đại số đơn là cấu trúc đơn giản nhất, mà điển hình là các đại số ma trận toàn phần như chúng ta đã thấy.

Một đại số đơn có thể chứa hay không chứa đơn vị. Từ nay về sau, để được giản đơn, ta chỉ xét những đại số có chứa đơn vị.

§ 3. ĐẠI SỐ NỬA ĐƠN

Trong các tài liệu về đại số kết hợp, có trình bày định nghĩa « chính quy » về đại số nửa đơn. Nhưng trong tài liệu này, do khuôn khổ có hạn, chúng ta hãy đưa ra định nghĩa sau

Định nghĩa

Một đại số kết hợp có thể viết dưới dạng tổng trực tiếp nhiều đại số đơn triệt tiêu lẫn nhau

$$\mathcal{A} = \Sigma\oplus\mathcal{A}_i,\ \mathcal{A}_i\ \text{đơn},\ \mathcal{A}_i\mathcal{A}_j = 0,\ i \neq j \tag{3-1}$$

gọi là một *đại số nửa đơn.*

Theo định nghĩa của tổng trực tiếp, mọi phần tử a của $\mathcal{A}$ đều có thể viết một cách duy nhất dưới dạng

$$a = \Sigma a_i,\ a_i \in \mathcal{A}_i.$$

Tất nhiên, theo định nghĩa, cấu trúc đại số nửa đơn là cấu trúc đơn giản nhất, kế sau cấu trúc đại số đơn.

Đại số nhóm

Cho một nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$. Dễ thấy rằng tập hợp tất cả các tổ hợp tuyến tính có dạng (với phép nhân của nhóm $\mathcal{G}$)

$$a = \sum_g a(g)g,\ a(g)\in C,\ g\in\mathcal{G} \tag{3-1}$$

làm thành một cấu trúc đại số, gọi là *đại số nhóm* $\mathcal{A}$ của nhóm $\mathcal{G}$. Chiều của đại số nhóm tất nhiên bằng cấp G của nhóm.

Các phép tính đơn giản cho thấy rằng nếu $a = \{a(g)\}$ và $b = \{b(g)\}$ thì

$$\lambda a = \{\lambda a(g)\},\ \lambda\in C,\ a + b = \{a(g) + b(g)\},$$

$$ab = \Big\{\sum_u a(u)b(u^{-1}g)\Big\} = \Big\{\sum_u a(gu^{-1})b(u)\Big\}. \tag{3-2}$$

Người ta chứng minh rằng các đại số nhóm đều thuộc loại nửa đơn.

Ví dụ

Đại số nhóm $\mathcal{A}$ của nhóm đối xứng S_3 có thể viết dưới dạng

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_1\oplus\mathcal{A}_2\oplus\mathcal{A}_3,\ \mathcal{A}_i:\ \text{đơn},\ \mathcal{A}_i\mathcal{A}_j = 0,\ i \neq j,$$

với

$$\mathcal{A}_1 = \{e+a+b+c+d+f\},\ \mathcal{A}_2 = \{e-a-b-c+d+f\},\ \mathcal{A}_3 = \{a_1, a_2, a_3, a_4\}$$

trong đó

$$a_1 = 2e+2a-b-c-d-f,\ a_2 = -e-a+2b-c-d+2f,$$

$$a_3 = 2e-2a+b+c-d-f,\ a_4 = e-a+2b-c+d-2f,$$

$$a = (1, 2),\ b = (1, 3),\ c = (2, 3),\ d = (1, 3, 2)\ \text{và}\ f = (1, 3, 2).$$

Ngoài ra, còn có định lý sau :

Định lý : (không chứng minh)

Một đại số nửa đơn tất yếu phải có đơn vị.

Chẳng hạn, đại số nhóm luôn luôn có đơn vị : đơn vị của nhóm.

§ 4. TÂM

Định nghĩa

Cho một đại số kết hợp $\mathcal{A}$. Tập hợp

$$\mathcal{C} = \{ c \mid ca = ac \quad \text{với mọi} \quad a \in \mathcal{A} \}$$

gọi là *tâm* của đại số.

Chẳng hạn, tâm của đại số ma trận toàn phần cấp n là

$$\mathcal{C} = \lambda I_n \quad , \quad \lambda \in C \quad \text{hay} \quad \mathcal{C} = CI_n \quad .$$

Định lý

Tâm của một đại số nửa đơn $\mathcal{A}$ cũng là một đại số nửa đơn. Số đại số đơn nằm trong biểu thức phân tích của tâm bằng số đại số đơn nằm trong biểu thức phân tích của $\mathcal{A}$. Nếu

$$\mathcal{A} = \sum^{p} \oplus \mathcal{A}_i \tag{4-1}$$

thì

$$\mathcal{C} = \sum^{p} \oplus \mathcal{C}_i \quad , \quad \mathcal{C}_i : \text{đơn} \quad , \tag{4-2}$$

với

$$\mathcal{A}_i = \mathcal{A}\, \mathcal{C}_i \quad . \tag{4-3}$$

Chứng minh

Theo tính chất của tổng trực tiếp, với mọi $c \in \mathcal{C}$ ta có thể viết

$$c = \sum_j \overline{c}_j \quad , \quad \overline{c}_j \in \mathcal{A}_j \quad . \tag{4-4}$$

Nhưng theo tính chất trực giao (tính chất triệt tiêu lẫn nhau) của các $\mathcal{A}_i$, ta có

$$\overline{c}_j a_i = a_i \overline{c}_j = 0 \quad , \quad \text{với mọi } a_i \in \mathcal{A}_i \ (i \neq j) \quad .$$

Từ đó, ta được

$$a_i c = a_i \sum_j \overline{c}_j = a_i \overline{c}_i \quad , \quad ca_i = \overline{c}_i a \quad .$$

Nhưng vì $a_i c = ca_i$, nên

$$a_i \overline{c}_i = \overline{c}_i a_i \quad .$$

Kết quả này chứng tỏ rằng $\overline{c}_i$ thuộc tâm $\mathcal{C}_i$ của đại số đơn $\mathcal{A}_i$ và tổng (4-4) có thể viết dưới dạng (4-2). Chúng ta thừa nhận các đại số $\mathcal{C}_i$ là đơn. Như thế, $\mathcal{C}$ là nửa đơn.

Tiếp theo, do đại số nửa đơn $\mathcal{A}$ có chứa đơn vị e, ta có thể viết

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}e \quad .$$

Nhưng lại do $e \in \mathcal{C}$, đẳng thức trên có thể viết dưới dạng

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{C} \quad .$$

Thay $\mathcal{C}$ bằng tổng (4-2), ta được

$$\mathcal{A} = \sum \mathcal{A}\,\mathcal{C}_i \quad .$$

Nhưng vì tổng này là một tổng trực tiếp:

$$(\mathcal{A}\mathcal{C}_i)(\mathcal{A}\mathcal{C}_j) = (\mathcal{A}\mathcal{A})(\mathcal{C}_i\mathcal{C}_j) \subset (\mathcal{A}_i\mathcal{A}_j) = 0 \quad , \quad (i \neq j)$$

nên ta suy ra ngay đẳng thức (4-1).

Khái niệm tâm có một tầm quan trọng lớn trong lý thuyết biểu diễn các đại số nửa đơn.

Tính đơn của đại số Clifford

Khi n là một số chẵn: $n = 2r$ (r là một số nguyên), tâm của $\mathcal{C}(2r)$ là Ce. Từ đó theo định lý trên, các *đại số Clifford* $\mathcal{C}(2r)$ *là đơn*. Chẳng hạn các đại số $\mathcal{C}(2)$ và $\mathcal{C}(4)$ là đơn. Các đại số này đóng vai trò cơ sở trong học thuyết về spin của các hạt cơ bản (xem XI, § 6, 7).

Khi n là một số lẻ $n = 2r + 1$, tâm của $\mathcal{C}(2r+1)$ là tổng hai đại số đơn Ce_1, Ce_2, với

$$e_1 = \frac{1}{2}(e + \gamma_{1,2\ldots n}) \quad , \quad e_2 = \frac{1}{2}(e - \gamma_{1,2\ldots n}) \quad ,$$

khi r chẵn,

và
$$e_1 = \frac{1}{2}(e + i\gamma_{1,2\ldots n}) \quad , \quad e_2 = \frac{1}{2}(e - i\gamma_{1,2\ldots n}) \quad ,$$

khi r lẻ.

Như vậy các *đại số Clifford* $\mathcal{C}(2r+1)$ *là nửa đơn* và phân thành tổng trực tiếp hai đại số đơn.

§ 5. IĐEMPÔTEN

Trên kia ta đã định nghĩa cấu trúc của đại số nửa đơn qua cấu trúc đại số đơn. Bây giờ ta hãy tìm cấu trúc của đại số nửa đơn qua cấu trúc iđêan tối thiểu. Điều này được thực hiện bằng một khái niệm rất quan trọng, gọi là khái niệm đempôten.

Định nghĩa iđempôten

Phần tử $e \in \mathcal{A}$ gọi là *iđempôten*, nếu

$$e^2 = e \quad . \tag{5-1}$$

Còn nếu

$$e^2 = \lambda e \quad , \quad \lambda \in C \tag{5-2}$$

thì e gọi là *iđempôten chủ yếu*.

Tất nhiên, đơn vị của đại số (nếu có) cũng là một iđempôten, iđempôten đơn giản nhất (iđempôten tầm thường).

Idempôten nguyên thủy

Một idempôten e, không thể phân thành tổng hai idempôten khác triệt tiêu nhau

$$e \neq e_1 + e_2 \quad , \quad e_1e_2 = e_2e_1 = 0$$

gọi là *idempôten nguyên thủy.*

Có thể chứng minh định nghĩa trên là tương đương với định nghĩa :

Một idempôten là nguyên thủy nếu không thể tìm được một idempôten khác e' ≠ e, sao mà

$$e'e = ee' = e'. \tag{5-3}$$

Tiêu chuẩn của idempôten nguyên thủy

Một idempôten e là nguyên thủy, khi và chỉ khi tập hợp $e\mathcal{A}e$ không chứa một idempôten nào khác e.

Chứng minh

Quả vậy, giả sử tập hợp $e\mathcal{A}e$ có chứa một idempôten e' khác e. Tất nhiên, e' có dạng

$$e' = eae, \quad \text{với } a \in \mathcal{A}.$$

Thế thì, ta được

$$ee' = e(eae) = (ee)(ae) = eae = e', \; e'e = e'.$$

Kết quả này mâu thuẫn với định nghĩa của idempôten nguyên thủy.

Ngược lại, có thể chứng minh rằng nếu e không phải là một idempoten nguyên thủy, thì tập $e\mathcal{A}e$ sẽ chứa một idempoten e' ≠ e.

Định lý (không chứng minh)

Mọi đại số nửa đơn $\mathcal{A}$ đều có thể phân thành tổng trực tiếp của nhiều idêan trái tối thiểu $\mathcal{L}_i$, tương ứng sinh bởi những idempôten nguyên thủy e_i, triệt tiêu nhau :

$$\mathcal{A} = \sum \oplus \mathcal{L}_i, \quad \mathcal{L}_i = \mathcal{A}e_i, \quad e_ie_j = e_i\delta_{ij}. \tag{5-4}$$

Từ (5-4) ta thấy rằng với mọi $a \in \mathcal{A}$, ta có

$$a = \sum_i ae_i.$$

Nói riêng, với đơn vị e của đại số nửa đơn, ta có thể phân tích thành tổng trực tiếp của các idempôten nguyên thủy

$$e = \sum_i e_i. \tag{5-5}$$

Theo định lý trên, rõ ràng vấn đề phân tích một đại số nửa đơn thành tổng trực tiếp các idêan trái tối thiểu quy về vấn đề tìm các idempôten nguyên thủy của đại số (hay về vấn đề phân tích đơn vị).

Ví dụ

Với đại số Clifford $\mathcal{C}(2)$, dễ thu được biểu thức phân tích sau

$$e = e_1 + e_2, \quad e_1 = \frac{1}{2}(e + \gamma_1), \quad e_2 = \frac{1}{2}(e - \gamma_1).$$

Với đại số nhóm của nhóm $\mathcal{D}_3 \approx S_3$, ta có biểu thức phân tích sau của đơn vị e thành tổng các iđempoten nguyên thủy

$$e = e_1 + e_2 + e_3 + e_4,$$

với

$$e_1 = \frac{1}{6}\sum_g g, \quad e_2 = \frac{e+a}{2} - \frac{1}{6}\sum_g g,$$

$$e_3 = \frac{1}{6}\sum_g \delta_g g, \quad e_4 = \frac{e-a}{2} - \frac{1}{6}\sum_g \delta_g g. \tag{5-6}$$

Ký hiệu δ_g đã định nghĩa ở I, § 4.

Tương ứng, đại số nhóm phân thành tổng trực tiếp của bốn iđêan trái tối thiểu

$$\mathcal{A} = \sum^4 \oplus \mathcal{L}_i, \quad \mathcal{L}_i = \mathcal{A}e_i,$$

trong đó

$$\mathcal{L}_1 = \{e + a + b + c + d + f\}, \quad \mathcal{L}_3 = \{e - a - b - c + d + f\}$$

$$\mathcal{L}_2 = \left\{\frac{1}{6}(2e + 2a - b - c - d - f), \ \frac{1}{6}(-e - a + 2b - c + 2f - d)\right\},$$

$$\mathcal{L}_4 = \left\{\frac{1}{6}(2e - 2a + b + c - d - f), \ \frac{1}{6}(e - a + 2b - c + d - 2f)\right\}.$$

Các iđêan $\mathcal{L}_1$ và $\mathcal{L}_3$ có một chiều. Các iđêan $\mathcal{L}_2$ và $\mathcal{L}_4$ có hai chiều.

Vì các đại số đơn (có đơn vị) đồng thời là đại số nửa đơn, nên có thể ứng dụng định lý trên cho các đại số đơn. Từ đó, ta thấy rằng tập hợp các iđêan trái tối thiểu của một đại số nửa đơn có thể gộp lại thành từng nhóm, các iđêan trái tối thiểu cùng một nhóm làm thành một đại số đơn, nằm trong cái phân tích (3-1) của đại số nửa đơn.

§ 6. PHÉP BIỂU DIỄN CÁC ĐẠI SỐ NỬA ĐƠN

Định nghĩa

Mọi phép ánh xạ đồng cấu của một đại số kết hợp $\mathcal{A}$ lên đại số kết hợp các ma trận toàn phần cấp (điển hình) n gọi là một *phép biểu diễn* của đại số đó.

Không gian trong đó các ma trận biểu diễn tác dụng gọi là *không gian biểu diễn*. Chiều của không gian biểu diễn (bằng n) gọi là *chiều biểu diễn*. Khái niệm biểu diễn khả quy, bất khả quy... cũng giống như với các nhóm.

Biểu diễn chính quy

Biểu diễn trong không gian của đại số nhóm gọi là *biểu diễn chính quy*.

Trong biểu diễn chính quy của đại số $\mathcal{A}$, đại số này đóng hai vai trò, vai trò của đối tượng được biểu diễn và vai trò của không gian biểu diễn. Rõ ràng, các iđêan trái đóng vai trò của các không gian bất biến và các iđêan trái tối thiểu đóng vai trò của các không gian bất khả quy của biểu diễn chính quy. Vấn đề thứ nhất là nghiên cứu xem những iđêan trái tối thiểu nào thực hiện những biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau. Vấn đề thứ hai là xét cấu trúc của biểu diễn chính quy. Người ta chứng minh được định lý sau.

Định lý 1 (không chứng minh)

Tất cả các biểu diễn bất khả quy của một đại số nửa đơn đều nằm trong biểu diễn chính quy.

Các iđêan trái tối thiểu cùng thuộc một đại số đơn trong biểu thức phân tích (4-1) thực hiện những biểu diễn bất khả quy tương đương với nhau.

Định lý 2

Số biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau của một đại số nửa đơn bằng số đại số đơn có mặt trong biểu thức phân tích (4-1).

Số biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau của một đại số nửa đơn bằng số đại số đơn nằm trong biểu thức phân tích của tâm.

Định lý này là hệ quả của định lý 1 và định lý § 4.

Theo định lý 1, vấn đề tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của một đại số nửa đơn quy về vấn đề tìm cấu trúc (5-4) của đại số. Như đã phân tích, vấn đề này chính là vấn đề tìm hệ thống các iđempôten nguyên thủy của đại số. Từ đó xuất hiện danh từ phương pháp biểu diễn bằng iđempôten (nguyên thủy).

Mặt khác, xuất hiện vấn đề nghiên cứu cấu trúc của các đại số đơn (có đơn vị), theo nghĩa là tìm tất cả các cấu trúc đại số đơn cùng chiều không đẳng cấu với nhau. Người ta thấy rằng tất cả các đại số đơn có chiều như nhau là đẳng cấu với nhau. Phối hợp kết quả này với định lý § 2, ta đi đến

Định lý Vedderburn

Mọi đại số đơn (có đơn vị), chiều n^2, đều đẳng cấu với đại số ma trận toàn phần cấp n.

Định lý 4

Mọi đại số nửa đơn là đẳng cấu với tổng trực tiếp của nhiều đại số ma trận toàn phần.

Định lý này là hệ quả của định lý Vedderburn và định nghĩa của đại số nửa đơn.

Tất nhiên, chiều N của mọi đại số nửa đơn đều có dạng

$$N = \sum_i n_i^2 . \tag{6-1}$$

Vì khái niệm đại số nhóm là thác triển của khái niệm nhóm (bằng cách đưa thêm vào cảnh giới trường số phức C) và vì đại số nhóm là một đại số nửa đơn, nên tất cả các kết quả trên về biểu diễn đều có thể vận dụng cho lý thuyết biểu diễn các nhóm. Nói cụ thể hơn, tất cả các biểu diễn bất khả quy của đại số nhóm đồng thời là bất khả quy đối với nhóm, biểu diễn chính quy của đại số nhóm đồng thời là biểu diễn chính quy của nhóm, vấn đề tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của một nhóm hữu hạn quy về bài toán tìm các iđempôten nguyên thủy của đại số nhóm của nhóm. Công thức Burnside chỉ là một trường hợp riêng của công thức (6-1).

Cuối cùng, theo định lý Vedderburn và tính chất đơn của các đại số Clifford $\mathcal{C}(2r)$ (xem § 4), ta thấy rằng đại số Clfford $\mathcal{C}(2)$ với chiều bằng $2^2 = 4$ có thể biểu diễn bằng các ma trận cấp 2, Còn đại số Clifford $\mathcal{C}(4)$ với chiều hằng $4^2 = 16$ có thể biểu diễn bằng các ma trận cấp 4. Đó chính là các ma trận Pauli và ma trận Dirac quen thuộc.

§7. ỨNG DỤNG PHƯƠNG PHÁP IĐEMPÔTEN VÀO CÁC NHÓM ĐỐI XỨNG

Trong chương I, chúng ta đã đề cập đến cấu trúc của các nhóm đối xứng S_N. Bây giờ chúng ta hãy bàn đến phép biểu diễn các nhóm đó bằng phương pháp iđempoten. Dĩ nhiên, vấn đề là phải tìm hệ thống các iđempôten nguyên thủy của đại số nhóm của các nhóm đó và biểu thức phân tích của tâm.

Phép biến đổi các bảng Young

Cho 2 bảng Young T và T' cùng tương ứng với một sơ đồ Young như nhau. Bao giờ cũng có một hoán vị biến bảng này thành bảng khác. Chẳng hạn với hai bảng sau

$$T = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 4 & 5 \\ \hline 6 & 7 \\ \cline{1-2} 3 & 8 \\ \cline{1-2} 1 \\ \cline{1-1} \end{array} \qquad T' = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 5 & 7 \\ \cline{1-2} 2 & 6 \\ \cline{1-2} 8 \\ \cline{1-1} \end{array}$$

ta có thể biến bảng T thành T' với hoán vị

$$s = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 8 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 7 & 6 \end{bmatrix}.$$

Khi chuyển bảng như trên, các hoán vị ngang p và dọc q của bảng T sẽ biến thành các hoán vị ngang p' và dọc q' của bảng T' như sau

$$q' = sqs^{-1}, \tag{7-1}$$

$$p' = sps^{-1}. \tag{7-2}$$

Định nghĩa

Một sơ đồ Young $\{\lambda\}$ gọi là *thấp* (*không thấp*) hơn một sơ đồ Young $\{\lambda'\}$ khác, nếu hiệu đầu tiên khác không $\lambda_i - \lambda'_i$ là âm (không dương). Ta ký hiệu $\{\lambda\} < \{\lambda'\}$ (hay $\{\lambda\} \leqslant \{\lambda'\}$).

Ta thừa nhận bổ đề cơ bản sau của các nhóm đối xứng:

Bổ đề

Cho hai bảng Young T *và* T' *tương ứng với hai sơ đồ Young* $\{\lambda\}$ *và* $\{\lambda'\}$. *Nếu* $\{\lambda\}$ *không thấp hơn* $\{\lambda'\}$ *và nếu mọi cặp số đã thuộc cùng một cột nào đó của bảng* T' *sẽ không bao giờ thuộc cùng một hàng của sơ đồ* T, *thì*

1. $$\{\lambda\} = \{\lambda'\},$$

và

2. *Ta có thể chuyển từ bảng* T *sang bảng* T' *bằng một hoán vị* s *có dạng* $s = pq$.

Hệ quả

Cho một bảng Young T *và một phần tử* $s \neq qp$. *Thế thì trong* T *bao giờ cũng có thể tìm được hai chuyển vị dọc và ngang* p_o *và* q_o *sao mà*

$$sp_o = q_o s. \tag{7-3}$$

Định lý 1

Cho $Y = QP$ *là một đối xứng hóa tử Young nào đó của nhóm đối xứng* S_N *(xem I (6-4). Thế thì*

$$Y^2 = \mu Y, \tag{7-4}$$

với μ *là một lượng không phụ thuộc vào phân hoạch* $\{\lambda\}$ *tương ứng với sơ đồ Young đang xét*

Chứng minh

Quả vậy, dễ thấy rằng với mọi $t \in S_N$ thì

$$tP = P, \quad Pt = P, \quad tQ = \delta_t Q, \quad Qt = \delta_t Q,$$

thành thử với mọi cặp phần tử p và q, ta có

$$pY = Yp = Y, \quad Yq = qY = \delta qY, \tag{7-5}$$

từ đó, nhân với Y, ta được

$$Y^2 p = Y^2, \quad qY^2 = \delta_q Y^2. \tag{7-6}$$

Tiếp theo, gọi a(s) là các thành phần của phần tử Y^2 theo một cơ sở nào đó của đại số nhóm của nhóm S_N:

$$Y^2 = \sum_s a(s)s.$$

Thế thì đẳng thức thứ nhất ở (7-6) có thể viết dưới dạng

$$\sum_s a(s)\,sp = \sum_s a(s)\,s.$$

Vì vế phải của đẳng thức này có thể viết dưới dạng

$$\sum_s a(sp)sp$$

nên ta được đẳng thức

$$a(sp) = a(s). \tag{7-7}$$

Từ đó, cho $s = e$, chúng ta được

$$a(p) = a(e). \tag{7-8}$$

Tương tự như thế, từ đẳng thức thứ hai ở (7-6), ta được

$$a(qs) = \delta_q\, a(s), \tag{7-9}$$

$$a(q) = \delta_q\, a(e). \tag{7-10}$$

Các tính chất (7-7) và (7-9) là đặc trưng cho các đối xứng hóa tử.

Bây giờ ta hãy nghiên cứu các tính chất của các thành phần a(s) của các đối xứng hóa tử Y^2.

Trước hết, nếu

$$s = qp$$

thì, theo (7-9) và (7-8), ta được

$$a(s) = a(qp) = \delta_q a(p) = \delta_q a(e).$$

tức là

$$a(s) = \delta_q a(e), \; s = qp. \tag{7-11}$$

Còn nếu $s \neq qp$ thì, theo hệ quả của bổ đề, trong bảng Young ta luôn luôn tìm được hai chuyển vị ngang và dọc p_o và q_o thỏa mãn (7-3). Thế thì, theo (7-7) (7-9) ta được ($\delta q_o = -1$).

$$a(sp_o) = a(s) = a(q_o s) = \delta q_o a(s) = -a(s),$$

tức là

$$a(s) = 0, \; s \neq qp. \tag{7-12}$$

Thành thử, theo (7-11) và (7-12), ta được

$$Y^2 = \sum_S a(s)s = a(e) \sum_{p,q} \delta_q qp =$$

$$= a(e) \left\{\sum_q \delta_q q\right\} \left\{\sum_p p\right\} = a(e)(QP) = a(e)Y,$$

tức là

$$Y^2 = \mu Y,$$

với

$$\mu = a(e)$$

là một lượng không phụ thuộc vào phân hoạch $\{\lambda\}$. Đó là điều phải chứng minh.

Như thế, theo (7-4), đối xứng hóa tử Y là một iđempôten chủ yếu. Hơn nữa, theo (7-5) với $\mathcal{A}$ là đại số nhóm của nhóm S_N, ta có

$$Y\mathcal{A}Y \sim Y.$$

từ đó, theo tiêu chuẩn §5, Y là một iđempôten nguyên thủy.

Theo định lý 1, §6, các iđêan trái tối thiểu sinh bởi các iđempôten này sẽ thực hiện những biểu bất khả quy của nhóm đối xứng. Nhưng vì các đối xứng hóa tử Y đó là tương ứng với các bảng Young, nên ta thấy rằng các bảng Young khác nhau cho những biểu diễn bất khả quy khác nhau của nhóm. Vấn đề còn lại là phân biệt những biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau. Chúng ta sẽ chứng minh rằng tất cả các bảng Young cùng tương ứng với một sơ đồ Young như nhau đều cho những biểu diễn tương đương với nhau, sử dụng các tính chất của sự phân tích tâm ở §4.

Muốn thế, ta xét bảng Young sT, suy từ bảng Young T bởi s. Theo (7-1), (7-2), nếu gọi Y_s là đối xứng hóa tử Young tương ứng với bảng Young sT, ta có

$$Y_s = sYs^{-1}.$$

Thế thì ta có

Định lý 2

Cho hai bảng Young T và T'. Nếu

$$\{\lambda\} > \{\lambda'\}$$

hoặc

$$\{\lambda\} = \{\lambda'\},$$

nhưng lại có ít nhất một cặp số đồng thời ở cùng một hàng của bảng sT và ở cùng một cột của bảng uT' ($s, u \in S_n$),

thì

$$Y_s Y_u' = 0. \tag{7-13}$$

Chứng minh

Quả vậy, trong cả hai trường hợp nêu lên trong giả thiết, có ít nhất một cặp số đồng thời ở cùng một hàng của bảng sT và cùng một cột của bảng uT'. Gọi p_o là chuyển vị ngang của hai số đó trong bảng thứ nhất. Từ đó, nếu a(s) và a'(s) là các thành phần của các phần tử Y_s và Y_u' trong một cơ sở nào đó của đại số nhóm của nhóm S_N thì, theo (7-7) và (7-9), ta được

$$a(sp_o) = a(s). \tag{7-14}$$

$$a'(p_o s) = -a'(s). \tag{7-15}$$

Tiếp theo, gọi b(s) là các thành phần của phần tử $Y_s Y_u'$:

$$Y_s Y'_u = \sum_s b(s)s\,.$$

Thế thì, theo (3-2), (7-14) và (7-15), ta được

$$b(s) = \sum_t a(st^{-1})\,a'(t) = -\sum_t a(st^{-1}p_o^{-1})\,a'(p_o t) =$$

$$= -\sum_{p_o,t} a(s(p_o t)^{-1})\,a'(p_o t) = -\sum_t a(st^{-1})\,a'(t) = -\,b(s),$$

tức là

$$b(s) = 0 \text{ với mọi } s \in S_N,$$

tức là

$$Y_s Y_u' = 0,$$

định lý được chứng minh xong.

Ta cũng có thêm

Định lý 3

$$Y_s Y_u = sYs^{-1}uYu^{-1} = \delta_q s Y_u^2 u^{-1}, \text{ nếu } s = uqp. \tag{7-16}$$

Ta có thể chứng minh định lý này bằng một phép thử trực tiếp.

Đối xứng hóa tử trung tâm

Cho một phân hoạch $\{\lambda\}$ và sơ đồ Young tương ứng. Thế thì, lượng

$$\varepsilon_\lambda = \frac{1}{\mu^2}\sum_s sYs^{-1} = \frac{1}{\mu^2}\sum_s Y_s \tag{7-17}$$

gọi là *đối xứng hóa tử trung tâm* tương ứng với phân hoạch $\{\lambda\}$. Trong định nghĩa (7-17), μ là số có mặt trong đẳng thức (7-4).

Để tìm các tính chất của các đối xứng hóa tử trung tâm, trước hết ta lưu ý rằng

$$\varepsilon_\lambda Y = Y\varepsilon_\lambda = Y. \tag{7-18}$$

Quả vậy, theo (7-17) chúng ta có

$$\varepsilon_\lambda Y = \frac{1}{\mu^2}\sum_s Y_s Y.$$

Nhưng, theo các kết quả đã chứng minh, ở vế phải của đẳng thức này chỉ những phần tử Y_sY với $s = qp$ mới khác không, tức là

$$\varepsilon_\lambda Y = \frac{1}{\mu^2}\sum_{q,p} Y_{qp} Y,$$

từ đó, theo định lý 3 với $u = e$, ta được

$$\varepsilon_\lambda Y = \frac{Y^2}{\mu^2}\left\{\sum_{q,p} \delta_q\, qp\right\} = \frac{Y^2}{\mu^2} QP = \frac{Y^3}{\mu^2}.$$

Nhưng theo (7-4), vế phải bằng Y, thành thử chúng ta được

$$\varepsilon_\lambda Y = Y.$$

Tương tự như thế, ta có

$$Y\varepsilon_\lambda = Y.$$

Đẳng thức (7-18) chứng minh xong. Dựa vào đẳng thức này ta có thể chứng minh định lý sau.

Định lý 4

$$\varepsilon_\lambda^2 = \varepsilon_\lambda \text{ với mọi } \{\lambda\}. \tag{7-19}$$

Chứng minh

Quả vậy, theo định nghĩa (7-17) và theo (7-18), ta có

$$\varepsilon_\lambda^2 = \frac{1}{\mu^2}\sum_s Y_s\varepsilon_\lambda = \frac{1}{\mu^2}\sum_s Y_s = \varepsilon_\lambda.$$

Như thế, các lượng ε_λ là những iđempôten.

Định lý 5

$$\varepsilon_{\lambda'}\varepsilon_\lambda = \varepsilon_\lambda\varepsilon_{\lambda'} = 0, \text{ nếu } \{\lambda\} \neq \{\lambda'\} \tag{7-20}$$

Chứng minh

Theo tính chất (7-18), các ε_λ và $\varepsilon_{\lambda'}$ giao hoán với nhau. Thành thử, ta có thể giả thiết

$$\{\lambda\} > \{\lambda'\}.$$

Thế thì, theo định lý 2, ta được ngay

$$\varepsilon_\lambda\varepsilon_{\lambda'} = \frac{1}{\mu^2\mu'^2}\sum_s Y_s \sum_u Y'_u = \frac{1}{\mu^2\mu'^2}\sum_{s,u} Y_s Y'_u = 0.$$

Định lý 6

Đơn vị e của đại số nhóm $\mathcal{A}$ của nhóm S_N bằng

$$e = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} , \tag{7-21}$$

với tổng lấy theo tất cả các sơ đồ Young $\{\lambda\}$ của nhóm S_N.

Chứng minh

Quả vậy, theo các tính chất (7-5), các đối xứng hóa tử trung tâm giao hoán với mọi phần tử s của nhóm đối xứng S_N, do đó, ε_{λ} giao hoán với mọi phần tử của đại số nhóm $\mathcal{A}$. Nói cách khác, tập hợp tất cả các đối xứng hóa tử trung tâm làm thành tâm của đại số kết hợp $\mathcal{A}$. Tâm này là một đại số kết hợp nửa đơn vì đại số $\mathcal{A}$ là một đại số nửa đơn. Nhưng theo định lý 5, các phần tử ε_{λ} với $\{\lambda\}$ khác nhau là trực giao với nhau, tức là độc lập tuyến tính với nhau, thành thử đại số $\mathcal{C}$ có s chiều, với s là số phân hoạch khác nhau của số nguyên N. Ta hãy dùng các ε_{λ} làm cơ sở của $\mathcal{C}$.

Tiếp theo vì $e \in \mathcal{C}$, nên

$$e = \sum a_{\lambda} \varepsilon_{\lambda}.$$

Nhân cái phân tích này với $\varepsilon_{\lambda'}$, sau đó lưu ý đến các hệ thức trực giao (7-20), ta được

$$\varepsilon_{\lambda'} = e\varepsilon_{\lambda'} = a_{\lambda'}\varepsilon_{\lambda'}, \ a_{\lambda'} = 1,$$

đẳng thức (7-21) được chứng minh.

Tiếp theo, nhân hai vế của (7-21) với $\mathcal{C}$, ta được

$$\mathcal{C} = \sum_{\lambda} \oplus \, \mathcal{C}_{\lambda},$$

với

$$\mathcal{C}_{\lambda} = C e_{\lambda} .$$

Nhưng do trường số phức C là một đại số đơn (đại số ma trận toàn phần cấp 1), các đại số Ce, đẳng cấu với C, đều là đơn. Như thế, tâm $\mathcal{C}$ của đại số phân thành tổng trực tiếp nhiều đại số đơn $\mathcal{C}_{\lambda}$, triệt tiêu lẫn nhau. Mỗi đại số đơn này tương ứng với một sơ đồ Young.

Thành thử, theo định lý 2 §6; ta kết luận:

Tất cả các biểu diễn bất khả quy cùng tương ứng với một sơ đồ Young đều tương đương với nhau và số biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau bằng số sơ đồ Young của nhóm S_N.

Một vấn đề còn tồn tại là tìm chiều của các biểu diễn bất khả quy. Người ta chứng minh rằng chiều biểu diễn tương ứng với sơ đồ Young T bằng số bảng Young chuẩn của sơ đồ.

Biểu diễn liên hợp

Cho một biểu diễn bất khả quy nào đó $\mathcal{D}^{(\lambda)}$, tương ứng với sơ đồ Young $\{\lambda\}$ Ta hãy xét tập hợp các ma trận

$$D'(s) = \delta_s D(s), \ D(s) \in \mathcal{D}^{(\lambda)}. \tag{7-22}$$

Rõ ràng tập hợp các ma trận D'(s) làm thành một biểu diễn của nhóm S_N. Quả vậy vì st là một hoán vị chẵn khi s và t đồng thời là những hoán vị chẵn hay đồng thời là hoán vị lẻ, còn st là một hoán vị lẻ khi các hoán vị s và t có tính chẵn lẻ khác nhau, nên ta có thể viết

$$\delta_s \delta_t D(s)\, D(t) = \delta_{st} D(st)\,,$$

tức là

$$D'(s)\, D'(t) = D'(st).$$

Biểu diễn thực hiện bởi các ma trận D'(s) là bất khả quy. Quả vậy, theo (7-22), ta có ngay (G = N!)

$$\frac{1}{G}\sum_s \chi'(s)\, \chi'(s)^* = \frac{1}{G}\sum_s \delta_s^2 \chi(t)\, \chi^*(t) =$$

$$= \frac{1}{G}\sum \chi(t)\, \chi^*(t) = 1,$$

kết quả này, theo tiêu chuẩn bất khả quy, chứng tỏ rằng biểu diễn với các ma trận D'(s) là bất khả quy. Vì là bất khả quy, biểu diễn này phải tương ứng với một sơ đồ Young nào đó, ký hiệu là $\{\widetilde{\lambda}\}$. Và đẳng thức (7-22) có thể viết lại dưới dạng

$$D^{(\widetilde{\lambda})}(s) = \delta_s D^{(\lambda)}(s). \qquad (7\text{-}23)$$

Theo định nghĩa, biểu diễn $\mathcal{D}^{(\widetilde{\lambda})}$ gọi là *liên hợp* với biểu diễn $\mathcal{D}^{(\lambda)}$. Vấn đề là xác định sơ đồ Young $\{\widetilde{\lambda}\}$ từ sơ đồ Young $\{\lambda\}$.

Trước hết, ta nhận xét rằng nếu D(s) là một biểu diễn của nhóm S_N thì $D^+(s^{-1})$ cũng là một biểu diễn của S_N. Hơn nữa, hai biểu diễn này là tương đương với nhau. Quả vậy, ta có

$$D^+(s^{-1})\, D^+(t^{-1}) = [D(t^{-1})\, D(s^{-1})]^+ = D^+((st)^{-1})$$

và

$$\mathrm{Sp} D^+(s^{-1}) = [\mathrm{Sp}\, D(s^{-1})]^* = [\mathrm{Sp}\, D(s)]^* = \mathrm{Sp}\, D(s)$$

vì, như đã biết, các phần tử s và s^{-1} của nhóm S_N đều thuộc cùng một lớp và đặc biểu các biểu diễn bất khả quy của nhóm S_N đều thực (xem 51).

Do tính chất tương đương này giữa các biểu diễn D(s) và $D^+(s^{-1})$ đẳng thức (7-22) có thể viết lại dưới dạng

$$D^{(\widetilde{\lambda})}(s) = \delta_s D^{+(\lambda)}(s^{-1})\,. \qquad (7\text{-}24)$$

Bây giờ giả sử ε_λ là đối xứng hóa tử trung tâm, tương ứng với sơ đồ Young $\{\lambda\}$, ε_λ là đơn vị của đại số đơn $\mathcal{A}_\lambda = \mathcal{A}\varepsilon_\lambda$.

Nếu viết

$$\varepsilon_\lambda = \sum_s a(s)\, s\,,$$

thì ta có

$$D^{(\lambda)}(\varepsilon_\lambda) = \sum_s a(s)\, D^{(\lambda)}(s) = I \text{ (ma trận đơn vị).} \tag{7-25}$$

Mặt khác, theo (7-24), với đối xứng hóa tử trung tâm $\varepsilon_{\tilde{\lambda}}$, tương ứng với sơ đồ Young $\{\tilde{\lambda}\}$

$$\varepsilon_{(\tilde{\lambda})} = \sum_s \tilde{a}(s)\, s, \tag{7-26}$$

ta có

$$D^{(\tilde{\lambda})}(\varepsilon_{\tilde{\lambda}}) = \sum_s \tilde{a}(s)\, D^{(\tilde{\lambda})}(s) = \sum_s \tilde{a}(s)\, \delta_s\, D^{+(\lambda)}(s^{-1}) = I. \tag{7-27}$$

Từ (7-27), lấy liên hợp hermitic, ta được

$$\sum_s \tilde{a}^*(s)\, \delta_s\, D^{(\lambda)}(s^{-1}) = I,$$

hay

$$\sum_s \tilde{a}^*(s^{-1})\, \delta_s\, D^{(\lambda)}(s) = I. \tag{7-28}$$

So sánh hai đẳng thức (7-28) và (7-25), ta được

$$a(s) = \delta_s \tilde{a}^*(s^{-1}) \ ,\ \tilde{a}(s) = \delta_s\, a^*(s^{-1}). \tag{7-29}$$

Nhưng đối xứng hóa tử trung tâm ε_λ (theo định nghĩa (7-17) và theo (7-1), (7-2)) bằng

$$\varepsilon_\lambda = \sum_{q,p,t} \delta_p\, tqpt^{-1}, \tag{7-30}$$

sai khác một thừa số không đổi nào đó. Thành thử, do $\varepsilon_\lambda = \sum_s a(s)\, s$, ta được

$$a(tqpt^{-1}) = \delta_q. \tag{7-31}$$

Từ đó, đẳng thức (7-29) cho (với $s = tp^{-1}q^{-1}t^{-1}$)

$$\tilde{a}(tp^{-1}q^{-1}t^{-1}) = \delta_{tp^{-1}q^{-1}t^{-1}}\, a^*(tqpt^{-1}) = \delta_p\, \delta_q\, \delta_q = \delta_p \tag{7-32}$$

vì các phần tử $tp^{-1}q^{-1}t^{-1}$ và qp có tính chẵn lẻ như nhau.
Cuối cùng, từ (7-32) và (7-26), ta được

$$\varepsilon_{\tilde{\lambda}} = \sum_{q,p,t} \tilde{a}(tp^{-1}q^{-1}t^{-1})\,(tp^{-1}q^{-1}t^{-1}) =$$

$$= \sum_{p,q,t} \delta_p\, tp^{-1}q^{-1}t^{-1} = \sum_{q,p,t} \delta_p\, tpqt^{-1}. \tag{7-33}$$

So sánh (7-33) với (7-30) ta thấy rằng đối xứng hóa tử trung tâm $\varepsilon_{\tilde{\lambda}}$ là tương ứng với sơ đồ Young $\{\tilde{\lambda}\}$, thu từ sơ đồ $\{\lambda\}$ bằng cách hoán vị $p \leftrightarrow q$, tức là bằng cách hoán vị hàng và cột với nhau.
Nói cụ thể hơn, ta có

Định lý 7

Biểu diễn liên hợp $\mathcal{D}(\tilde{\lambda})$ là tương ứng với sơ đồ Young liên hợp với sơ đồ Young $\{\lambda\}$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

xem [3], [15].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử

Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể

Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử

Chỉ cần công nhận định lý 6 ở cuối § 7 về biểu diễn liên hợp (xem định nghĩa và kết luận ở cuối tiết)

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân

Đọc như C

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản

Đọc toàn chương

CHƯƠNG V

CÁC PHƯƠNG PHÁP LÝ THUYẾT NHÓM TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

§ 1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Không gian Hilbert các trạng thái

Như đã biết, trong cơ học lượng tử chính thống, các trạng thái lượng tử làm thành một không gian Hilbert $\mathcal{H}$ nào đó.

Mặt khác Von Neuman đã chứng minh rằng trong khuôn khổ của cơ học lượng tử chính thống trên, các hạt không thể có những tham số nào khác các tham số **r** và t, và tập hợp các toán tử vị trí x_i và xung lượng p_i làm thành một hệ bất khả quy tác dụng trong không gian $\mathcal{H}$: tất cả các toán tử mô tả các đại lượng động lực đều là hàm của x_i và p_i và phải là bội của đơn vị, nếu chúng giao hoán với các toán tử trên (theo bổ đề Schur thứ hai).

Giữa các toán tử cơ sở trên, như đã biết, có hệ thức giao hoán cơ bản

$$[x_j, p_k] = i\hbar\,\delta_{jk}, \quad \hbar \text{ là hằng số Planck.} \tag{1-1}$$

Phương trình Schrödinger

Trong cơ học lượng tử, trạng thái tại thời điểm t ký hiệu là $|\,t\rangle$. Ta ký hiệu $|\,\rangle^+ = \langle\,|$. Tích vô hướng của các trạng thái ký hiệu là

$$\langle t_1 \| t_2 \rangle .$$

Về quy luật biến đổi của trạng thái theo thời gian, trong cơ học lượng tử, người ta thừa nhận có sự biến đổi sau

$$|\,t\,\rangle = U(t, t_0)\,|\,t_0\rangle,$$

trong đó $U(t, t_0)$ là một toán tử unita nào đó. Các toán tử này tạo nên một nhóm liên tục nào đó.

Tính chất unita của toán tử U là cần thiết, vì ta có

$$\langle t \| t \rangle = \langle t_0\,|\,U^+U\,|\,t_0\,\rangle = \langle t_0 \| t_0 \rangle ,$$

kết quả này đảm bảo ý nghĩa vật lý thống kê của hàm sóng.

Lấy đạo hàm của (1-2) theo t ta được phương trình

$$i\hbar \frac{\partial | t \rangle}{\partial t} = H | t \rangle, \quad H^{+} = H. \tag{1-3}$$

trong đó

$$H = \frac{\hbar}{i} \left. \frac{\partial U}{\partial t} \right|_{t = t_0}.$$

H chính là vi tử của nhóm các toán tử U. Phương trình (1-3) gọi là *phương trình Schrödinger*.

Nếu H không phụ thuộc tường minh vào thời gian, như đã biết, từ phương trình (1-3) ta suy ra phương trình trạng thái dừng (bài toán tìm trị riêng của toán tử năng lượng)

$$H\Phi = E\Phi, \tag{1-4}$$

trong đó Φ là hàm sóng tọa độ không phụ thuộc vào thời gian và

$$| t \rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Et\right] \Phi.$$

Các định luật bảo toàn

Theo biểu diễn Schrödinger, sự biến thiên của mọi toán tử A theo t có dạng

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A], \tag{1-5}$$

($\partial A/\partial t = 0$). Từ đó, nếu có hệ thức giao hoán sau

$$[H, A] = 0, \tag{1-6}$$

A sẽ là một đại lượng bảo toàn.

Các kiến thức trình bày sơ lược trên đây cho phép ứng dụng lý thuyết biểu diễn nhóm vào cơ học lượng tử.

§ 2. CÁC NHÓM ĐỐI XỨNG VẬT LÝ

Định nghĩa

Cho một hệ vật lý có toán tử Hamilton H(q), nhóm $\mathcal{G}$ gọi là *nhóm đối xứng* của hệ, nếu

$$H(gq) = H(q), \quad \text{với mọi } g \in \mathcal{G}, \tag{2-1}$$

trong đó

$$q = (\mathbf{r}, t).$$

Các nhóm đối xứng cơ bản

Các nhóm đối xứng cơ bản trong vật lý có hai nguồn gốc:

a) Các tính chất đồng nhất và đẳng hướng của không gian và thời gian (trong các hệ quy chiếu quán tính).

b) Các tính chất đối xứng của các phân tử, tinh thể, hạt cơ bản. Nói cụ thể hơn, ta có các nhóm đối xứng sau:

Lấy đạo hàm của (1-2) theo t ta được phương trình

$$i\hbar \frac{\partial |t\rangle}{\partial t} = H|t\rangle, \quad H^{+} = H. \tag{1-3}$$

trong đó

$$H = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial U}{\partial t}\Big|_{t = t_0}.$$

H chính là vi tử của nhóm các toán tử U. Phương trình (1-3) gọi là *phương trình Schrödinger.*

Nếu H không phụ thuộc tường minh vào thời gian, như đã biết, từ phương trình (1-3) ta suy ra phương trình trạng thái dừng (bài toán tìm trị riêng của toán tử năng lượng)

$$H\Phi = E\Phi, \tag{1-4}$$

trong đó Φ là hàm sóng tọa độ không phụ thuộc vào thời gian và

$$|t\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right]\Phi.$$

Các định luật bảo toàn

Theo biểu diễn Schrödinger, sự biến thiên của mọi toán tử A theo t có dạng

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A], \tag{1-5}$$

($\partial A/\partial t = 0$). Từ đó, nếu có hệ thức giao hoán sau

$$[H, A] = 0, \tag{1-6}$$

A sẽ là một đại lượng bảo toàn.

Các kiến thức trình bày sơ lược trên đây cho phép ứng dụng lý thuyết biểu diễn nhóm vào cơ học lượng tử.

§ 2. CÁC NHÓM ĐỐI XỨNG VẬT LÝ

Định nghĩa

Cho một hệ vật lý có toán tử Hamilton H(q), nhóm $\mathcal{G}$ gọi là *nhóm đối xứng* của hệ, nếu

$$H(gq) = H(q), \quad \text{với mọi } g \in \mathcal{G}, \tag{2-1}$$

trong đó

$$q = (\mathbf{r}, t).$$

Các nhóm đối xứng cơ bản

Các nhóm đối xứng cơ bản trong vật lý có hai nguồn gốc:

a) Các tính chất đồng nhất và đẳng hướng của không gian và thời gian (trong các hệ quy chiếu quán tính).

b) Các tính chất đối xứng của các phân tử, tinh thể, hạt cơ bản. Nói cụ thể hơn, ta có các nhóm đối xứng sau:

+ Tính đồng nhất của không gian — thời gian bốn chiều: nhóm tịnh tiến $\mathcal{C}_4$ trong không gian Minkovski bốn chiều.

+ Tính đẳng hướng của không gian ba chiều: nhóm SO(3).

+ Tính đối xứng phải-trái (gần đúng): nhóm $\mathcal{C}_i$.

+ Tính đẳng hướng và đối xứng phải-trái của không gian ba chiều: nhóm $O(3) = SO(3) \otimes \mathcal{C}_i$.

+ Tính đối xứng các phân tử: các nhóm điểm (xem chương III).

$\mathcal{C}_{2v}$ cho H_2O, SO_2, H_2S, Siss — $C_2H_2Cl_2$...

$\mathcal{C}_{3v}$ cho NH_3, PCl_3, CH_3Cl...

$\mathcal{C}_{2h}$ cho Trans — $C_2H_2Cl_2$...

$\mathcal{D}_{3d}$ cho C_2H_6 — đối

$\mathcal{D}_{3h}$ cho C_2H_6 — khuất

$\mathcal{D}_{6h}$ cho C_6H_6

$\mathcal{C}_d$ cho CH_4...

$\mathcal{O}_h$ cho SF_6, UF_6, OsF_8 v.v...

+ Tính đối xứng các tinh thể: các nhóm không gian (xem chương VI).

+ Tính đối xứng giữa các hạt cơ bản: các nhóm SU(n) (xem chương cuối).

+ Tính đối xứng giữa các hệ quy chiếu quán tính:

Trong lý thuyết phi tương đối tính: nhóm Galileo.

Trong lý thuyết tương đối tính: nhóm Lorentz O(3,1).

Lý thuyết nhóm và các đại lượng bảo toàn.

Cho toán tử biểu diễn T_g (xem II, § 3) của nhóm $\mathcal{G}$:

$$T_g\Phi(q) = \Phi(g^{-1}q) \tag{2-2}$$

tác dụng trong không gian Hilbert (không gian các trạng thái lượng tử) và ký hiệu $\varphi(q) = H(q)\,\Phi(q)$. Ta được

$$T_g[H(q)\,\Phi(q)] = T_g\,\varphi(q) = \varphi(g^{-1}q) = H(g^{-1}q)\,\Phi(g^{-1}q) = H(g^{-1}q)\,T_g\,\Phi(q).$$

Nếu $\mathcal{G}$ là nhóm đối xứng thì theo (2-1)

$$H(q) = H(g^{-1}q),$$

từ đó ta được hệ thức giao hoán sau

$$[T_g, H(q)] = 0,\ g \in \mathcal{G} \tag{2-3}$$

giữa các toán tử biểu diễn của nhóm đối xứng của hệ vật lý và toán tử Hamilton

Từ (2-3) và (1-6), ta thấy rằng

$$\dot{T}_g = \text{const (đại lượng bảo toàn)}. \tag{2-4}$$

Từ đó, ta thấy rằng nếu nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ là một nhóm liên tục (xem II (3(3)) thì các vi tử

$$I_\rho = \text{const (đại lượng bảo toàn)}. \tag{2-5}$$

§ 3. CÁC TOÁN TỬ ĐỘNG LỰC

Các kết quả (2-4) và (2-5) cho phép suy biểu thức toán tử của các đại lượng động lực trong cơ học lượng tử, xuất phát từ các tính chất đối xứng của không gian và thời gian.

Toán tử năng lượng

Ta xét nhóm đối xứng là nhóm tịnh tiến trong thời gian:

$$gt = t + \tau,\ g^{-1}t = t - \tau, \text{ (}\tau\text{ là tham số của nhóm).}$$

Thế thì theo II (3-3), ta được vi tử

$$I\,\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial\tau}[T_\tau\,\Phi(\mathbf{r}, t)]_{\tau=0} = \frac{\partial}{\partial\tau}\Phi(\mathbf{r}, t-\tau)|_{\tau=0} =$$

$$= -\frac{\partial\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

(Trong biểu thức trên T_τ là biểu diễn của phép tĩnh tiến thời gian). Do đó

$$I = -\frac{\partial}{\partial t}.$$

Toán tử hecmitic

$$E = -i\hbar\,I = i\hbar\,\partial/\partial t, \qquad (3\text{-}1)$$

gọi là *toán tử năng lượng*. Theo (2-5), năng lượng là một đại lượng bảo toàn do tính chất đồng nhất của thời gian.

Toán tử xung lượng

Ta xét nhóm đối xứng là nhóm tịnh tiến trong không gian:

$$g\,\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{a},\ g^{-1}\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{a}, \text{ (}\mathbf{a}\text{ là các tham số của nhóm).}$$

Thế thì ta được các vi tử

$$I_\sigma\,\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial a^\sigma}[T_a\,\Phi(\mathbf{r}, t)]|_{a=0} = \frac{\partial}{\partial a^\sigma}\Phi(\mathbf{r}-\mathbf{a}, t)|_{a=0} =$$

$$= -\frac{\partial\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial x^\sigma}.$$

(Trong biểu thức trên T_a là biểu diễn của phép tĩnh tiến không gian). Do đó

$$I_\sigma = -\partial/\partial x^\sigma,\ (\sigma = 1, 2, 3).$$

Toán tử hecmitic

$$\mathbf{p} = i\hbar\,\mathbf{I} = -i\hbar\nabla \qquad (3\text{-}2)$$

gọi là *toán tử xung lượng*. Theo (2-5), xung lượng bảo toàn do tính chất đồng nhất của không gian.

Ta lưu ý rằng thừa số không đổi $-i\hbar$ ở (3-2) được chọn sao cho phù hợp với các hệ thức cơ bản (1-1).

Toán tử mômen xung lượng

Ta xét nhóm đối xứng là nhóm quay trong không gian SO (3):

$$\delta\mathbf{r} = \delta g\,\mathbf{r} = [\delta\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{r}],\ (e + \delta g)^{-1}\mathbf{r} = (e - \delta g)\,\mathbf{r} = \mathbf{r} \quad [\delta\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{r}].$$

Thế thì, ta được

$$T_{e+\delta g}\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi[\mathbf{r} - [\delta\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{r}], t] = \Phi(\mathbf{r}) - [\delta\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{r}]\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) =$$

$$= \Phi(\mathbf{r}) - \delta\boldsymbol{\varphi}\,[\mathbf{r}\times\nabla]\,\Phi(\mathbf{r}, t),$$

(Trong biểu thức trên T là biểu diễn của toán tử quay trong không gian). Do đó

$$I_\sigma \Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial\varphi\sigma} \{T_{e+\delta g} \Phi(\mathbf{r}, t)\}_{|\delta\varphi=0},$$

$$I_\sigma = -[\mathbf{r} \times \nabla]_\sigma, \quad (\sigma = 1, 2, 3).$$

Toán tử hecmitic

$$\mathbf{L} = -i\hbar [\mathbf{r} \times \nabla] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \tag{3-3}$$

gọi là *toán tử mômen xung lượng*. Theo (2-5), mômen xung lượng là một đại lượng bảo toàn do tính chất đẳng hướng của không gian.

Toán tử Hamilton

Toán tử Hamilton được xây dựng theo các hệ thức giữa các đại lượng động lực trong cơ học kinh điển. Nói chung, nếu hạt tương tác với điện từ trường khi chưa kể đến hiệu ứng spin ta có toán tử hecmitic

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2M} + eA_0 + U. \tag{3-4}$$

Nếu kể đến hiệu ứng spin của hạt có spin 1/2, ta được

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2M} + eA_0 + U - (\mu, \mathbf{B}), \tag{3-5}$$

trong đó $\mathbf{B} = \text{rot}\,\mathbf{A}$, μ là mômen từ của hạt.

§ TÍNH ĐỐI XỨNG PHẢI — TRÁI

Nếu toán tử Hamilton H bất biến đối với nhóm $\mathcal{C}_i = \{e, I\}$ thì, theo (2-4), toán tử I là bảo toàn. Từ đó, do I có hai giá trị : $I = \pm 1$ (xem bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_i$), các giá trị này là những đại lượng bảo toàn và gọi là số *chẵn, lẻ*.

Trong không gian các hàm chẵn, lẻ, dễ thấy rằng toán tử I có dạng

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4-1}$$

§5. TÍNH ĐỐI XỨNG QUÁ KHỨ — TƯƠNG LAI

Tính bất biến của các phương trình cơ bản của vật lý học kinh điển

Các phương trình Newton

$$M\frac{d^2r}{dt^2} = \mathbf{F}$$

là bất biến đối với phép biến đổi $T : t \to -t$. Ta nói, các phương trình đó có tính thuận nghịch theo thời gian.

Các phương trình của điện động lực học kinh điển

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{B}],$$

chỉ bất biến đối với phép biến đổi T, khi đồng thời có phép biến đổi

$$\mathbf{E} \to \mathbf{E},\ \mathbf{B} \to -\mathbf{B}, \tag{5-1}$$

hay

$$\mathbf{A}_0 \to \mathbf{A}_0,\ \mathbf{A} \to -\mathbf{A}. \tag{5-2}$$

Thành thử, nếu $\mathbf{B} = 0$ hay $\mathbf{A} = 0$, các phương trình của điện động lực học sẽ bất biến đối với phép biến đổi T, nghĩa là có tính chất đối xứng tương lai — quá khứ.

Tính bất biến của phương trình Schrödinger

Với phép biến đổi $t \to -t$, ta thấy rằng:

a) Phương trình Schrödinger (1-3) có vế phải không đổi dấu, còn vế trái thì đổi dấu : phương trình không bất biến.

b) Các hệ thức cơ bản (1-1) cũng không bất biến, vì

$$x_i \to Tx_iT^{-1} = x_i,\ p_i \to Tp_iT^{-1} = -p_i,$$

$$[x_i, p_j] \to [x_i, -p_j] = -[x_i, p_j],\ \delta_{ij} \to \delta_{ij}.$$

Trong trường hợp này, muốn khôi phục tính bất biến đối với phép nghịch đảo thời gian, ta hãy đưa ra khái niệm toán tử phản tuyến tính. Theo định nghĩa, toán tử S thỏa mãn điều kiện

$$S(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^* S\psi_1 + \beta^* S\psi_2\ ,\ \alpha, \beta \in C$$

gọi là một toán tử *phản tuyến tính.*

Toán tử lấy liên hợp phức K

$$K\psi = \psi^*$$

là một trường hợp riêng của toán tử phản tuyến tính. Một toán tử S phản tuyến tính đồng thời là unita

$$< S\psi \,|\, S\Phi > = < \psi \,|\, \Phi >$$

gọi là một toán tử *unita phản tuyến tính.*

Bây giờ ta hãy đưa ra toán tử unita phản tuyến tính

$$\theta = TK, \tag{5-3}$$

Trong đó T và K là các toán tử: $Tt = -t$, $K\psi = \psi^*$. Áp dụng toán tử θ vào hai vế của phương trình Schrödinger, ta được ở vế trái :

$$\theta\left[i\hbar\,\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right] = TK\left[i\hbar\,\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right] = (-i)\,\hbar\,\frac{\partial\psi^*(-t)}{\partial(-t)} = i\hbar\,\frac{\partial\psi^*(-t)}{\partial t}\ ,$$

và ở vế phải

$$\theta H\psi(t) = (\theta H\theta^{-1})\,\theta\psi = (\theta H\theta^{-1})\,\psi^*(-t).$$

Từ đó, giả thiết H bất biến đối với θ, tức là $\theta H\theta^{-1} = H$, ta được phương trình có dạng

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi^*(-t)}{\partial t} = H\psi^*(-t).$$

Như thế, phương trình Schrödinger không đổi dạng với phép biến đổi θ.

Tiếp theo, nhân hai vế của hệ thức (1.1) với $\psi(t)$, sau đó áp dụng toán tử θ, ta sẽ được ở vế trái

$$\theta[x_i, p_j]\psi(t) = (\theta x_i \theta^{-1})(\theta p_j \theta^{-1})\theta\psi(t) - (\theta p_j \theta^{-1})(\theta x_i \theta^{-1})\theta\psi(t) =$$
$$= (Tx_iT^{-1})(Tp_jT^{-1})\psi^*(-t) - (Tp_jT^{-1})(Tx_iT^{-1})\psi^*(-t) =$$
$$= -[x_i, p_j]\psi^*(-t),$$

và ở vế phải

$$\theta[i\hbar\delta_{ij}\psi(t)] = -i\hbar\delta_{ij}\psi^*(-t),$$

tức là

$$[x_i, p_j]\psi^*(-t) = i\hbar\delta_{ij}\psi^*(-t),$$

thành thử, các hệ thức giao hoán cơ bản cũng không thay đổi dạng.

Nói tóm lại, trong cơ học lượng tử ta có phép biến đổi unita phản tuyến $\theta = TK$, làm mọi phương trình bất biến khi đổi dấu thời gian.

Nếu $\partial H/\partial t = 0$ thì, từ điều kiện bất biến đối với θ, ta được

$$H = \theta H \theta^{-1} = KHK^{-1} = H^*,$$

và phương trình trạng thái dừng (1-4) sẽ cho hai nghiệm Φ, Φ^* cùng tương ứng với một mức năng lượng: năng lượng E là suy biến bậc hai.

§6. PHƯƠNG PHÁP PHÂN LOẠI CÁC MỨC NĂNG LƯỢNG

Trong các tiết trước, chúng ta đã suy ra các đại lượng bảo toàn từ các biểu diễn của các nhóm đối xứng. Các kết quả này, như đã biết có nguồn gốc ở các tính đối xứng của không gian và thời gian (tính đồng nhất, đẳng hướng...).

Bây giờ chúng ta hãy dựa vào tính đối xứng của các hệ vật chất như phân tử tinh thể, nguyên tử và dùng lý thuyết biểu diễn nhóm để nghiên cứu các hệ đó.

Các hệ vật chất này có các tính đối xứng hình học: chẳng hạn cấu hình không gian các hạt nhân phân tử là bất biến đối với những nhóm điểm xác định nào đó. Do đó, nếu có một hệ hạt (hệ êlectrôn chẳng hạn), chuyển động trong trường sinh bởi hệ hạt nhân đó, toán tử Hamilton của hệ hạt này sẽ bất biến đối với nhóm đối xứng nói trên, tức là ta có đẳng thức (2-1), trong đó $\mathcal{G}$ là nhóm đối xứng của cấu hình hạt nhân nói trên. Điều này cho phép tiến hành phân loại các mức năng lượng của hệ hạt đó như sau.

Phương pháp phân loại

Ta viết phương trình Schrödinger (1-4) dưới dạng

$$H\Phi^i_\mu = E_\mu \Phi^i_\mu \tag{6-1}$$

với $i = 1, 2, ..., n_\mu$, n_μ bậc suy biến của E_μ.

Từ (2-3) và (6-1) ta được

$$H\{T_g\Phi^i_\mu\} = T_g H\Phi^i_\mu = T_g H\Phi^i_\mu = E_\mu\{T_g\Phi^i_\mu\}. \tag{6-2}$$

Đẳng thức (6-2) chứng tỏ rằng hàm $T_g\Phi^i_\mu$ cũng là một trạng thái của hệ, tương ứng với mức năng lượng E_μ. Thành thử, $T_g\Phi^i_\mu$ phải là một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái Φ^i_μ, tức là có dạng

$$T_g\Phi^i_\mu = D_{ki}(g)\Phi^k_\mu \,, \; D_{ki}(g) \in C \,. \tag{6-3}$$

Bây giờ ta chứng minh rằng các ma trận $D_{ki}(g)$, $g \in \mathcal{G}$ làm thành một biểu diễn nào đó của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$, không gian biểu diễn chính là không gian các trạng thái Φ^i_μ, tương ứng với mức năng lượng E_μ. Quả vậy, với một phần tử tùy ý khác h của $\mathcal{G}$, tương tự như (6-3), ta có

$$T_h\Phi^j_\mu = D_{lj}(h)\,\Phi^l_\mu \,. \tag{6-4}$$

Từ đó, ta có

$$T_gT_h\Phi^j_\mu = T_g\,\{T_h\Phi^j_\mu\} = T_gD_{lj}(h)\,\Phi^l_\mu = D_{lj}(h)\,T_g\,\Phi^l_\mu =$$

$$= D_{lj}(h)\,D_{kl}(g)\,\Phi^k_\mu = \{D(g)\,D(h)\}_{kj}\,\Phi^k_\mu \,.$$

Nhưng vì

$$T_{gh}\Phi^j_\mu = D_{kj}(gh)\,\Phi^k_\mu \,,$$

nên đối chiếu các đẳng thức trên với nhau, ta được

$$D(gh) = D(g)\,D(h),$$

điều này chứng tỏ rằng các ma trận $D(g)$ thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ trong không gian các trạng thái Φ_μ. Nói cách khác, khi thực hiện các phép biến đổi g của nhóm đối xứng của hệ, các trạng thái cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau E_μ biến đổi lẫn nhau và thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm đối xứng. Các biểu diễn này chủ yếu là bất khả quy. Quả vậy, vì toán tử H là một toán tử tuyến tính nên các trạng thái biến đổi lẫn nhau dưới tác dụng của các phần tử của nhóm, tất yếu phải cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau (tính chất của bài toán trị riêng !). Thứ nữa, khả năng trùng với nhau của các mức năng lượng tương ứng với những nhóm trạng thái không biến đổi lẫn nhau rất là hãn hữu. Những trường hợp này, nếu xảy ra, gọi là những trường hợp *suy biến ngẫu nhiên.*

Thành thử ta có thể kết luận như sau :

Ngoài trường hợp suy biến ngẫu nhiên thì :

a) Tương ứng với mỗi biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng ta có một mức năng lượng.

b) Bậc suy biến của mức năng lượng bằng chiều của biểu diễn bất khả quy tương ứng của nhóm đối xứng.

c) Các trạng thái tuân theo các quy luật biến đổi của các không gian biểu diễn bất khả quy tương ứng của nhóm đối xứng.

Khi vận dụng các kết quả này, cần lưu ý điểm sau : do tính bất biến của cơ học lượng tử đối với phép biến đổi θ (xem cuối § 6), hai biểu diễn bất khả quy được thực hiện trong những không gian nhưng liên hợp phức với nhau Φ_μ và Φ_μ^*, phải gộp lại thành một biểu diễn « bất khả quy về mặt vật lý », và có chiều gấp đôi. Điều này đã được thể hiện trong các bảng đặc biểu của các nhóm điểm $\mathcal{C}_3$, $\mathcal{C}_4$, $\mathcal{S}_4$, $\mathcal{T}$...

Ví dụ

Các phân tử có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{2v}$: H_2O, SO_2 v.v...

Nhóm này có bốn biểu diễn bất khả quy một chiều. Theo các kết quả trên (trừ trường hợp suy biến ngẫu nhiên !) ta kết luận :

Năng lượng của hệ electron của các phân tử trên

a) Có bốn mức,

b) Tất cả các mức đều không suy biến

c) Hàm sóng tương ứng với biểu diễn $\mathcal{A}_1$ là hoàn toàn đối xứng (trạng thái cơ bản).

Hàm sóng tương ứng với biểu diễn $\mathcal{B}_1$ đổi dấu khi có các phần tử C_2 và σ_v tác dụng lên v.v...

Các phân tử có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$: $ClCH_3$, NH_3 v.v...

Nhóm này có ba biểu diễn bất khả quy, một biểu diễn hai chiều và hai biểu diễn một chiều. Ta kết luận :

Năng lượng hệ electron của phân tử

a) Có ba mức năng lượng,

b) Hai mức đơn, tương ứng với các biểu diễn $\mathcal{A}$ và $\mathcal{B}$, một mức suy biến bậc hai, tương ứng với biểu diễn $\mathcal{E}$.

c) Hàm sóng tương ứng với mức năng lượng $\mathcal{A}$ là hoàn toàn bất biến v.v...

Electrôn chuyển động trong trường xuyên tâm

Trong trường hợp này, nhóm đối xứng là nhóm O (3). Thành thử, số mức năng lượng của êlectrôn bằng số biểu diễn bất khả quy của nhóm O (3).

Suy biến ngẫu nhiên

Ta hãy lấy một thí dụ về suy biến ngẫu nhiên. Ta biết rằng đối với hạt chuyển động trong hộp thế năng

$$U = U(x) + U(y) + U(z) ,$$

với

$$U(x) = U(y) = U(z) = \begin{cases} 0 \text{ khi } 0 \leqslant x \leqslant a,\ 0 \leqslant y \leqslant a, \\ \qquad 0 \leqslant z \leqslant a, \\ \infty \text{ tại các giá trị khác của } x, y, z \end{cases}$$

thì năng lượng của hạt có dạng

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2}{2a^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) , (\hbar = 1, \mathcal{M} = 1).$$

Tất nhiên nhóm đối xứng ở đây là nhóm của hình lập phương, tức là nhóm $\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \otimes \mathcal{C}_i$. Các biểu diễn bất khả quy của nhóm này bằng tích trực tiếp các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{O}$ và nhóm $\mathcal{C}_i$. Nhưng vì nhóm $\mathcal{O}$ không có biểu diễn bất khả quy nào có chiều lớn hơn 3 và vì các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{C}_i$ đều một chiều, nên chiều của các biểu diễn bất khả quy của nhóm O_h là không lớn hơn 3. Tuy nhiên, ta thấy rằng có tồn tại 4 hàm sóng có cùng một mức năng lượng bằng $27\pi^2/2a^2$: đó là

$$\Phi_{n_1 n_2 n_3}: \Phi_{511}, \Phi_{151}, \Phi_{115} \text{ và } \Phi_{333}.$$

Như thế là có suy biến ngẫu nhiên.

Phương pháp lý thuyết nhóm còn cho phép nghiên cứu nhiều sự phân loại khác mà chúng ta sẽ thấy sau này.

§7. PHƯƠNG PHÁP XÉT SỰ TÁCH CÁC MỨC NĂNG LƯỢNG

Trên cơ sở của phương pháp thứ nhất của lý thuyết nhóm, trình bày ở §6, ta hãy xét hai phương pháp khác. Trước hết là phương pháp xét sự tách các mức năng lượng.

Phương pháp

Cho một hệ nào đó có nhóm đối xứng là $\mathcal{G}_0$. Các mức năng lượng E_0 của hệ được phân loại theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}_0$ (trừ trường hợp suy biến ngẫu nhiên), bậc suy biến bằng chiều của biểu diễn bất khả quy tương ứng. Giả sử toán tử Hamilton của hệ là H_0. Lại giả sử có một ngoại trường yếu H' nào đó ($H' \ll H_0$), tác dụng lên hệ và làm nhiễu loạn các mức năng lượng E_0. Toán tử Hamilton trở thành

$$H_0 \to H = H_0 + H'.$$

Có hai trường hợp:

a) Nếu nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ của toán tử H' nhận nhóm $\mathcal{G}_0$ làm nhóm con, (ta nói H' có tính đối xứng cao hơn tính đối xứng của H_0), thì nhóm đối xứng của toán tử H bằng $\mathcal{G}_0$. Trong trường hợp này, tuy các mức năng lượng có xê dịch đi it nhiều

$$E_{0\mu} \to E_\mu = E_{0\mu} + \triangle E_\mu$$

sự phân loại các mức năng lượng vẫn như trước.

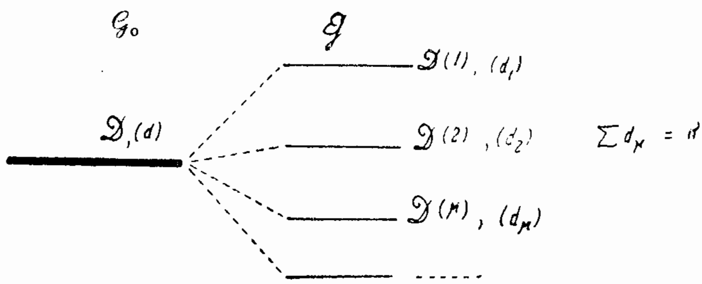
b) Nếu $\mathcal{G}$ là một nhóm con thực sự của $\mathcal{G}_0$, (ta nói tính đối xứng của H' thấp hơn tính đối xứng của H_0), tính đối xứng của bài toán hạ xuống, thì nhóm đối xứng của toán tử H sẽ là nhóm con $\mathcal{G}$ của $\mathcal{G}_0$. Trong trường hợp này, các mức năng lượng của hệ vật lý, dưới tác dụng của nhiễu loạn H', sẽ sắp xếp lại theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm con $\mathcal{G}$. Nếu nhóm con $\mathcal{G}$ có tính chất hoàn toàn khả quy thì mỗi biểu diễn $\mathcal{D}$ của $\mathcal{G}_0$ hạn chế trên nhóm con $\mathcal{G}$ sẽ phân thành tổng của các biểu diễn bất khả quy của nhóm. Ta có bài toán biểu diễn hạ cảm

$$\mathcal{G}_0 \downarrow \mathcal{G} : \mathcal{D} = \sum_\mu \oplus a_\mu \mathcal{D}^{(\mu)}.$$

Các hệ số a_μ tìm theo công thức II (10-4), trong đó $\mathcal{G}$ là cấp của nhóm con $\mathcal{G}$.

Dĩ nhiên chiều các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ không lớn hơn chiều của biểu diễn $\mathcal{D}$, tức là bậc suy biến của năng lượng nói chung giảm, số mức năng lượng nói chung sẽ tăng lên. Hiện tượng này gọi là hiện tượng tách các mức năng lượng hay giảm tính suy biến.

Như thế, về mặt lý thuyết nhóm, hiện tượng tách các mức năng lượng được giải quyết bằng bài toán biểu diễn hạ cảm. Vấn đề này có thể biểu diễn bằng sơ đồ sau (các d và d_μ trỏ các bậc suy biến)



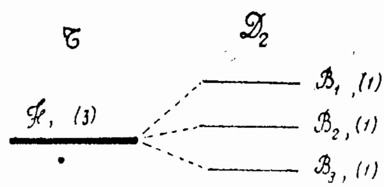
Hình 5-1

Ví dụ

Theo kết quả của bài toán biểu diễn hạ cảm ở II (18-3), ta có

$$\mathcal{C}\downarrow\mathcal{D}_2 : \mathcal{T} = \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{B}_3$$

Thành thử nếu $\mathcal{G}_o = \mathcal{C}$ và $\mathcal{G} = \mathcal{D}_2$, còn $\mathcal{D} = \mathcal{T}$ thì rõ ràng mức năng lượng suy biến bậc ba, tương ứng với biểu diễn $\mathcal{T}$ của nhóm $\mathcal{C}$, dưới tác dụng của nhiễu loạn với nhóm đối xứng $\mathcal{D}_2$, sẽ tách thành ba mức đơn, tương ứng với các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{B}_1$, $\mathcal{B}_2$ và $\mathcal{B}_3$. Sự suy biến được khử hoàn toàn. Ta có sơ đồ



Hình 5-2

§ 8. PHƯƠNG PHÁP TÌM CÁC QUY TẮC LỌC LỰA

Trong vật lý, các quy tắc lọc lựa là các tiêu chuẩn cho phép xem trong những trường hợp nào, các phần tử ma trận

$$F^{ij}_{(\mu,\nu)} = \langle \psi^i_\mu F, \Phi^j_\nu \rangle = \int \psi^{i*}_\mu F \Phi^j_\nu \, dq, \qquad (8\text{-}1)$$

của một toán tử F nào đó là khác không. Tất nhiên điều này phụ thuộc vào các tính chất biến đổi của các hàm sóng ψ^i_μ, Φ^j_ν và của toán tử F. Bài toán này rất quan trọng khi nghiên cứu sự chuyển dời từ một trạng thái dừng này sang một trạng thái dừng khác, cũng như khi tính các phần tử ma trận chéo của F.

Trước hết, ký hiệu $\mathcal{D}^{(o)}$ là biểu diễn đơn vị của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$. $\psi^i_o = inv \neq 0$ là trạng thái tương ứng với biểu diễn đó, ta hãy chứng minh

Định lý

$$\int \Phi^j_\nu \, dq = 0 \textit{ với } \nu \neq 0. \tag{8-2}$$

Chứng minh

Quả vậy, giả sử T_g là một biểu diễn unita của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$, ta có

$$\langle \psi^i_\mu , \Phi^j_\nu \rangle = \langle T_g \psi^i_\mu , T_g \Phi^j_\nu \rangle .$$

Nhưng vì vế trái không phụ thuộc vào phần tử g, nên theo các hệ thức trực giao II (9-6) ta có thể viết

$$\int \psi^{i*}_\mu \cdot \Phi^j_\nu \, dq = \langle \psi^i_\mu , \Phi^j_\nu \rangle = \frac{1}{G} \sum_g \langle T_g \psi^i_\mu, T_g \Phi^j_\nu \rangle =$$

$$= \frac{1}{G} \langle \psi^k_\mu , \Phi^l_\nu \rangle \sum_g D^{(\mu)}_{ki} (g) D^{(\nu)}_{lj} (g) = \frac{1}{G} \langle \psi^k_\mu , \Phi^{l}_\nu \rangle \frac{G}{n_\mu} \delta_{\mu\nu} \delta_{kl} \delta_{ij} =$$

$$= \frac{1}{n_\mu} \langle \psi^l_\mu , \Phi^l_\nu \rangle \delta_{\mu\nu} \delta_{ij}.$$

Tiếp theo, ở vế phải cho $\mu \neq \nu$ và $i \neq j$, ta được

$$\int \psi^{i*}_\mu \, \Phi^j_\nu \, dq = 0, \quad \mu \neq \nu, \ i \neq j.$$

Lại cho $\mu = 0$, tức là $\psi^i_0 = \text{inv}$, ta được đẳng thức (8-2).

Từ đẳng thức (8-2) ta thấy rằng nếu ψ^i là một hàm thực hiện một biểu diễn khả quy nào đó $\mathcal{D}$ của nhóm $\mathcal{G}$ thì tích phân này chỉ khác không khi $\mathcal{D}$ có chứa biểu diễn đơn vị.

Bây giờ ta trở lại biểu thức (8-1). Nếu toán tử F biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ (ký hiệu là $F : \mathcal{D}^{(\alpha)}$) của nhóm $\mathcal{G}$ thì, dựa vào định nghĩa của tích biểu diễn (chương II, § 16) ta thấy rằng biểu thức dưới dấu tích phân (8-1) biến đổi theo biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(\mu)*} \otimes \mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} \tag{8-3}$$

Tiếp theo, vì đặc biểu diễn (8-3) là $\chi^{(\mu)*} \chi^{(\alpha)} \chi^{(\nu)}$ và đặc biểu của biểu diễn đơn vị là $\chi^{(0)} \equiv 1$ nên, theo công thức II (10-4), số lần (a_0) biểu diễn đơn vị $\mathcal{D}^{(0)}$ nằm trong biểu diễn (8-3) bằng

$$a_0 = \frac{1}{G} \sum_g \chi^{(\mu)*} (g) \chi^{(\alpha)}(g) \chi^{(\nu)} (g). \tag{8-4}$$

Nhưng cũng theo công thức II (10-4) đó, vế phải của (8-4) lại bằng số lần biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nằm trong tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$. Thành thử số lần biểu diễn (8-3) chứa biểu diễn đơn vị bằng số lần biểu diễn tích $\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$ chứa biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ Từ đó, đẳng thức (8-2) cho

Quy tắc lọc lựa I

Phần tử ma trận (8-1) là khác không khi và chỉ khi biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ có mặt trong biểu thức khai triển của tích $\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$.

Bài toán tìm các quy tắc lọc lựa như thế quy về bài toán tìm các chuỗi Clebsch — Gordan của các tích biểu diễn của nhóm đối xứng của các hệ vật lý.

Ta có thể viết quy tắc lọc lựa I dưới một dạng khác. Vì theo tính bất biến đối với phép nghịch đảo thời gian, các hàm sóng ψ^i_μ và ψ^{i*}_μ được xếp vào cùng một biểu diễn [1] (bất khả quy về mặt vật lý), nên trong tích biểu diễn (8-3), ta có thể thay biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ bằng biểu diễn liên hợp phức $\mathcal{D}^{(\mu)*}$ của nó và được tích biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$$

Nhưng vì tích biểu diễn không phụ thuộc vào thứ tự các nhân tử nên, hoán vị $\mu \leftrightarrow \alpha$, từ quy tắc I, ta được

Quy tắc lọc lựa II

Phần tử ma trận (8-1) là khác không khi và chỉ khi biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ có mặt trong biểu thức khai triển của tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)}$.

Các biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ và $\mathcal{D}^{(\nu)}$ có thể khác nhau hoặc như nhau. Trong trường hợp chúng như nhau, các hàm thực hiện biểu diễn lại có thể khác nhau, hoặc như nhau. Trường hợp cuối cùng này xảy ra khi chúng ta tính các phần tử ma trận chéo của toán tử F. Nhưng trong trường hợp này, như đã biết (xem II, § 17), tất cả các bình phương phản xứng các biểu diễn của nhóm đều bằng không, tức là tích biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}$ quy về bình phương đối xứng $[\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}]$. Thành thử, ta có

Quy tắc lọc lựa III

Phần tử ma trận chéo

$$\langle \psi^i_\mu, F\, \psi^i_\mu \rangle$$

là khác không khi và chỉ khi biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ có mặt trong biểu thức khai triển của bình phương đối xứng $[\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}]$ của biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$.

Bây giờ ta hãy trình bày một vấn đề cụ thể thường gặp về các quy tắc lọc lựa I, II và III.

Đó là vấn đề tương tác của một hệ vi mô (nguyên tử, phân tử) với điện từ trường, giải theo phương pháp nhiễu loạn thông thường. Giả sử toán tử Hamilton khi chưa có nhiễu loạn là H_0, với hệ hàm riêng là

$$\psi^0_n(\mathbf{r}, t) = \Phi^0_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E^0_n t\right),$$

và giả sử nhiễu loạn là H', $H' \ll H_0$.

Với tương tác của hệ vi mô với điện từ trường thì

$$H' = -\frac{e}{Mc}\, \mathbf{A}\, \mathbf{p},$$

trong đó e là điện tích của êlectrôn của hệ, M là khối lượng của êlectrôn đó, c là tốc độ ánh sáng, **A** là thế hàm vectơ điện từ (khá bé).

---

1) Xem phần cuối § 5.

Vectơ **A** có biểu thức (nghiệm của phương trình Maxwuel, trong chân không)

$$\mathbf{A} = C\mathbf{u}e^{-i\mathbf{kr}}e^{i\omega t} + C\mathbf{u}e^{i\mathbf{kr}}e^{-i\omega t},$$

với ω là tần số, **k** là vectơ sóng, còn **u** là phương không đổi của diện trường ($C = \text{const}$).

Nếu tại thời điểm ban đầu $t = 0$, hệ vi mô ở trạng thái dừng

$$\psi_n^o(\mathbf{r}, t)$$

thì, theo phương pháp nhiễu loạn trong cơ học lượng tử, xác suất để tại thời điểm t hệ ở trạng thái dừng

$$\psi_m^o(\mathbf{r}, t)$$

là

$$\beta_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{mn}\exp i\omega_{mn}\,dt\right|^2$$

trong đó

$$H'_{mn} = (\Phi_m^o, H'\,\Phi_n^o),$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m^o - E_n^o}{\hbar}.$$

Trong trường hợp cụ thể bức xạ điện từ nói trên, xác suất chuyển dời trạng thái này sẽ tỉ lệ với bình phương của phần tử ma trận sau

$$-\frac{e}{M}C(\Phi_m^o\,e^{-i\mathbf{kr}}(\mathbf{u}, \mathbf{p})\,\Phi_n^o,$$

(tính theo đơn vị thời gian).

Nhưng, trong các trường hợp thực tiễn, do các hệ vi mô có kích thước khá bé (cỡ 10^{-8}cm), các hàm sóng Φ_m^o và Φ_n^o ở biểu thức trên chỉ khác không khi r bé hơn kích thước trên. Từ đó, các phép tính cụ thể đơn giản cho thấy rằng với các ánh sáng thấy được và ánh sáng tử ngoại thì

$$\mathbf{kr} \ll 10^{-3}.$$

Thành thử, ta có thể khai triển

$$\exp(-i\mathbf{kr}) = 1 - i\mathbf{kr} + \frac{(-i\mathbf{kr})}{2!} + \ldots$$

Với khai triển này, phần tử ma trận đang xét có thể viết dưới dạng chuỗi

$$W_{mn}^{(1)} + W_{mn}^{(2)} + W_{mn}^{(3)},\ (W^{(s)} \ll W^{(s+1)}),$$

trong đó

$$W_{mn}^{(1)} = -\frac{e}{M}C(\Phi_m^o, (\mathbf{u}, \mathbf{p})\,\Phi_n^o),$$

$$W_{mn}^{(2)} = -\frac{ie}{M}C(\Phi_m^o, (\mathbf{k}, \mathbf{r})(\mathbf{u}, \mathbf{p})\,\Phi_n^o),$$

. . . .

Tiếp theo, với

$$H_o = \frac{p^2}{2M} + U(r),$$

có thể chứng minh rằng

$$\mathbf{p} = \frac{M}{i\hbar}(\mathbf{r}H_o - H_o\mathbf{r}),$$

$$x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x} = \frac{2M}{\hbar^2}(xyH_o - H_o xy)$$

(và các đẳng thức tương tự như thế).

Thế thì, thay biểu thức của $\mathbf{p}$ vào lượng $W^{(1)}_{mn}$, ta được

$$W^{(1)}_{mn} = -i\omega_{mn} C\,(\Phi^o_m, (\mathbf{u}, \mathbf{d})\,\Phi^o_n),$$

với

$$\mathbf{d} = e\,\mathbf{r},$$

là mômen lưỡng cực của hệ vi mô.

Bức xạ điện từ, tương ứng với lượng $W^{(1)}_{mn}$ gọi là *bức xạ lưỡng cực điện*. Ta thấy rằng với bức xạ lưỡng cực điện thì toán tử F tỉ lệ với vectơ $\mathbf{r}$:

$$F \approx \mathbf{r}.$$

Tiếp theo, nếu ta chọn trục y theo vectơ phân cực và trục x dọc theo vectơ sóng, thì lượng $W^{(2)}_{mn}$ sẽ tỉ lệ với

$$-ik\hbar\left[\Phi^o_m, x\frac{\partial}{\partial y}\Phi^o_n\right] =$$

$$= -\frac{i}{2}k\hbar\left\{\left[\Phi^o_m, \left[x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x}\right]\Phi^o_n\right] +\right.$$

$$\left. + \left[\Phi^o_m, \left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right]\Phi^o_n\right]\right\}.$$

Thay biểu thức trong dấu ngoặc thứ nhất bởi biểu thức đã thu được ở trên, ta thấy rằng với cách chọn hệ trục nói trên, lượng $W^{(2)}_{mn}$ tỷ lệ với

$$-ikM\,\omega_{mn}(\Phi^o_m, xy\,\Phi^o_n) + \frac{k}{2}(\Phi^o_m, L_z\Phi^o_n).$$

Tương tự như thế, với các cách chọn hệ trục tọa độ khác, ta có các biểu thức tỉ lệ sau của lượng $W^{(2)}_{mn}$:

$$-ikM\,\omega_{mn}(\Phi^o_m, yz\,\Phi^o_n) + \frac{k}{2}(\Phi^o_m, L_x\Phi^o_n),$$

$$-ikM\,\omega_{mn}(\Phi^o_m, zx\,\Phi^o_n) + \frac{k}{2}(\Phi^o_m, L_y\Phi^o_n).$$

Bức xạ tương ứng với các số hạng thứ hai của các biểu thức trên gọi là *bức xạ lưỡng cực từ*. Như thế, với bức xạ lưỡng cực từ, ta có

$$F \approx \mathbf{L} \text{ (mômen xung lượng).}$$

Bức xạ tương ứng với các số hạng thứ nhất của các biểu thức trên gọi là *bức xạ tứ cực điện*. Như thế, với bức xạ tứ cực điện, ta có

$$F \approx x_i x_k - \frac{1}{3}\delta_{ik} x_l x_l.$$

Trong trường hợp tán xạ tổ hợp (hệ vi mô hấp thu một photon, chuyển trạng thái và bức xạ một photôn khác), có thể chứng minh rằng

$$F \approx x_i x_k.$$

Tóm lại, với bức xạ điện từ của hệ vi mô, để tìm xác suất chuyển dời trạng thái, ta cần phải tính các phần tử ma trận dạng (8-1), trong đó

$F \approx \mathbf{r}$ (bức xạ lưỡng cực điện),

$F \approx \mathbf{L}$ (bức xạ lưỡng cực từ),

$F \approx x_i x_k - \frac{1}{3}\delta_{ik} x_l x_l$ (bức xạ tứ cực điện),

$F \approx x_i x_k$ (tán xạ tổ hợp). (8-5)

Các xác suất bức xạ lưỡng cực từ và tứ cực điện rất bé so với bức xạ lưỡng cực điện. Chỉ trong những trường hợp đặc biệt bức xạ lưỡng cực điện bằng không, ta mới tính đến các bức xạ lưỡng cực từ và tứ cực điện, hoặc những bức xạ cao hơn.

Để vận dụng các quy tắc lọc lựa I, II và III, vấn đề là xem các lượng ở (8-5) tuân theo những biểu diễn nào của nhóm đối xứng. Sau này chúng ta sẽ thấy rằng các lượng đó tuân theo những biểu diễn bất khả quy của nhóm trực giao O(3). Nhưng trong các ứng dụng cụ thể, nhóm đối xứng là chỉ là những nhóm con của nhóm đó (xem §2). Thành thử, cần phải giải bài toán biểu diễn hạ cảm $0(3)\downarrow \mathcal{G}$, với $\mathcal{G}$ là nhóm đối xứng của hệ vi mô. Bài toán này sẽ giải ở chương VIII, §14. Tuy nhiên, ngay bây giờ, chúng ta cũng đã có thể tìm thấy các biểu thức của biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ dựa vào các bảng đặc biểu của các nhóm điểm.

Ta hãy lấy chẳng hạn bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ để làm ví dụ (xem bảng đặc biểu ở cuối tài liệu).

$\mathcal{C}_{3v}$			e	$2C_3$	$3\sigma_v$
$x^2+y^2,\ z^2$	z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1
	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	-1
$x^2-y^2,\ xy$ $(xz,\ yz)$	(x, y) (L_x, L_y)	$\mathcal{E}$	2	-1	0

Ở cột thứ hai, theo cách xây dựng bảng đặc biểu, thành phần z tuân theo biểu diễn $\mathcal{A}_1$ của nhóm, còn hai thành phần x và y tuân theo biểu diễn $\mathcal{E}$ của nhóm. Như thế, có nghĩa là ba thành phần x, y, z của vectơ **r** tuân theo biểu diễn khả quy

$$\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}$$

của nhóm.

Thế thì, theo (8-5), ta thấy rằng khi có bức xạ lưỡng cực điện thì toán tử F tuân theo biểu diễn khả quy

$$F: \mathcal{D}^{(\alpha)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}.$$

Tương tự như thế, cũng theo cột thứ hai, thành phần L_z tuân theo biểu diễn $\mathcal{A}_2$, còn các thành phần L_x và L_y tuân theo biểu diễn $\mathcal{E}$ của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$. Từ đó, theo (8-5), ta thấy rằng khi có bức xạ lưỡng cực từ thì toán tử F tuân theo biểu diễn khả quy

$$F: \mathcal{D}^{(\alpha)} = \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}.$$

Bây giờ ta chuyển sang hiện tượng tán xạ tổ hợp. Vì theo (8-5), trong trường hợp này toán tử F biến đổi như tích các lượng x_i, nên rõ ràng biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ trong trường hợp này sẽ là

$$F: \mathcal{D}^{(\alpha)} = (\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}) \otimes (\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}),$$

và chúng ta cần thực hiện phép nhân ở trên.

Cuối cùng ta xét đến cột thứ nhất của bảng đặc biểu. Theo lệ thường, cột này ghi các thành phần của lượng

$$x_i x_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} x_l x_l,$$

tức là của lượng biến đổi tỉ lệ với toán tử F khi có bức xạ tứ cực điện. Đó là các lượng

$$x^2 - \frac{1}{2}(y^2 + z^2),\ y^2 - \frac{1}{2}(z^2 + x^2),\ z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$$

$$xy,\ yz,\ zx,$$

hay là các tổ hợp tuyến tính của các lượng đó. Trong trường hợp cụ thể của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, vì z biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{A}_1$, nên z^2 cũng biến đổi theo biểu diễn đó (biểu diễn đơn vị!). Từ đó, thành phần

$$z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$$

quy về lượng $x^2 + y^2$, được ghi trong bảng.

Như thế, khi có bức xạ tứ cực điện, theo (8-5), toán tử từ F tuân theo biểu diễn khả quy

$$F: \mathcal{D}^{(\alpha)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{E} = \mathcal{A}_1 \oplus 2\mathcal{E}.$$

Các quy tắc lọc lựa cho nhóm O

Ta hãy tìm các quy tắc lọc lựa cho nhóm $\mathcal{O}$. Ta biết rằng nhóm này có 5 biểu diễn bất khả quy là $\mathcal{A}_1$, $\mathcal{A}_2$, $\mathcal{E}$, $\mathcal{F}_1$ và $\mathcal{F}_2$.

Trước hết ta hãy tính chuỗi Clebsch-Gordan cho nhóm này. Theo các công thức thông thường về đặc biểu của một tích biểu diễn và về sự phân tích một biểu diễn khả quy thành tổng các biểu diễn bất khả quy, ta có các kết quả sau (dấu $\oplus$ thay bằng $+$).

	$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{A}_2$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_2$
$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{A}_2$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_2$
$\mathcal{A}_2$	$\mathcal{A}_2$	$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_1$
$\mathcal{E}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2 + \mathcal{E}$	$\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$
$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{A}_1 + \mathcal{E} + \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{A}_2 + \mathcal{E} + \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$
$\mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{A}_2 + \mathcal{E} + \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{A}_1 + \mathcal{E} + \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$

Với bức xạ lưỡng cực điện có thể chứng minh rằng (xem bảng đặc biểu) toán tử F tuân theo biểu diễn $\mathcal{F}_1$ của nhóm $\mathcal{O}$. Thành thử theo quy tắc II, các chuyển dời cho phép khi có bức xạ lưỡng cực điện là

$$\text{F}: \mathcal{F}_1 \quad : \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_1, \quad \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}, \quad \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_1, \quad \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_2,$$
$$\mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_2, \quad \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}, \quad \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{F}_2.$$

Bây giờ ta hãy tính các phần tử ma trận chéo của toán tử F. Muốn thế, ta hãy tính các bình phương đối xứng của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{O}$. Ta có đặc biểu

$$[\chi \times \chi](e) = \frac{1}{2}\{\chi^2(e) + \chi(e^2)\} = \frac{1}{2}(9+3) = 6,$$

$$[\chi \times \chi](C_3) = \frac{1}{2}\{\chi^2(C_3) + \chi(C_3^2)\} = \frac{1}{2}\{\chi^2(C_3) + \chi(C_3)\} =$$
$$= \frac{1}{2}(0+0) = 0,$$

$$[\chi \times \chi](C_4^2) = \frac{1}{2}\{\chi^2(C_4^2) + \chi(C_4^4)\} = \frac{1}{2}(1+3) = 2,$$

$$[\chi \times \chi](C_2) = \frac{1}{2}\{\chi^2(C_2) + \chi(C_2^2)\} = \frac{1}{2}(1+3) = 2,$$

$$[\chi \times \chi](C_4) = \frac{1}{2}\{\chi^2(C_4) + \chi(C_4^2)\} = \frac{1}{2}(1-1) = 0.$$

Từ đó, theo công thức II(10-4) ta được chuỗi Clebsch-Gordan

$$[\mathcal{F}_2 \otimes \mathcal{F}_2] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2.$$

Tương tự như thế, ta được

$$[\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1] = [\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{A}_2] = \mathcal{A}_1, \quad [\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E},$$
$$[\mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_1] = [\mathcal{F}_2 \otimes \mathcal{F}_2] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2.$$

Vì các vế phải của các đẳng thức này đều không chứa biểu diễn $\mathcal{F}_1$ của toán tử F, nên các phần tử ma trận chéo của toán tử F đều bằng không.

Với nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, có thể chứng minh rằng khi có hiện tượng tán tổ hợp thì toán tử F tuân theo biểu diễn (theo trình bày ở trên)

$$\text{F}: (\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}) \otimes (\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}) = 2\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus 3\mathcal{E}.$$

Từ đó, nếu trạng thái đầu là trạng thái cơ bản, thì rõ ràng tất cả các mức năng lượng của các phân tử có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$ đều hoạt [1] đối với hiện tượng tán xạ tổ hợp.

TÓM TẮT

Trên đây ta đã trình bày ba phương pháp chủ yếu của lý thuyết biểu diễn nhóm ứng dụng vào cơ học lượng tử:

Bài toán vật lý		*Bài toán toán học*
Phân loại mức năng lượng	→	Tìm hệ thống biểu diễn bất khả quy
Khử suy biến (tách mức)	→	Giải bài toán biểu diễn hạ cảm
Tìm các quy tắc lọc lựa	→	Tìm chuỗi Clebsch-Gordan

Sau đây, chúng ta sẽ trình bày một số ứng dụng khác trong phân tử. Những ứng dụng vào trong các lĩnh vực khác của vật lý học lượng tử sẽ trình bày trong các chương sau.

§ 9. PHƯƠNG PHÁP PHÂN LOẠI DAO ĐỘNG BÉ

Dao động vuông góc

Trong cơ học lý thuyết và trong đại số học, đã chứng minh rằng có thể chéo hóa đồng thời hai dạng toàn phương là động năng T và thế năng U của một hệ hạt dao động bé quanh vị trí cân bằng:

$$T = \frac{1}{2}\sum \dot{Q}^{i2}_{\alpha}, \qquad U = \frac{1}{2}\sum \omega^2_{\alpha} Q^{i2}_{\alpha}, \qquad (i = 1, \dots, n_{\alpha}).$$

Các lượng Q^i_{α} là những tổ hợp tuyến tính của các dịch chuyển của các hạt (ra khỏi vị trí cân bằng bền).

Các lượng Q^i_{α} gọi là *dao động vuông góc*, còn các lượng ω_{α} là *tần số vuông góc*. Lượng n_{α} là bậc suy biến của tần số ω_{α}.

Như thế, chuyển động bé của hệ là một sự tổng hợp của nhiều dao động điều hòa với năng lượng

$$E = \sum_{\alpha} E_{\alpha},$$

$$E_{\alpha} = \frac{1}{2}\sum_{i}^{n_{\alpha}} (\dot{Q}^{i2}_{\alpha} + \omega^2_{\alpha} Q^{i2}_{\alpha}). \tag{9-1}$$

---

1) Một mức năng lượng E gọi là hoạt đối với hiện tượng tán xạ tổ hợp, nếu sự chuyển dời từ trạng thái inv (tuân theo biểu diễn đơn vị) đến trạng thái tương ứng với mức năng lượng E đó là cho phép khi có tán xạ tổ hợp. Ta cũng có các định nghĩa tương tự như thế đối với các hiện tượng bức xạ khác.

Biểu diễn dao động

Thông thường, các hạt của hệ có cấu hình không gian nhận một nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ nào đó (chẳng hạn đó là nhóm đối xứng của cấu hình các hạt nhân nguyên tử của phân tử). Nhóm này làm bất biến năng lượng (9-1). Điều này có nghĩa là không gian các dao động vuông góc thực hiện một biểu diễn $\mathcal{D}$ nào đó của nhóm đối xứng. Nói chung, biểu diễn này là khả quy. Sự phân tích biểu diễn này thành tổng những biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng sẽ cho phép phân loại các dao động vuông góc và các tần số vuông góc.

Để tính đặc biểu của biểu diễn (nói chung khả quy) thực hiện trong không gian 3N chiều (N là số hạt của hệ) các dao động vuông góc Q, ta hãy chuyển sang không gian các dịch chuyển ký hiệu là u, và chọn các dịch chuyển đó làm cơ sở. Về phương diện đại số, điều này dẫn đến một biểu diễn tương đương.

Ta biết rằng chuyển động toàn bộ của hệ chia thành ba phần: phần dao động quanh các vị trí cân bằng, phần tịnh tiến và phần quay của hệ xem như một cố thể.

Tương ứng, không gian biểu diễn toàn bộ $\mathcal{M}$ phân thành tổng trực tiếp các không gian dao động, không gian tịnh tiến và không gian quay.

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 \oplus \mathcal{M}_T \oplus \mathcal{M}_R.$$

Trong chuyển động tịnh tiến, tất cả các hạt đều di chuyển một vectơ như nhau; ký hiệu là **R**. Như thế, không gian tịnh tiến $\mathcal{M}_T$ là không gian ba chiều của vectơ **R** đó.

Trong chuyển động quay, tại mỗi thời điểm, toàn bộ hệ quay xung quanh một trục nào đó, với vectơ quay — ký hiệu là $\boldsymbol{\Omega}(t)$ — đặt trên trục đó. Như thế, không gian quay $\mathcal{M}_R$ là không gian ba chiều của vectơ quay $\boldsymbol{\Omega}$.

Tương ứng với biểu thức phân tích không gian trên, đặc biểu $\chi(g)$, $g \in \mathcal{G}$ của biểu diễn $\mathcal{D}$ phân thành tổng

$$\chi(g) = \chi_0(g) + \chi_T(g) + \chi_R(g), \tag{9-2}$$

trong đó các lượng $\chi_0(g)$, $\chi_T(g)$ và $\chi_R(g)$ tương ứng là các đặc biểu của các biểu diễn cảm ứng trong các không gian con trên.

Các biểu diễn này tương ứng gọi là *biểu diễn dao động*, ký hiệu là $\mathcal{D}_0$, *biểu diễn tịnh tiến* và *biểu diễn quay*.

Tiếp theo, ta lưu ý rằng khi tính đặc biểu tại một phần tử nào đó g của nhóm điểm, ta chỉ cần xét các vị trí cân bằng nào của các hạt được giữ nguyên dưới tác dụng của g. Quả, nếu dưới tác dụng của phần tử g, một vị trí cân bằng nào đó biến thành một vị trí cân bằng khác, thì dịch chuyển tại vị trí đó sẽ biến thành dịch chuyển tại vị trí thứ hai. Như thế, trong cơ sở của không gian biểu diễn gồm các dịch chuyển **u**, phần tử ma trận tương ứng không nằm trên đường chéo chính, do đó không ảnh hưởng đến giá trị của đặc biểu của biểu diễn.

Bây giờ, ta hãy tính đặc biểu của biểu diễn dao động trong không gian con gồm ba thành phần của các dịch chuyển u_x, u_y, u_z tại một vị trí cân bằng bất dịch nào đó. Muốn thế, chỉ cần tính đặc biểu của biểu diễn tại phần tử loại một có dạng $C(\varphi)$ và phần tử loại hai có dạng $S(\varphi)$.

Tính $\chi_O[C_z(\varphi)] = \chi_O[C(\varphi)]$.

Ta có

$$C_z(\varphi): \begin{cases} u'_x = u_x\cos\varphi - u_y\sin\varphi, \\ u'_y = u_x\sin\varphi + u_y\cos\varphi, \\ u'_z = u_z, \end{cases} \tag{9-3}$$

giả sử phép quay thực hiện trong mặt phẳng các dịch chuyển (u_x, u_y). Như thế, trong không gian con (u_x, u_y, u_z), phần đặc biểu χ bằng $1 + 2\cos\varphi$. Nếu có N_C vị trí cân bằng bất dịch dưới tác dụng của $C_z(\varphi)$, ta được giá trị sau của đặc biểu

$$\chi[C(\varphi)] = \chi[C_z(\varphi)] = N_C(1+2\cos\varphi). \tag{9-4}$$

Tiếp theo, để tính $\chi_O[C(\varphi)]$, ta hãy tính $\chi_T[C(\varphi)]$ và $\chi_R[C(\varphi)]$. Vì không gian $\mathcal{M}_T$ là không gian ba chiều của vectơ **R**, nên dưới tác dụng của phần tử $C(\varphi)$, ta có một phép biến đổi tương tự như (9-3), từ đó thu được phần đặc biểu

$$\chi_T[C(\varphi)] = 1 + 2\cos\varphi. \tag{9-5}$$

Mặt khác, đối với phép quay, vectơ quay $\boldsymbol{\Omega}$ cũng biến đổi như một vectơ thông thường. Thành thử, ta cũng có ngay

$$\chi_R[C(\varphi)] = 1 + 2\cos\varphi \tag{9-6}$$

Với các kết quả trên, từ (9-2), ta được

$$\chi_O[C(\varphi)] = (N_C - 2)(1 + 2\cos\varphi). \tag{9-7}$$

Tính $\chi_O[S_z(\varphi)] = \chi_O[S(\varphi)]$

Do (xem III (1-2))

$$S_z(\varphi = \sigma C_z(\varphi), \ (\sigma \perp z)$$

dưới tác dụng của phần tử $S_z(\varphi)$, dịch chuyển **u** biến đổi theo công thức (9-3), kèm theo một sự đổi dấu của u_z. Từ đó, gọi N_S là số hạt được giữ nguyên dưới tác dụng của $S_z(\varphi)$, tương tự như (9-4), ta được đặc biểu

$$\chi[S(\varphi)] = \chi[S_z(\varphi)] = N_S(-1 + 2\cos\varphi). \tag{9-8}$$

Tiếp theo, vì vectơ **R** cũng biến đổi như u dưới tác dụng của phần tử $S_z(\varphi)$, nên ta lại có

$$\chi_T(S(\varphi)) = -1 + 2\cos\varphi. \tag{9-9}$$

Cuối cùng, ta xét quy luật biến đổi của vectơ quay $\boldsymbol{\Omega}$ dưới tác dụng của phần tử $S_z(\varphi)$. Ta biết rằng [xem III (1-2)]

$$S_z(\varphi) = C_z(\varphi + \pi)\, I.$$

Mặt khác, vì với phép quay $\delta\boldsymbol{\Omega}$, ta có $\delta\mathbf{r} = [\delta\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}]$ và vì $I\mathbf{r} = -\mathbf{r}$, $I\delta\mathbf{r} = -\delta\mathbf{r}$, nên $I\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}$, tức là vectơ quay $\boldsymbol{\Omega}$ không đổi dấu dưới tác dụng của toán tử I. Từ đó, ta được

$$S_z(\varphi)\boldsymbol{\Omega} = C_z(\varphi + \pi)\, I\boldsymbol{\Omega} = C_z(\varphi + \pi)\,\boldsymbol{\Omega}.$$

Như thế, đối với vectơ quay $\boldsymbol{\Omega}$, phần tử $S_z(\varphi)$ tác dụng như một phép quay với góc $\varphi + \pi$. Từ đó, ta được

$$\chi_R(S(\varphi)) = 1 + 2\cos(\varphi + \pi) = 1 - 2\cos\varphi. \tag{9-10}$$

Từ các đẳng thức (9-8), (9-9), (9-10) và (9-2), ta được đặc biểu dao động

$$\chi_0(S(\varphi)) = N_S(-1 + 2\cos\varphi). \qquad (9\text{-}11)$$

Nói riêng, với $g = \sigma$, tức là khi $\varphi = 0$, ta được từ (9-11)

$$\chi_0(\sigma) = N_\sigma, \qquad (9\text{-}12)$$

trong đó N_σ là số vị trí cân bằng bất dịch qua phép biến đổi σ.

Tương tự như thế, với $g = I$, tức là khi $\varphi = \pi$, cũng từ (9-11), ta được

$$\chi_0(I) = -3N_I, \qquad (9\text{-}13)$$

với N_I là số vị trí cân bằng bất dịch qua phép biến đổi I.

Các công thức (9-7), (9-11), (9-12) và (9-13) cho phép tính được đặc biểu dao động $\mathcal{D}_0$. Từ đó, sự phân tích biểu diễn này sẽ cho phép phân loại được các tần số vuông góc và các dao động vuông góc.

Trên đây là các tính toán cho các hệ hạt không thẳng (tức là không sắp xếp trên cùng một đường thẳng), bậc tự do của chuyển động dao động bằng 3N-6. Đối với các hệ thẳng, bậc tự do dao động bằng 3N-5, nhóm đối xứng sẽ là những nhóm điểm liên tục nào đó (xem chương VIII).

Phân loại dao động của phân tử NH_3

Các phân tử cơ cấu hình không gian hình tháp, như NH_3 có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$, có số hạt $N = 4$.

Ta có (xem hình 3-11):

C_3 : $N_C = 1$, $\chi_0(C_3) = (1-2)(1 + 2\cos 120°) = 0$ [theo (9-7)],

σ_v : $N_\sigma = 2$, $\chi_0(\sigma_v) = 2$, [theo (9-12)],

e : $\chi_0(e) = 3N - 6 = 6$.

χ_0 :	e	$2C_3$	$3\sigma v$
	6	0	2

Phân tích biểu diễn này, ta được ngay

$$\mathcal{D}_0 = 2\mathcal{A}_1 \oplus 2\mathcal{E}. \qquad (9\text{-}13)$$

Kết luận:

a) Có hai tần số vuông góc đơn ω_1, ω_2 tương ứng với các biểu diễn $\mathcal{A}_1$ (2 lần) Các dao động vuông góc tương ứng Q_1, Q_2 tuân theo biểu diễn đơn vị này là hoàn toàn bất biến. Các dao động này thường gọi là *dao động hoàn toàn đối xứng*.

b) Có hai tần số vuông góc kép ω_3, ω_4 tuân theo các biểu diễn hai chiều $\mathcal{E}$ (2 lần). Tương ứng, ta có các dao động vuông góc (Q_3^1, Q_3^2) và (Q_4^1, Q_4^2). Các dao động này từng cặp biến đổi như x và y (xem bảng đặc biểu).

Phân loại dao động của phân tử CH_3Cl

Với phân tử CH_3Cl, có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$ và $N = 5$, ta có ($N_C = 2$' $N_\sigma = 3$).

$$\chi_o : \begin{array}{c|ccc} & e & 2C_3 & 3\sigma_v \\ \hline & 9 & 0 & 3 \end{array}$$

$$\mathcal{D}_o = 3\mathcal{A}_1 \oplus 3\mathcal{E}. \qquad (9\text{-}14)$$

Kết luận: Phân tử CH_3Cl

a) Có ba tần số đơn, tương ứng với các dao động vuông góc tuân theo biểu diễn đơn vị $\mathcal{A}_1$.

b) Có ba tần số kép, tương ứng với những dao động vuông góc tuân theo biểu diễn hai chiều $\mathcal{E}$.

Tương tự như thế, ta thu được các kết quả sau:

Phân tử OsF_8 có nhóm đối xứng $\mathcal{O}_h$:

$$\mathcal{D}_o = \mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{A}_{2u} \oplus \mathcal{E}_g \oplus \mathcal{E}_u \oplus 2\mathcal{F}_{1u} \oplus 2_2\mathcal{F}_g \oplus \mathcal{F}_{2u}.$$

Phân tử C_2H_6 có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{3d}$:

$$\mathcal{D}_o = 3\mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{A}_{1u} \oplus 2\mathcal{A}_{2u} \oplus 3\mathcal{E}_g \oplus 3\mathcal{E}_u.$$

Phân tử C_2H_4 có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{2d}$:

$$\mathcal{D}_o = 3\mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{A}_{1u} \oplus 2\mathcal{B}_{1g} \oplus \mathcal{B}_{1u} \oplus 2\mathcal{B}_{3u} \oplus \mathcal{B}_{2g} \oplus 2\mathcal{B}_{2u}.$$

Phân tử CH_4 có nhóm đối xứng $\mathcal{T}_d$

$$\mathcal{D}_o = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus 2\mathcal{F}_2.$$

Tần số hoạt trong phổ hồng ngoại

Ta hãy xét sự chuyển dời trạng thái từ trạng thái cơ bản đến một trạng thái nào đó, tương ứng với tần số dao động vuông góc ω. Nếu sự chuyển dời này là cho phép, ta nói tần số ω là *hoạt*. Trong trường hợp bức xạ là lưỡng cực điện (xem (8-6)):

$$F : e\mathbf{r}$$

các tần số hoạt gọi là *hoạt trong (vùng) phổ hồng ngoại*. Để làm ví dụ ta lấy các phân tử NH_3 và CH_3Cl có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$. Như sẽ chứng minh ở VIII, § 14, trong trường hợp này, toán tử F tuân theo biểu diễn

$$F : \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}.$$

Nhưng tất cả các biểu diễn dao động đều có mặt trong biểu diễn này. Thành thử, theo quy tắc lọc lựa I, các tần số vuông góc của các phân tử đó đều hoạt trong phổ hồng ngoại.

Đối với phân tử H_2O, có nhóm đối xứng là $\mathcal{C}_{2v}$, có thể chứng minh rằng tất cả các tần số vuông góc (tương ứng với các biểu diễn $\mathcal{A}_1$ và $\mathcal{B}_1$) đều hoạt trong phổ hồng ngoại.

§ 10. PHƯƠNG PHÁP TÌM QUY TẮC CÁC CẤU HÌNH BỀN CỦA PHÂN TỬ

Quy tắc các cấu hình bền của phân tử

Như đã biết, các êlectrôn phân tử có các trạng thái năng lượng tuân theo những biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của cấu hình không gian các hạt nhân. Các mức năng lượng có bậc suy biến khác nhau và các bậc suy biến đó bằng chiều của những biểu diễn bất khả quy tương ứng.

Chẳng hạn, với những phân tử có cấu hình không gian tứ diện như CH_4, các êlectrôn phân tử có thể ở những trạng thái năng lượng tương ứng với các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{A}_1$, $\mathcal{E}$, $\mathcal{F}_1$ và $\mathcal{F}_2$. Tất cả các mức năng lượng đều suy biến, trừ mức thứ nhất ứng với biểu diễn đơn vị $\mathcal{A}_1$. Bài toán đặt ra như sau:

Cấu hình tứ diện trên của các hạt nhân là bền đối với những trạng thái năng lượng nào của các êlectrôn? Tất nhiên, nếu xảy ra trường hợp cấu hình không bền, vị trí tương đối giữa các hạt nhân sẽ xê dịch để phá vỡ tính đối xứng, từ đó, do tính đối xứng giảm, các mức năng lượng êlectrôn sẽ tách ra.

Để giải bài tính [1], ta lưu ý rằng H là một hàm của các tọa độ Q (khá bé), vì năng lượng êletrôn là hàm của các khoảng cách giữa các hạt nhân, còn các tọa độ vuông góc lại là những tổ hợp tuyến tính của các di chuyển bé của các hạt nhân khỏi vị trí cân bền. Thành thử, ta có thể khai triển:

$$H = H_o + \sum_{\alpha,i} V_{\alpha i}\, Q^i_\alpha + \text{số hạng cấp cao của Q}. \tag{10-1}$$

Các hệ số $V_{\alpha i}$... đều là những hàm của các tọa độ êlectrôn.

Theo khai triển trên, số hạng tuyến tính của các Q có thể xem là một toán tử Hamilton nhiễu loạn nào đó. Từ đó, theo phương pháp nhiễu loạn, các mức năng lượng xê dịch sẽ là các trị riêng của ma trận

$$V_{ab} = (\Phi^a_o, \sum_{\alpha,i} V_{\alpha i}\, Q^i\, \Phi^b_o), \tag{10-2}$$

trong đó các trạng thái Φ^a_o, Φ^b_o là tương ứng với toán tử Hamilton H_o.

Nhưng do giả thiết cấu hình hạt nhân là bền, các mức xê dịch năng lượng nói trên phải bằng không (theo định lý Lejeune Dirichlet). Thành thử ma trận V_{ab} có những trị riêng hoàn toàn bằng không, phải bằng không.

Để sử dụng điều kiện này ta lưu ý rằng dưới tác dụng của các phần tử g của nhóm đối xứng, các tọa độ vuông góc $Q^i_{(\alpha)}$ biến lẫn nhau theo các biểu diễn $D^{(\alpha)}$ của nhóm đối xứng sao cho toán tử Hamilton H là bất biến. Từ đó, tất cả các số hạng khai triển đẳng cấp với các Q đều bất biến. Nói riêng, tập hợp các biểu thức tuyến tính theo Q ở vế phải của (10-2) là bất biến. Nhưng về mặt toán học, điều này là tương đương với sự kiện các tọa độ Q xem như không thay đổi, còn các lượng $V_{\alpha i}$ thì biến đổi theo các biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$. Từ đó, do các tọa độ Q là tùy ý, theo (10-2), ta thu được điều kiện

$$(\Phi^a_o, V_{\alpha i}\, \Phi^b_o) = 0,$$

hay, nói riêng

$$(\Phi^a_o, V_{\alpha i}\, \Phi^a_o) = 0,\ V_{\alpha i} : \mathcal{D}^{(\alpha)}. \tag{10-3}$$

Theo quy tắc lọc lựa III (xem § 8), điều kiện (10-3) được thỏa mãn khi bình phương đối xứng

$$[\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}],$$

$$\Phi^a_o : \mathcal{D}^{(\mu)}$$

không chứa một biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nào của các tọa độ vuông góc Q^i_α.

---

1. Ta bỏ qua ảnh hưởng của spin các êlectrôn vì trong trường hợp này, ảnh hưởng đó không đáng kể.

Tất nhiên ở đây cần lưu ý là ta không xét đến những tọa độ vuông góc tuân theo biểu diễn đơn vị. Vì, trong trường hợp này, các di chuyển sẽ không làm méo mó cấu hình không gian các hạt nhân. Thành thử ta có quy tắc các cấu hình bên sau của các phân tử:

Cấu hình không gian các hạt nhân phân tử chỉ bền tại các trạng thái electron tuân theo những biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}$ nào của nhóm đối xứng, sao mà bình phương đối xứng

$$[\mathcal{D}^{(\mu)} \otimes \mathcal{D}^{(\mu)}]$$

không chứa một biểu diễn bất khả quy nào (trừ biểu diễn đơn vị) tương ứng với các dao động vuông góc.

Ta lưu ý rằng với các biểu diễn một chiều thì, theo II (17-6), đặc biểu của bình phương đối xứng luôn luôn bằng đơn vị, nghĩa là bình phương đối xứng luôn luôn chỉ chứa biểu diễn đơn vị. Thành thử, cấu hình hạt nhân là bền khi các trạng thái êlectrôn là không suy biến.

Các trạng thái bền của các phân tử tứ diện

Với nhóm $\mathcal{T}_d$ ta có

$$[\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E},$$

$$[\mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_1] = [\mathcal{F}_2 \otimes \mathcal{F}_2] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2.$$

Mặt khác, theo cuối § 9 ta thấy rằng

$$\mathcal{D}_0 = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus 2\mathcal{F}_2.$$

Thành thử tất cả các bình phương đối xứng của các biểu diễn bất khả quy nhiều chiều của nhóm đối xứng $\mathcal{T}_d$ đều chứa ít nhất một biểu diễn bất khả quy (khác biểu diễn đơn vị) tương ứng với các dao động vuông góc.

Kết luận

Cấu hình hạt nhân các phân tử tứ diện đều không bền tại các trạng thái suy biến của các electrôn.

Người ta đã chứng minh được kết luận trên cho trường hợp chung: tất cả các cấu hình không gian của các hạt nhân (trừ các phân tử thẳng) đều không bền tại các trạng thái êlectrôn suy biến.

§ 11. PHƯƠNG PHÁP PHÂN LOẠI CÁC MỨC NĂNG LƯỢNG TOÀN PHẦN CỦA PHÂN TỬ

Quy tắc phân loại

Phương pháp tiến hành ở § 6 chỉ đề cập đến các mức năng lượng eletron của phân tử. Nhưng nếu kể đến ảnh hưởng của spin các hạt nhân, có thể tiến hành phân loại cả các mức năng lượng toàn phần của phân tử (tức là các mức năng bao hàm cả năng lượng êlectrôn, cả năng lượng quay, cả năng lượng dao động).

Cụ thể hơn, có thể chứng tỏ rằng, tập hợp tất cả các hàm tọa độ của các hạt nhân sẽ tạo nên một không gian nào đó, thực hiện một biểu diễn nào đó — ký hiện là $\mathcal{D}_{td}$ — của nhóm đối xứng, và sự phân tích biểu diễn này thành tổng các biểu diễn bất khả quy của nhóm sẽ cho phép phân loại các mức năng lượng toàn phần nói trên của phân tử.

Nếu gọi s_a là spin của hạt nhân thứ a, thì các tính toán cho thấy rằng đặc biểu của biểu diễn $\mathcal{D}_{td}$ có dạng

$$\chi_{td}(g) = \Pi (2s_a + 1)(-1)^{2s_a(n_a-1)} \quad (11\text{-}2)$$

tích lấy theo tất cả các nhóm hạt nhân đồng nhất như nhau, có vị trí hoán vị với nhau dưới tác dụng của phần tử g của nhóm đối xứng, n_a là số hạt nhân từng nhóm

Ta biết rằng hàm sóng toàn phần của phân tử (tương ứng với các mức năng lượng thu được) là tích của các hàm quay, hàm dao động và hàm sóng các êlectrôn. Từ đó, nếu giả thiết các êlectrôn ở trạng thái cơ bản (với hàm sóng hoàn toàn đối xứng) và giả thiết các dao động ở trạng thái không kích thích, thì hàm sóng toàn phần sẽ trùng với hàm quay. Do đó, có thể tiến hành nghiên cứu các hàm này trong các điều kiện trên.

Phân loại các mức năng lượng của êtylen C_2H_4

Phân tử êtylen $C_2^{12}H_2^1$ có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{2h}$ (xem V, § 2)

$$\mathcal{D}_{2h} = \{e, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}, C_x, C_y, C_z\}.$$

Mặt phẳng của phân tử lấy làm mặt (xy), trục x đi qua hai C.

Spin các hạt nhân: $s_{C^{12}} = 0$, $s_{H^1} = 1/2$.

Lần lượt cho các phần tử g của nhóm $\mathcal{D}_{2h}$ tác dụng lên cấu hình không gian các hạt nhân, theo công thức (11-2), ta được

$$\chi_{td}(e) = (2s_C + 1)^2(2s_H + 1)^4 = 16 \text{ (6 nhóm, } n_a = 1),$$

$$\chi_{td}(\sigma_{xy}) = (2s_C + 1)^2(2s_H + 1)^4 = 16, \text{ (6 nhóm, } n_a = 1),$$

$$\chi_{td}(\sigma_{xz}) = (2s_C + 1)^2 (2s_H + 1)^2 (-1)^2 = 4, \text{ (4 nhóm,}$$
$$n_1 = 1 \;,\; n_2 = 1 \;,\; n_3 = 2 \;,\; n_4 = 2) \;,$$

$$\chi_{td}(C_x) = (2s_C + 1)(2s_H + 1)^2(-1)^2 = 4 \text{ (4 nhóm như trên)}$$

$$\chi_{td}(\sigma_{yz}) = (2s_C + 1)(2s_H + 1)^2(-1)^2 = 4 \;, \text{ (3 nhóm,}$$
$$n_1 = 2 \;,\; n_2 = 2 \;,\; n_3 = 2) \text{ v.v...}$$

Ta được bảng đặc biểu của biểu diễn $\mathcal{D}_{td}$

χ_{td} :	e	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	C_x	C_y	C_z
	16	16	4	4	4	4	4

Theo phương pháp thông thường, ta được biểu thức phân tích

$$\mathcal{D}_{td} = 7\mathcal{A}_{1g} \oplus 3\mathcal{B}_{1g} \oplus 3\mathcal{B}_{2u} \oplus 3\mathcal{B}_{3u} \;. \quad (11\text{-}3)$$

Các hệ số 7, 3, 3, 3 trong biểu thức khai triển trên gọi là các *trọng số thống kê hạt nhân* tương ứng của các biểu diễn $\mathcal{A}_{1g}$, $\mathcal{B}_{1g}$, $\mathcal{B}_{2u}$ và $\mathcal{B}_{3u}$.

Ảnh hưởng của spin các hạt nhân đến sự phân loại các mức năng lượng như thế nào?

Ta biết rằng

$$\mathcal{D}_{2h} = \mathcal{D}_2 \otimes \mathcal{C}_i \;.$$

Từ đó, các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_{2h}$ sẽ là tích các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{D}_2$ với các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{C}_i$. Tất cả là 8 biểu diễn.

Nếu không kể đến ảnh hưởng của spin các hạt nhân, ta sẽ có tất cả 8 mức năng lượng êlectrôn. Nhưng, với kết quả thu được ở cái phân tích (11-3), ta thấy phân tử chỉ có 4 mức năng lượng với những trọng số thống kê hạt nhân khác nhau. Bốn mức năng lượng còn lại là « cấm ».

Ta biết rằng tương tác giữa spin các hạt nhân với các electrôn rất yếu. Từ đó, nếu hiệu số giữa các mức năng lượng cho phép nói trên là tương đối lớn thì trong thực tế không thể tồn tại sự chuyển dời nào giữa một trạng thái tuân theo một biểu diễn này sang một trạng thái tuân theo một biểu diễn khác. Do đó, trong điều kiện nói trên về khoảng cách giữa các mức năng lượng cho phép, các trạng thái tương ứng với những biểu diễn khác nhau của phân tử được xem như những dạng khác nhau của phân tử. Phân tử êtylen rơi vào trong trường hợp này và ta quan sát được bốn dạng êtylen.

Phân loại các mức năng lượng của các phân tử khác.

Phân tử amôniăc $N^{14}H^1_3$ có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$ và spin các hạt nhân $s_{N^{14}} = 1$, $s_{H^1} = 1/2$. Tính toán theo phương pháp trên ta thu được kết quả sau

$$\mathcal{D}_{td} = 12\mathcal{A}_2 \oplus 6\mathcal{E} \quad .$$

Phân tử amôniăc $N^{14}H^2_3$ có nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$, và spin các hạt nhân $s_{N^{14}} = 1$, $s_{H^2} = 1$. Tính toán theo phương pháp trên ta được kết quả sau

$$\mathcal{D}_{td} = 30\mathcal{A} \oplus 3\mathcal{A}_2 \oplus 24\mathcal{E} \quad .$$

Phân tử êtan $C^{12}_2H^1_6$ có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{3d}$, và spin các hạt nhân $s_{C^{12}} = 0$, $s_{H^{12}} = 1/2$. Tính toán theo phương pháp trên ta được kết quả sau

$$\mathcal{D}_{td} = 7\mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{A}_{1u} \oplus 3_{2g} \oplus 13\mathcal{A}_{2u} \oplus 9\mathcal{E}_g \oplus 11\mathcal{E}_u \quad .$$

Phân tử mêtan $C^{12}H^1_4$ có nhóm đối xứng $\mathcal{T}_d$; và spin các hạt nhân $s_{C^{12}} = 0$, $s_{H^1} = 1/2$. Tính toán theo phương pháp trên ta được kết quả sau

$$\mathcal{D}_{dt} = 5\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E} \oplus 3\mathcal{F}_1 \quad .$$

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [9], [10], [14], [15], [17], [21], [22].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Đọc toàn chương

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Đọc toàn chương

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc § 1 ÷ § 8.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc § 1 ÷ § 8.

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc § 1 ÷ § 8.

CHƯƠNG VI

CÁC NHÓM KHÔNG GIAN

§ 1. HỆ

Trong chương IV, chúng ta đã đề cập đến các nhóm điểm, là các nhóm đối xứng của các phân tử. Bây giờ chúng ta chuyển sang nghiên cứu các nhóm đối xứng của các tinh thể.

Nhóm R^3_M

Ở I § 15 đã nói đến nhóm chuyển động $R^3_M = R^3 \otimes O(3)$ trong không gian Euclid ba chiều thông thường.

Ta ký hiệu: $h, k, \ldots \in O(3)$, e là đơn vị của O(3),

$$\alpha, \beta, \ldots \in R^3, \text{ O là đơn vị của } R^3. \tag{1-1}$$

Theo I § 15, ta được

$$(h \mid \alpha)(k \mid \beta) = (hk \mid h\beta + \alpha), \tag{1-2}$$

$$(h \mid \alpha)^{-1} = (h^{-1} \mid -h^{-1}\alpha), \tag{1-3}$$

$$(h \mid \alpha)^{-1}(e \mid \beta)(h \mid \alpha) = (e \mid h^{-1}\beta). \tag{1-4}$$

Đẳng thức cuối cùng biểu thị tính chất bất biến của nhóm gồm các phần tử $\{(e \mid \alpha)\}$, đẳng cấu với nhóm tịnh tiến R^3 (xem các tính chất của tích nửa trực tiếp ở I § 14).

Có thể chứng minh rằng các phần tử có tính chất hình học khác nhau của nhóm R^3_M là phép tịnh tiến, phép quay, phép quay gương, chuyển động đinh ốc và phép phản chiếu trượt (phép phản chiếu trượt là tích của một phép phản chiếu qua một mặt σ nào đó và một phép tịnh tiến song song với σ).

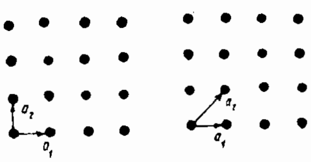
Mạng Bravais

Một tính chất nổi bật của cấu trúc các tinh thể là tính chất rời rạc của sự phân bố vật chất, hay cụ thể hơn, của các hạt nhân nguyên tử trong tinh thể. Điều này dẫn đến một không gian con của không gian R^3, gồm tất cả các vectơ có dạng

$$\mathbf{a} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (n_1, n_2, n_3 \text{ là số nguyên}) \tag{1-5}$$

với $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ là ba vectơ xác định nào đó, gọi là các *vectơ cơ sở*. Mút các vectơ cơ sở làm thành một mạng gọi là *mạng Bravais*. Các hình hộp dựng trên các vectơ cơ sở gọi là *ô tinh thể*. Rõ ràng các vectơ $\mathbf{a}$ làm thành một nhóm giao hoán.

Nhóm các vectơ **a** thường ký hiệu là $\mathcal{T}_a$. Ta lưu ý rằng các vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ của một nhóm $\mathcal{T}_a$ cho sẵn không được xác định duy nhất : có thể chọn các vectơ cơ sở đó bằng nhiều cách khác nhau, mà thể tích của các ô tinh thể vẫn bằng nhau. Ta có thể minh họa điểm này bằng các mạng Bravais hai chiều sau đây



Hình 6-1

Các vectơ cơ sở của hai hình trên là khác nhau, nhưng lại xác định một nhóm tịnh tiến như nhau. Diện tích hình bình hành dựng trên các vectơ cơ sở thuộc hai hình trên là như nhau.

Hệ

Bây giờ ta xét nhóm $\mathcal{G}$ gồm những phép tự đẳng cấu của nhóm $\mathcal{T}_a$, với điều kiện $\mathcal{G} \subset O(3)$. Ta sẽ thấy rằng rằng tính chất rời rạc của nhóm $\mathcal{T}_a$ tức là của mạng Bravais, đề ra nhiều hạn chế cho các nhóm $\mathcal{G}$.

1. Nhóm $\mathcal{G}$ phải chứa phần tử nghịch đảo không gian I vì, khi đã chứa vectơ **a**, nhóm $\mathcal{T}_a$ tất yếu phải chứa cả vectơ $-\mathbf{a}$.

2. Nhóm $\mathcal{G}$ chỉ có thể chứa các trục đối xứng hạng 2, 3, 4, 6.

Thực vậy, cho $g \in \mathcal{G}$. Theo định nghĩa của nhóm $\mathcal{G}$, ta có $g\mathbf{a} \in \mathcal{T}_a$, khi $\mathbf{a} \in \mathcal{T}_a$. Do đó, nếu chọn cơ sở của không gian $\mathcal{T}_a$ trong đó nhóm $\mathcal{G}$ tác dụng là các vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ và $\mathbf{a}_3$ của mạng Bravais thì, theo (1-5), vectơ $g\mathbf{a}$ sẽ có những tọa độ nguyên. Thành thử, các phần tử của ma trận g và, do đó, vết của ma trận, là những số nguyên nào đó. Nhưng vì vết là bất biến đối với phép biến đổi đồng dạng và vì mọi phép quay hay quay gương đều có thể quy về dạng

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{bmatrix}, \quad \varphi = 2\pi/n,$$

($\varepsilon = 1$ đối với phép quay và $\varepsilon = -1$ đối với phép quay gương), nên ta được

$$\mathrm{Sp}\, g = \varepsilon + 2\cos\varphi = q \text{ (số nguyên)}$$

tức là

$$2\cos\varphi = 2\cos 2\pi/n = p \text{ (số nguyên)}, \quad |p| \leqslant 2.$$

Từ kết quả này ta thấy rằng n chỉ có thể có các giá trị $n = 1$ (khi $p = 2$), $n = 2$ (khi $p = -2$), $n = 6$ (khi $p = 1$), $n = 3$ (khi $p = -1$), $n = 4$ (khi $p = 0$). Như thế, nhóm $\mathcal{G}$ chỉ có thể có các trục đối xứng hạng 2, 3, 4 và 6.

3. Khi nhóm $\mathcal{G}$ đã chứa nhóm con $\mathcal{C}_n$ $(n > 2)$, thì nhóm $\mathcal{G}$ phải chứa cả nhóm con $\mathcal{C}_{nv}$.

Quả vậy, giả sử nhóm $\mathcal{G}$ có một trục hạng n $(n > 2)$ nào đó. Ta gọi P là mặt phẳng thẳng góc với trục C_n, và chọn vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$ là vectơ ngắn nhất của mạng nằm trong mặt phẳng P đó. Vcetơ cơ sở thứ hai $\mathbf{a}_2$ ta chọn bằng $C_n\mathbf{a}_1$. Vectơ này quả thật là một vectơ cơ sở, vì nếu trong hình bình hành dựng trên hai vectơ $\mathbf{a}_1$ và $C_n\,\mathbf{a}_1$ ta tìm được một vectơ **a'** nào đó thuộc mạng (tức là thuộc nhóm $\mathcal{T}_a$), thì rõ ràng ít nhất một trong các vectơ **a'**, $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}'$, $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}'$, $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}'$, thuộc nhóm $\mathcal{T}_a$ sẽ ngắn hơn $\mathbf{a}_1$, đó là điều mâu thuẫn với cách chọn vectơ $\mathbf{a}_1$. Vectơ cơ sở thứ ba $\mathbf{a}_3$ ta chọn tùy ý.

Ta phân vectơ $\mathbf{a}_3$

$$\mathbf{a}_3 = \mathbf{c} + \mathbf{d},\ \mathbf{c} \parallel C_n,\ \mathbf{d} \perp C_n. \qquad (1\text{-}6)$$

Nhưng do $C_n \in \mathcal{G}$, nên hiệu

$$C_n\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_3 = C_n\mathbf{d} - \mathbf{d}$$

phải là một vectơ nằm trong mặt phẳng P và thuộc nhóm $\mathcal{T}_a$, nghĩa là có dạng

$$C_n\mathbf{d} - \mathbf{d} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2, \qquad (1\text{-}7)$$

trong đó m_1 và m_2 là những số nguyên nào đó. Tiếp theo, nhân trái (1-7) với C_n^{-1}, sau đó ở vế phải thay $C_n^{-1}\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1$, ta được

$$\mathbf{d} - C_n^{-1}\mathbf{d} = m_1C_n^{-1}\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_1. \qquad (1\text{-}8)$$

Trừ hai đẳng thức (1-7) và (1-8) vế với vế, ta được

$$C_n\mathbf{d} + C_n^{-1}\mathbf{d} - 2\mathbf{d} = (m_1 - m_2)\,\mathbf{a}_1 - m_1C_n^{-1}\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 =$$

$$= (m_1 - m_2)\,\mathbf{a}_1 - m_1\,(C_n^{-1}\mathbf{a}_1 + C_n\mathbf{a}_1) + m_1C_n\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2. \qquad (1\text{-}9)$$

Nhưng vì

$$C_n\mathbf{d} + C_n^{-1}\mathbf{d} = 2(\cos 2\pi/n)\,\mathbf{d},\ C_n\mathbf{a}_1 + C_n^{-1}\mathbf{a}_1 = 2(\cos 2\Pi/n)\,\mathbf{a}_1$$

nên đẳng thức (1 — 9) có thể viết dưới dạng

$$(2\cos 2\pi/n - 2)\,d = (m_1 - 2m_1\cos 2\pi/n - m_2)\,\mathbf{a}_1 + (m_1 + m_2)\,\mathbf{a}_2. \qquad (1\text{-}10)$$

Cho n = 3, 4, 6, từ đẳng thức (1-10), ta có thể chứng minh được tính chất trên. Chẳng hạn, ta lấy trường hợp n = 4. Trong trường hợp này, từ (1-10), ta được

$$\mathbf{d} = (m_2 - m_1)\,\frac{\mathbf{a}_1}{2} - (m_1 + m_2)\,\frac{\mathbf{a}_2}{2},$$

tức là, theo (1-6)

$$\mathbf{a}_3 = \mathbf{c} + (m_2 - m_1)\,\frac{\mathbf{a}_1}{2} - (m_1 + m_2)\,\frac{\mathbf{a}_2}{2}. \qquad (1\text{-}11)$$

Tiếp theo, muốn chứng minh nhóm $\mathcal{G}$, khi đã chứa nhóm $\mathcal{C}_4$, sẽ chứa cả nhóm $\mathcal{C}_{4v}$, ta hãy chứng minh rằng

$$\sigma_v\mathbf{a}_1,\ \sigma_v\mathbf{a}_2,\ \sigma_v\mathbf{a}_3 \in \mathcal{T}_a,$$

với σ_v là phép phản chiếu qua mặt phẳng đi qua trục C_4 và vectơ $\mathbf{a}_1$. Quả vậy, ta có ngay

$$\sigma_v\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_1 \in \mathcal{T}_a,\ \sigma_v\mathbf{a}_2 = -\mathbf{a}_2 \in \mathcal{T}_a, \qquad (1\text{-}12)$$

và, từ (1-11) và (1-12), ta được

$$\sigma_v\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_3 + (m_1 + m_2)\,\mathbf{a}_2 \in \mathcal{T}_a.$$

Với các trường hợp khác, khi n = 3,6, ta cũng chứng minh tính chất hạn chế nói trên tương tự như thế.

Nếu bây giờ ta duyệt lại tất cả các nhóm điểm đã nghiên cứu ở chương III, ta thấy rằng các nhóm điểm thỏa mãn các điều kiện :

a) Chứa phần tử nghịch đảo I.

b) Không chứa các trục đối xứng hạng 5, 7 hoặc cao hơn.

c) Chứa các trục đối xứng hạng 3, 4, 6 đồng thời các phép phản chiếu qua mặt phẳng đi qua các trục đó,

là

$$\mathcal{G} = \mathcal{S}_2, \mathcal{C}_{2h}, \mathcal{D}_{2h}, \mathcal{D}_{3d}, \mathcal{D}_{4h}, \mathcal{D}_{6h}, \mathcal{O}_h.$$

Tất cả là 7 nhóm như thế.

Hai nhóm $\mathcal{T}_a$ và $\mathcal{T}'_a$ có cùng nhóm đối xứng $\mathcal{G}$, gọi là thuộc cùng một hệ. Vì có tất cả 7 nhóm đối xứng, như đã chứng minh ở trên, cho nên có tất cả 7 hệ.

Bảy hệ này mang tên là

$\mathcal{S}_2$: hệ triklin hay tam tà,

$\mathcal{C}_{2h}$: hệ mônôklin hay đơn tà,

$\mathcal{D}_{2h}$: hệ rômbic hay trực giao,

$\mathcal{D}_{3d}$: hệ trigônal hay tam giác,

$\mathcal{D}_{4h}$: hệ têtragônal hay tứ giác,

$\mathcal{D}_{6h}$: hệ hecxagônal hay lục giác,

$\mathcal{O}_h$: hệ cubic hay lập phương.

§2. CÁC NHÓM KHÔNG GIAN

Định nghĩa

Các nhóm gồm các phần tử có dạng

$$(e \mid \mathbf{a})(h_i \mid \alpha_i) = (h_i \mid \mathbf{a} + \alpha_i) \qquad (2\text{-}1)$$

với

$$\mathcal{F} = \{h_i\} \subset \mathcal{G},\ \mathcal{F} \text{ là nhóm điểm},$$

α_i là những phần hữu tỷ của vectơ $\mathbf{a}$, gọi là *các nhóm không gian*, hay *nhóm tinh thể*. Các nhóm $\mathcal{F}$ gọi là *nhóm phương hướng*. Các nhóm phương hướng vì là những nhóm con của các nhóm $\mathcal{G}$, sẽ là 32 nhóm sau

$$\mathcal{F} = e, \mathcal{S}_2, \mathcal{C}_{0h}, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_{2h}, \mathcal{C}_{2v}, \mathcal{D}_2, \mathcal{D}_{2h}, \mathcal{S}_4, \mathcal{D}_{2d}, \mathcal{C}_4,$$
$$\mathcal{C}_{4v}, \mathcal{C}_{4h}, \mathcal{D}_4, \mathcal{D}_{4h}, \mathcal{C}_3, \mathcal{S}_6, \mathcal{C}_{3v}, \mathcal{D}_3, \mathcal{D}_{3d}, \mathcal{D}_{3h},$$
$$\mathcal{C}_{3h}, \mathcal{C}_6, \mathcal{C}_{6h}, \mathcal{C}_{6v}, \mathcal{D}_6, \mathcal{D}_{6h}, \mathcal{T}, \mathcal{T}_h, \mathcal{T}_d, \mathcal{O}, \mathcal{O}_h.$$

Các nhóm không gian khác nhau cùng nhóm phương hướng làm thành một *lớp*. Như thế ta có tất cả 32 lớp.

Các lớp được xếp vào các hệ như sau

Hệ	Lớp
Tam tà	e, $\mathcal{S}_2$.
Đơn tà	$\mathcal{C}_{0h}, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_{2h}$.
Trực giao	$\mathcal{C}_{2v}, \mathcal{D}_2, \mathcal{D}_{2h}$.
Tứ giác	$\mathcal{S}_4, \mathcal{D}_{2d}, \mathcal{C}_4, \mathcal{C}_{4h}, \mathcal{C}_{4v}, \mathcal{D}_4, \mathcal{D}_{4h}$.
Tam giác	$\mathcal{C}_3, \mathcal{S}_6, \mathcal{C}_{3v}, \mathcal{D}_3, \mathcal{D}_{3d}$.
Lục giác	$\mathcal{D}_6, \mathcal{D}_{6h}, \mathcal{C}_3, \mathcal{S}_6, \mathcal{C}_{3v}, \mathcal{D}_3, \mathcal{D}_{3d}, \mathcal{D}_{3h}, \mathcal{C}_{3h}, \mathcal{C}_6, \mathcal{C}_{6h}, \mathcal{C}_{6v}$.
Lập phương	$\mathcal{T}, \mathcal{T}_h, \mathcal{T}_d, \mathcal{O}, \mathcal{O}_h$

Chúng ta thấy rằng một nhóm không gian có thể xếp vào nhiều hệ khác nhau.

Cách xác định một nhóm không gian

Tính chất rời rạc của nhóm $\mathcal{C}_a$ cũng đề ra những hạn chế xác định về vị trí tương đối của các vectơ cơ sở đối với các phần tử đối xứng của các nhóm không gian và về chiều dài tương đối của các vectơ cơ sở. Từ đó, các nhóm không gian có thể phân thành nhiều loại khác nhau. Người ta chứng minh có tất cả 14 loại.

Các kết quả thu được cho thấy rằng để đặc trưng một nhóm không gian cần phải nói đến vị trí của các vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ so với các trục và mặt đối xứng của nhóm phương hướng $\mathcal{G}$. Ngoài ra, cần phải xác định các vectơ tịnh tiến α_i ở các phần tử $(\mathbf{a}_i \mid \alpha_i)$, $h_i \in \mathcal{G}$, trong biểu thức (2-1). Thông thường, các vectơ α_i được xác định bởi các thành phần $\alpha_1^{(i)}$, $\alpha_2^{(i)}$, $\alpha_3^{(i)}$ theo các vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$:

$$\alpha_i = \alpha_1^{(i)}\mathbf{a}_1 + \alpha_2^{(i)}\mathbf{a}_2 + \alpha_3^{(i)}\mathbf{a}_3.$$

Cuối cùng các nhóm không gian thuộc cùng một lớp được phân biệt bởi một chỉ số trên.

Ví dụ

Chẳng hạn, chúng ta hãy lấy các nhóm không gian $\mathcal{D}_2^i$ (i = 1, 2, ..., 9) (xem phụ lục về nhóm không gian) thuộc lớp $\mathcal{D}_2$

$$\mathcal{G} = \mathcal{D}_2 = \{e, C_x, C_y, C_z\} \equiv \{e, u_1, u_2, C_2\}.$$

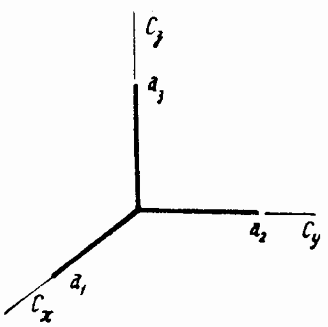
Tất cả có 9 nhóm không gian khác nhau, phân thành bốn loại sau:

$$\{\mathcal{D}_2^1, \mathcal{D}_2^2, \mathcal{D}_2^3, \mathcal{D}_2^4\}, \{\mathcal{D}_2^5, \mathcal{D}_2^6\}, \{\mathcal{D}_2^7\}, \{\mathcal{D}_2^8, \mathcal{D}_2^9\}$$

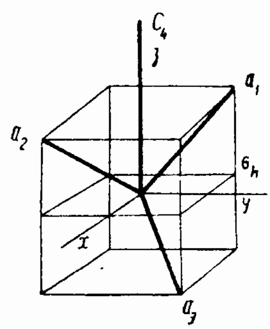
Các vectơ cơ sở tương ứng có các vị trí sau (xem hình vẽ 6-2).

Các phần tử của nhóm $\mathcal{D}_2^4$ là

$$(e \mid \mathbf{a}), (e \mid \mathbf{a})\left[C_x \mid \frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0\right], \ (e \mid \mathbf{a})\left[C_y \mid 0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right],$$
$$(e \mid \mathbf{a})\left[C_z \mid \frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2}\right].$$



Hình 6-2



Hình 6-3

$|a_1| = |a_2| = |a_3|$;
$(a_1 + a_2) \perp (a_2 + a_3) \perp (a_3 + a_1)$

Với các nhóm không gian $\mathcal{C}_{4h}^{i}$ (i = 1, 2, ... , 6) thuộc lớp $\mathcal{C}_{4h}$, ta có hai loại

$$\left\{ \mathcal{C}_{4h}^{1}, \mathcal{C}_{4h}^{2}, \mathcal{C}_{4h}^{3}, \mathcal{C}_{4h}^{4} \right\}, \left\{ \mathcal{C}_{4h}^{5}, \mathcal{C}_{4h}^{6} \right\}$$

(xem hình vẽ 6-3). Nhóm phương hướng là nhóm

$$\mathcal{G} = \mathcal{C}_{4h} = \{e, S_4^3, C_4^2, S_4, \sigma_h, C_4^3, I, C_4\}.$$

Các phần tử của nhóm không gian $\mathcal{C}_{4h}^{6}$ là

$$(e \mid \mathbf{a}), (e \mid \mathbf{a}) (S_4^3 \mid 0\ 0\ 0), (e \mid \mathbf{a}) (C_4^2 \mid 0\ 0\ 0), (e \mid \mathbf{a}) (S_4 \mid 0\ 0\ 0),$$

$$(e \mid \mathbf{a}) \left[\sigma_h \mid \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\right], (e \mid \mathbf{a}) \left[C_4^3 \mid \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\right],$$

$$(e \mid \mathbf{a}) \left[I \mid \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\right], (e \mid \mathbf{a}) \left[C_4 \mid \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\right].$$

§ 3. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM $\mathcal{T}_a$

Muốn tìm các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian, trước hết ta hãy tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{T}_a$

Vì nhóm tịnh tiến là một nhóm Abel, nên tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm đó đều một chiều. Thông thường, khi xét các biểu diễn của nhóm này, ta có thể đưa ra các điều kiện sau

$$f[(L_i + 1)\ \mathbf{a}_i] = f[\mathbf{a}_i], (i = 1, 2, 3, L_i \text{ là số nguyên dương})$$

gọi là *điều kiện tuần hoàn*. Trong tinh thể học, các điều kiện tuần hoàn phản ánh giả thiết các mặt đối diện của các tinh thể đang xét là đồng nhất với nhau.

Các điều kiện tuần hoàn trên dẫn đến kết quả xem các nhóm con $\mathcal{T}_a$ là những nhóm tuần hoàn. Do đó, các nhóm này là đẳng cấu với nhóm các căn bậc L_i của đơn vị, tức là ta có các biểu diễn bất khả quy một chiều sau

$$D^{(m_i)}(\mathbf{a}_i) \equiv D^{(m_i)}[(e \mid \mathbf{a}_i)] = e^{2\pi i \frac{m_i}{L_i}}, (m_i = 0, 1, \ldots, L_i - 1)$$

của các nhóm con $\mathcal{T}_{a_i}$. Từ đó, với phần tử **a** ở (1-5), ta được toán tử biểu diễn

$$D^{(m_1 m_2 m_3)}(e \mid \mathbf{a}) = e^{2\pi i \left[\frac{m_1}{L_1} n_1 + \frac{m_2}{L_2} n_2 + \frac{m_3}{L_3} n_3\right]}. \quad (3\text{-}1)$$

Như đã thấy ở biểu thức này, ta có tất cả là $L_1 L_2 L_3$ biểu diễn bất khả quy một chiều của nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$, đánh số bằng các chỉ số $m_i = 0, 1, \ldots, L_i - 1$.

Không gian mạng đảo

Ta hãy xét các vectơ sau

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{(a_1 a_2 a_3)}\pi \quad , \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{(a_1 a_2 a_3)}\pi \quad , \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{(a_1 a_2 a_3)}\pi \qquad (3\text{-}2)$$

thỏa mãn các hệ thức

$$(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_k) = 2\pi\delta_{ik}, \ (i,k = 1, 2, 3). \qquad (3\text{-}3)$$

Tiếp theo, song song với tập hợp các vectơ **a** có biểu thức (1-5), ta xét tập hợp các vectơ

$$\mathbf{k} = \frac{m_1}{L_1}\mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{L_2}\mathbf{b}_2 + \frac{m_3}{L_3}\mathbf{b}_3 . \qquad (3\text{-}4)$$

Các vectơ **k** làm thành một không gian nào đó (xác định bởi các vectơ $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$) gọi là *không gian mạng đảo*. Từ (3-2), (3-3) và (3-4) ta được

$$D^{(m_1 m_2 m_3)}[(e \mid \mathbf{a})] \to D^{(\mathbf{k})}[(e \mid \mathbf{a})] = e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{a})}. \qquad (3\text{-}5)$$

Như thế, các biểu diễn bất khả quy của nhóm con tịnh tiến $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}$ được đặc trưng bởi vectơ **k** của không gian mạng đảo.

Vùng Brillouin

Sự tương quan giữa các vectơ **k** của mạng đảo và các biểu diễn (3-3) không phải một đối một, vì hai vectơ **k** và **k'**

$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + p_1\mathbf{b}_1 + p_2\mathbf{b}_2 + p_3\mathbf{b}_3$, ($p_i$ là số nguyên) của mạng đảo cùng xác định một biểu diễn bất khả quy (3-5) như nhau. Các vectơ **k** và **k'** nói trên gọi là *tương đương* với nhau. Như thế, muốn sự tương ứng giữa các vectơ **k** và các biểu diễn (3-5) là một đối một, ta có thể giới hạn miền biến thiên của vectơ **k** trong không gian mạng đảo như sau :

a) Miền biến thiên không chứa những vectơ tương đương với nhau.

b) Với mọi vectơ của không gian mạng đảo, bao giờ ta cũng tìm được một vectơ tương đương nằm trong miền đó.

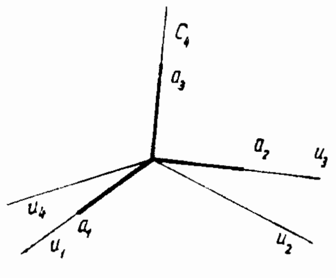
Một miền biến thiên của vectơ **k** như thế trong không gian mạng đảo gọi là *vùng Brillouin thứ nhất* hay gọi tắt là *vùng Brillouin*. Tất nhiên, mỗi vectơ **k** có mút nằm trên biên Brillouin đều có một hoặc vài vectơ tương đương với nó, cũng có mút nằm của vùng trên biên của vùng.

Ví dụ

Ta hãy lấy ví dụ về nhóm không gian $\mathcal{D}_4^1$ có lớp D_4

$$\mathcal{G} = \mathcal{D}_4 = \{e, C_4, C_4^2, C_4^3, u_1, u_2, u_3, u_4\}.$$

Các u_i là những phép C_2 quanh các trục thẳng góc với trục C_4. Vị trí của các vectơ cơ sở $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ so với các trục đối xứng của nhóm phương hướng $\mathcal{D}_4$ được xác định theo hình vẽ 6-4 với



Hình 6-4

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1,$$
$$|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| = a,$$
$$\alpha_i \equiv 0.$$

Theo công thức (3-3), ta thấy ngay rằng các vectơ $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ của không gian mạng đảo là

$$\mathbf{b}_1 \perp \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{b}_3 \perp \mathbf{b}_1, \qquad |\mathbf{b}_i| = 2\pi/a.$$

Như thế, vùng Brillouin của nhóm không gian $\mathcal{D}_4^1$ có thể quy về một vùng hai chiều (vì lý do đối xứng) có dạng một hình vuông có cạnh bằng $2\pi/a$ (xem hình 6-5)

Theo hình vẽ, ta thấy rằng vectơ OA_1 tương đương với vectơ OA_2 vì

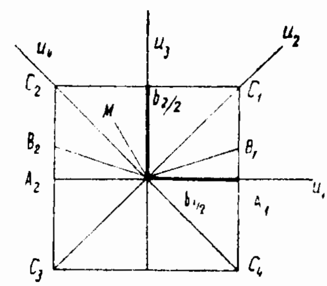
$$OA_2 = OA_1 - \mathbf{b}_1,$$

hai vectơ này đều có mút nằm trên biên của vùng Brillouin. Tương tự như thế, OB_2 là tương đương với OB_1 vì

$$OB_2 = OB_1 - \mathbf{b}_1,$$

còn OC_2, OC_3 và OC_4 là tương đương với OC_1 vì

$$OC_1 = OC_2 + \mathbf{b}_1 = OC_4 + \mathbf{b}_2 = OC_3 + \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2.$$



Hình 6-5

Vectơ OM có mút nằm trong vùng Brillouin không có phần tử tương đương nằm trong vùng đó.

Chúng ta lưu ý rằng nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ của mạng Bravais và nhóm đối xứng $\mathcal{H}$ của mạng đảo là như nhau. Quả vậy, cho $\mathbf{a}$ là một vectơ của mạng Bravais và

$$\mathbf{b} = c_1\mathbf{b}_1 + c_2\mathbf{b}_2 + c_3\mathbf{b}_3, \text{ (c_i là số nguyên)}$$

là một vectơ nào đó của mạng đảo. Thế thì, theo (3-3), chúng ta có

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 2\pi n, \tag{3-6}$$

với n là một số nguyên nào đó. Nhưng vì phần tử $g\mathbf{a}$ cũng thuộc mạng Bravais, theo định nghĩa của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ nên, theo (3-6), ta có

$$(g\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 2\pi m \tag{3-7}$$

với m là một số nguyên nào đó. Tiếp theo, vì $\mathcal{G}$ là một nhóm trực giao bảo toàn tích vô hướng nên, từ (3-7), ta được

$$(g^{-1}g\mathbf{a}, g^{-1}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, g^{-1}\mathbf{b}) = 2\pi m$$

kết quả này chứng tỏ rằng vectơ $g^{-1}\mathbf{b}$ cũng thuộc mạng đảo, tức là $g^{-1} \in \mathcal{H}$. Như thế, mỗi phần tử g^{-1}, khi đã thuộc $\mathcal{G}$ thì cũng thuộc $\mathcal{H}$, tức là $\mathcal{G} \subset \mathcal{H}$. Hoán vị vai trò của các nhóm $\mathcal{G}$ và $\mathcal{H}$ với nhau, ta được ngay đẳng thức $\mathcal{G} = \mathcal{H}$.

§ 4. SAO VÀ NHÓM CỦA VECTƠ k.

Sao của vectơ k

Cho $\mathcal{G}$ là một nhóm không gian, $\mathcal{D}$ là một biểu diễn của nhóm đó trong một không gian tuyến tính $\mathcal{M}$ nào đó. Trong bài toán biểu diễn hạ cảm $\mathcal{G} \downarrow \mathcal{T}_{\mathbf{a}}$, vì nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$ là một nhóm Abel mà tất cả các biểu diễn bất khả quy đều một chiều, biểu diễn $\mathcal{D}$ sẽ phân thành tổng của nhiều biểu diễn bất khả quy một chiều. Thành thử, chúng ta có thể giả thiết các ma trận $D[(e \mid a)]$ của biểu diễn $\mathcal{D}$ này là chéo, cơ sở của không gian biểu diễn sẽ gồm tất cả các vectơ $\mathbf{e}_k$ sao mà

$$D[(e \mid \mathbf{a})]\,\mathbf{e}_k = D^{(k)}[(e \mid \mathbf{a})]\,\mathbf{e}_k = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{a}}\,\mathbf{e}_k. \tag{4-1}$$

Thế thì, theo (4-1) và (1-4), với mọi phần tử $g = (h \mid a' + \alpha)$ của nhóm không gian $\mathcal{G}$, ta có

$$D[(e \mid \mathbf{a})]\,D(g)\,\mathbf{e}_k = D(g)\,D[(e \mid h^{-1}\mathbf{a})]\,\mathbf{e}_k = D(g)\,{}^{i(k,\overset{-1}{h}a)}\,\mathbf{e}_k = e^{i(hk'a)}\,D(g)\,\mathbf{e}_k. \tag{4-2}$$

Kết quả này chứng tỏ rằng vectơ $D(g)\,\mathbf{e}_k$ biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(hk)}$ của nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$. Thành thử, ta có thể viết

$$D(g)\mathbf{e}_k = D[(h \mid \mathbf{a}' + \alpha)]\,\mathbf{e}_k = \mathbf{e}_{hk}. \tag{4-3}$$

Đó là tác dụng của toán tử $D(g)$ lên vectơ cơ sở $\mathbf{e}_k$. Dựa vào kết quả này, ta có thể định nghĩa tác dụng của bản thân phần tử $g = (h \mid \mathbf{a}' + \alpha)$ lên chính vectơ $\mathbf{k}$ như sau

$$g\mathbf{k} = (h \mid \mathbf{a}' + \alpha)\,\mathbf{k} = h\mathbf{k}, \tag{4-4}$$

tức là xem tác dụng của toàn bộ phần tử $(h \mid \mathbf{a}' + \alpha)$ lên vectơ $\mathbf{k}$ chỉ thu về tác dụng thông thường của thành phần $h \in \mathcal{F}$ lên vectơ đó. Nếu lần lượt tác dụng tất cả các phần tử của nhóm không gian $\mathcal{K}$ lên vectơ $\mathbf{k}$, tức là lần lượt tác dụng tất cả các phần tử chỉ thuộc nhóm phương hướng $\mathcal{F}$ lên vectơ $\mathbf{k}$ theo nghĩa thông thường, thì ta sẽ được một tập hợp vectơ có dạng

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(1)},\ \mathbf{k}^{(2)},\ldots,\ \mathbf{k}^{(s)}. \tag{4-5}$$

Trong (4-5), ta chỉ xét các vectơ không tương đương với nhau.

Tập hợp các vectơ $\mathbf{k}$ này gọi là *sao của biểu diễn* $\mathcal{D}$. Vì sao có thể thu từ một vectơ $\mathbf{k}$ nào đó của sao bằng cách cho tác dụng tất cả các phần tử của nhóm không gian $\mathcal{K}$ lên vectơ đó, nên ta có thể ký hiệu sao là $\{\mathbf{k}\}$.

Nhóm $\mathcal{F}_k$ của vectơ k

Dựa vào định nghĩa (4-4), ta hãy xét nhóm con $\mathcal{K}_k$ của nhóm không gian $\mathcal{K}$ làm bất biến vectơ $\mathbf{k}$ hay biến $\mathbf{k}$ thành một vectơ tương đương $\mathbf{k}'$ nào đó (với ký hiệu $\equiv$):

$$g\mathbf{k} = (h \mid \mathbf{a} + \alpha)\,\mathbf{k} = \mathbf{k}' \equiv \mathbf{k},\quad g \in \mathcal{K}_k. \tag{4-6}$$

Nhóm $\mathcal{K}_k$ gọi là *nhóm của vectơ* $\mathbf{k}$ *của sao* $\{\mathbf{k}\}$. Theo (4-2), nếu gọi $\mathcal{M}_k$ là tập hợp tất cả các vectơ $\mathbf{e}_k$ biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(k)}$ của nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$, thì rõ ràng không gian $\mathcal{M}_k$ là bất biến đối với nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ $\mathbf{k}$. Biểu diễn của nhóm $\mathcal{K}_k$ cảm ứng trong không gian con $\mathcal{M}_k$ gọi là *biểu diễn bé.*

Tất nhiên, theo (4-4), tất cả các phần tử của nhóm con tịnh tiến $\mathcal{T}_a$ đều làm bất biến vectơ $\mathbf{k}$; do đó, nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_a$ là một nhóm con của nhóm $\mathcal{K}_k$. Thành thử, ta có thể viết

$$\mathcal{K}_k = \{\mathcal{T}_a(e \mid 0),\ \mathcal{T}_a(h_2 \mid \alpha_2),\ldots,\ \mathcal{T}_a(h_r \mid \alpha_r)\}. \tag{4-7}$$

Theo định nghĩa (4-4), tất nhiên tập hợp tất cả các phần tử

$$h_1 = e,\quad h_2,\ldots,\ h_r$$

làm thành một nhóm con nào đó của nhóm phương hướng $\mathcal{F}$. Nhóm này ký hiệu là $\mathcal{F}_k$, tương ứng với vectơ $\mathbf{k}$ của sao $\{\mathbf{k}\}$.

Ví dụ

Ta hãy trở lại ví dụ ở trên liên quan đến nhóm không gian $\mathcal{D}_4^1$. Ta hãy tìm các sao của các vectơ **k**. Trước hết, ta tìm sao của các vectơ $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$, tức là $2\mathbf{k} \equiv 0$. Các vectơ như thế có dạng

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1, \frac{1}{2}\mathbf{b}_2, \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2), 0. \tag{4-8}$$

Tác dụng các phần tử của nhóm $\mathcal{D}_4^1$ lên vectơ

$$\mathbf{k}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1,$$

ta được các vectơ ở hình 6-6, a. Nhưng nếu chỉ lấy các vectơ không tương đương với nhau, thì ta có sao ở hình 6-6, a' tức là ta được sao

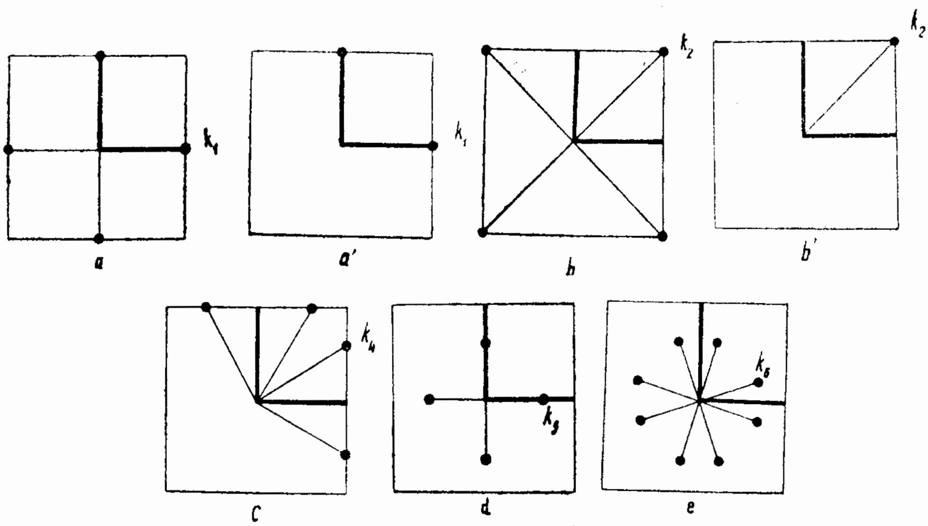
$$\{\mathbf{k}_1\} = \left\{\frac{1}{2}\mathbf{b}_1, \frac{1}{2}\mathbf{b}_2\right\}.$$

Tiếp theo, trong tập (4-8), ta chọn một trong hai vectơ còn lại là

$$\{\mathbf{k}_2\} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2).$$

Tác dụng các phần tử của nhóm không gian $\mathcal{D}_4^1$ lên vectơ này, ta được các vectơ ở hình 6-6, b. Nhưng vì bốn vectơ này đều tương đương với nhau, nên sao của vectơ $\mathbf{k}_2$ là (xem hình 6-6, b')

$$\{\mathbf{k}_2\} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2).$$



Hình 6-6

a) Sao $\{\mathbf{k}_1\}$. b) Sao $\{\mathbf{k}_2\}$. c) Sao $\{\mathbf{k}_4\}$
d) Sao $\{\mathbf{k}_5\}$ e) Sao $\{\mathbf{k}_6\}$

Cuối cùng, bản thân vectơ $\mathbf{k}_3 = 0$ làm thành một sao

$$\{\mathbf{k}_3\} = 0.$$

Bây giờ ta tìm sao của các vectơ $\mathbf{k} \not\equiv -\mathbf{k}$. Dễ thấy các vectơ này có ba loại, tạo nên các sao ở các hình 6-6c, d, e.

Gọi các nhóm điểm làm bất biến các vectơ $\mathbf{k}_i$ ($i = 1, 2, \ldots, 6$) tương ứng là $\mathcal{F}_{\mathbf{k}_i}$, ta có

$$\mathcal{F}_{\mathbf{k}_1} = \{e, C_2, u_1, u_3\},$$

vì

$$e\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1, \; C_2\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_1 \equiv \mathbf{k}_1, \; u_1\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1, \; u_3\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_1 \equiv \mathbf{k}_1.$$

Nhưng vì các trục C_2, u_1 và u_3 thẳng góc với nhau, nên nhóm $\mathcal{F}_{\mathbf{k}_1}$ chính là nhóm $\mathcal{D}_2$

$$\mathcal{F}_1 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_1} = \mathcal{D}_2.$$

Tiếp theo, vì tất cả các phần tử của nhóm không gian $\mathcal{D}_4^1$ hoặc để nguyên vectơ $\mathbf{k}_2$, hoặc biến vectơ này thành các vectơ tương đương nên rõ ràng nhóm điểm $\mathcal{F}_{\mathbf{k}_2}$ là

$$\mathcal{F}_2 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_2} = \mathcal{D}_4.$$

Tương tự như thế, ta có

$$\mathcal{F}_3 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_3} = \mathcal{D}_4,$$

(vì vectơ O là bất biến đối với mọi phép quay hay quay gương!).

Đối với vectơ $\mathbf{k}_4$, vì $u_3\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_4 + \mathbf{b}_1 \equiv \mathbf{k}_4$, nên nhóm $\mathcal{F}_{\mathbf{k}_4}$ là

$$\mathcal{F}_4 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_4} = \{e, u_3\} = \mathcal{C}_2.$$

Đối với vectơ $\mathbf{k}_5$, ta có

$$\mathcal{F}_5 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_5} = \{e, u_1\} = \mathcal{C}_2.$$

Cuối cùng đối với vectơ $\mathbf{k}_6$, chúng ta có

$$\mathcal{F}_6 \equiv \mathcal{F}_{\mathbf{k}_6} = \{e\}.$$

Tóm lại, ta có

$$\mathcal{K}_{\mathbf{k}_1} = \mathcal{T}_a\mathcal{D}_2, \; \mathcal{K}_{\mathbf{k}_2} = \mathcal{T}_a\mathcal{D}_4, \; \mathcal{K}_{\mathbf{k}_3} = \mathcal{T}_a\mathcal{D}_4,$$
$$\mathcal{K}_{\mathbf{k}_4} = \mathcal{T}_a\mathcal{C}_2, \; \mathcal{K}_{\mathbf{k}_5} = \mathcal{T}_a\mathcal{C}_2, \; \mathcal{K}_{\mathbf{k}_6} = \mathcal{T}_a(e \mid 0).$$

Tính đẳng cấu của các nhóm vectơ thuộc cùng một sao $\{\mathbf{k}\}$

Bây giờ cho một sao $\{\mathbf{k}\}$ nào đó. Gọi $\mathcal{K}_{\mathbf{k}}$ là nhóm vectơ $\mathbf{k}$ thuộc sao $\{\mathbf{k}\}$. Ta hãy lập các lớp kề phải của nhóm không gian $\mathcal{K}$ theo nhóm con $\mathcal{K}_{\mathbf{k}}$

$$g_1\mathcal{K}_{\mathbf{k}}, \; g_2\mathcal{K}_{\mathbf{k}}, \ldots, \; g_s\mathcal{K}_{\mathbf{k}}, \; (\text{ở đây } g_1 = (e \mid 0), \; g_i \in \mathcal{K}). \tag{4-9}$$

Rõ ràng tất cả các phần tử của lớp kề $g_i\mathcal{K}_{\mathbf{k}}$ đều biến vectơ $\mathbf{k}$ thành một vectơ duy nhất. Ký hiệu vectơ $\mathbf{k}$ đó của lớp kề thứ i là

$$\mathbf{k}^{(i)} = g_i\mathbf{k} \; (i = 1, \ldots, s). \tag{4-10}$$

Các vectơ $\mathbf{k}^{(i)}$, $\mathbf{k}^{(j)}$ đều khác nhau, khi $i \neq j$. Quả vậy, nếu $\mathbf{k}^{(i)} = \mathbf{k}^{(j)}$ khi $i \neq j$, thì ta có

$$g_i\mathbf{k} = g_j\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} = g_i^{-1} g_j\mathbf{k}$$

tức là

$$\mathcal{K}_k = g_i^{-1} g_j \mathcal{K}_{\mathbf{k}} \to g_i\mathcal{K}_k = g_j\mathcal{K}_k \ (i \neq j),$$

điều này mâu thuẫn với tính chất các lớp kề khác nhau không có phần tử chung. Vì nhóm không gian được phân hoàn toàn theo các lớp kề (4-9), nên tập các vectơ (4-10) chính là sao của biểu diễn. Thành thử, ta thấy rằng tác dụng của các vectơ g_i trong biểu thức phân tích (4-9) là biến một vectơ nhất định nào đó của sao thành toàn bộ các vectơ của sao.

Tiếp theo, nếu $\mathcal{K}_{k_i}$ là nhóm của vectơ $\mathbf{k}^{(i)}$ thuộc sao $\{\mathbf{k}\}$ thì, theo (4-10), dễ thấy rằng

$$g_i\mathcal{K}_{\mathbf{k}}g_i^{-1}\mathbf{k}^{(i)} = g_i\mathcal{K}_k\mathbf{k} = g_i\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(i)},$$

tức là

$$\mathcal{K}_{k_i} = g_i\mathcal{K}_{\mathbf{k}}g_i^{-1}.$$

Điều này có nghĩa là tất cả các nhóm của các vectơ $\mathbf{k}^{(i)}$ khác nhau thuộc cùng một sao là đẳng cấu với nhau.

§ 5. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA CÁC NHÓM KHÔNG GIAN

Cách xác định các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian

Ta hãy chứng minh rằng các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}$ của nhóm không gian $\mathcal{K}$ có liên quan mật thiết đến các biểu diễn bất khả quy bé của các nhóm $\mathcal{K}_k$ của các vectơ $\mathbf{k}$ của sao của biểu diễn $\mathcal{D}$. Quả vậy, giả sử sao của biểu diễn $\mathcal{D}$ của nhóm không gian $\mathcal{G}$ là

$$\{\mathbf{k}\} = \{\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(1)}, \mathbf{k}^{(2)}, \ldots, \mathbf{k}^{(s)}\}.$$

Tiếp theo, giả sử g là một phần tử tùy ý của $\mathcal{G}$ và $g\mathbf{k}^{(j)} = \mathbf{k}^{(l)}$. Thế thì, theo (4-10) ta có

$$gg_j\mathbf{k} = g_l\mathbf{k}, \ g_l^{-1}gg_j\mathbf{k} = \mathbf{k}$$

tức là

$$g_l^{-1}gg_j\mathbf{k} \in \mathcal{K}_{\mathbf{k}}.$$

Thành thử trong nhóm $\mathcal{K}_k$ phải tồn tại một phần tử g_o sao mà

$$g_l^{-1}gg_j = g_o, \ g = g_lg_og_j^{-1}. \tag{5-1}$$

Tiếp theo, giả sử $e_k^{(v)}$ là cơ sở của không gian con $\mathcal{M}_k$ thực hiện biểu diễn bé $\mathcal{D}_k$ của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ k của sao của biểu diễn $\mathcal{D}$. Theo (4-10), ta được

$$D(g_i)e_k^{(v)} = e_{k_i}^{(v)}. \tag{5-2}$$

Từ đó, theo (5-1) và (4-10), ta được

$$\{D(g)\}_{\mu\nu}\, e^{(\nu)}_{k_j} = D(g)\, e^{(\mu)}_{k_j} = D(g_1 g_o g_j^{-1})\, e^{(\mu)}_{k_j} =$$

$$= D(g_1)D(g_o)D(g_j^{-1})\, e^{(\mu)}_{k_j} = D(g_1)D(g_o)\, e_k^{\mu} =$$

$$= D(g_1)\{D_k(g_o)\}_{\mu\nu}\, e^{(\nu)}_{k} = \{D_k(g_o)\}_{\nu\mu}\, e^{(\nu)}_{k_1}, \qquad (5\text{-}3)$$

nghĩa là ma trận D(g) của biểu diễn $\mathcal{D}$ của nhóm không gian được xác định bởi ma trận $D_k(g_o)$ của biểu diễn bé của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ **k**. Theo kết quả này, ta thấy rằng các biểu diễn của nhóm không gian và các biểu diễn bé của các nhóm $\mathcal{K}_k$ của các vectơ của sao đồng thời là bất khả quy. Nếu biểu diễn bé $\mathcal{D}_k$ là unita thì biểu diễn $\mathcal{D}$ cũng là unita.

Như thế, các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian được xác định bởi hai nhân tố sau:

a) sao $\{\mathbf{k}\}$ của biểu diễn,

b) biểu diễn bé bất khả quy $\mathcal{D}_k^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ **k** của sao.

Thành thử, để tìm các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{k(\mu)}$ của các nhóm không gian, ta cần xác định sao của biểu diễn và các biểu diễn bé bất khả quy của nhóm của các vectơ thuộc sao.

Vì, như đã thấy ở cuối § 4, các nhóm $\mathcal{K}_{k_j}$ của các vectơ $\mathbf{k}^{(j)}$ khác nhau của sao là đẳng cấu với nhau, nên các biểu diễn bé $\mathcal{D}_{k_j}$ là tương đương với nhau. Do đó chiều của biểu diễn $\mathcal{D}^{k(\mu)}$ là

$$\dim \mathcal{D}^{k(\mu)} = s \dim \mathcal{D}_k^{(\mu)}. \qquad (5\text{-}4)$$

Biểu diễn xạ ảnh

Như thế, theo kết quả vừa thu được, vấn đề biểu diễn các nhóm không gian quy về các biểu diễn bé các nhóm $\mathcal{K}_k$ của các vectơ k của sao của biểu diễn. Nhưng trước khi nghiên cứu các biểu diễn bé này, hãy đưa ra một khái niệm mới về biểu diễn.

Cho một nhóm hữu hạn $\mathcal{G}$ và một nhóm các phép biến đổi tuyến tính (ma trận) D. Ánh xạ tuyến tính.

$$g \to D(g), \quad g \in \mathcal{G},$$

có tính chất

$$D(g_1)\, D(g_2) = p(g_1, g_2)\, D(g_1 g_2), \; g_1, g_2 \in \mathcal{G} \qquad (5\text{-}5)$$

trong đó $p(g_1, g_2)$ là một thừa số phụ thuộc vào cách lựa chọn các ma trận $D(g_1)$ và $D(g_2)$, gọi là một *biểu diễn xạ ảnh* của nhóm $\mathcal{G}$, tương ứng với *trọng* $p(g_1, g_2)$.

Nếu $p = 1$, biểu diễn gọi là *biểu diễn vectơ*. Như thế, các biểu diễn thông thường mà ta đề cập đến từ trước đến nay là những biểu diễn vectơ, một trường hợp riêng của biểu diễn xạ ảnh.

Các khái niệm về biểu diễn xạ ảnh cũng định nghĩa giống các khái niệm của biểu diễn vectơ thông thường, cụ thể là:

Các biểu diễn xạ ảnh $\mathcal{D}'$ và $\mathcal{D}$ gọi là *tương đương* với nhau nếu có tồn tại một ma trận S không kỳ dị sao mà

$$D'(g) = S^{-1} D(g)S \text{ với mọi } g \in \mathcal{G}.$$

Trong trường hợp này dễ thấy rằng

$$p'(g_1, g_2) = p(g_1, g_2).$$

Nếu chọn được một ma trận S như thế nào mà

$$D'(g) = \begin{bmatrix} D_1(g) & 0 \\ 0 & D_2(g) \end{bmatrix}$$

với mọi $g \in \mathcal{G}$, thì biểu diễn xạ ảnh $\mathcal{D}$ gọi là *khả quy* và *phân giải* thành tổng

$$D(g) = D_1(g) \oplus D_2(g).$$

Các trọng $p(g_1, g_2)$ của các biểu diễn xạ ảnh $\mathcal{D}$, $\mathcal{D}_1$ và $\mathcal{D}_2$ đều bằng nhau.

Một biểu diễn xạ ảnh gọi là *bất khả quy* nếu biểu diễn đó không phải là khả quy.

Trọng p không thể chọn tùy ý được mà phải thỏa mãn những hệ thức nhất định nào đó. Quả vậy, ta có

$$[D(g_1) D(g_2)] D(g_3) = p(g_1, g_2) D(g_1 g_2) D(g_3) =$$
$$= p(g_1, g_2) p(g_1 g_2, g_3) D[(g_1 g_2) g_3],$$
$$D(g_1) [D(g_2) D(g_3)] = p(g_2, g_3) D(g_1) D(g_2 g_3) =$$
$$= p(g_2, g_3) p(g_1, g_2 g_3) D[g_1(g_2 g_3)],$$

từ đó, theo tính chất kết hợp $(g_1 g_2) g_3 = g_1(g_2 g_3)$ của phép nhân nhóm ta được các hệ thức

$$p(g_1 g_2, g_3) p(g_1, g_2) = p(g_1, g_2 g_3) p(g_2, g_3), \tag{5-6}$$

với mọi g_1, g_2 và $g_3 \in \mathcal{G}$.

Ngược lại, có thể chứng minh rằng nếu có một hàm p thỏa mãn các hệ thức (5-6) thì có tồn tại một biểu diễn xạ ảnh (5-5) của nhóm nhận p làm trọng.

Với các biểu diễn xạ ảnh, ta có thể suy ra những công thức trực giao tương tự như đối với các biểu diễn thông thường. Quả vậy, từ các hệ thức (5-6) có thể chứng minh rằng toán tử

$$A = \frac{D(g) BD(g^{-1})}{p(g, g^{-1})}$$

trong đó B là một toán tử tùy ý, là giao hoán với mọi toán tử D(h) của biểu diễn xạ ảnh từ đó, với các biểu diễn xạ ảnh bất khả quy có chiều bằng n_α, ta được các hệ thức trực giao

$$\frac{1}{G} \sum_g \frac{D_{ik}^{(\alpha)}(g) D_{jl}^{\beta^{(\beta)}}(g)}{p(g, g^{-1})} = \frac{1}{n_\alpha} \delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{\alpha\beta}. \tag{5-7}$$

Từ các hệ thức trực giao này, suy ra các hệ thức trực giao cho các đặc biểu của các biểu diễn xạ ảnh bất khả quy

$$\frac{1}{G}\sum_{g}\frac{\chi^{(\alpha)}(g)\,\chi^{(\beta)*}(g)}{p(g,\,g^{-1})}=\delta_{\alpha\beta}. \tag{5-8}$$

Tiếp theo, gọi a_α là số lần biểu diễn bất khả quy với đặc biểu $\chi^{(\alpha)}(g)$ nằm trong biểu diễn với đặc biểu $\chi(g)$, ta có

$$a_\alpha=\frac{1}{G}\sum_{g}\frac{\chi(g)\,\chi^{(\alpha)*}(g)}{p(g,\,g^{-1})}. \tag{5-9}$$

Biểu diễn bé

Theo các kết quả ở trên, ta đã biết rằng vấn đề tìm biểu diễn bất khả quy tương ứng với sao $\{\mathbf{k}\}$ quy về vấn đề tìm các biểu diễn bé bất khả quy của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ **k** thuộc sao.

Ta lại biết rằng ngoài các phần tử thuộc nhóm con $\mathcal{T}_a$, nhóm $\mathcal{K}_k$ còn chứa các phần tử có dạng

$$g=(h\mid\alpha),$$

trong đó h thuộc nhóm phương hướng $\mathcal{G}_k$ làm bất biến vectơ **k**, tức là

$$h\mathbf{k}=\mathbf{k}+\mathbf{b},\ \ h\in\mathcal{G}_k. \tag{5-10}$$

Ta đặt

$$\widehat{D}(h)=D(g)\,e^{-i(\mathbf{k},\alpha)},\ \ g=(h\mid\alpha), \tag{5-11}$$

trong đó D(g) giả sử là các ma trận của biểu diễn bé của nhóm $\mathcal{K}_k$, và sẽ chứng minh rằng các biểu diễn bất khả quy bé của nhóm $\mathcal{K}_k$ quy về các biểu diễn xạ ảnh của nhóm phương hướng $\mathcal{G}_k$. Quả vậy, theo (5-11) và (1-2), ta có

$$\widehat{D}(h_1h_2)=D(g_1g_2)\ e^{-i(\mathbf{k},\,\alpha_1+h_1\alpha_2)}=$$
$$=D(g_1)\ D(g_2)\ e^{-i(\mathbf{k},\,\alpha_1)-i(h_1^{-1}\mathbf{k},\,\alpha_2)}=$$
$$=\widehat{D}(h_1)\,\widehat{D}(h_2)\,e^{i(\mathbf{k}-h_1^{-1}\mathbf{k},\,\alpha_2)}, \tag{5-12}$$

với mọi $g_1=(h_1\mid\alpha_1)$, $g_2=(h_2\mid\alpha_2)\in\mathcal{K}_k$, $h_1,\ h_2\in\mathcal{G}_k$. Nhưng theo (5-10) ta được

$$h_1^{-1}\mathbf{k}=\mathbf{k}+\mathbf{b},$$

với **b** là một vectơ nào đó thuộc mạng đảo. Thành thử, đẳng thức (5-12) có thể viết dưới dạng

$$\widehat{D}(h_1)\ \widehat{D}(h_2)=D(h_1h_2)\,e^{i(\mathbf{b},\alpha_2)}. \tag{5-13}$$

Như thế, so sánh với định nghĩa (5-5), ta thấy rằng tập hợp các toán tử D(h) làm thành một biểu diễn xạ ảnh với trọng

$$p(h_1,h_2)=e^{i(\mathbf{b},\,\alpha_2)}=e^{i(h_1^{-1}\mathbf{k}-\mathbf{k},\,\alpha_2)} \tag{5-14}$$

của nhóm phương hướng $\mathcal{G}_k$. Như thế, tương ứng với mỗi toán tử D (g) của biểu diễn bé của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ **k** thuộc sao, ta có một toán tử $\widehat{D}$ (h) của biểu diễn xạ ảnh của nhóm phương hướng $\mathcal{G}_k \subset \mathcal{K}_k$.

Có hai trường hợp ở đó các biểu diễn xạ ảnh (5-14) của nhóm $\mathcal{G}_k$ quy về biểu diễn vectơ:

1. Nhóm không gian có tính chất $\alpha = 0$. Trong trường hợp này, theo (5-14), ta có $p(h_1, h_2) \equiv 1$, tức là có những biểu diễn vectơ thông thường của nhóm phương hướng $\mathcal{G}_k$.

2. Tất cả các phần tử của nhóm $\mathcal{K}_k$ không thay đổi vectơ **k**, tức là $b = 0$ và từ đó $p \equiv 1$. Trường hợp này xảy ra khi vectơ **k** của sao nằm trong vùng Brillouin. Quả vậy, vì h_i^{-1} **k** cũng nằm trong vùng Brillouin và vì trong vùng Brillouin không thể có hai vectơ tương đương với nhau, theo định nghĩa của vùng, nên $\mathbf{b} = 0$.

Với đẳng thức (5-11) ta thấy rằng các biểu diễn bé và các biểu diễn xạ ảnh của nhóm $\mathcal{G}_k$ đều có chiều như nhau.

Thứ nữa, nếu biết được tất cả các biểu diễn xạ ảnh bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}_k$, ta có thể biết được số lần a_μ mà biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}_k^{(\mu)}$ của nhóm $\mathcal{K}_k$ nằm trong một biểu diễn $\mathcal{D}$ tùy ý nào đó (có đặc biểu $\chi(g)$) của nhóm đó. Quả vậy, theo (5-9) và (5-11), ta có

$$a_\mu = \frac{1}{G_k} \sum_h \chi(g) \widehat{\chi}^{(\mu)*}(h)\, e^{-i(k, h\alpha)}, \quad g = (h \mid \alpha) \qquad (5\text{-}15)$$

trong đó G_k trỏ cấp của nhóm $\mathcal{G}_k$.

§ 6. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM KHÔNG GIAN $\mathcal{C}_{4h}^6$

Theo các suy luận ở các tiết trước, ta hãy tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian $\mathcal{C}_{4h}^6$. Các tài liệu của nhóm này đã trình bày ở § 2.

Bài toán có bốn bước chính.

Bước I

Xác định các vectơ cơ sở của mạng đảo và tác dụng của các phần tử của nhóm phương hướng lên các vectơ đó.

Lấy các trục x, y, z theo hình 6-3. Các thành phần của các vectơ của mạng Bravais sai khác một thừa số tỷ lệ là

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Từ đó, theo công thức

$$\mathbf{b}_i = \frac{2\pi\,[\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k]}{(a_1, a_2, a_3)},$$ (i, j, k: hoán vị vòng quanh) các vectơ cơ sở của mạng đảo sai khác một thừa số tỷ lệ là

$$\mathbf{b}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

Bây giờ ta tính tác dụng của các phần tử của nhóm phương hướng

$$\mathcal{G} = \{e, C_4, C_4^2, C_4^3, I, \sigma_h, S_4, S_4^3\}$$

lên các vectơ $\mathbf{b}_i$.

Trước hết vì

$$C_4 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

nên ta được

$$C_4 \mathbf{b}_1 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3.$$

Tương tự như thế, ta được

$$C_4\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_1, \; C_4\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2.$$

Từ đó, ta được

$$C_4^2 \mathbf{b}_1 = C_4(C_4 \mathbf{b}_1) = C_4(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3) = \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3,$$

$$C_4^2 \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3, \; C_4^2 \mathbf{b}_3 = -\mathbf{b}_3,$$

$$C_4^3 \mathbf{b}_1 = C_4(C_4^2\mathbf{b}_1) = \mathbf{b}_2, \; C_4^3 \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3, \; C_4^3 \mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1.$$

Tiếp theo vì theo định nghĩa ta có

$$I\mathbf{b}_1 = -\mathbf{b}_1, \; I\mathbf{b}_2 = -\mathbf{b}_2, \; I\mathbf{b}_3 = -\mathbf{b}_3,$$

và $\sigma_h = C_2 I = C_4^2 I$ nên, theo các kết quả thu được, ta có ngay

$$\sigma_h\mathbf{b}_1 = C_4^2(I\mathbf{b}_1) = -C_4^2\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2,$$

$$\sigma_h\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_1, \; \sigma_h\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3.$$

Lại vì $\quad S_4 = \sigma_h C_4, \; S_4^3 = C_2 S_4,$

nên ta suy ra

$$S_4\mathbf{b}_1 = -\mathbf{b}_2, \; S_4\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2, \; S_4\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2,$$

$$S_4^3\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_1, \; S_4^3\mathbf{b}_2 = -\mathbf{b}_1, \; S_4^3\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1.$$

Các kết quả thu được ghi lại thành bảng sau

	C_4	C_4^2	C_4^3	I	σ_h	S_4	S_4^3
$\mathbf{b}_1$	$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_2$	$-\mathbf{b}_1$	$\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2$	$-\mathbf{b}_2$	$\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_1$
$\mathbf{b}_2$	$\mathbf{b}_1$	$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3$	$-\mathbf{b}_2$	$\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_1$	$\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2$	$-\mathbf{b}_1$
$\mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$	$-\mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$	$-\mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_3$	$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$	$\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$

Bước II. *Xác định các sao*

a) Sao gồm các vectơ $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$, tức là $2\mathbf{k} \equiv 0$. Ta có ngay tập hợp các vectơ

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1, \; \frac{1}{2}\mathbf{b}_2, \; \frac{1}{2}\mathbf{b}_3, \; \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2), \; \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3),$$

$$\frac{1}{2}(\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3), \; \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3), \; 0.$$

Dựa vào bảng trên dễ thấy rằng các vectơ thuộc tập hợp này phân thành các sao sau đây

1. Sao

$$\{\mathbf{k}_1\} = \Big\{\mathbf{k}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1 \equiv I\mathbf{k}_1,\ \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3) \equiv C_4\mathbf{k}_1 \equiv S_4^3\mathbf{k}_1,$$

$$\frac{1}{2}\mathbf{b}_2 \equiv C_4^3\mathbf{k}_1 \equiv S_4\mathbf{k}_1,\ \frac{1}{2}(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3) \equiv C_4^2\mathbf{k}_1 \equiv \sigma_h\mathbf{k}_1\Big\},$$

$$s = 4,$$

$$\mathcal{G}_1 = \mathcal{C}_i = \{e, I\}.$$

2. Sao

$$\{\mathbf{k}_2\} = \Big\{\frac{1}{2}\mathbf{b}_3 \equiv C_4^2\mathbf{k}_2 \equiv \sigma_h\mathbf{k}_2 \equiv I\mathbf{k}_2,$$

$$\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \equiv C_4\mathbf{k}_2 \equiv C_4^3\mathbf{k}_2 \equiv S_4\mathbf{k}_2 \equiv S_4^3\mathbf{k}_2\Big\},\ s = 2,$$

$$\mathcal{G}_2 = \mathcal{C}_{2h} = \{e, C_2, \sigma_h, I\}.$$

3. Sao

$$\{\mathbf{k}_3\} = \Big\{\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) \equiv h\mathbf{k}_3 \text{ với mọi } h \in \mathcal{C}_{4h}\Big\},\ s = 1,$$

$$\mathcal{G}_3 = \mathcal{C}_{4h}.$$

4. Sao

$$\{\mathbf{k}_4\} = \{0\},\ s = 1$$

$$\mathcal{G}_4 = \mathcal{C}_{4h}.$$

b) Sao gồm các vectơ $\mathbf{k} \not\equiv -\mathbf{k}$ (nằm trong vùng Brillouin).

5. Sao

$$\{\mathbf{k}_5\} = \Big\{\alpha\mathbf{b}_1,\ -\frac{1}{2} < \alpha < \frac{1}{2},\ -\alpha\mathbf{b}_1 = I\mathbf{k}_5,\ \alpha\mathbf{b}_2 = C_4^3\mathbf{k}_5,$$

$$-\alpha\mathbf{b}_2 = S_4\mathbf{k}_5,\ \alpha(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3) = C_4\mathbf{k}_5,\ -\alpha(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3) = S_4^3\mathbf{k}_5,$$

$$\alpha(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3) = C_4^2\mathbf{k}_5,\ -\alpha(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3) = \sigma_h\mathbf{k}_5\Big\},\ s = 8,$$

$$\mathcal{G}_5 = e.$$

6. Sao

$$\{\mathbf{k}_6\} = \Big\{\alpha\mathbf{b}_3 \equiv \sigma_h\mathbf{k}_6,\ -\frac{1}{2} < \alpha < \frac{1}{2},\ \alpha(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \equiv C_4\mathbf{k}_6 \equiv S_4\mathbf{k}_6,$$

$$-\alpha\mathbf{b}_3 = C_4^2\mathbf{k}_6 \equiv I\mathbf{k}_6,\ -\alpha(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \equiv C_4^3\mathbf{k}_6 \equiv S_4^3\mathbf{k}_6\Big\},\ s = 4,$$

$$\mathcal{G}_6 = \mathcal{C}_s = \{e, \sigma_h\}.$$

Vectơ $\mathbf{k}_6 = \alpha\mathbf{b}_3$ nằm trên trục đối xứng C_4.

7. Sao

$$\{\mathbf{k}_7\} = \Big\{\alpha(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3) \equiv C_4\mathbf{k}_7 \equiv C_4^2\mathbf{k}_7 \equiv C_4^3\mathbf{k}_7,\ -\frac{1}{4} < \alpha < \frac{1}{4},$$

$$-\alpha(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3) \equiv I\mathbf{k}_7 \equiv \sigma_h\mathbf{k}_7 \equiv S_4\mathbf{k}_7 \equiv S_4^3\mathbf{k}_7\Big\},\ s = 2,$$

$$\mathcal{G}_7 = \mathcal{C}_4.$$

Vectơ $\mathbf{k}_7 = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ nằm trên mặt phẳng đối xứng σ_h.

8. Sao

$$\{\mathbf{k}_8\} = \Big\{\frac{1}{4}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) \equiv C_4^3\mathbf{k}_7 \equiv S_4\mathbf{k}_7 \equiv S_4^3\mathbf{k}_7,$$

$$-\frac{1}{4}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) \equiv C_4\mathbf{k}_7 \equiv C_4^2\mathbf{k}_7 \equiv I\mathbf{k}_7 \equiv \sigma_h\mathbf{k}_7\Big\}, \ s = 2,$$

$$\mathcal{G}_8 = \mathcal{S}_4.$$

Bước III. *Tìm các biểu diễn xạ ảnh của các nhóm phương hướng $\mathcal{G}_i$ tương ứng với các sao $\{\mathbf{k}_i\}$.*

Như đã biết, trước hết ta phải tính các giá trị của trọng $p(h_1, h_2) = \exp i\,(h_1^{-1}\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_i, \alpha_2)$, $\alpha_2 = \alpha = \frac{3}{4}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{4}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 = \left[\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}\right]$ (xem (5-14)). Tất nhiên trong mọi trường hợp, ta đều có

$$p(h_1, e) = p(e, h_2) = 1.$$

1. *Sao* $\{\mathbf{k}_1\}$, *nhóm* $\mathcal{C}_i\ (= \mathcal{G}_1)$

Ta có

$$p(I, I) = e^{i(I^{-1}k_1 - k_1,\ \alpha_I)} = e^{i(Ik_1 - k_1,\ \alpha)} =$$

$$= e^{-i\left(b_1,\ \frac{3}{4}a_1 + \frac{1}{4}a_2 + \frac{1}{2}a_3\right)} = e^{-i\left(b_1,\ \frac{3}{4}a_1\right)} = e^{-\frac{3\pi i}{2}} = i$$

Từ đó ta được

$$\hat{D}(I)\,\hat{D}(I) = p(I, I)\,\hat{D}(I^2) = i\,\hat{D}(e) = i.$$

Vì nhóm $\mathcal{C}_i$ chỉ có hai phần tử nên nhóm này chỉ có hai biểu diễn xạ ảnh một chiều. Như thế ta được ngay các biểu diễn xạ ảnh một chiều sau

$\mathcal{C}_i$	e	I
$\hat{\mathcal{D}}(1)$	1	$e^{i\pi/4}$
$\hat{\mathcal{D}}(2)$	1	$-e^{i\pi/4}$

2. *Sao* $\{k_2\}$, *nhóm* $\mathcal{C}_{2h}\ (= \mathcal{G}_2)$

Tính toán tương tự như trên, ta được

$p(h_1, h_2)$:

$h_2 \backslash h_1$	e	C_4^2	σ_h	I
e	1	1	1	1
C_4^2	1	1	1	1
σ_h	1	−1	1	−1
I	1	1	1	−1

Vì chỉ có bốn phần tử, nhóm $\mathcal{C}_{2h}$ chỉ có hoặc một biểu diễn xạ ảnh hai chiều, hoặc bốn biểu diễn xạ ảnh một chiều. Dựa vào bảng giá trị trên của trọng p, ta hãy chứng tỏ rằng nhóm này không có biểu diễn xạ ảnh một chiều. Quả vậy, ta có chẳng hạn

$$\widehat{D}(C_2)\,\widehat{D}(\sigma_h) = p(C_2, \sigma_h)\,\widehat{D}(C_2\,\sigma_h) = -\,\widehat{D}(C_2\,\sigma_h) \quad ,$$

$$\widehat{D}(\sigma_h)\,\widehat{D}(C_2) = p(\sigma_h, C_2)\,\widehat{D}(\sigma_h\,C_2) = \quad \widehat{D}(\sigma_h\,C_2) \quad .$$

Nhưng vì

$$\sigma_h C_2 = C_2 \sigma_h$$

nên ta được

$$\widehat{D}(\sigma_h)\,\widehat{D}(C_2) = -\,\widehat{D}(C_2)\,D(\sigma_h) \quad . \tag{6-1}$$

Nếu $\widehat{D}$ là một biểu diễn một chiều, tức là

$$[\widehat{D}(h_1)\ ,\ \widehat{D}(h_2)] = 0$$

với mọi h_1 , h_2 thuộc nhóm, thì từ (6-1) ta được $\widehat{D}(C_2)\,\widehat{D}(\sigma_h) = 0$, chẳng hạn $\widehat{D}(C_2) = 0$, từ đó hóa ra $\widehat{D}(e) = \widehat{D}(C_2)\,\widehat{D}(C_2) = 0$, một điều vô lý. Như thế trong trường hợp cụ thể của bài toán, nhóm $\mathcal{C}_{2h}$ chỉ có một biểu diễn xạ ảnh hai chiều.

Để tìm biểu diễn này, ở đây có thể dùng phương pháp biểu diễn hạ cảm $\mathcal{C}_{2h} \downarrow \mathcal{H}$, với $\mathcal{H}$ là một nhóm con nào đó của $\mathcal{C}_{2h}$ (nếu có !) ở đó biểu diễn xạ ảnh đang xét biến thành biểu diễn vectơ thông thường $p(h_1, h_2) \equiv 1$ với mọi h_1, $h_2 \in \mathcal{H}$). Theo bảng p ở trên, ta có thể lấy

$$\mathcal{H} = \mathcal{C}_2 = \{e, C_4^2\} \quad ,$$

hay

$$\mathcal{H} = \mathcal{C}_s = \{e\ ,\ \sigma_h\} \quad .$$

Ta hãy chọn trường hợp thứ hai chẳng hạn. Vì các biểu diễn vectơ thông thường D của nhóm *Abel* $\mathcal{C}_s$ là một chiều và $D(\sigma_h) = \pm 1$, nên biểu diễn xạ ảnh hai chiều đang xét của nhóm $\mathcal{C}_{2h}$, khi cảm ứng trên nhóm con $\mathcal{C}_s$ sẽ trở thành hoàn toàn khả quy, tức là ta có các khả năng sau

$$\mathcal{C}_{2h} \downarrow \mathcal{C}_s\ :\ \widehat{D}(\sigma_h) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ hay } \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} .$$

Vì $[\widehat{D}(\sigma_h)\ ,\ \widehat{D}(h)] \not\equiv 0$ (xem (6-1) chẳng hạn) nên, theo bổ đề Schur thứ hai, $\widehat{D}(\sigma_h)$ phải khác bội của đơn vị. Thành thử hai khả năng cuối cùng kể trên của $\widehat{D}(\sigma_h)$ bị loại trừ và chỉ còn lại khả năng

$$\widehat{D}(\sigma_h) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} .$$

Tiếp theo ta hãy tính $\widehat{D}(C_2)$ bằng phương pháp đồng nhất. Đặt

$$\widehat{D}(C_2) = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix},$$

từ (6-1) ta được

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

hay

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\gamma & -\delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\alpha & \beta \\ -\gamma & \delta \end{bmatrix},$$

tức là $\alpha = \delta = 0$,

$$\widehat{D}(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{bmatrix}.$$

Nhưng vì $\widehat{D}(C_2)\,\widehat{D}(C_2) = p(C_2, C_2)\,\widehat{D}(e) = I_2$, nên ta lại được

$$\begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta\gamma & 0 \\ 0 & \beta\gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\beta\gamma = 1.$$

Ta có thể chọn $\beta = \gamma = 1$, và như thế

$$\widehat{D}(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Cuối cùng, từ đẳng thức $I = \sigma_h C_2$, ta được

$$\widehat{D}(I) = \widehat{D}(\sigma_h C_2) = [p(\sigma_h, C_2)]^{-1}\,\widehat{D}(\sigma_h)\,\widehat{D}(C_2) =$$
$$= \widehat{D}(\sigma_h)\,\widehat{D}(C_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Ta có kết quả

$\mathcal{C}_{2h}$	e	σ_h	C_2	I
$\widehat{\mathcal{D}}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$

3. *Sao* $\{\mathbf{k}_3\}$, *nhóm* $\mathcal{C}_{4h}$ $(= \mathcal{G}_3)$

Tương tự như trên, ta tìm được bảng giá trị

$p(h_1 h_2)$:

$h_2 \backslash h_1$	e	C_4	C_4^2	C_4^3	S_4	S_4^3	σ_h	I
e	1	1	1	1	1	1	1	1
C_4	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
C_4^2	1	1	1	1	1	1	1	1
C_4^3	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
S_4	1	1	1	1	1	1	1	1
S_4^3	1	1	1	1	1	1	1	1
σ_h	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
I	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1

Theo bảng này, ta được

$$\widehat{D}(I)\,\widehat{D}(C_4) = p(I, C_4)\,\widehat{D}(I\,C_4) = -\widehat{D}(I\,C_4)$$

$$\widehat{D}(C_4)\,\widehat{D}(I) = p(C_4, I)\,\widehat{D}(C_4\,I) = \widehat{D}(C_4\,I)$$

tức là (vì $IC_4 = C_4 I$)

$$\widehat{D}(I)\,\widehat{D}(C_4) = -\widehat{D}(C_4)\,\widehat{D}(I). \tag{6-2}$$

Từ đó, lý luận tương tự như trên, ta thấy rằng trong trường hợp cụ thể của bài toán, nhóm $\mathcal{C}_{4h}$ không có biểu diễn xạ ảnh một chiều và, như thế, nhóm này chỉ có hai biểu diễn xạ ảnh hai chiều (vì cấp của nhóm bằng 8).

Tiếp theo, để tìm các biểu diễn xạ ảnh hai chiều này, cũng như trên, ta dùng phương pháp biểu diễn hạ cảm $\mathcal{C}_{4h} \downarrow \mathcal{C}_4$ vì với nhóm con $\mathcal{C}_4$ của $\mathcal{C}_{2h}$ thì $p = 1$. Nhưng vì với nhóm Abel $\mathcal{C}_4$ tất cả các biểu diễn thông thường D đều một chiều và $D(C_4^2) = +1$, nên ta được

$$\mathcal{C}_{4h} \downarrow \mathcal{C}_4 : \ \widehat{D}(C_4^2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \text{ hay } \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Mặt khác vì nhóm $\mathcal{C}_{4h}$ là một nhóm Abel, nên ta được (xem bảng giá trị của p).

$$[\widehat{D}(C_4^2), \widehat{D}(h)] = 0$$

với mọi $h \in \mathcal{C}_{4h}$. Theo bổ đề Schur thứ hai, $\widehat{D}(C_4^2)$ phải là bội của đơn vị (khả năng thứ ba kể ở trên bị loại trừ) tức là ta được

$$\widehat{D}^{(1)}(C_4^2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \widehat{D}^{(2)}(C_4^2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Từ đó, dựa vào bảng đại biểu của nhóm $\mathcal{C}_4$ ta được các ma trận tương ứng

$$\widehat{D}^{(1)}(C_4) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \widehat{D}^{(2)}(C_4) = \begin{bmatrix} i & o \\ o & -i \end{bmatrix},$$

$$\widehat{D}^{(1)}(C_4^3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \widehat{D}^{(2)}(C_4^3) = \begin{bmatrix} -i & o \\ o & i \end{bmatrix},$$

Tiếp theo, đặt $\widehat{D}(I) = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix}$, bằng phương pháp đồng nhất dựa trên đẳng thức (6-2), ta được

$$\alpha = \delta = 0.$$

Sau đó, dùng đẳng thức

$$\widehat{D}(I)\,\widehat{D}(I) = p(I, I)\,\widehat{D}(I^2) = -\widehat{D}(e) = -\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

ta được $\beta\gamma = -1$ và có thể chọn $\beta = \gamma = i$. Như thế ta có

$$\widehat{D}(I) = \begin{bmatrix} o & i \\ i & o \end{bmatrix}.$$

Cuối cùng, dùng các hệ thức

$$\sigma_h = IC_2, \quad S_4 = \sigma_h C_4, \quad S_4^3 = C_2 S_4$$

ta được các biểu diễn xạ ảnh hai chiều sau của nhóm $\mathcal{C}_{4h}$

$\mathcal{C}_{4h}$	e	C_4	C_4^2	C_4^3	S_4	S_4^3	σ_h	I
$\mathcal{D}^{(1)}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\-i & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\-i & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\i & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\i & 0\end{bmatrix}$
$\mathcal{D}^{(2)}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}i & 0\\0 & -i\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-i & 0\\0 & -i\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & 1\\-1 & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & -i\\-i & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\i & 0\end{bmatrix}$

4. *Sao* $\{\mathbf{k}_4\} = 0$, *nhóm* $\mathcal{C}_{4h}$ $(= \mathcal{G}_4)$

Vì $k_4 = 0$. nên ở đây ta có các biểu diễn thông thường của nhóm $\mathcal{C}_{4h}$ (biểu diễn một chiều)

$\mathcal{C}_{4h}$	e	C_4	C_4^2	C_4^3	S_4	S_4^3	σ_h	I
	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	1	1	−1	−1
	1	i	−1	−i	i	−i	1	−1
	1	i	−1	−i	−i	i	−1	1
	1	−i	−1	i	−i	i	1	−1
	1	−i	−1	i	i	−i	−1	1

5. *Sao* $\{\mathbf{k}_5\}$, *nhóm* e $(= \mathcal{G}_5)$

Dĩ nhiên ta chỉ có một biểu diễn một chiều $\widehat{D}(e) = 1$.

6. *Sao* $\{\mathbf{k}_6\}$ *nhóm* $\mathcal{C}_s$ $(= \mathcal{G}_6)$

Vectơ $\mathbf{k}_6$ nằm trong đối Brillouin, do đó ta có các biểu diễn vectơ thông thường của nhóm

$\mathcal{C}_s$	e	σ_h
	1	1
	1	−1

7. *Sao* $\{\mathbf{k}_7\}$, *nhóm* $\mathcal{C}_4$ $(= \mathcal{G}_7)$

Ở đây, cũng như trường hợp trước, ta có các biểu diễn vectơ thông thường của nhóm.

8. *Sao* $\{\mathbf{k}_8\}$ *nhóm* $\mathcal{S}_4$ $(= \mathcal{G}_8)$

Cũng như trên, ta có

$\mathcal{S}_4$	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

Bước IV. *Xác định các biểu diễn bé của các nhóm $\mathcal{K}_i$ của các vectơ sao* $\mathbf{k}_i$
Công thức (5-11):

$$D(g) = \widehat{D}(h)\, e^{i(k_i, \alpha)},$$

với $g = (h \mid \alpha)$, $g \in \mathcal{K}_i$, $h \in \mathcal{G}_i$.

1. *Sao* $\{\mathbf{k}_1\}$, *nhóm* $\mathcal{K}_1 = \mathcal{T}_a \mathcal{C}_i$

Vì

$$(\mathbf{k}_1, \alpha_I) = \frac{1}{2}\left[\mathbf{b}_1, \frac{3}{4}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{4}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3\right] = \frac{3\pi}{4},$$

nên ta có ngay các biểu diễn bé bất khả quy của nhóm $\mathcal{K}_1$

1	e	$(I \mid \alpha)$	$(e \mid a)$
$\mathcal{D}_{k_1}^{(1)}$	1	-1	$e^{i(k_1, a)}$
$\mathcal{D}_{k_1}^{(2)}$	1	1	$e^{i(k_1, a)}$

Với sao này, nhóm không gian $\mathcal{C}_{4h}^6$, theo (5-4), có hai biểu diễn bất khả quy 4 chiều (vì $s = 4$).

2. *Sao* $\{\mathbf{k}_2\}$, *nhóm* $\mathcal{K}_2 = \mathcal{T}_a \mathcal{C}_{2h}$

Các giá trị của $e^{i(k_2, \alpha)}$ là

	e	$(\sigma_h \mid \alpha)$	C_2	$(I \mid \alpha)$
$e^{i(k_2, \alpha)}$	1	i	1	$-i$

Từ đó ta được biểu diễn bất khả quy sau của $\mathcal{K}_2$

$\mathcal{K}_2$	e	$(\sigma_h \mid \alpha)$	C_2	$(I \mid \alpha)$	$(e \mid a)$
$\mathcal{D}_{k_2}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}i & 0\\0 & -i\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0 & i\\-i & 0\end{bmatrix}$	$e^{i(k_2, a)}\, I_2$

Với sao này, nhóm không gian có một biểu diễn bất khả quy 4 chiều (vì $s = 2$).

3. Sao $\{k_3\}$ *nhóm'* $\mathcal{K}_3 = \mathcal{T}_a \mathcal{C}_{4h}$

$\mathcal{K}_3$	e	$(C_4 \mid \alpha)$	C_4^2	$(C_4^3 \mid \alpha)$	S_4	S_4^3	$(\sigma_h \mid \alpha)$	$(I \mid \alpha)$	$(e \mid a)$
$\mathcal{D}_{k3}^{(1)}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$e^{i(k_3,a)}I_2$
$\mathcal{D}_{k3}^{(2)}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$e^{i(k_3,a}I_2$

Với sao này, nhóm không gian có hai biểu diễn bất khả quy hai chiều (vì $s = 1$).

Với các nhóm $\mathcal{K}_4, \mathcal{K}_5, \ldots, \mathcal{K}_8$, cách tính các biểu diễn bé không vấp phải khó khăn gì.

§ 7. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC TRẠNG THÁI NĂNG LƯỢNG CỦA ÊLECTRÔN TINH THỂ

Ta hãy giải hai bài toán sau cho tinh thể tương tự như hai bài toán cho phân tử: bài toán phân loại các mức năng lượng êlectrôn và bài toán phân loại các dao động vuông góc của các phân tử. Điểm chung của các bài toán này là sự tồn tại các nhóm đối xứng của các cấu hình hạt nhân. Đối với phân tử ta có nhóm điểm, nhưng còn đối với các tinh thể, ta có các nhóm không gian. Tất nhiên, bài toán cho các tinh thể là phức tạp hơn vì rằng cách tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy cho các nhóm không gian nói chung là phức tạp hơn so với các nhóm điểm. Trước hết ta xét bài toán phân loại các trạng thái năng lượng.

Giả sử các êlectrôn ở trong trường thế U của tinh thể, ta có phương trình trạng thái dừng sau:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta\psi^i_\mu + (U - E_\mu)\,\psi^i_\mu = 0. \tag{7-1}$$

Theo phương pháp phân loại chung dựa trên lý thuyết biểu diễn nhóm, các rạng thái ψ^i_μ cùng tương ứng với một mức năng lượng E_μ xác định, làm thành một không gian biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian của tinh thể (tất nhiên trừ trường hợp suy biến ngẫu nhiên). Nhưng vì các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian được đặc trưng bởi sao của biểu diễn, nên ta có thể ký hiệu lại các trạng thái như sau

$$\psi^i_{k,\mu}\ , \quad (i = 1, \ldots, n_\mu)$$

với n_μ là bậc suy biến của mức năng lượng E_μ. Các hàm này có thể lấy bằng các hàm riêng của toán tử tịnh tiến theo các vectơ của mạng, tức là thỏa mãn đẳng thức (xem (3-5))

$$D^k[(e \mid a)]\,\psi^i_{k,\mu} = e^{i(k,a)}\,\psi^i_{k,\mu}. \tag{7-2}$$

Ta đặt

$$\varphi^i_{k,\mu}(\mathbf{r}) = \psi^i_{k,\mu}(\mathbf{r})\, e^{i(\mathbf{k},\mathbf{r})}. \tag{7-3}$$

Thế thì, theo (7-2), rõ ràng các hàm (7-3) không thay đổi dưới tác dụng của toán tử tịnh tiến theo vectơ a của mạng, nghĩa là các hàm đó là tuần hoàn

$$\varphi^i_{k,\mu}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varphi^i_{k,\mu}(\mathbf{r}).$$

Như thế trạng thái

$$\psi^i_{k,\mu}(\mathbf{r}) = \varphi^i_{k,\mu}(\mathbf{r})\, e^{i(\mathbf{k},\mathbf{r})} \tag{7-4}$$

có thể xem như một sóng phẳng suy rộng, trong đó biên độ không phải là một hằng, mà là một hàm tuần hoàn của vectơ **r**. Các trạng thái (7-4) gọi là *hàm Bloch*. Vectơ **k** gọi là *tựa xung lượng* của êlectrôn.

Phương trình của hàm tuần hoàn $\varphi_{\mathbf{k},\mu}$ là

$$\left\{\triangle + 2i(K, \nabla) + \frac{2M}{\hbar^2}\left[E_\mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} - U\right]\right\}\varphi_{\mathbf{k}\mu} = 0 \tag{7-5}$$

Các kết quả thu được dẫn đến bài toán biên sau: Tìm các hàm $\varphi_{\mathbf{k},\mu}$ thỏa mãn phương trình, (7-5), các hàm này cùng với các đạo hàm vuông góc của chúng có giá trị như nhau tại các điểm tương ứng với nhau nằm trên biên của các ô tinh thể.

Các điều kiện biên sẽ cho một loạt trị riêng gián đoạn của năng lượng E:

$$E_1(\mathbf{k}),\ E_2(\mathbf{k}), \ldots, E_\mu(\mathbf{k}), \ldots \tag{7-6}$$

Các biểu thức trên của E tất nhiên là những hàm tuần hoàn của tựa xung lượng. Tập hợp tất cả các giá trị của $E_\mu(k)$ khi k biến thiên làm thành một phổ nào đó gọi là *vùng năng lượng thứ* μ của tinh thể.

Tại những giá trị nhất định nào đó của tựa xung lượng k, một số các hàm khác nhau ở (7-6) có thể có những giá trị như nhau. Ta nói rằng có hiện tượng *chập* các vùng năng lượng. Ta hãy xem trong những điều kiện nào sẽ xuất hiện hiện tượng này. Ta biết rằng các hàm $\psi^i_{k\mu}$ biến đổi theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian của tinh thể, và cùng tương ứng với một mức năng lượng E(k) như nhau của êlectrôn. Thành thử, nếu tại một giá trị k_0 của k, nhóm phương hướng $\mathcal{F}_{k_0}$ tương ứng với nhóm $\mathcal{K}_{k_0}$ của vectơ $\mathbf{k}_0$ có những biểu diễn n_α chiều, $n_\alpha > 1$, thì ta sẽ có hiện tượng chập n_α vùng năng lượng.*

§8. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC DAO ĐỘNG VUÔNG GÓC CỦA CÁC HẠT NHÂN TINH THỂ

Ta hãy ứng dụng lý thuyết biểu diễn các nhóm không gian để tiến hành phân loại các dao động vuông góc của các tinh thể. Ta không xét trường hợp suy biến ngẫu nhiên, tức là giả thiết rằng các tọa độ vuông góc của tinh thể, cùng

* Về phương trình (7-5) và về các vùng năng lượng của êlectrôn tinh thể, bạn đọc có thể xem cách tính gần đúng ở chương X.

tương ứng với một tần số riêng, biến đổi theo cùng một biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian của tinh thể đó.

Tương tự như trong trường hợp các phân tử, (xem V, §9) tập hợp tất cả các dịch chuyển u^i ra khỏi các vị trí cân bằng các hạt nhân, tạo nên một không gian nào đó thực hiện một biểu diễn (khả quy) nào đó của nhóm không gian của tinh thể. Sự biến đổi từ các dịch chuyển u sang các tọa độ vuông góc Q là một phép biến đổi tuyến tính có dạng

$$u^i = (A)_{i,\alpha j}\, Q^j_\alpha \tag{8-1}$$

$$Q^j_\alpha = (A^{-1})_{i,\alpha j}\, u^i \tag{8-2}$$

các tọa độ vuông góc Q^j_α cùng tương ứng với một tần số xác định ω_α nào đó, như đã giả thiết, biến đổi theo những biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian của tinh thể. Ta có thể chọn các tọa độ vuông góc này trùng với các vectơ riêng của toán tử tịnh tiến theo vectơ **a** của mạng Bravais, tức là

$$D^{(k)}[(e \mid a)]\, Q^j_\alpha = e^{i(k,a)} Q^j_\alpha \,. \tag{8-3}$$

Bây giờ ta hãy tác dụng toán tử tịnh tiến nói trên lên hai vế của (8-1). Dưới tác dụng của toán tử này, dịch chuyển u^i sẽ biến thành dịch chuyển $u^i_{(a)}$ của hạt nhân tương đương với hạt nhân có dịch chuyển u^i đó, và nằm trong ô tinh thể suy từ ô đang xét bởi phép tịnh tiến theo vectơ **a** của mạng. Tất nhiên, theo (8-3), ở vế trái ta sẽ được lượng $e^{i(k,a)}.\, u^i$, tức là ta có

$$u^i_a = e^{i(k,a)}\, u^i. \tag{8-4}$$

Kết quả này cùng với (8-2) chứng tỏ rằng tại các vị trí tương đương với nhau trong các ô tinh thể khác nhau, các dao động vuông góc với tọa độ Q^j_α cùng tương ứng với một tần số ω_α như nhau, là lệch pha với nhau một các tuần hoàn. Tóm lại, nếu chọn các tọa độ vuông góc trùng với các vectơ riêng của toán tử tịnh tiến theo vectơ của mạng, thì tương ứng với mỗi tọa độ đó, ta có một sóng tương tự như một sóng phẳng mà vectơ sóng chính là vectơ **k** của mạng đảo. Dĩ nhiên, sóng phẳng này là một sóng gián đoạn do tính chất gián đoạn của tinh thể. Theo trên, các tọa độ vuông góc có thể lấy thêm một chỉ số nữa là **k**:

$$Q^j_\alpha \to Q^j_{k,\alpha}$$

Tiếp theo, nếu giả sử mỗi ô tinh thể chứa N hạt nhân thì, với một giá trị k xác định, tập hợp tất cả các dịch chuyển u^i thỏa mãn (8-4) làm thành một không gian 3N chiều. Nhưng số chiều này bằng số tọa độ vuông góc độc lập với nhau, tương ứng với vectơ **k** đó. Thành thử ta có tất cả là 3N dao động vuông góc với các tọa độ $Q^j_{k,\alpha}$. Tương ứng với các dao động này là 3N tần số phụ thuộc vào **k**

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) = \omega_1(\mathbf{k}),\ \omega_2(\mathbf{k}), \dots,\ \omega_{3N}(\mathbf{k}). \tag{8-5}$$

Tập hợp tất cả các giá trị của tần số $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ ($\alpha = 1, \dots, 3N$) khi **k** lấy tất cả các giá trị khả dĩ gọi là *giải tần thứ* α, hay là *nhánh thứ* α của phổ đàn hồi của tinh thể. Các giá trị của nhánh tại giá trị $k = 0$ gọi là các *tần số giới hạn*. Tất nhiên, chuyển động tịnh tiến của tinh thể xem như một toàn bộ, với ba bậc tự do của mình, có thể xem như một tập hợp ba dao động vuông góc có tần số đều bằng không. Các nhánh của phổ đàn hồi của tinh thể xuất phát từ ba tần số giới hạn bằng không này gọi là các *nhánh âm học*. 3N-3 nhánh còn lại của phổ gọi là các *nhánh quang học*.

Như thế, bước thứ nhất là phân loại các tọa độ vuông góc, tức là các dao động vuông góc, theo các giá trị khả dĩ của vectơ **k** của mạng đảo. Bước thứ hai là phân loại các dao động đó tương ứng với một giá trị xác định của vectơ **k**. Ta biết rằng các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian được xác định bằng những biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{K}_k$ của vectơ **k**. Vì thế, các tọa độ vuông góc $Q^i_{k,\alpha}$ (k xác định) sẽ làm một không gian biểu diễn (khả quy) nào đó của nhóm $\mathcal{K}_k$. Ký hiệu biểu diễn và đặc biểu của biểu diễn trong không gian đó tương ứng là $\mathcal{D}_k$ và χ_k, ta thấy rằng bước thứ hai của sự phân loại dao động là phân tích biểu diễn $\mathcal{D}_k$ thành các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{K}_k$. Các tọa độ vuông góc thực hiện từng biểu diễn bất khả quy này sẽ tương ứng với cùng một tần số $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ xác định. Theo kết quả phân tích này, ta sẽ biết được tinh thể có những loại dao động vuông góc nào, tính chất đối xứng của các tọa độ vuông góc dưới tác dụng của các phần tử của nhóm $\mathcal{K}_k$ và bậc suy biến của từng tần số. Bài toán phân tích tiến hành theo phương pháp thông thường. Nói cụ thể hơn, ta hãy tính đặc biểu χ_k của biểu diễn (khả quy) $\mathcal{D}_k$ tại các phần tử $C(\varphi) \mid \alpha)$ và $(S(\varphi) \mid \alpha)$ của nhóm $\mathcal{K}_k$. Tương tự như trong trường hợp phân loại các dao động của các phân tử, ta được

$$\chi_k[((C(\varphi) \mid \alpha)] = (1 + 2\cos\varphi) \sum_{a \in \mathcal{C}_a} N_a e^{i(k,a)},$$

$$\chi_k[((S(\varphi) \mid \alpha)] = (-1 + 2\cos\varphi) \sum_{a \in \mathcal{C}_a} N_a e^{i(k,a)}, \tag{8-6}$$

với **k** nằm trong đới Brillouin, còn N_a là số hạt nhân của ô tinh thể mà vị trí cân bằng, dưới tác dụng của các phần tử của nhóm $\mathcal{K}_k$, trùng với các vị trí cân bằng của các hạt nhân tương đương trong ô tinh thể thu từ ô tinh thể ban đầu bởi phép tịnh tiến theo vectơ **a** của mạng. Từ đó, công thức (5-15) cho biết số $a_{k\mu}$, trỏ bao nhiêu lần biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\mu)}_k$ của nhóm $\mathcal{K}_k$ nằm trong biểu diễn $\mathcal{D}_k$ nói trên:

$$a_{k\mu} = \frac{1}{G_k} \sum \chi_k(g) \,.\, \widehat{\chi}^{(\mu)*}(h) e^{-i(k,h\alpha)},$$

$$g = (h \mid \alpha), \tag{8-7}$$

trong đó G_k là cấp của nhóm điểm $\mathcal{G}_k$. tổng lấy theo tất cả các $h \in \mathcal{G}_k$.

Nếu như trong sự phân tích này có xuất hiện những biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{K}_k$ có chiều lớn hơn đơn vị thì, do số chiều này bằng bậc suy biến của tần số w_α (**k**), ta thấy rằng có một số nhánh (bằng số chiều trên) có giá trị bằng nhau tại giá trị **k** đang xét. Ta nói có hiện tượng chập các *nhánh* của phổ đàn hồi của tinh thể.

Xem [9], [14].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Đọc cả chương

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Không cần đọc chương này

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Không cần đọc chương này

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc qua §1 ÷ §5 để chuẩn bị kiến thức hiểu được nhóm Poincaré ở chương XII

CHƯƠNG VII

ĐẠI CƯƠNG VỀ NHÓM LIE

§ 1. NHÓM TOPÔ

Định nghĩa nhóm tôpô

Một nhóm $\mathcal{G} = \{g\}$ vô hạn gọi là một *nhóm tôpô* nếu khi g và g' biến thiên liên tục thì tích gg' và phần tử nghịch đảo g^{-1} cũng biến thiên liên tục.

(Định nghĩa này có thể phát biểu qua ngôn ngữ lân cận như thường lệ).

Các nhóm ma trận tôpô

Theo định nghĩa trên, dựa vào công thức nhân ma trận và công thức lấy ma trận nghịch đảo (cho thấy rằng các phần tử của ma trận tích và ma trận nghịch đảo của nhóm GL(n, C) là những hàm liên tục của các phần tử ma trận có liên quan) ta kết luận rằng nhóm GL(n, C) là một nhóm tôpô. Cũng vì lý do đó, các nhóm GL(n, R), SL(n, C), SL n, R), U(n), U(p, q), SU(n), SU(p, q), SO(n, C), SO(n), O(p, q), SO(p, q), Sp(2p, 2q), Sp(2n), Sp(2n, C) đều là những nhóm tôpô.

Tham số của nhóm tôpô

Các nhóm tôpô có thể có vô số hay một số hữu hạn tham số thực. Ta chỉ xét những nhóm có một số hữu hạn tham số.

Chẳng hạn, nhóm SO(1,1) (nhóm Lorentz đặc biệt), là nhóm có dạng

$$x' = x\,\mathrm{ch}\psi + x^{o}\mathrm{sh}\psi,$$

$$x'^{o} = x\,\mathrm{ch}\psi + x^{o}\mathrm{ch}\psi,$$

có một tham số là ψ $(-\infty < \psi < \infty)$ với $\mathrm{tg}\psi = iV/c$, trong đó V là vận tốc tương đối giữa các hệ quy chiếu.

Nhóm này làm bất biến dạng toàn phương

$$(x'^{1})^2 - (x'^{o})^2 = (x^{1})^2 - (x^{o})^2.$$

Nhóm SU(2) viết dưới dạng

$$x' = Ux,$$

$$U = \frac{1 + i\sigma\mathbf{a}/2}{1 - i\sigma\mathbf{a}/2} = \frac{(1 - a^2/4) + i\sigma\mathbf{a}}{1 + a^2/4},$$

$$U^+U = I_2, \quad \det U = 1,$$

trong đó $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ là các ma trận Pauli. Nhóm có ba tham số là ba thành phần của vectơ **a**.

Người ta đã tính được số tham số của các nhóm ma trận sau (có thể dựa vào số phần tử ma trận độc lập với nhau).

GL(n, C)	$2n^2$	tham số,	
GL(n, R)	n^2	tham số,	
SL(n, C)	$2l(l + 2)$	tham số,	$n = l + 1$,
SL(n, R)	$l(l + 2)$	tham số,	$n = l + 1$,
SU(n)	$l(l + 2)$	tham số,	$n = l + 1$,
U(n)	n^2	tham số,	
SO(2l)	$l(2l + 1)$	tham số,	
SO(2l + 1)	$l(2l - 1)$	tham số,	
Sp(2l)	$l(2l + 1)$	tham số.	

Không gian tham số các nhóm tôpô

Ta có thể quan niệm các tham số của các nhóm tôpô làm thành một không gian nào đó, gọi là *không gian tham số* hay *không gian nhóm*. Mỗi phần tử của nhóm là một điểm của không gian đó. Chẳng hạn:

Nhóm SO(2) có tham số φ, không gian tham số là $[0,2\pi]$, trong đó hai mút đồng nhất như nhau (không gian này tương đương với vòng tròn theo nghĩa tôpô).

Nhóm SO(1, 1) có tham số là ψ, không gian tham số là một đường thẳng vô hạn.

Nhóm SO(3) ở đó mỗi phần tử được xác định bởi mút của vectơ quay (đặt trên trục quay), không gian nhóm là quả cầu bán kính π, hai điểm đối tâm trên mặt cầu là đồng nhất như nhau (do các góc quay biến thiên từ O đến π và do hai điểm đối tâm cùng mô tả một phép quay như nhau).

§2. NHÓM LIE

Các tiên đề của cấu trúc nhóm tôpô

Ta hãy phát biểu các tiên đề của cấu trúc nhóm cho nhóm tôpô. Ta chỉ xét các nhóm tôpô dưới dạng nhóm các phép biến đổi liên tục $f : x \to x'$ của không gian, vì đây là trường hợp quan trọng nhất trong các ứng dụng vật lý. Ta có các tiên đề sau:

1. Phép nhân phải kín: Tích của hai phép biến đổi liên tiếp nhau của tập hợp các phép biến đổi đang xét phải thuộc tập hợp đó. Điều này có nghĩa là nếu

$a = \{a^\sigma\}$ là tập hợp giá trị của các tham số tương ứng với phép biến đổi thứ nhất

$$g(a): x' = f(x; a^\sigma) \equiv f(x; a),$$

$b = \{b^\sigma\}$ là tập hợp giá trị của các tham số tương ứng với phép biến đổi thứ hai

$$g(b): x'' = f(x'; b^\sigma) = f[f(x; a); b],$$

thì phải có một tập hợp giá trị $c = \{c^\sigma\}$ của các tham số sao mà

$$g(c): x'' = f(x; c).$$

Các giá trị c là những hàm nào đó của a và b : $c = \Phi(a; b)$, hàm Φ này chính là luật hợp thành (phép nhân) của nhóm các phép biến đổi không gian mà ta đang xét.

Chẳng hạn luật hợp thành của nhóm SO(2) là

$$\varphi = \Phi(\varphi_1; \varphi_2) = \varphi_1 + \varphi_2,$$

trong đó φ_1, φ_2 và φ là các giá trị của tham số ứng với các phép quay thành phần và phép quay tích.

Luật hợp thành của nhóm SO(1, 1) là

$$\psi = \Phi(\psi_1; \psi_2) = \psi_1 + \psi_2,$$

trong đó ψ_1, ψ_2 và ψ là các giá trị của tham số ứng với các phép biến đổi thành phần và phép biến đổi tích. Hoặc, diễn theo tham số V, ta sẽ được luật hợp thành

$$V = \frac{V_1 + V_2}{1 + \dfrac{V_1 V_2}{c^2}}$$

Công thức này chính là công thức hợp tốc Einstein.

Luật hợp thành của nhóm SU(2) suy từ đẳng thức

$$\frac{1 + i\sigma\mathbf{c}/2}{1 - i\sigma\mathbf{c}/2} = \frac{1 + i\sigma\mathbf{a}/2}{1 - i\sigma\mathbf{a}/2} \cdot \frac{1 + i\sigma\mathbf{b}/2}{1 - i\sigma\mathbf{b}/2},$$

tức là

$$\mathbf{c} = \Phi(\mathbf{a}; \mathbf{b}) = \frac{(1 - |\mathbf{b}|^2/4)\mathbf{a} + (1 - |\mathbf{a}|^2/4)\mathbf{b} + [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]}{1 - \mathbf{a}\mathbf{b}/2 + |\mathbf{a}|^2|\mathbf{b}|^2/16}.$$

Nói chung, biểu thức của luật hợp thành là khá phức tạp.

2. *Phép nhân phải có tính chất kết hợp*: ta phải có

$$[g(a)g(b)]g(c) = g(a)[g(b)g(c)],$$

với mọi tập hợp giá trị a, b và c của các tham số. Từ đó, ta suy ra điều kiện sau đây cho hàm Φ :

$$\Phi[\Phi(a; b); c] = \Phi[a; \Phi(b; c)].$$

Có thể minh họa tính chất này với luật hợp thành Φ khá đơn giản trong trường hợp các nhóm SO(2) và SO(1.1).

3. Trong tập hợp các phép biến đổi đang xét, *phải tồn tại một phần tử e*, mà ta gọi là phần tử đơn vị, sao mà ta luôn luôn có

$$g(a)e = eg(a) = g(a),$$

với mọi tập hợp giá trị a của các tham số. Như thế, diễn theo luật hợp thành Φ, ta phải có một tập hợp giá trị $a_0 = \{a_0^g\}$ nào đó của các tham số sao mà

$$\Phi(a\,;\,a_0) = \Phi(a_0\,;\,a) = a, \quad (g(a_0^g) = e).$$

với mọi tập hợp giá trị a của các tham số.

Với các nhóm SO(2), SO(1, 1) và SU(2) các giá trị a_0 bằng 0. Nói chung, bằng cách đổi gốc tọa độ trong không gian tham số, ta có thể giả thiết rằng $a_0 = 0$.

4. Tương ứng với mọi phép biến đổi g(a) của tập hợp các phép biến đổi đang xét, luôn luôn *phải có tồn tại một phép biến đổi thuộc tập hợp, gọi là phép biến đổi nghịch đảo của $g(a)$* và ký hiệu là $g^{-1}(a)$, thỏa mãn điều kiện

$$g(a)\,g^{-1}(a) = g^{-1}(a)\,g(a) = e,$$

hay, diễn điều kiện trên theo hàm Φ, ta phải có điều kiện sau:

Với mọi tập hợp giá trị a của các tham số, luôn luôn phải tồn tại một tập hợp giá trị $\bar{a}$ nào đó của các tham số sao mà

$$\Phi(a\,;\,\bar{a}) = \Phi(\bar{a}\,;\,a) = a_0\,;$$

Từ điều kiện này (với một số suy luận nào đó để đảm bảo tính chặt chẽ), ta suy ra $\bar{a}$ là một hàm Ψ nào đó của a:

$$\bar{a} = \Psi(a)\,;$$

Chẳng hạn, với các nhóm SO(2) hay SO(1, 1) $(a_0 = 0)$ thì

$$\bar{a} = \Psi(a) = -a.$$

Nhóm Lie

Vì các tham số của các nhóm tôpô là những tham số thực, nên các hàm Φ và Ψ là những hàm thực. Mặt khác, dựa vào định nghĩa của các nhóm tôpô, trong đó tính liên tục của tích các phần tử của nhóm và tính liên tục của phần tử nghịch đảo phải được đảm bảo, ta thấy rằng với các nhóm tôpô thì các hàm Φ và Ψ phải là những hàm thực liên tục của các đối số.

Nếu ta đưa ra điều kiện chặt hơn, buộc các hàm Φ và Ψ là những hàm giải tích, tức là có đạo hàm mọi cấp theo tất cả các đối số, thì mọi nhóm tôpô có một số tham số hữu hạn thỏa mãn điều kiện giải tích này gọi là *nhóm Lie*. Tuy nhiên, người ta có thể chứng minh rằng mọi nhóm tôpô có số tham số hữu hạn thực tế đều là những nhóm Lie (bài tính Hilbert số V).

Nhóm Lie các phép biến đổi

Như thế, các nhóm GL(n, C), GL(n, R), SL(n, C), SL(n,R), U(n), U(p, q), SU(p,q), SU(n), SO(n, C), SO(n), SO(p, q), Sp(2n, C), Sp (2p, 2q), Sp(2n), đều là những nhóm Lie, vì đó là những nhóm tôpô có số tham số hữu hạn (xem § 1).

Các nhóm chuyển động trong các không gian Euclid hay giả Euclid (tích bán trực tiếp) bảo toàn dạng

$$g_{ik}(x^i - x_0^i)(x^k - x_0^k), \quad g_{ik} = \begin{pmatrix} I_p & O \\ O & -I_q \end{pmatrix}$$

đều là những nhóm Lie, vì các nhóm này là các nhóm liên tục và các phần tử của nhóm có thể viết dưới dạng

$$x^i = a^i_k x^k + b^i, \quad (i, k = 1,..., n),$$

trong đó số tham số a^i_k, b^i là hữu hạn.

Tương tự như thế, các nhóm biến đổi xạ ảnh, chẳng hạn nhóm biến đổi xạ ảnh trong không gian hai chiều gồm các phần tử có dạng

$$x'^1 = \frac{a^1_1 x^1 + a^1_2 x^2 + a^1}{a^3_1 x^1 + a^3_2 x^2 + a^3}, \quad x'^2 = \frac{a^2_1 x^1 + a^2_2 x^2 + a^2}{a^3_1 x^1 + a^3_2 x^2 + a^3},$$

cũng là những nhóm Lie với các tham số a^i_k, a^k $(i, k = 1, 2, 3)$.

§3. NHÓM LIE COMPĂC

Ta hãy xét hai tính chất tôpô quan trọng nhất của các nhóm tôpô. Đó là các tính chất compắc và tính chất liên thông. Trước hết, ta hãy nói đến tính chất compắc.

Nhóm compắc

Một không gian tôpô gọi là *compắc* nếu mọi không gian con gồm vô số phần tử của không gian đó đều chứa một dãy hội tụ tại một điểm nào đó của không gian đó.

Một nhóm tôpô gọi là *compắc* nếu không gian nhóm hay không gian tham số của nhóm là compắc. Vì theo định lý Boltzano-Weiertrass mọi tập hợp giới nội gồm vô số điểm của không gian Euclid đều chứa ít nhất một điểm giới hạn, nên mọi nhóm Lie mà không gian nhóm là một cảnh giới *kín và giới nội* của không gian Euclid đều là những nhóm compắc.

Tính compắc của U(n)

Như thế nhóm SO(2) mà không gian nhóm là một vòng tròn, tức là một cảnh giới kín và giới nội của không gian Euclid hai chiều, là một nhóm compắc. Tương tự như thế, nhóm SO(3) mà không gian nhóm là một quả cầu có bán kính giới nội (bằng π) của không gian Euclid ba chiều cũng là một nhóm compắc. Nói chung, ta hãy xét nhóm unita U(n). Mọi phần tử A của nhóm này thỏa mãn điều kiện

$$A^+A = AA = I_n,$$

hay

$$\sum_{i,k} |a_{ik}|^2 = 1, \quad A = \{a_{ik}\}.$$

Từ đó, ta được điều kiện cho các tham số (phần tử ma trận) của nhóm unita U(n):

$$|a_{ik}| \leqslant 1, \text{ với mọi } i, k = 1,..., n,$$

tức là không gian nhóm của nhóm U(n) là một không gian con giới nội của không gian Euclide. Tiếp theo, cho

$$A_k \in U(n), \quad k = 1, 2,...$$
$$A_k \to A \quad \text{khi} \quad k \to \infty.$$

Thế thì, từ các đẳng thức

$$A_k^+ A_k = A_k A_k^+ = I_n,$$

cho qua giới hạn $k \to \infty$, ta được các đẳng thức

$$A^+A = AA^+ = I_n,$$

tức là tập hợp các ma trận unita thuộc U(n) là một tập hợp kín: không gian nhóm là một không gian kín. Các kết quả nói trên chứng tỏ rằng nhóm unita U(n) là một nhóm compắc. Từ đó, tất cả các nhóm con của nhóm U(n), như các nhóm SU(n), SO(n), Sp(n) đều là những nhóm compắc.

Nhóm compắc địa phương

Trong số các nhóm không compắc, ta nêu ra những nhóm có tính chất khá gần tính chất compắc, gọi là những nhóm compắc địa phương (cục bộ): một nhóm gọi là *compắc địa phương* nếu mỗi điểm của không gian nhóm đều có một lân cận compắc nào đó. Do các nhóm Lie đều có một số hữu hạn tham số, các không gian nhóm là những không gian hữu hạn chiều, nên mọi điểm của không gian nhóm của các nhóm Lie đều có một lân cận compắc. Thành thử, tất cả các nhóm Lie đều hoặc compắc, hoặc compắc địa phương, và vấn đề compắc hay không quy về vấn đề không gian nhóm là giới nội hay không. Như thế, nhóm tịnh tiến trong không gian n chiều, và nhóm SO(1,1) có không gian nhóm không giới nội là $(-\infty, \infty)$, đều là những nhóm không compắc (compắc địa phương). Nói chung, các nhóm GL(n, C), GL(n, R), SL(n, C), SL(n, R), U(p, q), SU(p, q), SO(p, q), O(p, q), Sp(2p, 2q), Sp(2n, C), đều là những nhóm Lie không compắc (compắc địa phương)

Sự khác nhau giữa các nhóm compắc và không compắc biểu hiện một cách chủ yếu ở lý thuyết biểu diễn của các nhóm đó, như ta sẽ thấy sau này.

TÓM TẮT

Nhóm compắc địa phương	Nhóm compắc
GL(n, C), GL(n, R)	
SL(n, C), SL(n, R)	
U(p, q)	U(n)
SU(p, q)	SU(n)
O(n, C), SO(p, q), O(p, q)	SO(n)
Sp(2n, C), Sp(2p, 2q)	Sp(2n), $n = p + q$

§ 4. NHÓM LIE LIÊN THÔNG

Ví dụ

Một khái niệm tôpô quan trọng khác là khái niệm liên thông. Để được cụ thể, trước hết ta hãy lấy một ví dụ. Cho một không gian vectơ n chiều có mêtric g_{ik} và xét tập hợp tất cả các phép biến đổi A của không gian đó bảo toàn dạng toàn phương cơ bản $g_{ik}\, x^i x^k$ (với mọi $x = \{x^i\}$, viết dưới dạng ma trận cột). Theo định nghĩa của phép biến đổi A, ta có

$$g_{ik}x^i x^k = x^C g x = (Ax)^C g(Ax) = x^C(A^C g A)x,$$
$$g = \{g_{ik}\},$$

tức là ma trận A của các phép biến đổi nói trên phải thỏa mãn đẳng thức

$$A^C g A = g, \quad A = \{a_i^k\}. \tag{4-1}$$

Lấy định thức hai vế của (4-1), ta được

$$(\det A)^2 \det g = \det g, \ \det g \neq 0,$$

tức là

$$(\det A)^2 = 1, \ \det A = \pm 1.$$

Như thế ta có thể phân tập hợp các ma trận A làm hai loại, loại thứ nhất gồm tất cả các ma trận có định thức bằng 1, còn loại thứ hai gồm tất cả các ma trận có định thức bằng — 1. Rõ ràng không có một quá trình biến đổi *liên tục* nào cho phép biến một ma trận thuộc loại thứ nhất thành một ma trận thuộc loại thứ hai, và ngược lại, vì tập hợp hai giá trị 1 và — 1 của các định thức nói trên là một tập hợp gián đoạn (hay rời rạc). Ta nói rằng tập hợp các ma trận A là *không liên thông*.

Nhóm Lie liên thông

Một tập hợp gọi là *liên thông* nếu bằng một quá trình biến đổi liên tục nào đó, ta có thể biến một phần tử bất kỳ này thành một phần tử bất kỳ khác, nhưng không vượt ra ngoài tập hợp.

Nếu các phần tử của tập hợp đang xét được biểu diễn bằng những điểm của một không gian nào đó, thì khái niệm liên thông có thể diễn ra như sau :

Một tập hợp gọi là liên thông nếu hai điểm tùy ý nào của tập hợp cũng có thể nối với nhau bằng một đường cong liên tục hoàn toàn nằm trong không gian đó.

Một nhóm Lie gọi là *liên thông* nếu không gian nhóm là liên thông.

Tờ liên thông và thành phần đơn vị

Bây giờ cho một tập hợp không liên thông. Ta hãy phân tập hợp này thành nhiều phần, sao mà bất kỳ hai điểm thuộc cùng một phần đều có thể nối với nhau bằng một đường cong liên tục hoàn toàn nằm trong phần đó, và bất kỳ hai điểm nào không cùng thuộc một phần đều không có tính chất đó. Rõ ràng các phần khác nhau trong sự phân chia này là những tập hợp (con) liên thông, gọi là những *tờ liên thông* của tập hợp đã cho. Ta hãy minh họa điều này bằng một số ví dụ.

Nhóm trực giao O(3), gồm tất cả các phép biến đổi của không gian 3 chiều thông thường bảo toàn dạng toàn phương

$$(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2, \ (g_{ik} = \delta_{ik}, \ n = 3)$$

chia làm hai tờ, tờ liên thông thứ nhất gồm tất cả các phép quay thuần túy có định thức bằng 1. Tờ thứ hai gồm tất cả các phép biến đổi có định thức bằng — 1, các phần tử của tờ này là tích của một phép quay thuần túy và phép nghịch đảo không gian.

Nhóm Lorentz tổng quát, gồm tất cả các phép biến đổi bảo toàn dạng cơ bản

$$-(x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2 + (x^o)^2$$
$$x^o = ct,\ n = 4,$$

mêtric của không gian là mêtric Minkovski

$$g = \begin{bmatrix} -I_3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Từ đẳng thức (4-1) và từ đẳng thức suy từ đẳng thức này bằng một phép chuyển vị, với trường hợp cụ thể của mêtric Minkovxki nói trên, ta được

$$(a_0^o)^2 - \sum_{i=1}^{3}(a_i^o)^2 = 1,$$

$$(a_0^o)^2 - \sum_{i=1}^{3}(a_0^i)^2 = 1,\ (a_0^o)^2 \geqslant 1.$$

Từ đó, ta được các bất đẳng thức

$$a_0^o \geqslant 1,\ a_0^o \leqslant -1.$$

Tất nhiên không có một quá trình liên tục nào có thể biến giá trị $a_0^o \geqslant 1$ thành giá trị $a_0^o \leqslant -1$, và ngược lại. Thành thử, kết hợp kết quả này với các giá trị gián đoạn 1 hay -1 của detA, ta thấy rằng nhóm Lorentz tổng quát phân thành bốn tờ liên thông

$$L = L_+^{\uparrow} \cup L_+^{\downarrow} \cup L_-^{\uparrow} \cup L_-^{\downarrow},$$

với

$$L_+^{\uparrow} = \{A \text{ sao mà } \det A = 1 \text{ và } a_0^o \geqslant 1\},$$
$$L_+^{\downarrow} = \{A \text{ sao mà } \det A = 1 \text{ và } a_0^o \leqslant -1\},$$
$$L_-^{\uparrow} = \{A \text{ sao mà } \det A = -1 \text{ và } a_0^o \geqslant 1\},$$
$$L_-^{\downarrow} = \{A \text{ sao mà } \det A = -1 \text{ và } a_0^o \leqslant -1\}.$$

Vì

$$x'^o = a_0^o x^o + \dots$$

nên các giá trị dương của a_0^o trỏ thời gian không đổi chiều trong phép biến đổi, còn các giá trị âm của a_0^o trỏ thời gian đổi chiều. Thành thử, các phần tử thuộc các tờ $L_+^{\uparrow}$ và $L_-^{\uparrow}$ bảo toàn chiều thời gian, còn các phần tử thuộc các tờ $L_+^{\downarrow}$ và $L_-^{\downarrow}$ đổi chiều của thời gian.

Ta chú ý rằng trong số các tờ liên thông thu được khi phân chia nhóm chỉ có tờ liên thông chứa đơn vị — gọi là *thành phần đơn vị* — mới là nhóm con của nhóm đang xét. Các thành phần đơn vị của hai nhóm nói trên là SO(3) và $L_+^{\uparrow}$. Đối với nhóm Lorentz, ta chú ý rằng các tập hợp

$$L^{\uparrow} = L_+^{\uparrow} \cup L_-^{\uparrow},$$
$$L_+ = L_+^{\uparrow} \cup L_+^{\downarrow},$$
$$L_{+-}^{\uparrow\downarrow} = L_+^{\uparrow} \cup L_-^{\downarrow},$$

cũng là những nhóm con của nhóm Lorentz. Nhóm L_+ là một nhóm con bất biến có chỉ số bằng hai và nhóm thương L/L_+ gồm hai phần tử là L_+ và IL_+.

Các nhóm ma trận liên thông

Có thể chứng minh rằng các nhóm GL(n, C), SL(n, C), SL(n, R), U(p, q), U(n), SU(p, q), SO(p, q), SO(n, C), SO(n), Sp(2n, C), Sp(2p, 2q), Sp(2n) là liên thông.

Còn các nhóm GL(n, R), O(p, q) là không liên thông và gồm hai tờ liên thông.

Tập hợp m — liên thông

Ta có thể đi sâu hơn vào khái niệm liên thông. Cho một tập hợp nào đó. Hai đường cong kín của tập hợp đó có tính chất trùng với nhau bởi một quá trình biến dạng liên tục mà không vượt ra ngoài tập hợp gọi là *đồng luân* với nhau. Các đường cong kín đồng luân với nhau làm thành một họ đồng luân. Nếu trong tập hợp đang xét có m họ đường cong đồng luân khác nhau, thì tập hợp đó gọi là *m — liên thông*. Chẳng hạn mặt tròn là một tập 1 — liên thông, hay *đơn liên*, vì tập này chỉ có một họ đồng luân. Trái lại, mặt tròn thủng một lỗ là một tập 2 — liên thông, vì trong trường hợp này ta có hai họ đồng luân khác nhau. Họ thứ nhất gồm tất cả các đường cong kín bao quanh lỗ đó (đồng luân với nhau), còn họ thứ hai gồm tất cả các đường cong kín không bao quanh lỗ đó. Một đường cong thuộc loại thứ nhất không thể trùng với một đường cong thuộc loại thứ hai bằng một quá trình biến dạng liên tục. Mặt tròn có n lỗ thủng là một tập n + 1 — liên thông.

(Người ta có thể nghiên cứu tính liên thông của các không gian tôpô với một loại nhóm hữu hạn, gọi là *nhóm cơ bản*).

Ta nêu lên một vài ví dụ cụ thể để minh họa.

Tính 2 — liên thông của các nhóm SO(n)

Trước hết, ta xét không gian nhóm của nhóm SO(3). Ta biết rằng không gian này là một quả cầu bán kính bằng π, ở đó hai điểm đối tâm trên mặt cầu là đồng nhất như nhau. Tập hợp tất cả các đường cong kín không có điểm chung với mặt cầu đó, [illegible] xuất phát và kết thúc tại tâm chẳng hạn đều đồng luân với không, tức là co [illegible] hu về một điểm trùng với tâm quả cầu. Bây giờ ta xét những đường cong kín cắt mặt cầu tại một số điểm nào đó. Tất nhiên, trong trường hợp này, các điểm đối tâm phải xem như nhau. Có hai trường hợp:

1. Đường cong kín cắt mặt cầu tại một số lẻ điểm, chẳng hạn tại một điểm. Rõ ràng trong trường hợp này, ta có thể biến dạng đường cong kín đó một cách liên tục để nó trùng với một trục nào đó của quả cầu. Tất cả các đường cong này làm thành một họ đường đồng luân với nhau.

2. Đường cong kín cắt mặt cầu tại một số chẵn điểm, chẳng hạn tại hai điểm. Trong trường hợp này, ta có thể dời một cách liên tục các điểm đó sao cho chúng trùng với nhau (và, từ đó, các điểm đối tâm cũng trùng với nhau), và tập hợp các đường cong này sẽ tạo nên một họ đường cong đồng luân với nhau.

Hai họ đường cong nói trên là không đồng luân với nhau. Như thế, nhóm SO(3) là một nhóm 2 — liên thông. Có thể chứng minh rằng các nhóm SO(n), $n > 3$ cũng 2 — liên thông như nhóm SO(3).

Tính ∞ — liên thông của nhóm SO(2)

Riêng đối với nhóm SO(2), ta biết rằng không gian nhóm của nhóm này là một vòng tròn. Rõ ràng một đường cong kín nằm trên vòng tròn đó n lần không thể biến dạng liên tục để trở thành một đường cong kín khác nằm trên vòng đó $m \neq n$ lần. Như thế nhóm SO(2) là một nhóm ∞ — liên thông.

Nói chung, có thể chứng minh rằng:

Các nhóm SL(n, C), nhóm unita và symplectic đều đơn liên.

Các nhóm SO(n, C), SO(p, q) đều nhị liên (trừ trường hợp nhóm SO(2).

TÓM TẮT

Nhóm không liên thông	*Nhóm liên thông*		
	Đơn liên	*Nhị liên*	*∞ — liên*
GL(n, R), O(p, q).	SL(n, C), Nhóm unita, Nhóm sym- plectic	SO(n, C), SO(p, q),	SO(2)

§ 5. CÁC ĐỊNH LÝ SOPHUS LIE VỀ NHÓM LIE

Tính giải tích và tính đồng nhất của nhóm Lie

Để tiến hành nghiên cứu các nhóm Lie về mặt cấu trúc, trước hết ta chú ý đến hai điểm quan trọng sau.

1. Vì, theo định nghĩa, nhóm Lie có tính giải tích, nên ta có thể nghiên cứu các nhóm Lie một cách địa phương, nghĩa là có thể hạn chế ở các phép biến đổi vi phân, xét cấu trúc nhóm tại lân cận của mọi phân tử của nhóm.

2. Mặt khác, một nhóm đều có tính chất đồng nhất, nghĩa là với mọi cặp phần tử g_1, g_2 của nhóm, bao giờ chúng ta cũng có thể tìm được hai loại phép biến đổi gọi là phép *tịnh tiến phải* và *trái* thực hiện bởi các phân tử h và l để đưa g_1 đến trùng với g_2:

$$h = g_1^{-1}g_2 : g_1 \rightarrow g_1 h = g_2, \text{ (tịnh tiến phải)},$$

$$l = g_2 g_1^{-1} : g_1 \rightarrow l g_1 = g_2, \text{ (tịnh tiến trái)}.$$

Do đó, lân cận các phần tử khác nhau của nhóm Lie có thể biến thành nhau bởi các phép tịnh tiến phải hoặc trái. Như thế, không cần thiết phải nghiên cứu cấu trúc của các nhóm Lie tại mọi lân cận các phần tử của nhóm, mà chỉ cần xét tại lân cận một phần tử xác định nào đó của nhóm là đủ, chẳng hạn để đơn giản ta xét lân cận của phần tử đơn vị của nhóm. Tóm lại, để nghiên cứu cấu trúc các nhóm Lie, ta chỉ cần nghiên cứu cấu trúc địa phương của nhóm tại đơn vị. Theo phương hướng đó, như sẽ thấy ở gần cuối tiết này ta sẽ đi đến các định lý thuận về cấu trúc địa phương của nhóm Lie.

Tham số cốt yếu

Giả sử có một nhóm Lie các phép biến đổi, phụ thuộc vào r tham số $a = \{a^\sigma\}$, $(\sigma = 1, \dots, r)$:

$$x \to x' = f(x; a), \ x = (x^1, \dots, x^n). \tag{5-1}$$

Các tham số a gọi là cốt yếu, nếu không thể tìm được r—1 hàm độc lập của $a : \alpha^1, \dots, \alpha^{r-1}$ sao mà các đồng nhất thức có dạng

$$f^i(x^1, \dots, x^n; a^1, \dots, a^r) = F^i(x^1, \dots, x^n; \alpha^1, \dots, \alpha^{r-1})$$

được thỏa mãn. Vì các lượng α^ρ là những hàm độc lập của các lượng a^σ, nên hạng của ma trận $D\alpha/Da$ không quá $r - 1$. Do đó, có tồn tại một hệ r hàm không đồng nhất bằng không $c^\sigma(a)$ của các tham số a thỏa mãn các đẳng thức

$$c^\sigma(a) \frac{\partial \alpha^\rho}{\partial a^\sigma} = 0 \ (\sigma = 1, \dots, r; \ \rho = 1, \dots, r - 1).$$

Như thế, mọi hàm $h(\alpha)$ của các lượng đó đều thỏa mãn phương trình

$$c^\sigma \frac{\partial h}{\partial a^\sigma} = c^\sigma \frac{\partial h}{\partial \alpha^\rho} \frac{\partial \alpha^\rho}{\partial a^\sigma} = 0. \tag{5-2}$$

Vì phương trình này chỉ liên quan đến các hàm của α (các lượng $c^\sigma(a)$ trong phương trình không chứa biến số x), nên các hàm F^i — xem là những hàm của α — và, từ đó, các hàm f^i đều thỏa mãn phương trình (5-2). Đó là kết quả của giả thiết a là không cốt yếu.

Ngược lại, nếu có phương trình (5-2) thì sẽ tồn tại r — 1 nghiệm độc lập với nhau $\alpha^1, \dots, \alpha^{r-1}$, và là những hàm của a. Mọi nghiệm của phương trình (5-2) sẽ là những hàm của các nghiệm α đó. Thành thử, nếu các hàm f^i thỏa mãn phương trình (5-2) thì các hàm đó sẽ là những hàm của x và đồng thời của các lượng α, một điều mâu thuẫn với giả thiết các tham số a là cốt yếu. Tóm lại, điều kiện cần và đủ để các tham số a là cốt yếu là các hàm f^i không thỏa mãn bất kỳ phương trình nào có dạng (5-2) trong đó c^σ không đồng nhất bằng không.

Các hằng số cấu trúc

Bây giờ ta trở lại nhóm các phép biến đổi (5-1) với giả thiết các tham số a là cốt yếu. Trong không gian ở đó nhóm các phép biến đổi tác dụng, ta hãy chọn hai điểm x_0 và x nào đó. Ta có thể đi từ điểm x_0 đến điểm x + dx bằng hai cách, hoặc

$$x_0 \to x + dx = f(x; \delta a), \tag{5-3}$$

hoặc

$$x_0 \to x + dx = f(x_0; a + da), \tag{5-4}$$

với các giá trị a được xác định theo phương trình

$$x = f(x_0; a). \tag{5-5}$$

Như thế, từ (5-3), (5-4) và (5-5) ta có

$$f[f(x_0; a); \delta a] = f(x_0; a + da),$$

Do đó, theo tiên đề 1 § 2, luật hợp thành Φ của nhóm Lie đang xét là

$$\Phi(a; \delta a) = a + da, \ (\Phi(a; 0) = a), \tag{5-6}$$

Từ đẳng thức này, ta được

$$da^{\rho} = \mu^{\rho}_{\tau}(a)\,\delta a^{\tau}, \tag{5-7}$$

với

$$\mu^{\rho}_{\tau}(a) = \frac{\partial \Phi^{\rho}(a\,;b)}{\partial b^{\tau}}\Big|_{b=0}.$$

Định thức $|\mu^{\rho}_{\tau}(a)|$ là khác không. Vì nếu trái lại thì hóa ra từ đẳng thức (5-7) ta sẽ tìm được một hệ δa^{τ} không bằng không sao mà $da^{\rho} = 0$, một điều vô lý, vì các hệ $\delta a^{\tau} = 0$ và $da^{\rho} = 0$ đều cùng tương ứng với phép biến đổi đơn vị. Vì lý do đó, từ (5-7) ta có thể viết

$$\delta a^{\sigma} = \lambda^{\sigma}_{\rho}(a)\,da^{\rho}, \tag{5-8}$$

trong đó $\lambda^{\sigma}_{\rho}(a)$ là ma trận ngược của ma trận $\mu^{\rho}_{\tau}(a)$, tức là

$$\lambda^{\sigma}_{\rho}(a)\,\mu^{\rho}_{\tau}(a) = \delta^{\sigma}_{\tau}. \tag{5-9}$$

Nhưng từ phép biến đổi (5-3) ta lại có

$$dx^{i} = u^{i}_{\sigma}(x)\,\delta a^{\sigma} \tag{5-10}$$

với

$$u^{i}_{\sigma}(x) = \frac{\partial f^{i}}{\partial a^{\sigma}}\Big|_{a=0}\ . \tag{5-11}$$

Thay các giá trị (5-8) của δa^{σ} vào vế trái của (5-10), ta được các phương trình

$$dx^{i} = u^{i}_{\sigma}(x)\,\lambda^{\sigma}_{\rho}(a)\,da^{\rho}, \tag{5-12}$$

hay

$$\frac{\partial x^{i}}{\partial a^{\rho}} = u^{i}_{\sigma}(x)\,\lambda^{\sigma}_{\rho}(a)\,. \tag{5-13}$$

Điều kiện khả tích

$$\frac{\partial^2 x^{i}}{\partial a^{\rho}\,\partial a^{\sigma}} = \frac{\partial^2 x^{i}}{\partial a^{\sigma}\,\partial a^{\rho}}$$

của hệ phương trình (5-13) lại cho các hệ thức

$$\left[u^{j}_{\chi}\frac{\partial u^{i}_{\nu}}{\partial x^{j}} - u^{j}_{\nu}\frac{\partial u^{i}_{\chi}}{\partial x^{j}}\right]\lambda^{\chi}_{\rho}\,\lambda^{\nu}_{\sigma} + u^{i}_{\tau}\left[\frac{\partial \lambda^{\tau}_{\sigma}}{\partial a^{\rho}} - \frac{\partial \lambda^{\tau}_{\rho}}{\partial a^{\sigma}}\right] = 0 \tag{5-14}$$

Nhân hai vế của (5-14) với $\mu^{\rho}_{\chi}\,.\,\mu^{\sigma}_{\nu}$, và chú ý đến (5-9), ta được

$$u^{j}_{\chi}\frac{\partial u^{i}_{\nu}}{\partial x^{j}} - u^{j}_{\nu}\frac{\partial u^{i}_{\chi}}{\partial x^{j}} = C^{\tau}_{\chi\nu}(a)\,u^{i}_{\tau}(x)\,, \tag{5-15}$$

với

$$C^{\tau}_{\chi\nu}(a) = \left[\frac{\partial \lambda^{\tau}_{\rho}}{\partial a^{\sigma}} - \frac{\partial \lambda^{\tau}_{\sigma}}{\partial a^{\rho}}\right]\mu^{\rho}_{\chi}\,\mu^{\sigma}_{\nu}\ . \tag{5-16}$$

là những lượng phản xứng theo các chỉ số χ và ν :

$$C^{\tau}_{\nu\chi} = - C^{\tau}_{\chi\nu} . \tag{5-17}$$

Tiếp theo, vì vế trái của (5-15) không phụ thuộc vào a, nên vế phải của (5-15) cũng không phụ thuộc vào a, tức là ta có

$$\frac{\partial C^{\tau}_{\chi\nu}(a)}{\partial a^{\rho}} u^{i}_{\tau}(x) = 0.$$

Nhưng vì các tham số a là cốt yếu, nên theo (5-2) và (5-11), ta phải có

$$\frac{\partial C^{\tau}_{\chi\nu}}{\partial a^{\rho}} = 0 ,$$

một điều chứng tỏ rằng các lượng $C^{\tau}_{\chi\nu}$ là những hằng số. Các hằng số này gọi là *hằng số cấu trúc* của nhóm Lie đang xét. Các hằng số cấu trúc chiếm vị trí cơ bản trong lý thuyết các nhóm Lie.

Từ (5-16) và (5-11) ta có thể suy ra các hệ thức sau

$$\frac{\partial \lambda^{\tau}_{\rho}}{\partial a^{\sigma}} - \frac{\partial \lambda^{\tau}_{\sigma}}{\partial a^{\rho}} = C^{\tau}_{\chi\nu} \lambda^{\chi}_{\rho} \lambda^{\nu}_{\sigma} . \tag{5-18}$$

Vi tử

Bây giờ cho F (x) là một hàm nào đó của x. Khi có một phép biến đổi vi phân $x \to x + dx$ thì, theo (5-10), hàm F (x) chịu một phép biến đổi cảm ứng có dạng

$$F(x) \to F(x) + dF ,$$

với

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x^{i}} dx^{i} = \frac{\partial F}{\partial x^{i}} u^{i}_{\sigma} \delta a^{\sigma} = \delta a^{\sigma} X_{\sigma} F, \tag{5-19}$$

$$X_{\sigma} = u^{i}_{\sigma} \frac{\partial}{\partial x^{i}} , \ (\sigma = 1 ,..., r) \tag{5-20}$$

Các lượng X_{σ} gọi là những *vi tử* của nhóm Lie đang xét. Tất nhiên, theo định nghĩa, số vi tử bằng số tham số cốt yếu của nhóm. Ta hãy lập các móc Lie cho các vi tử X_{σ} . Theo (5-15) và (5-20), ta có

$$[X_{\chi}, X_{\nu}] = X_{\chi} X_{\nu} - X_{\nu} X_{\chi} = \left[u^{j}_{\chi} \frac{\partial}{\partial x^{j}}\right] \left[u^{i}_{\nu} \frac{\partial}{\partial x^{i}}\right] - \left[u^{i}_{\nu} \frac{\partial}{\partial x^{i}}\right] \times$$

$$\times \left[u^{j}_{\chi} \frac{\partial}{\partial x^{j}}\right] = u^{j}_{\chi} \frac{\partial u^{i}_{\nu}}{\partial x^{j}} \frac{\partial}{\partial x^{i}} - u^{j}_{\nu} \frac{\partial u^{i}_{\chi}}{\partial x^{j}} \frac{\partial}{\partial x^{i}} = C^{\tau}_{\chi\nu} u^{i}_{\tau} \frac{\partial}{\partial x^{i}} ,$$

tức là

$$[X_{\chi}, X_{\nu}] = C^{\tau}_{\chi\nu} X_{\tau} . \tag{5-21}$$

Hệ thức hết sức quan trọng này nêu lên mối quan hệ giữa các hằng số cấu trúc của nhóm Lie và các vi tử của nó.

Tiếp theo dựa vào đồng nhất thức Jacobi

$$[[X_\chi, X_\nu], X_\sigma] + [[X_\nu, X_\sigma], X_\chi] + [[X_\sigma, X_\chi], X_\nu] = 0$$

mà bạn đọc có thể thử lại một cách khá dễ dàng, từ (5-21), ta có thể suy ra các hệ thức sau

$$C^{\lambda}_{\rho\sigma} C^{\mu}_{\lambda\tau} + C^{\lambda}_{\sigma\tau} C^{\mu}_{\lambda\rho} + C^{\lambda}_{\tau\rho} C^{\mu}_{\lambda\sigma} = 0 \qquad (5\text{-}22)$$

cho các hằng số cấu trúc

Các định lý Sophus Lie thuận

Những kết quả thu được ở trên cho phép phát biểu: *Nếu có một nhóm Lie các phép biến đổi (5-1) thì các hàm x^i sẽ thỏa mãn hệ phương trình (5-13), trong đó các hàm $u^i_\sigma(x)$ thỏa mãn các hệ thức (5-15) và các hàm $\lambda^\tau_\sigma(a)$ thỏa mãn các hệ thức (5-18), còn các hằng số cấu trúc $C^\lambda_{\rho\tau}$ có mặt trong các hệ thức đó thỏa mãn điều kiện phản xứng (5-17) và điều kiện (5-22) (cũng thường gọi là đồng nhất thức Jacobi cho các hằng số cấu trúc).*

Các định lý Sophus Lie đảo

Có thể giải bài toán ngược lại. Sophus Lie đã đi đến các kết quả sau:

1. Nếu có những hàm $x^i(x_0; a) = f^i(x_0; a)$ thỏa mãn các phương trình (5-13) thì các hàm đó sẽ xác định một nhóm Lie các phép biến đổi trong một không gian n chiều nào đó.

2. Nếu có những hàm $u^i_\sigma(x)$ thỏa mãn các phương trình (5-15) thì sẽ tồn tại những hàm $\lambda^\tau_\sigma(a)$ nào đó thỏa mãn các phương trình (5-18) sao cho các phương trình (5-13) là khả tích.

3. Nếu có một hệ thống hằng số $C^\lambda_{\rho\sigma}$ thỏa mãn điều kiện phản xứng (5-17) và đồng nhất thức Jacobi (5-22) thì sẽ tồn tại những hàm $u^i_\sigma(x)$ nào đó thỏa mãn các phương trình (5-15).

Ba điểm này thường gọi là các định lý của Sophus Lie đảo cơ bản. Như thế, theo các định lý Sophus Lie đảo, nếu đi từ dưới lên trên, ta thấy rằng nếu có một hệ $r^2(r-1)/2$ hằng số $C^\lambda_{\rho\sigma}$ thỏa mãn các điều kiện phản xứng và đồng nhất thức Jacobi thì sẽ tồn tại những hàm $u^i_\sigma(x)$ thỏa mãn các phương trình (5-15), từ đó sẽ tồn tại những hàm $\lambda^\tau_\sigma(a)$ thỏa mãn các phương trình (5-18) sao cho các phương trình (5-13) là khả tích, và cuối cùng các nghiệm thu được của phương trình này sẽ xác định một nhóm Lie các phép biến đổi liên tục trong một không gian tuyến tính n chiều nào đó. Nói cách khác, mọi hệ hằng số thỏa mãn điều kiện phản xứng và đồng nhất thức Jacobi đều xác định một nhóm Lie các phép biến đổi liên tục nào đó, nhận hệ hằng số đó làm hằng số cấu trúc của mình.

Các vi tử dạng khác của phép biến đổi liên tục tuyến tính

Ta chú ý rằng các phép biến đổi đề cập đến trong các định lý Lie (thuận và đảo) là những phép biến đổi liên tục có thể tuyến tính hay phi tuyến tính.

Trong trường hợp đặc biệt nhóm gồm các phép biến đổi tuyến tính thực hiện bởi các ma trận g^i_k

$$x^i_o \to x^i = f(x_o\,;\,a) = g^i_k\,(a)\,x^k_o\ (i = 1,\dots,n)\,;\,a = \{a^\sigma\},$$

$$(\sigma = 1,\dots,r), \tag{5-23}$$

thì, theo (5-11), các hàm $u^i_\sigma\,(x)$ sẽ có dạng

$$u^i_\sigma\,(x) = \frac{\partial f^i}{\partial a^\sigma}\Big|_{a=0} = \frac{\partial g^i_k}{\partial a^\sigma}\Big|_{a=0}\,x^k_o\,,$$

hay

$$u^i_\sigma\,(x) = (I_\sigma)^i_k\,x^k_o\,,$$

với

$$(I_\sigma)^i_k = \frac{\partial g^i_k}{\partial a^\sigma}\Big|_{a=0}\,,\ I_\sigma = \frac{\partial g\,(a)}{\partial a^\sigma}\Big|_{a=0} \tag{5-24}$$

Trong trường hợp này, các hệ thức (5-15) có dạng

$$[(I_\rho)^j_k\,(I_\sigma)^k_l - (I_\sigma)^j_k\,(I_\rho)^k_l]\,x^l_o = -\,C^\tau_{\rho\sigma}\,(I_\tau)^j_l\,x^l_o\,.$$

Từ đó, đặt

$$J_\tau = -\,I_\tau \tag{5-26}$$

và lưu ý rằng x_o là một điểm tùy ý, ta được các hệ thức sau

$$[J_\rho\,,\,J_\sigma] = C^\tau_{\rho\sigma}\,J_\tau\,, \tag{5-26}$$

Như thế, các lượng J_σ cũng thỏa mãn các hệ thức giao hoán giống như các hệ thức (5-21) cho các vi tử X_σ. Vì lý do đó, các lượng J_σ và, từ đó, các lượng I_σ cũng gọi là các vi tử của nhóm các phép biến đổi liên tục tuyến tính.

Ma trận mũ

Giả sử A là một ma trận cấp n. Ta đặt

$$e^A = I_n + A + \frac{A^2}{2!} + \dots + \frac{A^p}{p!} + \dots \tag{5-27}$$

Ma trận e^A gọi là *ma trận mũ*, ta có các tính chất sau.

1. Chuỗi (5-27) luôn luôn hội tụ

Quả vậy, vì ma trận A có cấp hữu hạn nên luôn luôn có một số m dương sao cho

$$|a_{ik}| \leqslant m,$$

với a_{ik} là các phần tử của ma trận A. Tiếp theo, nếu đặt

$$A^p = \{a^{(p)}_{ik}\}\,,$$

ta sẽ có

$$|a_{ik}^{(p)}| \leqslant (mn)^{(p)}. \tag{5-28}$$

Quả vậy, bất đẳng thức (5-28) đã đúng cho p thì nó sẽ đúng cho p+1 vì

$$|a_{ik}^{(p+1)}| = |a_{ij}^{(p)} a_{jk}| \leqslant (mn)^{(p)} \left|\sum a_{jk}\right| = (mn)^{(p)}(mn),$$

$$|a_{ik}^{(p+1)}| \leqslant (mn)^{(p+1)}.$$

Nhưng theo giả thiết về số m, bất đẳng thức (5-28) đúng khi $p = 1$. Thành thử, (5-28) đúng với mọi p. Từ đó, chuỗi (5-27) là hội tụ.

Khi ma trận A có cấp vô hạn, vấn đề hội tụ của chuỗi (5-27) là khá phức tạp.

2. *Nếu A và B là hai ma trận giao hoán với nhau thì*

$$e^{A+B} = e^A e^B, \quad (AB = BA) \tag{5-29}$$

Quả vậy, số hạng thứ p của vế trái tức là của $\sum_{p=0}^{\infty} (A+B)^p/p!$ gồm tất cả các số hạng có dạng $A^h B^k / h!\,k!$ với $h + k = p$. Nhưng các số hạng này lại chính là các số hạng của vế phải của (5-29), từ đó đẳng thức (5-29) đúng.

3. $$e^{PAP^{-1}} = Pe^A P^{-1} \tag{5-30}$$

Quả vậy, ta có

$$e^{PAP^{-1}} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(PAP^{-1})^r}{r!} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{PA^rP^{-1}}{r!} =$$

$$= P\left(\sum_{r=0}^{\infty} \frac{A^r}{r!}\right) P^{-1} = Pe^A P^{-1}.$$

4. Nếu $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ là các giá trị riêng của A thì các trị riêng của e^A là $e^{\lambda_1}, \ldots, e^{\lambda_n}$.

Ta sẽ chứng minh tính chất này bằng phương pháp truy toán. Tính chất này dĩ nhiên đúng cho $n = 1$. Bây giờ giả sử nó đúng cho $n - 1$. Gọi $\mathbf{v}$ là vectơ riêng của A ứng với trị riêng λ_1: $A\mathbf{v} = \lambda_1 \mathbf{v}$. Chọn $\mathbf{v}$ làm vectơ cơ sở đầu tiên của cơ sở mới và giả sử S là ma trận chuyển sang cơ sở mới đó, ta có

$$SAS^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & * & \ldots & * \\ 0 & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & \boxed{A_1} & \\ \cdot & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

Thế thì, ta có

$$(SAS^{-1})^r = \begin{bmatrix} \lambda_1^r & * & \dots & * \\ 0 & & & \\ \cdot & & \boxed{A_1^r} & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

Thành thử

$$e^{SAS^{-1}} = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & * & \dots & * \\ 0 & & & \\ \cdot & & \boxed{e^{A_1}} & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

Theo giả thiết, e^{A_1} có các trị riêng $e^{\lambda_2},\dots, e^{\lambda_n}$. Thành thử $e^{SAS^{-1}}$ và, do đó, theo tính chất 3), e^A có các trị riêng $e^{\lambda_1},\dots, e^{\lambda_n}$.

5. $\det e^A = e^{SpA}$

Quả vậy định thức của e^A là $e^{\lambda_1}\dots e^{\lambda_n} = e^{\lambda_1+\dots+\lambda_n} = e^{SpA}$. Thành thử nếu $\det e^A = 1$ thì $SpA = 0$ và ngược lại.

6. $e^{A^*} = (e^A)^*,\ e^{A^C} = (e^A)^C,\ e^{A^+} = (e^A)^+,\ e^{-A} = (e^A)^{-1}$ (5-31)

Quả vậy vì

$$(A^p)^* = (A^*)^p \text{ và } (A^p)^C = (A^C)^p,$$

nên ta có ngay ba đẳng thức đầu. Đẳng thức cuối cùng suy từ tính chất 2.

Biểu diễn phần tử của nhóm theo các vi tử

Trong trường hợp các nhóm biến đổi tuyến tính (nhóm ma trận), các vi tử hoàn toàn xác định các phần tử của nhóm. Quả vậy, theo định nghĩa (5-21), ta có thể viết

$$\exp a^\sigma I_\sigma = e + a^\sigma I_\sigma + (a^\sigma I_\sigma)^2/2! + \dots + (a^\sigma I_\sigma)^n/n! + \dots$$

Chuỗi trên là hội tụ. Từ biểu thức trên, ta được ngay

$$\left.\frac{d(\exp a^\sigma I_\sigma)}{da^\rho}\right|_{a=0} = I_\rho. \tag{5-32}$$

Đối chiếu các đẳng thức (5-24) và (5-32) và dựa vào định lý về tính duy nhất của nghiệm của các phương trình vi phân, ta có thể suy ra biểu thức sau của các phần tử của nhóm

$$g(a) = \exp a^\sigma I_\sigma, \tag{5-33}$$

hay nếu đặt $F_\sigma = -iI_\sigma$, ta được

$$g(a) = \exp ia^\sigma F_\sigma. \tag{5-34}$$

Từ đó, theo tính chất 5), ta được các quan hệ sau :

Phần tử g	Vi tử I_σ	Vi tử F_σ	
Unita	Phản hecmitic	Hecmitic	(5-36)
Đơn môđula	Có vết bằng 0	Có vết bằng 0	

§ 6. VÍ DỤ

Nhóm tịnh tiến trong không gian n chiều

Phần tử của nhóm g : $x \rightarrow x' = x + a$.

Tham số của nhóm : $a = \{a^i\}$, $(i = 1, 2, \dots, n)$.

Đơn vị của nhóm : $a_0 = 0$

Phép biến đổi vi phân : $x^i \rightarrow x'^i = x^i + \delta a^i$,

$$dx^i = x'^i - x^i = \delta a^i.$$

Theo công thức (5-10), ta có $u^i_\sigma(x) = \delta^i_\sigma$, và công thức (5-20) cho các vi tử

$$X_i = \frac{\partial}{\partial x^i}, \qquad (i = 1, 2, \dots, n). \tag{6-1}$$

Từ đó, ta được các móc Lie

$$[X_i, X_k] = 0, \tag{6-2}$$

Thành thử theo 5-21), ta có

$$C^\tau_{\rho\sigma} = 0, \tag{6-3}$$

nghĩa là đối với các nhóm tịnh tiến các hằng số cấu trúc đều bằng 0.

Nhóm SO (2)

Phần tử của nhóm : $x'^1 = x^1 \cos\varphi - x^2 \sin\varphi$,

$$x'^2 = x^1 \sin\varphi + x^2 \cos\varphi.$$

Tham số của nhóm : φ.

Đơn vị của nhóm : $\varphi_0 = 0$.

Phép biến đổi vi phân

$$x'^1 = x^1 - x^2\delta\varphi, \quad x'^2 = x^1\delta\varphi + x^2,$$
$$dx^1 = -x^2\delta\varphi, \quad dx^2 = x^1\delta\varphi.$$

Từ đó, theo (5-20) ta được

$$X = x^1 \frac{\partial}{\partial x^2} - x^2 \frac{\partial}{\partial x^1}. \tag{6-4}$$

Nhóm chuyển động trong mặt phẳng : $R^2_M = R^2 \otimes SO(2)$

Phối hợp hai kết quả trên, ta được ngay các vi tử

$$\varphi \rightarrow X_1 = x^1 \frac{\partial}{\partial x^2} - x^2 \frac{\partial}{\partial x^1}, \quad a^1 \rightarrow X_2 = \frac{\partial}{\partial x^1},$$

$$a^2 \rightarrow X_3 = \frac{\partial}{\partial x^2}. \tag{6-5}$$

Từ đó, các phép tính đạo hàm thông thường cho các hằng số cấu trúc

$$C_{31}^{2} = - C_{13}^{2} = 1,\ C_{12}^{3} = - C_{21}^{3} = 1,$$

tất cả các hằng số cấu trúc khác đều bằng không.

Nhóm g — trực giao n chiều

Bây giờ ta xét nhóm các phép biến đổi tuyến tính bảo toàn dạng toàn phương cơ bản $g_{ik} x^i x^k$ của một không gian n chiều nào đó. Ký hiệu A là ma trận của phép biến đổi tuyến tính đó, ta đặt

$$A = I_n + \varepsilon B,\ \varepsilon \ll 1, \tag{6-6}$$

thì, từ đẳng thức (4-1), ta có

$$(I_n + \varepsilon B^C)\, g(I_n + \varepsilon B) = g,\ B^C g + gB = 0,$$

Nói riêng, nếu $g = I_n$, tức là nếu xét trường hợp đặc biệt nhóm trực giao SO(n) trong không gian Euclid n chiều, ta thấy toán tử vi phân B phải là phản xứng: $B^C = - B$.

Như thế, ta có thể đặt

$$\varepsilon B = \{\delta a^{ij}\},\ \delta a^{ij} = - \delta a^{ji}. \tag{6-7}$$

Tiếp theo, từ đẳng thức $dx = \varepsilon Bx$ suy từ $x' = Ax$ và (6-6), ta được

$$dx^i = x^j \delta a^{ij} = x^j \delta^{ik} \delta a^{kj}. \tag{6-8}$$

Nhưng, theo (5-10), ta có

$$dx^i = u^i_{kj}\, \delta a^{kj},$$

trong đó, do tính chất phản xứng của ma trận δa^{kj}, ta có thể giả thiết

$$u^i_{jk} = - u^i_{kj}\ .$$

Thành thử, so sánh hai biểu thức của dx^i và lưu ý đến tính chất phản xứng đó, a được

$$u^i_{kj} = - u^i_{jk} = x^j \delta^{ik},$$

hay

$$u^i_{ij} = - u^i_{ji} = x^j,\ u^i_{jk} = 0 \text{ khi } i \neq j \tag{6-9}$$

Như thế, theo (6-9) và (5-20), các vi tử của nhóm SO (n) có dạng

$$X_{jk} = u^i_{jk} \frac{\partial}{\partial x^i} = u^j_{jk} \frac{\partial}{\partial x^j} + u^k_{jk} \frac{\partial}{\partial x^k} =$$

$$= x^k \frac{\partial}{\partial x^j} - x^j \frac{\partial}{\partial x^k}$$

hay

$$X_{kj} = - X_{jk} = x^j \frac{\partial}{\partial x^k} - x^k \frac{\partial}{\partial x^j}\ . \tag{6-10}$$

Tiếp theo dựa vào biểu thức (6-10) và đẳng thức

$$\frac{\partial}{\partial x^j}(x^k) = \delta_i^k ,$$

ta có thể tính được các hệ thức giao hoán của nhóm đang xét

$$[X_{ik}, X_{lm}] = \delta_{mk} X_{li} + \delta_{li} X_{mk} - \delta_{mi} X_{lk} - \delta_{lk} X_{mi}. \qquad (6\text{-}11)$$

Tương tự như thế, trong trường hợp chung với mêtric $g_{\mu\nu}$ ta có

$$[X_{\mu\nu}, X_{\rho\sigma}] = g_{\sigma\nu} X_{\rho\mu} + g_{\rho\mu} X_{\sigma\nu} - g_{\sigma\mu} X_{\rho\nu} - g_{\rho\nu} X_{\sigma\mu}. \qquad (6\text{-}12)$$

Thông thường, người ta hay thay các vi tử X_{jk} nói trên bằng các vi tử hecmitic

$$X_{jk} \to iX_{jk} \; (i = \sqrt{-1}).$$

Như thế, các công thức (6-11), (6-12) biến thành

$$[X_{ik}, X_{lm}] = i(-\delta_{mk} X_{li} - \delta_{li} X_{mk} + \delta_{mi} X_{lk} + \delta_{lk} X_{mi}), \qquad (6\text{-}13)$$

$$[X_{\mu\nu}, X_{\rho\sigma}] = i(-g_{\sigma\nu} X_{\rho\mu} - g_{\rho\mu} X_{\sigma\nu} + g_{\sigma\mu} X_{\rho\nu} + g_{\rho\nu} X_{\sigma\mu}). \qquad (6\text{-}14)$$

Nhóm SO (3)

Từ (6-11), với

$$X_1 = X_{23}, \; X_2 = X_{31}, \; X_3 = X_{12},$$

và ε_{ijk} là tenxơ hạng ba hoàn toàn phản xứng ($\varepsilon_{123} = 1$), ta được

$$[X_i, X_j] = -\varepsilon_{ijk} X_k, \qquad (6\text{-}15)$$

hay (dùng vi tử hecmitic)

$$[X_i, X_j] = i\,\varepsilon_{ijk} X_k. \qquad (6\text{-}16)$$

Có thể tìm lại các kết quả tương tự như (6-16) theo công thức (5-24), chú ý rằng ($a = (a^1, a^2, a^3)$) là tham số)

$$I_1 = \frac{\partial}{\partial a^1}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos a^1 & -\sin a^1 \\ 0 & \sin a^1 & \cos a^1 \end{bmatrix}_{a=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = E_{32} - E_{23}$$

$$I_2 = E_{13} - E_{31}, \; I_3 = E_{21} - E_{12},$$

$$E_{ij} E_{kl} = \delta_{jk} E_{il}. \qquad (6\text{-}17)$$

trong đó E_{ik} là ma trận mà chỉ có phần tử ở hàng i cột k là bằng đơn vị, còn các phần tử khác đều bằng không, như đã thấy ở chương II.

Nhóm SU (2)

Phần tử của nhóm:

$$\frac{(1 - a^2/4) + i\sigma\mathbf{a}}{1 + a^2/4}.$$

Tham số của nhóm: $\mathbf{a}$.

Đơn vị của nhóm: $\mathbf{a}_0 = 0$.

Phép biến đổi vi phân:

$$1 + i\sigma\delta\mathbf{a} = 1 + i(\sigma_1\delta a^1 + \sigma_2\delta a^2 + \sigma_3\delta a^3).$$

Từ đó ta được

$$I_1 = i\sigma_1 \quad , \quad I_2 = i\sigma_2 \quad , \quad I_3 = i\sigma_3,$$

và

$$[I_i, I_j] = -2\varepsilon_{ijk} I_k,$$

hay thực hiện phép thay thế $I_j \to J_j = -iI_j/2$ ta được các hệ thức giao hoán

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k. \tag{6-18}$$

Ta đặc biệt lưu ý rằng các hệ thức giao hoán (6-18) của các vi tử của nhóm SU(2) là giống hoàn toàn với các hệ thức giao hoán (6-16) của các vi tử của nhóm SO(3).

Hai nhóm SO(3) và SU(2) có các hệ thức giao hoán giống nhau, tức là có cấu trúc nhóm tại lân cận của đơn vị như nhau. Nhưng do tính đồng nhất của nhóm, hai nhóm trên có cấu trúc địa phương tại mọi phần tử như nhau. Ta gọi các nhóm đó là *đẳng cấu địa phương với nhau* Khái niệm đẳng cấu địa phương là một sự mở rộng của khái niệm đẳng cấu, và chỉ xuất hiện với các nhóm Lie.

Nhóm SU(3)

Như đã biết, đó là nhóm các phép biến đổi tuyến tính làm bất biến dạng hecmitic

$$z^1z^{1*} + z^2z^{2*} + z^3z^{3*}.$$

Theo nhận xét ở cuối § 5, ta thấy rằng các vi tử F của nhóm SU(3) là những ma trận cấp ba hecmitic và có vết bằng không. Có tất cả 8 ma trận có các tính chất đó và độc lập tuyến tính với nhau. Ta có thể chọn các ma trận đó như sau :

$$F_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad F_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$F_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad F_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$F_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad F_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$F_7 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \qquad F_8 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}. \tag{6-19}$$

Các phép tính ma trận thông thường cho các hệ thức giao hoán

$$[F_i, F_j] = 2if_{ijk} F_k, \tag{6-20}$$

với các hằng số cấu trúc f_{ijk} là hoàn toàn phản xứng đối với tất cả các chỉ số. Các hằng số khác không và độc lập là

$$f_{123} = 1,\ f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{516} = f_{367} = 1/2.$$

Nhóm SU (6)

Tương tự như trên, các vi tử của nhóm SU (6) là những ma trận cấp 6, hecmitic và có vết bằng không. Có tất cả là $5 \times 7 = 35$ ma trận như thế (xem § 1). Các vi tử của nhóm SU (6) có thể chọn là

$$i\sigma_j \otimes I_3 \ , \quad (j = 1, 2, 3) \ : \ 3 \text{ vi tử},$$

$$I_2 \otimes F_\sigma \ , \quad (\sigma = 1, \ldots, 8) \ : \ 8 \text{ vi tử}.$$

và

$i\sigma_j \otimes F_\sigma$ ($j = 1, 2, 3$; $\sigma = 1, \ldots, 8$) : 24 vi tử trong đó $i\sigma_j$ là các vi tử của nhóm SU(2) còn F_σ là các vi tử của nhóm SU(3).

Tích nửa trực tiếp $R^{p+q} \otimes SO\ (p,\ q)$

Các phép tính cho các giao hoán tử sau

$$\begin{aligned}
&[X_{\mu\nu}, X_{\sigma\rho}] = i(-g_{\nu\sigma} X_{\rho\mu} - g_{\rho\mu} X_{\sigma\nu} + g_{\sigma\mu} X_{\rho\nu} + g_{\rho\nu} X_{\sigma\mu}),\\
&[P_\mu, P_\nu] = 0,\\
&[X_{\mu\nu}, P_\rho] = i(g_{\mu\rho} P_\nu - g_{\nu\rho} P_\mu)
\end{aligned} \tag{6-21}$$

với

$$P_\nu = \frac{\partial}{\partial x^\nu}\ , \ g = -I_p \oplus I_q.$$

§ 7. ĐẠI SỐ LIE CỦA NHÓM LIE

Đại số Lie của nhóm Lie

Như đã thấy ở § 5, sự nghiên cứu cấu trúc địa phương (tại lân cận của đơn vị chẳng hạn) của các nhóm Lie có r tham số thực đã dẫn đến một tập hợp r vi tử X_σ (hay I_j) độc lập với nhau. Tập hợp các tổ hợp tuyến tính với hệ số thực (trên R) của các vi tử này làm thành một không gian tuyến tính thực r chiều nào đó. Mặt khác, theo (5-21), trong không gian tuyến tính này lại có xác định một luật hợp thành (phép nhân) kín

$$[X_\rho, X_\sigma] = C^\tau_{\rho\sigma} X_\tau,$$

thỏa mãn điều kiện phản xứng

$$[X_\rho, X_\sigma] = -[X_\sigma, X_\rho]$$

và đồng nhất thức Jacobi

$$[[X_\rho, X_\sigma], X_\tau] + [[X_\sigma, X_\tau], X_\rho] + [[X_\tau, X_\rho], X_\sigma] = 0.$$

Theo định nghĩa, tập hợp các vi tử của nhóm Lie với phép nhân ở trên làm thành một cấu trúc đại số Lie thực, gọi là *đại số Lie của nhóm Lie* đang xét.

Vấn đề hết sức quan trọng là xét mối quan hệ giữa các cấu trúc con của nhóm Lie và cấu trúc con của đại số Lie đó. Như sẽ thấy, điều này cho phép sử dụng đại số Lie của nhóm như một phương pháp nghiên cứu bản thân nhóm đó.

Đại số Lie con, iđêan

Cho một đại số Lie $\mathcal{L}$. Một không gian tuyến tính $\mathcal{B} \subset \mathcal{L}$ gọi là một *đại số Lie con* của $\mathcal{L}$ nếu

$$[\mathcal{B}, \mathcal{B}] \subset \mathcal{B} \tag{7-1}$$

Một tập hợp con $\mathcal{J}$ của $\mathcal{L}$ gọi là một *iđêan* của $\mathcal{L}$ nếu

$$[\mathcal{L}, \mathcal{J}] = \mathcal{J} \tag{7-2}$$

Dĩ nhiên, mọi iđêan đều là đại số con. Quả vậy, theo (7-2) ta có

$$[\mathcal{J}, \mathcal{J}] \subset [\mathcal{L}, \mathcal{J}] = \mathcal{J}.$$

Ta có thể lấy một ví dụ về đại số Lie con và iđêan. Theo (6-21), rõ ràng tập hợp gồm tất cả các vi tử X_{ij} của tích nửa trực tiếp $R^{p+q} \otimes SO(p, q)$ làm thành một đại số Lie con của đại số Lie của tích nửa trực tiếp đó. Tương tự như thế, tập hợp tất cả các vi tử X_i, tương ứng với các phép tịnh tiến, cũng làm thành một đại số Lie con giao hoán của đại số Lie đó. Hơn nữa, theo đẳng thức cuối cùng của (6-21), đại số Lie con này lại là một iđêan.

Đại số Lie tổng trực tiếp

Bây giờ, cho $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$ là hai iđêan của đại số Lie $\mathcal{L}$. Giả sử không gian $\mathcal{L}$ là tổng trực tiếp của hai không gian $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$, tức là mọi phần tử x của $\mathcal{L}$ đều có biểu thức phân tích duy nhất

$$x = x_1 + x_2,\ x_1 \in \mathcal{J}_1,\ x_2 \in \mathcal{J}_2.$$

Trong trường hợp này, ta có $\mathcal{J}_1 \cap \mathcal{J}_2 = 0$. Quả vậy, nếu có một

$$z \in \mathcal{J}_1 \cap \mathcal{J}_2$$

thì vì z đồng thời thuộc $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$, nên ta có đồng thời hai biểu thức phân tích sau

$$z = x_1 + 0,\ z = 0 + x_2.$$

Vì $\mathcal{L}$ là một tổng trực tiếp nên, theo định nghĩa, ta chỉ có một biểu thức phân tích duy nhất, tức là $x_1 = 0$, $x_2 = 0$. Do đó $z = 0$, tức là $\mathcal{J}_1 \cap \mathcal{J}_2 = 0$. Tiếp theo, vì $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$ đều là iđêan, nên ta lại có

$$[\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] \subset [\mathcal{J}_1, \mathcal{L}] = \mathcal{J}_1,$$
$$[\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] \subset [\mathcal{L}, \mathcal{J}_2] = \mathcal{J}_2.$$

tức là

$$[\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2[\subset \mathcal{J}_1 \cap \mathcal{J}_2 = 0.$$

Đại số Lie $\mathcal{L}$ với các giả thiết nói trên gọi là *tổng trực tiếp* của hai iđêan của nó và ký hiệu

$$\mathcal{L} = \mathcal{J}_1 \oplus \mathcal{J}_2.$$

Ta có thể suy rộng định nghĩa này cho tổng trực tiếp nhiều iđêan. Ta hãy lấy một ví dụ. Cho nhóm SO(4) mà các vi tử thỏa mãn các hệ thức giao hoán (6-11) trong đó i, k, l, m = 1,..., 4. Đặt

$$M_1 = X_{23},\ M_2 = X_{31},\ M_3 = X_{12},$$
$$N_1 = X_{14},\ N_2 = X_{24},\ N_3 = X_{34},$$

ta được, theo (6-11)

$$[M_i, M_j] = -\varepsilon_{ijk}M_k,$$
$$[N_i, N_j] = -\varepsilon_{ijk}M_k,$$
$$[M_i] N_j[= -\varepsilon_{ijk}N_k.$$

Lại đặt

$$J_i = (M_i + N_i)/2,\ K_i = (M_i - N_i)/2,$$

từ các hệ thức giao hoán trên, ta được

$$[J_i, J_j] = -\varepsilon_{ijk}J_k,$$

$$[K_i, K_j] = -\varepsilon_{ijk}K_k,$$

$$[J_i, K_j] = 0. \qquad (7\text{-}3)$$

Từ các hệ thức giao hoán (7-3), ta thấy rằng $\mathcal{J}_1 = \{J_i\}$ và $\mathcal{J}_2 = \{K_i\}$ là hai iđêan của đại số Lie của nhóm SO(4). Đồng thời đại số Lie của nhóm là tổng trực tiếp của hai iđêan đó. Dựa vào các hệ thức giao hoán của các vi tử J_i cũng như các vi tử K_j, theo (6-15) ta lại thấy rằng các iđêan $\mathcal{J}_i$ chính là các đại số Lie của nhóm SO(3). Ta kết luận: đại số Lie của nhóm SO(4) là tổng trực tiếp của hai đại số Lie của nhóm SO(3).

Đại số Lie của tổng nửa trực tiếp

Bây giờ giả thiết đại số Lie $\mathcal{L}$ có một đại số con $\mathcal{B}$ và một iđêan $\mathcal{J}$, đồng thời không gian $\mathcal{L}$ là tổng trực tiếp của hai không gian $\mathcal{B}$ và $\mathcal{J}$. Trong điều kiện này, ta nói rằng đại số Lie $\mathcal{L}$ là *tổng nửa trực tiếp* của đại số con $\mathcal{B}$ và iđêan $\mathcal{J}$, và ký hiệu

$$\mathcal{L} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{J}$$

Theo (6-21) đại số Lie của tích nửa trực tiếp $R^{p+q} \otimes SO(p, q)$ là tổng nửa trực tiếp của đại số con $\{X_{ij}\}$ và iđêan $\{P_i\}$.

Đại số Lie đơn và nửa đơn

Một đại số Lie gọi là *đơn* nếu nó không có iđêan nào khác chính nó và iđêan $\{0\}$. Một đại số Lie gọi là *nửa đơn* nếu nó không có iđêan giao hoán nào kể cả chính nó (Một tập hợp gọi là giao hoán nếu giao hoán tử của mọi cặp phần tử của tập hợp đó đều bằng không).

Đại số Lie một chiều gồm tất cả các phần tử có dạng aX, a∈R với X là một phần tử cố định nào đó của đại số Lie, dĩ nhiên là một đại số Lie đơn, vì mọi iđêan khác không của nó đều trùng với chính nó. Mặt khác, đại số này là không nửa đơn vì bản thân đại số đó chính là một iđêan giao hoán của chính nó. Như thế, đại số Lie một chiều là đơn nhưng không nửa đơn. Ngoài đại số đặc biệt đó, mọi đại số Lie đơn đều *đồng thời* là nửa đơn.

Tất nhiên, cũng vì lý do như trên, mọi đại số Lie giao hoán đều không nửa đơn. Như đã thấy ở §6, đại số Lie của nhóm tịnh tiến trong không gian n chiều là một đại số Lie giao hoán, tức là không nửa đơn.

Quan hệ giữa các cấu trúc của đại số Lie con và nhóm Lie con

Đến đây, ta đã có thể xét mối quan hệ giữa các cấu trúc con của nhóm Lie và các cấu trúc con của đại số Lie của nhóm Lie đó. Muốn thế, ta hãy xét sự tương quan giữa các giao hoán tử $[X_\rho, X_\sigma]$ của đại số Lie và các giao hoán tử $g(a)g(b)g^{-1}(a)g^{-1}(b)$ của nhóm Lie. Tất nhiên, ta có thể hạn chế ở những phép biến đổi vi phân tại lân cận của đơn vị của nhóm Lie. Như đã thấy ở (5-19), một phép biến đổi vi phân $x \to x + dx$, cảm ứng một sự biến đổi xác định nào đó của hàm F(x)

$$g(a): F(x) \to F(x + dx) = F(x) + dF = (e + a^\sigma X_\sigma)F$$

trong đó e trỏ phép biến đổi đơn vị. Thành thử, tương ứng với giao hoán tử $g(a)\,g(b)g^{-1}(a)g^{-1}(b)$ của hai phần tử a và b của nhóm Lie, ta có sự biến đổi cảm ứng

$$g(a)\,g(b)g^{-1}(a)\,g^{-1}(b):\ F(x) \to (x + a^{\sigma}X_{\sigma})(e + b^{\rho}X_{\rho}) \times$$
$$\times (e - a^{\sigma}, X_{\sigma})(e - b^{\rho}X_{\rho})F = (e + a^{\sigma}b^{\rho}[X_{\sigma}, X_{\rho}])F, \qquad (7\text{-}4)$$

nghĩa là giao hoán tử $[X_{\rho}, X_{\sigma}]$ là vi tử của giao hoán tử $g(a)\,g(b)\,g^{-1}(a)\,g^{-1}(b)$. Nói cách khác, tương ứng với giao hoán tử của nhóm Lie là giao hoán tử của đại số Lie của nhóm Lie đó. Kết quả này cho phép giải quyết mối quan hệ nói trên giữa các cấu trúc con của nhóm Lie và cấu trúc con của đại số Lie của nó.

Trước hết, nếu nhóm Lie đang xét là một nhóm Abel thì, vì mọi giao hoán tử của một nhóm Abel đều bằng đơn vị, do đó cảm ứng phép biến đổi đơn vị của hàm F, nên từ (7-4) ta được

$$[X_{\rho}, X_{\sigma}] = 0 \text{ với mọi } \rho \text{ và } \sigma.$$

Như thế, đại số Lie của một nhóm Abel là một đại số Lie giao hoán, các hằng số cấu trúc đều bằng không. Điều ngược lại cũng đúng. Đại số Lie giao hoán của nhóm (Abel) tịnh tiến trong không gian n chiều là một ví dụ.

Bây giờ, giả sử $\mathcal{H}$ là một nhóm con của nhóm Lie $\mathcal{G}$ có r tham số. Ta giả sử thêm các tham số của $\mathcal{H}$ là $a^1, \ldots, a^p$, $p \leqslant r$. Vì các giao hoán tử của các phần tử của nhóm con $\mathcal{H}$ phải là những phần tử của nhóm con đó, nên các giao hoán tử $[X_{\mu}, X_{\nu}]$, $\mu, \nu = 1, \ldots, p)$ phải là những tổ hợp tuyến tính của các vi tử X_{μ} $(\mu = 1, \ldots, p)$. Nói cách khác, các vi tử X_{μ} $(\mu = 1, \ldots, p)$ làm thành một đại số con $\mathcal{B}$ của đại số Lie $\mathcal{L}$ của nhóm $\mathcal{G}$, tức là đại số Lie của các nhóm con là những đại số Lie con của đại số Lie của nhóm. Điều ngược lại cũng đúng.

Từ hệ thức $[\mathcal{B}, \mathcal{B}] \subset \mathcal{B}$ ta suy ra các đẳng thức sau cho các hằng số cấu trúc

$$C^{\rho}_{\mu\nu} = 0\,(\mu, \nu = 1, \ldots, p;\ \rho = p + 1, \ldots, r). \qquad (7\text{-}5)$$

Tiếp theo, giả sử $\mathcal{K}$ là một nhóm con bất biến của nhóm Lie $\mathcal{G}$. Thế thì ta có

$$g(a)\,g(b)\,g^{-1}(a) \in \mathcal{K} \text{ với mọi } g(b) \in \mathcal{K} \text{ và } g(a) \in \mathcal{G}.$$

Từ đó, ta được

$$g(a)\,g(b)\,g^{-1}(a)\,g^{-1}(b) \in \mathcal{K}.$$

Thành thử, giao hoán tử $[X_{\rho}, X_{\mu}]$ $(\rho = 1, \ldots, r;\ \mu = 1, \ldots, p)$ phải là một tổ hợp tuyến tính của chỉ các vi tử X_{ν} $(\nu = 1, \ldots, p)$. Nói cách khác, các vi tử X_{μ} $(\mu = 1, \ldots, p)$ làm thành một iđêan $\mathcal{J}$ nào đó của đại số Lie $\mathcal{L}$ của nhóm Lie $\mathcal{G}$, tức là đại số Lie của một nhóm con bất biến là một iđêan của đại số Lie của nhóm. Điều ngược lại cũng đúng. Từ hệ thức

$$[\mathcal{L}, \mathcal{J}] = \mathcal{J}$$

ta suy ra

$$C^{\sigma}_{\rho\mu} = 0\ (\rho = 1, \ldots, r;\ \mu = 1, \ldots, p;\ \sigma = p + 1, \ldots, r) \qquad (7\text{-}6)$$

Như đã biết ở chương I, một nhóm gọi là *đơn* nếu nhóm đó không có nhóm con bất biến nào khác không và khác chính nó. Theo các kết quả trên, đại số Lie của một nhóm Lie đơn là một đại số Lie đơn. Điều ngược lại cũng đúng.

Theo công thức (6-13), ta thấy đại số Lie của nhóm SO(3) không chứa một iđêan nào khác không và khác chính nó, nên đại số Lie này là một đại số Lie đơn. Và như thế, nhóm SO(3) là một nhóm đơn. Tất nhiên, nhóm SU(2) đẳng cấu (địa phương) với nhóm SO(3) cũng là một nhóm đơn.

Cũng theo các kết quả trên, đại số Lie của một nhóm nửa đơn là một đại số Lie nửa đơn. Điều ngược lại cũng đúng.

Cũng như thế, ta thấy rằng đại số Lie của một tích trực tiếp hai nhóm là tổng trực tiếp của các đại số Lie của các nhóm đó. (Các nhóm này là những nhóm con bất biến của nhóm đang xét và các đại số Lie tương ứng là những iđêan của đại số Lie của nhóm). Điều ngược lại cũng đúng.

Vì như đã thấy ở (7-3), đại số Lie của nhóm SO(4) là tổng trực tiếp của các đại số Lie của nhóm SO(3), nên ta kết luận rằng nhóm SO(4) là tích trực tiếp của SO(3) và SO(3)

$$SO(4) = SO(3) \otimes SO(3). \tag{7-7}$$

Vì SO(3) là một nhóm con bất biến của SO(4) khác không và khác SO(4), nên kết quả (7-7) cho thấy rằng nhóm SO(4) không phải là một nhóm đơn. Nhưng nhóm này là một nhóm nửa đơn vì đại số Lie của nhóm đó không chứa một iđêan giao hoán nào.

Tương tự như thế, đại số Lie của một tích nửa trực tiếp là một tổng nửa trực tiếp. Điều ngược lại cũng đúng. Kết quả (6-21) là một ví dụ về mối quan hệ này.

Như thế, do sự tồn tại song song giữa các cấu trúc con của các nhóm Lie và các cấu trúc con của đại số Lie của các nhóm Lie, vấn đề nghiên cứu cấu trúc các nhóm Lie có thể quy về vấn đề nghiên cứu cấu trúc của các đại số Lie. Điểm thuận lợi của phương pháp nghiên cứu này rất rõ ràng: trong lúc các nhóm Lie có vô số phần tử độc lập, thì các đại số Lie của các nhóm Lie chỉ có r phần tử độc lập.

Nhóm phủ phổ dụng và nhóm Lie đẳng cấu địa phương với nhau

Tất nhiên, sau khi nghiên cứu các đại số Lie, cần đặt vấn đề quay trở lại các nhóm Lie. Một câu hỏi rất quan trọng tự nhiên đề ra là: tương ứng với một đại số Lie cho sẵn, có thể có bao nhiêu nhóm Lie cùng nhận đại số Lie đó làm đại số Lie của mình? Vấn đề này tương tự như vấn đề tìm các nguyên hàm từ một hàm cho sẵn. Thực ra, cách đặt vấn đề chuyển từ nhóm Lie sang đại số Lie tương ứng hay từ một hàm số sang đạo hàm của nó về thực chất là như nhau: chúng ta chuyển từ những tính chất toàn bộ sang những tính chất cục bộ (địa phương).

Nếu tương ứng với một hàm cho sẵn, chúng ta có nhiều nguyên hàm khác nhau bởi một hằng số thì, tương tự như thế, từ một đại số Lie cho sẵn, có khả năng tìm được nhiều nhóm Lie nhận đại số Lie đó làm đại số Lie của mình. Sự tồn tại các nhóm SU(2) và SO(3) cùng nhận một đại số Lie chung là một ví dụ sáng sủa. Như đã nói ở trên, các nhóm Lie này là đẳng cấu với nhau tại từng địa phương của nhóm và gọi là đẳng cấu địa phương với nhau. Nhưng xét về toàn bộ, thì giữa những nhóm Lie có cùng đại số Lie, nói chung ta chỉ có một ánh xạ đồng cấu: tương ứng với mỗi phần tử của một nhóm nào đó là nhiều phần tử thuộc nhóm khác. Chẳng hạn, có thể chứng minh rằng giữa các nhóm SU(2) và SO(3) tính đồng cấu nói trên thể hiện ở chỗ tương ứng với mỗi phần tử của nhóm SO(3) là hai phần tử khác dấu nhau của nhóm SU(2). (Có thể xem kết quả này ở phần biểu diễn của nhóm SO(3)).

Nói cụ thể hơn, người ta chứng minh rằng tương ứng với một đại số Lie cho sẵn, có tồn tại một nhóm Lie *đơn liên « lớn nhất »* $\tilde{\mathcal{G}}$ gọi là *nhóm phủ phổ dụng*, nhận đại số Lie đó làm đại số Lie của mình. Các nhóm Lie liên thông khác $\mathcal{G}_i$ có cùng đại số Lie đó (nghĩa là đẳng cấu địa phương với $\tilde{\mathcal{G}}$) đều có dạng

$$\mathcal{G}_i = \tilde{\mathcal{G}}/\mathcal{D}_i$$

trong đó $\mathcal{D}_i$ là tất cả những nhóm con giao hoán rời rạc thuộc tâm của nhóm phủ phổ dụng.

Chẳng hạn, tâm của nhóm SU(3) gồm các ma trận có dạng $e^{i\varphi}I_3$, $\varphi = \dfrac{2\pi k}{3}$.
Từ đó, nhóm con rời rạc cực đại của tâm chỉ có thể là nhóm Z_3 gồm các căn bậc ba của đơn vị. Mặt khác do nhóm SU(3) là một nhóm đơn liên (xem cuối § 4) nên bản thân nhóm này là một nhóm phủ phổ dụng. Muốn tìm tất cả các nhóm liên thông cùng có đại số Lie như SU(3), cần tìm các nhóm con (rời rạc) của Z_3. Nhưng vì nhóm này không có nhóm con rời rạc nào, nên tất cả các nhóm liên thông nói trên chỉ là các nhóm sau

$$\tilde{\mathcal{G}} = SU(3), \quad SU(3)/Z_3\,.$$

Với nhóm SU(4) — đơn liên như ta đã biết — nhóm con giao hoán rời rạc cực đại là nhóm Z_4, gồm các căn bậc bốn của đơn vị $(1, -1, i, -i)$. Vì nhóm con này có một nhóm con thực sự là $\{-1, 1\} = Z_2$, nên tất cả các nhóm Lie liên thông có đại số Lie bằng đai số Lie của nhóm SU(4) là

$$\tilde{\mathcal{G}} = SU(4),\ SU(4)/Z_2,\ SU(4)/Z_4.$$

Đối với các nhóm quay SO(n), như ta đã thấy ở § 4, nhóm SO(2) là ∞ — liên thông, còn các nhóm SO(n), $n > 2$, là 2 — liên thông. Vì thế, các nhóm không đơn liên SO(n) không phải là những nhóm phủ phổ dụng. Các nhóm phủ phổ dụng cùng đại số Lie như SO(n), $n > 3$, gọi là các nhóm Spin(n) và người ta thấy rằng nhóm con giao hoán rời rạc cực đại của nhóm phủ phổ dụng Spin(n) là Z_4 nếu n lẻ hay $Z_2 \otimes Z_2$ nếu n chẵn, và ta có

$$SO(n) = Spin(n)/Z_4 \text{ với n lẻ, } n > 3,$$

$$SO(n) = Spin(n)/Z_2 \otimes Z_2 \text{ với n chẵn, } n > 3.$$

Nhóm phủ phổ dụng khi $n = 2$ là toàn bộ đường thẳng R.

Nhóm phủ phổ dụng khi $n = 3$ là SU(2).

Đối với các nhóm Sp(n), các nhóm này là đơn liên và chính là những nhóm phủ phổ dụng. Nhóm con rời rạc giao hoán cực đại là Z_2

Khuếch phức

Một trong những khái niệm tương đối quan trọng có liên quan đến các đại số Lie là khái niệm khuếch phức hay mở rộng phức.

Cho một đại số Lie thực $\mathcal{L}$ có cơ sở I_σ: mọi phần tử của $\mathcal{L}$ có dạng tổ hợp tuyến tính $a^\sigma I_\sigma$, $a_\sigma \in R$. Nếu thay các hệ số thực a bằng hệ số phức

$$a \to \alpha + i\beta,\ \alpha,\ \beta \in R,$$

thì sẽ được một đại số Lie phức, ký hiệu là $[\mathcal{L}]$. Đại số Lie phức này gọi là *cái khuếch phức* của $\mathcal{L}$. Do

$$a^\sigma I_\sigma = (\alpha^\sigma + i\beta^\sigma)\, I_\sigma = \alpha^\sigma I_\sigma + \beta^\sigma (i I_\sigma),\ \alpha^\sigma,\ \beta^\sigma \in R$$

đại số Lie phức $[\mathcal{L}]$ có thể xem là một đại số Lie thực có cơ sở I_σ, (iI^σ) tức là có chiều gấp đôi.

Đại số Lie $\mathcal{L}$ gọi là *dạng thực* của $[\mathcal{L}]$. Nếu $\mathcal{L}$ lại là compắc, thì $\mathcal{L}$ gọi là *dạng compắc của* $[\mathcal{L}]$.

Theo biểu thức (5-33), ta thấy rằng sự khuếch phức của đại số Lie $\mathcal{L}$ là tương đương với sự khuếch phức các nhóm Lie, mà nội dung là thay các tham số thực bằng tham số phức.

Ta hãy lấy một vài ví dụ. Theo định nghĩa rõ ràng

$$[GL(n, R)] = GL(n, C).$$

Tiếp theo, do đại số Lie của nhóm U(n) là tập hợp tất cả các ma trận cấp n, hecmitic có chiều bằng n^2, khi khuếch phức, ta được một đại số Lie có chiều gấp đôi, bằng $2n^2$. Nhưng ngoài đại số Lie của nhóm GL(n, C), không có một đại số Lie ma trận cấp n nào có chiều lớn hơn, nên ta được ngay

$$[U(n)] = GL(n, C).$$

Rõ ràng U(n) là dạng compăc của GL(n, C).

Cũng tương tự như thế, ta được

$$[SU(n)] = SL(n, C),\ [SL(n, R)] = SL(n, C).$$

Tất nhiên

$$[SO(n)] = SO(n, C),\ [Sp(2n)] = Sp(2n, C).$$

Cũng có thể chứng minh rằng

$$[U(p, q)] = GL(p + q, C),\ [SO(p, q)] = SO(p + q, C).$$

Ta hãy minh họa kết quả trên cho nhóm SO(1, 1) gồm các ma trận dạng

$$g(\psi) = \begin{bmatrix} ch\psi & sh\psi \\ sh\psi & ch\psi \end{bmatrix},\ \psi \in R.$$

Bằng phép biến đổi đồng dạng với ma trận a:

$$a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix},$$

ta được

$$g(\psi) \to g'(\psi) = a g(\psi) a^{-1}$$

$$g'(\psi) = \begin{bmatrix} ch\psi & -ish\psi \\ ish\psi & ch\psi \end{bmatrix},\ \psi \in R.$$

Cuối cùng, thay tham số thực ψ bằng tham số phức $z = i\psi$, ta được các ma trận

$$g'(z) = \begin{bmatrix} \cos z & -\sin z \\ \sin z & \cos z \end{bmatrix}, \ z \in C.$$

Tập hợp các ma trận $g'(z)$ chính là nhóm SO(2, C).

Như thế : $[SO(1, 1)] = SO(2, C)$.

Tương tự như thế, có thể chứng minh rằng

$$[SU(p, q)] = SL(p + q, C), \ [Sp(2p, 2q)] = Sp(2p + 2q, C).$$

TÓM TẮT

Dạng phức	Dạng compăc	Dạng thực không compăc
GL(n, C)	U(n)	GL(n, R)
SL(n, C)	SU(n)	SL(n, R)
SO(n, C)	SO(n)	SO(p, q), $p + q = n$
Sp (2n, C)	Sp (2n)	Sp(2p, 2q), $p + q = n$.

§ 8. PHÉP BIỂU DIỄN CÁC NHÓM LIE

Phép biểu diễn nhóm Lie

Khái niệm biểu diễn (tuyến tính) các nhóm Lie cũng định nghĩa giống như khái niệm biểu diễn các nhóm hữu hạn. Cho một nhóm Lie $\mathcal{G}$, ta cho tương ứng với mỗi phần tử g của nhóm Lie $\mathcal{G}$ một toán tử tuyến tính D(g) tác dụng trong một không gian hữu hạn chiều hay trong một không gian Hilbert vô số chiều nào đó, trong đó có xác định một tích vô hướng xác định dương. Các toán tử D(g) làm thành một biểu diễn tuyến tính của nhóm Lie $\mathcal{G}$ khi ánh xạ

$$g \rightarrow D(g), \ g \in \mathcal{G}$$

là một ánh xạ đồng cấu, tức là khi

$$D(g_1) D(g_2) = D(g_1g_2) \text{ với mọi } g_1, g_2 \in \mathcal{G}$$

$$D(e) = I. \tag{8-1}$$

Ta giả thiết rằng các toán tử D(g) là giới nội để đảm bảo tích vô hướng $\langle D(g)\psi, \psi\rangle$ là giới nội với mọi vectơ ψ của không gian biểu diễn. Ngoài ra, ta chỉ giới hạn ở những biểu diễn liên tục nghĩa là giới hạn ở những biểu diễn mà các toán tử D(g) là những hàm liên tục của những tham số của nhóm lie đang xét. Trong trường hợp này, các tích vô hướng $\langle D(g)\psi, \psi\rangle$ sẽ là những hàm liên tục của các tham số đó.

Phép biểu diễn đại số Lie

Vấn đề tìm các biểu diễn của một nhóm Lie có thể giải quyết thông qua vấn đề tìm các biểu diễn của đại số Lie của nhóm Lie đó. Gọi $\mathcal{L}$ là đại số Lie của nhóm Lie $\mathcal{G}$. Ta cho tương ứng với mỗi phần tử X của $\mathcal{L}$ một toán tử D(x) tuyến tính, tác dụng trong một không gian hữu hạn chiều hay trong một không gian Hilbert nào đó. Ánh xạ

$$X \to D(x),\ X \in \mathcal{L}$$

sẽ là một biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{L}$ nếu đó là một ánh xạ đồng cấu, tức là nếu với mọi $X_1, X_2 \in \mathcal{L}$ và $\lambda_1, \lambda_2 \in R$ ta có

$$D(\lambda_1 X_1 + \lambda_2 X_2) = \lambda_1 D(X_1) + \lambda_2 D(X_2),$$
$$D[X_1, X_2] = [D(X_1), D(X_2)].$$

Quan hệ giữa phép biểu diễn của nhóm Lie và phép biểu diễn đại số Lie của nhóm

Bây giờ ta hãy xét xem ta sẽ chuyển từ biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{L}$ sang biểu diễn của nhóm Lie $\mathcal{G}$ như thế nào.

Giả sử có tồn tại các lượng A_ρ sao mà

$$A_\rho = \frac{d\,[Dg(a)]}{da^\rho}\Big|_{a=0} \tag{8-3}$$

Các lượng A_ρ này như đã thấy ở chương II, gọi là những *vi tử* của biểu diễn D(g). Người ta thấy rằng các toán tử A_ρ luôn luôn tồn tại nếu nhóm $\mathcal{G}$ là một nhóm ma trận và nếu biểu diễn là hữu hạn chiều. Còn trong trường hợp biểu diễn vô số chiều, vấn đề có phức tạp hơn vì, nói chung, các vi tử của biểu diễn trong trường hợp này có thể là không giới nội. Cũng có thể dùng khái niệm hàm suy rộng để giải quyết khó khăn này. Tuy nhiên, trong đa số trường hợp mà ta gặp phải trong các ứng dụng vật lý, với những yêu cầu bổ sung về tính giới nội và tính liên tục nói ở trên thì ta có thể xem những khó khăn đó được giải quyết.

Trong trường hợp biểu diễn hữu hạn chiều, theo các kết quả ở § 5, chương VII, ta có thể lập ma trận mũ exp $a^\sigma A_\sigma$ và được đẳng thức

$$\frac{d\,(\exp a^\sigma A_\sigma)}{da^\rho}\Big|_{a=0} = A_\rho. \tag{8-4}$$

Đối chiếu các đẳng thức (8-3) và (8-4) với nhau và ứng dụng định lý về tính duy nhất của nghiệm các phương trình vi phân, ta có thể suy ra

$$D[g(a)] = \exp(a^\sigma A_\sigma) \tag{8-5}$$

Như thế, trong trường hợp nhóm ma trận và biểu diễn hữu hạn chiều, biểu diễn D(g) được hoàn toàn xác định bởi các vi tử A_ρ của biểu diễn.

Nhưng theo các kết quả ở § 5, ta có

$$g = \exp(a^\sigma I_\sigma) \tag{8-6}$$

trong đó I_σ là các vi tử của nhóm $\mathcal{G}$, các vi tử này lập thành đại số Lie của nhóm. Đối chiếu các đẳng thức (8-5) và (8-6) với nhau, ta thấy rằng nếu $g \to D(g)$ là một biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$, thì $I_\sigma \to A_\sigma$ là một biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{L}$ của nhóm đó, và ngược lại. Thành thử, ta thấy rằng biểu diễn của nhóm được hoàn toàn xác định bởi biểu diễn của đại số Lie của nó. Ta sẽ chuyển từ biểu diễn của đại số Lie của nhóm sang biểu diễn của nhóm bằng công thức (8-5). Dùng biểu diễn của đại số Lie của nhóm để tìm các biểu diễn của nhóm tiện lợi ở chỗ cơ sở các đại số Lie của các nhóm Lie chỉ gồm một số hữu hạn phần tử độc lập (các I_σ) và ta chỉ cần tìm các biểu diễn của các phần tử cơ sở đó là đủ. Chẳng hạn trong trường hợp nhóm SO(3), với đại số Lie gồm ba phần tử độc lập X_i, ta chỉ cần tìm các toán tử A_1, A_2 và A_3 thỏa mãn hệ thức giao hoán như (6-16)

$$[A_i, A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k$$

là đủ để giải quyết vấn đề biểu diễn của nhóm: biểu diễn của nhóm SO(3) sẽ được xác định bởi công thức

$$D[g(a^1, a^2, a^3)] = e^{i(a^1A_1 + a^2A_2 + a^3A_3)} .$$

Trong trường hợp biểu diễn vô số chiều, như đã nói ở trên, vấn đề phức tạp hơn rất nhiều.

Biểu diễn phó

Một trong các biểu diễn quan trọng của đại số Lie là biểu diễn phó, có nội dung như sau.

Giả sử có một đại số Lie $\mathcal{L}$ và định nghĩa phép biến đổi

$$X \to X' = (\mathrm{ad}A)X \equiv [A, X],\ A, X, X' \in \mathcal{L} \tag{8-7}$$

trong không gian $\mathcal{L}$.

Ánh xạ

$$A \to \mathrm{ad}A,\ A \in \mathcal{L}$$

từ đại số Lie $\mathcal{L}$ vào trong đại số Lie các phép biến đổi tuyến tính $\mathrm{ad}\mathcal{L}$ của chính không gian $\mathcal{L}$ là một phép đồng cấu. Quả vậy, trước hết theo (8-7) ta có các tính chất

$$\mathrm{ad}(\lambda A + \mu B)X = [\lambda A + \mu B, X] = \lambda[A, X] + \mu[B, X] =$$
$$= \lambda(\mathrm{ad}A)X + \mu(\mathrm{ad}B)X \text{ với mọi } A, B, X \in \mathcal{L}$$

tức là

$$\mathrm{ad}(\lambda A + \mu B) = \lambda \mathrm{ad}A + \mu \mathrm{ad}B \text{ với mọi } A, B \in \mathcal{L}. \tag{8-8}$$

Tiếp theo, dựa vào đồng nhất thức Jacobi, ta có

$$\mathrm{ad}[A, B]X = [[A, B], X] = [[A, X], B] + [A, [B, X]] =$$
$$= [\mathrm{ad}AX, B] + [A, \mathrm{ad}BX] =$$
$$= (\mathrm{ad}A\mathrm{ad}B - \mathrm{ad}B\mathrm{ad}A)X = [\mathrm{ad}A, \mathrm{ad}B]X,$$

tức là

$$\mathrm{ad}[A, B] = [\mathrm{ad}A, \mathrm{ad}B] \text{ với mọi } A, B \in \mathcal{L} \tag{8-9}$$

Các tính chất (8-8) và (8-9) chứng tỏ rằng ánh xạ $A \to \mathrm{ad}A$ là một phép đồng cấu, tức là thực hiện một phép biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{L}$, không gian biểu diễn chính là $\mathcal{L}$. Phép biểu diễn này gọi là phép *biểu diễn phó* của đại số Lie $\mathcal{L}$. Ta lưu ý rằng trong biểu diễn phó của đại số Lie $\mathcal{L}$, đại số này đóng hai vai trò, vai trò của đối tượng được biểu diễn và vai trò của không gian biểu diễn.

Ta hãy tính ma trận của biểu diễn phó trong một cơ sở X_ρ ($\rho = 1, ..., r$) nào đó của không gian $\mathcal{L}$. Với mọi phần tử

$$A = a^\rho X_\rho,\ X = x^\sigma X_\sigma ,$$

của $\mathcal{L}$, theo định nghĩa (8-7) ta có

$$X \to X' = [A, X] = a^\rho x^\sigma [X_\rho, X_\sigma] = a^\rho x^\sigma C^\tau_{\rho\sigma} X_\tau . \qquad (8\text{-}10)$$

Nếu

$$X' = x'^\tau X_\tau \qquad (8\text{-}11)$$

thì, từ (8-10) và (8-11), ta được phép biến đổi tọa độ

$$x^\tau \to x'^\tau = a^\rho C^\tau_{\rho\sigma} x^\sigma ,$$

tức là ma trận của toán tử adA có dạng

$$(\mathrm{ad}A)^\tau_\sigma = a^\rho C^\tau_{\rho\sigma}, \qquad (8\text{-}12)$$

Nói riêng, nếu $A = X_\lambda$, tức là $a^\rho = \delta^\rho_\lambda$ thì, từ (8-12), ta được ma trận

$$(\mathrm{ad}X_\lambda)^\tau_\sigma = \delta^\rho_\lambda C^\tau_{\rho\sigma} = C^\tau_{\lambda\sigma} . \qquad (8\text{-}13)$$

Kết quả này chứng tỏ rằng các hằng số cấu trúc với chỉ số dưới λ trỏ vectơ cơ sở X_λ, lập thành ma trận của toán tử $\mathrm{ad}X_\lambda$.

Ta hãy lấy một ví dụ cụ thể. Chẳng hạn, đối với nhóm SU(2) (hay SO(3)) ta đưa vào ký hiệu

$$H_1 = J_3,\ E_1 = (J_1 + iJ_2)/\sqrt{2}\ ,\ E_{-1} = (J_1 - iJ_2)/\sqrt{2}\ , \qquad (8\text{-}14)$$

trong đó J_1, J_2, J_3 là các vi tử của nhóm (xem 6-18). Ta có

$$[H_1, E_1] = E_1,\ [H_1, E_{-1}] = - E_{-1}\ [E_1, E_{-1}] = H_1, \qquad (8\text{-}15)$$

Ta hãy chọn cơ sở

$$X_1 = E_1,\ X_0 = H_1,\ X_{-1} = E_{-1}.$$

Thế thì, theo (8-13), ta có

$$\mathrm{ad}E_1 = \mathrm{ad}X_1 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\ \mathrm{ad}H_1 = \mathrm{ad}X_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{ad}E_{-1} = \mathrm{ad}X_{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

từ đó, với mọi phần tử **A** của đại số Lie

$$A = a^1 E_1 + a^0 H_1 + a^{-1} E_{-1},$$

ta được ma trận biểu

$$\mathrm{ad}A = \begin{bmatrix} a^0 & -a^1 & 0 \\ -a^{-1} & 0 & a^1 \\ 0 & a^{-1} & -a^0 \end{bmatrix}.$$

Dạng Killing

Đến đây, chúng ta hãy định nghĩa dạng đối xứng

$$(A, B) = (B, A) \equiv \mathrm{Sp}(\mathrm{ad}A\,\mathrm{ad}B) = (\mathrm{ad}A)^\rho_\sigma\ (\mathrm{ad}B)^\sigma_\rho, \qquad (8\text{-}16)$$

với mọi $A, B \in \mathcal{L}$, gọi là *dạng Killing* xác định trên đại số $\mathcal{L}$.

Nếu

$$A = a^\rho X_\rho, \ B = b^\sigma X_\sigma$$

thì, dựa vào công thức (8-12), từ định nghĩa (8-16) ta thu được biểu thức

$$(A,\ B) = g_{\rho\sigma} a^\rho b^\sigma , \tag{8.17}$$

với

$$g_{\sigma\rho} = g_{\rho\sigma} = C^\tau_{\sigma\lambda} C^\lambda_{\rho\tau} . \tag{8-18}$$

Với ví dụ trên, ta có

$$(\mathrm{ad}A)^2 = \begin{bmatrix} a^{o2} + a^1 a^{-1} & & * \\ & a^1 a^{-1} + a^{-1} a^1 & \\ * & & a^{-1} a^1 + a^{o2} \end{bmatrix},$$

từ đó

$$(A, A) = \mathrm{Sp}(\mathrm{ad}A)^2 = 2(a^{o2} + a^1 a^{-1} + a^{-1} a^1),$$

tức là, theo (8-17), ta được các thành phần của mêtric g

$$g_{oo} = g_{1-1} = g_{-11} = 2, \tag{8-19}$$

còn tất cả các thành phần khác đều bằng không.

Mêtric $g_{\rho\sigma}$ phụ thuộc vào cơ sở: khi thực hiện phép biến đổi cơ sở

$$X_\rho \rightarrow X'_\rho = a^\sigma_\rho X_\sigma$$

thì mêtric $g_{\rho\sigma}$ sẽ biến đổi theo công thức

$$g_{\rho\sigma} \rightarrow g'_{\rho\sigma} = a^\mu_\rho a^\nu_\sigma g_{\mu\nu} .$$

Cartan đã chứng minh

Định lý 1

Điều kiện cần và đủ để một nhóm nhóm Lie là nửa đơn là dạng Killing xác định trên đại số Lie của nhóm đó là không suy biến. Ta nhắc lại định nghĩa về dạng không suy biến. Dạng (A, B) gọi là không suy biến nếu khi

$$(A,\ B) = 0$$

với mọi $B \in \mathcal{L}$ thì $A = 0$. Có thể chứng minh rằng tính chất không suy biến đó là tương đương với điều kiện

$$\det g \neq 0.$$

Thành thử, với các đại số Lie hay nhóm Lie nửa đơn, ta có thể đưa ra mêtric có chỉ số phản biến $g^{\rho\sigma}$ với

$$g^{\rho\sigma} g_{\sigma\lambda} = \delta^\rho_\lambda . \tag{8-19}$$

Định lý 2

Điều kiện cần và đủ để một nhóm Lie là compắc là dạng Killing xác định trên đại số Lie của nó là xác định âm.

Thành thử, với các nhóm compăc ta có thể chọn một cơ sở của đại số Lie của nhóm đó như thế nào mà ma trận $g_{\rho\sigma}$ xác định âm là một ma trận chéo trong đó tất cả các phần tử trên đường chéo chính đều bằng -1

$$g_{\rho\sigma} = -\delta_{\rho\sigma} \tag{8-20}$$

Mặt khác, các lượng $C_{\rho\sigma\lambda}$ xác định theo định nghĩa

$$C_{\rho\sigma\lambda} \equiv g_{\rho\nu} C^{\nu}_{\sigma\lambda}, \tag{8-21}$$

là hoàn toàn phản xứng đối với mọi cặp chỉ số (có thể thấy tính chất này, dựa vào đồng nhất thức Jacobi cho các hằng số cấu trúc). Thành thử, với các nhóm compăc, theo (8-20) và (8-21), ta được,

$$C^{\rho}_{\sigma\lambda} = - C_{\rho\sigma\lambda} ,$$

tức là các hằng số cấu trúc $C^{\lambda}_{\rho\sigma}$ của các nhóm compăc là hoàn toàn phản xứng đối với mọi cặp chỉ số. Các hằng số cấu trúc ε_{ijk} hoàn toàn phản xứng của nhóm SO(3) là một ví dụ.

Một số định nghĩa về biểu diễn của nhóm Lie

Để kết thúc phần này, cuối cùng chúng ta đưa ra một số định nghĩa tương tự như đối với các nhóm hữu hạn.

Một biểu diễn $g \rightarrow D(g)$ gọi là *trung thành* nếu đó là một ánh xạ đẳng cấu. Một không gian con $\mathscr{M}_1$ của không gian biểu diễn gọi là *bất biến*, nếu $\mathscr{M}_1$ là bất biến đối với tất cả các phép biến đổi D(g), hay đối với tất cả các vi tử A_σ của biểu diễn.

Một biểu diễn trong không gian $\mathscr{M}$ gọi là *bất khả quy* nếu trong không gian $\mathscr{M}$ không có không gian con bất biến nào khác $\mathscr{M}$. Không gian $\mathscr{M}$ như thế cũng gọi là bất khả quy. Một biểu diễn gọi là *hoàn toàn khả quy*, nếu biểu diễn đó là bất khả quy, hoặc nếu không gian $\mathscr{M}$ có thể phân thành tổng trực tiếp nhiều không gian con bất khả quy.

Một biểu diễn gọi là *unita* nếu trong không gian biểu diễn có xác định một tích vô hướng và tất cả các toán tử D(g) đều unita đối với tích vô hướng đó.

Nếu biểu diễn (8-5)

$$D[g(a)] = e^{ia^{\sigma}B_{\sigma}} , \; B = - iA_{\sigma} , \tag{8-22}$$

là unita thì, theo các kết quả ở § 5, các vi tử B_σ là hecmitic, và ngược lại.

§ 9. TÍCH PHÂN BẤT BIẾN

Định nghĩa tích phân bất biến

Với các nhóm hữu hạn, ở chương II ta đã đưa ra khái niệm trung bình bất biến

$$M\{P\} = \frac{1}{G} \sum_{g} P(g), \tag{9-1}$$

có các tính chất

$$M\{P\} = \frac{1}{G} \sum_{g} P(g) = \frac{1}{G} \sum_{g} P(gg_0) = \frac{1}{G} \sum_{g} P(g_0 g) =$$

$$= \frac{1}{G} \sum_{g} P(g^{-1}) = \frac{1}{G} \sum_{g} P(g_0 g^{-1}) = \frac{1}{G} \sum_{g} P(g^{-1} g_0). \tag{9-2}$$

Như ta đã thấy ở đấy, với khái niệm trung bình bất biến này, ta đã chứng minh được một số định lý quan trọng của lý thuyết biểu diễn các nhóm hữu hạn (xem chương II): 1. Định lý về tính chất hoàn toàn khả quy của các nhóm hữu hạn, 2. Định lý về tính chất tương đương của mọi biểu diễn (hữu hạn) của các nhóm hữu hạn với một biểu diễn unita nào đó, 3. Định lý về tính chất trực giao của các đặc biểu của các biểu diễn của các nhóm hữu hạn.

Bước sang các nhóm Lie, ta hãy đặt vấn đề xem các định lý nói trên còn đúng trong những trường hợp nào. Muốn thế, cần đưa ra một khái niệm tương tự như khái niệm trung bình bất biến (9-1). Dĩ nhiên, vì ở đây các nhóm Lie là những nhóm liên tục, nên tổng trong khái niệm trung bình bất biến biến thành một tích phân theo các tham số của nhóm, và tự nhiên xuất hiện khái niệm tích phân bất biến. Nói cụ thể hơn, cho một nhóm $\mathcal{G}$, ta nói trên nhóm đó có xác định một *tích phân bất biến*, nếu với mọi hàm liên tục f(g), $g \ni \mathcal{G}$, ta có thể cho tương ứng được một số thực

$$\int f(g)dg,$$

thỏa mãn các tính chất sau

$$\int f(gg_o)dg \equiv \int f(g)d(gg_o) = \int f(g)dg,\ d(gg_o) = dg \text{ (bất biến bên phải)},$$

$$\int f(g_og)dg \equiv \int f(g)d(g_og) = \int f(g)dg,\ d(g_og) = dg \text{ (bất biến bên trái)},$$

$$\int f(g^{-1})dg = \int f(g)dg. \tag{9-3}$$

Các tính chất (9-3) này là tương tự như các tính chất (9-2) đối với các nhóm hữu hạn.

Tính tôpô compăc và sự tồn tại của tích phân bất biến

Bây giờ ta hãy xem trong những điều kiện nào có tồn tại những tích phân thỏa mãn (9-3). Ta hãy xét tích phân

$$M = \int f(g)dg = \int f[g(c)]\ p[g(c)]dc =$$

$$= \int f(c^1, \dots, c^r)\ p(c^1, \dots, c^r)dc^1 \dots dc^r$$

của một hàm liên tục f[g(c)] nào đó xác định trên nhóm $\mathcal{G}$. Tích phân được lấy theo toàn bộ không gian nhóm (tham số). Hàm p[g(c)] gọi là *hàm trọng*. Tìm biểu thức của hàm trọng thỏa mãn các điều kiện bất biến là vấn đề chủ yếu đề ra ở đây.

Trước hết, ta giải quyết bài toán bất biến bên trái. Giả sử

$$g(c) = g(b)\ g(a)$$

tức là

$$c = \Phi(b\,;\,a)$$

với Φ là luật hợp thành của nhóm Lie đang xét. Ta có

$$M = \int f[g(c)]\,p[g(c)]dc = \int f[g(b)\ g(a)]\ p[g(b)\ g(a)] \left| \frac{D\Phi(b\,;\,a)}{Da} \right| da,$$

trong đó

$$\frac{D\Phi(b\,;\,a)}{Da}$$

là định thức hàm xuất hiện khi chuyển từ biến số tích phân c sang biến số tích phân a. Theo điều kiện bất biến bên trái, hàm trọng p phải thỏa mãn đồng nhất thức

$$p[g(b)\,g(a)]\left|\frac{D\Phi(b\,;\,a)}{Da}\right| = p[g(a)] \tag{9-4}$$

với mọi b. Cho $g(b) = g^{-1}(a)$, từ (9-4), ta được

$$\frac{p[g(a)]}{p(e)} = \left|\frac{D\Phi(b\,;\,a)}{Da}\right|_{g(b)\,=\,g^{-1}(a)} \tag{9-5}$$

hay hoán vị a với b rồi cho b = 0

$$\frac{p[g(a)]}{p(e)} = \left|\frac{D\Phi(a\,;\,b)}{Db}\right|^{-1}_{g(b)\,=\,e} \tag{9-6}$$

Có thể chứng minh rằng hàm trọng ở (9-6) là nghiệm của (9-4).

Tương tự như thế, với điều kiện bất biến bên phải, tích phân

$$N = \int f[g(c)]\,q[(g(c)]\,dc = \int f[(g(a)\,g(b)]\,q[g(a)\,g(b)]\left|\frac{D\Phi(a\,;\,b)}{Da}\right|da$$

đưa đến điều kiện tương tự như (9-4)

$$q[g(a)\,g(b)]\left|\frac{D\Phi(a\,;\,b)}{Da}\right| = q[g(a)] \tag{9-7}$$

mà nghiệm là

$$\frac{q[g(a)]}{q(e)} = \left|\frac{D\Phi(a\,;\,b)}{Da}\right|_{g(b)\,=\,g^{-1}(a)} \tag{9-8}$$

hay hoán vị a với b rồi cho b = 0:

$$\frac{q[g(a)]}{q(e)} = \left|\frac{D\Phi(b\,;\,a)}{Db}\right|^{-1}_{g(a)\,=\,e} \tag{9-9}$$

Tiếp theo, người ta thấy rằng nếu

$$\frac{p[g(a)]}{p(e)} = \frac{q[g(a)]}{q(e)}, \tag{9-10}$$

thì hai tích phân M và N sẽ bằng nhau và điều này cho phép xác định một tích phân duy nhất có dạng

$$H = \frac{\int f[g(a)]\,p[g(a)]\,da}{\int p[g(a)]\,da},$$

gọi là *tích phân Hurwitz*. Tích phân này là chuẩn hóa và thỏa mãn các điều kiện bất biến của bài toán.

Người ta chứng minh rằng nếu nhóm đang xét là một nhóm compắc thì điều kiện (9-10) được thỏa mãn, nghĩa là trong trường hợp này ta có thể xây dựng được tích phân bất biến, ở đó biểu thức của hàm trọng được tính theo công thức (9-6).

Ta hãy lấy nhóm compắc SO(2) làm thí dụ. Như đã thấy ở § 2, trong trường hợp này hàm Φ có dạng

$$c = \Phi\,(a\,;\,b) = a + b.$$

Thành thử, theo công thức (9-6), ta được nghiệm

$$\frac{p(g(a))}{p(e)} = 1,\ p(a) = 1,$$

và tích phân bất biến trong trường hợp này có dạng

$$H = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(\varphi)\,d\varphi$$

với φ là tham số của nhóm, theo ký hiệu thông thường. Thừa số $1/2\pi$ là thừa số chuẩn hóa.

Tính chất của các biểu diễn nhóm compắc

Vì các nhóm compắc có tích phân bất biến nên, lặp lại các quá trình chứng minh cần thiết như đối với các nhóm hữu hạn ở chương II, ta có thể kết luận rằng:

1. Mọi biểu diễn hữu hạn chiều của các nhóm Lie compắc đều tương đương với một biểu diễn unita nào đó.

2. Không gian biểu diễn hữu hạn của các nhóm compắc có thể phân thành tổng trực tiếp của nhiều không gian con bất khả quy, tức là các nhóm compắc có tính chất hoàn toàn khả quy. Người ta chứng minh rằng điều này cũng đúng cho các biểu diễn vô số chiều của các nhóm compăc.

3. Hệ thống tất cả các phần tử ma trận của các biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau của một nhóm compăc làm thành một hệ trực chuẩn đầy đủ. Nói cụ thể hơn ta có tính chất trực chuẩn sau

$$\int D^{(\alpha)}_{ki}(g)\, D^{(\beta)*}_{pj}(g)\, dg = \frac{1}{n_\alpha}\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{kp}\,\delta_{ij}, \tag{9-24}$$

với n_α là chiều của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(\alpha)}$. Mặt khác, với mọi hàm f(g) xác định trên nhóm và có bình phương khả tích

$$\int |f(g)|^2\, dg < +\infty$$

ta có tính chất đầy đủ sau

$$f(g) = \sum a^{(\alpha)}_{ij}\, D^{(\alpha)}_{ij}(g), \tag{9-25}$$

chuỗi Fourier này hội tụ theo trung bình. Các hệ số Fourer $a_{ik}^{(\alpha)}$ tính theo công thức sau

$$a_{ik}^{(\alpha)} = n_\alpha \int f(g)\, D_{ik}^{(\alpha)*}(g)\, dg. \tag{9-26}$$

Ngoài ra ta có đẳng thức Parseval

$$\int |f(g)|^2 dg = \sum_\alpha \frac{1}{n_\alpha} \sum_{i,j} \left| a_{ij}^{(\alpha)} \right|^2 \tag{9-27}$$

Nếu trong các công thức (9-24) cho các chỉ số ma trận bằng nhau rồi lấy tổng, ta được các hệ thức trực giao sau cho các đặc biểu của những biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau

$$\int \chi^{(\alpha)}(g)\, \chi^{(\beta)*}(g)\, dg = \delta_{\alpha\beta}, \tag{9-28}$$

$$dg = p(a^1, a^2, \ldots, a^r)\, da^1\, da^2 \ldots da^r.$$

4. Biểu diễn chính quy của mọi nhóm compắc có thể phân thành tổng của các biểu diễn unita bất khả quy của nhóm đó. Mỗi biểu diễn unita bất khả quy của nhóm đều nằm trong biểu diễn chính quy với số bội bằng chiều biểu diễn của mình. Đó cũng là một kết quả rất quan trọng liên quan đến sự tồn tại của tích phân bất biến đối với các nhóm compắc.

Ta hãy nhắc lại và bổ sung thêm một vài nét về biểu diễn chính quy.

Như đã thấy ở chương II, ta có thể dùng không gian $\mathcal{L}$ bất biến của nhóm (gồm tất cả các phần tử $\psi(x)$ sao mà $\psi(gx) \in \mathcal{L}$ với mọi g thuộc nhóm) để định nghĩa biểu diễn của nhóm theo đẳng thức

$$T_g \psi(x) \equiv D(g)\, \psi(x) = \psi(g^{-1}x). \tag{9-29}$$

Cũng theo định nghĩa, các phần tử x phải thuộc một không gian đồng nhất $\mathcal{M}$ nào đó của nhóm (nhóm bắc cầu). Nhưng vì không gian nhóm là một không gian đồng nhất của nhóm (xem § 5), nên ta có thể chọn $\mathcal{M} = \mathcal{G}$, tức là $x = g$ và, từ (9-29), ta được biểu diễn

$$L(g_0)\, \psi(g) \equiv \psi(g_0^{-1} g). \tag{9-30}$$

Biểu diễn (9-30) gọi là *biểu diễn chính quy trái*. Tương tự như thế, toán tử R với định nghĩa

$$R(g_0)\, \psi(g) \equiv \psi(g g_0), \tag{9-31}$$

cũng xác định một biểu diễn nào đó của nhóm, gọi là biểu diễn *chính quy phải*. Như thế, các biểu diễn chính quy (trái và phải) được thực hiện trong không gian những hàm xác định trên nhóm.

Ta lấy một trường hợp riêng quan trọng. Trong (9-31) ta chọn các hàm $\psi(g)$ bằng các phần tử ma trận của một biểu diễn bất khả quy $D_{ik}^{(\alpha)}$ nào đó của nhóm. Thế thì, ta được

$$R(g_0)\, D_{kl}^{(\alpha)}(g) = D_{kl}^{(\alpha)}(g g_0).$$

Nhưng theo định nghĩa của biểu diễn, vế phải của đẳng thức trên bằng

$$D^{(\alpha)}_{mk}(g)\, D^{(\alpha)}_{ml}(g_o),$$

thành thử ta được

$$R(g_o)\; D^{(\alpha)}_{kl}(g) = D^{(\alpha)}_{ml}(g_o)\, D^{(\alpha)}_{km}(g). \qquad (9\text{-}32)$$

Như thế, ta thấy rằng các phần tử ma trận $D^{(\alpha)}_{km}(g)$ với k cố định làm thành một không gian thực hiện biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ của nhóm, và biểu diễn này tương đương với biểu diễn chính quy phải. Nhưng vì có tất cả n_α giá trị cố định của chỉ số k, nên rõ rằng biểu diễn $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ có mặt trong biểu diễn chính quy phải (tổng quát) n_α lần. Ta có

$$R(g) = \sum \oplus\; n_\alpha\, D^{(\alpha)}(g).$$

Đó là những kết quả quan trọng có liên quan đến các nhóm compắc. Đối với các nhóm không compắc, vấn đề có khác. Cụ thể là người ta chứng minh rằng:

Mọi biểu diễn unita của các nhóm không compắc nhất thiết là vô số chiều. Kết quả này dẫn đến hai khó khăn. Một là khó khăn về tính toán đối với các ma trận vô số hàng và cột. Khó khăn thứ hai, chủ yếu hơn, là vấn đề xét sự tồn tại của chuẩn của các vectơ của không gian biểu diễn vô số chiều.

§ 10. TOÁN TỬ CASIMIR CỦA CÁC NHÓM NỬA ĐƠN

Một khái niệm rất quan trọng có liên quan đến các biểu diễn bất khả quy là khái niệm toán tử Casimir có nội dung như sau.

Cho một nhóm nửa đơn $\mathcal{G}$ và một biểu diễn $\mathcal{D}$ của nhóm. Như ta đã thấy ở § 8, ma trận $g_{\rho\sigma}$ là không suy biến, từ đó có thể xây dựng được ma trận $g^{\rho\sigma}$ với tính chất

$$g^{\rho\sigma}\, g_{\sigma\lambda} = \delta^\rho_\lambda .$$

Thế thì ta gọi toán tử

$$C = g^{\rho\sigma}\, D(X_\rho)\, D(X_\sigma) \qquad (10\text{-}1)$$

trong đó X_ρ là các vi tử thuộc một cơ sở nào đó của đại số Lie $\mathcal{L}$ của nhóm $\mathcal{G}$ là *toán tử Casimir* của nhóm $\mathcal{G}$, tương ứng với biểu diễn $\mathcal{D}$. Ta hãy chứng minh rằng toán tử Casimir giao hoán với mọi vi tử của biểu diễn $\mathcal{D}$. Quả vậy, ta có

$$[C, D(X_\tau)] = g^{\rho\sigma}\, [D(X_\rho)\, D(X_\sigma), D(X_\tau)] =$$

$$= g^{\rho\sigma}\, [D(X_\rho), D(X_\tau)]\; D(X_\sigma) + g^{\rho\sigma} D(X_\rho)\, [D(X_\sigma), D(X_\tau)] =$$

$$= g^{\rho\sigma}\, C^\lambda_{\sigma\tau}\, D(X_\rho)\, D(X_\lambda) + g^{\rho\sigma}\, C^\lambda_{\rho\tau}\, D(X_\lambda)\, D(X_\sigma) =$$

$$= g^{\rho\sigma}\, C^\lambda_{\sigma\tau}\, D(X_\rho)\, D(X_\lambda) + g^{\sigma\rho}\, C^\lambda_{\sigma\tau}\, D(X_\lambda)\, D(X_\rho) =$$

$$= g^{\rho\sigma}\, C^\lambda_{\rho\tau}\, [D(X_\rho)\, D(X_\lambda) + D(X_\lambda)\, D(X_\rho)].$$

Nhưng theo (8-21) ta có

$$C^{\lambda}_{\sigma\tau} = g^{\lambda\nu} C_{\nu\sigma\tau},$$

từ đó ta được

$$[C, D(X_\tau)] = g^{\rho\sigma} g^{\lambda\nu} C_{\nu\sigma\tau} [D(X_\rho)\ D(X_\lambda) + D(X_\lambda) D(X_\rho)].$$

Vì $C_{\nu\sigma\tau}$ là hoàn toàn phản ứng theo mọi cặp chỉ số, nên lượng nằm ngoài dấu ngoặc ở vế phải là phản xứng theo cặp chỉ số ρ, λ. Vì lượng trong dấu ngoặc lại đối xứng theo cặp này, nên vế phải bằng không. Như thế, toán tử Casimir giao hoán với mọi toán tử của biểu diễn $\mathcal{D}$.

Nếu biểu diễn $\mathcal{D}$ là bất khả quy thì, theo bổ đề Schur thứ hai, toán tử Casimir nói trên phải là một bội của toán tử đơn vị. Thành thử các biểu diễn bất khả quy hoàn toàn xác định giá trị của toán tử Casimir.

Như đã nêu ra ở trên (cuối § 8), với các nhóm compắc ta có thể chọn cơ sở thích hợp để ma trận $g_{\rho\sigma}$, và từ đó, ma trận $g^{\rho\sigma}$ có dạng chéo. Do đó, toán tử Casimir (10-1) sẽ có một dạng đơn giản.

Chẳng hạn, với cơ sở J_1, J_2, J_3 của đại số Lie của SU(2) hay SO(3), toán tử Casimir C_2 có dạng đơn giản

$$C_2/2 = D^2(J_1) + D^2(J_2) + D^2(J_3). \tag{10-2}$$

§ 11. BIỂU DIỄN TENXƠ

Trong chương II, ta đã đề cập đến khái niệm không gian tenxơ và tích biểu diễn. Ở đây, ta hãy trở lại các khái niệm này một cách khái quát hơn và đầy đủ hơn.

Tích kronecker các không gian

Giả sử $\mathcal{M}_1$ và $\mathcal{M}_2$ là hai không gian tuyến tính nào đó trên trường số phức C. Thế thì không gian tuyến tính sau sẽ gọi là *tích tenxơ* hay *tích Kronecker* của các không gian $\mathcal{M}_1$ và $\mathcal{M}_2$ và ký hiệu là

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \otimes \mathcal{M}_2,$$

nếu, tương ứng với mỗi cặp phần tử (x_1, x_2), $x_1 \in \mathcal{M}_1$, $x_2 \in \mathcal{M}_2$, ta có một phần tử xác định của $\mathcal{M}$, ký hiệu là $x_1 \otimes x_2$, thỏa mãn các tính chất sau

1. $x_1 \otimes x_2$ là song tuyến tính đối với x_1 và x_2, tức là [1])

$$(a\, x_1 + a'\, x'_1) \otimes x_2 = a\,(x_1 \otimes x_2) + a'\,(x'_1 \otimes x_2),$$
$$x_1 \otimes (a\, x_2 + a'\, x'_2) = a\,(x_1 \otimes x_2) + a'\,(x_1 \otimes x'_2),$$

với mọi $x_1, x'_1 \in \mathcal{M}_1$, $x_2, x'_2 \in \mathcal{M}_2$, $a, a' \in C$.

2. Mọi phần tử của không gian $\mathcal{M}$ là tổng hữu hạn của các phần tử $x_1 \otimes x_2$.

3. dim $\mathcal{M}$ = dim $\mathcal{M}_1$. dim $\mathcal{M}_2$.

Một tích tenxơ của hai không gian $\mathcal{M}_1$ và $\mathcal{M}_2$ như thế tồn tại và tồn tại duy nhất.

---

1) Ta dùng dấu « nhân » $\otimes$ vì các vectơ x_1 và x_2 có thể có bản chất hoàn toàn khác nhau. Tuy nhiên, để được đơn giản, thông thường ta bỏ dấu $\otimes$.

Nếu

$$e^1_{i_1},\ e^2_{i_2},\ [i_1 = 1,\dots, \dim \mathscr{M}_1,\ i_2 = 1,\dots, \dim \mathscr{M}_2]$$

tương ứng là các cơ sở của các không gian $\mathscr{M}_1$ và $\mathscr{M}_2$ thì cơ sở của không gian tích sẽ là

$$e^1_{i_1} \otimes e^2_{i_2}.$$

Tương tự như thế, ta định nghĩa tích tenxơ của nhiều không gian tuyến tính.

Nói riêng, tích tenxơ của k không gian $\mathscr{M}$ như nhau gọi là *lũy thừa bậc k* của không gian $\mathscr{M}$ và ký hiệu

$$\mathscr{M}^k = \underbrace{\mathscr{M} \otimes \dots \otimes \mathscr{M}}_{\text{k số hạng}}.$$

Cơ sở của không gian lũy thừa $\mathscr{M}^k$ là

$$e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k},\ (i_j = 1,\dots, n,\ j = 1,\dots, k)$$

trong đó $e_1,\dots, e_n$ là cơ sở của không gian $\mathscr{M}$, $n = \dim \mathscr{M}$.

Tenxơ phản biến của một nhóm

Bây giờ giả sử ta có một nhóm ma trận $\mathscr{G}$ các phép biến đổi trong không gian $\mathscr{M}$:

$$x'^i = a_{ik} x^k \ (\text{hay } a^i_k\ x^k),\ A = \{a_{ik}\} \in \mathscr{G},\ x = \{x^i\} \in \mathscr{M}. \qquad (11\text{-}1)$$

Thế thì, theo định nghĩa, *tenxơ phản biến hạng p* của nhóm $\mathscr{G}$ là một đại lượng biến đổi theo tích biểu diễn

$$A^{\otimes p} \equiv \underbrace{A \otimes \dots \otimes A}_{\text{p số hạng}},$$

thực hiện trong không gian lũy thừa $\mathscr{M}^p$. Điều này có nghĩa như sau. Nếu gọi

$$\psi^{i_1 \dots i_p}$$

là các tọa độ của tenxơ phản biến theo cơ sở $e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_p}$:

$$\psi \equiv \psi^{i_1 \dots i_p} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_p},$$

thì, theo định nghĩa nói trên, quy luật biến đổi của các tọa độ $\psi^{i_1 \dots i_p}$ là

$$\psi'^{i_1 \dots i_p} = a_{i_1 j_1} \dots a_{i_p j_p}\ \psi^{j_1 \dots j_p}, \qquad (11\text{-}2)$$

ma trận biến đổi

$$a_{i_1 \dots i_p;\ j_1 \dots j_p} \equiv a_{i_1 j_1} \dots a_{i_p j_p}$$

là tích trực tiếp của p ma trận biến đổi $\{a_{ik}\}$ của phép biến đổi (11-1), thực hiện biểu diễn định nghĩa của nhóm $\mathscr{G}$. Theo (11-2), tenxơ

$$\psi^{j_1 \dots j_p}$$

biến đổi như tích

$$\psi^{j_1} \dots \psi^{j_p}.$$

Tenxơ hiệp biến của một nhóm

Tương tự như thế, gọi

$$B = \{b_{ik}\}\ (\text{hay } \{b^i_k\}),\ B = (A^C)^{-1},\ b_{ik} = (a^{-1})_{ki}$$

là biểu diễn phản bộ của biểu diễn định nghĩa (11-1), thực hiện trong không gian các hàm tuyến tính trên $\mathcal{M}$, ký hiệu là $\mathcal{N}$. Nếu $f^1, \ldots, f^n$ là cơ sở của không gian $\mathcal{N}$, thì cơ sở của không gian lũy thừa bậc q

$$\mathcal{N}^q \equiv \underbrace{\mathcal{N} \otimes \cdots \otimes \mathcal{N}}_{q \text{ số hạng}}$$

của không gian $\mathcal{N}$ là

$$f^{i_1} \otimes \ldots \otimes f^{i_q},\ (i_j = 1, \ldots, n,\ j = 1, \ldots, q).$$

Theo định nghĩa, *tenxơ hiệp biến dạng q* của nhóm $\mathcal{G}$ là một đại lượng biến đổi theo tích

$$B^{\otimes q} \equiv \underbrace{B \otimes \ldots \otimes B}_{q \text{ số hạng}}$$

thực hiện trong không gian lũy thừa $\mathcal{N}^q$. Điều này có nghĩa như sau: nếu gọi

$$\Phi_{i_1 \ldots i_q}$$

là các tọa độ của tenxơ hiệpbiến trong không gian $\mathcal{N}^q$ theo cơ sở $f^{i_1} \otimes \ldots \otimes f^{i_q}$:

$$\Phi \equiv \Phi_{i_1 \ldots i_q} f^{i_1} \otimes \ldots \otimes f^{i_q},$$

thì, theo định nghĩa nói trên, quy luật biến đổi của các tọa độ $\Phi_{i_1 \ldots i_q}$ là

$$\Phi'_{i_1 \ldots i_q} = b_{i_1 j_1} \ldots b_{i_q j_q} \Phi_{j_1 \ldots j_q}, \tag{11-3}$$

ma trận biến đổi $b_{i_1 j_1} \ldots b_{i_q j_q}$ là tích trực tiếp của q ma trận $\{b_{ik}\}$.

Theo định nghĩa, tenxơ hiệp biến hạng q biến đổi như tích

$$\Phi_{i_1} \ldots \Phi_{i_q}.$$

Tenxơ hỗn hợp của một nhóm

Tương tự như trên, ta có thể định nghĩa tenxơ hỗn hợp p lần phản biến và q lần hiệp biến của nhóm $\mathcal{G}$, biến đổi theo tích biểu diễn

$$A^{\otimes p} \otimes B^{\otimes q},$$

thực hiện trong không gian tích tenxơ

$$\mathcal{M}^p \otimes \mathcal{N}^q.$$

Theo định nghĩa, *tenxơ hỗn hợp p lần phản biến và q lần hiệp biến* là tập hợp các lượng (tọa độ)

$$\psi^{j_1 \ldots j_p}_{i_1 \ldots i_q}$$

biến đổi theo quy luật

$$\psi'^{j_1 \ldots j_p}_{i_1 \ldots i_q} = a_{j_1 k_1} \ldots a_{j_p k_p} b_{i_1 l_1} \ldots b_{i_q l_q} \psi^{k_1 \ldots k_p}_{l_1 \ldots l_q}. \tag{11-4}$$

Theo định nghĩa, tenxơ hỗn hợp này biến đổi như tích

$$\psi^{j_1}\ldots\psi^{j_p}\,\Phi_{i_1}\ldots\Phi_{i_q}.$$

Theo các định nghĩa trên, cần đặc biệt lưu ý rằng khái niệm tenxơ không phải là một khái niệm chung. Trái lại, khi nói đến tenxơ, phải xác định đó là tenxơ của nhóm nào.

Phép phân tích biểu diễn tenxơ thuần nhất

Theo định nghĩa, rõ ràng không gian các tenxơ khác nhau thực hiện những biểu diễn nào đó của nhóm $\mathcal{G}$. Biểu diễn trong không gian tenxơ gọi là *biểu diễn tenxơ*. Vì biểu diễn tenxơ là một tích biểu diễn, nên nói chung các biểu diễn này là khả quy. Nếu nhóm $\mathcal{G}$ có tính chất hoàn toàn khả quy (chẳng hạn khi $\mathcal{G}$ là compắc) thì một vấn đề rất quan trọng tự nhiên đặt ra là phân biểu diễn tenxơ thành các thành phần bất khả quy. Lý thuyết biểu diễn các nhóm đối xứng đóng một vai trò rất quan trọng trong vấn đề này.

Quả vậy, cho

$$t = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \ldots & p \\ i_1 & i_2 & \ldots & i_p \end{bmatrix}$$

là một phần tử của nhóm đối xứng S_p. Ta hãy định nghĩa toán tử tuyến tính D(t) tác dụng trong không gian các tenxơ phản biến hạng p như sau:

$$D(t)\psi^{j_1\ldots j_p} = \psi^{j_{i_1}\ldots j_{i_p}}. \tag{11-5}$$

Các toán tử này tạo nên một biểu diễn của nhóm S_p trong không gian tenxơ phản biến hạng p. Quả vậy, cho một phần tử tùy ý khác

$$s = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \ldots & p \\ l_1 & l_2 & \ldots & l_p \end{bmatrix} \in S_p.$$

Theo định nghĩa (11-5) với mọi

$$\psi^{j_1\ldots j_p}$$

ta có

$$D(s)D(t)\ \psi^{j_1\ldots j_p} = D(s)\left[D(t)\ \psi^{j_1\ldots j_p}\right] =$$
$$D(s)\ \psi^{j_{i_1}\ldots j_{i_p}} = \psi^{j_{i_{l_1}}\ldots j_{i_{l_p}}} = D(st)\ \psi^{j_1\ldots j_p},$$

tức là

$$D(s)D(t) = D(st).$$

Bây giờ ta tìm tất cả các phép biến đổi giao hoán với các toán tử D(s), tức là các phép biến đổi O thỏa mãn đẳng thức

$$OD(s)\ \psi = D(s)O\psi.$$

Ta đặt

$$O = \{c_{j_1\ldots j_p\,;\ k_1\ldots k_p}\},$$

từ đó ta có thể viết đẳng thức trên theo thành phần như sau

$$c_{j_1\ldots j_p\,;\ k_1\ldots k_p}\ \psi^{k_{l_1}\ldots k_{l_p}} =$$
$$= c_{j_{l_1}\ldots j_{l_p}\,;\ k_1\ldots k_p}\ \psi^{k_1\ldots k_p},$$

hay

$$c_{j_1\ldots j_p;\; k_1\ldots k_p}\,\psi^{k_{l_1}\ldots k_{l_p}} =$$

$$= c_{j_{l_1}\ldots j_{l_p};\; k_{l_1}\ldots k_{l_p}}\,\psi^{k_{l_1}\ldots k_{l_p}}$$

Nhưng vì tenxơ ψ là tùy ý nên, từ đẳng thức trên, ta suy ra điều kiện

$$c_{j_{l_1}\ldots j_{l_p};\; k_{l_1}\ldots k_{l_p}} = c_{j_1\ldots j_p;\; k_1\ldots k_p} \qquad (11\text{-}6)$$

Các phép biến đổi O có tính chất (11-6) gọi là các phép biến đổi *lưỡng đối xứng.* Như thế, ta kết luận:

Tập hợp tất cả các phép biến đổi giao hoán với các ma trận của biểu diễn D(s) của nhóm đối xứng là lưỡng đối xứng.

Chính kết quả quan trọng này cho phép ta đặt mối quan hệ giữa các nhóm đối xứng và các biểu diễn bất khả quy của các nhóm ma trận.

Quả vậy, ma trận các phép biến đổi (11-2), cũng như (11-3), đều có dạng

$$c_{i_1\ldots i_p;\; j_1\ldots j_p} = c_{i_1 j_1}\ldots c_{i_p j_p}.$$

Vì vế phải của hệ thức trên là một tích nhiều số phức có tính chất giao hoán với nhau, nên một phép hoán vị s các chỉ số không thay đổi giá trị của vế phải và, do đó, của vế trái. Như thế, theo (11-6), ma trận thực hiện phép biến đổi các tenxơ là những ma trận lưỡng đối xứng.

Từ tính chất giao hoán đó, ta thấy rằng các tenxơ có một tính đối xứng nhất định (chẳng hạn là hoàn toàn đối xứng hay hoàn toàn phản xứng) làm thành những không gian bất biến của các phép biểu diễn đang xét. Quả vậy, ta hãy lấy đại số nhóm $\mathcal{A}_p$ của nhóm đối xứng S_p (xem chương V), gồm tất cả các phần tử a có dạng

$$a = \sum_s a(s)\, s,\ s \in S_p,\ a(s) \in C,$$

sau đó, xét không gian tenxơ phản biến con hạng p thỏa mãn phương trình

$$D(a)\,\psi^{i_1\ldots i_p} = \sum_s a(s)\, D(s)\,\psi^{i_1\ldots i_p} = 0.$$

Do tính chất giao hoán nói trên, ta có

$$\sum a(s)\, D(s)\left[O\psi^{i_1\ldots i_p}\right] = O\left[\sum a(s) D(s)\,\psi^{i_1\ldots i_p}\right] = 0,$$

tức là $O\psi^{i_1\ldots i_p}$ cũng thuộc không gian tenxơ con đó: không gian tenxơ con này là một không gian bất biến. Chẳng hạn, nếu

$$a = e - P,$$

$$P = \sum_s s/p\,!,$$

thì không gian tenxơ con bất biến tương ứng với phần tử a sẽ gồm các thành phần tenxơ thỏa mãn phương trình.

$$D(a)\,\psi^x = \{e - D(P)\}\,\psi^x = 0$$

tức là

$$\psi = D(P)\,\psi.$$

Tenxơ này chính là tenxơ đối xứng hoàn toàn và ký hiệu là $\psi^{\{i_1 \ldots i_p\}}$ hay $\psi^{i_1 \ldots i_p}$, hay

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline i_1 & & & & i_p \\ \hline\end{array}$$

Tương tự như thế, với

$$a = e - Q$$

$$Q = \sum_s \delta_s\, s/p\,!,$$

thì không gian tenxơ con bất biến được xác định bởi phương trình

$$\psi^x = D(Q)\,\psi^x$$

Tenxơ thỏa mãn phương trình này chính là tenxơ hoàn toàn phản xứng và ký hiệu là

$$\psi^{[i_1 \ldots i_p]} \text{ hay } \psi^{i_1, \ldots, i_p}$$

hay

$$\begin{array}{|c|}\hline i_1 \\ \hline \\ \hline \\ \hline i_p \\ \hline\end{array}$$

Như thế, các sơ đồ Young $\{p\}$ hay $\{1^p\}$ cho phép trích từ không gian tenxơ phản biến hạng p những không gian tenxơ con hoàn toàn đối xứng hay hoàn toàn phản xứng, tức là có những tính chất đối xứng nhất định. Nói chung, với tất cả các sơ đồ Young của nhóm S_p, ta có thể phân toàn bộ không gian tenxơ phản biến hạng p thành những không gian con tenxơ bất biến, có tính chất đối xứng nhất định tương ứng với các sơ đồ Young đó.

Chẳng hạn với tenxơ phản biến hạng ba $\psi^{i_1 i_2 i_3} \equiv \psi^{ijk}$ ta có các không gian tenxơ con bất biến sau

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline i & j & k \\ \hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline i & j \\ \hline k \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline i & k \\ \hline j \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline i \\ \hline j \\ \hline k \\ \hline\end{array}$$

ở đó, theo định nghĩa, chẳng hạn ta có

$$\begin{array}{|c|c|}\hline i & j \\ \hline k & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = [e - D(i, k)]\,[e + D(i, j)]\,\psi^{ijk} =$$
$$= [e - D(i, k)]\,[\psi^{ijk} + \psi^{jik}] =$$
$$= \psi^{ijk} + \psi^{jik} - \psi^{kji} - \psi^{jki}.$$

Hai không gian con thứ hai và thứ ba, cùng tương ứng với một sơ đồ Young $\{2,1\}$ như nhau, thực hiện những biểu diễn tương đương với nhau.

Đối với các tenxơ hiệp biến, bài toán cũng giải quyết tương tự như thế. Tất nhiên các không gian tenxơ con bất biến thu được nói chung vẫn còn là khả quy và cần phải phân thành những không gian con bất khả quy. Sự phân chia này dĩ nhiên phụ thuộc vào các đặc điểm riêng của nhóm đang xét.

Các dãy bất khả quy

Đối với nhóm ma trận lớn nhất GL (n, C), vì không có những điều kiện nào đề ra cho các phần tử ma trận a_{ik}, nên không thể phân tích nhỏ hơn nữa các không gian bất biến nói trên. Nói cách khác, các không gian tenxơ con thu được ở trên bằng các sơ đồ Young của nhóm đối xứng là những không gian bất khả quy của nhóm GL (n, C). Còn với các nhóm con của nhóm GL (n, C) ở đó có một số điều kiện nào đấy đề ra cho các phần tử ma trận (như điều kiện trực giao chẳng hạn), các không gian bất biến nói trên có thể tiếp tục phân thành nhiều không gian bất khả quy đối với các nhóm con đó.

Bây giờ ta hãy xem đối với các nhóm con nào của nhóm GL (n, C) thì các biểu diễn bất khả quy của nhóm GL (n, C) vẫn còn là bất khả quy.

Trước hết ta đưa ra nhận xét sau. Cho $\mathcal{G}_0$ là một nhóm con nào đó của nhóm $\mathcal{G}$, và xét bài toán biểu diễn hạ cảm $\mathcal{G} \downarrow \mathcal{G}_0$. Giả sử một biểu diễn bất khả quy nào đó của nhóm $\mathcal{G}$ trở nên khả quy đối với nhóm con $\mathcal{G}_0$. Thế thì, bằng một phép biến đổi cơ sở thích hợp, ta có thể đưa các ma trận biểu diễn về dạng khả quy (dạng gần chéo) cho nhóm con $\mathcal{G}_0$. Tất nhiên, cũng do giả thiết, các ma trận biểu diễn cho nhóm $\mathcal{G}$ không thể có tính chất này được. Nhưng vì các phần tử của các ma trận biểu diễn tenxơ là những đa thức thuần nhất của các phần tử của nhóm, nên rõ ràng với các ma trận biểu diễn dạng gần chéo đó, có *tồn tại những đa thức thuần nhất triệt tiêu tại các phần tử của nhóm con $\mathcal{G}_0$, nhưng lại không triệt tiêu tại các phần tử của nhóm $\mathcal{G}$.*

Bây giờ giả sử nhóm $\mathcal{G}$ là nhóm GL (n, C) và nhóm $\mathcal{G}_0$ là nhóm GL (n, R). Nếu các biểu diễn bất khả quy của nhóm GL (n, C) trở thành khả quy đối với nhóm GL (n, R) thì, theo nhận xét trên, tất yếu phải có những đa thức thuần nhất nào đó triệt tiêu tại các phần tử ma trận thực a_{ik} của nhóm GL (n, R). Nhưng, theo một định lý cơ bản của đại số học, các đa thức này cũng phải triệt tiêu tại các giá trị phức của các phần tử ma trận a_{ik}, một điều trái với nhận xét trên. Như thế, tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm GL (n, C) đều cũng bất khả quy cả đối với nhóm con GL (n, C). Tương tự như thế, vì nhóm GL (n, C) đồng thời cũng là nhóm khuếch phức của nhóm U (n), nên các biểu diễn bất khả quy của nhóm GL (n, C) cũng bất khả quy cả đối với nhóm con U (n). Cũng vì lý do này, các biểu diễn bất khả quy của nhóm SL (n, C) cũng vẫn là bất khả quy đối với nhóm SU (n).

Tiếp theo, ta xét nhóm GL (n, C) và nhóm $\mathcal{G}_0 = SL(n, C)$. Mọi phần tử $g \in GL(n, C)$ có thể viết dưới dạng $g = \alpha h$, với

$$\det h = 1, \qquad \alpha = (\det g)^{1/n}.$$

Như thế, tương ứng với mỗi phần tử g của nhóm GL (n, C) là một phần tử h của nhóm SL (n, C). Bây giờ giả sử các biểu diễn tenxơ bất khả quy của nhóm GL (n, C) trở nên khả quy đối với nhóm con SL (n, C). Thế thì, có tồn tại một số đa thức thuần nhất P nào đó, triệt tiêu tại các phần tử của nhóm SL (n, C). Nhưng với giả thiết này, ta lại có

$$P(g) = \alpha^{p+q} P(h) = 0$$

với $p + q$ là hạng của tenxơ thực hiện biểu diễn, một điều mâu thuẫn với giả thiết: Như thế các biểu diễn khả quy của nhóm GL (n, C) đều vẫn bất khả quy cả đối với nhóm con SL (n, C). Tương tự như thế, các biểu diễn bất khả quy của nhóm U (n) vẫn là bất khả quy đối với nhóm con SU (n).

Tóm lại ta có các « dãy nhóm bất khả quy di truyền » như sau

$$GL(n, C) \supset G(n, R) \supset SL(n, R), \tag{11-7}$$

$$GL(n, C) \supset U(n) \supset SU(n), \tag{11-8}$$

$$GL(n, C) \supset SL(n, C) \supset SU(n). \tag{11-9}$$

Phép phân tích biểu diễn tenxơ hỗn hợp

Trên đây, ta chỉ mới nói đến cách dùng các tenxơ hoàn toàn phản biến hoặc hoàn toàn hiệp biến để biểu diễn các nhóm. Bây giờ, ta hãy nói đến cách dùng các tenxơ hỗn hợp để biểu diễn nhóm. Muốn thế, trước hết ta hãy chứng minh rằng lượng

$$e_i f^i = \text{inv},$$

trong đó e_i là cơ sở của không gian $\mathcal{M}$ của biểu diễn đồng nhất, còn f^i là cơ sở của không gian $\mathcal{N}$ gồm các hàm tuyến tính xác định trên $\mathcal{M}$, tức là của không gian thực hiện biểu diễn phản bộ của biểu diễn đồng nhất (xem §11). Quả vậy, vì

$$e'_i = a_{ki} e_k, \quad f'^i = b_{il} f^l, \quad b_{li} = (a^{-1})_{il},$$

nên ta được

$$e'_i f'^i = a_{ki} (a^{-1})_{il} e_k f^l = \delta_{kl} e_k f^l = e_k f^k = \text{inv}. \tag{11-10}$$

Tương tự như thế, với các tenxơ ψ^i và ψ_i tuân theo các quy luật biến đổi (11-12) và (11-13):

$$\psi'^i = a_{ik} \psi^k, \quad \psi'_i = b_{il} \psi_l,$$

ta được

$$\psi'^i \psi'_i = \psi^k \psi_k = \text{inv}. \tag{11-11}$$

Từ tính chất (11-11) dễ chứng minh rằng lượng

$$\mathrm{Sp}\, \psi = \psi^i_i ,$$

gọi là *vết* của tenxơ hỗn hợp ψ^i_j, là một bất biến, vì tenxơ này, theo định nghĩa (11-4), biến đổi như tích hai tenxơ ψ^i và ψ_j. Như thế, trong không gian tenxơ hỗn hợp

$$\psi^{i_1 i_2 \dots i_p}_{j_1 j_2 \dots j_q},$$

các vết khác nhau thu được bằng cách lấy tổng theo tất cả các cặp chỉ số, một phản biến, một hiệp biến, làm thành những không gian con bất biến. Thành thử, trong quá trình tìm các không gian tenxơ con bất khả quy, trước hết ta phải tách riêng các không gian con đó, sau đó giới hạn ở những không gian con có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số. Tiếp theo, trong các không gian thu được như thế, tương tự như đối với các không gian tenxơ hoàn toàn phản biến hay hoàn toàn hiệp biến, ta tách các không gian con có những tính chất đối xứng nhất định theo các chỉ số phản biến nói riêng, cũng như theo các chỉ số hiệp biến nói riêng (dùng các sơ đồ Young).

§ 12. BIỂU DIỄN ĐA TRỊ

Tính tôpô đa liên và các biểu diễn đa trị

Vấn đề cuối cùng tương đối tinh vi của lý thuyết biểu diễn nhóm là vấn đề biểu diễn đa trị. Nguyên nhân của vấn đề là tính chất đa liên của các nhóm (xem § 4).

Nói cụ thể hơn, ta biết rằng những hàm liên tục xác định trong một không gian m — liên thông có bậc đa trị cao nhất là m. Chẳng hạn, ta lấy vòng tròn mà ta biết là một không gian ∞ — liên thông (xem § 4). Các hàm

$$f(\varphi) = e^{il\varphi}$$

xác định trên vòng tròn là những hàm liên tục. Nếu l là một số nguyên thì f (φ) là những hàm đơn trị. Nếu $l = p/q$ với p/q là một phân số tối giản, thì f (φ) lại là một hàm q — trị, vì khi ta đi trên vòng tròn một lần thì hàm f (φ) không trở về lại giá trị cũ, và chỉ trở lại giá trị cũ sau khi ta đi trên vòng tròn q lần. Nhưng nếu l là một số vô tỉ thì hàm f (φ) là ∞ — trị. Như thế, bậc đa trị tối đa của những hàm liên tục xác định trên vòng tròn là ∞, bậc này bằng bậc liên thông của không gian đó.

Vì các phần tử ma trận thực hiện các biểu diễn khác nhau của các nhóm là những hàm liên tục xác định trên không gian nhóm của các nhóm đó nên, khi không gian nhóm là m — liên thông, các phần tử ma trận đó và, từ đó, bản thân các ma trận thực hiện biểu diễn sẽ có thể là những hàm đa trị trên nhóm và có bậc đa trị tối đa bằng m.

Vị trí của các nhóm phủ phổ dụng

Tính chất đa trị có ảnh hưởng gì đến lý thuyết biểu diễn nhóm? Nếu trở lại phân tích quá trình chứng minh chẳng hạn các tính chất trực giao của các đặc biểu (là những tính chất hết sức quan trọng trong lý thuyết biểu diễn nhóm), ta sẽ thấy rằng quá trình này dựa trên tính chất đơn trị của biểu diễn mà ta đã mặc nhiên công nhận, và các suy luận sẽ không còn đúng khi các biểu diễn trở nên đa trị. Để tránh khó khăn này, có cần gạt ra ngoài các biểu diễn đa trị hay không? Như ta sẽ thấy sau này, trong các ứng dụng của lý thuyết biểu diễn nhóm vào vật lý học, chính những biểu diễn đa trị (thường gọi là biểu diễn spinơ) lại đóng vai trò rất cơ bản, mô tả những tính chất khá sâu sắc của vật chất. Thành thử, vấn đề các biểu diễn đa trị cần phải giải quyết theo một hướng khác.

Như chúng ta đã giới thiệu ở §7, trong hàng ngũ các nhóm Lie có cùng một đại số Lie nào đó, có tồn tại một nhóm đơn liên « lớn nhất » duy nhất, nhóm thương của nhóm này theo các nhóm con giao hoán rời rạc của tâm của nó sẽ cho tất cả các nhóm khác có cùng đại số Lie. Nhóm đơn liên này ta đã gọi là nhóm phủ phổ dụng. Vì là đơn liên, nhóm phủ phổ dụng chỉ có những biểu diễn đơn trị, và tất cả những biểu diễn đa trị của các nhóm cùng một đại số Lie đều trở nên đơn trị với nhóm phủ phổ dụng. Chẳng hạn, tất cả các biểu diễn đa trị của nhóm quay SO(2) trong mặt phẳng đều trở nên đơn trị với nhóm R là nhóm phủ phổ dụng của nhóm quay đó. Các biểu diễn lưỡng trị của nhóm SO (3), có không gian nhóm 2 — liên thông, sẽ trở nên đơn trị với nhóm phủ phổ dụng của nó là nhóm SU (2).

Tất nhiên, với các nhóm phủ phổ dụng, tất cả những khó khăn trong lý thuyết biểu diễn nhóm có liên quan đến tính chất đa trị của biểu diễn đều giải quyết được, nói riêng ta có thể tiến hành chứng minh một cách đúng đắn tính chất trực giao của các đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau.

Những trình bày trên đây trong toàn chương này chỉ có tính chất đại cương, có mục đích chuẩn bị một số kiến thức tối thiểu cho việc nghiên cứu một số nhóm đơn giản và cần thiết trong những ứng dụng rộng rãi của lý thuyết biểu diễn nhóm vào vật lý học. Muốn đề cập đến những ứng dụng sâu sắc hơn của lý thuyết nhóm trong lý thuyết quang phổ, lý thuyết hạt nhân hay lý thuyết các hạt cơ bản, cần phải có những nghiên cứu sâu xa hơn. Trung tâm của sự nghiên cứu này là lý thuyết các đại số Lie mà chúng ta sẽ trình bày những nét chính ở các chương sau.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [2], [4], [5], [6], [7], [10], [14], [15].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

Mặc dầu trong chương này có một số khái niệm không trực tiếp liên quan đến việc ứng dụng nhóm vào vật lý phân tử và vật lý tinh thể, những kiến thức trong chương có tính chất rất cơ bản. Vì thế đề nghị bạn đọc lưu ý đặc biệt đến nội dung của chương này.

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử.

Đọc §1 ÷ §7; §8 (chỉ cần đọc qua phần biểu diễn phó và dạng Killing) §9 ÷ §12.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể

Đọc như A.

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử

Đọc toàn chương.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân.

Đọc toàn chương

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản

Đọc toàn chương.

CHƯƠNG VIII

CÁC NHÓM SO(2), SO(3) VÀ R^2_M

§ 1. NHÓM SO(2)

Trong chương này, chúng ta sẽ vận dụng các kiến thức trình bày trong chương VII để nghiên cứu hai nhóm Lie rất cơ bản và có nhiều ứng dụng trong vật lý học: đó là các nhóm SO(2) và SO(3). Trước hết ta hãy nhắc lại một số kiến thức đã biết về các nhóm này.

Định nghĩa

Nhóm SO(2) là nhóm các phép biến đổi có định thức bằng đơn vị làm bất biến dạng toàn phương

$$x^2 + y^2 = \text{inv}.$$

Tính chất

a) $O^cO = OO^c = I_2$, ($O \in SO(2)$), nhóm SO(2) là nhóm giao hoán.

b) Vi tử của nhóm SO(2) là : $X = x\partial/\partial y - y\partial/\partial x$ (xem VII (6-4)).

c) Nhóm SO(2) là một *nhóm compắc*: tất cả các biểu diễn đều unita. Đặc biểu có dạng

$$\mathcal{D}_z^{(m)}: \chi^{(m)}(\varphi) = e^{-im\varphi}, \text{ m là số nguyên} \tag{1-1}$$

(xem II, (2-1)).

Công thức trực giao: ($dg = d\varphi/2\pi$, xem VII, § 9)

$$(\chi^{(m)}(\varphi), \chi^{(m')}(\varphi)) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{im\varphi}\, e^{-im'\varphi}\, d\varphi = \delta_{mm'}$$

d) Nhóm SO(2) là ∞ - *liên*: có tồn tại những biểu diễn ∞ - trị. Các biểu diễn này là đơn trị đối với nhóm phủ phổ dụng của nhóm SO(2): đó là nhóm R (xem VII, § 12).

e) Chuỗi Clebsch-Gordan: Dựa vào công thức đặc biểu, dễ thấy rằng

$$\mathcal{D}_z^{(m)} \otimes \mathcal{D}_z^{(n)} = \mathcal{D}_z^{(m+n)}. \tag{1-2}$$

Ta lưu ý rằng các công thức trực giao nói trên đưa đến phép khai triển Fourier thông thường theo họ hàm exp $(-im\varphi)$ (m là số nguyên):

$$f(\varphi) = \sum_n c_n e^{-in\varphi}, \quad c_n = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(\varphi)e^{in\varphi}\, d\varphi,$$

$$\sum_n |c_n|^2 = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |f(\varphi)|^2 d\varphi, \text{ (đẳng thức Parseval).}$$

(xem VII, § 9).

Các nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$ và $\mathcal{C}_{\infty h}$

Cạnh nhóm quay SO(2), ta xét thêm hai nhóm khác thu được bằng cách thêm vào nhóm SO(2) các phép phản chiếu qua các mặt phẳng đi qua trục quay (gọi là mặt phẳng thẳng đứng) và các mặt phẳng thẳng góc với trục quay (gọi là mặt phẳng ngang).

Nhóm gồm các phép quay trong mặt phẳng (x, y) — tức là thuộc nhóm SO(2) — và các phép phản chiếu qua các mặt phẳng thẳng đứng đi qua trục z gọi là nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$.

Để có những biểu diễn của nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$, theo phương pháp II, § 3, ta hãy chọn các hàm cơ sở Ψ. Trước hết, với nhóm SO(2), ta có thể chọn các hàm cơ sở sau

$$\Psi_1 = e^{im\psi} \text{ và } \Psi_2 = e^{-im\psi}.$$

Thế thì, các toán tử biểu diễn các phần tử quay theo II, § 3 sẽ là

$$C(\varphi)\, e^{im\psi} = e^{im(\psi-\varphi)} = e^{-im\varphi}\, e^{im\psi},$$

$$C(\varphi)\, e^{(-im\psi)} = e^{-im(\psi-\varphi)} = e^{im\varphi}\, e^{-im\psi}.$$

Tiếp theo, nếu chọn mặt phẳng phản chiếu σ_v là (x, z) và góc ψ kể từ mặt phẳng đó, ta được

$$\sigma_v e^{im\psi} = e^{-im\psi}, \quad \sigma_v e^{-im\psi} = e^{im\psi},$$

vì, khi ta thực hiện phép σ_v, góc ψ đổi dấu. Như thế, với các hàm cơ sở exp$(im\psi)$ và exp $(-im\psi)$, $m \neq 0$, ta có các biểu diễn hai chiều sau đây của nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$:

$$C(\varphi)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\exp(-im\varphi) & 0\\ 0 & \exp(im\varphi)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix},$$

$$\sigma_v\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix},$$

tức là

$$C(\varphi) = \begin{pmatrix}\exp(-im\varphi) & 0\\ 0 & \exp(im\varphi)\end{pmatrix}, \quad \sigma_v = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

Với trường hợp m = 0, hai hàm cơ sở nói trên trùng với nhau, và ta có biểu diễn một chiều. Nhưng vì $(\sigma_v)^2 = e$, nên toán tử σ_v có hai trị riêng là 1 và -1. Và, như thế, ta có hai loại biểu diễn một chiều của nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$ khi $m = 0$, tương ứng với các giá trị 1 hay -1 của toán tử σ_v. Các biểu diễn này tương ứng gọi là biểu diễn chẵn hay lẻ của nhóm và ký hiệu là Σ^+ hay Σ^-. Các biểu diễn này còn ký hiệu là $\mathcal{A}_1$ hay $\mathcal{A}_2$. Với $m = 1$, biểu diễn ký hiệu là $\mathcal{E}_1$ hay Π. Với $m = 2$, biểu diễn ký hiệu là $\mathcal{E}_2$ hay Δ...

Bây giờ ta hãy phân các phần tử của nhóm thành lớp. Dĩ nhiên, như thường lệ, đơn vị e làm thành một lớp. Tiếp theo, vì bằng một phép biến đổi thuộc nhóm ta có thể biến các mặt phẳng phản chiếu thẳng đứng, cái này thành cái kia, nên tất cả các phép phản chiếu σ_v đều làm thành một lớp. Cuối cùng, mỗi cặp phép quay $C(\varphi)$ và $C^{-1}(\varphi)$ làm thành một lớp do trục quay là hai phía. Theo công thức (1-3), tương ứng với các lớp đó của nhóm ta có các giá trị của đặc biểu ($m \neq 0$)

$$\begin{aligned} \chi(e) &= 2, \\ \chi(\sigma_v) &= 0, \\ \chi(C(\varphi)) &= 2\cos m\varphi . \end{aligned}$$

Ta có bảng đặc biểu

$\mathcal{C}_{\infty v}$	e	$2C(\varphi)$	σ_v
$\mathcal{A}_1$, $\Sigma^+ : z\,;\ x^2 + y^2\,;\ z^2$	1	1	1
$\mathcal{A}_2$, Σ^- :	1	1	-1
$\mathcal{E}_1$, $\Pi : (x, y)\,;\ (xz, yz)$	2	$2\cos\varphi$	0
$\mathcal{E}_2$, $\Delta : (x^2 - y^2, xy)$	2	$2\cos 2\varphi$	0
⋮	⋮	⋮	⋮
$\mathcal{E}_m$	2	$2\cos m\varphi$	0
⋮	⋮	⋮	⋮

(1-3)

Ngoài ra, theo định nghĩa, ta có nhóm

$$\mathcal{C}_{\infty h} = SO(2) \otimes \mathcal{C}_i . \tag{1-4}$$

Nhóm $\mathcal{D}_{\infty h}$

Nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$ là nhóm đối xứng của các phân tử thẳng nào không có tính chất đối xứng qua tâm quán tính. Nếu các phân tử thẳng lại có tính chất đối xứng qua tâm quán tính, thì nhóm đối xứng sẽ là nhóm

$$\mathcal{D}_{\infty h} = \mathcal{C}_{\infty v} \otimes \mathcal{C}_i .$$

Bảng đặc biểu của nhóm này thu từ các bảng đặc biểu của các nhóm $\mathcal{C}_{\infty v}$ và $\mathcal{C}_i$.

Định nghĩa

Nhóm SO(3) là nhóm các phép biến đổi có định thức bằng đơn vị làm bất biến dạng toàn phương

$$x^2 + y^2 + z^2 = \text{inv}. \tag{2-1}$$

Tính chất

a) $O^C O = O O^C = I_3$, $(O \in SO(3))$, nhóm SO(3) là nhóm không giao hoán.

b) Các vi tử của nhóm SO(3) là :

$$[X_i, X_j] = i\,\varepsilon_{ijk} X_k. \tag{2-2}$$

(xem VII (6-16).

c) Nhóm SO(3) là *một nhóm compăc*: Tất cả các biểu diễn hữu hạn đều tương đương với biểu diễn unita.

d) Nhóm SO(3) là *một nhóm nhị liên* (xem VII, § 4): Có tồn tại những biểu diễn lưỡng trị. Nhóm phủ phổ dụng là nhóm SU(2) (xem VII, § 7). Các biểu diễn lưỡng trị của nhóm SO(3) đều là đơn trị đối với nhóm SU(2).

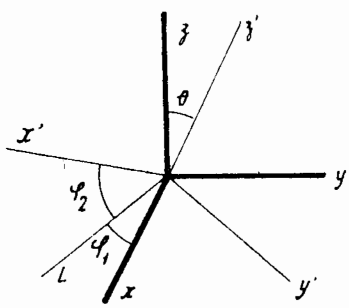
e) Nhóm SO(3) là *thành phần* (*liên thông*) đơn vị của nhóm $O(3) = SO(3) \otimes \mathcal{C}_i$ (xem VII, § 4 và I (11-4)).

e) Nhóm O(3) cũng làm bất biến dạng (2-1)).

§ 3. CÁC GÓC EULER VÀ TÍCH PHÂN BẤT BIẾN

Các góc Euler cho nhóm SO(3)

Như ta đã thấy ở trên, nhóm SO(3) có ba tham số. Trong nhiều trường hợp, các tham số này được chọn một cách đặc biệt như sau.



Hình 8-1

Ta giả sử rằng phép quay g chuyển các trục tọa độ Ox, Oy và Oz thành các trục Ox', Oy' và Oz'. Gọi Ol là giao tuyến của các mặt phẳng xOy và x'Oy', giao tuyến đó có chiều dương sao mà người quan sát, hướng theo chiều đó, sẽ thấy trục Oz phải quay một góc không quá π theo chiều thuận để có thể trùng với trục Oz'. Như thế, trục Ol được xác định một cách duy nhất (trừ trường hợp các trục Oz và Oz' trùng với nhau hay làm với nhau một góc bằng π). Gọi φ_1 là góc giữa các trục Ox và Ol, φ_2 là góc giữa các trục Ol và Ox' và, cuối cùng θ là góc giữa các trục Oz và Oz' (xem h. 8-1).

Ta thực hiện liên tiếp các phép quay

$C_z(\varphi_1)$: Ox → Ol,

$C_l(\theta)$: Oz → Oz',

$C_{z'}(\varphi_2)$: Ox → Ox', Oy → Oy', và như thế, sau ba phép quay nói trên, các trục Ox, Oy và Oz sẽ trùng với các trục Ox', Oy' và O_z. Do đó, ta có

$$g = C_{z'}(\varphi_2)\, C_l(\theta)\, C_z(\varphi_1). \tag{3-1}$$

Nhưng vì trục Ol thu được từ trục Ox bằng phép quay $C_z(\varphi_1)$, nên ma trận này thực hiện quan hệ đồng dạng sau giữa hai ma trận $C_l(\theta)$ và $C_x(\theta)$:

$$C_l(\theta) = C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)\, C_z^{-1}(\varphi_1).$$

Tương tự như thế, ta có

$$C_{z'}(\varphi_2) = [C_l(\theta)\, C_z(\varphi_1)]\, C_z(\varphi_2)\, [C_l(\theta)\, C_z(\varphi_1)]^{-1}.$$

Thành thử, với hai đẳng thức này, đẳng thức (3-1) biến thành

$$g = [C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)]\, C_z(\varphi_2)\, [C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)]^{-1}.$$

$$. \; C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)\, C_z^{-1}(\varphi_1)\, C_z(\varphi_1) = C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)\, C_z(\varphi_2). \tag{3-2}$$

Các góc θ, φ_1 và φ_2 xác định như trên gọi là các *góc Euler*. Theo (3-2), ta thấy rằng với các góc Euler thì phép quay g thuộc nhóm SO(3) phân thành ba phép quay liên tiếp nhau quanh các trục x và z. Theo định nghĩa, các góc Euler biến thiên trong các giới hạn

$$0 \leqslant \varphi_1 \leqslant 2\pi\ ,\ 0 \leqslant \varphi_2 \leqslant 2\pi\ ,\ 0 \leqslant \theta \leqslant \pi. \tag{3-3}$$

Tương ứng với các bộ ba góc Euler khác nhau là những phép quay khác nhau (các giá trị $\varphi_1 = 0$, $\varphi_1 = 2\pi$ xem là như nhau ; với φ_2 cũng thế), trừ trường hợp $\theta = 0$ và $\theta = \pi$.

Tiếp theo vì

$$C_z(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},\ C_x(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

nên, theo công thức (3-2), ta được ma trận

$$g(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = C_z(\varphi_1)\, C_x(\theta)\, C_z(\varphi_2) =$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \cos\theta\sin\varphi_1\sin\varphi_2 & -\cos\varphi_1\sin\varphi_2 - \cos\theta\sin\varphi_1\cos\varphi_2 & \sin\varphi_1\sin\theta \\ \sin\varphi_1\cos\varphi_2 + \cos\theta\cos\varphi_1\sin\varphi_2 & -\sin\varphi_1\sin\varphi_2 + \cos\theta\cos\varphi_1\cos\varphi_2 & -\cos\varphi_1\sin\theta \\ \sin\varphi_2\sin\theta & \cos\varphi_2\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \tag{3-4}$$

Từ công thức này ta thấy rằng ma trận ngược với ma trận $g(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ là $g(\pi - \varphi_2, \theta, \pi - \varphi_1)$, vì ma trận này là chuyển vị của ma trận thứ nhất (trong nhóm trực giao ma trận chuyển vị bằng ma trận ngược).

Các góc Euler cho nhóm SU(2)

Tương tự như đối với nhóm SO(3), với nhóm SU(2), đẳng cấu địa phương với SO(3), ta cũng có thể dùng các tham số gọi là tham số Euler như sau.

Giả sử phần tử

$$u = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} \quad , \quad \alpha\delta - \beta\gamma = 1,$$

thuộc nhóm SU(2). Vì

$$u^* = \begin{bmatrix} \alpha^* & \gamma^* \\ \beta^* & \delta^* \end{bmatrix} \quad , \quad u^{-1} = \begin{bmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{bmatrix},$$

nên đẳng thức $u^+ = u^{-1}$ cho $\delta = \alpha^*$ và $\gamma = -\beta^*$. Như thế các ma trận u thuộc nhóm SU(2) có dạng

$$u = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{bmatrix}. \tag{3-5}$$

Vì $\det u = 1$, nên

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \tag{3-6}$$

Ngược lại, các đẳng thức (3-5) và (3-6) cho các ma trận thuộc nhóm SU(2).

Như thế, nhóm SU(2) được hoàn toàn xác định bởi một cặp tham số phức α và β thỏa mãn đẳng thức (3-6).

Nếu đặt

$$\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2, \quad \beta = \beta_1 + i\beta_2, \quad \alpha_i \in R, \quad \beta_i \in R,$$

thì đẳng thức (3-6) cho

$$|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 + |\beta_2|^2 = 1,$$

tức là không gian nhóm của SU(2) là mặt cầu bán kính đơn vị trong không gian thực bốn chiều.

Nếu đặt

$$|\alpha| = \cos\theta/2, \quad \operatorname{Arg}\alpha = (\varphi_1 + \varphi_2)/2,$$
$$\operatorname{Arg}\beta = (\varphi_1 - \varphi_2 + \pi)/2, \tag{3-7}$$

thì ba tham số φ_1, θ và φ_2 gọi là các *góc Euler* của nhóm SU(2). Để các góc này có thể được xác định duy nhất từ đẳng thức (3-7), ta có thể đề ra các điều kiện bổ sung sau

$$0 \leqslant \varphi_1 \leqslant 2\pi, \quad 0 \leqslant \theta \leqslant \pi, \quad -2\pi \leqslant \varphi_2 \leqslant 2\pi$$
$$(\text{hay } 0 \leqslant \varphi_2 \leqslant 4\pi). \tag{3-8}$$

Từ công thức (3-6) ta suy ra $|\beta| = \sin\theta/2$ và ma trận u thuộc nhóm SU(2) có thể biểu diễn theo các góc Euler như sau

$$u = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{i\frac{(\varphi_1+\varphi_2)}{2}} & i\sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{(\varphi_1-\varphi_2)}{2}} \\ i\sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{(\varphi_2-\varphi_1)}{2}} & \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{(\varphi_1+\varphi_2)}{2}} \end{bmatrix}. \tag{3-9}$$

Tương tự như biểu thức phân tích (3-2) cho nhóm SO(3), ở đây cũng dễ thấy rằng ta có thể phân tích

$$u(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\varphi_1}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi_1}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\frac{\varphi_2}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi_2}{2}} \end{bmatrix} =$$
$$= u(\varphi_1, 0, 0)\, u(0, \theta, 0)\, u(0, 0, \varphi_2). \tag{3-10}$$

Tính chất tồn tại song song của các góc Euler cho cả hai nhóm SO(3) và SU(2) có thể giải thích dựa vào tính chất đẳng cấu địa phương giữa hai nhóm ấy, như ta đã biết. Có một điểm cần lưu ý là, theo (3-3) và (3-8), các giới hạn biến thiên cho tham số φ_2 là khác nhau đối với hai nhóm đó.

Tích phân bất biến

Bây giờ, ta nói đến tích phân bất biến. Vì các nhóm SO(3) cũng như nhóm SU(2) đều là những nhóm compắc nên, theo kết quả của VII §9, các nhóm này đều có tích phân bất biến. Hàm trọng p(g) có mặt trong tích phân bất biến được tính theo công thức VII (9-6) trong đó ta phải tính luật hợp thành Φ. Đối với nhóm SO(3), luật hợp thành đó có thể tính từ biểu diễn (3-4) của các phần tử của nhóm theo các góc Euler. Một số phép tính phức tạp dẫn đến biểu thức sau của hàm trọng cho nhóm SO(3):

$$p\,[g\,(\varphi_1, \theta, \varphi_2)] \sim \sin\theta,$$

và tích phân bất biến chuẩn hóa (tích phân Hurwitz) cho nhóm đó có dạng

$$H = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(g)\sin\theta\, d\varphi_1\, d\varphi_2\, d\theta,$$

$$dg = \frac{1}{8\pi^2}\sin\theta\, d\varphi_1 d\varphi_2\, d\theta. \tag{3-11}$$

Với nhóm SU(2), ta cũng có biểu thức tương tự như thế, nhưng các giới hạn tích phân theo tham số φ_2 phải là -2π và 2π, như đã nói ở trên. Ta có tích phân bất biến sau cho nhóm SU(2):

$$H = \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi}\int_{-2\pi}^{2\pi}\int_0^{\pi} f(g)\sin\theta\, d\varphi_1\, d\varphi_2\, d\theta,$$

$$dg = \frac{1}{16\pi^2}\sin\theta\, d\varphi_1\, d\varphi_2\, d\theta. \tag{3-12}$$

Tích phân bất biến (3-12) cũng có thể tính một cách trực tiếp như sau.

Như đã biết, tích phân M ở VII § 9 có thể viết dưới dạng

$$M = \int f(g)\, dg$$

với

$$dg = p(g)\, dc.$$

Tích phân M sẽ là bất biến bên phải nếu

$$d(gg_o) = dg, \text{ với mọi } g \in \mathcal{G}. \tag{3-13}$$

Tất nhiên tích phân đó sẽ bất biến bên trái khi nó đã bất biến bên phải, vì nhóm SU(2) là compắc.

Vì với nhóm này ta có (ký hiệu g là u)

$$u = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{bmatrix}, \quad u_o = \begin{bmatrix} \alpha_o & \beta_o \\ -\beta_o^* & \alpha_o^* \end{bmatrix},$$

nên

$$u' \equiv uu_0 = \begin{bmatrix} \alpha' & \beta' \\ -\beta'^* & \alpha'^* \end{bmatrix},$$

với

$$\alpha' = \alpha_0\alpha - \beta_0^*\beta,$$

$$\beta' = \beta_0\alpha + \alpha_0^*\beta.$$

Bây giờ ta chọn

$$du \equiv d\alpha\, d\alpha^*\, d\beta\, d\beta^*. \qquad (3\text{-}14)$$

Nhưng do $\det u_0 = 1$, nên một phép tính đơn giản cho thấy

$$d(uu^0) = du' = d\alpha'\, d\alpha'^*\, d\beta'\, d\beta'^* = \frac{D(\alpha', \alpha'^*, \beta', \beta'^*)}{D(\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*)}\, d\alpha\, d\alpha^* d\beta\, d\beta^* =$$

$$= d\alpha\, d\alpha^*\, d\beta\, d\beta^* = du,$$

nghĩa là độ đo du ở (3-14) thỏa mãn điều kiện bất biến (3-13). Tiếp theo, vì

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{\frac{i(\varphi_1+\varphi_2)}{2}} = \alpha_1 + i\alpha_2,$$

$$\beta = i\sin\frac{\theta}{2}\, e^{\frac{i(\varphi_1-\varphi_2)}{2}} = \beta_1 + i\beta_2,$$

và

$$d\alpha\, d\alpha^* = \frac{D(\alpha, \alpha^*)}{D(\alpha_1, \alpha_2)}\, d\alpha_1\, d\alpha_2 = -2i\, d\alpha_1 d\alpha_2 \text{ v.v...}$$

nên, sau một phép tính đơn giản, ta được

$$d\alpha\, d\alpha^* d\beta\, d\beta^* = \frac{1}{2}\sin\theta\, d\varphi_1 d\varphi_2 d\theta,$$

từ đó thu được tích phân bất biến (3-12) cho nhóm SU(2).

§ 4. CÁC TOÁN TỬ BÔZÔN

Định nghĩa

Bây giờ ta hãy tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(2) hay SO(3). Muốn thế, trước hết ta hãy trình bày khái niệm về các toán tử bôzôn.

Giả sử có một không gian Hilbert vô số chiều $\mathcal{H}$ nào đó. Trong không gian này, ta hãy định nghĩa toán tử a thỏa mãn điều kiện

$$[a, a^+] \equiv aa^+ - a^+a = 1, \qquad (4\text{-}1)$$

trong đó a^+ là toán tử liên hợp hecmitic của toán tử a. Toán tử a thỏa mãn hệ thức giao hoán (4-1) gọi là *toán tử bôzôn*.

Toán tử

$$N_a = a^+a, \quad N_a^+ = N_a, \qquad (4\text{-}2)$$

là một toán tử hermitic, xác định dương (vì là tích của một toán tử với toán tử liên hiệp hermitic của nó) và, theo (4-1), thỏa mãn hệ thức

$$[a, N_a] = aN_a - N_a a = aa^+a = a^+aa = [a, a^+]a = a. \qquad (4\text{-}3)$$

Ý nghĩa các toán tử a, a^+ và N_a

Bây giờ ta hãy tìm ý nghĩa của các toán tử a và a^+. Muốn thế, gọi $|n_a>$ là vectơ riêng của toán tử N_a tương ứng với trị riêng N_a:

$$N_a |n_a> = n_a |n_a>. \qquad (4\text{-}4)$$

Thế thì, theo (4-3) và (4-4), ta có

$$N_a(a|n_a>) = (aN_a - a)|n_a> = (n_a - 1)(a|n_a>),$$

tức là $a|n_a>$ cũng là một vectơ riêng của toán tử N_a, nhưng lại tương ứng với trị riêng $n_a - 1$. Thành thử toán tử a là toán tử giảm trị riêng của N_a đi một đơn vị. Trong vật lý học, toán tử a gọi là *toán tử hủy hạt*.

Tiếp tục lý luận như trên, ta thấy rằng dãy

$$|n_a>, a|n_a>, a^2|n_a>, \ldots \qquad (4\text{-}5)$$

là dãy các vectơ riêng của toán tử N_a, tương ứng với dãy

$$n_a, n_a - 1, n_a - 2, \ldots \qquad (4\text{-}6)$$

các trị riêng của toán tử đó. Nhưng vì toán tử N_a là một toán tử xác định dương, như đã nói ở trên, nên các trị riêng của nó phải không âm. Từ đó, ta thấy rằng dãy (4-6) và, từ đó, dãy (4-5) phải kết thúc tại một lúc nào đó.

Cũng lý luận tương tự như trên, từ hệ thức

$$[N_a, a^+] = a^+, \qquad (4\text{-}7)$$

suy từ hệ thức (4-3) bằng cách lấy liên hợp hermitic hai vế, ta thấy rằng $a^+|n_a>$ cũng là một vectơ riêng của toán tử N_a, nhưng lại tương ứng với trị riêng $n_a + 1$:

$$N_a(a^+|n_a>) = (n_a + 1)(a^+|n_a>). \qquad (4\text{-}8)$$

Vì lý do này, toán tử a^+ là toán tử tăng trị riêng của N_a lên một đơn vị. Trong vật lý học, toán tử a^+ gọi là *toán tử sinh hạt*. Như thế, dãy

$$|n_a>, a^+|n_a>, (a^+)^2|n_a>, \ldots \qquad (4\text{-}9)$$

là dãy các vectơ riêng của toán tử N_a, tương ứng với dãy

$$n_a, n_a + 1, n_a + 2, \ldots \qquad (4\text{-}10)$$

các trị riêng của toán tử đó. Ta lưu ý rằng dãy (4-10) và dãy (4-9) có thể kéo dài đến vô tận, khác với các dãy (4-5) và (4-6).

Do tính chất đó của các dãy (4-5) và (4-6) ta có thể định nghĩa một vectơ $|0>$ thuộc không gian $\mathcal{H}$, có tính chất

$$a|0> = 0, <0||>0 = 1. \qquad (4\text{-}11)$$

Thế thì, theo (4-11), ta có

$$N_a|0> = a^+(a|0>) = 0,$$

tức là $|0>$ là vectơ riêng của toán tử N_a, tương ứng với trị riêng bằng không. Trong vật lý học, vectơ $|0>$ gọi là *trạng thái vacum* hay, vắn tắt hơn, *vacum*.

Thành thử, theo (4-8), dãy

$$|\,0>,\ a^+\,|\,0>,\ (a^+)^2\,|\,0>,\ldots \tag{4-12}$$

là dãy các vectơ riêng của toán tử N_a, tương ứng với dãy

$$0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

các trị riêng của toán tử đó

Như thế, với định nghĩa (4-12) của vacum, các trị riêng của toán tử N_a đều là nguyên, không âm. Trong vật lý học, toán tử N_a gọi là *toán tử số hạt.*

Không gian biểu diễn

Ta lưu ý rằng không gian căng trên các vectơ thuộc dãy (4-12) là bất biến đối với các toán tử a và a^+. Đối với toán tử a^+, điều này là hiển nhiên. Muốn chứng minh điều khẳng định trên đối với toán tử a, ta hãy xuất phát từ đẳng thức sau

$$a(a^+)^n - (a^+)^n a = n(a^+)^{n-1}. \tag{4-13}$$

Với n = 1, đẳng thức này quy về định nghĩa (4-1). Thành thử, ta có thể chứng minh đẳng thức (4-13) bằng phương pháp truy toán, giả thiết đó giả sử đã đúng cho n. Nhân phải hai vế của đẳng thức (4-13) cho a^+, ta được

$$a(a^+)^{n+1} - (a^+)^n aa^+ = n(a^+)^n.$$

Số hạng thứ hai của đẳng thức này theo (4-1) có thể viết dưới dạng

$$-(a^+)^n aa^+ = -(a^+)^n (a^+a + 1) = -(a^+)^{n+1}a - (a^+)^n\,,$$

từ đó ta thu được đẳng thức (4-13) với $n \to n + 1$.

Từ đẳng thức (4-13) và định nghĩa (4-11), ta được

$$a(a^+)^n\,|\,0> = (a^+)^n\,|\,0> + n(a^+)^{n-1}\,|\,0> = n(a^+)^{n-1}\,|\,0>\,, \tag{4-14}$$

tức là khi tác dụng lên mỗi phần tử của dãy (4-12), toán tử a lại cho một phần tử khác của dãy đó : dãy (4-12) là kín đối với toán tử a. Thành thử có thể lấy không gian các vectơ (4-12) đó làm không gian Hilbert để biểu diễn các toán tử bôzôn.

Ta có thể dùng đẳng thức (4-14) để chuẩn hóa các véctơ riêng $(a^+)^n\,|\,0>$ của toán tử N_a. Quả vậy, theo (4-14), ta có

$$d_n^2 \equiv <0\,|\,a^n(a^+)^n\,|\,0> \equiv <0\,|\,a^{n-1}\,(a(a^+)^n)\,|\,0> =$$

$$= n<0\,|\,a^{n-1}\,(a^+)^{n-1}\,|\,0> = nd_{n-1}^2.$$

Vì, theo (4-11), ta có

$$d_0^2 \equiv <0\,|\ \ |\,0> = 1\,,$$

nên, theo công thức trên, ta được dần dần

$$d_1^2 = 1.d_0^2 = 1\,,\ d_2^2 = 2\,.\,d_1^2 = 2 = 2\,!,\ldots,d_n^2 = n\,!.$$

Như thế, các vectơ riêng

$$|\,n_a> = \frac{1}{\sqrt{n\,!}}\,(a^+)^n\,|\,0> \tag{4-15}$$

của toán tử N_a có chuẩn bằng 1. Mặt khác, vì các vectơ riêng $|n_a>$ và $|n_a'>$, tương ứng với các trị riêng khác nhau n_a và n_a' của toán tử hermitic N_a, là trực giao với nhau nên, cùng với đẳng thức (4-15), ta có đẳng thức

$$< n_a || n_a' > = \delta_{n_a n_a'}, \tag{4-16}$$

như thế các vectơ $|n_a>$ làm thành một hệ trực chuẩn của không gian $\mathcal{H}$.

Nói tóm lại, ta có thể lấy không gian tác dụng của các toán tử bôzôn a và a^+ là không gian Hilbert vô số chiều gồm các véctơ trực chuẩn (4-15), các vectơ này là các vectơ riêng của toán tử số hạt N_a. Trong không gian này, dĩ nhiên các toán tử a và a^+ được biểu diễn bằng những ma trận cấp ∞.

Trường hợp nhiều toán tử bôzôn

Tương tự như trên, ta có thể định nghĩa một hệ toán tử bôzôn

$$a_i\,,\ a_i^+\,,\ i = 1,\ldots, N,$$

thỏa mãn các hệ thức giao hoán

$$\left[a_i\,,\, a_j^+\right] = \delta_{ij}\,,\ \left[a_i\,,\, a_j\right] = \left[a_i^+\,,\, a_j^+\right] = 0\,. \tag{4-17}$$

Tiếp theo, ta định nghĩa các toán tử số hạt, hermitic và xác định dương

$$N_i = a_i^+ a_i\,, (i = 1,\ldots, N), \tag{4-18}$$

$$[N_i\,, N_j] = 0\,,\ (i \neq j)\,, \tag{4-19}$$

và vacum

$$|0> \equiv |0, 0,\ldots, 0>\,,\ \ a_i|0> = 0. \tag{4-20}$$

Thế thì, tương tự như trên, ta có thể suy ra biểu thức

$$|n\rangle \equiv |n_1,\ldots, n_N\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1}\ldots(a_N^+)^{n_N}}{\sqrt{n_1!\ldots n_N!}}\ |0\rangle\,, \tag{4-21}$$

cho các vectơ riêng chung trực chuẩn của các toán tử hermitic N_i giao hoán với nhau:

$$N_i|n\rangle = n_i|n\rangle\,,\ n_i \text{ nguyên, không âm}, \tag{4-22}$$

$$\langle n_1,\ldots, n_N || n'_1,\ldots,n'_N\rangle = \delta_{n_1 n'_1}\ldots\delta_{n_N, n'_N}. \tag{4-23}$$

Không gian Hilbert vô số chiều căng trên các vectơ (4-21) có thể lấy làm không gian tác dụng của các toán tử bôzôn a_i và a_i^+.

§ 5. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{A}_1$

Đại số Lie $\mathcal{A}_1$

Như đã nhận xét ở chương VII, muốn tìm các biểu diễn của một nhóm Lie, ta bắt đầu với các biểu diễn của đại số Lie của nhóm đó, sau đó chuyển sang các biểu diễn của nhóm bằng cách lấy mũ theo công thức VII (8-5).

Đối với nhóm SO(3) hay nhóm SU(2), đẳng cấu địa phương với SO(3), ta cần bắt đầu bằng các biểu diễn của đại số Lie (2-2), gọi là đại số Lie $\mathcal{A}_1$.

Toán tử Casimir C_2

Bây giờ, ta sẽ dùng các toán tử bôzôn được nghiên cứu ở § 4 để xây dựng các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{A}_1$. Nói cụ thể hơn, giả sử có các toán tử bôzôn a, b, a^+ và b^+ thỏa mãn các hệ thức giao hoán (xem công thức (4-17)).

$$[a, a^+] = 1, \quad [b, b^+] = 1,$$

$$[a, b] = [a^+, b^+] = [a, b^+] = [a^+, b] = 0. \tag{5-1}$$

Ta lập các toán tử số hạt, hermitic, xác định dương

$$N_a = a^+ a, \; N_b = b^+ b, \; [N_a, N_b] = 0. \tag{5-2}$$

Các vectơ riêng chung cho các toán tử hermitic N_a, N_b giao hoán với nhau, theo (4-21) và (4-23), là

$$| n_1, n_2 \rangle = \frac{(a^+)^{n_1} (b^+)^{n_2}}{\sqrt{n_1!}\ \sqrt{n_2!}} \; | 0 \rangle, \tag{5-3}$$

$$\langle n_1, n_2 \| n'_1, n'_2 \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}. \tag{5-4}$$

Tiếp theo ta hãy xét các toán tử

$$A_i \equiv (a^+ \; b^+) \; \frac{\sigma_i}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{5-5}$$

$$A_1 = (a^+ b + b^+ a)/2, \quad A_2 = (a^+ b - b^+ a)/2i,$$

$$A_3 = (a^+ a - b^+ b)/2, \tag{5-6}$$

tác dụng trong không gian các vectơ (4-5), ở đây σ_i là các ma trận Pauli. Dựa vào các giao hoán tử (5-1), có thể chứng tỏ rằng các toán tử A_i cũng thỏa mãn các hệ thức giao hoán của đại số Lie $\mathcal{A}_1$. Thành thử, ánh xạ

$$X_i \to A_i = D(X_i)$$

là một biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{A}_1$ trong không gian Hilbert vô số chiều các vectơ (5-3).

Biểu diễn thực hiện bởi các toán tử A_i là một biểu diễn vô hạn chiều trong không gian Hilbert các vectơ (5-3). Bài toán đặt ra là phân không gian này thành tổng trực tiếp của những không gian bất khả quy (xem VII, § 9). Muốn thế, ta hãy xét toán tử Casimir C_2 của đại số Lie $\mathcal{A}_1$, có dạng sau (xem VII, (10-2)).

$$\frac{C_2}{2} = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 . \tag{5-7}$$

Nếu đặt

$$A = (N_a + N_b)/2 = (a^+ a + b^+ b)/2 \tag{5-8}$$

thì, từ (5-6), (5-7) và (5-8), ta được

$$\frac{C_2}{2} = A\,(A + 1). \tag{5-9}$$

Nhưng vì với các biểu diễn bất khả quy, toán tử Casimir phải có những giá trị xác định nên, theo (5-9), ta thấy rằng các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{A}_1$ được đặc trưng bởi các giá trị của toán tử A, ký hiệu là j. Gọi n_1 và n_2

(nguyên, không âm) tương ứng là các giá trị của các toán tử N_a và N_b, ta được theo (5-8)

$$j = (n_1 + n_2)/2, \tag{5-10}$$

j là số nguyên hay bán nguyên, không âm.

Lượng j, đặc trưng các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{A}_1$, gọi là *trọng trưởng* của các biểu diễn bất khả quy đó. Các biểu diễn này ký hiệu là $\mathcal{D}^{(j)}$.

Cách đánh số cơ sở

Bây giờ ta hãy xác định không gian con của $\mathcal{H}$ thực hiện biểu diễn bất khả quy có trọng trưởng bằng j. Vì, theo (5-3), các vectơ của không gian biểu diễn được xác định bởi hai số là n_1 và n_2, nên riêng trọng trưởng j chưa đủ để đánh số các cơ sở của không gian biểu diễn. Tuy nhiên, ta nhận xét rằng toán tử A_3 là giao hoán với toán tử A, tức là có trị riêng m xác định đồng thời với j và bằng (xem (5-6))

$$m = (n_1 - n_2)/2. \tag{5-11}$$

Thành thử, ta có thể dùng các trị riêng m của A_3 cùng với trọng trưởng j để đánh số các vectơ cơ sở của các biểu diễn bất khả quy của $\mathcal{A}_1$. Theo (5-10) và (5-11), ta có

$$n_1 = j + m \quad , \quad n_2 = j - m,$$

từ đó, theo (5-5), các vectơ cơ sở của các không gian con của $\mathcal{H}$ thực hiện biểu diễn bất khả quy với trọng trưởng j có dạng

$$| j, m\rangle = \frac{(a^+)^{j+m}(b^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!}\,.\sqrt{(j-m)!}}\,|0\rangle\,. \tag{5-12}$$

Tiếp theo, theo (5-10) và (5-11), ta thấy rằng với một j xác định thì m lấy 2j + 1 giá trị

$$m = j,\ j-1, \ldots, -j+1,\ -j,\ |m| \leqslant j. \tag{5-13}$$

Thành thử ta có 2j + 1 vectơ $|j, m\rangle$, tức là không gian biểu diễn của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j)}$ với trọng trưởng j là 2j + 1 chiều.

Các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j)}$ của đại số Lie $\mathcal{A}_1$ theo cơ sở chính tắc.

Ta hãy tìm ma trận của các vi tử biểu diễn A_i. Trước hết, ta nhận xét rằng trong cơ sở (5-12) thì các toán tử A và A_3 là chéo:

$$A\,|j, m\rangle = j\,|j, m\rangle \quad , \quad A_3\,|j, m\rangle = m\,|j, m\rangle\,. \tag{5-14}$$

Để tính các ma trận của các toán tử a, a^+, b, b^+, ta hãy tác dụng các toán tử đó lên các vectơ cơ sở (5-12). Chẳng hạn, ta có

$$a^+\,|j, m\rangle = \frac{(a^+)^{j+m+1}(b^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!}\sqrt{(j-m)!}}\,|0\rangle =$$

$$= \sqrt{j+m+1}\,\left|j+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{5-15}$$

Từ đó, phần tử ma trận khác không duy nhất của toán tử a^+ là

$$\left\langle j+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\right|a^+|j, m\rangle = \sqrt{j+m+1}\,. \tag{5-16}$$

Tương tự như thế, ta tính được

$$\langle j+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2} \mid b^{+} \mid j, m\rangle = \sqrt{j-m+1}\ , \qquad (5\text{-}17)$$

$$\langle j-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2} \mid a \mid j, m\rangle = \sqrt{j+m}\ , \qquad (5\text{-}18)$$

$$\langle j-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2} \mid b \mid j, m\rangle = \sqrt{j-m}\ . \qquad (5\text{-}19)$$

Tiếp theo, dễ thấy rằng

$$ab^{+} \mid j, m\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\ \mid j, m+1\rangle, \qquad (5\text{-}20)$$

$$b^{+}a \mid j, m\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\ \mid j, m-1\rangle. \qquad (5\text{-}21)$$

Từ đó, theo (5-6), ta được các ma trận cần tìm của các vi tử trong biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j)}$:

$$A_3 \mid j, m\rangle = m \mid j, m\rangle\ , \quad -j \leqslant m \leqslant j,$$

$$(A_1 + iA_2) \mid j, m\rangle = \sqrt{(j+m+1)\ (j-m)}\ \mid j, m+1\rangle,$$

$$(A_1 - iA_2) \mid j, m\rangle = \sqrt{(j-m+1)\ (j+m)}\ \mid j, m-1\rangle,$$

$$(A_1 + iA_2) \mid j, j\rangle = 0, (A_1 - iA_2) \mid j, -j\rangle = 0, \qquad (5\text{-}22)$$

Các vectơ $\mid j, m\rangle$ gọi là vectơ *cơ sở chính tắc* của biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{A}_1$, tương ứng với trọng trưởng j.

Sự quan hệ giữa biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)}$ và biểu diễn đồng nhất

Với $j = 1$, chúng ta có biểu diễn $2j + 1 = 3$ chiều của đại số Lie $\mathcal{A}_1$. Ta hãy tìm các hệ thức giữa các vectơ cơ sở $\mid j, m\rangle = \mid 1, m\rangle$ chính tắc trong trường hợp biểu diễn ba chiều này và các vectơ cơ sở thông thường

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

của không gian ba chiều thực hiện biểu diễn định nghĩa — hay đồng nhất — của đại số Lie. Muốn thế, trước hết, theo (5-22), ta suy ra

$$(A_1 + iA_2) \mid 1, 0\rangle = \sqrt{2}\ \mid 1, 1\rangle\ , \quad (A_1 - iA_2) \mid 1, 0\rangle = \sqrt{2}\ \mid 1, -1\rangle\ . \qquad (5\text{-}23)$$

Mặt khác, với biểu diễn định nghĩa của SO(3) trong cơ sở e_i thông thường, ta có (xem VII § 6) các vi tử

$$A_1 = I_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad A_2 = I_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

từ đó ta được

$$(A_1 + iA_2)e_3 = -e_2 + ie_1, (A_1 - iA_2)e_3 = -e_2 - ie_1. \qquad (5\text{-}24)$$

Nhưng vì hai vectơ $\mid 1, 0\rangle$ và e_3 đều không đổi khi có phép quay quanh trục Ox^3, nên ta có thể đồng nhất $\mid 1, 0\rangle = e_3$. Giả thiết này cùng với sự đối chiếu các đẳng thức (5-23) và (5-24) với nhau cho ta các hệ thức cần tìm

$$\mid 1, 0\rangle = e_3, \mid 1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_2 + ie_1),$$

$$\mid 1, 1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_2 - ie_1). \qquad (5\text{-}25)$$

Từ các hệ thức này ta được

$$e_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\{\,|1,1\rangle + |1,-1\rangle\,\},\ e_1 = -\frac{i}{\sqrt{2}}\{\,|1,1\rangle - |1,-1\rangle\,\},$$

$$e_3 = |1,0\rangle. \tag{5-26}$$

Bây giờ cho một vectơ x tùy ý và các khai triển

$$x = x^1e_1 + x^2e_2 + x^3e_3 \equiv \eta^1|1,1\rangle + \eta^0|1,0\rangle + \eta^{-1}|1,-1\rangle.$$

Thế thì, theo (5-26), ta được ngay các hệ thức sau giữa các tọa độ của vectơ x trong hai cơ sở thông thường và chính tắc

$$\eta^0 = x^3,\quad \eta^1 = -\frac{x^1 + ix^2}{\sqrt{2}},\quad \eta^{-1} = \frac{-x^1 + ix^2}{\sqrt{2}}. \tag{5-27}$$

Biểu diễn phản bộ của biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$

Tiếp theo, ta xét các vi tử của biểu diễn phản bộ của biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$ và tìm các bất biến. Như đã nhận xét, các vi tử A_i là hermitic, do đó các ma trận $D^{(j)}(g)$, $g \in SO(3)$ hay $g \in SU(2)$ là unita. Thành thử, ta có

$$D^{C(j)}(g)^{-1} = D^{(j)*}(g),$$

Từ đó, theo VII (8-22), ta có (thay ký hiệu $B_\sigma \to A_\sigma$)

$$D^{(j)}(g) = \exp ia\sigma A_\sigma,$$

$$D^{C(j)}(g)^{-1} = \exp(-ia^\sigma A^*_\sigma)$$

tức là vi tử của biểu diễn phản bộ của biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$ bằng $-A^*_\sigma$. Với kết quả này, các công thức (5.22) cho các phần tử ma trận sau của biểu diễn phản bộ đang xét

$$A_3f^m = -mf^m,$$

$$(A_1 - iA_2)f^m = -\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\ f^{m+},$$

$$(A_1 + iA_2)f^m = -\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\ f^{m-1}, \tag{5-28}$$

ở đây f^m là cơ sở của biểu diễn phản bộ. So sánh hai đẳng thức đầu tiên của (5-28) với các đẳng thức đầu và cuối của (5-22), ta được ($e_m \equiv |j,m\rangle$)

$$f^m = a_m e_{-m} (m = -j, \ldots, j;\ a_m = \text{thừa số tỷ lệ}).$$

Thay biểu thức này vào đẳng thức cuối của (5-28), ta được

$$(A_1 + iA_2)e_{-m} = -\frac{a_{m+1}}{a_m}\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\ e_{-m+1},$$

hay đổi $m \to -m$ ta được

$$(A_1 + iA_2)e_m = -\frac{a_{-m+1}}{a_{-m}}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\ e_{m+1}.$$

Lại so sánh đẳng thức này với đẳng thức thứ hai của (5-22), ta suy ra

$$a_{-m+1} = -a_{-m}\ \text{hay}\ a_{m+1} = -a_m.$$

Như thế, ta có thể viết f^m dưới dạng

$$f^m = b(-1)^{j-m}e_{-m},\ b = \text{const}. \tag{5-29}$$

Mặt khác, tương tự như các đẳng thức VII (11-10) và (11-11), ta có

$$\sum_{m=-j}^{j} f^m e_m = \text{inv}, \quad \sum_{m=-j}^{j} \psi^m \psi_m = \text{inv}, \tag{5-30}$$

trong đó ψ^m và ψ_m tương ứng là các thành phần phản biến và hiệp biến của tenxơ ψ trong các cơ sở f^m và e_m. Tiếp theo, tương tự như (5-29) ta có

$$\psi^m = c(-1)^{j-m}\,\psi_{-m}, \quad c = \text{const}. \tag{5-31}$$

Cuối cùng thay (5-31) và (5-29) vào (5-30), ta được các bất biến sau của các nhóm SU(2), SO(3) (hay của các đại số Lie $\mathcal{A}_1$ của các nhóm đó)

$$\sum_{m=-j}^{j} (-1)^{j-m} e_m e_{-m} = \text{inv}, \tag{5-32}$$

$$\sum_{m=-j}^{j} (-1)^{j-m} \psi_m\, \psi_{-m} = \text{inv}. \tag{5-33}$$

§6. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM SO(3)

Phần tử ma trận biểu diễn theo các tham số Euler

Như đã trình bày ở VII §8, ta chuyển từ biểu diễn của đại số Lie sang biểu diễn của nhóm bằng cách lấy mũ theo công thức VII (8-5). Trong trường hợp này, vì các vi tử biểu diễn A_σ được chọn là hecmitic (biểu diễn của nhóm là unita!) như đã thấy ở §5, nên công thức (8-5) đó có dạng

$$D(g) = e^{ia^\sigma A_\sigma}. \tag{6-1}$$

Tiếp theo vì các vectơ cơ sở của không gian biểu diễn là các vectơ (5-12), nên các phần tử ma trận của biểu diễn $D^{(j)}(g)$ của nhóm SO(3) là

$$D_{mn}^{(j)}(g) \equiv \langle j, n \mid D(g) \mid j, m \rangle =$$
$$= \langle j, n \mid e^{ia^\sigma A_\sigma} \mid j\, m \rangle \tag{6-2}$$

trong đó a^σ là ba thành phần của vectơ quay trong không gian ba chiều, còn chỉ số n trỏ cột, chỉ số m trỏ hàng. Cách tính các phần tử ma trận trên với các a^σ đó khá phức tạp. Nhưng, nếu chuyển sang các tham số Euler, các phép tính được đơn giản hơn. Vì, theo công thức (3-2), với các tham số Euler mọi phép quay g của nhóm SO(3) đều có thể phân tích thành ba phép quay *thực hiện liên tiếp nhau* quanh các trục Oz và Ox, và vì các vi tử tương ứng với các phép quay này là A_3 và A_1, nên phép biểu diễn (6-1) theo các tham số Euler có dạng đơn giản (xem VII,(6-17))

$$D(g) = e^{i\varphi_1 A_3} \,.\, e^{i\theta A_1} \,.\, e^{i\varphi_2 A_3}. \tag{6-3}$$

Từ đó, các phần tử ma trận có dạng

$$D_{mn}^{(j)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \langle j, n \mid e^{(i\varphi_1 A_3)} \,.\, e^{(i\theta A_1)} \,.\, e^{(i\varphi_2 A_3)} \mid j, m \rangle \tag{6-4}$$

Một số trường hợp cụ thể

a. $j = 1/2$

Với $j = 1/2$, không gian biểu diễn là hai chiều và biểu diễn $D^{(1/2)}$ chính là biểu diễn định nghĩa của nhóm SU(2). Thành thử, ta có

$$A_i = D(X_i) = X_i = \frac{1}{2}\sigma_i.$$

Dĩ nhiên, kết quả này cũng có thể tính được theo các công thức (5-24) với $j = 1/2$, $m = 1/2$, $-1/2$. Như thế, ta có

$$D_{mn}^{(1/2)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) =$$

$$= \left\langle \frac{1}{2}, n \left| \exp\left[\frac{i}{2}\varphi_1\sigma_3\right] \exp\left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right] \exp\left[\frac{i}{2}\varphi_2\sigma_3\right] \right| \frac{1}{2}, m \right\rangle. \quad (6\text{-}5)$$

Nhưng theo định nghĩa, ta có

$$\exp\left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right] = 1 + \frac{i}{2}\theta\sigma_1 + \left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right]^2 \Big/ 2! + \left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right]^3 \Big/ 3! + $$

$$+ \left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right]^4 \Big/ 4! + \ldots =$$

$$= 1 - \left[\frac{\theta}{2}\right]^2 \Big/ 2! + \left[\frac{\theta}{2}\right]^4 \Big/ 4! + \ldots + i\sigma_1\left[\frac{\theta}{2} - \left[\frac{\theta}{2}\right]^3 \Big/ 3! + \left[\frac{\theta}{2}\right]^5 \Big/ 5! + \ldots\right].$$

vì $(\sigma_1)^2 = 1$. Tiếp theo, dựa vào các khai triển của cos và sin, từ đẳng thức trên, ta được

$$\exp\left[\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right] = \cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_1\sin\frac{\theta}{2} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}. \quad (6\text{-}6)$$

Tương tự như thế, ta được

$$\exp\left[\frac{i}{2}\varphi_1\sigma_3\right] = \begin{bmatrix} e^{\frac{i\varphi_1}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{-i\varphi_1}{2}} \end{bmatrix},$$

$$\exp\left[\frac{i}{2}\varphi_2\sigma_3\right] = \begin{bmatrix} e^{\frac{i\varphi_2}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{-i\varphi_2}{2}} \end{bmatrix}. \quad (6\text{-}7)$$

Thành thử, theo (6-5), (6-6) và (6-7), ta được ma trận của biểu diễn với trọng trưởng $j = 1/2$ của nhóm SO(3) :

$$D^{(1/2)}_{mn} = \begin{bmatrix} e^{\frac{i\varphi_1}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{-i\varphi_1}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\frac{i\varphi_2}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{-i\varphi_2}{2}} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{\frac{i(\varphi_1+\varphi_2)}{2}} & i\sin\frac{\theta}{2}\, e^{\frac{i(\varphi_1-\varphi_2)}{2}} \\ i\sin\frac{\theta}{2}\, e^{\frac{i(\varphi_2-\varphi_1)}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{(\varphi_1+\varphi_2)}{2}} \end{bmatrix}$$

hay

$$D^{(1/2)}_{mn} = e^{-i(m\varphi_1+n\varphi_2)}\, P^{(1/2)}_{mn}(\theta), \tag{6-8}$$

với

$$P^{(1/2)}_{mn}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (m, n = \pm 1/2). \tag{6-9}$$

Đó chính là ma trận của biểu diễn định nghĩa (đồng nhất) của nhóm SU(2) (xem (3-9)).

Trong công thức (6-9), m trỏ hàng với $m = 1/2$ trỏ hàng thứ nhất, và $m = -1/2$ trỏ hàng thứ hai. Còn số n trỏ cột, $n = 1/2$ trỏ cột thứ nhất, $n = -1/2$ trỏ cột thứ hai.

b) $j = 1$

Với $j = 1$, các công thức (5,22) cho

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \; A_2 = \frac{-i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6-10}$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

từ đó công thức (6-4) cho ma trận của biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3) với trọng trưởng $j = 1$:

$$D^{(1)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = e^{-i(m\varphi_1+n\varphi_2)}\, P^1_{mn}(\theta) \tag{6-11}$$

$$P^{(1)}_{mn}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\frac{\theta}{2} & -\sin^2\frac{\theta}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\sin^2\frac{\theta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\frac{\theta}{2} & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \qquad (6\text{-}12)$$

$$(m, n = -1, 0, 1),$$

($m = 1, 0, -1$ tương ứng trỏ các hàng thứ nhất, thứ hai, thứ ba ; với n cũng thế).

Nói chung, có thể chứng minh rằng các ma trận của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3) với trọng trưởng j có dạng

$$D^{(j)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = e^{-i(m\varphi_1 + n\varphi_2)} P^{(j)}_{mn}(\theta). \qquad (6\text{-}13)$$

Trong phần sau ta sẽ tính các lượng $P^{(j)}_{mn}(\theta)$.

Các biểu diễn đơn trị và lưỡng trị của nhóm SO(3)

Bây giờ ta hãy xét tính chất đơn trị và đa trị của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3). Theo (5-13), ta thấy rằng khi trọng trưởng j là nguyên thì m nguyên. Trái lại, khi j là bán nguyên thì m là bán nguyên. Tiếp theo, vì các giá trị O và 2π của các góc Euler φ_1 hay φ_2 đều cho cùng một phép quay, nên công thức (6-13) cho thấy rằng với các biểu diễn có trọng trưởng j là bán nguyên, thì tương ứng với cùng một phép quay, chẳng hạn phép quay

$$g(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = g(\varphi_1 + 2\pi, \theta, \varphi_2)$$

ta có hai biểu diễn $D^{(j)}_{mn}$ khác dấu nhau. Nói cách khác, các biểu diễn với trọng trưởng j bán nguyên là lưỡng trị. Các biểu diễn này gọi là *biểu diễn lưỡng trị* hay *biểu diễn spinơ* của nhóm SO(3). Với j nguyên, thừa số mũ ở (6-13) không đổi dấu khi tăng φ_1 (hoặc φ_2) một lượng bằng 2π, nghĩa là các biểu diễn với trọng trưởng nguyên là đơn trị. Các biểu diễn này gọi là *biểu diễn đơn trị* hay *biểu diễn tenxơ* của nhóm.

Sự xuất hiện các biểu diễn lưỡng trị, theo lý thuyết tổng quát là tất nhiên, vì nhóm SO(3) là một nhóm nhị liên.

Vì nhóm SU(2) là nhóm phủ phổ dụng của nhóm SO(3), nên các biểu diễn lưỡng trị của nhóm SO(3) trở nên đơn trị đối với nhóm SU(2).

§7. ĐẶC BIỂU CỦA CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM SO(3)

Cách suy đặc biểu bằng phương pháp biểu diễn hạ cảm

Bây giờ ta hãy tính đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3). Tất nhiên, như đã biết, mọi biểu diễn của nhóm SO(3) đều đồng thời là biểu diễn, nói chung khả quy, của nhóm con SO(2) của nó. Nhưng vì nhóm con SO(2) là một nhóm Abel, nên các biểu diễn bất khả quy của nhóm đó như đã thấy đều một chiều. Thành thử các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j)}$ của nhóm SO(3), khi hạ cảm trên nhóm con SO(2), đều phân thành tổng trực tiếp nhiều biểu diễn một chiều của nhóm con SO(2). Theo (1-1) và (5-13) ta có thể viết

$$\begin{matrix} SO(3)\downarrow SO(2): \\ D^{(j)}(C_z(\varphi)) = \end{matrix} \begin{bmatrix} e^{-ij\varphi} & & & & 0 \\ & e^{-i(j-1)\varphi} & & & \\ & & \cdots\cdots & & \\ & & & e^{-i(j-1)\varphi} & \\ 0 & & & & e^{ij\varphi} \end{bmatrix} \tag{7-1}$$

Nhưng vì đặc biểu là một hàm của lớp và tập hợp tất cả các phép quay cùng một góc φ nào đó quanh mọi trục (qua gốc 0) đều làm thành một lớp, nên tổng tất cả các phần tử trên đường chéo chính của ma trận (7-1) chính là đặc biểu của nhóm SO(3), tức là

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{m=-j}^{j} e^{-im\varphi} \quad ,$$

hay, chú ý rằng biểu thức bên phải là một cấp số nhân, ta được biểu thức cho đặc biểu của nhóm SO(3), tại lớp các phép quay một góc φ

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \frac{\sin\left[j + \frac{1}{2}\right]\varphi}{\sin\frac{1}{2}\varphi}. \tag{7-2}$$

Đồng thời, từ (7-1), ta lưu ý rằng bài toán biểu diễn hạ cảm SO(3) ↓ SO(2) cho ngay kết quả

$$SO(3)\downarrow SO(2): \mathcal{D}^{(j)} = \sum_{m=-j}^{j} \oplus \mathcal{D}_z^{(m)}. \tag{7-3}$$

Theo lý luận chung, ta có công thức trực giao của các đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy không tương đương với nhau (dg tính theo (3-11))

$$\int \chi^{(j_1)}(g)\, \chi^{(j_2)*}(g)\, dg = \delta_{j_1 j_2} \,. \tag{7-4}$$

Chuỗi Clebsch-Gordan cho nhóm SO(3)

Theo (7-2), đặc biểu của tích biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)}$$

có dạng

$$\chi^{(j_1)}(\varphi)\, \chi^{(j_2)}(\varphi) = \sum_{k=-j_1}^{j_1} e^{-ik\varphi} \sum_{l=-j_2}^{j_2} e^{-il\varphi} =$$

$$= \sum_{l=-j_2}^{j_2} \alpha^l \frac{\alpha^{j_1+1} - \alpha^{-j_1}}{\alpha - 1},$$

với j_1 giả thiết không bé hơn j_2 và $\alpha = \exp(-i\varphi)$. Nhưng vế phải của đẳng thức trên có thể viết dưới dạng sau

$$\frac{1}{\alpha - 1}\left[\alpha^{j_1+j_2+1} + \ldots + \alpha^{j_1-j_2+1} - \alpha^{j_2-j_1} - \ldots - \alpha^{-j_2-j_1}\right]$$

Gộp các cặp mũ âm và dương có tổng chỉ số bằng đơn vị lại với nhau, ta được

$$\chi^{(j_1)}(\varphi)\,\chi^{(j_2)}(\varphi) = \sum_{j_1-j_2}^{j_1+j_2} \frac{\alpha^{j+1} - \alpha^{-j}}{\alpha - 1} = \sum_{j_1-j_2}^{j_1+j_2} \chi^{(j)}(\varphi).$$

Với $j_1 \leqslant j_2$, ta cũng có một tổng tương tự như thế, nhưng bắt đầu từ $j = j_2 - j_1$. Thành thử, cuối cùng ta được chuỗi Clebsch-Gordan sau cho nhóm SO (3):

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)} = \sum_{|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \oplus\, \mathcal{D}^{(k)} \qquad (7\text{-}5)$$

§ 8. CÁC PHẦN TỬ MA TRẬN CỦA CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM SO(3)

Cách suy các vi tử từ biểu diễn chính quy

Ta hãy dùng biểu diễn chính quy để suy các phương trình vi phân và biểu thức các phần tử ma trận của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3). Trước hết, ta hãy suy biểu thức các vi tử dưới dạng toán tử đạo hàm.

Theo công thức (3-2), ta được đẳng thức

$$D^{(j)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = D^{(j)}_{mk}(C_z(\varphi_1))\, D^{(j)}_{kl}(C_x(\theta))\, D^{(j)}_{ln}(C_z(\varphi_2))$$

Nhưng, theo (7-1), ta lại có

$$D^{(j)}_{mk}(C_z(\varphi_1)) = \delta_{mk}\, e^{-im\varphi_1}, \quad D^{(j)}_{ln}(C_z(\varphi_2)) = \delta_{ln}\, e^{-in\varphi_2}$$

Thành thử các phần tử ma trận nói trên có dạng

$$D^{(j)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = e^{-i(m\varphi_1 + n\varphi_2)}\, D^{(j)}_{mn}(C_x(\theta)), \qquad (8\text{-}1)$$

tức là, theo (6-13), ta được các biểu thức

$$P^{(j)}_{mn}(\theta) = D^{(j)}_{mn}(C_x(\theta)), \qquad (8\text{-}2)$$

$$P^{(j)}_{mn}(0) = \delta_{mn}. \qquad (8\text{-}3)$$

Bây giờ ta hãy suy phương trình vi phân cho các lượng $P^{(j)}_{mn}$.

Muốn thế, ta hãy trở lại biểu diễn chính quy phải (xem VII, (9-32))

$$R(h)\, D^{(j)}_{mn}(g) = D^{(j)}_{mn}(gh) = D^{(j)}_{mk}(g)\, D^{(j)}_{kn}(h). \tag{8-4}$$

Ta hãy lần lượt chọn

$$h = C_x(a^1),\ C_y(a^2),\ C_z(a^3).$$

Gọi φ_1, θ và φ_2 là các góc Euler của phần tử g. Thế thì các góc Euler của phần tử gh trong đẳng thức (8-4) sẽ là các hàm của các tham số a^i:

$$\varphi_1(a^i),\quad \theta(a^i),\quad \varphi_2(a^i),\quad (i = 1, 2, 3)$$

và

$$\varphi_1(0) = \varphi_1,\quad \theta(0) = \theta,\quad \varphi_2(0) = \varphi_2. \tag{8-5}$$

Nói riêng, ta có với tham số a^1:

$$R(C_x(a^1))\, D^{(j)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) \equiv D^{(j)}_{mn}(\varphi_1(a^1), \theta(a^1), \varphi_2(a^1)). \tag{8-6}$$

Tiếp theo, lấy đạo hàm của hai vế của phương trình này theo tham số a^1, sau đó cho $a^1 = 0$, ta được theo định nghĩa VII (8-3)

$$A_1 D^{(j)}_{mn}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) =$$

$$= \frac{\partial D^{(j)}_{mn}}{\partial \varphi_1} \frac{\partial \varphi_1(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a=0} + \frac{\partial D^{(j)}_{mn}}{\theta} \frac{\partial \theta(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a=0} + \frac{\partial D^{(j)}_{mn}}{\partial \varphi_2} \frac{\partial \varphi_2(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a=0},$$

từ đó ta thấy rằng vi tử A_1 có dạng

$$A_1 = \frac{\partial \varphi_1(a^1)}{\partial a^1} \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial \theta(a^1)}{\partial a^1} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi_2(a^1)}{\partial a^1} \frac{\partial}{\partial \varphi_2}, \tag{8-7}$$

vấn đề tính vi tử A_1 quy về vấn đề tính các đạo hàm riêng

$$\frac{\partial \varphi_1(a^1)}{\partial a^1},\quad \frac{\partial \theta(a^1)}{\partial a^1},\quad \frac{\partial \varphi_2(a^1)}{\partial a^1}.$$

Từ đẳng thức

$$g^i_k(\varphi_1(a^1), \theta(a^1), \varphi_2(a^1)) = g^i_m(\varphi_1, \theta, \varphi_2)\, \{C_x(a^1)\}^m_k$$

dựa vào công thức (3-4), ta được ($i = 3, k = 3$)

$$\cos\theta(a^1) = -g^3_2(\varphi_1 \theta, \varphi_2) \sin a^1 + g^3_3(\varphi_1, \theta, \varphi_2) \cos a^1.$$

Lấy đạo hàm hai vế của đẳng thức này theo a^1, sau đó cho $a^1 = 0$, ta được

$$\left[-\sin\theta(a^1) \frac{\partial \theta(a^1)}{\partial a^1}\right]_{a^1=0} = -g^3_2(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = -\sin\theta \cos\varphi_2,$$

tức là

$$\frac{\partial \theta(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a^1=0} = \cos\varphi_2.$$

Tương tự như thế, ta được ($i = 3, k = 2$)

$$\frac{\partial \varphi_2(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a^1=0} = -\operatorname{ctg}\theta \sin\varphi_2,$$

và $(i = 1, k = 3)$

$$\frac{\partial\varphi_1(a^1)}{\partial a^1}\Big|_{a^1=0} = \frac{\sin\varphi_2}{\sin\theta}.$$

Cho $h = C_y(a^2)$ và $h = C_z(a^3)$, tương tự như trên, ta sẽ tính được các đạo hàm riêng cần thiết để tính các vi tử A_2 và A_3. Tóm lại ta được các công thức

$$A_1 = \cos\varphi_2 \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi_2 \frac{\partial}{\partial\varphi_2} + \frac{\sin\varphi_2}{\cos\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi_1},$$

$$A_2 = -\sin\varphi_2 \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi_2 \frac{\partial}{\partial\varphi_2} + \frac{\cos\varphi_2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi_1},$$

$$A_3 = \frac{\partial}{\partial\varphi_2}. \tag{8-9}$$

Các phương trình vi phân và biểu thức của các phần tử ma trận biểu diễn

Vì với chỉ số k cố định, các phần tử ma trận $D^{(j)}_{km}$ đóng vai trò các cơ sở vectơ của thành phần bất khả quy có trọng trưởng bằng j của biểu diễn chính quy của nhóm SO(3), nên trong các công thức (5-22), ta có thể thay các toán tử $A_1 + iA_2$, $A_1 - iA_2$ bằng các biểu thức (8-9) và đồng thời thay

$$|j, m> \to D^{(j)}_{km}.$$

Như thế, ta được các phương trình vi phân sau cho các phần tử ma trận $D^{(j)}_{km}$:

$$e^{i\varphi_2}\left[i\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi_2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\right]D^{(j)}_{km} = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,D^{(j)}_{k,m-1},$$

$$e^{-i\varphi_2}\left[i\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi_2} - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\right]D^{(j)}_{km} = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,D^{(j)}_{k,m+1} \tag{8-10}$$

Tiếp theo, thay các phần tử đó bằng các biểu thức (8-1), từ các đẳng thức (8-10), ta được các phương trình vi phân

$$\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{m\cos\theta - k}{\sin\theta}\right]P^{(j)}_{km}(\theta) = -i\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,P^{(j)}_{k,m-1}(\theta),$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m\cos\theta - k}{\sin\theta}\right]P^{(j)}_{km}(\theta) = -i\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,P^{(j)}_{k,m+1}(\theta) \tag{8-11}$$

cho các hàm $P^{(j)}_{km}$. Các phương trình này đồng thời là những hệ thức truy toán.

Giải các hệ phương trình này, ta được nghiệm

$$P^{(j)}_{km}(\theta) = \frac{(-1)^{j-k}.\,i^{m-k}}{2^j(j-k)!}\sqrt{\frac{(j-k)!(j+m)!}{(j+k)!(j-m)!}}(1-z)^{-\frac{m-k}{2}}(1+z)^{-\frac{m+k}{2}}\times$$

$$\times\frac{d^{j-m}}{dz^{j-m}}[(1-z)^{j-k}(1+z)^{j+k}],\quad (z = \cos\theta). \tag{8-12}$$

Các hàm $P^{(j)}_{km}(\theta)$ gọi là các *hàm cầu suy rộng*.

Một số hàm đặc biệt quen thuộc có quan hệ với các hàm cầu suy rộng như sau :

Đa thức Jacobi.

$$P_k^{(\alpha,\beta)}(z) \equiv \frac{(-1)^k}{2^k k!}(1-z)^{-\alpha}(1+z)^{-\beta}\frac{d^k}{dz^k}[(1-z)^{\alpha+k}(1+z)^{\beta+k}],$$

$$P_k^{(\alpha,\beta)}(z) = 2^m i^{n-m}\sqrt{\frac{(l-n)!(l+n)!}{(l-m)!(l+m)!}}(1-z)^{\frac{n-m}{2}}(1+z)^{\frac{-n-m}{2}} P_{mn}^{(l)}(z),$$

với

$$l = k + \frac{\alpha+\beta}{2}, \; m = \frac{\alpha+\beta}{2}, \; n = \frac{\beta-\alpha}{2}. \quad (8\text{-}13)$$

Đa thức Legendre phó

$$P_l^m(z) \equiv \frac{(-1)^{m+1}(1-z^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!}\frac{d^{m+l}}{dz^{m+l}}(1-z^2)^l = \frac{2^m(l+m)!}{l!}(1-z)^{2^{-\frac{m}{2}}} P_{l,m}^{(-m,-n)}$$

$$P_l^m(z) = i^m\sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_{m,0}^{(l)}(z) \; (m \geqslant 0). \quad (8\text{-}14)$$

a thức Legendre.

$$P_l(z) \equiv \frac{(-1)^l d^l}{2^l l!\, dz^l}(1-z^2)^l, \;\; P_l(z) = P_{00}^{(l)}(z). \quad (8\text{-}15)$$

Cách suy các phương trình vi phân các phần tử ma trận biểu diễn từ ıoán tử Casimir.

Ta cũng có thể suy cả phương trình vi phân cho các hàm cầu suy rộng từ toán tử Casimir như sau. Theo (5-7) và (5-9), ta có

$$A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 = -A(A+1) = -j(j+1)$$

hay, theo (8-9), sau một số phép tính đạo hàm (chú ý rằng các phần tử ma trận $D_{mn}^{(j)}$ thuộc không gian biểu diễn của biểu diễn chính quy) ta được

$$\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\left[\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2} - 2\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1\partial\varphi_2} + \frac{\partial^2}{\partial^2\varphi_1}\right]D_{mn}^{(j)} =$$

$$= -j(j+1)D_{mn}^{(j)}.$$

Thay $D_{mn}^{(j)}$ bằng biểu thức (8-1), sau một số phép tính, ta được phương trình vi phân cần tìm

$$(1-z^2)\frac{d^2P_{mn}^{(l)}(z)}{dz^2} - 2z\frac{dP_{mn}^{(l)}(z)}{dz} - \frac{m^2+n^2-2mnz}{1-z^2}P_{mn}^{(l)}(z) =$$

$$= -j(j+1)P_{mn}^{(l)}(z). \quad (8\text{-}16)$$

Trên đây, như ta đã thấy, dựa vào lý thuyết biểu diễn nhóm SO(3), chúng ta đã suy được các hệ thức truy toán (8-11) và phương trình vi phân (8-16) cho các hàm cầu suy rộng $P^{(j)}_{mk}$. Không những thế, lý thuyết biểu diễn nhóm SO(3) còn có thể cho chúng ta nhiều kết quả khác quan trọng về các hàm cầu suy rộng đó.

Chẳng hạn, theo tính chất trực giao của các phần tử ma trận $D^{(j)}_{mn}$, như đã thấy trước đây, ta có các đẳng thức (xem VII (4-24)).

$$\int D^{(l)}_{mn}(g)\, D^{(s)*}_{pq}(g)\, dg = \frac{1}{2l+1}\,\delta_{ls}\,\delta_{mp}\,\delta_{nq},$$

Từ đó, vì theo (3-11)

$$dg = \frac{1}{8\pi^2}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi_1\, d\varphi_2,$$

ta được các hệ thức trực giao

$$\int_0^\pi P^{(l)}_{mn}(\cos\theta)\, P^{(s)*}_{mn}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \frac{2}{2l+1}\,\delta_{ls}, \qquad (8\text{-}17)$$

hay, với $z = \cos\theta$

$$\int_{-1}^{1} P^{(l)}_{mn}(z)\, P^{(s)*}_{mn}(z)\, dz = \frac{2}{2l+1}\,\delta_{ls}. \qquad (8\text{-}18)$$

Vì, như đã biết, các phần tử ma trận

$$\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\, D^{(l)}_{mn}$$

làm thành một hệ hàm trực chuẩn đầy đủ đối với dg, nên với mọi hàm f(g) có bình phương khả tích, ta luôn luôn có cái khai triển Fourrier

$$f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \sum_{l}\ \sum_{m,\, n=-l}^{l} a^{(l)}_{mn}\, e^{-i(m\varphi_1 + n\varphi_2)}\, P^{(l)}_{nn}(\cos\theta),$$

trong đó các hệ số Fourrier có dạng

$$a^{(l)}_{mn} = \frac{(-1)^{m-n}(2l+1)}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\varphi_1, \theta, \varphi_2)\, e^{i(m\varphi_1+n\varphi_2)}\ \times$$

$$\times\ P^{(l)}_{mn}(\cos\theta)\,.\sin\theta\, d\theta\, d\varphi_1\, d\varphi_2). \qquad (8\text{-}19)$$

Cùng vì tính chất đầy đủ đó, ta có đẳng thức Parseval

$$\sum_{l} \frac{1}{2l+1} \sum_{m,\,n=-l}^{l} \left| a_{mn}^{(l)} \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \left| f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) \right|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi_1 \, d\varphi_2 \,. \tag{8-20}$$

Ta cũng có những kết quả tương tự như thế cho trường hợp riêng của các hàm cầu suy rộng là các hàm Legendre.

Cần lưu ý rằng với lý thuyết biểu diễn nhóm, ta có thể trình bày tất cả các hàm đặc biệt được biết một cách nhất quán. Sự trình bày các tính chất của các hàm mũ và các hàm cầu nói trên thông qua lý thuyết biểu diễn các nhóm SO(2) và SO(3) là những ví dụ cụ thể và sáng sủa.

§ 9. ĐẠI SỐ SPINƠ CỦA NHÓM SO(3)

Spinơ phản biến

Qua các công thức (3-9), (6-8) và (6-9), ta đã thấy rằng ma trận thực hiện biểu diễn $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ của nhóm SO(3) chính là ma trận thực hiện biểu diễn định nghĩa của nhóm SU(2):

$$u = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi_1+\varphi_2}{2}} & i\sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi_1-\varphi_2}{2}} \\ i\sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi_2-\varphi_1}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\varphi_1+\varphi_2}{2}} \end{bmatrix}. \tag{9-1}$$

Biểu diễn này là hai chiều, có chiều bé hơn chiều biểu diễn định nghĩa của chính nhóm SO(3), và gọi là *biểu diễn spinơ* cơ bản của nhóm đó.

Theo định nghĩa, mọi đại lượng Ψ^i $(i = 1, 2)$, biến đổi theo biểu diễn $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ nói trên, gọi là *spinơ phản biến* hạng nhất của nhóm. Ta lưu ý rằng spinơ hạng nhất của nhóm SO(3) chính là tenxơ phản biến hạng nhất của nhóm SU(2) (xem VII § 11).

Spinơ hỗn hợp

Tương tự như thế, các tenxơ hỗn hợp p lần phản biến và q lần hiệp biến của nhóm SU(2) gọi là *spinơ hỗn hợp p lần phản biến và q lần hiệp biến* của nhóm SO(3). Vì đối với nhóm SU(2) ta có

$$(u^C)^{-1} = u^*,$$

nên, theo công thức VII (11-4), ta có các công thức biến đổi sau cho các spinơ hỗn hợp của nhóm SO(3)

$$\Psi'^{i_1 \ldots i_p}_{j_1 \ldots j_q} = u_{i_1 k_1} \ldots u_{i_p k_p} \, u^*_{j_1 l_1} \ldots u^*_{j_q l_q} \, \Psi^{k_1 \ldots k_p}_{l_1 \ldots l_q} \,. \tag{9-2}$$

Lấy liên hợp phức hai vế của (9-2) ta thấy rằng

$$\left[\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_p}_{j_1 j_2 \cdots j_q}\right]^* = \Psi^{j_1 j_2 \cdots j_q}_{i_1 i_2 \cdots i_p} . \tag{9-3}$$

Nói riêng, ta có hệ thức sau giữa các spinơ phản biến và hiệp biến hạng nhất

$$(\Psi^i)^* = \Psi_i . \tag{9-4}$$

Trong số các spinơ hạng cao, có những spinơ có thành phần không thay đổi bởi các phép biến đổi thuộc nhóm SU(2). Trước hết là spinơ

$$\Psi^i_j = \delta^i_j .$$

Tiếp theo là các spinơ phản xứng hạng hai

$$\varepsilon^{ik} , \varepsilon_{ik} , (-\varepsilon^{12} = \varepsilon_{12} = 1), \tag{9-5}$$

$$\varepsilon^{ik} \varepsilon_{kl} = \delta^i_l . \tag{9-6}$$

Với các spinơ phản xứng này, ta có thể nâng hoặc hạ chỉ số như sau

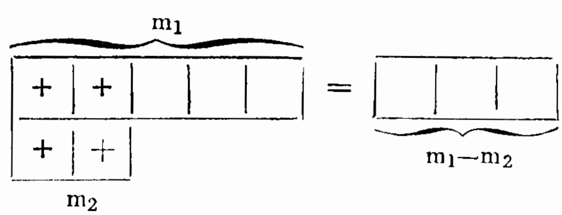
$$\Psi^i_{jl\ldots} = \varepsilon^{ik} \Psi_{kjl\ldots}$$

$$\Psi^{jl\ldots}_i = \varepsilon_{ik} \Psi^{kjl\ldots} .$$

Phép nâng và hạ chỉ số chẳng qua là những phép nhân tenxơ với các tenxơ ε^{ik} và ε_{ik} và một phép co (tức là phép lấy tổng theo cặp chỉ số, một trên, một dưới).

Spinơ bất khả quy

Những spinơ bất khả quy của nhóm SO(3) là những tenxơ bất khả quy của nhóm SU(2), theo định nghĩa của spinơ của SO(3). Nhưng theo dãy bất khả quy GL(2, C) $\supset$ SU(2), các tenxơ bất khả quy của SU(2) được đặc trưng bởi những sơ đồ Young hai hàng như đối với GL(2,C). Mặt khác, do các tenxơ hoàn toàn phản xứng của SU(2) là inv, nên trong các sơ đồ Young của biểu diễn của nhóm đó ta có thể bỏ những cột có hai hàng. Thành thử, các sơ đồ Young của những biểu diễn bất khả quy của SU(2) chỉ có một hàng, nghĩa là hoàn toàn đối xứng. Ta có thể mô tả kết quả trên bằng đẳng thức sau

SU(2) : 

$$\{m_1, m_2\} = \{m_1 - m_2\} \tag{9-7}$$

Kết quả trên cho thấy rằng các spinơ bất khả quy của nhóm SO(3) là hoàn toàn đối xứng. Chúng ta hãy xem các spinơ phản biến (hay hiệp biến) hạng p thực hiện những biểu diễn bất khả quy nào của nhóm SO(3)? Muốn thế, chỉ cần tính số thành phần độc lập của các spinơ đó. Các thành phần này là:

— thành phần có p chỉ số bằng 1 và 0 chỉ số bằng 2,

— thành phần có p—1 chỉ số bằng 1 và 1 chỉ số bằng 2,

. . . .

— thành phần có 0 chỉ số bằng 1 và p chỉ số bằng 2.

Tất cả là p + 1 thành phần độc lập. Thành thử không gian biểu diễn tương ứng có p + 1 chiều: biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3) thực hiện bởi các spinơ phản biến (hay hiệp biến) hoàn toàn đối xứng hạng p là biểu diễn có trọng trưởng j = p/2.

Ta có thể viết

$$\{p\} = \mathcal{D}^{(p/2)} . \tag{9-8}$$

Chẳng hạn, với spinơ phản biến hoàn toàn đối xứng hạng 3, chúng ta có bốn thành phần độc lập sau: $\psi^{\{111\}}$, $\psi^{\{112\}}$, $\psi^{\{122\}}$, $\psi^{\{222\}}$

Vì spinơ $\psi^{i_1 i_2 i_3}$ biến đổi như tích $\psi^{i_1}\psi^{i_2}\psi^{i_3}$ nên, nếu chọn

$$\psi^1 = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right>, \ \psi^2 = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right>,$$

ta có thể viết (theo IV (13-6) và XI (5-24) chương XI)

$$\psi^{\{1\,1\,1\}} = \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right>, \qquad \psi^{\{1\,1\,2\}} = \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right>,$$

$$\psi^{\{1\,2\,2\}} = \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right>, \qquad \psi^{\{2\,2\,2\}} = \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right>.$$

Nói chung, với spinơ hoàn toàn đối xứng $\psi^{\{i_1 \dots i_p\}}$, ta có thể viết

$$\psi^{\{\overbrace{1 \ \dots \ 1}^{p/2+s \text{ cái}} \ \overbrace{2 \ \dots \ 2}^{p/2-s \text{ cái}}\}} = \left|\frac{p}{2}, \frac{s}{2}\right>. \tag{9-9}$$

Nếu muốn dùng các spinơ hỗn hợp để biểu diễn nhóm SO(3), như đã nêu lên ở VII § 11, cần phải chọn các spinơ hoàn toàn đối xứng đối với các chỉ số phản biến nói riêng cũng như đối với các chỉ số hiệp biến nói riêng, và có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số, một phản biến, một hiệp biến. Tất nhiên, các spinơ hỗn hợp này là tương đương với các spinơ thuần túy phản biến đối xứng hay thuần túy hiệp biến đối xứng, và các loại spinơ này đều là spinơ bất khả quy của nhóm SU (2).

Cuối cùng từ (9-8) và (7,5) ta có thể viết chuỗi Clebsch — Gordan dưới dạng sau

$$\{p\} \otimes \{q\} = \{p+q\} \oplus \{p+q-2\} \oplus \{p+q-4\} \oplus \dots \oplus \{|p-q|\}. \tag{9-10}$$

Tenxơ phản biến

Theo định nghĩa ở VII § 11, tenxơ phản biến hạng p của nhóm SO(3) là một đại lượng biến đổi theo tích biểu diễn $A^{\otimes p}$ của biểu diễn định nghĩa A của nhóm, tức là của biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)}$ của nhóm.

Vì với nhóm SO(3), cũng như với nhóm SO(n) nói chung, biểu diễn $(O^{C})^{-1}$, phản bộ của biểu diễn định nghĩa, trùng với biểu diễn định nghĩa, nên ở đây các tenxơ phản biến và hiệp biến là tương đương với nhau. Như thế, với nhóm SO(n) chỉ có một loại tenxơ. Đó là đặc điểm thứ nhất của nhóm SO(n).

Tenxơ bất khả quy

Đặc điểm thứ hai của nhóm này có nội dung như sau. Cũng do tính chất trên

$$O^{C}O = I_3\ ,\ a_{ik}a_{il} = \delta_{kl}\ ,\ a_{ik} = \{O\}_{ik}$$

các tenxơ có một tính chất đối xứng nhất định không làm thành những không gian bất khả quy của nhóm. Quả vậy, nếu ta cho hai chỉ số $i_1 = i_2 = i$ trong tenxơ

$$\psi^{i_1 i_2 i_3 \cdots i_p} \tag{10-1}$$

rồi lấy tổng theo i, nghĩa là thực hiện một phép co theo một cặp chỉ số đồng loại (khác với phép co theo một cặp chỉ số khác loại như đối với nhóm U(n)) thì, từ công thức biến đổi VII, (11-2), ta dễ thấy rằng tenxơ thu được biến đổi như sau

$$\psi'^{iii_3\cdots i_p} = a_{ij_1}a_{ij_2}a_{i_3j_3}\cdots a_{i_pj_p}\ \psi^{j_1j_2j_3\cdots j_p} =$$

$$= \delta_{j_1j_2}a_{i_3j_3}\cdots a_{i_pj_p}\ \psi^{j_1j_2j_3\cdots j_p} = a_{i_3j_3}\cdots a_{i_pj_p}\ \psi^{iij_3\cdots j_p}. \tag{10-2}$$

Do vế phải của quy luật biến đổi này chỉ chứa ma trận tích lũy thừa p—2 của A:

$$\{a_{i_3j_3}\cdots a_{i_pj_p}\} = \underbrace{A\otimes\cdots\otimes A}_{p-2 \text{ số hạng}}$$

nên rõ ràng tenxơ (10-1) chỉ là một tenxơ hạng p—2. Tương tự như thế, tenxơ

$$\psi^{iijji_5\cdots i_p} \tag{10-3}$$

chỉ là một tenxơ hạng p—4, v.v... Đồng thời, theo (10-2), ta thấy rằng tenxơ $\psi^{iii_3\cdots i_p}$ làm thành một không gian con bất biến của không gian tenxơ hạng p. Trong không gian con bất biến này, tenxơ (10-3) lại làm một không gian con bất biến khác. Tất nhiên, các không gian bất khả quy không thể chứa các không gian con bất biến đó, theo định nghĩa. Do đó, các không gian tenxơ bất khả quy của nhóm SO(3) (cũng như của các nhóm SO(n)) chỉ có thể gồm các tenxơ có tính chất đối xứng nhất định như thường lệ, đồng thời có vết theo mọi cặp chỉ số bằng không.

Ví dụ

Để làm ví dụ, ta hãy lấy một tenxơ hạng hai có tính chất đối xứng nhất định, tenxơ đối xứng hạng hai chẳng hạn ψ^{ik}. Tenxơ này có 6 thành phần độc lập.

$$\psi^{11},\ \psi^{22},\ \psi^{33},\ \psi^{12},\ \psi^{23},\ \psi^{31}.$$

Theo lý luận trên, không gian tenxơ 6 chiều của tenxơ này không phải là bất khả quy, vì có chứa một không gian con bất biến tenxơ hạng 2—2=0, ($p = 2$), dạng ψ^{jj}. Do đó ta cần thực hiện sự phân tích

$$\psi^{ik'} = \left\{\psi^{ik'} - \frac{1}{3}\delta^{ik}\psi^{jj}\right\} + \frac{1}{3}\delta^{ik}\psi^{jj}, \quad (\psi^{ik'} \equiv \psi^{\{ik\}})$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3)$$

Thành phần thứ nhất

$$\tilde{\psi}^{ik'} \equiv \psi^{ik'} - \frac{1}{3}\delta^{ik}\psi^{jj}$$

là một tenxơ đối xứng hạng hai có vết bằng không: $\tilde{\psi}^{jj'} = 0$. Tenxơ này thực hiện một biểu diễn bất khả quy nào đó của nhóm SO(3) trong không gian 5 chiều, Đó chính là biểu diện $\mathcal{D}^{(2)}$). Thành phần thứ hai $\psi^{jj'}$ thực hiện biểu diễn một chiều $\mathcal{D}^{(0)}$. Vấn đề phân tích không gian tenxơ thành không gian bất khả quy kết thúc.

Nếu ta xuất phát từ tenxơ hạng hai ψ^{ik} biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)} \otimes \mathcal{D}^{(1)}$. ta có thể sơ bộ phân tích tenxơ này thành các thành phần có tính chất đối xứng nhất định như sau:

$$\psi^{ik} = \psi^{ik'} + \psi^{i'k}, \quad (\psi^{i'k} \equiv \psi^{[ik]}),$$

trong đó thành phần thứ hai là phản xứng. Muốn tìm biểu diễn tương ứng với tenxơ này, ta viết

$$\psi^{ik} = \tilde{\psi}^{ik'} + \frac{1}{3}\delta^{ik}\psi^{jj} + \psi^{i'k}, \tag{10-4}$$

và, tương ứng với cái phân tích này, ta viết (theo (7-5)) chuỗi

$$\mathcal{D}^{(1)} \otimes \mathcal{D}^{(1)} = \mathcal{D}^{(2)} \oplus \mathcal{D}^{(0)} \oplus \mathcal{D}^{(1)}. \tag{10-5}$$

So sánh hai đẳng thức này, ta thấy rằng tenxơ phản xứng $\psi^{i'k}$ biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)}$ của nhóm. Điều này cũng có thể thấy ngay, chú ý rằng tenxơ phản xứng này có ba thành phần độc lập với nhau.

§11. PHÉP BIỂU DIỄN NHÓM O(3)

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm O(3)

Như đã biết, nhóm O(3) (nhóm trực giao ba chiều) là nhóm làm bất biến dạng toàn phương (2-1). Mặt khác ta lại có

$$O(3) = SO(3) \otimes \mathcal{C}_i,$$

từ đó, theo II § 21, hệ thống tất cả các biểu diễn bất khả quy của nhóm O(3) là tích trực tiếp của các biểu diễn bất khả quy của các nhân tử SO(3) và $\mathcal{C}_i$.

Vì nhóm $\mathcal{C}_i$ chỉ có hai biểu diễn bất khả quy một chiều là $\mathcal{A}_g$ và $\mathcal{A}_u$, nên hệ thống tất cả các biểu diễn bất khả quy của O(3) là

$$\mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{A}_g = \mathcal{D}^{(j)}\mathcal{A}_g \text{ và } \mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{A}_u = \mathcal{D}^{(j)}\mathcal{A}_u.$$

Với $j = l$ nguyên, ta ký hiệu

$$\mathcal{D}_g^{(l)} \equiv \mathcal{D}^{(l)+} = \mathcal{D}^{(l)}\mathcal{A}_g, \quad \mathcal{D}_u^{(l)} \equiv \mathcal{D}^{(l)-} = \mathcal{D}^{(l)}\mathcal{A}_u$$

tức là tại các phần tử $g \in SO(3)$ và $h = gI = Ig$:

$$D_g^{(l)}(g) \equiv D^{(l)+}(g) = D^{(l)}(g),$$

$$D_g^{(l)}(h) \equiv D^{(l)+}(h) = D^{(l)}(g)\,\mathcal{A}_g(I) = D^{(l)}(g), \tag{11-1}$$

$$D_u^{(l)}(g) \equiv D^{(l)-}(g) = D^{(l)}(g),$$

$$D_u^{(l)}(h) \equiv D^{(l)-}(h) = D^{(l)}(g)\,\mathcal{A}_u(I) = -D^{(l)}(g), \tag{11-2}$$

tức là ta có hai loại biểu diễn đơn trị của nhóm O(3), xuất phát từ loại biểu diễn đơn trị của nhóm SO(3).

Với j *bán nguyên*, vấn đề có khác. Trong trường hợp này, vì tương ứng với mỗi phần tử g của nhóm, ta có hai ma trận biểu diễn

$$g \to \varepsilon D^{(j)}(g),\ \varepsilon = \pm 1,\ g \in SO(3)$$

và vì giá trị ε hoàn toàn không phụ thuộc vào chỗ ta chọn biểu diễn $\mathcal{A}_g$ hay $\mathcal{A}_u$ của nhóm $\mathcal{C}_i$, nên sự đóng góp của các biểu diễn này về dấu của ma trận biểu diễn như ở (11-1) và (11-2) trở nên không có nghĩa. Thành thử, tương ứng với mỗi $h = gI$ ta luôn luôn có hai ma trận ngược dấu nhau và, do đó, ta chỉ có một biểu diễn lưỡng trị của nhóm O(3).

Tóm lại các biểu diễn bất khả quy của nhóm O(3) là

$$\mathcal{D}_g^{(l)} \equiv \mathcal{D}^{(l)+},\quad \mathcal{D}_u^{(l)} \equiv \mathcal{D}^{(l)-},\quad \text{khi } l \text{ nguyên}.$$

$$^{(j)},\quad \text{khi } j \text{ bán nguyên}.$$

Dĩ nhiên ta có:

$$O(3) \downarrow SO(3): \mathcal{D}^{(l)\pm} = \mathcal{D}^{(l)}. \tag{11-3}$$

Tenxơ và giả tenxơ

Do ta có hai loại biểu diễn của nhóm O(3) khi j nguyên nên, trong trường hợp này, cần phải tiến hành phân loại xa hơn các tenxơ của nhóm SO(3). Cụ thể là ta có các định nghĩa sau.

Vô hướng không thay đổi dấu khi có phép nghịch đảo I gọi là *vô hướng thực sự*. Vô hướng thay đổi dấu khi có phép nghịch đảo I gọi là *giả vô hướng*, Vô hướng thực sự tuân theo phép $\mathcal{D}^{(0)+}$ của nhóm O(3), còn giả vô hướng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(0)-}$.

Tương tự như thế, đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)-}$ gọi là *vectơ (thực sự)* hay *vectơ cực*, còn đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)+}$ gọi là *giả vectơ* hay *vectơ trục*.

Đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(2)+}$ gọi là *tenxơ (thực sự) hạng hai*. Đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(2)-}$ gọi là *giả tenxơ hạng hai v.v...*

Ta hãy lấy một vài ví dụ.

Điện tích e, khối lượng M là những vô hướng thực sự, vì không đổi dấu khi có phép nghịch đảo I tác dụng lên. Thế hàm điện từ A_0 cũng là một vô hướng thực sự.

Các lượng: di chuyển **r**, vận tốc **v** = d**r**/dt, xung lượng **p** = M**v**, gia tốc **g** = d**v**/dt, lực **F** = M**g**, thế hàm điện từ **A**, toán tử Nabla $\nabla = \partial/\partial \mathbf{r}$, cường độ điện trường **E** là những vectơ thực sự, đổi dấu khi có I tác dụng lên.

Các lượng: mômen xung lượng **L** = [**r** × **p**], cường độ từ trường **B** = =[∇ × A], spin **s**, vectơ quay **Ω** (**v** = [**Ω** × **r**]) là những giả vectơ hay vectơ trục.

Tất nhiên các tích vô hướng $\triangle = (\nabla, \nabla)$, (**p**, **v**), (**L**, **s**), div**A** = (∇, **A**)... đều là những vô hướng thực sự.

Trái lại, các tích vô hướng (**L**, **p**), (∇, **L**)... đều là những giả vô hướng.

Chuỗi Clebsch-Gordan

Theo định nghĩa (11-1) và (11-2), ta có ngay các chuỗi sau

$$\mathscr{D}^{(j)+} \otimes \mathscr{D}^{(j')+} = \mathscr{D}^{(j)-} \otimes \mathscr{D}^{(j')-} = \sum_{l=|j-j'|}^{j+j'} \oplus \mathscr{D}^{(l)+},$$

j, j' là số nguyên (11-4)

$$\mathscr{D}^{(j)+} \otimes \mathscr{D}^{(j')-} = \mathscr{D}^{(j)-} \otimes \mathscr{D}^{(j')+} = \sum_{l=|j-j'|}^{j+j'} \oplus \mathscr{D}^{(l)-},$$

j, j' là số nguyên (11-5)

$$\mathscr{D}^{(j)+} \otimes \mathscr{D}^{(j')} = \mathscr{D}^{(j)-} \otimes \mathscr{D}^{(j')} = \sum_{k=|j-j'|}^{j+j'} \oplus \mathscr{D}^{(k)}, \quad (11\text{-}6)$$

j là số nguyên, j' là bán nguyên

Khi nhân hai biểu diễn lưỡng trị với nhau, vấn đề có phức tạp hơn. Ta có hai khả năng loại trừ nhau sau đây

$$\mathscr{D}^{(j)} \otimes \mathscr{D}^{(j')} = \sum_{l=|j-j'|}^{j+j'} \oplus \mathscr{D}^{(l)+},$$

$$\mathscr{D}^{(j)} \otimes \mathscr{D}^{(j')} = \sum_{l=|j-j'|}^{j+j'} \oplus \mathscr{D}^{(l)-}. \quad (11\text{-}7)$$

và tùy theo trường hợp cụ thể mà chọn khả năng này hoặc khả năng kia (tùy theo cách lập các tích biểu diễn).

Ví dụ: Khi nhân vectơ cực **r** với vectơ cực **p**, đều tuân theo biểu diễn $\mathscr{D}^{(1)-}$ như đã nói ở trên, ta có chuỗi Clebsch-Gordan thứ hai ở (11-4):

$$\mathscr{D}^{(1)-} \otimes \mathscr{D}^{(1)-} = \mathscr{D}^{(2)+} \oplus \mathscr{D}^{(0)+} \oplus \mathscr{D}^{(1)+}.$$

Tuân theo biểu diễn thứ ba của biểu thức phân tích này (xem (10-5)) là tenxơ phản xứng

$$T^{[12]} = x^1p^2 - p^2x^1,\ T^{[23]},\ T^{[31]}.$$

Đó chính là vectơ mômen xung lượng **L**, một giả vectơ, như đã thấy ở trên. Tenxơ T^{ii} tuân theo biểu diễn $\mathscr{D}^{(0)+}$, còn tenxơ đối xứng

$$x^ip^k - \frac{\delta_{ik}}{3} x^lp^l$$

có vết bằng không tuân theo biểu diễn $\mathscr{D}^{(2)+}$.

§ 12. CÁC BIỂU DIỄN LƯỠNG TRỊ CÁC NHÓM ĐIỂM

Phần tử R và nhóm đôi

Như đã chứng minh ở § 10, khi j là bán nguyên, ta có các biểu diễn lưỡng trị $\mathcal{D}^{(j)}$ của nhóm trực giao O(3). Vì các nhóm điểm là những nhóm con của nhóm trực giao, nên tất nhiên xuất hiện bài toán tìm các biểu diễn lưỡng trị của các nhóm điểm.

Các biểu diễn lưỡng trị về thực chất không phải là những biểu diễn theo định nghĩa thông thường, vì tương ứng với một phần tử của nhóm đang xét, ta có không phải một mà hai phép biến đổi tuyến tính (ma trận). Với các biểu diễn lưỡng trị (như đã nhận xét), một số hệ thức tìm được trước đây cho các nhóm hữu hạn không còn đúng nữa, như các hệ trực giao cho các đặc biểu hay hệ thức Burnside (chẳng hạn trong hệ thức Burnside $\sum_\mu n_\mu^2 = G$ thì các đại lượng n_μ chỉ trỏ chiều của những biểu diễn đơn trị mà thôi). Như ta đã thấy, với nhóm quay SO(3), những khó khăn về biểu diễn lưỡng trị có thể khắc phục được bằng cách đưa vào khái niệm nhóm phủ phổ dụng SU(2), các biểu diễn lưỡng trị của nhóm SO(3) đều có thể xem là biểu diễn đơn trị của nhóm phủ phổ dụng đó.

Đối với các nhóm điểm cũng thế, để khắc phục những khó khăn về biểu diễn lưỡng trị, cần thiết phải đề ra một nhóm nào đó sao mà các biểu diễn lưỡng trị của các nhóm điểm trở thành biểu diễn đơn trị của nhóm đó. Ta hãy giải quyết bài tính này cụ thể như sau.

Như đã biết, với nhóm SO(3), tương ứng với mỗi phần tử của nhóm ta có hai toán tử khác dấu nhau khi có biểu diễn lưỡng trị. Nói riêng, tương ứng với đơn vị $e \in SO(3)$, ta có các toán tử

$$D(e) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D'(e) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = -I_2,$$

(I_2 là ma trận đơn vị)

với

$$D'^2(e) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

Ở đây cũng thế, bên cạnh đơn vị e, ta giả sử có tồn tại một phần tử mới R nào đó, xem là một phép quay một góc 2π, và có tính chất

$$R^2 = e, \; D(R) = -I, \text{ (tương tự như } D'(e)), \tag{12-1}$$

R giả thiết giao hoán với mọi phần tử của nhóm.

Giả thiết về R dẫn đến kết quả tất nhiên là

$$C_n^n = C(2\pi) = R, \; C_n^{2n} = R^2 = e. \tag{12-2}$$

Đó là những điều kiện buộc cho các phép quay thuộc nhóm điểm do sự tồn tại của phần tử R nói trên. Đối với phép nghịch đảo I, vì

$$\sigma = IC_2,$$

$$\sigma^2 = I^2 C_2^2 = I^2 R,$$

nên, nếu giả thiết

$$\sigma^2 = R, \quad \sigma^4 = e, \tag{12-3}$$

ta được

$$I^2 = e, \quad D(I) = \pm 1. \tag{12-4}$$

Bây giờ, cho một nhóm điểm $\mathcal{G}$. Ta hãy xét nhóm $\mathcal{G}'$ gồm các phần tử g, gR, $g \in \mathcal{G}$. Cấp của nhóm $\mathcal{G}'$ bằng hai lần cấp của nhóm $\mathcal{G}$. Tất nhiên, các phần tử của nhóm $\mathcal{G}'$ không còn mang tính chất hình học trực quan như đối với các phần tử của các nhóm điểm thông thường. Nhóm $\mathcal{G}'$ thu được như thế gọi là *nhóm đôi* ứng với $\mathcal{G}$. Vì với các biểu diễn lưỡng trị, ứng với mỗi phần tử của nhóm $\mathcal{G}$ ta có hai toán tử khác dấu nhau và vì với nhóm đôi $\mathcal{G}'$, bên cạnh toán tử D(g) ta lại cũng có toán tử (xem (12-1)).

$$D(gR) = D(g)\,D(R) = -D(g),$$

nên rõ ràng các biểu diễn lưỡng trị của nhóm $\mathcal{G}$ trở nên đơn trị đối với nhóm đôi $\mathcal{G}'$. Vị trí của nhóm đôi $\mathcal{G}'$, đối với nhóm $\mathcal{G}$ trong lý thuyết biểu diễn nhóm như thế là giống vị trí của nhóm SU(2) đối với nhóm SO(3).

Tiếp theo, để tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm đôi, ta lưu ý rằng nếu nhóm $\mathcal{G}$ có một trục hai phía hạng n nào đó thì, do $C_n^{2n} = e$, các phần tử « nghịch » nhau

$$C_n^k \text{ và } C_n^{2n-k} = RC_n^{n-k}$$

là thuộc cùng một lớp. Với các nhóm đôi, theo đẳng thức trên, các trục hạng hai cũng có thể là trục hai phía, khác với lệ thường.

Cũng như đối với các biểu diễn đơn trị các nhóm điểm, về phương diện vật lý, hai biểu diễn lưỡng trị liên hợp phức với nhau cần gộp lại thành một biểu diễn có chiều gấp đôi (các hàm sóng thực hiện các biểu diễn liên hợp phức với nhau như thế là liên hợp phức với nhau và cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau).

Đối với các nhóm có dạng tích trực tiếp $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 \otimes \mathcal{C}_i$, bài tính tìm các biểu diễn bất khả quy cũng tiến hành như với trường hợp thông thường vì, theo (12-4), nhóm $\mathcal{C}_i$ cũng có hai biểu diễn chẵn $\mathcal{A}_g$ và lẻ $\mathcal{A}_u$ như lệ thường.

Cuối cùng, vì đối với các biểu diễn đơn trị, ta có

$$D(gR) = D(g)\,D(R) = D(g),$$

còn đối với các biểu diễn lưỡng trị ta có

$$D(gR) = -D(g),$$

nên rõ ràng các hệ thức trực giao giữa các đặc biểu các biểu diễn đơn trị và các biểu diễn lưỡng trị được nghiệm đúng. Từ đó, ta cũng suy ra được hệ thức Burnside cho nhóm đôi $\mathcal{G}'$, cũng như với các trường hợp thông thường.

Nhóm $\mathcal{C}'_n$

Sau khi trình bày các điểm đại cương ở trên, ta hãy tìm các biểu diễn bất khả quy lưỡng trị của nhóm $\mathcal{C}_n$. Nhóm đôi tương ứng, ký hiệu là $\mathcal{C}'_n$, gồm có 2n phần tử

$$C_n, C_n^2, \ldots, C_n^n = R, \quad C_n R, \quad C_n^2 R, \ldots, C_n^n R = C_n^{2n} = e.$$

Vì R giao hoán với mọi phần tử của nhóm theo cách xây dựng R, nên nhóm đôi $\mathcal{C}'_n$ là một nhóm Abel, có 2n biểu diễn một chiều. Ngoài n biểu diễn đơn trị một chiều thông thường ở đó

$$\chi(R) = 1,\ \chi(C_nR) = \chi(C_n) = e^{\frac{2i\pi m}{n}},\ (m = 0, 1, \ldots, n-1),$$

mà ta có thể thực hiện với các hàm cơ sở $e^{\pm ir}$, (r nguyên), nhóm $\mathcal{C}_n$ còn có n biểu diễn lưỡng trị một chiều khác. Nếu ta chọn các hàm cơ sở dưới dạng $e^{\pm ir}$, (r bán nguyên) thì từ đẳng thức

$$D(R)e^{\pm ir} = e^{\pm ir(\varphi-2\pi)} = e^{\mp 2ir\pi}e^{\pm ir} =$$
$$= (-1)^{2r}e^{\pm ir} = -e^{\pm ir},\quad D(R) = -1,$$

ta thấy rằng với các hàm đó chúng ta có thể thực hiện các biểu diễn lưỡng trị của nhóm $\mathcal{C}_n$.

Chẳng hạn, với nhóm $\mathcal{C}'_2$, ta chọn các hàm cơ sở là (r = 1/2)

$$e^{i\varphi/2} \text{ và } e^{-i\varphi/2}.$$

Với các hàm này ta được các biểu diễn lưỡng trị

$$D(R)\ e^{i\varphi/2} = C_2^2\ e^{i\varphi/2} = e^{i(\varphi-2\pi)/2} = e^{-i\pi}\ e^{i\varphi/2} = -e^{i\varphi/2},$$
$$D(R)\ e^{-i\varphi/2} = e^{-i(\varphi-2\pi)/2} = e^{i\pi}\ e^{-i\varphi/2} = -e^{-i\varphi/2},$$
$$D(C_2)\ e^{i\varphi/2} = e^{i(\varphi-\pi)/2} = e^{-i\pi/2}\ e^{i\varphi/2} = -ie^{i\varphi/2},$$
$$D(C_2)\ e^{-i\varphi/2} = e^{-i(\varphi-\pi)/2} = e^{i\pi/2}\ e^{-i\varphi/2} = ie^{-i\varphi/2},$$
$$D(C_2R)\ e^{i\varphi/2} = ie^{i\varphi/2},\quad D(C_2R)\ e^{-i\varphi/2} = -ie^{-i\varphi/2}.$$

$\mathcal{C}'_2$	e	R	C_2	C_2R
$\mathcal{E}'$	1	−1	−i	i
	1	−1	i	−i

Hai biểu diễn liên hợp phức với nhau ở trên được gộp lại thành một biểu diễn (vật lý) hai chiều.

Các biểu diễn của các nhóm $\mathcal{C}'_3$, $\mathcal{C}'_4$ và $\mathcal{C}'_6$ cũng có thể tính được với phương pháp trên.

Nhóm $\mathcal{D}'_n$

Bây giờ ta chuyển sang nhóm $\mathcal{D}_n$. Với nhóm này trục hạng n là một trục hai phía, do đó trong nhóm đôi tương ứng $\mathcal{D}'_n$, các phần tử « nghịch » nhau

$$C_n^k \text{ và } C_n^{n-k}R$$

cùng thuộc một lớp như đã nói ở trên. Các phần tử « nghịch nhau »

$$C_n^{n-k} \text{ và } C_n^k R$$

thuộc một lớp khác. Hai lớp này trùng với nhau khi $n = 2p$ là một số chẵn và $k = p$.

Với nhóm đôi $\mathcal{D}'_2$, các phần tử của nhóm

$$e,\ R,\ C_2,\ C_2R,\ u_1,\ u_1R,\ u_2,\ u_2R$$

phân thành năm lớp như sau ($n = 2$)

$$\{e\},\ \{R\},\ \{C_2,\ C_2R\},\ \{u_1,\ u_1R\},\ \{u_2,\ u_2R\}.$$

Xuất phát từ công thức Burnside

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 + n_5^2 = 8,$$

và lưu ý rằng nhóm này có bốn biểu diễn bất khả quy đơn trị một chiều tương ứng với $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$, ta thấy rằng nhóm $\mathcal{D}_2$ chỉ có một biểu diễn bất khả quy lưỡng trị hai chiều tương ứng với $n_5 = 2$. Với biểu diễn lưỡng trị này, tất nhiên ta có

$$\chi(e) = 2,\quad \chi(R) = -2.$$

Từ đó và từ các công thức trực giao của các đặc biểu, ta được

$$\chi(C_2) = 0,\quad \chi(C_2R) = \chi(C_2) = 0,\quad \chi(u_{1,2}) = \chi(u_{1,2}R) = 0,$$

nghĩa là ta có biểu diễn lưỡng trị bất khả quy hai chiều (duy nhất) sau

$\mathcal{D}'_2$	e	R	C_2 C_2R	u_1 u_1R	u_2 u_2R
$\mathcal{E}'$	2	−2	0	0	0

Tiếp theo, ta xét nhóm điểm $\mathcal{D}_3$ có sáu phần tử

$$e,\ C_3,\ C_3,\ u_1,\ u_2,\ u_3$$

thuộc ba lớp $\{e\}$, $\{C_3, C_3^2\}$, $\{u_1, u_2, u_3\}$. Nhóm đôi tương ứng là nhóm $\mathcal{D}'_3$ có 12 phần tử

$$e,\ R,\ C_3,\ C_3^2R,\ C_3^2,\ C_3R,\ u_1,\ u_1R,\ u_2,\ u_2R,\ u_3,\ u_3R$$

chia thành sáu lớp

$$\{e\},\ \{R\},\ \{C_3,\ C_3^2R\},\ \{C_3^2,\ C_3R\},\ \{u_1,\ u_2,\ u_3\},$$
$$\{u_1R,\ u_2R,\ u_3R\}.$$

Thành thử công thức Burnside cho hệ thức

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 + n_5^2 + n_6^2 = 12.$$

Vì nhóm $\mathcal{D}_3$ có ba biểu diễn bất khả quy với $n_1 = n_2 = 1$, $n_3 = 2$, các biểu diễn này là những biểu diễn đơn trị, nên còn lại ba biểu diễn lưỡng trị với $n_4 = n_5 = 1$, $n_6 = 2$.

Với các biểu diễn bất khả quy lưỡng trị một chiều, do C_3 và $C_3^2 R$ thuộc cùng một lớp, ta có

$$\chi(C_3) = \chi(C_3^2 R) = \chi^2(C_3)\,\chi(R) = -\chi^2(C_3),\ \chi(C_3) \neq 0,$$

tức là

$$\chi(C_3) = -1.$$

Tiếp theo vì với biểu diễn một chiều ta có

$$\chi^2(u) = \chi(u^2) = \chi(R) = -1,$$

nên ta được

$$\chi(u) = \pm 1\cdot$$

Cuối cùng, với biểu diễn lưỡng trị hai chiều còn lại, dĩ nhiên ta có

$$\chi(e) = 2,\quad \chi(R) = -2.$$

Các giá trị khác của đặc biểu của biểu diễn này có thể tính theo các hệ thức trực giao.

Nhóm $\mathcal{C}$'

Bây giờ ta chuyển sang nhóm $\mathcal{C}$. Nhóm này có các trục hạng hai hai phía và tương đương với nhau, còn các trục hạng ba thì tương đương với nhau nhưng chỉ một phía. Nhóm đối tương ứng $\mathcal{C}$' có 24 phần tử phân thành 7 lớp như sau

$$\{e\},\ \{R\},\ \{4C_3\},\ \{4C_3R\},\ \{4C_3^2\},\ \{4C_3^2 R\},\{3C_2,\ 3C_2R\}.$$

Vì nhóm $\mathcal{C}$ có ba biểu diễn một chiều đơn trị và một biểu diễn ba chiều đơn trị, nên công thức Burnside cho thấy rằng ba biểu diễn bất khả quy lưỡng trị còn lại có các chiều n_5, n_6, n_7 thỏa mãn hệ thức

$$n_5^2 + n_6^2 + n_7^2 = 12,$$

tức là

$$n_5 = n_6 = n_7 = 2.$$

Với các biểu diễn hai chiều này, vì C_2 và C_2R thuộc cùng một lớp, nên ta có (xem (12-1)

$$\chi(C_2) = \chi(C_2R) = \mathrm{Sp}\,\{D(C_2)\,D(R)\} = -\chi(C_2),\ \chi(C_2) = 0.$$

Như thế, với tất cả các biểu diễn lưỡng trị hai chiều của nhóm $\mathcal{C}$, ta đều có

$$\chi(C_2) = 0\,.$$

Tiếp theo, vì các biểu diễn phức (tức là có đặc biểu có giá trị phức) bao giờ cũng xuất hiện từng đôi một, nên trong ba biểu diễn hai chiều lưỡng trị nói trên, ít nhất phải có một biểu diễn thực. Trong biểu thức thực này ta giả thiết

$$D(C_3) = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}.$$

Nhưng vì

$$D(C_3^3) = \begin{bmatrix} a^3 & 0 \\ 0 & b^3 \end{bmatrix} = D(R) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

nên

$$a^3 = b^3 = -1.$$

Mặt khác vì $\chi(C_3) = a + b$ phải là thực theo giả thiết, nên ta phải có

$$a = e^{i\pi/3},\ b = e^{-i\pi/3}.$$

Từ đó ta được

$$\chi(C_3) = 1,\ \chi(C_3^2) = a^2 + b^2 = -1,$$

$$D(C_3R) = D(C_3)\,D(R) = -D(C_3),\ \chi(C_3R) = -1,\ \chi(C_3^2R) = 1.$$

Như thế là đã tính được bằng đặc biểu của một biểu diễn lưỡng trị hai chiều. Hai biểu diễn lưỡng trị hai chiều còn lại liên hợp phức với nhau có thể tính theo các công thức trực giao.

Nhóm *O'*

Với nhóm đôi *O'*, tương ứng với nhóm *O*, ta cũng có thể tính các biểu diễn bất khả quy lưỡng trị bằng những suy luận tương tự như thế.

§ 13. PHÉP PHÂN LOẠI TRẠNG THÁI NĂNG LƯỢNG CỦA ÊLECTRON TRONG CHUYỂN ĐỘNG XUYÊN TÂM

Ta hãy ứng dụng phương pháp phân loại các trạng thái năng lượng của êlectrôn trong chuyển động xuyên tâm bằng lý thuyết biểu diễn nhóm.

Chuyển động xuyên tâm tổng quát

Như đã biết trong cơ học lượng tử, với cách tính gần đúng Hartree-Fock (trường tự thích), chuyển động của mỗi electron nguyên tử có thể xem là xuyên tâm, trường xuyên tâm này sinh bởi hạt nhân và các electron khác của nguyên tử.

Trong trường hợp này, nhóm đối xứng của ngoại trường là nhóm O(3), và ta có vô số mức năng lượng, vì nhóm O(3) có vô số biểu diễn bất khả quy. Cần phân biệt hai trường hợp.

Trường hợp không kể đến spin

Các mức năng lượng phân loại theo các biểu diễn đơn trị với trọng trưởng l nguyên của nhóm O(3). Bậc suy biến của mọi mức năng lượng bằng chiều của biểu diễn bất khả quy tương ứng, tức là bằng $2l + 1$. Để đánh số các trạng thái cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau, ta cần tìm hệ toán tử đầy đủ. Trong trường hợp này, hệ đó gồm $\mathbf{L}^2$ và L_3 (ngoài toán tử H). Các trị riêng của $\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ cho số lượng tử l, còn các trị riêng của toán tử L_3 bằng $\hbar m$ cho số lượng tử **m**. Như thế, các trạng thái năng lượng suy biến có thể đánh số bằng cặp (l, m). Đó chính là cặp số đánh số cơ sở chính tắc đã nói đến ở § 5. Ngoài ra, sự lượng tử hóa năng lượng âm lại cho một số lượng tử khác là n. Thành thử, các hàm sóng có thể đánh số là Ψ_{nlm}.

Trường hợp có kể đến spin (s=1/2) [1]

Trong trường hợp này, nếu kể đến tương tác spin-oocbitan tỷ lệ với (**s**, **L**) ta có các biểu diễn lưỡng trị của nhóm O(3). Thành thử, phân loại các mức năng lượng của electron dựa vào các biểu diễn bất khả quy lưỡng trị đó. Bậc suy biến là $2j + 1$. Để đánh số các trạng thái, trong trường hợp này, ta dùng hệ toán tử đầy đủ gồm có $\mathbf{J}^2$, J_3, $\mathbf{L}^2$ (và H). Các trị riêng của các toán tử đó tương ứng bằng $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar m_j$, $\hbar^2 l(l+1)$, cho phép đánh số hàm sóng bởi bộ ba (j, l, m_j), $j = l \pm 1/2$, $-j \leqslant m_j \leqslant j$, (với các biểu diễn lưỡng trị của nhóm O(3) ta thường thay $m \to m_j$).

Ngoài ra, với năng lượng âm, sự lượng tử hóa dẫn đến một số lượng tử mới, ký hiệu là n. Thành thử các hàm sóng có thể đánh số là Ψ_{njlm_j}.

Chuyển động trong trường Coulomb, $U = -Ze^2/r$.

Trong trường hợp này, xuất hiện sự phụ thuộc giữa hai số lượng tử n và l như sau :

$$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1.$$

và, như đã biết, bậc suy biến chuyển từ $2l + 1$ đến

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

Bậc suy biến này không tương ứng với số chiều của một biểu diễn bất khả quy nào của nhóm đối xứng. Ta có hiện tượng suy biến ngẫu nhiên, sẽ giải thích ở chương XI.

§ 14. BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM $O(3) \downarrow \mathcal{G}$ ($\mathcal{G}$: NHÓM ĐIỂM)

Bài toán chia làm ba phần.

Nhóm điểm thuộc loại một (không chứa phần tử I).

Ta có

$$O(3) \downarrow \mathcal{G} = SO(3) \downarrow \mathcal{G}.$$

Các khai triển của các biểu diễn $\mathcal{D}^{(l)\pm}$ của nhóm O(3) đều giống như các khai triển của các biểu diễn $\mathcal{D}^{(l)}$ của nhóm SO(3).

Để giải quyết bài tính này, ta hãy tính các đặc biểu $\chi^{(l)}$ của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(l)}$ của nhóm SO(3) hạn chế lên các nhóm loại một $\mathcal{G}$. Vì $\mathcal{G}$ trong trường hợp này chỉ gồm các phần tử quay thuần túy với các góc 0 và $\frac{2\pi}{2} = \pi$,

---

1) Ở XI, § 7, chúng ta sẽ đặt cơ sở toán học và vật lý cho đại lượng spin, khi nói đến nhóm Lorentz. Ở đây, chúng ta hãy tạm sử dụng những khái niệm thường gặp trong các giáo trình về cơ học lượng tử.

$\frac{2\pi}{3}$, $\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{3}$ (n = 2, 3, 4, 6) nên chỉ cần tính các lượng sau:

$$\chi^{(l)}(e) = \chi^{(l)}(0) = \left.\frac{\sin\left(l + \frac{1}{2}\right)\pi}{\sin\frac{l}{2}\pi}\right|_{\varphi=0} = 2l + 1,$$

$$\chi^{(l)}(C_2) = \chi^{(l)}(\pi) = (-1)^l,$$

$$\chi^{(l)}(C_4) = \chi^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}\right) = (-1)^{\left[\frac{l}{2}\right]},$$

$\left[\frac{l}{2}\right]$ là phần nguyên của $\frac{l}{2}$,

$$\chi^{(l)}(C_3) = \chi^{(l)}\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \begin{cases} 1, & l = 3m \\ 0, & l = 3m+1, \\ -1, & l = 3m+2, \text{ m: nguyên, tùy ý,} \end{cases}$$

$$\chi^{(l)}(C_6) = \chi^{(l)}\left(\frac{\pi}{3}\right) = \begin{cases} 1, & l = 6m \\ 2, & l = 6m+1, \\ 1, & l = 6m+2, \\ -1, & l = 6m+3, \\ -2, & l = 6m+4, \\ -1, & l = 6m+5, \\ & \text{m: nguyên, tùy ý.} \end{cases} \quad (14\text{-}1)$$

Từ các kết quả (14-1) ta lập bảng $\chi^{(l)}(C_n)$.

Bảng $\chi^{(l)}(C_n)$

l	C	C_2	C_3	C_4	C_6
0	1	1	1	1	1
1	3	−1	0	1	2
2	5	1	−1	−1	1
3	7	−1	1	−1	−1
4	9	1	0	1	−2
5	11	−1	−1	1	−1

(14-2)

Trong bảng trên, các giá trị của đặc biểu nằm trong một khung làm thành một « chu kỳ » (theo chiều dọc).

Dựa vào bảng $\chi^{(l)}(C_n)$ này ta có thể lập bảng đặc biểu $\chi^{(l)}_{SO(3)\downarrow\mathcal{G}}$, trong đó $\mathcal{G}$ là bất kỳ một nhóm điểm loại một nào và, từ đó, theo công thức II (10-4) ta sẽ giải được bài toán biểu diễn hạ cảm $SO(3)\downarrow\mathcal{G}$. Trong khi tiến hành tính toán, ta có thể sử dụng các công thức truy toán để rút số lượng phép tính.

Các công thức này dựa lên đặc trưng II (11·6) của biểu diễn chính quy. Chẳng hạn, ta dễ thấy rằng

$$\sin\left[\left((mn - l - 1) + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{2\pi}{n}\right)\right] = -\sin\left(l + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{2\pi}{n}\right),$$

(m = số nguyên)

từ đó, theo (7-2), ta được

$$\chi^{(l)}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = -\chi^{(mn-l-1)}\left(\frac{2\pi}{n}\right). \tag{14-3}$$

Với nhóm $\mathcal{O}$, ta có n = 2, 3, 4. Thế thì, lần lượt chọn trong (14-3)

$$n = 2\ ,\ m = 6\ ;\ n = 3\ ,\ m = 4\ ;\ n = 4\ ,\ m = 3\ ,$$

ta được

$$\chi^{(l)}\left(\frac{2\pi}{n}\right) + \chi^{(11-l)}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = 0\ ,\ (n = 2, 3, 4)\,. \tag{14-4}$$

Mặt khác, công thức (14-2) cho

$$\chi^{(l)}(e) + \chi^{(11-l)}(e) = 24 = G_o \text{ (cấp của } \mathcal{O}) \,. \tag{14-5}$$

Đối chiếu (14-4), (14-5) với II (11-6), ta được ngay đẳng thức

$$\chi^{(l)} + \chi^{(11-l)} = \chi^{(R)}\ ,\ (l < 11). \tag{14-6}$$

Công thức này có thể dùng làm công thức truy toán. Cụ thể là

$$SO(3) \downarrow \mathcal{O} : \mathcal{D}^{(l)} \oplus \mathcal{D}^{(11-l)} = \mathcal{D}^{(R)}\ ,\ (l < 11)\ , \tag{14-7}$$

với

$$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus 2\mathcal{E} \oplus 3\mathcal{F}_1 \oplus 3\mathcal{F}_2\ .$$

Ta còn có thể chứng minh công thức truy toán thứ hai

$$SO(3) \downarrow \mathcal{O} : \mathcal{D}^{(12m+l)} = m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)}\ ,\ (l < 11). \tag{14-8}$$

Quả vậy, trong trường hợp này, vì ta chỉ có các giá trị n = 2, 3, 4 nên, theo (14-2), ta thấy rằng bảng đặc biểu hạn chế lên $\mathcal{O}$ có « chu kỳ » bằng 12 với $g \neq e$. Nói cách khác, ta có

$$\chi^{(12m+l)}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = \chi^{(l)}\left(\frac{2\pi}{n}\right).$$

Mặt khác, ta lại có

$$\chi^{(12m+l)}(e) = 2(12m + l) + 1 = 24m + (2l + 1) =$$

$$= \chi^{(R)}(e) + \chi^{(l)}(e).$$

So sánh hai kết quả thu được, ta được ngay công thức truy toán (14-8).

Theo các công thức truy toán (14-7) và (14-8), ta thấy chỉ cần khai triển các biểu diễn $\mathcal{D}^{(l)}$ với $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Muốn thế, ta hãy lập bảng đặc biểu $\chi^{(l)}_{SO(3)\downarrow\mathcal{O}}$. Từ (14-2) ta được

$\chi^{(l)}_{SO(3)\downarrow\mathcal{O}}$:

l	e	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_2$	$6C_4$
0	1	1	1	1	1
1	3	0	− 1	− 1	1
2	5	− 1	1	1	− 1
3	7	1	− 1	− 1	− 1
4	9	0	1	1	1
5	11	− 1	− 1	− 1	1

(14-9)

Từ (14-9), công thức II (10-4) cho ngay kết quả cuối cùng

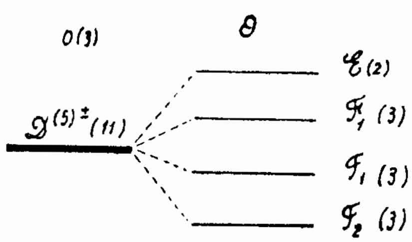
$O(3)\downarrow\mathcal{O}$:

$\mathcal{D}^{(0)\pm}$	$\mathcal{A}_1$	1
$\mathcal{D}^{(1)\pm}$	$\mathcal{F}_1$	1
$\mathcal{D}^{(2)\pm}$	$\mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2$	2
$\mathcal{D}^{(3)\pm}$	$\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$	3
$\mathcal{D}^{(4)\pm}$	$\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$	4
$\mathcal{D}^{(5)\pm}$	$\mathcal{E} \oplus 2\mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$	4
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(11-l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(12m+l)\pm}$	$m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}$	

$$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus 2\,\mathcal{E} \oplus 3\mathcal{F}_1 \oplus 3\mathcal{F}_2$$

(14-10)

Cột cuối cùng trỏ số mức năng lượng được tách ra. Chẳng hạn



Tương tự như thế, ta có các kết quả sau

$O(3)\downarrow \mathcal{T}$:

$\mathcal{D}^{(0)\pm}$	$\mathcal{A}$	1
$\mathcal{D}^{(1)\pm}$	$\mathcal{F}$	1
$\mathcal{D}^{(2)\pm}$	$\mathcal{E} \oplus \mathcal{F}$	2
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(5-l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(6m+l)}$	$m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A} \oplus 2\,\mathcal{E} \oplus 3\,\mathcal{F}$		

(14-11)

$O(3) \downarrow \mathcal{D}_6$: (14.12)

$\mathcal{D}^{(0)\pm}$	$\mathcal{A}_1$	1
$\mathcal{D}^{(1)\pm}$	$\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}_1$	2
$\mathcal{D}^{(2)\pm}$	$\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2$	3
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(5-l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(6m+l)\pm}$	$m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus 2\,\mathcal{E}_1 \oplus 2\,\mathcal{E}_2$		

$O(3) \downarrow \mathcal{D}_4$: (14.13)

$\mathcal{D}^{(0)\pm}$	$\mathcal{A}_1$	1
$\mathcal{D}^{(1)\pm}$	$\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}$	2
$\mathcal{D}^{(2)\pm}$	$\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{E}$	4
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \ominus \mathcal{D}^{(3-l)}$	
$\mathcal{D}^{(4m+l)\pm}$	$m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)}$	
$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus 2\,\mathcal{E}$		

Nhóm điểm thuộc loại hai, có dạng tích trực tiếp $\mathcal{G}_0 \otimes \mathcal{C}_i$

Đó chẳng hạn là các nhóm

$$\mathcal{D}_{2h} = \mathcal{D}_2 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{D}_{3d} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{O}_h = \mathcal{O} \otimes \mathcal{C}_i,$$
$$\mathcal{C}_{4h} = \mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{D}_{4h} = \mathcal{D}_4 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{D}_{6h} = \mathcal{D}_6 \otimes \mathcal{C}_i,$$
$$\mathcal{C}_{6h} = \mathcal{C}_6 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{S}_6 = \mathcal{C}_3 \otimes \mathcal{C}_i,\quad \mathcal{T}_h = \mathcal{T} \otimes \mathcal{C}_i,$$
$$\mathcal{C}_{\infty h} = SO(2) \otimes \mathcal{C}_i$$

Trong các bảng đặc biểu của các nhóm có dạng tích trực tiếp

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 \otimes \mathcal{C}_i \ (\mathcal{G}_0: \text{nhóm loại một})$$

ta ký hiệu các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$ như sau

$$\mathcal{D}^{(\mu)}_g \equiv \mathcal{D}^{(\mu)} \mathcal{A}_g, \quad \mathcal{D}^{(\mu)}_u \equiv \mathcal{D}^{(\mu)} \mathcal{A}_u,$$

trong đó $\mathcal{D}^{(\mu)}$ là các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}_0$.

Với cách ký hiệu này, bài toán biểu diễn hạ cảm $O(3)\downarrow\mathcal{G}$ quy về bài toán biểu diễn hạ cảm $SO(3)\downarrow\mathcal{G}_0$ với điều kiện thêm dấu $+$ (hay $-$) vào các biểu diễn $\mathcal{D}^{(l)}$ của nhóm SO(3) và chỉ số g (hay u) vào các biểu diễn bất khả quy của nhóm loại một $\mathcal{G}_0$.

Ví dụ:

Từ $SO(3)\downarrow\mathcal{D}_6: \mathcal{D}^{(2)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2$

ta được ngay

$$O(3)\downarrow\mathcal{D}_{6h}: \quad \mathcal{D}^{(2)+} = \mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{E}_{1g} \oplus \mathcal{E}_{2g},$$
$$\mathcal{D}^{(2)-} = \mathcal{A}_{1u} \oplus \mathcal{E}_{1u} \oplus \mathcal{E}_{2u}.$$

Ta hãy ứng dụng các kết quả thu được để nghiên cứu sự tách mức bởi một từ trường yếu không đổi **B** trong chuyển động xuyên tâm. Như đã biết, trong trường hợp này, toán tử Hamilton nhiễu loạn có chứa các lượng (**A**, **p**) và (σ, **B**). Sự có mặt của từ trường **B** giảm mức đối xứng cầu thành mức đối xứng trụ với nhóm đối xứng SO(2). Mặt khác toán tử Hamilton nhiễu loạn là bất biến đối với phép I. Thành thử nhóm đối xứng của hệ chuyển từ nhóm O(3) xuống nhóm $\mathcal{C}_{\infty h}$.

Như thế, từ (7-3), ta có ngay kết quả

$$O(3)\downarrow\mathcal{C}_{\infty h}: \mathcal{D}^{(l)+} = \sum_m \oplus \mathcal{D}^{(m)}_{zg}, \quad \mathcal{D}^{(l)-} = \sum_m \oplus \mathcal{D}^{(m)}_{zu}.$$

Vì các biểu diễn của nhóm $\mathcal{C}_{\infty h}$ đều một chiều, nên tất cả các mức năng lượng đều tách ra. Sự khử suy biến là hoàn toàn. Hiệu ứng này gọi là *hiệu ứng Zeeman* (đơn giản).

Nhóm điểm thuộc loại hai, không có dạng tích trực tiếp $\mathcal{G}_0 \otimes \mathcal{C}_i$

Bây giờ ta giả sử $\mathcal{G}$ là một nhóm điểm loại hai không phải là một tích trực tiếp $\mathcal{G}_0 \otimes \mathcal{C}_i$, như $\mathcal{C}_{3v}$ hoặc $\mathcal{D}_{2d}$ chẳng hạn. Để giải bài toán biểu diễn hạ cảm $O(3)\downarrow\mathcal{G}$, ta hãy tính thêm giá trị của đặc biểu của các biểu diễn $\mathcal{D}^{(l)+}$, $\mathcal{D}^{(l)-}$ của nhóm O(3) tại các phần tử của nhóm $\mathcal{G}$, khác các phép quay thuần túy. Chẳng hạn với nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ ta cần phải tính $\chi^{(l)\pm}(\sigma)$ và $\chi^{(l)\pm}(S_4)$.

Vì

$$\sigma = Ig(\pi).$$

và

$$S_4 = \sigma C_4 = \sigma g\left[\frac{\pi}{2}\right] = Ig(\pi)\, g\left[\frac{\pi}{2}\right] = Ig\left[\frac{3\pi}{2}\right],$$

nên ta được

$$\chi^{(l)\pm}(\sigma) = \chi^{\pm}(I)\, \chi^{(l)}(\pi) = (\pm 1)\, \chi^{(l)}(\pi),$$

tức là (xem (14,1))

$$\chi^{(l)\pm}(\sigma) = \pm(-1)^l, \tag{14-14}$$

và

$$\chi^{(l)\pm}(S_4) = \chi^{\pm}(I)\, \chi^{(l)}\left[\frac{3\pi}{2}\right] = \chi^{\pm}(I)\, \chi^{(l)}\left[\frac{\pi}{2}\right]$$

hay

$$\chi^{(l)\pm}(S_4) = \pm(1)^{\left[\frac{l}{2}\right]}, \tag{14-15}$$

các dấu $\pm$ ở các vế phải của (14-14) và (14-15) là tương ứng với các biểu diễn chẵn $\mathcal{A}_g$ và lẻ $\mathcal{A}_u$ của $\mathcal{C}_t$. Từ các kết quả này và từ (14-2) ta lập được các bảng đặc biểu hạn chế tương ứng sau :

$\chi^{(l)\pm}_{O(3)\downarrow \mathcal{C}_{3v}}$:

l	e	$2C_3$	$3\sigma_v$
0	1	1	± 1
1	3	0	± 1
2	5	-1	± 1

$\chi^{(l)\pm}_{O(3)\downarrow \mathcal{D}_{2d}}$:

l	e	C_2	$2S_4$	$2C'_2$	$2\sigma_d$
0	1	1	± 1	1	± 1
1	3	-1	± 1	-1	∓ 1
2	5	1	∓ 1	1	± 1
3	7	-1	∓ 1	-1	∓ 1

Vì với các nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ và $\mathcal{D}_{2d}$ ta có tương ứng $n = 2$, $n = 3$ và $n = 2$, $n = 4$, hơn nữa vì các chu kỳ của các bảng đặc biểu hạn chế lên các nhóm đó tương ứng là 6 và 4, nên ta có các công thức sau :

$$O(3)\downarrow \mathcal{C}_{3v} : \begin{cases} \mathcal{D}^{(l)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(5-l)\pm} = \mathcal{D}^{(R)}, \\ \mathcal{D}^{(6m+l)\pm} = m\, \mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}. \end{cases}$$

$$O(3)\downarrow \mathcal{D}_{2d} : \begin{cases} \mathcal{D}^{(l)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(3-l)\pm} = \mathcal{D}^{(R)}, \\ \mathcal{D}^{(4m+l)\pm} = m\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}. \end{cases}$$

Từ đó, các công thức quen thuộc cho các kết quả biểu diễn hạ cảm sau đây

$O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v}$

$\mathcal{D}^{(0)+}$	$\mathcal{A}_1$	1
$\mathcal{D}^{(0)-}$	$\mathcal{A}_2$	1
$\mathcal{D}^{(1)+}$	$\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}$	2
$\mathcal{D}^{(1)-}$	$\mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}$	2
$\mathcal{D}^{(2)+}$	$\mathcal{A}_1 \oplus 2\mathcal{E}$	3
$\mathcal{D}^{(2)-}$	$\mathcal{A}_2 \oplus 2\mathcal{E}$	3
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(5-l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(6m+l)\pm}$	$m\,\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus 2\mathcal{E}$		

(14-16)

$O(3) \downarrow \mathcal{D}_{2d}$

$\mathcal{D}^{(0)+}$	$\mathcal{A}_1$	1
$\mathcal{D}^{(0)-}$	$\mathcal{B}_1$	1
$\mathcal{D}^{(1)+}$	$\mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}$	2
$\mathcal{D}^{(1)-}$	$\mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{E}$	2
$\mathcal{D}^{(l)\pm}$	$\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(3-l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(4m+l)\pm}$	$m\mathcal{D}^{(R)} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm}$	
$\mathcal{D}^{(R)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus 2\mathcal{E}$		

(14-17)

Ta hãy ứng dụng các kết quả thu được vào hiện tượng vật lý electron chuyển động trong một điện trường yếu không đổi. Như đã biết, trong trường hợp này, toán tử Hamilton nhiễu loạn có dạng (**E**, **r**) với **E** là cường độ điện trường (không đổi). Sự có mặt của toán tử này dẫn đến nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{\infty v}$ với bảng đặc biểu ở §1.

Vì

$$\chi^{(l)\pm}(\varphi) = \chi^{(l)}(\varphi) = \frac{\sin(l + 1/2)\varphi}{\sin \varphi/2} =$$

$$= \sum_{m=1}^{l} (\exp im\varphi + \exp(-im\varphi)) + 1 = \sum_{m=1}^{l} 2\cos m\varphi + 1$$

nên, theo (14,9), ta có bảng đặc biểu hạn chế sau

		e	$2C(\varphi)$	σ_v
$\chi^{(l)\pm}$ $O(3)\downarrow \mathcal{C}_{\infty v}$:	l	$2l+1$	$\sum\limits_{1}^{l} 2\cos m\varphi + 1$	$\pm(-1)^l$

Từ kết quả này, bằng phương pháp khai triển thông thường, ta được

$O(3)\downarrow \mathcal{C}_{\infty v}$:

$$\mathcal{D}^{(l)\pm} = \sum_{m=1}^{l} \oplus \mathcal{E}_m \oplus \begin{cases} \mathcal{A}_1 \text{ khi } l: \text{ chẵn với dấu } +, \\ \qquad\quad \text{lẻ với dấu } -. \\ \mathcal{A}_2 \text{ khi } l: \text{ lẻ với dấu } +, \\ \qquad\quad \text{chẵn với dấu } -. \end{cases} \qquad (14\text{-}18)$$

Như thế, nếu đặt nguyên tử vào trong một điện trường yếu không đổi, thì các mức năng lượng suy biến bậc $2l + 1$ của êlectrôn của nguyên tử sẽ tách thành $l + 1$ mức, tương ứng với l biểu diễn hai chiều $\mathcal{E}_m$ ($m = 1, \ldots, l$) và biểu diễn một chiều $\mathcal{A}_1$ hay $\mathcal{A}_2$. Hiệu ứng này gọi là *hiệu ứng Stark*.

Phép phân tích các biểu diễn lưỡng trị của O(3)

Bây giờ ta hãy xét bài tính phân tích các biểu diễn lưỡng trị của nhóm quay theo các biểu diễn lưỡng trị của các nhóm điểm $\mathcal{G}$ trong bài toán biểu diễn hạ cảm $SO(3)\downarrow \mathcal{G}$. Vì đặc biểu các biểu diễn đơn trị và lưỡng trị là trực giao với nhau, nên trong các phân tích này chỉ có mặt các biểu diễn lưỡng trị của nhóm điểm $\mathcal{G}$.

Cũng như trên, ta dùng phương pháp đặc biểu. Ta biết rằng đặc biểu của các biểu diễn lưỡng trị $\mathcal{D}^{(j)}$ $\left[j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \ldots\right]$ của nhóm quay là

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \frac{\sin\left[j + \frac{1}{2}\right]\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}};$$

Từ đó các phép tính giản đơn cho kết quả

j	e	C_6	C_4	C_3	C_2	C_3^2	C_4^3	C_6^5	R
$\frac{1}{2}$	2	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	1	0	-1	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	-2
$\frac{3}{2}$	4	$\sqrt{3}$	0	-1	0	1	0	$-\sqrt{3}$	-4
$\frac{5}{2}$	6	0	$-\sqrt{2}$	1	0	0	$\sqrt{2}$	0	-6
$\frac{7}{2}$	8	$-\sqrt{3}$	0	1	0	-1	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	-8
$\frac{9}{2}$	10	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	-1	0	1	0	$\sqrt{3}$	-10
$\frac{11}{2}$	12	0	0	0	0	0	$\sqrt{2}$	0	-12

(14.19)

Từ đây ta lập các bảng đặc biểu hạn chế $\chi^{(j)}_{SO(3)\downarrow\mathcal{G}}$ và, bằng phương pháp thông thường, ta đi đến các kết quả về biểu diễn hạ cảm sau :

$SO(3)\downarrow\mathcal{D}'_4$	$\mathcal{D}^{(1/2)}$	$\mathcal{E}'_1$	1	(14-20)
	$\mathcal{D}^{(3/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2$	2	
	$\mathcal{D}^{(5/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus 2\mathcal{E}'_2$	3	
	$\mathcal{D}^{(7/2)}$	$2\mathcal{E}'_1 \oplus 2\mathcal{E}'_2$	4	
	$\mathcal{D}^{(4k+j)}$	$2k(\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2) \oplus \mathcal{D}^{(j)}$	$4k+j+\frac{1}{2}$	

$SO(3)\downarrow\mathcal{D}'_6$	$\mathcal{D}^{(1/2)}$	$\mathcal{E}'_1$	1	(14-21)
	$\mathcal{D}^{(3/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_3$	2	
	$\mathcal{D}^{(5/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{E}'_3$	3	
	$\mathcal{D}^{(7/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus 2\mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{E}'_3$	4	
	$\mathcal{D}^{(9/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus 2\mathcal{E}'_2 \oplus 2\mathcal{E}'_3$	5	
	$\mathcal{D}^{(11/2)}$	$2\mathcal{E}'_1 \oplus 2\mathcal{E}'_2 \oplus 2\mathcal{E}'_3$	6	
	$\mathcal{D}^{(6k+j)}$	$2k(\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{E}'_3) \oplus \mathcal{D}^{(j)}$	$6k+j+\frac{1}{2}$	

$SO(3)\downarrow\mathcal{O}'$	$\mathcal{D}^{(1/2)}$	$\mathcal{E}'_1$	1
	$\mathcal{D}^{(3/2)}$	$\mathcal{G}'$	1
	$\mathcal{D}^{(5/2)}$	$\mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{G}'$	2
	$\mathcal{D}^{(7/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{G}'$	3
	$\mathcal{D}^{(9/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 \oplus \mathcal{G}'$	3
	$\mathcal{D}^{(11/2)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 \oplus 2\mathcal{G}'$	4
	$\mathcal{D}^{(6+j)}$	$\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 + 2\mathcal{G}' \oplus \mathcal{D}^{(j)}(\mathcal{E}'_1 \leftrightarrow \mathcal{E}'_2)$ *)	4+số mức cho j
	$\mathcal{D}^{(12k+j)}$	$2k(\mathcal{E}'_1 \oplus \mathcal{E}'_2 + 2\mathcal{G}') \oplus \mathcal{D}^{(j)}$	8k+số mức cho j

*) *Bị chú*: Ký hiệu $\mathcal{D}^{(j)}(\mathcal{E}'_1 \leftrightarrow \mathcal{E}'_2)$ trỏ biểu thức $\mathcal{D}^{(j)}$ trong đó $\mathcal{E}'_1$ và $\mathcal{E}'_2$ hoán vị với nhau.

§ 15. PHÉP PHÂN TÍCH KHÔNG GIAN BIỂU DIỄN CỦA NHÓM SO(3). CÁC HÀM ĐIỀU HÒA TINH THỂ

Hàm cầu

Trong bài toán biểu diễn hạ cảm SO(3) $\downarrow \mathcal{G}$, với $\mathcal{G}$ là một nhóm điểm nào đó, ngoài phép phân tích các biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$ của nhóm SO (3) thành tổng các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$, còn phải giải quyết bài toán song song phân tích các không gian biểu diễn $2l + 1$ chiều các hàm Y_l^m thành các không gian con bất khả quy đối với nhóm $\mathcal{G}$. Cơ sở của các không gian con bất khả quy này gọi là các *hàm điều hòa tinh thể*. Phương pháp lý thuyết nhóm cho phép tính được các hàm điều hòa tinh thể đó. Tuy nhiên, cần lưu ý rằng phương pháp này chỉ hiệu nghiệm trong trường hợp bài toán biểu diễn hạ cảm SO (3) $\downarrow \mathcal{G}$ chỉ cho các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{G}$ không quá một lần. Trong trường hợp trái lại, cần phải giải phương trình đặc trưng cho các biểu diễn xuất hiện quá một lần trong mỗi khai triển biểu diễn.

Trong tiết này ta giả sử các hàm P_l^m nằm trong biểu thức

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (l \geqslant m \geqslant -l)$$

được chuẩn hóa như sau

$$P_l^{-m}(\theta) = P_l^m(\theta) = \frac{N_l^m \sin^m \theta d^{l+m} \sin^{2l}\theta}{d(\cos\theta)^{l+m}}, \quad (m > 0),$$

$$N_l^m = \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\,\frac{2l+1}{2}\right]^{1/2}.$$

$$\int_0^\pi P_l^m(\theta)^2 \sin\theta\, d\theta = 1,$$

$$P_l^m(\pi - \theta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\theta). \qquad (15\text{-}1)$$

Với các giá trị bé của l, các hàm P_l^m có các biểu thức cụ thể

$$P_0^0 = 1,$$

$$P_1^0 = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos\theta,$$

$$P_1^1 = \sqrt{\frac{3}{2}} \sin\theta,$$

$$P_2^0 = \sqrt{\frac{5}{2}} \left[\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right],$$

$$P_2^1 = \frac{\sqrt{15}}{4} \sin\theta\cos\theta,$$

$$P_2^2 = \frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2\theta,$$

$$P_3^0 = \sqrt{\frac{7}{2}}\left[\frac{5}{2}\cos^3\theta - \frac{3}{2}\cos\theta\right],$$

$$P_3^1 = \frac{\sqrt{21}}{2}\left[\frac{5}{4}\cos^2\theta - \frac{1}{4}\right]\sin\theta,$$

$$P_3^2 = \frac{\sqrt{105}}{4}\sin^2\theta\cos\theta,$$

$$P_3^3 = \frac{\sqrt{70}}{8}\sin^3\theta,$$

$$P_4^0 = \sqrt{\frac{9}{2}}\left[\frac{35}{8}\cos^4\theta - \frac{15}{4}\cos^2\theta + \frac{3}{8}\right],$$

$$P_4^1 = 3\frac{\sqrt{10}}{8}(7\cos^2\theta - 3\cos\theta)\sin\theta,$$

$$P_4^2 = 3\frac{\sqrt{5}}{8}(7\cos^2\theta - 1)\sin^2\theta,$$

$$P_4^3 = 3\frac{\sqrt{70}}{8}\cos\theta\sin^2\theta,$$

$$P_4^4 = 3\frac{\sqrt{35}}{16}\sin^4\theta\,. \tag{15-2}$$

Để được tiện lợi, ta lấy $2l + 1$ dạng thực

$$\sqrt{2}\,P_l^m(\theta)\cos m\varphi, \qquad \sqrt{2}\,P_l^m(\theta)\sin m\varphi, \; (0 \leqslant m \leqslant l)$$

của các hàm cầu $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Trường hợp các nhóm không thuộc hệ cubic

Bài tính phần không gian có thể tiến hành trước hết cho các nhóm trong đó chiều của các biểu diễn bất khả quy đều không lớn hơn hai, tức là trừ các nhóm điểm thuộc hệ cubic ($\mathcal{O}$, $\mathcal{T}$). Đối với các nhóm điểm nói trên, tất cả các phần tử quay đều có thể quy về các phần tử C_2, C_4, C_3, C_6 quanh trục đối xứng chính (gọi là Oz) và phần tử C'_2 quanh một trục hạng hai nào đó thẳng góc với trục Oz (ký hiệu là Ox hay Oy). Như thế bài tính quy về hai điểm:

a) Tìm trong số các tổ hợp tuyến tính của các hàm cầu, các tổ hợp nào chỉ thay đổi dấu dưới tác dụng của các phần tử quay C_2, C_4, C_3, C_6, C'_2 có mặt trong nhóm $\mathcal{G}$. Các hàm này sẽ là các hàm điều hòa tinh thể tạo nên các không gian con một chiều thực hiện các biểu diễn một chiều của các nhóm điểm $\mathcal{G}$. Đối chiếu các dấu nói trên và các giá trị của các đặc biểu của nhóm, ta sẽ xác định được biểu diễn cụ thể một chiều tương ứng với từng hàm điều hòa tinh thể đó.

b) Tìm trong số các tổ hợp tuyến tính các hàm cầu, cặp tổ hợp nào biến đổi lẫn nhau dưới tác dụng của các phần tử nói trên của nhóm điểm $\mathcal{G}$. Cặp hàm này sẽ là cặp hàm điều hòa tinh thể thực hiện các biểu diễn bất khả quy hai chiều của nhóm $\mathcal{G}$. Đối chiếu quy luật biến đổi giữa mỗi cặp đó với bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{G}$, ta sẽ xác định được biểu diễn hai chiều cụ thể tương ứng với từng cặp hàm điều hòa tinh thể đó. Dĩ nhiên, trong cả hai điểm, ta có thể sử dụng các kết quả khai triển biểu diễn nói ở § 14 xem là những thông tin dầu tiên của bài toán.

Theo chương trình này, ta hãy lần lượt xét tác dụng của từng phần tử quay C'_2, C_2, C_4, C_3, C_6 đối với các nhân tử $P^l_m(\theta)$, cosmφ, sinm φ của các hàm cầu. Kết quả ghi thành bảng sau.

	C'_2: $\theta \to \pi - \theta$, $\varphi \to -\varphi$	C_2: $\theta \to \theta$, $\varphi \to \varphi + \pi$	C_4: $\theta \to \theta$, $\varphi \to \varphi + \frac{\pi}{2}$	
			$m = 2n$	$m = 2n + 1$
$\cos m\varphi$	$\cos m\varphi$	$(-1)^m \cos m\varphi$	$(-1)^n \cos m\varphi$	$(-1)^n \sin m\varphi$
$\sin m\varphi$	$-\sin m\varphi$	$(-1)^m \sin m\varphi$	$(-1)^n \sin m\varphi$	$(-1)^{n+1} \cos m\varphi$
$P^m_l(\theta)$	$(-1)^{l-m} P^m_l(\theta)$	$P^m_l(\theta)$	$P^m_l(\theta)$	

	C_3: $\theta \to \theta$, $\varphi \to \varphi + 2\pi/3$		C_6: $\theta \to \theta$, $\varphi \to \varphi + \pi/3$	
	$m = 3n$	$m = 3n + k$	$m = 2n$	$m = 2n + 1$
$\cos m\varphi$	$\cos m\varphi$	$\cos\left(m\varphi + \frac{2k\pi}{3}\right)$	$(-1)^n \cos m\varphi$	$(-1)^n \cos\left(m\varphi + \frac{k\pi}{3}\right)$
$\sin m\varphi$	$\sin m\varphi$	$\sin\left(m\varphi + \frac{2k\pi}{3}\right)$	$(-1)^n \sin m\varphi$	$(-1)^n \sin\left(m\varphi + \frac{k\pi}{3}\right)$
$P^m_l(\theta)$	$P^m_l(\theta)$		$P^m_l(\theta)$	

Theo (15-3), ta có ngay các kết luận về phép phân tích không gian các hàm cầu thành các không gian con bất biến của các nhóm điểm. Vì nhân tử $P^m_l(\theta)$ chỉ đổi dấu là cùng dưới tác dụng của các phần tử quay kể trên, nên sự khác nhau ở hai điểm nói trên được hoàn toàn quyết định bởi quy luật biến đổi giữa các nhân tử cos mφ và sin mφ. Chẳng hạn, nếu với một m, nào đó cos m$\varphi \to \alpha$cos mφ + βsin mφ, ($\beta \neq 0$) thì rõ ràng hai hàm cầu $\sqrt{2}\ P^m_l(\theta)$ cos mφ và $\sqrt{2}\ P^m_l(\theta)$ sin mφ với giá trị đó của m phải lập thành một không gian bất khả quy hai chiều nào đó của nhóm $\mathcal{G}$ đang xét. Ví dụ với nhóm $\mathcal{D}_4$, để ý đến các phần tử C_2', C_2, C_4, ta thấy rằng khi m lẻ thì cặp hàm cầu nói trên biến đổi lẫn nhau, do đó chúng làm thành không gian bất khả quy hai chiều tương ứng với biểu diễn bất khả quy hai chiều duy nhất $\mathscr{E}$. Mặt khác, vì với các giá trị chẵn của m, cos mφ và sin mφ chỉ đổi dấu là cùng, nên từng hàm cầu $\sqrt{2}\, P_l^m(\theta)\cos m\varphi$, cũng như từng hàm cầu $\sqrt{2}\, P_l^m(\theta)\sin m\varphi$, làm thành một không gian biểu diễn một chiều riêng biệt của nhóm $\mathscr{D}_4$. Đối chiếu các dấu biến đổi đó với bảng đặc biểu của $\mathscr{D}_4$, ta sẽ xác định được hàm cầu nào tương ứng với biểu diễn một chiều cụ thể nào. Chẳng hạn, theo (15-3), ta có

$$C_2'P_l^o(\theta) = (-1)^l\, P_l^o(\theta),$$

từ đó, đối chiếu với bảng đặc biểu của nhóm $\mathscr{D}_4$, ta thấy hàm $P_l^o(\theta)$ thuộc biểu diễn $\mathscr{A}_1$ khi l chẵn và biểu diễn $\mathscr{A}_2$ khi l lẻ. Ta được bảng sau :

Bảng hàm điều hòa tinh thể cho nhóm $\mathscr{D}_4$

l lẻ	l chẵn	Các hàm điều hòa tinh thể (chuẩn hóa sai khác 2π)
$\mathscr{A}_2$	$\mathscr{A}_1$	P_l^o, $\sqrt{2}\, P_l^{4n}\cos 4n\varphi$
$\mathscr{A}_1$	$\mathscr{A}_2$	$\sqrt{2}\, P_l^{4n}\sin 4n\varphi$
$\mathscr{B}_1$	$\mathscr{B}_2$	$\sqrt{2}\, P_l^{4n+2}\cos(4n+2)\varphi$
$\mathscr{B}_2$	$\mathscr{B}_1$	$\sqrt{2}\, P_l^{4n+2}\sin(4n+2)\varphi$
$\mathscr{E}$	$\mathscr{E}$	$\sqrt{2}\, P_l^{2n+1}\cos(2n+1)\varphi$ $\sqrt{2}\, P_l^{2n+1}\sin(2n+1)\varphi$

Với $l = 3$, theo (14-13), biểu diễn $\mathscr{D}^{(3)}$ chứa biểu diễn $\mathscr{E}$ hai lần. Cụ thể hơn vì theo 15-4, ta có hai biểu diễn $\mathscr{E}$:

$$l = 3, \mathscr{E}: \begin{cases} \sqrt{2}\, P_3^1\cos\varphi,\ \sqrt{2}\, P_3^1\sin\varphi,\ (n=0), \\ \sqrt{2}\, P_3^3\cos 3\varphi,\ \sqrt{2}\, P_3^3\sin 3\varphi,\ (n=1), \end{cases}$$

nên, ở đây, để tìm trạng thái ở mức gần đúng cấp không của thuyết nhiễu loạn, riêng cho biểu diễn $\mathscr{E}$ ta phải giải phương trình đặc trưng. Với $l = 4$, biểu diễn $\mathscr{D}^{(4)}$ chứa biểu diễn $\mathscr{A}_1$ hai lần và biểu diễn $\mathscr{E}$ hai lần. Cụ thể hơn, vì theo (15-4) ta có hai biểu diễn $\mathscr{A}_1$ và hai biểu diễn $\mathscr{E}$ sau :

$$l = 4, \mathscr{A}_1: \begin{cases} P_4^o,\ (n=0), \\ \sqrt{2}\, P_4^4\cos 4\varphi,\ (n=1), \end{cases}$$

$$\mathscr{E}: \begin{cases} \sqrt{2}\, P_4^1 \cos\varphi, & \sqrt{2}\, P_4^1 \sin\varphi,\ (n=0), \\ \sqrt{2}\, P_4^3 \cos 3\varphi, & \sqrt{2}\, P_4^3 \sin 3\varphi,\ (n=1), \end{cases}$$

nên ta cần phải giải phương trình đặc trưng riêng cho hai biểu diễn đó. Tương tự như trên ta có thể tính các hàm điều hòa tinh thể cho nhóm $\mathscr{D}_6$.

Bảng hàm điều hòa tinh thể cho nhóm $\mathscr{D}_6$

l lẻ	l chẵn	Các hàm điều hòa tinh thể
$\mathscr{A}_2$	$\mathscr{A}_1$	P_l^0; $\sqrt{6}\, P_l^{6n} \cos 6n\varphi$
$\mathscr{A}_1$	$\mathscr{A}_2$	$\sqrt{2}\, P_l^{6n} \sin 6n\varphi$
$\mathscr{B}_1$	$\mathscr{B}_2$	$\sqrt{2}\, P_l^{6n+3} \cos (6n+3)\varphi$
$\mathscr{B}_2$	$\mathscr{B}_1$	$\sqrt{2}\, P_l^{6n+3} \sin (6n+3)\varphi$
$\mathscr{E}_2$	$\mathscr{E}_2$	$\sqrt{2}\, P_l^{6n-2} \cos (6n \pm 2)\varphi$ $\sqrt{2}\, P_l^{6n\pm 2} \sin (6n \pm 2)\varphi$
$\mathscr{E}_1$	$\mathscr{E}_1$	$\sqrt{2}\, P_l^{6n\pm 2} \cos (6n \pm 1)\varphi$ $\sqrt{2}\, P_l^{6n\pm 1} \sin (6n \pm 1)\varphi$

(15-5)

Bắt đầu từ $l = 4$, cần phải giải phương trình đặc trưng cho các biểu diễn có mặt nhiều lần trong biểu thức khai triển hạ cảm của $\mathscr{D}^{(l)}$. Chẳng hạn với $l = 4$, theo (15-5), ta có:

$$l = 4, \mathscr{E}_2 \begin{cases} \sqrt{2}\, P_4^2 \cos 2\varphi, & \sqrt{2}\, P_4^2 \sin 2\varphi;\ (n=0), \\ \sqrt{2}\, P_4^4 \cos 4\varphi, & \sqrt{2}\, P_4^4 \sin 4\varphi;\ (n=1), \end{cases}$$

và cần phải giải phương trình đặc trưng cho biểu diễn $\mathscr{E}_2$ để tìm các trạng thái nhiễu loạn ở mức gần đúng cấp không.

Trường hợp các nhóm thuộc hệ cubic

Bây giờ ta chuyển sang nhóm O thuộc hệ cubic. Sự phân tích không gian đối với hệ này có một thuận lợi đặc biệt do tính chất đối xứng của các tọa độ x, y và z. Cụ thể hơn, nếu ta chọn các hàm cơ sở của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{O}$ dưới dạng

$$r^l P_l^m(\theta)\cos m\varphi \quad , \quad r^l P_l^m(\theta)\sin m\varphi$$

tức là dưới dạng các đa thức thuần nhất của x, y, z, thì tập hợp các đa thức đó biến đổi lẫn nhau khi có hoán vị giữa các tọa độ x, y,z, và sẽ làm thành các không gian bất khả quy nào đó của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{O}$. Chẳng hạn, khi $l = 0$, hàm $P_o^o = 1$ dĩ nhiên biến đổi theo biểu diễn đơn vị $\mathcal{A}_1$.

Với $l = 1$, đa thức

$$rP_1^o = z \text{ (sai khác một hệ số không đổi)}$$

dưới tác dụng của các hoán vị giữa các tọa độ x, y, z, biến thành các đa thức (sai khác một hệ số không đổi)

$$x = rP_1^1\cos\varphi \quad , \quad y = rP_1^1\sin\varphi.$$

Như thế ba hàm cầu P_1^o, $\sqrt{2}\ P_1^1\cos\varphi$, $\sqrt{2}\ P_1^1\sin\varphi$ là các hàm điều hòa tinh thể của một biểu diễn ba chiều nào đó của nhóm $\mathcal{O}$. Nhưng theo (14-10), với $l = 1$, ta có

$$SO(3)\downarrow\mathcal{O} : \mathcal{D}^{(1)} = \mathcal{F}_1,$$

thành thử biểu diễn đó chính là $\mathcal{F}_1$. Bước sang giá trị $l = 2$, trước hết ta lấy đa thức đẳng cấp (sai khác một hệ số nào đó)

$$r^2P_2^1\cos\varphi = xz.$$

Các hoán vị giữa các tọa độ x, y, z cho các đa thức (sai khác một hệ số nào đó)

$$yx = r^2P_2^2\sin 2\varphi,\ zy = r^2P_2^1\sin\varphi.$$

Vì, theo (14-10) với $l = 2$, ta có

$$SO(3)\downarrow\mathcal{O} : \mathcal{D}^{(2)} = \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2$$

nên ba hàm cầu $\sqrt{2}\ P_2^1\cos\varphi$, $\sqrt{2}\ P_2^2\ \sin 2\varphi$, $\sqrt{2}\ P_2^1\sin\varphi$ chính là các hàm điều hòa tinh thể làm cơ sở cho không gian của biểu diễn $\mathcal{F}_2$. Tất nhiên, hai hàm cầu còn lại P_2^o và $\sqrt{2}\ P_2^2\cos 2\varphi$ sẽ là các hàm điều hòa tinh thể của biểu diễn còn lại $\mathcal{E}$.

§ 16. CÁC QUY TẮC LỌC LỰA CHO MÔMEN VÀ SỐ CHẴN LE

Các quy tắc lọc lựa cho mômen ocbitan l và cho số chẵn lẻ I

Ta hãy xét các trường hợp sau (xem V (8—1))

F : $\mathcal{D}^{(1)-}$ (lưỡng cực điện),

F : $\mathcal{D}^{(2)+}$ (tứ cực điện),

F : $\mathcal{D}^{(1)+}$ (lưỡng cực từ),

F : $\mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}^{(1)-}$ (tán xạ tổ hợp).

Bảng hàm điều hòa tinh thể của nhóm O.

l	$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{A}_2$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{F}_1$	$\mathcal{F}_2$
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$				
1				P_1^0 $\sqrt{2}\,P_1^1\cos\varphi$ $\sqrt{2}\,P_1^1\sin\varphi$	
2			P_2^0 $\sqrt{2}\,P_2^2\cos 2\varphi$		$\sqrt{2}\,P_2^2\cos 2\varphi$ $\sqrt{2}\,P_2^1\cos\varphi$ $\sqrt{2}\,P_2^1\sin\varphi$
3		$\sqrt{2}\,P_3^2\sin 2\varphi$		P_3^0 $\sqrt{\frac{5}{4}}\,P_3^3\cos 3\varphi - \sqrt{\frac{3}{4}}\,P_3^1\cos\varphi$ $\sqrt{\frac{5}{4}}\,P_3^3\sin 3\varphi + \sqrt{\frac{3}{4}}\,P_3^1\sin\varphi$	$\sqrt{2}\,P_3^2\cos 2\varphi$ $\sqrt{\frac{3}{4}}\,P_3^3\cos 3\varphi + \sqrt{\frac{5}{4}}\,P_3^1\cos\varphi$ $\sqrt{\frac{3}{4}}\,P_3^3\sin 3\varphi - \sqrt{\frac{5}{4}}\,P_3^1\sin\varphi$
4	$\sqrt{\frac{7}{12}}\,P_4^0 +$ $+\sqrt{\frac{5}{6}}\,P_4^4\cos 4\varphi$		$\sqrt{2}\,P_4^2\cos 2\varphi$ $\sqrt{\frac{5}{15}}\,P_4^0 -$ $-\sqrt{\frac{7}{6}}\,P_4^4\cos 4\varphi$	$\sqrt{2}\,P_4^4\sin 4\varphi$ $\sqrt{2}\sqrt{\frac{7}{8}}\,P_4^1\cos\varphi - \sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{8}}\,P_4^3\cos 3\varphi$ $\sqrt{2}\sqrt{\frac{7}{8}}\,P_4^1\sin\varphi + \sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{8}}\,P_4^3\sin 3\varphi$	$\sqrt{2}\,P_4^2\sin 2\varphi$ $\sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{8}}\,P_4^1\cos\varphi + \sqrt{2}\sqrt{\frac{7}{8}}\,P_4^3\cos 3\varphi$ $\sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{8}}\,P_4^1\sin\varphi + \sqrt{2}\sqrt{\frac{7}{8}}\,P_4^3\sin 3\varphi$

Bài tính này giải quyết rất đơn giản, dựa vào các chuỗi Clebsch-Gordan cho các nhóm SO(3) hay O(3) (xem (7-5), (11-4), (11-5) và (11-6)).

Chẳng hạn nếu F : $\mathcal{D}^{(1)-}$, tức là khi có bức xạ lưỡng cực điện thì theo (11-4) và (11-5), ta có

$$\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}^{(l)\pm} = \mathcal{D}^{(l-1)\mp} \oplus \mathcal{D}^{(l)\mp} \oplus \mathcal{D}^{(l+1)\mp}$$

và tiêu chuẩn lọc lựa I cho ta các quy tắc lọc lựa sau cho mômen và số chẵn lẻ:

1. $\Delta l \equiv l' - l = 0, 1, -1,$
2. Số chẵn lẻ I đổi dấu.

Còn nếu F : $\mathcal{D}^{(2)+}$, tức là khi có bức xạ tứ cực điện, thì

$$\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(2)+} \otimes \mathcal{D}^{(l)\pm} = \mathcal{D}^{(l-2)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l-1)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm} \oplus$$
$$\oplus \mathcal{D}^{(l+1)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l+2)\pm},$$

và ta được các quy tắc lọc lựa sau :

1. $\Delta l = 0, +1, -1, 2, -2,$
2. Số chẵn lẻ I không đổi dấu.

Khi F : $\mathcal{D}^{(1)+}$, tức là khi có bức xạ lưỡng cực từ, thì

$$\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(1)+} \otimes \mathcal{D}^{(l)\pm} = \mathcal{D}^{(l-1)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l+1)\pm},$$

tức là ta có các quy tắc lọc lựa

1. $\Delta l = 0, 1, -1,$
2. Số chẵn lẻ không đổi dấu.

Cuối cùng, khi F : $\mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}(1)^-$, tức là khi có hiện tượng tán xạ tổ hợp, thì vì

$$\mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}^{(1)-} = \mathcal{D}^{(2)+} \oplus \mathcal{D}^{(1)+} \oplus \mathcal{D}^{(0)+}$$

nên

$$\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}^{(1)-} \otimes \mathcal{D}^{(l)\pm} = [\mathcal{D}^{(2)+} \oplus \mathcal{D}^{(1)+} \oplus \mathcal{D}^{(0)+}] \otimes \mathcal{D}^{(l)\pm} =$$
$$= \mathcal{D}^{(l-2)\pm} \oplus 2\mathcal{D}^{(l-1)\pm} \oplus 3\mathcal{D}^{(l)\pm} \oplus 2\mathcal{D}^{(l+1)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(l+2)\pm},$$

tức là ta có các quy tắc lọc lựa

1. $\Delta l = 0, 1, -1, 2, -2.$
2. Số chẵn lẻ không đổi dấu.

Các quy tắc lọc lựa cho mômen từ m

Tiếp theo, ta giả thiết nhóm $\mathcal{G}$ đang xét là nhóm SO(2). Để có thể ứng dụng các tiêu chuẩn lọc lựa nói trên (ta lưu ý rằng trong các tiêu chuẩn lọc lựa thì các biểu diễn $\mathcal{D}^{(\mu)}$, $\mathcal{D}^{(\nu)}$ và $\mathcal{D}^{(\alpha)}$ là của cùng một nhóm), trước hết ta phải giải quyết bài toán biểu diễn hạ cảm SO(3) $\downarrow$ SO(2) (xem (7-3)) cho các biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(1)+}, \quad \mathcal{D}^{(2)+}.$$

ngoài ra, ta cần dùng chuỗi Clebsch-Gordan (1-2) cho nhóm SO(2). Thế thì, với F : $\mathcal{D}^{(1)}$, ta có theo (7-3) và (1-2)

$$\mathcal{D}^{(\alpha)} \otimes \mathcal{D}^{(\nu)} = \mathcal{D}^{(1)} \otimes \mathcal{D}_z^{(m)} = \left[\mathcal{D}_z^{(-1)} \oplus \mathcal{D}_z^{(0)} \oplus \mathcal{D}_z^{(1)}\right] \otimes \mathcal{D}_z^{(m)} =$$
$$= \mathcal{D}_z^{(m-1)} \oplus \mathcal{D}_z^{(m)} \oplus \mathcal{D}_z^{(m+1)},$$

từ đó, ta có các quy tắc lọc lựa cho hình chiếu m của mômen

$$\Delta m = m' - m = 0,\ 1,\ -1.$$

Tương tự như thế, khi

$$F : \mathcal{D}^{(2)} = \mathcal{D}_z^{(-2)} \oplus \mathcal{D}_z^{(-1)} \oplus \mathcal{D}_z^{(0)} \oplus \mathcal{D}_z^{(1)} \oplus \mathcal{D}_z^{(2)}$$

ta được

$$\Delta m = 0,\ 1,\ -1,\ 2,\ -2.$$

§ 17. CÁC QUY TẮC LỌC LỰA CHO NHÓM $\mathcal{O}$

Phép phân tích tenxơ.

Bây giờ ta chuyển sang tìm các quy tắc lọc lựa cho các nhóm điểm, hệ là tập hợp các electron phân tử mà nhóm đối xứng là một nhóm điểm nào đó. Ta hãy bắt đầu bằng một nhóm loại một, nhóm $\mathcal{O}$ chẳng hạn.

Cũng như trên, thông thường toán tử F giả sử tuân theo các biểu diễn không phải của nhóm điểm mà lại của nhóm trực giao O(3). Thành thử trước hết phải giải bài toán biểu diễn hạ cảm O(3) $\downarrow \mathcal{O}$. Để được đầy đủ, trong bài toán này cần phải giải quyết cả vấn đề phân phối các thành phần khác nhau của tenxơ thực hiện các biểu diễn của nhóm O(3) vào các biểu diễn bất khả quy (của nhóm điểm đang xét) xuất hiện trong bài toán biểu diễn hạ cảm nói trên (bài tính phân tích không gian tenxơ).

Chẳng hạn, theo (14-10) và các kết quả của ví dụ cuối cùng § 15, ta có SO(3) $\downarrow \mathcal{O} : \mathcal{D}^{(1)} = \mathcal{F}_1 : P_x, P_y, P_z$, ($P_x, P_y, P_z$: ba thành phần của vectơ)

$$\mathcal{D}^{(2)} = \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_2\,,$$

$$\mathcal{E} : T_{xx} - T_{yy}\,, T_{zz}\ (T_{xx} + T_{yy} + T_{zz} = 0)\,,$$

$$\mathcal{F}_2 : T_{xy}\,, T_{yz}\,, T_{zx}\,, (T_{ik} : \text{tenxơ dạng hai})\,.$$

Tiếp theo cần tính các chuỗi Clebsch — Gordan cho nhóm $\mathcal{O}$. Bài tính này đã giải quyết ở VI § 11. Với các kết quả đó và với các kết quả phân phối các thành phần tenxơ nói trên, ta có thể kết luận.

Kết luận

1. F : $\mathcal{D}^{(1)}$ *(bức xạ lưỡng cực điện hay từ)*

$$P_x, P_y, P_z : \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_1\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_1\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,,$$
$$\mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_2\,, \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}\,, \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,.$$

Tất cả các phần tử ma trận chéo tại mọi trạng thái của các thành phần P_x, P_y, P_z đều bằng không, vì biểu diễn $\mathcal{F}_1$ không có mặt trong các bình phương đối xứng của các biểu diễn bất khả quy khác nhau của nhóm $\mathcal{O}$.

2. F : $\mathcal{D}^{(2)}$ *(bức xạ tứ cực)*

$$T_{xx} - T_{yy}\,, T_{zz} : \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{A}_1\,, \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{A}_2\,, \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}\,,$$
$$\mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_1\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,, \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,,$$
$$T_{xy}\,, T_{yz}\,, T_{zx} : \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}\,, \mathcal{F}_1 \leftrightarrow \mathcal{F}_1\,,$$
$$\mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}\,, \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{F}_2\,, \mathcal{F}_2 \leftrightarrow \mathcal{F}_1\,.$$

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần $T_{xx} - T_{yy}$ và T_{zz} chỉ khác không tại các trạng thái $\mathcal{E}$, $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$.

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần T_{xy}, T_{yz} và T_{zx} chỉ khác không tại các trạng thái $\mathcal{G}_1$ và $\mathcal{G}_2$.

§ 18. CÁC QUY TẮC LỌC LỰA CHO NHÓM $\mathcal{C}_{3v}$

Phép phân tích không gian tenxơ

Ta hãy chuyển sang một nhóm điểm loại hai, nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ chẳng hạn. Tất nhiên, bài tính trong trường hợp này phức tạp hơn bài tính trên, vì cần phải phân biệt các tenxơ với các giả tenxơ của nhóm O(3). Trước hết, với bài toán biểu diễn hạ cảm $O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v}$, ta có theo (14-16)

$$
\begin{aligned}
O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v} : \mathcal{D}^{(1)+} &= \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}\,, \\
\mathcal{D}^{(1)-} &= \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}\,, \\
\mathcal{D}^{(2)+} &= \mathcal{A}_1 \oplus 2\mathcal{E}\,.
\end{aligned}
$$

Dựa trên các thông tin này, ta có thể tiến hành phân phối các thành phần tenxơ tuân theo các biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)+}$, $\mathcal{D}^{(1)-}$ và $\mathcal{D}^{(2)+}$ của nhóm O(3). Ta hãy lấy các thành phần x, y, z làm mẫu cho các thành phần P_x, P_y và P_z của vectơ tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)-}$ của nhóm O(3). Theo bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, ta thấy rằng thành phần z thực hiện biểu diễn $\mathcal{A}_1$. Thành thử thành phần P_z thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_1$ đó. Từ đó, theo kết quả phân tích biểu diễn thứ hai ở trên, ta kết luận ngay là các thành phần còn lại P_y và P_x thuộc biểu diễn còn lại, tức là biểu diễn $\mathcal{E}$. Ta viết

$$
\begin{aligned}
O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v} : \mathcal{D}^{(1)} &= \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E}\,, \\
\mathcal{A}_1 &: P_z\,, \\
\mathcal{E} &: P_x\,, P_y\,.
\end{aligned}
$$

Tương tự như trên, ta lấy các tổ hợp $L_z = x\partial_y - y\partial_x$, $L_y = y\partial_z - z\partial_y$, $L_x = z\partial_x - x\partial_z$ làm mẫu cho các thành phần của $R_x = P_{yz} - P_{zy}$, $R_y = P_{zx} - P_{xz}$, $R_z = P_{xy} - P_{yx}$ của tenxơ hoàn toàn phản xứng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)+}$ của nhóm O(3). Nhưng vì L_z không đổi dấu khi có phép quay quanh trục Oz và lại đổi dấu khi có phản chiếu qua mọi mặt phẳng đi qua trục Oz nên, dựa vào bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, ta thấy rằng thành phần L_z thực hiện biểu diễn $\mathcal{A}_2$ của nhóm đó. Như thế, thành phần R_z thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_2$. Từ đó, đẳng thức thứ nhất về phân tích biểu diễn ở trên cho thấy rằng các thành phần R_x và R_y là thuộc biểu diễn $\mathcal{E}$. Ta viết

$$
\begin{aligned}
O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v} : \mathcal{D}^{(1)} &= \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}\,, \\
\mathcal{A}_2 &: R_x\,, R_y\,, \\
\mathcal{E} &: R_z\,.
\end{aligned}
$$

Cuối cùng, ta xét sự phân phối các thành phần T_{ij} của tenxơ hạng hai đối xứng có vết bằng không của biểu diễn $\mathcal{D}^{(2)+}$ của nhóm O(3) theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$. Cũng như trên, ta lấy các lượng xx, xy, xz, yy ,... làm mẫu cho các thành phần đó. Theo kết quả phân tích biểu diễn thứ ba ở trên, ta thấy rằng một trong các thành phần đó phải thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_1$. Theo bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, thành phần z thực hiện biểu diễn $\mathcal{A}_1$. Mặt khác, vì $\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_1$, nên rõ ràng zz cũng thực hiện biểu diễn này. Như thế, thành phần T_{zz} thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_1$. Nhưng vì $T_{xx} + T_{yy} = - T_{zz}$, nên $T_{xx} + T_{yy}$ cũng thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_1$ đó. Thành thử, thuộc biểu diễn còn lại $\mathcal{E}$ là các thành phần $T_{xx} - T_{yy}$, T_{xy}, T_{yz}, T_{zx}. Ta viết

$$
\begin{aligned}
O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v} : \mathcal{D}^{(2)+} &= \mathcal{A}_1 \oplus 2\mathcal{E} , \\
\mathcal{A}_1 &: T_{zz}, (T_{xx} + T_{yy}) , \\
2\mathcal{E} &: T_{xx} - T_{yy} , T_{xy} , T_{yz} , T_{zx} .
\end{aligned}
$$

Chuỗi Clebsch — Gordan

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_2 , \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E} , \\
&\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E} , \mathcal{E} \otimes \mathcal{E} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E} , \\
&[\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1] = [\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{A}_2] = \mathcal{A}_1 , [\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} .
\end{aligned}
$$

Kết luận

1. F : $\mathcal{D}^{(1)-}$ *(bức xạ lưỡng cực điện)*

$$
\begin{aligned}
P_z &: \mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_2 , \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E} , \\
P_x , P_y &: \mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{E} \quad , \mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{E} \quad , \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E} ,
\end{aligned}
$$

Các phần tử ma trận chéo của thành phần P_z là khác không tại mọi trạng thái.

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần P_x và P_y chỉ khác không tại trạng thái $\mathcal{E}$.

2. F : $\mathcal{D}^{(2)+}$ *(bức xạ tứ cực điện)*

$$
\begin{aligned}
T_{zz} = - T_{xx} - T_{yy} &: \mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_2 , \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E} . \\
T_{xx} - T_{yy} , T_{xy} , T_{yz} , T_{zx} &: \mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{E} \quad , \mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{E} \quad , \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E} .
\end{aligned}
$$

Các phần tử ma trận chéo của T_{zz} là khác không với mọi trạng thái.

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần $T_{xx} - T_{yy}$, T_{xy} , T_{yz} và T_z chỉ khác không tại trạng thái $\mathcal{E}$.

Độc giả có thể suy ra các kết luận cho trường hợp bức xạ lưỡng cực từ

§ 19. CÁC QUY TẮC LỌC LỰA CHO NHÓM $\mathcal{D}_{2d}$

Phép phân tích không gian tenxơ

Ta hãy chuyển sang nhóm $\mathcal{D}_{2d}$. Theo (14-17) ta có các thông tin

$$
\begin{aligned}
O(3) \downarrow \mathcal{D}_{2d} : \mathcal{D}^{(1)+} &= \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E} , \mathcal{D}^{(1)-} = \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{E} , \\
\mathcal{D}^{(2)+} &= \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E} .
\end{aligned}
$$

Ta dễ thấy rằng z thuộc biểu diễn $\mathcal{B}_2$, thành thử P_z thuộc biểu diễn $\mathcal{B}_2$ và, từ đó, P_x và P_y thuộc biểu diễn $\mathcal{E}$. Tương tự như thế, $L_z = x\partial_y - y\partial_x$ thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_2$. Thành thử R_z thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_2$, còn R_x và R_y thuộc biểu diễn còn lại $\mathcal{E}$.

Tiếp theo, ta hãy phân phối các thành phần của tenxơ đối xứng hạng hai có vết bằng không T_{ik} theo các biểu diễn $\mathcal{A}_1$, $\mathcal{B}_1$, $\mathcal{B}_2$ và $\mathcal{E}$ của nhóm $\mathcal{D}_{2d}$. Vì $\mathcal{B}_2 \otimes \mathcal{B}_2 = \mathcal{A}_1$ và z thuộc biểu diễn $\mathcal{B}_2$, nên zz, tức là T_{zz} và $T_{xx} + T_{yy}$ $(= - T_{zz})$ thuộc biểu diễn $\mathcal{A}_1$. Mặt khác, vì $\mathcal{B}_2 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E}$ và x, y thuộc biểu diễn $\mathcal{E}$, nên ta suy ra xz và yz, tức là T_{xz} và T_{yz} thuộc biểu diễn $\mathcal{E}$. Như thế, còn lại hai thành phần $T_{xx} - T_{yy}$ và T_{xy} mà ta cần xếp vào hai biểu diễn còn lại $\mathcal{B}_1$ và $\mathcal{B}_2$. Nhưng dễ thấy rằng xy và từ đó T_{xy} thuộc biểu diễn $\mathcal{B}_2$. Như thế, $T_{xx} - T_{yy}$ thuộc biểu diễn $\mathcal{B}_1$.

Tóm lại, ta có thể viết

$O(3) \downarrow \mathcal{D}_{2d}$:

$$\mathcal{D}^{(1)+} = \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{E}, \ \mathcal{B}_2 : R_z, \ \mathcal{E} : R_x, R_y .$$

$$\mathcal{D}^{(1)-} = \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{E}, \ \mathcal{A}_2 : P_z, \ \mathcal{E} : P_x, P_y .$$

$$\mathcal{D}^{(2)+} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{E},$$

$$\mathcal{A}_1 : T_{zz}, (T_{xx} + T_{yy}), \ \mathcal{B}_1 : T_{xx} - T_{yy}, \ \mathcal{B}_2 : T_{xy}, \ \mathcal{E} : T_{xz}, T_{yz}.$$

Chuỗi Clebsch—Gordan

$$\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_1, \ \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_2, \ \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_1,$$
$$\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}_2, \ \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E},$$
$$\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_1, \ \mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2, \ \mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}_1,$$
$$\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E},$$
$$\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_1 = \mathcal{A}_1, \ \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2 = \mathcal{A}_2, \ \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E},$$
$$\mathcal{B}_2 \otimes \mathcal{B}_2 = \mathcal{A}_1, \ \mathcal{B}_2 \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E},$$
$$\mathcal{E} \otimes \mathcal{E} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2,$$
$$[\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_1] = [\mathcal{A}_2 \otimes \mathcal{A}_2] = [\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_1] = [\mathcal{B}_2 \otimes \mathcal{B}_2] = \mathcal{A}_1,$$
$$[\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2.$$

Kết luận

1. F : $\mathcal{D}^{(1)-}$ *(bức xạ lưỡng cực điện)*

P_z : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{B}_1$, $\mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}$.

P_x, P_y : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$.

Các phần tử ma trận chéo của P_z chỉ khác không tại trạng thái $\mathcal{E}$. Các phần tử ma trận chéo của P_x và P_y đều bằng không.

2. F : $\mathcal{D}^{(1)+}$ *(bức xạ lưỡng cực từ)*

R_z : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{B}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}$.

R_x, R_y : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$.

Các phần tử ma trận chéo của R_x, R_y và R_z đều bằng không tại mọi trạng thái.

3. F : $\mathcal{D}^{(2)+}$ *(bức xạ tứ cực điện)*

T_{zz}, $(T_{xx} + T_{yy})$: $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_1$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$, $\mathcal{B}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_1$, $\mathcal{B}_2 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}$.

$T_{xx} - T_{yy}$: $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_1$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}$,

T_{xy} : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{B}_2$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{B}_1$, $\mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}$.

T_{xz}, T_{yz} : $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_1 \leftrightarrow \mathcal{E}$, $\mathcal{B}_2 \leftrightarrow \mathcal{E}$.

Các phần tử ma trận chéo của T_{zz} đều khác không tại mọi trạng thái.

Các phần tử ma trận chéo của $T_{xx} - T_{yy}$ và T_{xy} chỉ khác không tại trạng thái $\mathcal{E}$.

Các phần tử ma trận chéo của T_{xz} và T_{yz} đều bằng không tại mọi trạng thái.

§ 20. MỘT SỐ KẾT QUẢ KHÁC

Sau đây, chúng ta ghi thêm một số kết quả khác

I. $SO(3) \downarrow \mathcal{T}$:

$\mathcal{D}^{(1)} = \mathcal{F}$; $P_x, P_y, P_z : \mathcal{F}$.

$\mathcal{D}^{(2)} = \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}$;

$T_{xx} + \varepsilon T_{yy} + \varepsilon^2 T_{zz}, T_{xx} + \varepsilon^2 T_{yy} + \varepsilon T_{zz} : \mathcal{E}, \varepsilon = \exp \frac{2\pi i}{3}$.

$T_{xy}, T_{yz}, T_{zx} : \mathcal{F}$

$\mathcal{A} \otimes \mathcal{A} = \mathcal{A}, \mathcal{A} \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E}, \mathcal{A} \otimes \mathcal{F} = \mathcal{F}$,

$\mathcal{E} \otimes \mathcal{E} = \mathcal{E} \oplus 2\mathcal{A}, \mathcal{E} \otimes \mathcal{F} = 2\mathcal{F}, \mathcal{F} \otimes \mathcal{F} = \mathcal{A} \oplus \mathcal{E} \oplus 2\mathcal{F}$,

$[\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}] = \mathcal{A}, [\mathcal{E} \otimes \mathcal{E}] = \mathcal{E} \oplus \mathcal{A}, [\mathcal{F} \otimes \mathcal{F}] = \mathcal{A} \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}$.

1. F : $\mathcal{D}^{(1)}$ *(bức xạ lưỡng cực)*

$P_x, P_y, P_z : \mathcal{A} \leftrightarrow \mathcal{F}, \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{F}, \mathcal{F} \leftrightarrow \mathcal{F}$.

Các phần tử ma trận chéo của P_x, P_y và P_z chỉ khác không ở trạng thái $\mathcal{F}$.

2. F : $\mathcal{D}^{(2)}$ *(bức xạ tứ cực)*

$T_{xx} + \varepsilon T_{yy} + \varepsilon^2 T_{zz}, T_{xx} + \varepsilon^2 T_{yy} + \varepsilon T_{zz} : \mathcal{A} \leftrightarrow \mathcal{E}, \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{E}, \mathcal{F} \leftrightarrow \mathcal{F}$.

$T_{xy}, T_{yz}, T_{zx} : \mathcal{A} \leftrightarrow \mathcal{F}, \mathcal{E} \leftrightarrow \mathcal{F}, \mathcal{F} \leftrightarrow \mathcal{F}$.

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần $T_{xx} + \varepsilon T_{yy} + \varepsilon^2 T_{zz}$ và $T_{xx} + \varepsilon^2 T_{yy} + \varepsilon T_{zz}$ chỉ khác không tại các trạng thái $\mathcal{E}$ và $\mathcal{F}$.

Các phần tử ma trận chéo của các thành phần T_{xy}, T_{yz} và T_{zx} chỉ khác không tại trạng thái $\mathcal{F}$.

II. $O(3) \downarrow \mathcal{D}_{3d}$.

$\mathcal{D}^{(1)-} = \mathcal{A}_{2u} \oplus \mathcal{E}_u$; $P_z : \mathcal{A}_{2u}$; $P_x, P_y : \mathcal{E}_u$.

$\mathcal{D}^{(2)+} = \mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{E}_g$.

$T_{zz} (T_{xx} + T_{yy}) : \mathcal{A}_{1g}, T_{xx} - T_{yy}, T_{xy}, T_{yz}, T_{zx} : 2\mathcal{E}_g$.

$\mathcal{E}_u \otimes \mathcal{A}_{1g} = \mathcal{E}_u \otimes \mathcal{A}_{2g} = \mathcal{E}_u, \mathcal{E}_u \otimes \mathcal{A}_{1u} = \mathcal{E}_u \otimes \mathcal{A}_{2u} = \mathcal{E}_g$,

$\mathcal{E}_u \otimes \mathcal{E}_u = \mathcal{A}_{1g} \oplus \mathcal{A}_{2g} \oplus \mathcal{E}_g, \mathcal{E}_u \otimes \mathcal{E}_g = \mathcal{A}_{1u} \oplus \mathcal{A}_{2u} \oplus \mathcal{E}_u$,

$[\mathcal{A}_{1g} \otimes \mathcal{A}_{1g}] = [\mathcal{A}_{1u} \otimes \mathcal{A}_{1u}] = [\mathcal{A}_{2u} \otimes \mathcal{A}_{2u}] = [\mathcal{A}_{2g} \otimes \mathcal{A}_{2g}] = \mathcal{A}_{1g}$,

$[\mathcal{E}_g \otimes \mathcal{E}_g] = [\mathcal{E}_u \otimes \mathcal{E}_u] = \mathcal{E}_g \oplus \mathcal{A}_{1g}$ v.v...

1. F : $\mathcal{D}^{(1)-}$

$P_z : \mathcal{A}_{1g} \leftrightarrow \mathcal{A}_{2u}, \mathcal{A}_{2g} \leftrightarrow \mathcal{A}_{1u}, \mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{E}_u$.

$P_x, P_y : \mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{A}_{1g}, \mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{A}_{2g}, \mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{E}_g, \mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{A}_{1u}, \mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{A}_{2u}$.

Các phần tử ma trận chéo của tất cả các thành phần P_x, P_y, P_z đều bằng không.

2. F : $\mathcal{D}^{(2)+}$

T_{zz}, $T_{xx} - T_{yy}$, T_{xy}, T_{yz}, T_{zx} :

$\mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{A}_{1g}$, $\mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{A}_{2g}$, $\mathcal{E}_g \leftrightarrow \mathcal{E}_g$, $\mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{A}_{1u}$, $\mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{A}_{2u}$, $\mathcal{E}_u \leftrightarrow \mathcal{E}_u$.

Các phân tử ma trận chéo của T_{zz} đều khác không tại mọi trạng thái.

Các phân tử ma trận chéo của các thành phần $T_{xx} - T_{yy}$, T_{xy}, T_{yz} và T_{xz} chỉ khác không tại các trạng thái $\mathcal{E}_g$ và $\mathcal{E}_u$.

Các kết quả phân tích không gian tenxơ đều ghi trong các bảng đặc biểu của các nhóm điểm.

Chúng ta lưu ý rằng qua các § 17, 18, 19 và 20, chúng ta đã giải quyết bài toán phân tích các không gian tenxơ hạng không (vô hướng), hạng nhất (vectơ) và hạng hai của nhóm O(3) thành các không gian con bất khả quy đối với các nhóm điểm. Cũng có thể dựa vào các hàm điều hòa để giải bài tính này (xem § 15). Tất nhiên, bài tính cũng có thể giải quyết với công cụ các toán tử chiếu ở II, § 20. Chẳng hạn, ta hãy xét tenxơ hạng hai viết dưới dạng

$$x_i x_k - \frac{\delta_{ij}}{3}(x_l x_l) =$$

$$= \left\{ x^2 - \frac{1}{2}(y^2 + z^2),\ y^2 - \frac{1}{2}(z^2 + x^2),\right.$$

$$\left. z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2),\ xy,\ yz,\ zx \right\},$$

trong đó ba vectơ cơ sở đầu tiên là không độc lập tuyến tính với nhau (có tổng bằng không). Ta chọn nhóm con là $\mathcal{D}_2$.

Để phân tích không gian tenxơ nói trên, ta có thông tin đầu tiên thu từ đẳng thức sau

$$O(3)\downarrow\mathcal{D}_2 : \mathcal{D}^{(2)+} = \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus 2\mathcal{A}_1.$$

Như thế, một không gian tenxơ con bất khả quy là tương ứng với biểu diễn $\mathcal{B}_1$. Ta hãy tìm cơ sở của không gian này. Muốn thế, ta dùng toán tử chiếu tương ứng, ký hiệu là P_1. Theo II, (20-5) ta có

$$P_1 = \frac{n_1}{G}\sum_g \chi^{(\mathcal{B}_1)}(g)\,T_g =$$

$$= \frac{1}{4}\left\{ \chi(e)T_e + \chi(C_x)T_{C_x} + \chi(C_y)T_{C_y} + \chi(C_z)T_{C_z} \right\}$$

(để giản đơn ta đã bỏ chỉ số $\mathcal{B}_1$ ở ký hiệu của đặc biểu). Nhưng, theo định nghĩa của toán tử T_g, ta có

$$P_1\varphi = \frac{1}{4}\left\{ \varphi(eq) - \varphi(C_x^{-1}q) - \varphi(C_y^{-1}q) + \varphi(C_z^{-1}q) \right\} =$$

$$= \frac{1}{4}\{\varphi(eq) - \varphi(C_x q) - \varphi(C_y q) + \varphi(C_z q)\}.$$

Bây giờ ta áp dụng công thức trên cho vectơ φ = xy của không gian năm chiều nói trên. Chú ý rằng

$$e(xy) = xy,\ C_x(xy) = -xy,\ C_y(xy) = -xy,\ C_z(xy) = xy,$$

ta được ngay

$$P_1(xy) = \frac{1}{4}(4xy) = xy.$$

Tương tự như thế, với vectơ xz, ta có

$$P_1(xz) = 0.$$

Tác dụng của toán tử P_1 lên những vectơ còn lại của không gian nói trên cũng đều bằng không. Các kết quả này chứng tỏ rằng cơ sở của không gian biểu diễn của biểu diễn $\mathcal{B}_1$ chính là xy.

Tiếp tục lý luận như thế, ta được kết quả sau

$$\mathcal{B}_1 : xy,\ \mathcal{B}_2 : xz,\ \mathcal{B}_3 : yz,\ \mathcal{A}_1 : x^2,\ y^2 \text{ hay } z^2.$$

§ 21. CÁC HỆ SỐ CLEBSCH—GORDAN VÀ CÁC KÝ HIỆU 3j

Trong các tiết § 21 và § 22, chúng ta sẽ nói đến một số đại lượng có liên quan đến các chuỗi Clebsch — Gordan. Các lượng này thường gặp trong các tính toán cụ thể. Tuy nhiên, vì sự chứng minh các tính chất của các đại lượng đó khá phức tạp, nên ở đây chúng tôi chỉ giới hạn ở cách đặt vấn đề và chỉ ghi các kết quả cuối cùng.

Trước đây, chúng ta đã nói đến chuỗi Clebsch — Gordan

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \oplus \mathcal{D}^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{D}^{(j)}$$

cho nhóm SO(3). Bây giờ ta hãy nghiên cứu vấn đề này một cách chi tiết hơn và đầy đủ hơn.

Gọi

$$|j_1, m_1>,\ |j_2, m_2>,\ |j, m>,$$
$$-j_1 \leqslant m_1 \leqslant j_1,\ -j_2 \leqslant m_2 \leqslant j_2,\ -j \leqslant m \leqslant j,$$

tương ứng là các cơ sở của các biểu diễn $\mathcal{D}^{(j_1)}$, $\mathcal{D}^{(j_2)}$ và $\mathcal{D}^{(j)}$ có mặt trong các chuỗi trên.

Với một giá trị cố định của m, mỗi một vectơ $|j, m>$ là một vectơ riêng của toán tử A_3 (xem (5-24) tương ứng với trị riêng m. Vì thế, vectơ $|j, m>$ là một tổ hợp tuyến tính nào đó của các vectơ $|j_1, m_1> |j_2, m_2>$ với $m_1 + m_2 = m$. Thành thử ta có thể viết

$$|j, m> = \sum_{m_1+m_2=m} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm) |j_1, m_1> |j_2, m_2>. \qquad (21\text{-}1)$$

Các hệ số $(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm)$, như đã biết, gọi là các *hệ số Clebsch — Gordan* cho nhóm SO(3). Vấn đề đề ra là tính các hệ số đó.

Trước hết ta lưu ý rằng cơ sở $|j, m>$ trực chuẩn chỉ được xác định sai khác một thừa số phụ thuộc vào j và có môđun bằng 1. Do đó các hệ thức (21-1) chưa đủ để xác định các hệ số Clebsch — Gordan. Thành thử, để bài tính có thể giải một cách xác định ta đưa ra thêm điều kiện phụ

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm) \geqslant 0. \tag{21-2}$$

Vì các cơ sở $|j, m>$ và $|j_1, m_1>|j_2, m_2>$ đều trực chuẩn, nên ma trận mà các phân tử là các hệ số Clebsch — Gordan là một ma trận unita. Từ đó ta được

$$\sum (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm)^* (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j' m') = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Người ta có thể chứng minh các hệ số Glebsch — Gordan là thực, từ đó hệ thức trên có thể viết dưới dạng

$$\sum (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm) (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j' m') = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \tag{21-3}$$

Nếu giải các phương trình (21-1) theo $|j_1, m_1>|j_2, m_2>$ thì, do tính chất trực giao (21-3) của ma trận các hệ số Clebsch — Gordan, ta được

$$|j_1, m_1>|j_2, m_2> = \sum_{|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j_1 m_1 + m_2)|j, m_1 + m_2>. \tag{21-4}$$

Các hệ số Clebsch-Gordan sẽ bằng không nếu tổng $j_1 + j_2 + j$ không phải là một số nguyên và nếu hệ thức

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2 \text{ (hệ thức tam giác)} \tag{21-5}$$

không được thỏa mãn.

Các hệ số Clebsch-Gordan có biểu thức

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid jm) = \left[\frac{2j+1}{(j_1 + j_2 + j + 1)} (j_2 + j - j_1)!(j + j_1 - j_2)!(j_1 + j_2 - j)! \times \right.$$

$$\left. \times (j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!(j + m)!(j - m)!\right]^{1/2} \times$$

$$\times \sum_z \frac{(-1)^z}{z!(j_1 + j_2 + j - z)!(z + j - j_2 - m_2)!(j_2 + m_2 - z)!(z + j - j_2 + m)!(j_1 - m_1 - z)!},$$

$$(m = m_1 + m_2) \tag{21-6}$$

tổng lấy theo tất cả các z nguyên không âm sao mà đối số của các giai thừa ở mẫu số là không âm.

Từ công thức (21-6) ta có thể suy ra các trường hợp đặc biệt sau

$$(j_1 j_2 j_1 m_2 \mid jm) = \frac{1}{(j - m)!} \times$$

$$\times \left[\frac{(2j+1)(j_2 + j - j_1)!(2j_1)!(j_2 - m_2)!(j + m)!(j - m)!}{(j_1 + j_2 + j + 1)!(j + j_1 - j_2)!(j_1 + j_2 - j)!(j_2 + m_2)!}\right]^{1/2} \tag{21-7}$$

$$(j_1 j_2 - j_1 m_2 \mid jm) = \frac{(-1)^{j_1 + j_2 - j}}{(j + m)!} \times$$

$$\times \left[\frac{(2j+1)(j_2 + j - j_1)!(2j_1)!(j_2 + m_2)!(j + m)!(j - m)!}{(j_1 + j_2 + j + 1)!(j_1 + j_2 - j)!(j_1 - j_2 + j)!(j_2 - m_2)!}\right]^{1/2} \tag{21-8}$$

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j_1 + j_2 m) = \left[\frac{(2j_1)!\,(2j_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!}{(2j)!\,(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!}\right]^{1/2} \qquad (21\text{-}9)$$

$$(j\, j m - m \,|\, 00) = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}\,. \qquad (21\text{-}10)$$

$$(1 j_2 m_1 m_2 \,|\, jm) =$$

$$\begin{bmatrix} \sqrt{\frac{(j_2-m+1)\,(j_2-m)}{(2j_2+2)\,(2j_2+1)}} & -\sqrt{\frac{(j_2+m+1)\,(j_2-m)}{2j_2\,(j_2+1)}} & \sqrt{\frac{(j_2+m+1)\,(j_2+m)}{2j_2\,(j_2+1)}} \\ \sqrt{\frac{(j_2+m+1)\,(j_2-m+1)}{(j_2+1)\,(2j_2+1)}} & \frac{-m}{\sqrt{j_2\,(j_2+1)}} & -\sqrt{\frac{(j_2+m_2)\,(j_2-m_2)}{j_2\,(2j_2+1)}} \\ \sqrt{\frac{(j_2+m+1)\,(j_2+m)}{(2j_2+2)\,(2j_2+1)}} & \sqrt{\frac{(j_2-m+1)\,(j_2+m)}{2j_2\,(j_2+1)}} & \sqrt{\frac{(j_2-m+1)\,(j_2-m)}{2j_2\,(j_2+1)}} \end{bmatrix}$$

Trong ma trận trên, các cột đánh số bằng (từ trái sang phải) $j = j_2 + 1$, $j = j_2$, $j = j_2 - 1$, và các hàng bằng (từ trên xuống dưới) $m = -1$, $m = 0$, $m = 1$.

(21-11)

$$\left[\tfrac{1}{2}\; j_2 m_1 m_2 \,|\, jm\right] = \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} j = j_2 + 1/2 & j = j_2 - 1/2 \end{array} & \\ \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{j_2 - m + 1/2}{2j_2+1}} & \sqrt{\frac{j_2 + m + 1/2}{2j_2+1}} \\ \sqrt{\frac{j_2 + m + 1/2}{2j_2+1}} & -\sqrt{\frac{j_2 - m + 1/2}{2j_2+1}} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} m = -1/2 \\ \\ m = 1/2 \end{array} \end{array}$$

$$(j_2 \geqslant 1/2) \qquad (21\text{-}12)$$

$$(j_1 j_2 00 \,|\, j0) = \begin{cases} (-1)^{j+L} \dfrac{L!}{(L-j_1)!\,(L-j_2)!\,(L-j)!} \left[\dfrac{(2j+1)\,(L-2j_1)!\,(L-2j_2)!\,(L-2j)!}{(L+1)!}\right]^{1/2}, & \text{nếu } L \text{ chẵn} \\ 0, \text{ nếu } L \text{ lẻ, với } L = j_1 + j_2 + j. \end{cases} \qquad (21\text{-}13)$$

Các hệ số Clebsch-Gordan có các tính chất đối xứng sau

$$(j_1 m_1 j_2 m_2 \,|\, jm) = (-1)^{j_1+j_2-j}\,(j_2 m_2 j_1 m_1 \,|\, jm). \qquad (21\text{-}14)$$

$$(j_1 - m_1\, j_2 - m_2 \,|\, j - m) = (-1)^{j_1+j_2-j}\,(j_1 m_1 j_2 m_2 \,|\, jm). \qquad (21\text{-}15)$$

$$(j_1 m_1 j_2 m_2 \,|\, jm) = (-1)^{j_2+m_2} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_1+1}}\,(j_2 - m_2\, jm \,|\, j_1 m) \qquad (21\text{-}16)$$

Do các tính chất đối xứng này, để được tiện lợi người ta thường dùng các hệ số Clebsch-Gordan đối xứng hóa sau, gọi là *ký hiệu 3j*

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix},$$

với định nghĩa

$$(j_1m_1j_2m_2 \,|\, jm) = (-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{2j+1}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{bmatrix}. \tag{21-17}$$

Thế thì các tính chất nói trên của các hệ số Clebsch-Gordan biến thành các tính chất sau của các ký hiệu 3j, chẳng hạn

$$\sum_{m_1, m_2} \sqrt{2j+1}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1' & m_2' & m' \end{bmatrix} = \delta_{m_1m_2'}\delta_{m_2m_2'}, \tag{21-18}$$

$$\sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{bmatrix} = \frac{1}{2j+1}\delta_{jj'}\delta_{mm'}, \tag{21-19}$$

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{bmatrix}, \tag{21-20}$$

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{bmatrix}, \tag{21-21}$$

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_2 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{bmatrix}. \tag{21-22}$$

Cuối cùng ta hãy kê một số ký hiệu 3j đặc biệt :

$$\begin{bmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m}\frac{1}{\sqrt{2j+1}}, \tag{21-23}$$

$$\begin{bmatrix} j+\frac{1}{2} & j & \frac{1}{2} \\ m & -m-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = (-1)^{j-m-1/2}\sqrt{\frac{(j-m+1/2)}{(2j+2)(2j+1)}}, \tag{21-24}$$

$$\begin{bmatrix} j+1 & j & 1 \\ m & -m-1 & 1 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m-1}\sqrt{\frac{(j-m)(j-m+1)}{(2j+3)(2j+2)(2j+1)}}, \tag{21-25}$$

$$\begin{bmatrix} j+1 & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m-1}\sqrt{\frac{(j+m+1)(j-m+1)}{(2j+3)(2j+1)(j+1)}}, \tag{21-26}$$

$$\begin{bmatrix} j & j & 1 \\ m & -m-1 & 1 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m}\sqrt{\frac{(j-m)(j+m+1)}{2(2j+1)(j+1)j}}, \tag{21-27}$$

$$\begin{bmatrix} j & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m}\frac{m}{\sqrt{(2j+1)(j+1)}}. \tag{21-28}$$

Các hệ số Clebsch—Gordan cho phép giải những bài tính cộng momen trong cơ học lượng tử.

Chẳng hạn, ta hãy trở lại bài tính chuyển động trong trường xuyên tâm của một hạt có spin bằng 1/2, đã nêu lên ở § 13. Hàm sóng được đánh số bằng các số lượng tử n, j, l, m_j với $j = l \pm 1/2$, $-j \leqslant m_j \leqslant j$. Ta có

$$\Phi_{n,j,l,m_j} = R_{nj}(r)\, D_{jl}^{m_j}(\theta, \varphi)$$

trong đó, theo (21-1), ta được (thay $m \to m_j$)

$$D_{jl}^{m_j} = |\, j\, m_j > = \sum_{m+m_s=m_j} (l, \frac{1}{2}, m, m_s |\, j m_j)\, Y_l^m\, \chi_{m_s},$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2},$$

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ hay } j = l - \frac{1}{2}.$$

Sử dụng công thức (21-12), tương ứng với các j ở trên ta được

$$D_{l+\frac{1}{2},\, l}^{m_j} = \sqrt{\frac{j + m_j}{2j}}\, \chi_{1/2}\, Y_l^{m_j - 1/2} + \sqrt{\frac{j - m_j}{2j}}\, \chi_{-1/2}\, Y_l^{m_j + 1/2},$$

$$D_{l-\frac{1}{2},\, l}^{m_j} = -\sqrt{\frac{j - m_j + 1}{2j + 2}}\, \chi_{1/2}\, Y_l^{m_j - 1/2} + \sqrt{\frac{j + m_j + 1}{2j + 2}}\, \chi_{-1/2}\, Y_l^{m_j + 1/2}.$$

§ 22. CÁC HỆ SỐ RACAH VÀ CÁC KÝ HIỆU 6j

Các *ký hiệu 6j* hay *hệ số Racah* (khác các hệ số *6j* bởi một thừa số không đổi) là các lượng xác định với định nghĩa

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \sum_m (-1)^{\sum_i (j_i - m_i)} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{bmatrix}, \tag{22-1}$$

tổng lấy theo tất cả các giá trị khả dĩ của m.

Từ định nghĩa (22-1), có thể suy ra hệ thức sau

$$\sum_{m_4, m_5, m_6} (-1)^{j_4 + j_5 + j_6 - m_4 - m_5 - m_6} \begin{bmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{bmatrix}. \tag{22-2}$$

Tiếp theo, dùng các tính chất đối xứng của các ký hiệu 3j, có thể suy ra các tính chất đối xứng sau của các ký hiệu 6j

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_5 & j_4 & j_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ j_4 & j_6 & j_5 \end{Bmatrix}, \tag{22-3}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ j_4 & j_2 & j_3 \end{Bmatrix}. \tag{22-4}$$

Ngoài ra, có thể chứng minh các hệ thức sau

$$\sum_j (2j+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j'_{12} \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} = \frac{1}{2j_{12}+1}\delta_{j_{12}\ j'_{12}}, \tag{22-5}$$

$$\sum_j (-1)^{j+j_{12}+j_{13}}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_2 & j_4 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & j_{13} \\ j_2 & j_4 & j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{12} \end{Bmatrix} \tag{22-6}$$

trong đó j_{kl} ký hiệu số có các giá trị

$$j_{kl} = j_k + j_l,\quad j_k + j_l - 1,\quad j_k + j_l - 2, \ldots, |j_k - j_l|.$$

Sau đây ta ghi một số giá trị đặc biệt của các ký hiệu 6j, ($J \equiv j_1 + j_2 + j_3$).

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & j_3 & j_2 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^J}{\sqrt{(2j_2+1)(2j_3+1)}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} & j_2 + \frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^J\sqrt{\frac{(J-2j_2)(J-2j_3+1)}{(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_3+1)2j_3}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \frac{1}{2} & j_3 - \frac{1}{2} & j_2 - \frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^J\sqrt{\frac{(J+1)(J-2j_1)}{2j_2(2j_2+1)(2j_3+1)2j_3}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3 - 1 & j_2 - 1 \end{Bmatrix} =$$

$$= (-1)^J\sqrt{\frac{J(J+1)(J-2j_1-1)(J-2j_1)}{(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)(2j_3-1)2j_3(2j_3+1)}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3 - 1 & j_2 \end{Bmatrix} =$$

$$= (-1)^J\sqrt{\frac{2(J+1)(J-2j_1)(J-2j_2)(J-2j_3+1)}{2j_2(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_3-1)2j_3(2j_3+1)}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3 - 1 & j_2 + 1 \end{Bmatrix} =$$

$$= (-1)^J\sqrt{\frac{(J-2j_2-1)(J-2j_2)(J-2j_3+1)(J-2j_3+2)}{(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_2+3)(2j_3-1)(2j_3+1)2j_3}},$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 1 & j_3 & j_2 \end{Bmatrix} =$$

$$= (-J)^{J+1}\sqrt{\frac{2j_2(j_2+1)+j_3(j_3+1)-j_1(j_1+1)}{2j_2(2j_2+1)(2j_2+2)2j_3(2j_3+1)(2j_3+2)}}. \tag{22-7}$$

Trong trường chung, ký hiệu 6j có thể viết dưới dạng

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \Delta(j_1j_2j_3)\,\Delta(j_1j_5j_6)\,\Delta(j_4j_2j_6)\,\Delta(j_4j_5j_3)\ \times$$

$$\times \sum_z \frac{(-1)^z(z+1)!}{(z-j_1-j_2-j_3)!\,(z-j_1-j_5-j_6)!\,(z-j_4-j_2-j_6)!\,(z-j_4-j_5-j_3)!}\times$$

$$\times\ \frac{1}{(j_1+j_2+j_4+j_5-z)!\,(j_2+j_3+j_5+j_6-z)!\,(j_3+j_1+j_6+j_4-z)!}, \tag{22-8}$$

với

$$\Delta(abc) \equiv \left[\frac{(a+b-c)!\,(a-b+c)!\,(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!}\right]^{1/2}, \qquad (22\text{-}9)$$

tổng ở (22-8) lấy theo tất cả các z nguyên không âm sao mà các đối số của các giai thừa ở mẫu số là không âm.

Từ các ký hiệu 6j, có thể định nghĩa các ký hiệu 9j như sau

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} =$$

$$= \sum_j (-1)^{2j}(2j+1) \begin{Bmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ j_{32} & j_{33} & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ j_{21} & j & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ j & j_{11} & j_{12} \end{Bmatrix}. \qquad (22\text{-}10)$$

§ 23. NHÓM $R^2_M = R^2 \otimes SO(2)$

Nhóm R^2_M

Trong phần này, chúng ta chuyển sang trình bày phép biểu diễn một tích nửa trực tiếp điển hình là nhóm chuyển động trong không gian Euclid hai chiều:

$$R^2_M = R^2 \otimes SO(2).$$

Nhóm này tất nhiên là một nhóm không đơn, vì có chứa một nhóm con bất biến giao hoán là nhóm các phép tịnh tiến trong không gian hai chiều R^2. Nhóm này lại không compắc, vì nhóm con nói trên là một nhóm không compắc.

Theo định nghĩa, các phần tử của nhóm chuyển động trên có dạng

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\alpha - y\sin\alpha + a, \\ y' &= x\sin\alpha + y\cos\alpha + b, \end{aligned} \qquad (23\text{-}1)$$

trong đó α là góc quay của phép quay thuộc SO(2) còn $\mathbf{p} = (a, b)$ là phép tịnh tiến. Từ đó, ta có thể tham số hóa các phần tử của nhóm như sau

$$g = g(a, b; \alpha). \qquad (23\text{-}2)$$

Với cách tham số hóa này, theo công thức nhân nhóm I, (16-6), ta được

$$g_1(a_1, b_1; \alpha_1)\, g_2(a_2, b_2; \alpha_2) = g(a, b; \alpha),$$

với

$$\begin{aligned} a &= a_1 + a_2\cos\alpha_1 - b_2\sin\alpha_1, \\ b &= b_1 + a_2\sin\alpha_1 + b_2\cos\alpha_1, \\ \alpha &= \alpha_1 + \alpha_2. \end{aligned} \qquad (23\text{-}3)$$

Đó là cách tham số hóa thứ nhất. Còn có cách tham số hóa thứ hai như sau. Ký hiệu

$$\mathbf{p} = (a, b) = (r, \varphi)$$

trong đó r và φ là các tọa độ độc cực của vectơ tịnh tiến (a, b), ta có thể ký hiệu

$$g = g(r, \varphi ; \alpha).$$

Từ đó, ta có chẳng hạn

$$g_1(r_1, 0 ; \alpha_1)\, g_2(r_2, 0 ; 0) = g(r, \varphi ; \alpha),$$

với

$$r = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2 \cos\alpha_1},$$

$$e^{i\varphi} = \frac{r_1 + r_2 e^{i\alpha_1}}{r}, \quad \alpha = \alpha_1. \tag{23-4}$$

Các biểu diễn unita bất khả quy của nhóm R_M^2

Do R_M^2 là một nhóm không compắc, tất cả các biểu diễn unita của nhóm đều vô số chiều (xem VIII, § 9). Ta hãy tìm cách xây dựng các biểu diễn này. Cũng có thể ứng dụng phương pháp chung đã trình bày ở II, § 22. Nhưng cũng có thể thực hiện trực tiếp như sau.

Ta hãy xét không gian vô số chiều $\mathcal{H}$ các hàm vô cùng khả vi f ($\mathbf{x}$) xác định trên vòng tròn $x_1^2 + x_2^2 = 1$. Sau đó, đặt

$$T_S(g) f(\mathbf{x}) = e^{S(\mathbf{p}, \mathbf{x})} f(C^{-1}(\alpha)\mathbf{x}), \tag{23-5}$$

với

$$g = (C(\alpha) \,|\, \mathbf{p}), \qquad S = \text{const} \in C. \tag{23-6}$$

Ta có với

$$g_1 = (C(\alpha_1) \,|\, \mathbf{p}_1), \quad g_2 = (C(\alpha_2) \,|\, \mathbf{p}_2),$$

$$T_S(g_1) T_S(g_2) f(\mathbf{x}) = T_S(g_1) e^{S(\mathbf{p}_2, \mathbf{x})} f[C^{-1}(\alpha_2)\mathbf{x}] =$$

$$= e^{S(\mathbf{p}_1, \mathbf{x})} e^{S(\mathbf{p}_2, C^{-1}(\alpha_1)\mathbf{x})} f[C^{-1}(\alpha_2) C^{-1}(\alpha_1)\mathbf{x}]. \tag{23-7}$$

Nhưng vì phép quay là một phép trực giao:

$$(\mathbf{p}_2, C^{-1}(\alpha_1)\mathbf{x}) = (C(\alpha_1)\mathbf{p}_2, \mathbf{x})$$

nên, từ (23-7), ta được

$$T_S(g_1) T_S(g_2) f(x) = e^{S(\mathbf{p}_1 + C(\alpha_1)\mathbf{p}_2, \mathbf{x})} f[C^{-1}(\alpha_2) C^{-1}(\alpha_1)\mathbf{x}].$$

Đối chiếu kết quả này với biểu thức I (14-3) của tích các phần tử của tích nửa trực tiếp, ta kết luận ngay rằng toán tử T_S xác định ở (23-5) đúng là một phép biểu diễn của nhóm R_M^2.

Ta có thể viết biểu diễn (23-5) dưới một dạng khác. Vì các điểm $\mathbf{x}$ trên vòng tròn bán kính đơn vị có thể hoàn toàn xác định bởi góc độc cực σ, nên biểu thức (23-5) biến thành

$$T_S(g) f(\sigma) = e^{Sr\cos(\sigma - \varphi)} f(\sigma - \alpha). \tag{23-8}$$

Bây giờ ta hãy chứng minh rằng các biểu diễn (23-8) là bất khả quy khi $S \neq 0$. Muốn thế, trước hết ta hãy tính các vi tử của biểu diễn.

Ta có

$$T_S(g(a, 0, 0)) f(\sigma) = e^{Sa\cos\sigma} f(\sigma),$$

từ đó, ta được vi tử tương ứng với tham số a:

$$A_a = \frac{dT_S(g(a, 0, 0))}{da} \Big|_{a=0} = S\cos\sigma. \tag{23-9}$$

Tương tự như thế, ta có

$$T_S(g(0, b, 0))f(\sigma) = e^{Sb\sin\sigma} f(\sigma),$$

$$A_b = S\sin\sigma, \tag{23-10}$$

và, cuối cùng, với tham số α, ta được vi tử

$$A_\alpha = -\frac{d}{d\sigma}. \tag{23-11}$$

Tiếp theo, ta nhận xét rằng với bài toán biểu diễn hạ cảm

$$R_M^2 \downarrow SO(2)$$

ta sẽ được biểu diễn (trong (23-8), cho r = 0)

$$T_S(g(0, 0, \alpha)f(\sigma) = f(\sigma - \alpha). \tag{23-12}$$

Biểu diễn vô số chiều này sẽ phân thành tổng trực tiếp của những biểu diễn một chiều của nhóm giao hoán SO(2), thực hiện trong các không gian con một chiều $\exp in\sigma$, n: số nguyên. Tất nhiên, điều này là tương đương với khả năng khai triển không gian $\mathcal{H}$ các hàm $f(\sigma)$ theo hệ hàm trực chuẩn đầy đủ $\{\exp in\sigma\}$ đó. Từ đó, tính bất khả quy của biểu diễn T_S, $S \neq 0$ quy về tính bất khả quy của cơ sở trên. Quả vậy, theo (23-9) (23-10) và (23-11), với

$$E_+ = A_a + iA_b, \quad E_- = A_a - iA_b, \quad H = A_\alpha, \tag{23-13}$$

ta được

$$E_+e^{in\sigma} = Se^{i(n+1)\sigma}, \quad E_-e^{in\sigma} = Se^{i(n-1)\sigma}, He^{in\sigma} = -ine^{in\sigma}, \tag{23-14}$$

và kết quả này chứng tỏ rằng cơ sở trên, tức là không gian các hàm f, là bất khả quy.

Tất nhiên, khi $S = 0$, biểu diễn (23-8) sẽ lấy dạng

$$T_0(g)f(\sigma) = f(\sigma - \alpha),$$

trùng với dạng (23-12), tức là dạng hoàn hoàn khả quy, và phân thành tổng vô số biểu diễn bất khả quy một chiều trong các không gian con một chiều $\exp in\sigma$.

Bây giờ ta nói đến điều kiện biểu diễn unita. Tất nhiên, trong trường hợp này phải biến không gian $\mathcal{H}$ thành một không gian Hilbert nào đó bằng cách trang bị không gian đó một tích vô hướng nào đó. Ta định nghĩa tích vô hướng trong không gian đó như sau:

$$(f_1, f_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f_1(\sigma) f_2^*(\sigma) d\sigma. \tag{23-15}$$

Thế thì dễ thấy rằng biểu diễn (23-8) là unita khi S là một số thuần ảo:

$$S = i\rho, \rho \in R.$$

Các phần tử ma trận của các biểu diễn bất khả quy của nhóm R^2_M

Trước đây, (VIII, § 8) ta đã chứng tỏ rằng các phần tử ma trận của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3) có liên quan chặt chẽ đến các hàm cầu suy rộng. Bây giờ, ta sẽ chứng tỏ rằng các phần tử ma trận của các biểu diễn bất khả quy của nhóm R^2_M sẽ liên quan chặt chẽ đến các hàm Bessel, một điều đã nêu lên ở cuối § 8, chương VIII. Quả vậy, trong không gian các hàm thực hiện biểu diễn, ở đấy có xác định tích vô hướng dạng (23-15), ta hãy chọn hệ trực chuẩn đầy đủ các hàm $\exp in\sigma$, và tính các phần tử ma trận sau của toán tử biểu diễn $T_S(g)$:

$$t^S_{mn}(g) = (T_S(g)e^{in\sigma}, e^{im\sigma}). \qquad (23\text{-}16)$$

Trong (23-8), thay f bằng $\exp in\sigma$, sau đó lấy kết quả thu được thay vào (23-16), ta được phần tử ma trận

$$t^S_{mn}(g) = \frac{e^{-in\alpha}}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{Sr\cos(\sigma-\varphi)}\, e^{i(n-m)\sigma}\, d\sigma. \qquad (23\text{-}17)$$

Tiếp theo, đặt

$$\sigma - \varphi = \frac{\pi}{2} - \theta,$$

từ (23-17) ta được

$$t^S_{mn}(g) = i^{n-m}\, e^{-i[n\alpha+(m-n)\varphi]}\, J_{n-m}(-iSr), \qquad (23\text{-}18)$$

trong đó J là hàm Bessel:

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{ix\sin\theta - in\theta}\, d\theta. \qquad (23\text{-}19)$$

Với biểu diễn unita $S = i\rho$, ta được các phần tử ma trận

$$t^{i\rho}_{mn}(g) = i^{n-m}\, e^{-i[n\alpha+(m-n)\varphi]}\, J_{n-m}(\rho r). \qquad (23\text{-}20)$$

Như đã biết, các hàm Bessel thỏa mãn phương trình vi phân

$$\left[x^2\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx} + x^2\right]J_n(x) = n^2 J_n(x),$$

và, cũng tương tự như trong trường hợp các hàm cầu (xem VIII, § 8), các phương trình này có thể suy từ biểu thức của toán tử Casimir của nhóm R^2_M.

Để kết thúc phần này, ta hãy minh họa phương pháp suy các hệ thức hàm đối với hàm Bessel từ lý thuyết biểu diễn nhóm.

Nói chung, xuất phát điểm là định nghĩa

$$T_S(g_1 g_2) = T_S(g_1)\, T_S(g_2).$$

Viết theo tích các phần tử ma trận, từ đẳng thức trên, ta được

$$t^s_{mn}(g_1 g_2) = t^s_{mk}(g_1)\, t^s_{kn}(g_2)\,.$$

Tiếp theo, ta chọn

$$g = g(r_1, 0, 0), \quad g_2 = g(r_2, \varphi_2, 0),$$

sau đó sử dụng các công thức (23-4) và (23-18). Thế thì sau một số phép tính toán, ta được hệ thức quan trọng sau

$$e^{in\varphi} J_n(r) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\varphi_2} J_{n-k}(r_1) J_k(r_2)\,, \tag{23-21}$$

thường gọi là *công thức cộng* cho các hàm Bessel.

Từ công thức này, lấy tích phân theo φ_2 từ 0 đến 2π sau khi nhân hai vế với $\exp(-im\varphi_2)/2$ và lưu ý đến tính chất trực giao của hệ $\exp in\varphi_2$, ta được hệ thức quan trọng thứ hai

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(n\varphi - m\varphi_2)} J_n(r)\, d\varphi_2 = J_{n-m}(r_1) J_m(r_2),$$

thường gọi là *công thức nhân* cho các hàm Bessel.

Lý thuyết biểu diễn có thể cho phép nghiên cứu sâu xa hơn các tính chất của các hàm Bessel (cũng như của các hàm đặc biệt khác), nhưng chúng hãy dừng tại đây, vì yêu cầu là chỉ để minh họa phương pháp.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [8], [9], [10], [11], [12], [13], [14], [15].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Đọc §1 ÷ §22.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Đọc §1 ÷ §22.

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc toàn chương.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc toàn chương.

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương.

CHƯƠNG IX

CÁC TRẠNG THÁI ÊLECTRÔN PHÂN TỬ THEO PHƯƠNG PHÁP MO-LCAO

Theo phương pháp trình bày ở § 6, chương V, chúng ta biết rằng trạng thái hệ êlectrôn phân tử tuân theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của cấu hình các hạt nhân phân tử. Tuy nhiên, chúng ta vẫn chưa nói đến cách tìm biểu thức cụ thể các trạng thái đó.

Trong chương này, chúng ta sẽ trình bày một phương pháp tính gần đúng để tìm các trạng thái đó.

§ 1. CÁC CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA PHƯƠNG PHÁP MO-LCAO

Khái niệm về thế năng hiệu dụng

Do bài tính chuyển động của hệ êlectrôn phân tử rất phức tạp, nói chung chúng ta không thể tìm chuyển động của toàn bộ hệ đó cùng một lúc, trong đó phải kể đến tương tác giữa các hạt nhân và tương tác lẫn nhau giữa các êlectrôn (thông thường, các tương tác này xem là tương tác Coulomb). Hiện có một phương pháp tính gần đúng thích hợp, dựa vào các ý chính sau đây:

1. Cần quy chuyển động của toàn bộ các êlectrôn về chuyển động của *từng* êlectrôn. Hàm sóng của từng êlectrôn phân tử gọi là *quỹ hàm phân tử* và viết tắt là MO (còn hàm sóng của từng êlectrôn nguyên tử gọi là *quỹ hàm nguyên tử* và viết tắt là AO).

2. Mỗi êlectrôn được xem là chuyển động trong trường thế năng của các hạt nhân và dưới tác dụng của một thế năng hiệu dụng *chung* nào đó. Trong chuyển động này, các êlectrôn xem là *độc lập* với nhau.

Khái niệm về thế năng hiệu dụng này chỉ là một sự suy rộng của khái niệm trường tự thích trong bài tính các nguyên tử (phương pháp tính gần đúng Hartree-Fock). Như lệ thường, *không thể biết trước* được biểu thức của thế năng hiệu dụng này.

3. Sau khi tìm được các MO của từng êlectrôn, trạng thái của hệ êlectrôn sẽ là *tích phản xứng* của các MO đó (theo nguyên lý loại trừ Pauli).

Khái niệm về LCAO.

Với khái niệm thế năng hiệu dụng chung ở trên, toán tử năng lượng của mỗi êlectrôn sẽ có dạng chung, ký hiệu là F. Và, nếu ta viết phương trình Schrodinger

$$F\Phi_{\mu} = \varepsilon_{\mu}\Phi_{\mu}, \tag{1-1}$$

thì các nghiệm Φ_{μ} sẽ là các MO cần tìm, còn ε_{μ} là năng lượng tương ứng.

Để giải phương trình (1-1), người ta đề ra một ý vật lý đơn giản như sau. Giả sử có một êlectrôn chuyển động xung quanh các hạt nhân của phân tử. Khi êlectrôn này ở tại lân cận của một hạt nhân A nào đó, do khoảng cách của êlectrôn đó đến các hạt nhân khác là tương đối lớn so với khoảng cách đến hạt nhân A, về thực tế thế năng của toàn bộ các hạt nhân phân tử tác dụng lên êlectrôn quy về thế năng của hạt nhân A. Từ đó, hàm MO gần đúng có thể xem là một quỹ hàm nguyên tử AO nào đó, tương ứng với hạt nhân A:

$$MO \approx AO(A), \text{ ở lân cận của hạt nhân } A.$$

Đối với các lân cận của các hạt nhân B, C,... khác, ta cũng có các kết quả tương tự như thế:

$$MO \approx AO(B),\ MO \approx AO(C) \ldots \text{ tại các lân cận của } B, C \ldots$$

Nhưng nếu êlectrôn có thể ở các trạng thái AO (A), AO (B), AO (C),... thì nó cũng có thể ở trạng thái

$$MO = c_A AO(A) + c_B AO(B) + c_C AO(C) + \ldots \tag{1-2}$$

trong đó c_A, c_B, c_C... là những hệ số nào đó. Nói cách khác, ta có thể xem quỹ hàm phân tử MO là một tổ hợp tuyến tính nào đó của những quỹ hàm nguyên tử AO. Từ đó, xuất hiện danh từ LCAO (linear combination of atomic orbitals)[1].

Vấn đề là tìm các hệ số c nói trên — thường gọi là *hệ số LCAO* — sao cho phương trình (1-1) được thỏa mãn. Muốn thế, ta hãy viết lại đẳng thức (1-2) dưới dạng

$$\Phi_{\mu} = \sum_k c_{\mu k}\,\Upsilon_k, \tag{1-3}$$

trong đó Υ_k trỏ các AO của bài tính (các AO này phụ thuộc vào từng bài tính cụ thể).

Thay (1-3) vào (1-1), ta được hệ phương trình

$$\sum_k c_{\mu k} F\,\Upsilon_k = \sum_k \varepsilon_{\mu}\, c_{\mu k}\,\Upsilon_k.$$

Tiếp theo, nhân vô hướng hai vế với Υ_1, ta được

$$\sum_k c_{\mu k}(\Upsilon_1, F\Upsilon_k) = \sum_k \varepsilon_{\mu}\, c_{\mu k}(\Upsilon_1, \Upsilon_k),$$

hay

$$\sum_k c_{\mu k}(F_{1k} - \varepsilon_{\mu} S_{1k}) = 0, \tag{1-4}$$

với

$$F_{1k} = (\Upsilon_1, F\Upsilon_k), \tag{1-5}$$

$$S_{1k} = (\Upsilon_1, \Upsilon_k), \tag{1-6}$$

1) Tổ hợp tuyến tính các quỹ hàm nguyên tử.

Như đã biết, muốn hệ phương trình (1-4) có nghiệm khác không, định thức của hệ phải bằng không, tức là

$$| F_{lk} - \varepsilon_\mu S_{lk} | = 0. \qquad (1\text{-}7)$$

Đó là phương trình thế kỷ quen thuộc. Phương trình này là một phương trình đại số của năng lượng. Tương ứng với mỗi giá trị của năng lượng thu được, ta sẽ có một nghiệm $c_{\mu k}$, tức là một quỹ hàm MO.

Vì các MO là các hàm sóng không gian, nên tương ứng với mỗi MO là hai hàm spin (xem chú thích ở VIII, § 13).

$$\alpha = \chi_{1/2}, \quad \beta = \chi_{-1/2}$$

và, như thế, tương ứng với mỗi MO ta có thể có tối đa là hai êlectrôn (theo nguyên lý loại trừ).

Theo (1-5), (1-6) và (1-7) rõ ràng các mức năng lượng và các MO tương ứng phụ thuộc vào toán tử F, trong đó có mặt thế năng hiệu dụng sản ra bởi tập hợp tất cả các êlectrôn của phân tử. Ngoài ra, bài tính còn phụ thuộc vào các lượng S_{lk}.

Các lượng F_{lk} gọi là các *tích phân Coulomb*, còn các lượng S_{lk} gọi là các *tích phân xen phủ.*

Các AO cấp thấp *)

Để có thể hình dung được cụ thể các AO, chúng ta hãy ghi ra đây một số AO cấp thấp (xem VIII (15-2)).

a) s-AO (tuân theo biểu thức $\mathcal{D}^{(0)+}$ của nhóm O(3)).

$$s = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \qquad (1\text{-}8)$$

b) p-AO (tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)-}$ của nhóm O(3)).

$$p_x = \sin\theta\cos\varphi = \frac{x}{r}, \; p_y = \sin\theta\sin\varphi = \frac{y}{r}, \; p_z = \cos\theta = \frac{z}{r}. \qquad (1\text{-}9)$$

c) d-AO (tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(2)+}$ của nhóm O(3))

$$d_{xy} = \sqrt{3}\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi = \sqrt{3}\,\frac{xy}{r},$$

$$d_{yz} = \sqrt{3}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi = \sqrt{3}\,\frac{yz}{r},$$

$$d_{zx} = \sqrt{3}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi = \sqrt{3}\,\frac{zx}{r},$$

$$d_{x^2-y^2} = \sqrt{\frac{3}{2}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) = \sqrt{\frac{3}{2}}\,\frac{x^2-y^2}{r^2},$$

$$d_{z^2} = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{1}{2}\,\frac{3z^2 - r^2}{r^2}.$$

Như đã biết, sự tồn tại các AO này của các nguyên tử là hệ quả trực tiếp của phương pháp tính gần đúng Hartree-Fock với khái niệm trường tự thích của các êlectrôn nguyên tử, cho phép « phục hồi » tính đối xứng O(3).

---

*) Ở đây, chỉ đề cập đến phần phụ thuộc vào góc của hàm sóng.

§2. CÁC TÍNH CHẤT ĐẠI SỐ CỦA PHƯƠNG PHÁP MO-LCAO

Ý nghĩa đại số các AO

Về mặt đại số, đẳng thức (1-5) chứng tỏ rằng chúng ta đã dùng các AO γ_k làm cơ sở để biểu diễn các MO. Từ đó, phương trình (1-4) chỉ là phương trình (1-1) viết theo cơ sở trên; các lượng F_{lk} và S_{lk} chính là các ma trận biểu diễn các toán tử F và toán tử đơn vị trong cơ sở đó.

Từ tính chất đại số này của các AO, rõ ràng chúng ta có thể dùng một cơ sở khác thay cho cơ sở cũ. Tất nhiên ở đây nói chung hệ cơ sở γ_k không làm một hệ trực chuẩn đầy đủ và, do đó, các ma trận thực hiện phép chuyển cơ sở nói chung không phải là unita.

Cách giản đơn bài tính giải phương trình thế kỷ

Ta hãy lợi dụng tính chất đại số nói trên để giản đơn bài tính giải phương trình thế kỷ (1-7). Bài tính đặt ra là rất cần thiết khi phân tử có tính chất đối xứng không gian, chẳng hạn là các phân tử thẳng, các phân tử có cấu hình tứ diện, lập phương... Trong trường hợp này, rõ ràng các AO sẽ làm thành một không gian tuyến tính nào đó, thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm đối xứng của phân tử, và ta cần phân biểu diễn này thành tổng những biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng đó. Nói cách khác, do các vectơ cơ sở của các biểu diễn bất khả quy của nhóm là các tổ hợp tuyến tính của các AO, ta có thể chọn các vectơ cơ sở này làm các MO. Như thế, cần phân tích không gian các AO thành tổng trực tiếp các không gian bất khả quy của nhóm đối xứng. Điều này có thể thực hiện bằng các toán tử chiếu ở II, §20.

Nhưng do tính chất trực giao giữa những không gian bất khả quy tương ứng với những biểu diễn bất khả quy khác nhau của nhóm, ma trận S_{lk} sẽ có dạng gần chéo. Mặt khác, do toán tử Hamilton của hệ là một bất biến đối với mọi phép biến đổi của nhóm đối xứng, ma trận F_{lk} cũng có dạng gần chéo như ma trận S_{lk}. Từ đó, phương trình thế kỷ (1-7) sẽ có dạng sau

$$\begin{vmatrix} \boxed{*} & & & & 0 \\ & \boxed{*} & & & \\ & & \boxed{*} & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \end{vmatrix} = 0,$$

tức là có thể phân thành nhiều phương trình thế kỷ có bậc nhỏ hơn, có dạng

$$|F_{\alpha\beta} - \varepsilon_\mu S_{\alpha\beta}| = 0. \qquad (2\text{-}1)$$

Tương ứng với những biểu diễn bất khả quy khác nhau là những phương trình thế kỷ (2-1) khác nhau và độc lập với nhau.

Để giải các phương trình thế kỷ (2-1) có nhiều phương pháp tính gần đúng khác nhau để xác định các lượng F_{lk} và S_{lk}. Cũng có thể lấy một số trong các giá trị đó từ thực nghiệm, biến phương pháp MO-LCAO thành một phương pháp bán thực nghiệm. Trong trường hợp cuối cùng này, chúng ta sẽ đi vòng những khó khăn có liên quan đến vấn đề xác định thế năng hiệu dụng chung, nói chung không biết trước, như đã trình bày ở trên.

Những bài toán đại số quan trọng nhất của phương pháp MO-LCAO

Trong những trường hợp phân tử có tính chất đối xứng, với phương pháp MO-LCAO, ta có những bài toán đại số sau :

1. *Xây dựng các MO từ các AO*, như đã nói ở trên. Đây là bài toán phân tích không gian biểu diễn.

2. *Xây dựng hàm sóng toàn phần của hệ tất cả các êlectrôn từ các MO đã thu được.* Ở đây có hai ý chính lớn sau :

a) Theo nguyên lý loại trừ Pauli và theo tính chất độc lập của chuyển động từng êlectrôn một (theo tinh thần của phương pháp thế năng hiệu dụng chung của các êlectrôn), hàm sóng này phải là một hàm sóng viết dưới dạng tích phản xứng. Có thể lập hàm sóng đó dưới dạng định thức sau :

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} (\Phi_1 \chi_1)_1 & (\Phi_2 \chi_2)_1 & \dots & (\Phi_N \chi_N)_1 \\ (\Phi_1 \chi_1)_2 & (\Phi_2 \chi_2)_2 & \dots & (\Phi_N \chi_N)_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ (\Phi_1 \chi_1)_N & (\Phi_2 \chi_2)_N & \dots & (\Phi_N \chi_N)_N \end{vmatrix} \qquad (2\text{-}2)$$

mà ta ký hiệu vắn tắt như sau

$$\Phi = |\,(\Phi_1 \chi_1), (\Phi_2 \chi_2), \dots (\Phi_N \chi_N)\,|\,. \qquad (2\text{-}3)$$

Trong biểu thức (2-2) ta dùng ký hiệu

$$(\Phi_b \chi_b)_p = \Phi_b(p)\chi_b(p),$$

với p là chỉ số trỏ tọa độ của hạt êlectrôn thứ p, N là số MO.

Dễ thấy rằng hàm sóng (2-2) là phản xứng khi hoán vị hai êlectrôn với nhau (do tính chất của định thức !). Các định thức (2-2) gọi là *định thức Slater.*

b) Chúng ta biết rằng trong phạm vi gần đúng phi tương đối tính thì toán tử Hamilton không chứa toán tử spin. Từ đó, toán tử Hamilton giao hoán với toán tử spin toàn phần S của hệ. Nói cách khác, chúng ta có hệ toán tử đầy đủ dạng

$$H, S^2, S_3 \text{ (và } L_3 \text{ với các phân tử thẳng).}$$

Như thế, các trạng thái của hệ êlectrôn sẽ là những vectơ thực hiện những biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của cấu hình hạt nhân phân tử và đồng thời của nhóm SO(3) mô tả spin (xem XI, § 7). Các trạng thái này như thế có thể ký hiệu là

$$\mu S S_3$$

trong đó μ trỏ biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của hệ. Thành thử, vấn đề đặt ra là từ các định thức Slater cần xây dựng những đại lượng có tính chất vectơ riêng, chung cho các toán tử S và toán tử Hamilton.

3. *Tìm các quy tắc lọc lựa.*

Vì trong mức gần đúng phi tương đối tính, toán tử Hamilton không chứa toán tử spin và vì các trạng thái tương ứng với những giá trị của spin tổng S khác nhau là trực giao với nhau, nên ta có ngay quy tắc lọc lựa về spin

$$\Delta S = 0. \tag{2-4}$$

Mặt khác, ta hãy xét bức xạ lưỡng cực điện với toán tử Hamilton biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1)}$- của nhóm O(3). Nhưng do giá trị của toán tử nghịch đảo không gian I tương ứng với biểu diễn này bằng — 1, nên rõ ràng ta có quy tắc lọc lựa

$$\Delta I = 2 \text{ hay } g \leftrightarrow u \tag{2-5}$$

về số chẵn lẻ.

§ 3. PHƯƠNG PHÁP XÂY DỰNG CÁC MO

Nội dung bài toán.

Phân tích không gian các AO thực hiện một biểu diễn $\mathcal{D}$ nào đó của nhóm đối xứng thành tổng trực tiếp các không gian con bất khả quy của nhóm. Các vectơ cơ sở của các không gian con bất khả quy này chính là các MO phải tìm.

Phương pháp và công cụ :

Các toán tử chiếu ở II, (20-1) và (20-5) :

$$P^i_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g D^{(\mu)*}_{ij}(g) T_g, \tag{3-1}$$

$$P_{(\mu)} = \frac{n_\mu}{G} \sum_g \chi^{(\mu)*}(g) T_g. \tag{3-2}$$

Phương pháp xây dựng các MO từ các s-AO

Ta hãy lấy một vài trường hợp cụ thể để minh họa.

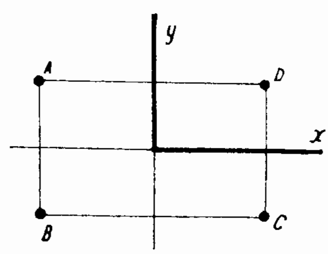
Nhóm $\mathcal{D}_{2h}$.

Giả sử có bốn hạt nhân đồng nhất như nhau nằm ở bốn đỉnh của một hình chữ nhật. Ta ký hiệu các hạt nhân đó là A, B, C, D, đồng thời ký hiệu các s—AO của các nguyên tử tương ứng là

$$s_A\ ,\ s_B\ ,\ s_C\ ,\ \text{và } s_D$$

hay, vắn tắt hơn là

$$A\ ,\ B\ ,\ C \text{ và } D.$$



Hình 9-1

Ta lưu ý rằng các trạng thái s là hoàn toàn đối xứng đối với mọi phép biến đổi của nhóm đối xứng (nhóm con của nhóm O(3)). Thành thử, ta chỉ cần xét quy luật biến đổi của vị trí các hạt nhân dưới tác dụng của các phần tử của nhóm đối xứng.

Thế thì ta được

$$T_I A = C,\ T_I B = D,\ T_I C = A,\ T_I D = B,$$

$$T_{C_v} A = D,\ T_{C_y} B = C,\ T_{C_y} C = B,\ T_{C_v} D = A \text{ v.v...}$$

Từ đó ta có thể lập bảng sau

$\mathcal{D}_{2h}$	e	C_y	C_x	C_z	I	$\sigma(x,z)$	$\sigma(y,z)$	$\sigma(x,y)$
A	A	D	B	C	C	D	B	A
B	B	C	A	D	D	C	A	B
C	C	B	D	A	A	B	D	C
D	D	A	C	B	B	A	C	D
χ	4	0	0	0	0	0	0	4

Từ kết quả này, dựa vào bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{D}_{2h}$, ta được biểu thức phân tích sau của biểu diễn

$$\mathcal{D} = a_{1g} \oplus b_{2u} \oplus b_{3u} \oplus b_{1g}.$$

(Ta quy ước dùng các ký hiệu chữ nhỏ cho các biểu diễn bất khả quy tương ứng với các MO và dành các chữ lớn cho các trạng thái của toàn hệ êlectrôn). Tiếp theo, theo công thức (3-2), ta được các không gian con bất khả quy sau :

$$\boxed{\mathcal{D}_{2h}}$$

Biểu diễn	*Bốn hạt nhân đồng nhất*
a_{1g}	$\frac{1}{2}(s_A + s_B + s_C + s_D)$
b_{3u}	$\frac{1}{2}(s_A + s_B - s_C - s_D)$
b_{2u}	$\frac{1}{2}(s_A - s_B - s_C + s_D)$
b_{1g}	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$

(3-3)

Tương tự như trên, với ba hạt nhân đồng nhất A, B, C, nằm tại ba đỉnh của một tam giác đều với nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{3v}$ ta được kết quả sau (σ_A trỏ mặt phẳng phản chiếu đi qua A v.v...)

$\mathcal{C}_{3v}$	e	C_3	C_3^2	σ_A	σ_B	σ_C
A	A	B	C	A	C	B
B	B	C	A	C	B	A
C	C	A	B	B	A	C
χ	3	0	0	1	1	1

$$\mathcal{D} = a_1 \oplus e.$$

Tiếp theo dựa vào bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$ và biểu thức của các ma trận thực biện biểu diễn hai chiều của nhóm đó (xem các bảng ở cuối tài liệu), với các công thức (3-1) và (3-2), ta được kết quả sau :

$\boxed{\mathcal{C}_{3v}}$

Biểu diễn	*Ba hạt nhân đồng nhất*
a_1	$\frac{1}{\sqrt{3}}(s_A + s_B + s_C)$
e	$\frac{1}{2}(s_A - s_B - s_C)$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(s_B - s_C)$

(3-4)

Nhóm $\mathcal{D}_{4h}$

Với bốn hạt nhân đồng nhất nằm tại bốn đỉnh của một hình vuông (nhóm $\mathcal{D}_{4h}$) ta được kết quả sau :

$\boxed{\mathcal{D}_{4h}}$

Biểu diễn	*Bốn hạt nhân đồng nhất*
a_{1g}	$\frac{1}{2}(s_A + s_B + s_C + s_D)$
b_{1g}	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$
e_u	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A - s_C)$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(s_B - s_D)$

(3-5)

Nhóm $\mathcal{D}_{6h}$

Với sáu hạt nhân đồng nhất nằm tại sáu đỉnh của một hình lục giác đều (nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{6h}$), ta được kết quả

$\boxed{\mathcal{D}_{6h}}$

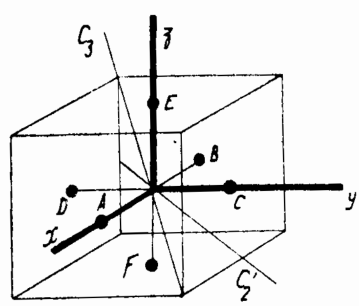
Biểu diễn	*Sáu hạt nhân đồng nhất*
a_{1g}	$\frac{1}{\sqrt{6}}(s_A + s_B + s_C + s_D + s_E + s_F)$
b_{2g}	$\frac{1}{\sqrt{6}}(s_A - s_B + s_C - s_D + s_E + s_F)$
e_{1g}	$\frac{1}{2\sqrt{3}}(s_A - s_B - 2s_C - s_D - s_E + 2s_F)$
	$\frac{1}{2}(s_A + s_B - s_D - s_E)$
e_{2u}	$\frac{1}{2\sqrt{3}}(s_A + s_B - 2s_C + s_D + s_E - 2s_F)$
	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_D - s_E)$ (3-6)

Nhóm $\mathcal{O}_h$

Giả sử có sáu hạt nhân nằm tại sáu tâm điểm của sáu mặt của một hình lập phương (nhóm đối xứng $\mathcal{O}_h$). Ta có

$\mathcal{O}_h$	e	C_3	C_2	C_4	$C_{2'}$	I	S_6	σ_h	S_4	σ_d
χ	6	0	2	2	0	0	0	4	0	2

$$\mathcal{D} = f_{1u} \oplus a_{1g} \oplus e_g.$$



Hình 9-2

$\boxed{\mathcal{O}_h}$

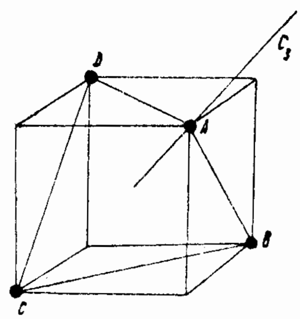
Biểu diễn	*Sáu hạt nhân đồng nhất*
a_{1g}	$\frac{1}{\sqrt{6}}(s_A + s_B + s_C + s_D + s_E + s_F)$
f_{1u}	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A - s_C)$
	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_B - s_D)$
	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_E - s_F)$
e_g	$\frac{1}{2\sqrt{3}}(2s_E + 2s_F - s_A - s_B - s_C - s_D)$
	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$ (3-7)

Nhóm $\mathcal{T}_d$

Giả sử có bốn hạt nhân đồng nhất nằm tại bốn đỉnh của một tứ diện đều (nhóm $\mathcal{T}_d$). Ta có các kết quả sau

$\mathcal{T}_d$	e	C_3	C_2	σ_d	S_4
χ	4	1	0	2	0

$$\mathcal{D} = a_1 \oplus f_2$$



Hình 9-3

$\boxed{\mathcal{T}_d}$

Biểu diễn	*Bốn hạt nhân đồng nhất*
a_1	$\frac{1}{2}(s_A + s_B + s_C + s_D)$
f_2	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$ (3-8)
	$\frac{1}{2}(s_A + s_B - s_C - s_D)$
	$\frac{1}{2}(s_A - s_B - s_C + s_D)$

Phương pháp tìm các MO từ các s-AO và các p-AO

Nhóm $\mathcal{C}_{3v}$

Trong phần này, chúng ta sẽ tìm cách xây dựng các MO từ các s-AO và các p-AO. Tất nhiên, bài tính có phức tạp hơn so với phần trước. Tuy nhiên, công cụ chỉ là một : đó là các toán tử chiếu đã trình bày ở trên. Ta hãy minh họa bài toán cho vài trường hợp riêng quan trọng.

Ta hãy xét phân tử CH_3Cl có nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{C}_{3v}$. Ta hạn chế ở các AO sau :

Hạt nhân C :

$$(2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z).$$

Các hạt nhân H :

$$(s_A, s_B, s_C).$$

Đối với các hạt nhân H, bài toán đã giải quyết xong với kết quả (3-4).

Đối với hạt nhân C, bài toán quy về bài toán biểu diễn hạ cảm (xem VIII (14-16))

$$O(3) \downarrow \mathcal{C}_{3v} : \mathcal{D}^{(0)+} = a_1,$$

$$\mathcal{D}^{(1)-} = a_2 \oplus e.$$

Nói chung các kết quả về biểu diễn hạ cảm $O(3) \downarrow \mathcal{G}$ (trong đó $\mathcal{G}$ là một nhóm điểm nào đó) cho các biểu diễn có trọng số thấp của nhóm O(3) đều có ghi ở các bảng đặc biểu. Theo bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{3v}$, ta có ngay các kết quả sau :

$$a_1 : 2s\ ,\ a_2 : 2p_z\ ,\ e : 2p_x\ ,\ 2p_y.$$

Phối hợp các kết quả này với (3-4), ta được các MO sau :

$$\boxed{\mathcal{C}_{3v}}$$

Biểu diễn	*Hạt nhân C*	*Các hạt nhân H_3*
a_1	2s	$\frac{1}{\sqrt{3}}(s_A + s_B + s_C)$
a_2	$2p_z$	
e	$2p_x$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_B - s_C)$
	$2p_y$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(2s_A - s_B - s_C)$

(3-9)

Nhóm $\mathcal{C}_{2v}$

Ta xét phân tử NO_2 với nhóm đối xứng $\mathcal{C}_{2v}$, và hạn chế ở các AO sau :

Hạt nhân N :

$$(s, p_x, p_y, p_z).$$

Các hạt nhân O :

$$(s_A, s_B, p_{Ax}, p_{Ay}, p_{Az}\ p_{Bx}, p_{By}\ p_{Bz}).$$

Dựa vào bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{2v}$, ta có ngay các MO sau tương ứng với hạt nhân N (xem hình 9-4 ở đấy phân tử NO_2 nằm trong mặt phẳng (x, z)):

$$a_1 : s, p_z ; \quad b_1 : p_x ; \quad b_2 : p_y.$$

Cách tìm các MO tương ứng với các hạt nhân A và B (tức là các hạt nhân O) tương đối phức tạp hơn. Đối với các AO s_A và s_B, theo phương pháp trình bày trước đây, ta có

$$\mathcal{D} = a_1 \oplus b_1,$$

$$a_1 : \frac{1}{\sqrt{2}} (s_A + s_B) ; \; b_1 : \frac{1}{\sqrt{2}} (s_A - s_B).$$

- Đối với các p-AO, với nhận xét

$$C_2 : x \to -x, \quad y \to -y, \quad z \to z,$$

$$\sigma(x,z) : x \to x, \quad y \to -y, \quad z \to z,$$

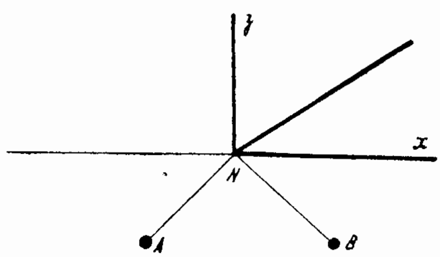
$$\sigma(y,z) : x \to -x, \quad y \to y, \quad z \to z,$$

ta lập được bảng biến đổi sau

$\mathcal{C}_{2v}$	e	C_2	$\sigma(x, z)$	$\sigma(y, z)$
p_{Ax}	p_{Ax}	$-p_{Bx}$	p_{Ax}	$-p_{Bx}$
p_{Bx}	p_{Bx}	$-p_{Ax}$	p_{Bx}	$-p_{Ax}$
p_{Ay}	p_{Ay}	$-p_{By}$	$-p_{Ay}$	p_{By}
p_{By}	p_{By}	$-p_{Ay}$	$-p_{By}$	p_{Ay}
p_{Az}	p_{Az}	p_{Bz}	p_{Az}	p_{Bz}
p_{Bz}	p_{Bz}	p_{Az}	p_{Bz}	p_{Az}
χ	6	0	2	0

$$\mathcal{D} = 2a_1 \oplus 2b_1 \oplus a_2 \oplus b_2.$$

Kết quả này cho chúng ta những thông tin đầu tiên, từ đó có thể lập được các MO từ các p-AO với các toán tử chiếu nói trên.



Hình 9-4

Với tất cả các kết quả thu được, ta có các MO sau

$$\boxed{\mathcal{C}_{2v}}$$

Biểu diễn	*Hạt nhân N*	*Các hạt nhân O_2*
a_1	s, p_z	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A + s_B)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ax} - p_{Bx})$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Az} + p_{Bz})$.
b_1	p_x	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A - s_B)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ax} + p_{Bx})$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Az} - p_{Bz})$.
b_2	p_y	$\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ay} + p_{By})$.
a_2		$\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ay} - p_{By})$.

(3-10)

Nhóm $\mathcal{D}_{\infty h}$

Ta hãy xét phân tử có hai hạt nhân đồng nhất như nhau, có nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{D}_{\infty h}$. Ta hạn chế ở những AO sau

$$(s_A, s_B, p_{Ax}, p_{Ay}, p_{Az}, p_{Bx}, p_{By}, p_{Bz}).$$

Các phép tính tương tự như đối với nhóm $\mathcal{C}_{2v}$ cho các kết quả sau

$\mathcal{D}_{\infty h}$	e	C(φ)	σ_v	I	IC(φ)	$I\sigma_v$
χ	8	4 + 4cos φ	4	0	0	4

$$\mathcal{D} = 2\sigma_g^+ \oplus 2\sigma_u^+ \oplus \Pi_u \oplus \Pi_g .$$

$$\boxed{\mathcal{D}_{\infty h}}$$

Biểu diễn	*Hai hạt nhân đồng nhất*
σ_g^+	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A + s_B)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Az} - p_{Bz})$
σ_u^+	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A - s_B)$. $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Az} + p_{Bz})$
Π_u	$\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ax} + p_{Bx})$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ay} + p_{By})$
Π_g	$\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ax} - p_{Bx})$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ay} - p_{By})$

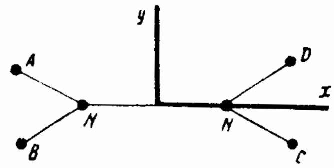
(3-11)

Nhóm $\mathcal{D}_{2h}$

Ta hãy xét phân tử C_2H_4 có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{2h}$. Ta ký hiệu các hạt nhân C là M, N còn các hạt nhân H là A, B, C và D. Ta hạn chế ở những AO sau:

Các hạt nhân H:

$$s_A,\ s_B,\ s_C,\ s_D.$$



Hình 9-5

Các hạt nhân C: (lai hóa sp^2)

$$1s_M,\ 1s_N$$

$$\sigma_M \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_M) + \sqrt{\frac{2}{3}}(2p_{Mx}),$$

$$\tau_A \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_M) - \frac{1}{\sqrt{6}}(2p_{Mx}) + \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{My}),$$

$$\tau_B \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_M) - \frac{1}{\sqrt{6}}(2p_{Mx}) - \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{My}),$$

$$\sigma_N \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_N) + \sqrt{\frac{2}{3}}(2p_{Nx}),$$

$$\tau_C \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_N) - \frac{1}{\sqrt{6}}(2p_{Nx}) - \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{Ny}),$$

$$\tau_D \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}(2s_N) - \frac{1}{\sqrt{6}}(2p_{Nx}) + \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{Ny}),$$

$$\Pi_M \equiv 2p_{Nz}.$$

$$\Pi_N \equiv 2p_{Nz}.$$

Từ tất cả các AO trên, bằng phương pháp thông thường, ta có thể lập được các MO sau:

$$\boxed{\mathcal{D}_{2h}}$$

Biểu diễn	*Các hạt nhân* C_2	*Các hạt nhân* H_4
a_{1g}	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1s_M + 1s_N)$.	
	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_M + \sigma_N)$	
	$\frac{1}{2}(\tau_A + \tau_B + \tau_C + \tau_D)$	$\frac{1}{2}(s_A + s_B + s_C + s_D)$
b_{3u}	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1s_M - 1s_N)$	
	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_M - \sigma_N)$	
	$\frac{1}{2}(\tau_A + \tau_B - \tau_C - \tau_D)$	$\frac{1}{2}(s_A + s_B - s_C - s_D)$

Biểu diễn	*Các hạt nhân* C_2	*Các hạt nhân* H_4
b_{2u}	$\frac{1}{2}(\sigma_A - \tau_B - \tau_C + \tau_D)$	$\frac{1}{2}(s_A - s_B - s_C + s_D)$
b_{1g}	$\frac{1}{2}(\tau_A - \tau_B + \tau_C - \tau_D)$	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$
b_{1u}	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_M + \pi_N)$	
b_{2g}	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_M - \pi_N)$	(3-12)

Phương pháp xây dựng các MO từ các s-AO, p-AO và d-AO

Nhóm O_h

Bây giờ ta hãy xét một phân tử có nhóm đối xứng O_h, chẳng hạn là phân tử SF_6. Ta chọn các AO sau:

Hạt nhân S:

$$(4s\ ,\ 4p_x\ ,\ 4p_y\ ,\ 4p_z\ ,\ 3d_{x^2-y^2}\ ,\ 3d_{z^2}\ ,\ 3d_{xy}\ ,\ 3d_{yz}\ ,\ 3d_{zx}).$$

Các hạt nhân F:

$$(s_i, p_{ix}\ ,\ p_{iy}\ ,\ p_{iz})\ ,\ (i = A, B, C, D, E, F).$$

Trong số này, các quỹ hàm ligăng là các p-AO không hướng vào hạt nhân trung tâm.

Tính chất biến đổi của các d-AO có thể thấy ngay từ bảng đặc biểu của nhóm O_h. Ta có ngay kết quả: (xem hình 9-2)

$$e_g : 3d_{x^2-y^2}\ ,\ 3d_{z^2}\ ,$$

$$f_{2g} : 3d_{xy}\ ,\ 3d_{yz}\ ,\ 3d_{zx}\ .$$

Đối với các s-AO của các hạt nhân F, bài toán đã giải trước đây (xem (3-7)). Thành thử, chỉ cần phân loại các quỹ hàm ligăng. Có tất cả 12 quỹ hàm như thế, làm thành một không gian biểu diễn nào đó của nhóm O_h. Ta hãy tìm đặc biểu của biểu diễn này.

Tất nhiên, đối với phép e thì tất cả các quỹ hàm đó đều không thay đổi, do đó ta có

$\chi(e) = 12.$

Tiếp theo, do với phép quay C_3 tất cả các hạt nhân F đều thay đổi vị trí, ta được

$\chi(C_3) = 0.$

Tại phép quay C_2, hai hạt nhân E và F giữ nguyên vị trí. Nhưng vì với phép quay này các p_{Ex}, p_{Ey}, p_{Fx} và p_{Fy} đều đổi dấu, nên ta có ngay

$\chi(C_2) = -4.$

Với các phần tử khác của nhóm, do không có hạt nhân nào đứng nguyên tại chỗ, nên giá trị của đặc biểu bằng không. Như thế, ta có bảng

$\mathcal{O}_h$	e	C_3	C_2	C_4	$C_{2'}$	I	S_6	σ_h	S_4	σ_d
χ	12	0	-4	0	0	0	0	0	0	0

$$\mathcal{D} = f_{1g} \oplus f_{1u} \oplus f_{2g} \oplus f_{2u}.$$

$\boxed{\mathcal{O}_h}$

Biểu diễn	*Hạt nhân trung tâm*	*Các hạt nhân ligăng*
a_{1g}	4s	$\frac{1}{\sqrt{6}}(s_A + s_B + s_C + s_D + s_E + s_F)$
e_g	$3d_{x^2-y^2}$	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$
	$3d_{z^2}$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}(2s_E + 2s_F - s_A - s_B - s_C - s_D)$
f_{1u}	$4p_x$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_A - s_C)$, $\frac{1}{2}(p_{By} + p_{Ex} - p_{Dx} - p_{Fy})$
	$4p_y$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_B - s_D)$, $\frac{1}{2}(p_{Ax} + p_{Ey} - p_{Cx} - p_{Dy})$
	$4p_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(s_E - s_F)$, $\frac{1}{2}(p_{Ay} + p_{Bx} - p_{Cx} - p_{Dy})$
f_{2g}	$3d_{xz}$	$\frac{1}{2}(p_{Ay} + p_{Ex} + p_{Cx} + p_{Fy})$
	$3p_{yz}$	$\frac{1}{2}(p_{Bx} + p_{Ey} + p_{Dy} + p_{Fx})$
	$3d_{xy}$	$\frac{1}{2}(p_{Ax} + p_{Bx} + p_{Cy} + p_{Dx})$
f_{1g}		$\frac{1}{2}(p_{Ay} - p_{Ex} + p_{Cx} - p_{Fy})$
		$\frac{1}{2}(p_{Bx} - p_{Ey} + p_{Dy} - p_{Ex})$
		$\frac{1}{2}(p_{Ax} - p_{By} + p_{Cy} - p_{Dx})$
f_{2u}		$\frac{1}{2}(p_{By} - p_{Ex} - p_{Dx} + p_{Fy})$
		$\frac{1}{2}(p_{Ax} - p_{Ey} - p_{Cy} + p_{Fx})$
		$\frac{1}{2}(p_{Ay} - p_{Bx} - p_{Cx} + p_{Dy})$ (3-13)

Nhóm $\mathcal{T}_d$

Đối với các phân tử có dạng ML_4 với nhóm đối xứng $\mathcal{T}_d$, ta có các kết quả sau

$\boxed{\mathcal{T}_d}$

Biểu diễn	*Hạt nhân trung tâm*	*Các hạt nhân ligăng*
a_1	s	$\frac{1}{2}(s_A + s_B + s_C + s_D)$
e	d_{z^2}	$\frac{1}{2}(p_{Ax} - p_{Bx} - p_{Cx} + p_{Dx})$
	$d_{x^2-y^2}$	$\frac{1}{2}(p_{Ay} - p_{By} - p_{Cy} + p_{Dy})$
f_2	p_x, d_{yz}	$\frac{1}{2}(s_A - s_B + s_C - s_D)$
		$\frac{1}{4}[(p_{Ax} + p_{Bx} - p_{Cx} - p_{Dx}) + \sqrt{3}(p_{Cy} + p_{Dy} - p_{Ay} - p_{By})]$
	p_y, d_{zx}	$\frac{1}{2}(s_A + s_B - s_C - s_D)$
		$\frac{1}{4}[(p_{Ax} - p_{Bx} + p_{Cx} - p_{Dx}) + \sqrt{3}(p_{Ay} - p_{By} + p_{Cy} - p_{Dy})]$
	p_z, d_{xy}	$\frac{1}{2}(s_A - s_B - s_C + s_D)$
		$-\frac{1}{2}(p_{Ax} + p_{Bx} + p_{Cx} + p_{Dx})$
f_1		$\frac{1}{4}[\sqrt{3}(p_{Ax} + p_{Bx} - p_{Cx} - p_{Dx}) + (p_{Ay} + p_{By} - p_{Cy} - p_{Dy})]$
		$\frac{1}{4}[\sqrt{3}(p_{Ax} - p_{Bx} + p_{Cx} - p_{Dx}) + (-p_{Ay} + p_{By} - p_{Cy} + p_{Dy})]$
		$\frac{1}{2}(p_{Ay} + p_{By} + p_{Cy} + p_{Dy})$ (3-14)

§ 4. PHƯƠNG PHÁP XÁC ĐỊNH CÁC HÀM RIÊNG CỦA TOÁN TỬ SPIN TỔNG

Khái niệm về vỏ kín.

Các êlectron của một hệ (nguyên tử hay phân tử) có thể chia làm hai loại. Loại thứ nhất gồm những êlectron ở trạng thái không gian như nhau và có spin s_3 đối nhau. Các êletron này không tham gia vào việc phân loại hệ theo trạng thái spin. Loại thứ hai gồm những êlectron không kết cặp với nhau theo nghĩa trên. Chính những êlectron này sẽ tham gia vào việc phân loại trạng thái theo spin tổng của hệ.

Ta ký hiệu (α và β là các hàm spin 1/2)

$$\mu \equiv \psi_\mu \equiv \Phi_\mu \alpha\ ,\ \overline{\mu} \equiv \overline{\psi}_\mu \equiv \Phi_\mu \beta. \tag{4-1}$$

Thế thì với một hệ gồm 2p êlectron đã kết cặp với nhau từng đôi, hàm sóng của hệ có thể viết dưới dạng định thức Slater như sau

$$\Psi = |\psi_1 \overline{\psi}_1 \psi_2 \overline{\psi}_2 \ldots \psi_p \overline{\psi}_p| \equiv |1\overline{1}2\overline{2}\ldots p\overline{p}|,\ S = S_3 = 0 \tag{4-2}$$

Một hệ như thế thường gọi là *vỏ* (hay *lớp*) *kín*, và ký hiệu chung là (A_o).

Nếu có 2p + 1 êlectron trong đó có 2p êlectron đã kết cặp với nhau và làm thành một vỏ kín, thì rõ ràng hệ này có spin bằng spin của êlectron còn lại. Hàm sóng sẽ có dạng

$$\Psi = |\psi_2 \overline{\psi}_2 \ldots \psi_{p+1} \overline{\psi}_{p+1} \Phi_1 \chi_1| \equiv |2\overline{2}\ldots p{+}1,\ \overline{p{+}1}\ \Phi_1 \chi_1| = |(A_o)\Phi_1 \chi_1|,\ S = 1/2.$$

Nếu có 2p+2 êlectron trong đó có 2p êlectron đã kết cặp với nhau và làm thành một vỏ kín, thì rõ ràng spin của hệ được quyết định bởi hai êlectron còn lại. Hàm sóng sẽ có dạng

$$\Psi = |3\overline{3}\ldots p+2,\ \overline{p+2}\ \Phi_1 \chi_1 \Phi_2 \chi_2| = |(A_o)\Phi_1 \chi_1 \Phi_2 \chi_2|.$$

Các trạng thái spin.

Do các trạng thái spin của từng êlectron thực hiện biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2)}$ của nhóm SO(3) và do trạng thái spin của toàn hệ là tích các trạng thái spin của từng êlectron, rõ ràng bài toán tìm các trạng thái spin này quy về bài toán nhân biểu diễn của nhóm SO(3) hay, nói cách khác, bài toán tìm chuỗi Clebsch-Gordan của nhóm. Song song là bài toán phân tích không gian với các hệ số Clebsch-Gordan đã trình bày ở VIII, § 20.

Trường hợp hai hạt

Ta hãy bắt đầu bằng trường hợp hệ có hai hạt (không kết cặp với nhau). Thế thì ta sử dụng công thức VIII, (21-1)

$$|j, m> = \sum_{m_1+m_2=m} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)\ |j_1 m_1>\ |j_2 m_2>, \tag{4-3}$$

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2.$$

trong đó các hệ số Clebsch-Gordan được tính theo công thức VIII, (21-12) vì trong trường hợp đang xét, ta có

$$j_1 = 1/2,\ j_2 = 1/2.$$

Ở đây, ta được

$$S = j = 0 \text{ hay } 1.$$

Với trường hợp thứ nhất, $S_3 = m = 0$. Với trường hợp thứ hai, $S_3 = m = 1, 0, -1$.

Do

$$|1/2, 1/2> = \alpha, \quad |1/2, -1/2> = \beta$$

các phép tính trực tiếp cho các kết quả sau (không gian bất khả quy):

1 — Không gian một chiều

$$|0\ 0> = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2), \ S = S_3 = 0,$$

2 — Không gian ba chiều

$$|1\ 1> = \alpha_1 \alpha_2, \ S = 1, \ S_3 = 1,$$

$$|1, -1> = \beta_1 \beta_2, \ S = 1, \ S_3 = -1,$$

$$|1\ 0> = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2), \ S = 1, \ S_3 = 0.$$

Tiếp theo, với các kết quả trên, ta chuyển từ các tích các hàm spin sang các định thức Slater bằng phép thay thế

$$\alpha_\mu \to \psi_\mu \equiv \mu, \beta_\mu \to \overline{\psi}_\mu = \overline{\mu}, \ (\mu = 1, 2). \tag{4-4}$$

Ta được các MO sau của hệ hai êlectron (không kết cặp):

1 — Đơn tuyến

$$1\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |(A_0)\, 1\bar{2}| - |(A_0)\, \bar{1}2| \}, \ S = 0, \ S_3 = 0, \tag{4-5}$$

2 — Tam tuyến

$$3\psi_1 = |(A_0)\ 12|, \ S = 1, \ S_3 = 1,$$

$$3\psi_{-1} = |(A_0)\ \bar{1}\bar{2}|, \ S = 1, \ S_3 = -1,$$

$$3\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \ |(A_0)\ 1\bar{2}| + |(A_0)\bar{1}2|, \ S = 1, \ S_3 = 0. \tag{4-6}$$

Trường hợp ba hạt

Ở đây ta có tích biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)} \otimes \mathcal{D}^{(j_3)} \tag{4-7}$$

thực hiện trong không gian các hàm

$$|j_1 m_1>, \quad |j_2 m_2>, \quad |j_3 m_3>$$

$$-j_1 \leqslant m_1 \leqslant j_1, \ -j_2 \leqslant m_2 \leqslant j_2, \ -j_3 \leqslant m_3 \leqslant j_3. \tag{4-8}$$

Ta ký hiệu j_{12} là trọng số của các biểu diễn bất khả quy chứa trong tích

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)}$$

tức là

$$|j_1 - j_2| \leqslant j_{12} \leqslant j_1 + j_2, \ -j_{12} \leqslant m_{12} \leqslant j_{12}. \tag{4-9}$$

Thế thì các vectơ cơ sở $|(j_{12})jm>$ của các không gian con bất khả quy chứa trong không gian tích (4-8) sẽ có biểu thức

$$|(j_{12})jm> = \sum_{m_1+m_2+m_3=m} (j_1 j_2 m_1 m_2 | j_{12} m_{12}) \times$$

$$\times (j_{12} j_3 m_{12} m_3 | jm) | j_1 m_1 > | j_2 m_2 > j_3 m_3 >,$$

$$m_{12} = m_1 + m_2, \; |j_{12} - j_3| \leqslant j \leqslant j_{12} + j_3, \qquad (4\text{-}10)$$

$$-j \leqslant m \leqslant j. \qquad (4\text{-}11)$$

Trong trường hợp cụ thể ba êlectron đang xét, ta có

$$j_1 = j_2 = j_3 = 1/2 .$$

Từ đó, theo (4-10) và (4-11), ta có thể vẽ sơ đồ sau

j_{12}	0	1	
	↓	↙	↘
j	1/2	1/2	3/2
Trạng thái	$\|(0)1/2,m>$	$\|(1)1/2,m>$	$\|(1)3/2,m>$
	$m_1+m_2=m_{12}=0$	$m_{12}=0, \pm 1$	$m_{12}=0, \pm 1$

Chúng ta có tất cả ba không gian bất khả quy :

1 — Không gian hai chiều

$$|(0)1/2,m> , \qquad S = j = 1/2 ,$$

2 — Không gian hai chiều

$$|(1)1/2,m> , \qquad S = j = 1/2 ,$$

3 — Không gian bốn chiều

$$|(1)3/2,m> , \qquad S = j = 3/2 .$$

Biểu thức các vectơ thuộc các không gian trên tính theo công thức (4-10). Ta có với không gian con thứ nhất

$$|(0)1/2\,,\,1/2> = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2\alpha_3 - \beta_1\alpha_2\alpha_3)\,,\; S = S_3 = 1/2\,,$$

$$|(0)1/2\,,\,-1/2> = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2\beta_3 - \beta_1\alpha_2\beta_3)\,,\; S = 1/2\,,\; S_3 = -1/2.$$

Với không gian con thứ hai, ta được

$$|(1)1/2\,,\,1/2> = \sqrt{\frac{2}{3}}\left[\alpha_1\alpha_2\beta_3 - \frac{1}{\sqrt{6}}\alpha_1\beta_2\alpha_3 - \frac{1}{\sqrt{6}}\beta_1\alpha_2\alpha_3\right],$$

$$S = 1/2\,,\; S_3 = 1/2\,,$$

$$|(1)1/2\,,\,-1/2> = \sqrt{\frac{2}{3}}\left[\beta_1\beta_2\alpha_3 + \frac{1}{\sqrt{6}}\beta_1\alpha_2\beta_3 + \frac{1}{\sqrt{6}}\alpha_1\beta_2\beta_3\right],$$

$$S = 1/2\,,\; S_3 = -1/2\,.$$

Với không gian con thứ ba, ta được

$$| (1)3/2\,,\, 3/2 > \; = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\,,\; S = 3/2\,,\; S_3 = 3/2\,,$$

$$| (1)3/2\,,\, -3/2 > \; = \beta_1\beta_2\beta_2\,,\; S = 3/2\,,\; S_3 = -3/2\,,$$

$$| (1)3/2\,,\, 1/2 > \; = \frac{1}{\sqrt{3}}\,(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_1\beta_2\alpha_3 + \beta_1\alpha_2\alpha_3),$$

$$S = 3/2\,,\; S_3 = 1/2\,,$$

$$(1)3/2\,,\, -1/2 > \; = \frac{1}{\sqrt{3}}\,(\beta_1\beta_2\alpha_3 + \alpha_1\beta_2\beta_3 + \beta_1\alpha_2\beta_3)\,,$$

$$S = 3/2\,,\; S_3 = -1/2.$$

Từ các kết quả thu được, bằng phép thay thế tương tự như (4-4), ta được các MO sau của hệ ba êlectron :

1 — Lưỡng tuyến

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|\,1\bar{2}3\,| - |\,\bar{1}23\,|\,) \qquad S = 1/2\,,\; S_3 = 1/2\,,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|\,1\bar{2}\bar{3}\,| - |\,\bar{1}2\bar{3}\,|\,)\,,\quad S = 1/2\,,\; S_3 = -1/2\,.$$

2 — Lưỡng tuyến

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\,|\,12\bar{3}\,|\;\frac{1}{\sqrt{6}}\;1\bar{2}3\,| - \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\,\bar{1}23\,|\,\right],\; S = 1/2\,,\; S_3 = 1/2\,,$$

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\,|\,\bar{1}\bar{2}3\,| + \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\,\bar{1}2\bar{3}\,| + \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\,1\bar{2}\bar{3}\,|\,\right],\; S = 1/2\,,\; S_3 = -1/2\,;$$

3 — Tứ tuyến

$$|\,123\,|\,, \qquad S = 3/2\,,\; S_3 = 3/2\,,$$

$$|\,\bar{1}\bar{2}\bar{3}\,|\,, \qquad S = 3/2\,,\; S_3 = -3/2\,,$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\,(\,|\,12\bar{3}\,| + |\,1\bar{2}3\,| + |\,\bar{1}23\,|\,), \qquad S = 3/2\,,\; S_3 = 1/2\,,$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\,(\,|\,1\bar{2}3\,| + |\,1\bar{2}\bar{3}\,| + |\,\bar{1}2\bar{3}\,|\,), \qquad S = 3/2\,,\; S_3 = -1/2$$

Trường hợp bốn hạt

Tương tự như trên, ta có công thức sau cho hệ bốn hạt

$$|(j_{12}, j_{123})\, jm > \;= \sum_{m_1 + m_2 + m_3 + m_4 = m} (j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j_{12} m_{12}) \times$$

$$\times\, (j_{12} j_3 m_{12} m_3 \,|\, j_{123} m_{123})\, (j_{123} j_4 m_{123} m_4 \,|\, jm)\, |\, j_1 m_1 > |\, j_2 m_2 > |\, j_3 m_3 > |\, j_4 m_4 >, \tag{4-13}$$

$$|\, j_{12} - j_3 \,| \leqslant j_{123} \leqslant j_{12} + j_3\,, \quad |\, j_{123} - j_4 \,| \leqslant j \leqslant j_{123} + j_4,$$
$$- j_{123} \leqslant m_{123} \leqslant j_{123}\,, \qquad m_{123} = m_1 + m_2 + m_3. \tag{4-14}$$

Trong trường hợp cụ thể đang xét, ta có

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = 1/2,$$

và sơ đồ

$$
\begin{array}{lccccccc}
j_{12} & & 0 & & & & 1 & \\
 & & \downarrow & & & \swarrow & & \searrow \\
j_{123} & & 1/2 & & & 1/2 & & 3/2 \\
 & \swarrow & & \searrow & \swarrow & \searrow & \swarrow & \searrow \\
j & 0 & & 1 & 0 & 1 & 1 & 2
\end{array}
$$

$|(0,1/2)\,00> \; |(0,1/2)\,1,m> \; |(1,1/2)\,00> \; |(1,1/2)\,1,m> \; |(1,3/2)\,1,m> \; |(1,3/2)\,2,m>$

Theo các công thức (4-13) và (4-14), ta được chẳng hạn

$$
\begin{aligned}
|(0,1/2)\,00> = \frac{1}{2}\,(&\alpha_1\beta_2\alpha_3\beta_4 - \beta_1\alpha_2\alpha_3\beta_4 + \\
&+ \beta_1\alpha_2\beta_3\alpha_4 - \alpha_1\beta_2\beta_3\alpha_4), \\
&S = S_3 = 0, \\
|(1,1/2)\,00> = \frac{1}{2}\,(&\alpha_1\beta_2\alpha_3\beta_4 - \alpha_1\alpha_2\beta_3\beta_4 - \\
&- \beta_1\alpha_2\beta_3\alpha_4 + \beta_1\alpha_2\alpha_3\beta_4), \\
&S = S_3 = 0.
\end{aligned}
$$

Từ đó, chuyển sang các định thức Slater, ta được các MO sau

$$\frac{1}{2}\,(\,|1\bar{2}3\bar{4}| - |\bar{1}23\bar{4}| + |\bar{1}2\bar{3}4| - |1\bar{2}\bar{3}4|\,),\ S = S_3 = 0,$$

$$\frac{1}{2}\,(\,|1\bar{2}3\bar{4}| - |12\bar{3}\bar{4}| - |\bar{1}2\bar{3}4| + |\bar{1}23\bar{4}|\,),\ S = S_3 = 0.$$

Tương tự như thế, ta có thể lập các hàm riêng của toán tử spin tổng S trong trường hợp nhiều hạt.

§ 5. PHƯƠNG PHÁP PHÂN LOẠI CÁC TRẠNG THÁI ÊLECTRÔN PHÂN TỬ THEO NHÓM ĐỐI XỨNG VÀ THEO SPIN TỔNG

Bây giờ ta hãy tìm cách phân loại các trạng thái electrôn phân tử theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng và theo spin tổng. Ta minh họa phương pháp với nhóm $\mathcal{D}_{\infty h}$, lần lượt xét các cấu hình sau của hai êlectrôn :

$$
\begin{array}{ll}
(\sigma_g^+)\,(\sigma_g^+), & (\Pi_u)\,(\Pi_u), \\
(\sigma_g^+)\,(\sigma_u^+), & (\Pi_g)\,(\Pi_g), \\
(\sigma_u^+)\,(\sigma_u^+), & (\Pi_g)\,(\Pi_u),
\end{array}
$$

trong đó các trạng thái một êlectrôn được ký hiệu bằng chính ngay biểu diễn bất khả quy tương ứng : (xem 3-11)

$$\sigma_g^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(s_A + s_B),\quad \sigma_u^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(s_A - s_B),$$

$$
\begin{aligned}
\Pi_u &= \left\{ \Pi_u^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(p_{Ax} + p_{Bx}),\ \Pi_u^- = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(p_{Ay} + p_{By}) \right\}, \\
\Pi_g &= \left\{ \Pi_g^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(p_{Ax} - p_{Bx}),\ \Pi_g^- = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(p_{Ay} - p_{By}) \right\}.
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

Trong các ký hiệu trên, A và B là hai hạt nhân của phân tử có nhóm đối xứng $\mathcal{D}_{\infty h}$.

Có hai vấn đề :

1. Phân không gian tích tương ứng với các cấu hình trên thành tổng các không gian con bất khả quy.

2. Xác định các giá trị S và S_3 của các vectơ (trạng thái) thu được.

Bài toán thứ nhất dựa trên các chuỗi Clebsch-Gordan và phương pháp phân tích không gian biểu diễn. Bài toán thứ hai dựa vào § 4.

Cấu hình $(\sigma_g^+)(\sigma_g^+)$

Theo chuỗi Clebsch-Gordan

$$\sigma_g^+ \otimes \sigma_g^+ = \Sigma_g^+,$$

(cần nhắc lại rằng các ký hiệu với chữ lớn dành cho các trạng thái của toàn hệ các êlectrôn), ta thấy rằng trạng thái mô tả bởi định thức Slater

$$|(\sigma_g^+ \chi), (\sigma_g^+ \chi')|$$

chính là trạng thái Σ_g^+ của hệ hai êlectrôn của phân tử đang xét.

Tiếp theo, do hàm không gian σ_g^+ của hai êlectrôn là như nhau, các hàm spin χ và χ' phải khác nhau :

$$\chi = \alpha, \quad \chi' = \beta.$$

Thành thử, với cấu hình $(\sigma_g^+)^2$, ta có đơn tuyến (vỏ kín)

$${}^1\Sigma_g^+ = |(\sigma_g^+ \alpha), (\sigma_g^+ \beta)|, \quad S = S_3 = 0.$$

Tương tự như thế, với cấu hình (σ_u^{+2}), do

$$\sigma_u^+ \otimes \sigma_u^+ = \Sigma_g^+,$$

ta cũng có một đơn tuyến dạng ${}^1\Sigma_g^+$.

Cấu hình $(\sigma_g^+)(\sigma_u^+)$

Do

$$\sigma_g^+ \otimes \sigma_u^+ = \Sigma_u^+$$

tượng tự như trên, ta được trạng thái

$$\Sigma_u^+ = |(\sigma_g^+ \chi), (\sigma_u^+ \chi')|$$

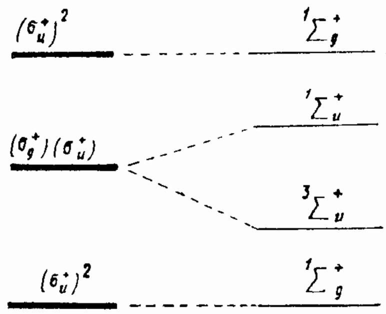
của hệ hai êlectrôn.

Nhưng trong trường hợp này, do các hàm sóng không gian σ_u^+ và σ_g^+ của hai êlectrôn là khác nhau, ta có thể lập các đa tuyến sau (xem (4-5) và (4-6))

$${}^1\Sigma_u^+ : \frac{1}{\sqrt{2}}\{|(\sigma_g^+\alpha), (\sigma_u^+\beta)| - |(\sigma_g^+\beta), (\sigma_g^+\alpha)|\}, \ S = 0, \ S_3 = 0,$$

$${}^3\Sigma_u^+ : \begin{cases} |(\sigma_g^+ \alpha), \sigma_u^+ \alpha)|, \ S = 1, \ S_3 = 1, \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\{|(\sigma_g^+\alpha), (\sigma_u^+\beta)| + |(\sigma_g^+\beta), (\sigma_u^+\alpha)|\}, \ S = 1, S_3 = 0, \\ |(\sigma_g^+ \beta), (\sigma_u^+ \beta)|, \ S = 1, \ S_3 = -1. \end{cases}$$

Trong lý thuyết về phân tử hiđrô, với các kết quả trên người ta xây dựng được trạng thái cơ bản của phân tử và các trạng thái kích thích thấp nhất (xem hình 9-8).



Hình 9-8

Theo các quy tắc lọc lựa (2-4) và (2-5), ta thấy rằng khi có bức xạ lưỡng cực điện thì, đối với các trạng thái nói trên, chỉ có chuyển dời

$$^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow {}^1\Sigma_u^+$$

là cho phép.

Cấu hình $(\Pi_u)^2$

Bây giờ chúng ta chuyển sang các cấu hình (Π) (Π), bắt đầu bằng cấu hình $(\Pi_u)^2$.

Trước hết, ta có thông tin đầu tiên suy từ chuỗi Clebsch-Gordan

$$\Pi_u \otimes \Pi_u = \Sigma_g^+ \oplus \Sigma_g^- \oplus \Delta_g \, ,$$

tức là với cấu hình trên, ta có ba trạng thái của hệ êlectrôn tương ứng tuân theo các biểu diễn bất khả quy

$$\Sigma_g^+ \, , \ \Sigma_g^- \ \text{và} \ \Delta_g$$

Muốn tìm các trạng thái này, ta cần phân tích không gian biểu diễn

$$(x, y) \otimes (x, y) = \{x^2 \, , \, y^2 \, , \, xy \, , \, yx\} \, .$$

Theo lệ thường có thể dùng các toán tử chiếu. Nhưng cũng có thể dựa ngay vào bảng đặc biểu của nhóm đối xứng, ở đó ta thấy rằng

$$\Sigma_g^+ : x^2 + y^2 \, ,$$

$$\Sigma_g^- : xy - yx = L_z \, ,$$

$$\Delta_g : x^2 - y^2 \, , xy + yx \text{ (hay vắn tắt là } xy). \qquad (5\text{-}2)$$

Bây giờ ta cần so sánh các vectơ cơ sở Π_u^+, Π_u^- ở (5-1) với các vectơ cơ sở (x, y) của biểu diễn Π_u. Chỉ cần so sánh các tính chất biến đổi của các vectơ trên theo một phần tử đối xứng nào đó là đủ, chẳng hạn là phần tử σ_v.

Nếu chọn mặt phẳng (x, z) làm mặt phẳng σ_v thì, do các vectơ cực x_i và p_i có tính chất biến đổi như nhau, ta được ngay

$$\sigma_v x = x \,,\ \sigma_v y = -y \,,$$
$$\sigma_v p_x = p_x \,,\ \sigma_v p_y = -p_y \,, \tag{5-3}$$
$$\sigma_v (p_{Ax} + p_{Bx}) = p_{Ax} + p_{Bx} \,,\ \sigma_v (p_{Ay} + p_{By}) = -(p_{Ay} + p_{By}).$$

Như thế, giữa hai không gian (x, y) và ($p_{Ax} + p_{Bx}$, $p_{Ay} + p_{By}$) ta có sự tương ứng

$$\pi_u^+ \sim p_{Ax} + p_{Bx} \sim x \,,\ \pi_u^- \sim p_{Ay} + p_{By} \sim y \,.$$

Kết quả này cho phép kết luận (xem (5-2))

$$\Sigma_g^+ : \pi_u^+ \pi_u^+ + \pi_u^- \pi_u^-$$

hay, chuyển sang định thức Slater

$$\Sigma_g^+ : \frac{1}{\sqrt{2}} \{| \pi_u^+ \chi) \,,\ (\pi_u^+ \chi')| + |(\pi_u^- \chi) \,,\ (\pi_u^- \chi')|\}.$$

Nhưng lại do các hàm sóng không gian trong các định thức trên là như nhau, các hàm spin phải khác nhau, tức là ta được đơn tuyến

$${}^1\Sigma_g^+ : \frac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^+ \beta)| + |(\pi_u^- \alpha) \,,\ (\pi_u^- \beta)|\} \,,\ S = 0 \,,\ S_3 = 0.$$

Tương tự như thế, ta được.

$${}^1\Delta_g : \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^+ \beta)| - |(\pi_u^- \alpha) \,,\ (\pi_u^- \beta)|\} \,,\ S = 0 \,,\ S_3 = 0, \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^- \beta)| - |(\pi_u^+ \beta) \,,\ (\pi_u^- \alpha)|\} \,,\ S = 0 \,,\ S_3 = 0. \end{cases}$$

Cuối cùng, với biểu diễn Σ_u^- ta được

$$\Sigma_g^- : \frac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \chi) \,,\ (\pi_u^- \chi')| + |(\pi_u^+ \chi') \,,\ (\pi_u^- \chi)|\} \,.$$

Từ đó, lần lượt cho cặp hàm sóng spin các giá trị

$$(\chi \,,\ \chi') = (\alpha \,,\ \alpha) \,,\ (\beta \,,\ \beta) \,,\ (\alpha \,,\ \beta)$$

ta được

$$\Sigma_u^- : \frac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^- \alpha)| + |(\pi_u^+ \alpha) \,,(\pi_u^- \alpha)|\} \,,$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \beta(\,,\ (\pi_u^- \beta)| + |(\pi_u^+ \beta) \,,\ (\pi_u^- \beta)|\} \,,$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^- \beta)| + |(\pi_u^+ \beta) \,,\ (\pi_u^- \alpha)|\} \,,$$

hay (sau khi chuẩn hóa)

$${}^3\Sigma_u^- : \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \{|(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^- \beta)| + |(\pi_u^+ \beta) \,,\ (\pi_u^- \alpha)|\} \,,\ S = 1 \,,\ S_3 = 0 \,, \\ |(\pi_u^+ \alpha) \,,\ (\pi_u^- \alpha)| \,,\ S = 1 \,,\ S_3 = 1 \,, \\ |(\pi_u^+ \beta) \,,\ (\pi_u^- \beta)| \,,\ S = 1 \,,\ S_3 = -1. \end{cases}$$

Cấu hình $(\Pi_g)^2$

Bài toán này cũng tương tự như bài toán trên. Ta xuất phát từ chuỗi Clebsch-Gordan

$$\Pi_g \otimes \Pi_g = \Sigma_g^+ \oplus \Sigma_g^- \oplus \Delta_g$$

và sự phân tích không gian (tương tự như (5-2))

$(L_x, L_y) \otimes (L_x, L_y) =$

$$\{L_x^2 + L_y^2, L_xL_y - L_yL_x, L_x^2 - L_y^2, L_xL_y + L_yL_x\},$$

$$\Sigma_g^+ : L_x^2 + L_y^2,$$

$$\Sigma_g^- : L_xL_y - L_yL_x,$$

$$\Delta_g : L_x^2 - L_y^2, L_xL_y + L_yL_x. \tag{5-4}$$

Mặt khác, so sánh các không gian (Π_g^+, Π_g^-) và (L_x, L_y) cùng thực hiện biểu diễn Δ_g của nhóm đối xứng, ta được

$$\Pi_g^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ax} - p_{Bx}) \sim L_y,$$

$$\Pi_g^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{Ay} - p_{By}) \sim L_x.$$

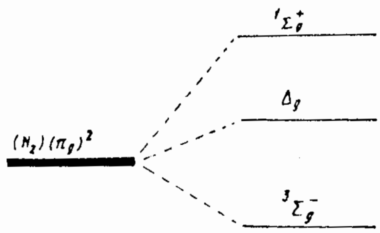
Với kết quả này, các kết quả (5-4) cho ngay các trạng thái sau

$${}^1\Sigma_g^+ : \frac{1}{\sqrt{2}}\{|(\Pi_g^+\alpha), (\Pi_g^+\beta)| + |(\Pi_g^-\alpha), (\Pi_g^-\beta)|\}, S = 0, S_3 = 0,$$

$$\Delta_g : \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Pi_g^+\alpha), (\Pi_g^-\beta)| - |(\Pi_g^+\beta), (\Pi_g^-\alpha)|\}, S = 0, S_3 = 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{|(\Pi_g^+\alpha), (\Pi_g^+\beta)| - |(\Pi_g^-\alpha), (\Pi_g^-\beta)|\}, S = 0, S_3 = 0. \end{cases}$$

$${}^3\Sigma_g^- : \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\{|(\Pi_g^+\alpha), (\Pi_g^-\beta)| + |(\Pi_g^+\beta), (\Pi_g^-\alpha)|\}, S = 1, S_3 = 0, \\ |(\Pi_g^+\alpha), (\Pi_g^-)\alpha|, \quad S = 1, S_3 = 1, \\ |(\Pi_g^+\beta), (\Pi_g^-\beta)|, \quad S = 1, S_3 = -1. \end{cases}$$

Trong hóa học lượng tử, người ta chứng tỏ rằng phân tử O_2 có trạng thái cơ bản (thuộc cấu hình $(\Pi_g)^2$) là tam tuyến ${}^3\Sigma_g^-$, còn hai đơn tuyến khác thuộc cấu hình trên là những trạng thái kích thích thấp nhất. Như thế, các mức năng lượng thấp nhất của phân tử O_2 có thể mô tả bởi sơ đồ sau :



Hình 9-9

Trong sơ đồ trên, ký hiệu (N_2) trỏ cấu hình của phân tử N_2 (vỏ kín):

$$(N_2) = (1\sigma_u^+)^2\ (2\sigma_g^+)^2\ (2\sigma_u^+)^2\ (1\pi_u)^4\ (3\sigma_g^+)^2 = {}^1\Sigma_g^+ .$$

Cấu hình $(\Pi_g)\ (\Pi_u)$

Trong trường hợp này, ta sử dụng các hệ thức sau:

$$\Pi_g \otimes \Pi_u = \Sigma_u^+ \oplus \Sigma_u^- \oplus \Delta_u ,$$

$$\Sigma_n^+ : xL_y - yL_x$$

$$\Sigma_u^- : xL_x + yL_y ,$$

$$\Delta_u : yL_x + xL_y ,\ xL_x - yL_y$$

Bạn đọc có thể tự mình chứng minh các hệ thức đó và sau đó xây dựng các trạng thái của hệ êlectrôn xem như làm bài tập.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [17], [19]

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — *Những kiến thức cần cho vật lý phân tử*
Đọc toàn chương.

B — *Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể*
Đọc toàn chương.

C — *Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử*
Không cần đọc chương này.

D — *Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân*
Không cần đọc chương này.

E — *Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản*
Không cần đọc chương này.

CHƯƠNG X

CÁC TRẠNG THÁI ÊLECTRÔN TINH THỂ THEO PHƯƠNG PHÁP ÊLECTRÔN TỰ DO

§1. VÙNG BRILLOUIN CỦA NHÓM O_h VỚI MẠNG BRAVAIS ĐƠN GIẢN

Cũng như đối với bài toán phân tử, giải một cách chính xác phương trình V (7-5) là một việc nói chung không thể thực hiện được. Thành thử, cần phải phát triển những phương pháp tính gần đúng nào đó. Sau đây ta sẽ minh họa một trong những phương pháp đó, gọi là *phương pháp êlectrôn tự do.*

Nói chung, theo phương pháp này, các êlectrôn xem như chuyển động độc lập với nhau và không chịu tác dụng của thế năng U (cho U = 0) của các hạt nhân tinh thể. Bài toán chia thành nhiều phần sau (tương tự như bài toán cho các phân tử):

1. Tìm trạng thái của từng êlectrôn tự do.

2. Xét thế năng U của tinh thể xem như một nhân tố nhiễu loạn nào đó. Các mức năng lượng sẽ tách ra.

3. Lập hàm sóng của hệ tất cả các êlectrôn của tinh thể. (Phân loại theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của tinh thể và theo spin tổng).

4. Các phần tử của ma trận năng lượng (nhiễu loạn) có thể xác định bằng phương pháp bán thực nghiệm.

Ta sẽ minh họa phương pháp này với điểm thứ nhất cho tinh thể có nhóm đối xứng O_h với mạng Bravais đơn giản.

Vùng Brillouin

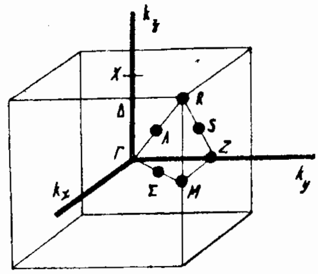
Với mạng đơn giản (xem bảng các nhóm không gian) các vectơ cơ sở tương ứng có tọa độ

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0), \ \mathbf{a}_2 = (0, a, 0), \ \mathbf{a}_3 = (0, 0, a).$$

Từ đó, các vectơ cơ sở của mạng đảo có dạng (xem V (3-2))

$$\mathbf{b}_1 = (2\pi/a, 0, 0), \ \mathbf{b}_2 = (0, 2\pi/a, 0), \ \mathbf{b}_3 = (0, 0, 2\pi/a)$$

Vùng Brillouin là một khối lập phương (xem hình 10-1)



Hình 10-1

Các nhóm phương hướng của các vectơ sao (có tính chất đối xứng cao)*.

Với nhóm cubic đơn giản, các sao có tính chất đối xứng cao tương ứng với các điểm sau đây:

$$(\Gamma, R), (X, M), (\Delta, T), \wedge, Z, (\Sigma, S).$$

Bằng cách tác dụng các phần tử của nhóm phương hướng $\mathcal{O}_h$ của các nhóm không gian $\mathcal{O}_h^i$ (i = 1, 2, ..., 10) lên các điểm nói trên ta sẽ được các sao có tính chất đối xứng cao. Tất nhiên các sao không có tính chất đối xứng cao là tương ứng với những điểm không nằm trên một phần tử đối xứng nào của nhóm phương hướng $\mathcal{O}_h$.

Để tìm các nhóm phương hướng tương ứng với các sao nói trên, ta chỉ cần tìm hệ các vectơ tương đương với nhau tương ứng với các điểm nói trên. Các nhóm phương hướng sẽ là những nhóm làm bất biến các hệ đó.

Điểm Γ

Hệ vectơ tương đương: $k = 0$.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_1 = \mathcal{O}_h.$$

Điểm R

Hệ vectơ tương đương:

Tám vectơ đi từ tâm đến tám đỉnh của hình lập phương.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_2 = \mathcal{O}_h.$$

Điểm X

Hệ vectơ tương đương:

Vectơ X và vectơ có mút là điểm đối xứng của X qua gốc.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_3 = \mathcal{D}_{4h}.$$

Điểm M

Hệ vectơ tương đương:

Bốn vectơ có mút là trung điểm của bốn cạnh thẳng đứng của hình lập phương.

*) Các sao có nhóm đối xứng khác đơn vị gọi là có tính chất đối xứng cao.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_4 = \mathcal{D}_{4h}.$$

Trục C_4 là trục k_z.

Điểm Δ

Hệ vectơ tương đương: ΓΔ.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_5 = \mathcal{C}_{4v}.$$

Trục C_4 là trục k_z. Bốn mặt phẳng σ_v đều đi qua trục đó.

Điểm T

Hệ vectơ tương đương:

Bốn giao điểm của mặt phẳng nằm ngang đi qua T với bốn cạnh thẳng đứng của hình lập phương.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_6 = \mathcal{C}_{4v}.$$

Trục C_4 là trục k_z.

Điểm Λ

Hệ vectơ tương đương: Γ Λ.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_7 = \mathcal{C}_{3v}.$$

Trục C_3 là trục ΓΛ, ba mặt phẳng σ_v là các mặt phẳng ΓΛA, ΓΛB và ΓΛC.

Điểm Z

Hệ vectơ tương đương:

Vectơ ΓZ và vectơ có mút là điểm đối xứng của Z qua mặt phẳng (k_z, k_x).

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_8 = \mathcal{C}_{2v}.$$

Trục C_2 là trục k_x. Các mặt phẳng σ_v là (k_z, k_x) và (k_x, k_y).

Điểm Σ

Hệ vectơ tương đương: ΓΣ.

Nhóm phương hướng:

$$\mathcal{G}_9 = \mathcal{C}_{2v}.$$

Trục C_2 là trục ΓM; còn hai mặt phẳng σ_v là các mặt phẳng ΓMT và mặt phẳng nằm ngang (k_x, k_y).

Điểm S

Tương tự như trên, ở đây nhóm phương hướng là nhóm

$$\mathcal{G}_{10} = \mathcal{C}_{2v}.$$

Các loại đối xứng thuộc về các nhóm phương hướng

Để tìm các trạng thái êlectrôn tinh thể tuân theo các biểu diễn bất khả quy của các nhóm phương hướng, cần phải xác định các loại đối xứng thuộc các nhóm phương hướng đó. Vấn đề đặt ra cũng tương tự như đối với các trạng thái êlectrôn phân tử mà chúng ta đã trình bầy ở trên.

Các loại đối xứng thuộc các nhóm có thể biểu thị bằng các không gian tenxơ bất khả quy hoặc bằng các hàm cầu. Điều này đã được giải quyết ở VIII, § 15, 17, 18, 19 và 20. Các không gian tenxơ hạng thấp như hạng không (vô hướng) hạng nhất (vectơ và giả vectơ) và hạng hai đều ghi ở các bảng đặc biểu như đã biết.

Trong các bài toán về trạng thái êlectrôn tinh thể, trong nhiều trường hợp. cần xác định các không gian tenxơ hạng cao hơn. Mặt khác, ở các bảng đặc biểu, trục đối xứng chính của các nhóm điểm quan niệm là thẳng đứng. Nhưng trong ứng dụng vào tinh thể, các trục đối xứng chính này có thể có một vị trí khác vị trí thẳng đứng, chẳng hạn như trục chính của nhóm phương hướng $\mathcal{G}_7$ hay $\mathcal{G}_9$.

Như thế, xuất hiện các bài toán tìm các không gian tenxơ bất khả quy hạng cao và bài toán đổi trục. Ta hãy lấy một vài thí dụ để minh họa. Ta hãy lấy nhóm phương hướng $\mathcal{O}_h$ của điểm Γ (đối chiếu các kết quả sau với bảng ở trang 279).

Trong trường hợp này, trục đối xứng chính (hạng bốn) — tức là trục k_z — vẫn có vị trí thẳng đứng, nên không cần giải quyết bài toán đổi trục.

Ta đặt vấn đề phân tích không gian tenxơ hạng ba bất khả quy của nhóm O(3) thành các không gian con bất khả quy của nhóm $\mathcal{O}_h$. Tất nhiên, chỉ cần giải quyết bài toán biểu diễn hạ cảm (xem VIII (14-10))

$$SO(3) \downarrow \mathcal{O} : \mathcal{D}^{(3)} = \mathcal{A}_2 \oplus \mathcal{G}_1 \oplus \mathcal{G}_2 .$$

Dựa vào thông tin này, ta hãy xét các hàm cầu $P_3^m \exp im\varphi$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$). Trước hết, ta chọn hàm cầu

$$P_3^2 \sin 2\varphi \ (m = 2) \text{ tỉ lệ với } \sin^2\theta \cos\theta \sin\varphi \cos\varphi \sim xyz.$$

Dựa vào bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{O}$, ta thấy ngay rằng vectơ xyz chính là không gian tenxơ bất khả quy một chiều tương ứng với biểu diễn $\mathcal{A}_2$.

Tiếp theo, trong số các hàm cầu còn lại, ta xét hàm

$$P_3^2 \cos 2\varphi \ (m = 2) \text{ tỉ lệ với } \cos\theta \sin^2\theta \ (\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) \sim z(x^2 - y^2).$$

Theo thông tin cung cấp bởi biểu thức khai triển của biểu diễn $\mathcal{D}^{(3)}$ ở trên, ta thấy ngay rằng vectơ $z(x^2 - y^2)$ thu được này sẽ là một trong ba vectơ cơ sở hoặc của biểu diễn $\mathcal{G}_1$, hoặc của biểu diễn $\mathcal{G}_2$. Ba vectơ đó là (bằng cách hoán vị vòng quanh, xem VIII, § 19)

$$z(x^2 - y^2), \ x(y^2 - z^2), \ y(z^2 - x^2).$$

Tiếp theo, muốn biết đó là không gian bất khả quy của biểu diễn ba chiều nào của nhóm $\mathcal{O}$, chỉ cần tính đặc biểu của biểu diễn tại phần tử C_2 hay C_4. Chẳng hạn, tại phần tử C_4 do

$$C_4 : x \to y, \ y \to -x, \ z \to z$$

ta được

$$x(y^2 - z^2) \to y(x^2 - z^2),$$

$$y(z^2 - x^2) \to -x(z^2 - y^2), \ z(x^2 - y^2) \to -z(x^2 - y^2)$$

từ đó ta được ma trận biểu diễn của phần tử C_4 như sau

$$C_4 : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Đặc biểu tại C_4 như thế có giá trị bằng -1 : không gian ba chiều trên là thuộc biểu diễn $\mathcal{F}_2$ của nhóm $\mathcal{O}$. Tất nhiên không gian ba chiều còn lại là thuộc biểu diễn $\mathcal{F}_1$.

Tương tự như thế, từ biểu thức khai triển

$$SO(3) \downarrow \mathcal{O} : \mathcal{D}^{(4)} = \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{E} \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$$

và hàm cầu

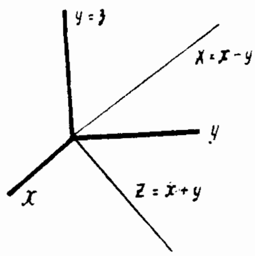
$$P_4^4 \sin 4\varphi \approx \sin^4\theta \sin\varphi \cos\varphi (\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) \sim xy(x^2 - y^2),$$

ta có thể kết luận rằng không gian tenxơ hạng bốn

$$xy(x^2 - y^2),\ yz(y^2 - z^2),\ zx(z^2 - x^2)$$

là thuộc biểu diễn $\mathcal{F}_1$ của nhóm $\mathcal{O}$.

Bây giờ ta hãy chọn một ví dụ về phép đổi trục. Ta xét nhóm phương hướng $\mathcal{F}_9 = \mathcal{C}_{2v}$ chẳng hạn, trong đó trục đối xứng chính không có vị trí thẳng đứng (theo phương z) như thường lệ (xem hình vẽ 10-2).



Hình 10-2

Ngay từ hình vẽ, đối chiếu với bảng đặc biểu của nhóm $\mathcal{C}_{2v}$, ta được các loại đối xứng sau

$$\mathcal{C}_{2v} : \mathcal{A}_1 : x + y,\ \mathcal{B}_2 : z,\ \mathcal{B}_1 : x - y.$$

§ . CÁC VÙNG NĂNG LƯỢNG VÀ CÁC TRẠNG THÁI NĂNG LƯỢNG VỚI PHƯƠNG PHÁP ÊLECTRÔN TỰ DO CHO NHÓM $\mathcal{O}_h$

Công thức chung của năng lượng êlectrôn tự do.

Đến đây ta đã có thể giải bài toán tìm các vùng năng lượng và các trạng thái năng lượng của êlectrôn tinh thể (một êlectrôn !) theo phương pháp êlectrôn tự do. Ta hãy minh họa cách tính cho các vùng năng lượng tương ứng với vectơ **k** nằm dọc theo trục ΓX.

Như đã biết (xem V (7-4)) với hàm Bloch

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\varphi$$

ta có phương trình sau:

$$\Delta\varphi + 2i\mathbf{k}\nabla\varphi + \frac{2M}{\hbar^2}\left[\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} - U\right]\varphi = 0$$

cho hàm tuần hoàn φ. Theo phương pháp êlectrôn tự do thì U cho bằng không. Từ đó, nếu ta viết hàm dưới dạng

$$\varphi(r) = e^{-i\mathbf{p}^C\mathbf{B}\mathbf{r}}, \tag{2-1}$$

năng lượng sẽ có biểu thức

$$\varepsilon = \varepsilon_{kp} = \frac{\hbar^2}{2M}|\mathbf{k} - \mathbf{p}^C\mathbf{B}|^2, \tag{2-2}$$

trong đó

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{bmatrix}, \ \mathbf{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix}, \ \mathbf{p}^C = (p_1, p_2, p_3).$$

Với mạng cubic đơn giản, do

$$\mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} I_3$$

ta được

$$\mathbf{p}^C\mathbf{B} = \frac{2\pi}{a}\mathbf{p}^C.$$

Từ đó, nếu đặt

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(\xi, \eta, \zeta),$$

từ (2-2), ta được năng lượng

$$E_{kp} \equiv \frac{2Ma^2}{\hbar^2}\varepsilon_{kp} = (\xi - p_1)^2 + (\eta - p_2)^2 + (\zeta - p_3)^2, \tag{2-3}$$

và, từ (2-1), ta được hàm sóng

$$\psi_{kp} = \exp\frac{2\pi i}{a}[(\xi - p_1)x + (\eta - p_2)y + (\zeta - p_3)z]. \tag{2-4}$$

Tiếp theo, do các điểm đối xứng cao có tọa độ

$$\Gamma = (0, 0, 0), \ \Delta = (0, 0, \zeta), \ X = \left[0, 0, \frac{1}{2}\right],$$

$$M = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right], \ R = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right], \ T = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \zeta\right],$$

$$\Sigma = (\xi, \xi, 0), \ \Lambda = (\xi, \xi, \xi), \ S = \left[\xi, \frac{1}{2}, \xi\right],$$

$$Z = \left[\xi, \frac{1}{2}, 0\right], \tag{2-5}$$

từ (2-3), ta thấy rằng các vùng năng lượng dọc theo trục $k_z = \Gamma X$ có biểu thức

$$E_\Gamma = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2, \qquad (2\text{-}6)$$

$$E_\Delta = p_1^2 + p_2^2 + (p_3 - \zeta)^2, \left[0 < \zeta < \frac{1}{2}\right] \qquad (2\text{-}7)$$

$$E_X = p_1^2 + p_2^2 + \left[p_3 - \frac{1}{2}\right]^2. \qquad (2\text{-}8)$$

Vùng năng lượng cơ bản

Ta hãy tính các vùng năng lượng thấp nhất dọc theo trục k_z, bắt đầu bằng vùng năng lượng cơ bản. Theo (2-6), giá trị của vùng này tại điểm Γ tương ứng với $\mathbf{p} = 0$, tức là ta có

$$E_\Gamma^{(0)} = 0, \ (\mathbf{p}^{(0)} = 0). \qquad (2\text{-}9)$$

Dọc theo trục k_z, theo (2-7), giá trị của vùng cơ bản tại điểm Δ bằng

$$E_\Delta^{(0)} = \zeta^2, \ (\mathbf{p}^{(0)} = 0). \qquad (2\text{-}10)$$

Tại điểm X, giá trị này bằng

$$E_X^{(0)} = \frac{1}{4}, \ (\mathbf{p}^{(0)} = 0). \qquad (2\text{-}11)$$

Đó là vùng năng lượng cơ bản dọc theo trục k_z.

Vùng năng lượng thứ hai

Nhưng theo (2-8), giá trị (2-11) tại điểm X còn tương ứng với giá trị

$$\mathbf{p}^{(1)} = (0, 0, 1).$$

Theo (2-7) giá trị này của $\mathbf{p}$ tương ứng với vùng năng lượng thứ hai tại điểm Δ:

$$E_\Delta^{(1)} = (1 - \zeta)^2, \ (\mathbf{p}^{(1)} = (0, 0, 1)). \qquad (2\text{-}12)$$

Giá trị tại điểm Γ của vùng này bằng

$$E_\Gamma^{(1)} = 1, \ (\mathbf{p}^{(1)} = (0, 0, 1)). \qquad (2\text{-}13)$$

Nhưng theo (2-6), giá trị (2-13) lại có thể còn tương ứng với những trị khác nhau sau đây của $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{p}^{(2)} = (0, 0, -1) \qquad (2\text{-}14)$$

$$\mathbf{p}^{(3)} = (1, 0, 0), \ \mathbf{p}^{(4)} = (-1, 0, 0), \ \mathbf{p}^{(5)} = (0, 1, 0), \ \mathbf{p}^{(6)} = (0, -1, 0). \qquad (2\text{-}15)$$

Vùng năng lượng thứ ba

Với giá trị $\mathbf{p}^{(2)}$ ta bắt đầu chuyển sang vùng năng lượng thứ ba:

$$E_\Delta^{(2)} = (1 + \zeta)^2, \ (\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(2)}). \qquad (2\text{-}16)$$

Các vùng năng lượng khác

Với các giá trị $\mathbf{p}^{(3)}, \ldots, \mathbf{p}^{(6)}$, theo (2-7), ta lại chuyển sang một vùng năng lượng khác:

$$E_{\Delta}^{(3)} = 1 + \zeta^2, \ (\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(3)}, \ldots, \mathbf{p}^{(6)}). \tag{2-17}$$

Giá trị của vùng năng lượng này tại điểm X, theo (2-6), bằng

$$E_{X}^{(3)} = 1 + \frac{1}{4}.$$

Nhưng theo (2-8), giá trị này còn tương ứng với những giá trị sau của p:

$$\mathbf{p}^{(7)} = (0, 1, 1), \quad \mathbf{p}^{(8)} = (0, -1, 1).$$
$$\mathbf{p}^{(9)} = (1, 0, 1), \quad \mathbf{p}^{(10)} = (-1, 0, 1).$$

Quá trình chuyển vùng năng lượng có thể tiếp tục như trên.

Các trạng thái tại vùng năng lượng cơ bản

Bây giờ ta hãy xây dựng các trạng thái một êlectrôn (tự do) tại các vùng năng lượng thấp nhất đã tìm được trên đây. Bài toán giải quyết dựa vào các nhóm phương hướng thuộc các điểm Γ, Δ, X (nhóm phương hướng của vectơ sao), dựa vào các loại đối xứng của các nhóm đó, dựa vào biểu thức (2-4) của hàm Bloch và, cuối cùng, vào các giá trị tương ứng của vectơ **p**. Ta hãy bắt đầu bằng vùng năng lượng cơ bản, tại đó $\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(0)} = 0$.

Tại điểm Γ, do

$$\mathbf{k} = (0, 0, 0)$$

từ (2-4), ta được hàm sóng

$$\psi_{\Gamma}^{(o)} = \text{const}.$$

Nhưng do tại điểm Γ, nhóm phương hướng là nhóm $\mathcal{O}_h$, ta có

$$\psi_{\Gamma}^{(o)} = \text{const}: \mathcal{A}_{1g} \text{ (nhóm } \mathcal{O}_h).$$

Tại điểm Δ, do

$$\mathbf{k}_{\Delta} \sim (0, 0, \zeta)$$

ta được hàm sóng

$$\psi_{\Delta}^{(o)} = \exp \frac{2\pi i}{a} \zeta z.$$

Nhưng vì nhóm phương hướng tại điểm Δ là nhóm $\mathcal{D}_4$ và vì tại z bé, ta có

$$\exp \frac{2\pi i}{a} z \approx 1$$

nên ta có ngay tính đối xứng

$$\psi_{\Delta}^{(o)} = \exp \frac{2i\pi}{a} \zeta z : \mathcal{A}_1 \ (\mathcal{D}_4).$$

Tại điểm X, tương ứng với các giá trị $p^{(o)}$ và $p^{(1)}$, ta có các hàm sóng

$$\psi_{1X}^{(o)} = \exp \frac{i\pi}{a} z, \qquad (p = p^{(o)})$$

$$\psi_{2X}^{(o)} = \exp \left[- \frac{i\pi}{a} z\right], \ (p = p^{(1)})$$

hay, lấy các tổ hợp tuyến tính thực, ta được

$$\Phi_{1X}^{(o)} = \sin \frac{\pi z}{a}, \ \Phi_{2X}^{(o)} = \cos \frac{\pi z}{a}$$

Nhưng vì nhóm phương hướng tại điểm X là nhóm $\mathcal{D}_{4h}$, ta được

$$\Phi_{1X}^{(o)} = \sin \frac{\pi z}{a} : \mathcal{A}_{2u}, \ \Phi_{2X}^{(o)} = \cos \frac{z\pi}{a} : \mathcal{A}_{1g} \ (\mathcal{D}_{4h}).$$

Các trạng thái tại vùng năng lượng thứ hai

Với giá trị $p = p^{(1)}$ ta có hàm sóng

$$\psi_{\Delta}^{(1)} = \exp \frac{2\pi i}{a} (1-\zeta)z : \mathcal{A}_1 \ (\mathcal{D}_4)$$

Tiếp theo với các giá trị $p^{(1)}, \ldots, p^{(6)}$, ta có thể lập sáu hàm sóng tại điểm Γ, và từ đó, sáu tổ hợp tuyến tính thực sau

$$\cos \frac{2\pi}{a} x, \quad \sin \frac{2\pi}{a} x, \quad \cos \frac{2\pi}{a} y, \quad \sin \frac{2\pi}{a} y,$$

$$\cos \frac{2\pi}{a} z, \quad \sin \frac{2\pi}{a} z.$$

Vì ở đây nhóm đối xứng là nhóm $\mathcal{O}_h$, nên ta có ngay:

$$\psi_{1\Gamma}^{(1)} = \sin \frac{1\pi}{a} x, \sin \frac{2\pi}{a} y, \sin \frac{2\pi}{a} z \sim (x,y,z) : \mathcal{F}_{1u} \ (\mathcal{O}_h)$$

Với các hàm sóng còn lại, ta được các tổ hợp tuyến tính

$$\psi_{2\Gamma}^{(1)} = \left\{ \begin{aligned} &\cos \frac{2\pi}{a} x - \cos \frac{2\pi}{a} y \sim x^2 - y^2 ; \\ &\cos \frac{2\pi}{a} z - \frac{1}{2}\left[\cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{a} y\right] \sim z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \end{aligned} \right\} : \mathcal{E}_g$$

$$\psi_{3\Gamma}^{(1)} = \cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{a} y + \cos \frac{2\pi}{a} z \sim \text{const} + x^2 + y^2 + z^2 : \mathcal{A}_{1g} \ (\mathcal{O}_h)$$

Các trạng thái tại vùng năng lượng thứ ba

Với giá trị $p^{(2)}$ ta có hàm sóng

$$\Psi_{\Delta}^{(2)} = \exp \frac{2\pi i}{a} (\zeta - 1) z : \mathcal{A}_1. (\mathcal{D}_4)$$

Các trạng thái ở các vùng năng lượng khác

Với các giá trị $p^{(3)}, \ldots, p^{(6)}$ ta có các trạng thái

$$\Psi_{1\Delta}^{(3)} = \left\{ \exp \frac{2\pi i}{a} \zeta z \sin \frac{2\pi}{a} x , \exp \frac{2\pi i}{a} \zeta z \sin \frac{2\pi}{a} y \right\} : \mathcal{E} ,$$

$$\Psi_{2\Delta}^{(3)} = \exp \frac{2\pi i}{a} \zeta z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x - \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{B}_2 ,$$

$$\Psi_{3\Delta}^{(3)} = \exp \frac{2\pi i}{a} \zeta z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{A}_1 (\mathcal{D}_4)$$

tại điểm Δ. Tại điểm X, ta có các hàm sóng sau tương ứng với các giá trị $p^{(3)}, \ldots, p^{(10)}$:

$$\exp \pm (\pi i/a) (2x + z) , \exp \pm (\pi i/a) (2x - z),$$

$$\exp \pm (\pi i/a) (2y + z) , \exp \pm (\pi i/a) (2y - z).$$

Từ đó, ta có thể lập các tổ hợp tuyến tính sau

$$\Psi_{1X}^{(3)} = \left\{ \sin \frac{\pi}{a} z \sin \frac{2\pi}{a} x , \sin \frac{\pi}{a} z \sin \frac{2\pi}{a} y \right\} : \mathcal{E}_g ,$$

$$\Psi_{2X}^{(3)} = \left\{ \cos \frac{\pi}{a} z \sin \frac{2\pi}{a} x , \cos \frac{\pi}{a} z \sin \frac{2\pi}{a} y \right\} : \mathcal{E}_u ,$$

$$\Psi_{3X}^{(3)} = \sin \frac{\pi}{a} z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{A}_{1u} ,$$

$$\Psi_{4X}^{(3)} = \sin \frac{\pi}{a} z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x - \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{B}_{2u} ,$$

$$\Psi_{5X}^{(3)} = \cos \frac{\pi}{a} z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x - \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{B}_{2g} ,$$

$$\Psi_{6X}^{(3)} = \cos \frac{\pi}{a} z \left[\cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{a} y \right] : \mathcal{A}_{1g} , (\mathcal{D}_{4h})$$

v.v...

Như đã thấy ở trên, các mức năng lượng có những bậc suy biến cao hơn thường lệ (chẳng hạn bậc suy biến trong trường hợp cuối cùng là tám, nhưng nhóm đối xứng có chiều biểu diễn tối đa là hai!). Điều này dễ hiểu vì chúng ta đã giả thiết thế năng U = 0, tức là đã mở rộng nhóm đối xứng đến nhóm O(3). Bây giờ chúng ta hãy tưởng tượng thế năng U của tinh thể bắt đầu tác dụng. Thế thì mức đối xứng sẽ hạ từ O(3) xuống nhóm đối xứng của tinh thể và các mức năng lượng sẽ tách ra, cho các mức với những bậc suy biến thấp hơn, phù hợp với tính đối xứng « chính thức » của tinh thể.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [14], [18]

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — *Những kiến thức cần cho vật lý phân tử*
Không cần đọc chương này

B — *Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể*
Đọc toàn chương

C — *Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử*
Không cần đọc chương này

D — *Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân*
Không cần đọc chương này

E — *Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản*
Không cần đọc chương này

CHƯƠNG XI

NHÓM LORENTZ

§1. NHÓM LORENTZ

Định nghĩa

Như đã biết, nhóm Lorentz L là nhóm O(3, 1), làm bất biến dạng toàn phương

$$x^C g x, \; g = -I_3 \oplus I_1, \; x^C = (x^1, x^2, x^3, x^o).$$

Tính chất

a) $A^C g A = g$.

b) Nhóm Lorentz là một nhóm *không compắc*: các biểu diễn hữu hạn chiều đều không unita (xem VII, § 3).

c) Nhóm Lorentz là một nhóm *không liên thông*: nhóm O(3, 1) có bốn tờ liên thông

$$L = L_+^{\uparrow} \cup L_+^{\downarrow} \cup L_-^{\uparrow} \cup L_-^{\downarrow}.$$

Thành phần đơn vị $L_+^{\uparrow}$ gọi là *nhóm Lorentz thực sự* hay ***nhóm** Lorentz.*

$L_+^{\uparrow}$ là nhị liên. Nhóm con

$$L^{\uparrow} = L_+^{\uparrow} \cup L_-^{\uparrow}$$

gọi là *nhóm Lorentz đầy đủ*, còn L gọi là *nhóm Lorentz tổng quát.*

Dễ thấy rằng

$$L_+^{\downarrow} = TL_+^{\uparrow}, \; L_-^{\uparrow} = IL_+^{\uparrow}, \; L_-^{\downarrow} = SL_+^{\uparrow}, \; L^{\uparrow} = L_+^{\uparrow} \otimes \mathcal{C}_i \tag{1-1}$$

với

$$Tt = -t, \quad S = IT. \tag{1-2}$$

Đại số Lie của nhóm Lorentz

Nhóm Lorentz thực sự có sáu tham số. Sáu tham số này có thể chọn là những góc quay $\omega_{\mu\nu}$ trong các mặt phẳng (x^μ, x^ν), $(\mu, \nu = 0, 1, 2, 3)$. Các vi tử tương ứng ký hiệu là $X_{\mu\nu}$. Theo VII (6-12) ta có

$$-X_{ki} = X_{ik} = x^k \frac{\partial}{\partial x^i} - x^i \frac{\partial}{\partial x^k}, \ (i, k = 1, 2, 3), \tag{1-3}$$

$$X_{io} = X_{oi} = x^i \frac{\partial}{\partial x^o} + x^o \frac{\partial}{\partial x^i}, \ (i = 1, 2, 3), \tag{1-4}$$

$$[X_{\mu\nu}, X_{\rho\sigma}] = g_{\sigma\nu}X_{\rho\mu} + g_{\rho\mu}X_{\sigma\nu} - g_{\sigma\mu}X_{\rho\nu} - g_{\rho\nu}X_{\sigma\mu},$$
$$(\mu, \nu, \rho, \sigma = 0, 1, 2, 3). \tag{1-5}$$

§2. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY HỮU HẠN CỦA NHÓM LORENTZ THỰC SỰ

Các hệ thức giao hoán

Vì nhóm Lorentz là một nhóm không compắc nên, như đã nói ở chương VII, các biểu diễn unita của nhóm đều là vô số chiều. Điều này dẫn đến nhiều khó khăn về tính toán thực hiện trên các ma trận vô số chiều và về sự tồn tại chuẩn của các vectơ cơ sở thực hiện biểu diễn vô số chiều.

Bây giờ giả sử ta có một biểu diễn nào đó của nhóm Lorentz mà các vi tử là $M_{\mu\nu}$. Các vi tử này làm thành một đại số Lie nào đó trong đó các hệ thức giao hoán phải giống các hệ thức giao hoán (1-5), tức là ta có

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = g_{\sigma\nu}M_{\rho\mu} + g_{\rho\mu}M_{\sigma\nu} - g_{\sigma\mu}M_{\rho\nu} - g_{\rho\nu}M_{\sigma\mu}. \tag{2-1}$$

Giả sử biểu diễn này là bất khả quy và hữu hạn chiều (tức là không unita), ta hãy chứng minh rằng biểu diễn đó được đặc trưng bởi hai số có thể lấy các giá trị nguyên hoặc bán nguyên. Quả vậy, đặt

$$\mathbf{L} = (M_{23}, M_{31}, M_{12}), \ \mathbf{N} = (M_{10}, M_{20}, M_{30}), \tag{2-2}$$

thì, từ các hệ thức giao hoán, ta được

$$[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk}L_k \ , \quad [N_i, N_j] = -\varepsilon_{ijk}L_k,$$
$$[L_i, N_j] = \varepsilon_{ijk}N_k \ , \quad (i, j, k = 1, 2, 3). \tag{2-3}$$

Các toán tử Casimir

Bây giờ ta hãy lập toán tử Casimir C_2 theo công thức VII (10-1). Các phép tính cho thấy rằng toán tử này, sai khác một thừa số không đổi, bằng

$$C_2 = \mathbf{L}^2 - \mathbf{N}^2. \tag{2-4}$$

Ngoài toán tử Casimir C_2, còn tồn tại một toán tử khác C'_2 giao hoán với mọi vi tử $M_{\mu\nu}$:

$$C'_2 = \frac{1}{4} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} M_{\mu\nu} M_{\rho\sigma} = \mathbf{L}\,\mathbf{N}, \tag{2-5}$$

trong đó $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ là tenxơ hoàn toàn phải xứng hạng bốn và $\varepsilon^{0123} = 1$. Vì biểu diễn đang xét là bất khả quy, nên hai toán tử trên đều là bội của toán tử đơn vị. Như thế, các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz có thể phân loại theo các giá trị của hai toán tử đó. Ta hãy tính các giá trị đó. Muốn thế, ta đặt

$$J_k = \frac{i}{2}(L_k + iN_k) \quad , \quad K_l = \frac{i}{2}(L_l - iN_l). \tag{2-6}$$

Thế thì, theo (2-3) và (2-6), ta được

$$[J_k, J_l] = i\varepsilon_{klm}J_m, \ [K_k, K_l] = i\varepsilon_{klm} K_m,$$
$$[J_k, K_l] = 0, \tag{2-7}$$

nghĩa là các toán tử **J** và **K** là các vi tử của nhóm quay SO(3) tương ứng có các giá trị [xem VIII (5-9), (5-11) và (5-12)].

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1), \ \mathbf{K}^2 = k(k+1), \ (j, k = 0, 1/2, 1, 3/2...) \tag{2-8}$$

Trở lại các toán tử C_2 và C'_2, theo (2-4), (2-5), (2-6) và (2-8), ta được (sai khác một thừa số không đổi)

$$C_2 = \mathbf{J}^2 + \mathbf{K}^2 = j(j+1) + k(k+1), \tag{2-9}$$
$$C'_2 = \mathbf{J}^2 - \mathbf{K}^2 = j(j+1) - k(k+1). \tag{2-10}$$

Các biểu diễn bất khả quy hữu hạn chiều

Như thế, ta thấy rằng các biểu diễn bất khả quy hữu hạn chiều của nhóm Lorentz được đặc trưng bởi một cặp số (j, k)

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots \ k = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$$

và có dạng

$$\mathcal{D}^{(j,k)} = \mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{D}^{(k)}, \tag{2-11}$$

trong đó $\mathcal{D}^{(j)}$ và $\mathcal{D}^{(k)}$ là các biểu diễn của nhóm SO(3). (Sở dĩ biểu diễn trên có dạng tích biểu diễn vì, theo (2-7), các vi tử **J** và **K** giao hoán với nhau). Không gian của biểu diễn (2-11) là không gian của các tích vectơ

$$|j, m; k, n\rangle = |j, m\rangle\, |k, n\rangle, \ -j \leqslant m \leqslant j, \ -k \leqslant n \leqslant k.$$

Chiều của không gian này là (2j + 1) (2k + 1). Theo VIII (5-22), các ma trận **J** và **K** có dạng

$$J_3\, |j, m; k, n\rangle = m\, |j, m; k, n\rangle,$$
$$(J_1 + iJ_2)\, |j, m; k, n\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\ |j, m+1; k, n\rangle,$$
$$(J_1 - iJ_2)\, |j, m; k, n\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\ |j, m-1; k, n\rangle, \tag{2-12'}$$
$$K_3\, |j, m; k, n\rangle = n\, |j, m; k, n\rangle,$$
$$(K_1 + iK_2)\, |j, m; k, n\rangle = \sqrt{(k+n+1)(k-n)}\ |j, m; k, n+1\rangle,$$
$$(K_1 - iK_2)\, |j, m; k, n\rangle = \sqrt{(k-n+1)(k+n)}\ |j, m; k, n-1\rangle. \tag{2-12''}$$

Các biểu diễn (2-12) là toàn bộ tất cả các biểu diễn bất khả quy hữu hạn chiều của nhóm Lorentz.

Trong trường hợp chung, dựa vào các giá trị của các toán tử C_2 và C'_2, có thể chứng minh rằng các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz có thể đặc trưng bởi một cặp số (j_0, v), trong đó j_0 là một số nguyên hoặc bán nguyên, còn v là một số phức.

Tùy theo lượng v^2 có dạng $(j_0 + p)^2$, p là số nguyên, hay không có dạng đó, mà các biểu diễn của nhóm Lorentz là hữu hạn hay vô hạn chiều.

Nhóm phủ phổ dụng của nhóm Lorentz

Do khi j bán nguyên, các biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$ là lưỡng trị, nên rõ ràng các biểu diễn (2-11) của nhóm Lorentz sẽ là đơn trị khi $j + k$ là một số nguyên và lưỡng trị khi $j + k$ là một số bán nguyên.

Theo VII § 7, các biểu diễn lưỡng trị này sẽ là đơn trị với nhóm phủ phổ dụng của nhóm Lorentz. Ta sẽ chứng minh rằng nhóm đó chính là nhóm SL (2, C). Quả vậy, mọi vectơ **x** bốn chiều của không gian R^{3+1} với mêtric $g = -I_3 \oplus I_1$ có thể biểu diễn bằng ma trận hecmitic sau

$$x \to H_x = \begin{bmatrix} x^0 - x^3 & x^2 - ix^1 \\ x^2 + ix^1 & x^0 + x^3 \end{bmatrix}.$$

Các ma trận này thuộc không gian các ma trận hecmitic cấp hai. Thế thì phép biến đổi tuyến tính

$$H_x \to T(A)H_x = AH_xA^+, \ A \in SL(2, C)$$

thực hiện trong không gian ma trận đó, sẽ cảm ứng phép biến đổi tuyến tính sau trong không gian R^{3+1}:

$$T(A): \quad x \to y$$

với y được xác định bởi đẳng thức

$$H_y = AH_xA^+, \quad H_y = \begin{bmatrix} y^0 - y^3 & y^2 - iy^1 \\ y^2 + iy^1 & y^0 + y^3 \end{bmatrix}.$$

Nhưng do $A \in SL(2, C)$, A có định thức bằng đơn vị, và ta được

$$\det H_y = \det H_x,$$

tức là

$$(y^0)^2 - (y^1)^2 - (y^2)^2 - (y^3)^2 = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2.$$

Rõ ràng phép biến đổi cảm ứng trong không gian R^{3+1} là phép biến đổi Lorentz.

Như thế ta có một ánh xạ nào đó từ nhóm SL (2, C) lên nhóm Lorentz. Ánh xạ này là một phép đồng cấu.

Quả vậy, ta có

$$\begin{aligned} T(A)T(B)H_x &= T(A)(T(B)H_x) = T(A)BH_xB^+ = \\ &= ABH_xB^+A^+ = (AB)H_x(AB)^+, \end{aligned}$$

với mọi $A, B \in SL(2, C)$, tức là

$$T(A)T(B) = T(AB).$$

Nhân đồng cấu là

$$Z_2 = \{1, -1\}$$

do

$$T(+A)H_x = T(-A)H_x.$$

Từ đó ta được

$$SL(2, C)/Z_2 \approx L_+^{\uparrow}.$$

Nhưng do các nhóm SL(n, C) đều đơn liên (VII, § 4), nhóm SL(2, C) chính là nhóm phủ phổ dụng của nhóm Lorentz (xem VII, § 7). Các biểu diễn lưỡng trị của nhóm Lorentz sẽ là đơn trị đối với nhóm SL(2, C), những khó khăn về biểu diễn lưỡng trị của nhóm Lorentz sẽ được khắc phục khi thay nhóm đó bằng nhóm SL(2, C).

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(4)

Để kết thúc phần này, ta lưu ý rằng các công thức (2-12) đều có thể áp dụng cho nhóm SO(4), vì ta có thể lặp lại tất cả các suy luận về các biểu diễn hữu hạn chiều nói trên với điều kiện thay N bằng iN (xem VII, § 7). Tất nhiên, do tính chất compắc của nhóm SO(4), các biểu diễn (2-12) là toàn bộ các biểu diễn unita hữu hạn chiều của nhóm SO(4).

Vì $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$, và $SO(3) \approx SU(2)/Z_2$ nên rõ ràng ta có

$$SO(4) \approx (SU(2) \otimes SU(2))/(Z_2 \otimes Z_2).$$

Nhóm đơn liên $SU(2) \otimes SU(2)$ chính là nhóm phủ phổ dụng của nhóm SO(4), và tất cả các biểu diễn lưỡng trị của nhóm SO(4) đều trở thành đơn trị đối với nhóm $SU(2) \otimes SU(2)$.

§ 3. CHUỖI CLEBSCH-GORDAN CHO $L_+^{\uparrow}$ VÀ BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM $L_+^{\uparrow} \downarrow SO(3)$

Chuỗi Clebsch-Gordan cho $L_+^{\uparrow}$

Bây giờ ta hãy tìm chuỗi Clebsch-Gordan cho tích biểu diễn

$$\mathfrak{D}^{(j_1,k_1)} \otimes {}^{(j_2,k_2)}$$

của nhóm Lorentz.

Để giải bài tính này, ta hãy lợi dụng mối quan hệ giữa các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz và nhóm SO(4). Ta ký hiệu biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(4), tương ứng với biểu diễn bất khả quy $\mathfrak{D}^{(j,k)}$ của nhóm Lorentz, là $\hat{\mathfrak{D}}^{(j,k)}$. Vì ta có $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$ nên rõ ràng

$$\hat{D}^{(j,k)}(h) = D^{(j)}(g) \otimes D^{(k)}(g'), \tag{3-1}$$

nếu, với mọi $h \in SO(4)$, ta có $h = gg'$, $g, g' \in SO(3)$. Thành thử ta được

$$\hat{D}^{(j_1,k_1)}(h) \otimes \hat{D}^{(j_2,k_2)}(h) = D^{(j_1)}(g) \otimes D^{(k_1)}(g') \otimes D^{(j_2)}(g) \otimes D^{(k_2)}(g').$$

Tiếp theo, bằng cách thay đổi cơ sở của không gian biểu diễn, ta có thể hoán vị các nhân tử của tích biểu diễn trên như sau

$$\widehat{D}^{(j_1,k_1)}(h) \otimes \widehat{D}^{(j_2,k_2)}(h) = D^{(j_1)}(g) \otimes D^{(j_2)}(g) \otimes D^{(k_1)}(g') \otimes D^{(k_2)}(g').$$

Từ đó, sử dụng chuỗi Clebsch-Gordan VIII (7-5) của nhóm SO(3), ta được

$$\widehat{D}^{(j_1,k_1)}(h) \otimes \widehat{D}^{(j_2,k_2)}(h) = \sum_{|j-j_2|}^{j_1+j_2} \oplus D^{(j)}(g) \otimes \sum_{|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \oplus D^{(k)}(g'). \tag{3-2}$$

Trở lại đẳng thức (3-1), từ (3-2) ta được

$$\widehat{D}^{(j_1,k_1)}(h) \otimes \widehat{D}^{(j_2,k_2)}(h) = \sum_{|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \oplus \sum_{|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \oplus \widehat{D}^{(j,k)}(h). \tag{3-3}$$

Đó là chuỗi Clebsch-Gordan của nhóm SO(4).

Cuối cùng, do mối quan hệ nói trên giữa các biểu diễn của nhóm Lorentz và nhóm SO(4), từ (3-3), ta được chuỗi Clebsch-Gordan sau cho nhóm Lorentz

$$\mathcal{D}^{(j_1,k_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2,k_2)} = \sum_{|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \oplus \sum_{|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \oplus \mathcal{D}^{(j,k)} \tag{3-4}$$

Tiếp theo, từ (3-4), với các hệ số Clebsch-Gordan $(j_1j_2m_1m_2 \mid jm)$ của nhóm SO(3), ta được

$$|jm; kn> = \sum_{\substack{m_1+m_2=m;\\ n_1+n_2=n}} (j_1j_2m_1m_2 \mid jm)(k_1k_2n_1n_2 \mid kn) \mid j_1m_1; k_1n_1 > \mid j_2m_2; k_2n_2 >. \tag{3-5}$$

Từ đó, dựa vào tính chất trực giao của các hệ số Clebsch-Gordan của nhóm SO(3), ta được hệ thức ngược

$$|j_1m_1; k_1n_1 > \mid j_2m_2; k_2n_2 > = \sum_{\substack{j,m;\\ k,m.}} (j_1j_2m_1m_2 \mid jm)(k_1k_2n_1n_2 \mid kn) \mid jm; kn >. \tag{3-6}$$

Với các công thức (3-4) và (3-5), bài toán nhân biểu diễn của nhóm Lorentz giải quyết xong.

Bài toán biểu diễn hạ cảm $L_+^\uparrow \downarrow SO(3)$

Bây giờ ta xét bài toán biểu diễn hạ cảm $L_+^\uparrow \downarrow SO(3)$, nhóm SO(3) xem là nhóm con của nhóm Lorentz $L_+^\uparrow$ khi ta cho tọa độ $x^0 = \text{const}$. Trước hết, từ (2-11), ta thấy ngay rằng

$$L_+^\uparrow \downarrow SO(3): \mathcal{D}^{(j,0)} = \mathcal{D}^{(j)}, \ \mathcal{D}^{(0,k)} = \mathcal{D}^{(k)}.$$

Mặt khác, từ (3-4), ta được

$$\mathcal{D}^{(j,0)} \otimes \mathcal{D}^{(0,k)} = \mathcal{D}^{(j,k)}.$$

Thành thử ta có

$$L\updownarrow \downarrow SO(3):\mathcal{D}^{(j,k)} = \mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{D}^{(k)} = \sum_{|j-k|}^{j+k} \oplus \mathcal{D}^{(l)}. \tag{3-7}$$

Tất nhiên, ta cũng có

$$SO(4) \downarrow SO(3):\widehat{\mathcal{D}}^{(j,k)} = \sum_{|j-k|}^{j+k} \oplus \mathcal{D}^{(l)}. \tag{3-8}$$

§ 4. SPINƠ VÀ TENXƠ CỦA NHÓM LORENTZ

Spinơ và tenxơ

Các đại lượng biến đổi theo các biểu diễn đơn trị của nhóm Lorentz gọi là *tenxơ*. Các đại lượng biến đổi theo các biểu diễn lưỡng trị của nhóm đó gọi là *spinơ*. Như thế, dựa vào kết luận ở cuối § 2, ta thấy rằng, theo định nghĩa, các đại lượng biến đổi theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(j,k)}$ của nhóm Lorentz là tenxơ khi $j + k$ là một số nguyên, và là spinơ khi $j + k$ là một số bán nguyên.

Nói riêng, đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,0)}$ gọi là *spinơ hạng nhất loại một*, còn đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(0,1/2)}$ gọi *là spinơ hạng nhất loại hai*. Đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(0,0)}$ gọi là *vô hướng* (tenxơ hạng không). Đại lượng tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,1/2)}$ gọi là *vectơ* (tenxơ hạng nhất).

Các biểu diễn cơ bản $\mathcal{D}^{(1/2,0)}$ và $\mathcal{D}^{(0,1/2)}$

Với biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,0)}$, ta có $K_i = 0$ vì $k = 0$ và, theo (2-12'), các ma trận biểu diễn các vi tử của biểu diễn đó là

$$J_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\ J_1 + iJ_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix},\ J_1 - iJ_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

tức là

$$J_i = \frac{1}{2}\sigma_i,\ (i = 1, 2, 3).$$

Thành thử, theo (2-6), ta có các biểu thức sau của các ma trận $L_i^{(1/2,0)}$ và $N_i^{(1/2,0)}$ của biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,0)}$:

$$\mathcal{D}^{(1/2,0)}:\ L_i^{(1/2,0)} = \frac{1}{2i}\sigma_i,\ N_i^{(1/2,0)} = -\frac{1}{2}\sigma_i. \tag{4-1}$$

Tương tự như thế, với biểu diễn $\mathcal{D}^{(0,1/2)}$, $J_i = 0$, ta có

$$\mathcal{D}^{(0,1/2)}:\ L_i^{(0,1/2)} = \frac{1}{2i}\sigma_i,\ N_i^{(0,1/2)} = \frac{1}{2}\sigma_i. \tag{4-2}$$

Ta lưu ý rằng các biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,0)}$ và $\mathcal{D}^{(0,1/2)}$ là không tương đương với nhau vì nếu xảy ra trường hợp trái lại, hóa ra có tồn tại một ma trận P khác bội của đơn vị sao mà

$$PN_i^{(1/2,0)}P^{-1} = N_i^{(0,1/2)},$$

hay là, theo (4-1) và (4-2),

$$P\,\sigma_i + \sigma_i P = 0\,,(i = 1, 2, 3).$$

Nhưng ta biết rằng không thể tồn tại một ma trận P như thế được.

Spinơ và tenxơ hạng cao

Theo định nghĩa, các đại lượng tuân theo biểu diễn

$$\{\mathcal{D}^{(1/2,0)}\}^{\otimes p} \otimes \{\mathcal{D}^{(0,1/2)}\}^{\otimes q}$$

của nhóm Lorentz gọi là *spinơ hạng p + q*. Các spinơ hạng cao này ký hiệu là

$$\psi_{i_1 \dots i_p\, j_1 \dots j_q}. \tag{4-3}$$

Tương tự như đối với các spinơ hạng cao của nhóm SO(3) (xem VIII § 9), ta có thể chứng minh rằng không gian con các spinơ (4-3) đối xứng theo tất cả các chỉ số i nói riêng cũng như đối xứng theo tất cả các chỉ số j nói riêng, là không gian của biểu diễn $\mathcal{D}^{(p/2,q/2)}$ của nhóm Lorentz

Tiếp theo ta có thể định nghĩa các *tenxơ hạng n* là các đại lượng biến đổi theo biểu diễn $\{\mathcal{D}^{(1/2,1/2)}\}^{\otimes n}$ của nhóm Lorentz.

§ 5. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM LORENTZ ĐẦY ĐỦ

Các biểu diễn bất khả quy hữu hạn chiều

Bây giờ ta hãy tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz đầy đủ, sau khi biết được các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz thực sự $L_+^\uparrow$. Như đã định nghĩa (xem (1-1)), nhóm Lorentz đầy đủ là tích trực tiếp

$$L^\uparrow = L_+^\uparrow \otimes \mathcal{C}_i,$$

tức là nhóm Lorentz đầy đủ thu từ nhóm Lorentz thực sự bằng cách đưa thêm toán tử nghịch đảo không gian I. Trước hết, ta hãy tính các giao hoán tử của toán tử I với các vi tử X_{ik} của nhóm Lorentz thực sự. Theo (1-2), (1-3) và (1-4) ta có

$$X_{0i}\, If\,(x^1, x^2, x^3, x^0) = X_{0i} f\,(-x^1, -x^2, -x^3, x^0) =$$

$$= \left[x^i \frac{\partial}{\partial x^0} + x^0 \frac{\partial}{\partial x^i} \right] f\,(-x^1, -x^2, -x^3, x^0),$$

$$IX_{0i} f\,(x^1, x^2, x^3, x^0) = I \left[x^0 \frac{\partial}{\partial x^i} + x^i \frac{\partial}{\partial x^0} \right] f\,(x^1, x^2, x^0, x^0) =$$

$$= - \left[x^0 \frac{\partial}{\partial x^i} + x^i \frac{\partial}{\partial x^0} \right] f\,(-x^1, -x^2, -x^3, x^0),$$

với mọi hàm $f\,(x^1, x^2, x^3, x^0)$. Từ đó ta suy ra hệ thức

$$[X_{0i}, I]_+ \equiv X_{0i}\, I + IX_{0i} = 0,\ (i = 1, 2, 3). \tag{5-1}$$

Tương tự như thế, ta có

$$[X_{ik}, I] = X_{ik}\, I - IX_{ki} = 0,\ (i, k = 1, 2, 3). \tag{5-2}$$

Thành thử, với (2-2), (2-6), (5-1) và (5-2), ($X_{oi} = X_{io}$!), ta được các hệ thức

$$IK_i = J_i I,\ IJ_i = K_i I,\ (i = 1, 2, 3). \tag{5-3}$$

Từ các hệ thức (5-3), theo (2-12), ta được

$$J_3 \{I \mid j, m; k, n\rangle\} = IK_3 \mid j, m; k, n\rangle = n \{I \mid j, m; k, n\rangle\},$$

tức là vectơ $I \mid j, m; k, n\rangle$ biến đổi như vectơ $\mid k, n; j, m\rangle$ và ta có thể giả thiết

$$I \mid j, m; k, n\rangle = \mid k, n; j, m\rangle,\ I \mid k, n; j, m\rangle = \mid j, m; k, n\rangle \tag{5-4}$$

(do $I^2 = e$).

Đến đây, ta phân biệt hai trường hợp.

a) $j \neq k$. Trong trường hợp này, do (5-4), không gian bất biến của các biểu diễn của nhóm Lorentz đầy đủ phải là tổng trực tiếp các không gian căng trên các vectơ $\mid j, m; k, n\rangle$ và $I \mid j, m; k, n\rangle = \mid k, n; j, m\rangle$. Vì các không gian này tương ứng là các không gian của các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j,k)}$ và $\mathcal{D}^{(k,j)}$ của nhóm Lorentz thực sự, nên ta thấy rằng các biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz đầy đủ có dạng

$$\mathcal{D}^{(j,k)} \oplus \mathcal{D}^{(k,j)},\quad (k \neq j). \tag{5-5}$$

Chiều của biểu diễn trên là $2(2j + 1)(2k + 1)$.

b) $k = j$. Tất nhiên trong trường hợp này $\mid j, m; j, n\rangle$ và $\mid j, n; j, m\rangle$ không còn độc lập tuyến tính với nhau như trong trường hợp trên, và các không gian biểu diễn bất khả quy của nhóm Lorentz đầy đủ sẽ có chiều bé hơn $2(2j + 1)(2k + 1) = 2(2j + 1)^2$. Gọi $\mathcal{M}$ là không gian bất khả quy căng trên các vectơ $\mid j, m; j, n\rangle$ và $\mid j, n; j, m\rangle$. Ta hãy lập các không gian con $\mathcal{N}^{\pm} = \{v^{\pm}\}$ của không gian $\mathcal{M}$, với

$$v^{\pm} = \mid j, m; j, n\rangle \pm \mid j, n; j, m\rangle =$$

hay, theo (5-4)

$$v^{\pm} = \mid j, m; j, n\rangle \pm I \mid j, m; j, n\rangle.$$

Nhưng vì $I^2 = e$, nên ta thấy ngay $\mathcal{N}^{\pm}$ là bất biến đối với I:

$$Iv^{\pm} = \pm v^{\pm},\ I\mathcal{N}^{\pm} = \mathcal{N}^{\pm}.$$

Mặt khác, cũng dễ chứng minh rằng các không gian $\mathcal{N}^{\pm}$ là bất biến đối với tất cả các vi tử còn lại là K_i và J_i của nhóm Lorentz đầy đủ. Thành thử, các không gian con $\mathcal{N}^{\pm}$ là bất biến đối với biểu diễn đang xét của nhóm Lorentz đầy đủ. Nhưng do giả thiết không gian $\mathcal{M}$ là bất khả quy, ta được hai khả năng sau

1) $\mathcal{N}^{+} = \mathcal{M}$, $\mathcal{N}^{-} = 0$, tức là $I \mid j, m; j, n\rangle = \mid j, m; j, n\rangle$, (5-6)

2) $\mathcal{N}^{-} = \mathcal{M}$, $\mathcal{N}^{+} = 0$, tức là $I \mid j, m; j, n\rangle = -\mid j, m; j, n\rangle$. (5-7)

Như thế, trong trường b) có hai loại biểu diễn khác nhau của nhóm Lorentz đầy đủ, tương ứng với các khả năng (5-6) và (5-7). Các biểu diễn này tương ứng ký hiệu là

$$\mathcal{D}^{(j,j)+},\ \mathcal{D}^{(j,j)-}$$

Tất nhiên các biểu diễn này là đơn trị vì j + j luôn luôn là một số nguyên. Chiều của mỗi biểu diễn này là $(2j + 1)^2$. Vấn đề giải quyết xong.

Ta cũng có thể lập công thức nhân biểu diễn cho nhóm Lorentz đầy đủ, tương tự như công thức (3-2). Chẳng hạn, ta có

$$\mathcal{D}^{(0,0)+} \otimes \mathcal{D}^{(1,1)\pm} = \mathcal{D}^{(1,1)\pm},$$
$$\mathcal{D}^{(0,0)-} \otimes \mathcal{D}^{(1,1)\pm} = \mathcal{D}^{(1,1)\mp}.$$

Cuối cùng, dễ thấy rằng

$$L^{\uparrow} \downarrow L_{+}^{\uparrow} : \mathcal{D}^{(j,j)\pm} = \mathcal{D}^{(j,j)}. \tag{5-8}$$

Lưỡng spinơ

Trong trường hợp riêng của biểu diễn bốn chiều

$$\mathcal{D}^{(1/2,0)} \oplus \mathcal{D}^{(0,1/2)}, \quad (j = 1/2, k = 0), \tag{5-9}$$

không gian biểu diễn gọi là không gian các *lưỡng spinơ bốn thành phần*. Như thế các lưỡng spinơ bốn thành phần, theo (5-4), có dạng

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} \tag{5-10}$$

với

$$\varphi = \begin{bmatrix} \psi_1 = | 1/2, 1/2; 0, 0 \rangle \\ \psi_2 = | 1/2, -1/2; 0, 0 \rangle \end{bmatrix}, \chi = \begin{bmatrix} \psi_3 = | 0, 0; 1/2, 1/2 \rangle \\ \psi_4 = | 0, 0; 1/2, -1,2 \rangle \end{bmatrix}, \tag{5-11}$$

φ và χ tương ứng là các spinơ hạng nhất loại một và loại hai. Các lưỡng spinơ bốn thành phần có vị trí cơ bản trong vật lý học vi mô tương đối tính.

Tenxơ và giả tenxơ

Các biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(0,0)+}, \quad \mathcal{D}^{(0,0)-}, \quad \mathcal{D}^{(1/2,1/2)-}, \quad \mathcal{D}^{(1/2,1/2)+} \tag{5-12}$$

tương ứng gọi là *biểu diễn vô hướng*, *giả vô hướng*, *vectơ* và *giả vectơ*. Các đại lượng tuân theo các biểu diễn đó tương ứng gọi là *vô hướng*, *giả vô hướng*, *vectơ*, và *giả vectơ*.

Nói chung, các đại lượng tuân theo các biểu diễn

$$\{\mathcal{D}^{(1/2,1/2)+}\}^{\otimes p} \otimes \{\mathcal{D}^{(1/2,1/2)-}\}^{\otimes q} \tag{5-13}$$

gọi là *tenxơ hạng* $p+q$. Các tenxơ hạng cao cũng chia làm hai loại, tùy theo chúng đổi dấu hay không khi có phép nghịch đảo không gian I. Chẳng hạn, các tenxơ hạng hai biến đổi theo biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(1/2,1/2)\pm} \otimes \mathcal{D}^{(1/2,1/2)\pm} \tag{5-14}$$

gọi là *tenxơ hạng hai* (thực sự), còn các tenxơ hạng hai biến đổi theo biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(1/2,1/2)+} \otimes \mathcal{D}^{(1/2,1/2)-} \tag{5-15}$$

gọi là *giả tenxơ hạng hai*.

§ 6. CÁC PHƯƠNG TRÌNH HIỆP BIẾN TƯƠNG ĐỐI

Phương trình Klein — Gordon

Theo hình thức luận của lý thuyết trường lượng tử, các phương trình hiệp biến tương đối (hay hiệp biến Lorentz) có thể suy từ các hệ thức thông thường giữa các đại lượng động lực trong lý thuyết tương đối Einstein, bằng phép thay thế (xem V, (3-1), (3-2))

$$E = i\hbar\, \partial/\partial t, \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla.$$

Từ hệ thức cơ bản

$$E^2 = M^2c^4 + p^2c^2$$

như thế ta được phương trình sau

$$(\Box + M^2c^2)\,\Phi = (p_\mu^2 + M^2c^2)\,\Phi = 0$$

gọi là *phương trình Klein-Gordon.* Hàm sóng Φ là một vô hướng hay giả vô hướng một thành phần, tương ứng tuân theo các biểu diễn (xem (5-12))

$$\mathcal{D}^{(0,0)+}, \quad \mathcal{D}^{(0,0)-}$$

của nhóm Lorentz đầy đủ.

Phương trình Dirac

Ta đặt

$$p_\mu^2 + M^2c^2 = (\gamma_\mu p_\mu - iMc)\,(\gamma_\nu p_\nu + iMc)$$

với các ma trận Dirac thỏa mãn các hệ thức cơ bản II (13-9). Từ phương trình Klein-Gordon ta sẽ được phương trình sau

$$(\gamma_\mu p_\mu - iMc)\,\psi = 0 \tag{6-1}$$

hay

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = H_D\psi,$$

với

$$H_D = c\,\alpha\,\mathbf{p} + Mc^2\beta, \quad \alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{6-2}$$

gọi là các *phương trình Dirac.* Vì các ma trận Dirac là cấp bốn, nên hàm sóng ψ có bốn thành phần.

Ta hãy tìm quy luật biến đổi của hàm sóng ψ đối với nhóm Lorentz đầy đủ. Theo § 5, ta đã thấy rằng trong trường hợp này hàm sóng phải biến đổi theo biểu diễn khả quy (xem (5-5))

$$\mathcal{D}^{(k,j)} \oplus \mathcal{D}^{(j,k)}$$

của nhóm Lorentz thực sự, không gian biểu diễn có $2(2k+1)(2j+1)$ chiều. Nhưng vì số chiều này bằng số thành phần của hàm sóng, nên ta phải có đẳng thức

$$2(2k+1)(2j+1) = 4,$$

tức là $k = 1/2$, $j = 0$ (hoặc ngược lại). Thành thử ta có

$$\psi : \mathcal{D}^{(1/2,0)} \oplus \mathcal{D}^{(0,1/2)}. \tag{6-3}$$

Như thế, hàm sóng ψ của phương trình Dirac là một lưỡng spinơ bốn thành phần. Ta lưu ý rằng kết quả này phù hợp với yêu cầu hiệp biến của phương trình Dirac (6-2) đối với phép biến đổi Lorentz. Quả vậy ta hãy viết phương trình này dưới dạng

$$\gamma_\mu p_\mu \psi = iMc\psi. \tag{6-4}$$

Thế thì yêu cầu hiệp biến nói trên buộc hai vế của (6-4) phải tuân theo những biểu diễn không mâu thuẫn nhau. Vì vectơ **p** tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,1/2)}$ (xem § 5) nên, theo chuỗi Clebsch-Gordan (3-4), ta thấy rằng vế trái của (6-4) tuân theo biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(1,1/2)} \oplus \mathcal{D}^{(1/2,1)} \oplus \mathcal{D}^{(1/2,0)} \oplus \mathcal{D}^{(0,1/2)},$$

tức là có chứa biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2,0)} \oplus \mathcal{D}^{(0,1/2)}$ của vế phải, tính chất phi mâu thuẫn nói trên được chứng minh.

Phương trình hiệp biến Lorentz tổng quát

Ta có thể đặt vấn đề hiệp biến Lorentz một cách tổng quát hơn, xuất phát từ những phương trình đạo hàm riêng cấp một tổng quát có dạng sau

$$(\Gamma_\mu p_\mu + \chi)\,\psi = 0,$$

hay

$$\Gamma_\mu p_\mu \psi = -\,\chi\psi, \tag{6-5}$$

trong đó Γ_μ là những ma trận nào đó, còn χ là một vô hướng nào đó. Trước hết ta giả sử ψ biến đổi theo một biểu diễn bất khả quy nào đó của nhóm Lorentz thực sự, chẳng hạn là biểu diễn $\mathcal{D}^{(k,j)}$. Thế thì vế trái của (6-5) biến đổi theo biểu diễn (theo (3-4))

$$\mathcal{D}^{(1/2,1/2)} \otimes \mathcal{D}^{(k,j)} = \mathcal{D}^{(k+1/2,j+1/2)} \oplus \mathcal{D}^{(k+1/2,j-1/2)} \oplus$$
$$\oplus\, \mathcal{D}^{(k-1/2,j+1/2)} \oplus \mathcal{D}^{(k-1/2,j-1/2)}.$$

Nhưng vì vế phải tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(k,j)}$, nên phương trình (6-5) chỉ tồn tại khi $\chi = 0$. Như thế, khi $\chi \neq 0$, hàm sóng phải biến đổi theo một biểu diễn *khả quy* của nhóm Lorentz thực sự. Trường hợp $\Gamma_\mu = \gamma_\mu$ là một ví dụ cụ thể.

Tiếp theo, ta hãy xét khối lượng của hạt mô tả bởi phương trình (6-5). Muốn thế, ta hãy tìm trạng thái dừng

$$\psi(\mathbf{r},\ t) = \psi_0(\mathbf{r}) \exp\,(-\,iMt/\hbar).$$

Thế thì, từ (6-1), ta được phương trình

$$M\Gamma_4\psi_0 = \chi\psi_0.$$

Từ đó, ký hiệu λ_i là các trị riêng của toán tử Γ_4 và M_i là các khối lượng tương ứng, ta được

$$M_i = \chi / \mid \lambda_i \mid,$$

một điều chứng tỏ rằng nói chung phương trình (6-5) mô tả những hạt có khối lượng M_i khác nhau. Trong trường hợp riêng tương ứng với phương trình Dirac $\Gamma_4 = \gamma_4$, do

$$\gamma_4 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{bmatrix}, \ |\lambda_i| = 1,$$

các hạt của phương trình Dirac đều có khối lượng như nhau.

Phương trình Duffin-Kummer

Trước khi kết thúc phần này, ta chú ý rằng phương trình Klein-Gordon có thể viết dưới dạng hệ phương trình sau

$$\Phi_o = \sqrt{iM}\,\Phi, \ \Phi_\mu = \frac{1}{\sqrt{iM}} \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu}, \ (c = 1),$$

hay (*phương trình Duffin-Kummer*)

$$(\beta_\mu p_\mu + iM)\,\Psi = 0, \tag{6-6}$$

với Ψ là một hàm sóng năm thành phần

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Phi_o \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{bmatrix},$$

và các ma trận hạng năm β_μ (gọi là ma trận Duffin-Kummer) thỏa mãn các hệ thức

$$\beta_\mu \beta_\nu \beta_\rho + \beta_\rho \beta_\nu \beta_\mu = \delta_{\mu\nu}\beta_\rho + \delta_{\rho\nu}\beta_\mu. \tag{6-7}$$

Theo cách đặt nói trên, rõ ràng hàm sóng Ψ tuân theo biểu diễn khả quy

$$\Psi : \mathcal{D}^{(0,0)\pm} \oplus \mathcal{D}^{(1/2,\,1/2)\mp},$$

vì Φ_0 là một vô hướng hay giả vô hướng và $\partial/\partial x^\mu$ là một vectơ.

§ 7. SPIN

Mômen xung lượng toàn phần và spin

Trước đây, ta đã nói đến một đại lượng bảo toàn là mômen xung lượng (xem V (3-3))

$$\mathbf{L} = -i\hbar\,[\mathbf{r} \times \nabla] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] \tag{7-1}$$

L có liên quan đến tính chất đẳng hướng của không gian R^3. Nhưng kết quả này ta chỉ thu được trong khuôn khổ của cơ học lượng tử phi tương đối tính.

Bước sang cơ học lượng tử tương đối tính với phương trình Dirac (6-2), ta sẽ thấy rằng bức tranh bảo toàn mômen có khác. Quả vậy, dễ thấy rằng (xem (6-2))

$$[L_3, H_D] = c\,[L_3, \alpha\,\mathbf{p}] = i\hbar c\,(\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1) \neq 0,$$

như thế momen L_3 không bảo toàn, vì không giao hoán với toán tử Hamilton H_D của phương trình Dirac. Mặt khác, từ (6-2), ta được

$$\sigma_3\alpha_1 = -\alpha_1\sigma_3 = i\alpha_2,\ \sigma_3\alpha_2 = -\alpha_2\sigma_3 = -i\alpha_1,\ \sigma_3\alpha_3 = \alpha_3\sigma_3.$$

Từ đó ta được

$$\frac{\hbar}{2}[\sigma_3, H_D] = \frac{\hbar c}{2}[\boldsymbol{\Sigma}_3, \alpha\,\mathbf{p}] = -i\hbar c(\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1),$$

với

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{bmatrix}.$$

Thành thử, phối hợp hai kết quả vừa thu được, ta thấy rằng

$$[J_3, H_D] = 0.$$

Nói chung, ta dễ chứng tỏ rằng

$$[\mathbf{J}, H_D] = 0, \tag{7-2}$$

với

$$\mathbf{J} = \mathbf{s} + \mathbf{L} = \frac{\hbar}{2}\sigma + \mathbf{L}. \tag{7-3}$$

Như thế, trong khuôn khổ của cơ học lượng tử tương đối tính, ta thấy rằng do tính chất đẳng hướng của không gian R^3, lượng bảo toàn không phải là mômen xung lượng thông thường **L**, mà lại là lượng **J**. Lượng **J** gọi là *mômen xung lượng toàn phần*. Thành phần thứ nhất

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\sigma \tag{7-4}$$

của mômen xung lượng toàn phần **J**, thu được từ **J** khi hạt đứng yên (khi $p = 0$), gọi là *spin* của hạt Dirac. Tất nhiên, cũng như **L**, spin **s** cũng không phải là một lượng bảo toàn trong trường hợp chuyển động chung của hạt.

Các toán tử spin s_i thỏa mãn các hệ thức giao hoán

$$[s_i, s_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,s_k. \tag{7-5}$$

Toán tử s_3 gọi là *hình chiếu của spin* lên trục thứ ba (thường gọi là trục Oz). Vì

$$s_3 = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

nên các trị riêng s_3 bằng $\hbar/2$ và $-\hbar/2$, hay bằng $1/2$, $-1/2$ nếu chọn $\hbar$ làm đơn vị. Ta nói các hạt Dirac có spin bằng 1/2. Trong tự nhiên, các hạt có spin bằng 1/2 là hạt êlectrôn, hạt nuclôn (prôtôn và nơtrôn), các hạt ν, các hạt hyperôn v.v...

Các hàm riêng của toán tử s_3 có thể viết dưới dạng hàm hai thành phần sau

$$\chi_{1/2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ tương ứng với trị riêng } s_3 = \frac{1}{2},$$

$$\chi_{-1/2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \text{ tương ứng với trị riêng } s_3 = -\frac{1}{2} \tag{7-6}$$

Thông thường người ta xem các hàm (7-6) như một hàm duy nhất nào đó chứa một biến số nào đó gọi là « biến số spin », ký hiệu là σ, và biến số này quan niệm có hai giá trị 1/2, — 1/2. Nói cụ thể hơn, người ta thường đặt

$$\chi'_{m_s}(\sigma) \equiv \begin{cases} \chi_{1/2}(\sigma) = \begin{cases} 1 \text{ khi } \sigma = \ \ 1/2, \\ 0 \text{ khi } \sigma = -1/2, \end{cases} \\ \chi_{-1/2}(\sigma) = \begin{cases} 0 \text{ khi } \sigma = \ \ 1/2, \\ 1 \text{ khi } \sigma = -1/2. \end{cases} \end{cases} \quad (7\text{-}7)$$

Với ký hiệu này, ta có thể viết

$$s_3 \chi_{m_s}(\sigma) = \hbar m_s \chi_{m_s}(\sigma), \ \left(m_s = \pm \frac{1}{2}\right). \quad (7\text{-}8)$$

Spin và nhóm SO (3)

Trên đây ta đã suy ra đại lượng spin từ phương trình Dirac trong khuôn khổ cơ học lượng tử tương đối tính, nhận nhóm biến đổi là nhóm Lorentz. Bây giờ ta hãy xem đại lượng spin có liên quan đến nhóm SO(3) như thế nào. Vấn đề giải quyết khá đơn giản, lưu ý rằng nhóm SO(3) là một nhóm con của nhóm Lorentz và bài tính quy về bài toán biểu diễn hạ cảm $L_+^\uparrow \downarrow SO(3)$. Theo công thức (3-7) ta được ngay

$$L_+^\uparrow \downarrow SO(3): \ \mathcal{D}^{(1/2,0)} \ \ (\text{hay}\,\mathcal{D}^{(0,1/2)}) = \mathcal{D}^{(1/2)},$$

tức là các spinơ hai thành phần (loại một hay loại hai) có mặt trong spinơ bốn thành phần của phương trình Dirac, chính là các spinơ hạng một của nhóm SO(3).

Nói cách khác, spin 1/2 chính là trọng trưởng của biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(1/2)}$ của nhóm SO(3). Nói chung, ta định nghĩa: spin của một hạt có hàm sóng tuân theo một biểu diễn $\mathcal{D}(j)$ nào đó của nhóm SO(3) chính là trọng trưởng j của biểu diễn đó.

Theo định nghĩa này, ta có những giá trị spin sau đây của các phương trình đã đề cập ở trên:

Nếu hàm sóng ψ thỏa mãn phương trình cấp một tổng quát (6-5) và tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(k,l)}$, $(\chi = 0)$, của nhóm Lorentz thì ta có

$$L_+^\uparrow \downarrow SO(3): \mathcal{D}^{(k,j)} = \mathcal{D}^{(k+j)} \oplus \mathcal{D}^{(k+j-1)} \oplus \ldots \oplus \mathcal{D}^{|k-j|},$$

như thế các hạt mô tả bởi phương trình (6-5) là những hạt có spin nguyên hay bán nguyên nếu $k + j$ là nguyên hay bán nguyên. Bằng phương pháp này ta cũng có thể tìm các giá trị của spin khi $\chi \neq 0$.

Tiếp theo, ta trở lại phương trình Duffin-Kummer (6-6), trong đó hàm sóng ψ tuân theo biểu diễn

$$\mathcal{D}^{(1/2,\,1/2)\mp} \oplus \mathcal{D}^{(0,0)\pm}.$$

Với biểu diễn thứ nhất tương ứng với Φ_μ ta có

$$L_+^\uparrow \downarrow SO(3): \mathcal{D}^{(1/2,\,1/2)\mp} = \mathcal{D}^{(1)} \oplus \mathcal{D}^{(0)},$$

tức là các hạt mô tả bởi hàm sóng bốn thành phần Φ_μ của Ψ có spin bằng 1 và 0.

Cuối cùng, ta hãy nói đến spin của các hạt của trường điện từ. Vì hàm sóng của trường điện từ là vectơ bốn chiều A_μ, tuân theo biểu diễn $\mathcal{D}^{(1/2, 1/2)}$- của nhóm Lorentz nên, cũng tương tự như trên, các hạt đó phải có spin bằng 1 và 0. Nhưng vì ta lại có điều kiện Lorentz

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\mu} = 0,$$

quy số thành phần của hàm sóng từ bốn về ba, nên hạt có spin bằng không phải loại ra ngoài. Thành thử, các hạt của trường điện từ (phôton) có spin bằng 1.

Phương trình Pauli

Theo thường lệ, khi một hạt có điện tích tương tác với điện từ trường ($\mathbf{A}$, A_0), phương trình chuyển động sẽ suy từ phương trình khi không có tương tác điện từ bằng cách thay thế

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c \quad , \quad E \to E - eA_0.$$

Từ đó, từ phương trình Dirac, ta suy ra phương trình sau

$$\left\{\gamma_\mu \left[\dot{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu\right] - iMc\right\} \psi = 0 \tag{7-9}$$

cho hạt có spin 1/2 và có điện tích e tương tác với điện từ trường.

Chuyển sang trường hợp phi tương đối tính, người ta chứng minh được rằng phương trình (7-9) sẽ cho phương trình chuyển động với toán tử H như sau

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2M} + eA_0 - \frac{e\hbar}{2Mc}\,\sigma\,\mathbf{B} \tag{7-10}$$

gọi là *phương trình Pauli*. Lượng $\mathbf{B}$ là từ trường. Hàm sóng là spinơ hai thành phần của nhóm SO(3).

Tương tác spin-oocbitan

Phương trình chuyển động phi tương đối tính (7-10) của hạt trong trường tĩnh điện A_0 chưa bao gồm lượng bổ chính cỡ v^2/c^2. Có thể chứng minh rằng lượng bổ chính này có dạng

$$W = \frac{e\hbar\sigma}{4M^2c^2}\,[\mathrm{grad}\, A_0 \times \mathbf{p}], \tag{7-11}$$

và gọi là toán tử *tương tác spin-oocbitan.*

Nếu A_0 là một trường xuyên tâm, ta được

$$W = \frac{e\hbar\sigma}{4M^2c^2r}\,\frac{\partial A_0}{\partial r}\,[\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \frac{2}{2M^2c^2r}\,\frac{\partial A_0}{\partial r}\,(\mathbf{s}, \mathbf{L}) \tag{7-12}$$

vì $\mathbf{s} = \hbar\sigma/2$.

Nếu A_0 là trường Coulomb, $A_0 = -Ze^2/r$, ta được

$$W = \frac{Ze^2}{2M^2c^2r^3}\,(\mathbf{s}, \mathbf{L}), \tag{7-13}$$

tương tác spin-oocbitan là đáng kể với những hạt nhân nặng (Z lớn).

Spin đồng vị

Cạnh khái niệm spin, trong lý thuyết hạt nhân còn xuất hiện một khái niệm tương tự như thế, gọi là khái niệm *spin đồng vị*. Nói cụ thể hơn, thực nghiệm chứng tỏ rằng các lực hạt nhân không phụ thuộc vào chỗ hạt tương tác là prôtôn hay nơtrôn, tức là tương tác hạt nhân có tính chất độc lập điện tích. Sự kiện này dẫn đến giả thiết xem các hạt protôn và nơtrôn là hai trạng thái khác nhau của cùng một hạt, hạt *nuclôn*. Về mặt lý thuyết nhóm, làm thế nào để thực hiện giả thiết đó? Khi ta nói đến spin thông thường, như đã biết, ta xem hạt Dirac với spin $s = 1/2$ có hai trạng thái spin: $s_3 = 1/2$, $s_3 = -1/2$ và xem đó là kết quả của biểu diễn $\mathcal{D}^{1/2}$ của nhóm SO(3). Nhưng vì

$$SO(3) \approx SU(2)/Z_2$$

nên có thể nói spin thông thường bằng 1/2 là đặc trưng của biểu diễn đồng nhất của một nhóm SU(2) nào đó ký hiệu là $SU(2)_S$, các trạng thái spin khác nhau là các vectơ cơ sở khác nhau của biểu diễn đó.

Đối với các hạt nuclôn cũng thế, sự kiện hai hạt prôtôn và nơtrôn được xem là hai trạng thái khác nhau của nuclôn, cho phép xem hai trạng thái này là hai vectơ cơ sở của biểu diễn đồng nhất của một nhóm SU(2) nào đó, gọi là *nhóm* SU(2) *đồng vị* và ký hiệu là $SU(2)_T$. Hạt nuclôn được xem là một hạt có spin đồng vị $T = 1/2$, trạng thái prôtôn tương ứng với $T_3 = 1/2$ và trạng thái nơtrôn tương ứng với $T_3 = -1/2$. Tương tự như (8-6), ta có thể viết

$$\text{prôtôn}: \; p = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \; T_3 = 1/2; \; \text{nơtrôn}: \; n = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \; T_3 = -1/2, \tag{7-14}$$

hay, tương tự như (7-7),

$$\begin{aligned} p &= \chi_{m_\tau}(\tau)\big|_{m_\tau = 1/2} = \chi_{1/2}(\tau), \\ n &= \chi_{m_\tau}(\tau)\big|_{m_\tau = -1/2} = \chi_{-1/2}(\tau), \; (\tau = \pm 1/2). \end{aligned} \tag{7-15}$$

Dạng của hàm sóng ở mức độ gần đúng phi tương đối tính

Ở mức độ gần đúng phi tương đối tính, như đã biết trong các giáo trình về cơ học lượng tử, hàm sóng có dạng (nếu không có từ trường)

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \psi(\mathbf{r})\,\chi(\sigma),$$

trong đó $\psi(\mathbf{r})$ là nghiệm chính thức của các phương trình không có spin. Nói riêng với bài tính chuyển động trong một trường xuyên tâm, ở mức gần đúng phi tương đối tính, ta có thể viết nghiệm dưới dạng

$$\psi_{nlm_lm_s}(\mathbf{r}, \sigma) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r})\,\chi_{m_s}(\sigma). \tag{7-16}$$

Sự kiện trên là một điểm đặc biệt thuận lợi cho các phép tính trong cơ học lượng tử phi tương đối tính.

Nếu kể đến tương tác spin-oocbitan thì, do giữa **s** và **L** có quan hệ với nhau, từng đại lượng **s**, **L** là không bảo toàn, lượng bảo toàn là tổng $\mathbf{J} = \mathbf{s} + \mathbf{L}$, và hàm sóng của hạt có dạng

$$\psi_{njm_j}(\mathbf{r}), \; (j \geqslant m_j \geqslant -j, \; j = l \pm 1/2). \tag{7-17}$$

Bây giờ ta chuyển sang các hạt nuclôn. Ta biết rằng hạt nuclôn là một hạt Dirac, tức là có spin thông thường bằng 1/2. Thành thử, khi hạt nuclôn chuyển động trong một trường xuyên tâm nào đó thì, tương tự như (7-16), hàm sóng của nuclôn có dạng

$$\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})\,\chi_{m_s}(\sigma)\,\chi_{m_\tau}(\tau)\,,\ m_\tau=\pm 1/2\,, \tag{7-18}$$

khi tương tác spin-oocbitan là không đáng kể, và

$$\psi_{njm_j}(\mathbf{r})\,\chi_{m_\tau}(\tau)\,,\ m_\tau=\pm 1/2\,. \tag{7-19}$$

khi tương tác spin-oocbitan là đáng kể.

Về nhóm $SU(2)_T$, tức là về khái niệm spin đồng vị, ta sẽ trở lại một cách toàn diện hơn khi nói đến các hạt cơ bản.

§8. TÍNH SUY BIẾN NGẪU NHIÊN CỦA BÀI TOÁN CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG COULOMB

Vectơ Laplace-Runge-Lenz

Như đã nói ở VIII § 13, với bài toán chuyển động trong trường Coulomb, bậc suy biến của các mức năng lượng không phải là

$$n_l = 2l + 1$$

mà lại là

$$\sum_0^{n-1} n_l = n^2.$$

Như thế là có hiện tượng suy biến ngẫu nhiên, vì số trạng thái cùng tương ứng với một mức năng lượng xác định là tương ứng với nhiều biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của bài toán, nếu xem nhóm đối xứng ở đây là SO(3) như thường lệ. Ta hãy giải thích hiện tượng này, chứng minh rằng trong trường hợp chuyển động trong trường Coulomb, nhóm đối xứng thực ra không phải là nhóm SO(3), mà lại là nhóm SO(4). Quả vậy, với bài toán đặt ra, ngoài tích phân chuyển động quen thuộc là mômen **L**, ta còn có một tích phân chuyển động phụ khác

$$\mathbf{A} \equiv [\mathbf{L}\times\mathbf{p}] + \alpha\,\frac{\mathbf{r}}{r}\,,\ (\alpha = Ze^2) \tag{8-1}$$

gọi là *vectơ Laplace-Runge-Lenz*, vì (M = 1)

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{L}\times\mathbf{p}] = [\mathbf{L}\times\ddot{\mathbf{r}}] = -\frac{\alpha}{r^3}\,[[\mathbf{r}\times\dot{\mathbf{r}}]\times\mathbf{r}] =$$

$$= -\frac{\alpha}{r^3}\,\{\dot{\mathbf{r}}\,\mathbf{r}^2 - \mathbf{r}\,(\mathbf{r}\,\dot{\mathbf{r}})\} = -\alpha\,\frac{d}{dt}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right),$$

từ đó

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = 0\,.$$

Cũng dễ thấy rằng vectơ **A** còn có tính chất

$$(\mathbf{L}\,,\,\mathbf{A}) = 0\,. \tag{8-2}$$

Nhóm đối xứng ẩn của bài toán.

Chuyển sang cơ học lượng tử, ta hãy thay vectơ **A** bằng toán tử

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\{[\mathbf{L} \times \mathbf{p}] - [\mathbf{p} \times \mathbf{L}]\} + \alpha \frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{8-3}$$

Cũng dễ thấyr ằgn ngoài các hệ thức

$$[L_i, H] = 0 \tag{8-4}$$

ta còn có

$$[A_i, H] = 0, \tag{8-5}$$

tức là, cũng như lượng **L**, lượng **A** cũng là những tích phân chuyển động. Tiếp theo, ta tính các móc Poisson của **A** với **L**. Ta được

$$[L_i, L_j] = i\,\varepsilon_{ijk} L_k, [L_i, A_j] = i\,\varepsilon_{ijk} A_k, [A_i, A_j] = -2iH\,\varepsilon_{ijk} L_k. \tag{8.6}$$

Từ đó, đặt

$$N_i = \frac{1}{\sqrt{-2H}} A_i, \tag{8-7}$$

ta được các hệ thức giao hoán sau

$$[L_i, L_j] = i\,\varepsilon_{ijk} L_k, [N_i, N_j] = i\,\varepsilon_{ijk} L_k, [L_i, N_j] = i\,\varepsilon_{ijk} N_k. \tag{8-8}$$

Rõ ràng, các hệ thức giao hoán này trùng với các hệ thức giao hoán của đại số Lie của nhóm SO(4). Như thế, nhóm đối xứng của bài toán chuyển động trong trường Coulomb chính là nhóm SO(4).

Phép phân loại các mức năng lượng

Để tìm sự phân loại các mức năng lượng trong trường hợp này, như thường lệ, ta hãy chuyển sang cơ sở

$$J_i = L_i + N_i, K_i = L_i - N_i$$

thỏa mãn các hệ thức giao hoán

$$[J_i, J_j] = i\,\varepsilon_{ijk} J_k, [K_i, K_j] = i\,\varepsilon_{ijk} K_k, [J_i, K_j] = 0,$$

ở đó

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1), \mathbf{K}^2 = k(k+1). \tag{8-9}$$

Nhưng vì

$$\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2 = 2(\mathbf{J}^2 + \mathbf{K}^2),$$

$$(\mathbf{L}, \mathbf{N}) = \frac{1}{\sqrt{-2H}}(\mathbf{L}, \mathbf{A}) = \mathbf{J}^2 - \mathbf{K}^2 = 0 \tag{8-10}$$

nên, từ (8-9), ta được

$$j = k, \tag{8-11}$$

và

$$\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2 = 2\{j(j+1) + k(k+1)\} = 4j(j+1). \tag{8-12}$$

Đẳng thức (8-11) chứng tỏ rằng các mức năng lượng của bài toán chuyển động trong trường Coulomb được phân loại theo biểu diễn $\widehat{\mathcal{D}}^{(j,j)}$ của nhóm SO(4). Ta hãy tìm hệ thức giữa j và n, nhớ rằng năng lượng E bằng

$$E_n = -\frac{\alpha}{2n^2}, \ (\hbar = c = 1) . \tag{8-13}$$

Vì

$$H = \frac{1}{2}\nabla - \frac{\alpha}{r},$$

nên, sau một số phép tính đơn giản, ta có

$$H = -\frac{\alpha}{\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2 + 1},$$

tức là, theo (8-12)

$$E_j = -\frac{\alpha}{2[4j(j+1)+1]} = -\frac{\alpha}{2(2j+1)^2} . \tag{8-14}$$

So sánh hai biểu thức (8-13) và (8-14) với nhau, ta được $j = \frac{n-1}{2}$. Như thế, mức năng lượng E_n là tương ứng với biểu diễn $\widehat{\mathcal{D}}^{(n-1)/2,\,(n-1)/2}$ của nhóm đối xứng SO(4). Tất nhiên, biểu diễn bất khả quy này của nhóm SO(4) trở nên khả quy đối với nhóm con SO(3), và ta có, theo công thức (3-8),

$$SO(4) \downarrow SO(3) : \widehat{\mathcal{D}}^{(n-1)/2,\,(n-1)/2} = \mathcal{D}^{(0)} \oplus \mathcal{D}^{(1)} \oplus \ldots \oplus \mathcal{D}^{(n-1)}. \tag{8-15}$$

Từ đó, chiều biểu diễn của biểu diễn khả quy (8-15) của nhóm SO(3) là

$$1 + 3 + \ldots + 2(n-1) + 1 = n^2,$$

như đã nói ở trên. Tính đối xứng SO(4) cao hơn tính đối xứng thông thường SO(3) của nguyên tử hydrô gọi là tính đối xứng *ẩn*. Hiện tượng suy biến ngẫu nhiên của bài toán chuyển động trong trường Coulomb được giải thích xong.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [13], [14], [15], [20].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử

Đọc §1 ÷ §7 (chỉ cần đọc để hiểu sâu sắc hơn khái niệm về spin và các kiến thức có liên quan tới phương trình Pauli, tương tác spin oocbitan)

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể

Đọc như A

Phần lý thuyết nhóm ứng dụng vào vật lý phân tử và vật lý tinh thể đến đây kết thúc.

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử

Đọc toàn chương.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân

Đọc toàn chương

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản

Đọc toàn chương

CHƯƠNG XII

NHÓM POINCARÉ

§1. NHÓM POINCARÉ

Như đã thấy ở chương I, §15, nhóm Poincaré là tích nửa trực tiếp

$$\mathcal{P} = R^{3+1} \otimes L_{+}^{\uparrow},$$

(Ở đây ta hạn chế nhóm Poincaré với nhóm Lorentz thực sự $L_{+}^{\uparrow}$).

Các phần tử của nhóm là các cặp $(A \mid u)$, $A \in L_{+}^{\uparrow}$, $u \in R^{3+1}$, thỏa mãn luật hợp thành

$$(A \mid u)(A' \mid u') = (AA' \mid Au' + u). \tag{1-1}$$

Nhóm Poincaré là một nhóm có 10 tham số, trong đó 6 tham số có thể lấy là các tham số xác định 6 phép quay và 4 tham số còn lại là các tham số xác định 4 phép tịnh tiến của không gian Minkovski R^{3+1}. Như đã thấy ở VII (6-21), các vi tử hecmitic tương ứng với các tham số này thỏa mãn các hệ thức giao hoán sau của đại số Lie của nhóm

$$\begin{aligned}
&[X_{\mu\nu}, X_{\rho\sigma}] = -i(g_{\nu\rho} X_{\rho\mu} + g_{\rho\mu} X_{\nu\sigma} - g_{\sigma\mu} X_{\rho\nu} - g_{\rho\nu} X_{\sigma\mu})\\
&[p_{\mu}, p_{\nu}] = 0,\\
&[X_{\mu\nu}, p_{\rho}] = i(g_{\mu\rho} p_{\nu} - g_{\nu\rho} p_{\mu}).
\end{aligned} \tag{1-2}$$

Nhóm Lorentz $L_{+}^{\uparrow}$ là một nhóm con của nhóm Poincaré còn nhóm tịnh tiến $\mathcal{T}_4 \approx R^{3+1}$ là một nhóm con bất biến, và ta có

$$\mathcal{P}/\mathcal{T}_4 \approx L_{+}^{\uparrow}.$$

§2. NHÓM CỦA VECTƠ p_{μ} VÀ BIỂU DIỄN BÉ

Trước đây, ta đã nghiên cứu các nhóm không gian (xem chương VI) và các biểu diễn bất khả quy của các nhóm đó. Như đã biết, các nhóm không gian có liên quan mật thiết đến các tích nửa trực tiếp xây dựng trên không gian Euclid ba chiều thông thường R^3, và sự nghiên cứu các biểu diễn bất khả quy của các nhóm không gian xuất phát từ các biểu diễn bất khả quy của nhóm con tịnh tiến $\mathcal{T}_a \subset R^3$. Từ đó, đã đưa ra khái niệm nhóm của vectơ **k** và khái niệm biểu diễn bé, tức là các biểu diễn của các nhóm con đó. Điểm chủ yếu của lý thuyết biểu diễn các nhóm không gian là ở chỗ các biểu diễn bất khả quy của các nhóm đó được hoàn toàn xác định bởi các sao $\{\mathbf{k}\}$ và các biểu diễn bé.

Trong trường hợp nhóm Poincaré — là một tích nửa trực tiếp — quá trình tìm các biểu diễn bất khả quy của nhóm cũng tiến hành tương tự như thế.

Ký hiệu

$$A = (A \mid 0), \quad u = (e \mid u),$$

ta có các biểu diễn một chiều $\mathscr{D}^{(p)}$:

$$\mathscr{D}^{(p)}: D(u)\psi(p, \alpha) = e^{i(p,u)}\psi(p, \alpha), \tag{2-1}$$

$$(p, u) \equiv p_\mu u^\mu = g_{\mu\nu} p^\mu u^\nu, \quad g = \begin{bmatrix} -I_3 & 0 \\ 0 & I_1 \end{bmatrix}$$

của nhóm con bất biến $\mathscr{C}_4$ (tương tự như biểu diễn VI (4-1), trong đó α là tập hợp tất cả các chỉ số cần thiết để đánh số các vectơ cơ sở của biểu diễn. Tiếp theo, từ luật hợp thành (1-1), ta suy ra đẳng thức (tương tự như VI (4-2)

$$D(u')\,[D(A)\psi(p, \alpha)] = e^{i(Ap,u')}\,[D(A)\psi(p, \alpha)], \tag{2-2}$$

một điều chứng tỏ rằng vectơ $D(A)\psi(p, \alpha)$ thực hiện biểu diễn $\mathscr{D}^{(Ap)}$ của nhóm tịnh tiến. Tất nhiên, vì A là một phép tự đẳng cấu của không gian Minkovski, theo định nghĩa của tích nửa trực tiếp, nên ta có

$$(Ap, Ap) = (p, p). \tag{2-3}$$

Nếu bây giờ ta định nghĩa *nhóm của vectơ* $\mathbf{p}_\mu$, ký hiệu là $\mathscr{K}_p$, như sau

$$\mathscr{K}_p = \{A_p \in L_+^\uparrow \text{ sao mà } A_p p_\mu = p_\mu\}, \tag{2-4}$$

thì, theo (2-2), rõ ràng tập hợp tất cả các vectơ $D(A_p)\psi(p, \alpha)$ làm thành một không gian con bất biến đối với nhóm của vectơ p_μ. Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $\mathscr{K}_p$ trong không gian này — gọi là *biểu diễn bất khả quy bé* — sẽ xác định hoàn toàn các biểu diễn bất khả quy của nhóm Poincaré. Sự chứng minh mệnh đề này hoàn toàn tương tự như với các nhóm không gian.

§3. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA NHÓM POINCARÉ

Như đã thấy ở §2, sự phân loại các biểu diễn bất khả quy của nhóm Poincaré quy về xác định vectơ $\mathbf{p}_\mu$ và biểu diễn bé của nhóm $\mathscr{K}_p$ của vectơ $\mathbf{p}_\mu$. Tuy nhiên, để có thể trình bày sự phân loại này một cách đầy đủ hơn, ta có thể dùng thêm một toán tử nào đó. Muốn thế, trước hết ta lập các toán tử

$$v_{\mu\nu\rho} \equiv P_\mu M_{\nu\rho} + P_\nu M_{\rho\mu} + P_\rho M_{\mu\nu} = M_{\nu\rho}P_\mu + M_{\rho\mu}P_\nu + M_{\mu\nu}P_\rho, \tag{3-1}$$

và

$$w_\mu \equiv \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} M^{\nu\rho} P^\sigma \text{ (giả vectơ)}, \tag{3-2}$$

(P_μ và $M_{\mu\nu}$ là các vi tử biểu diễn tương ứng với các vi tử p_μ và $X_{\mu\nu}$ của nhóm). Giữa các lượng này có hệ thức

$$(w^0, w^1, w^2, w^3) = (v^{321}, v^{230}, v^{310}, v^{120}). \tag{3-3}$$

Mặt khác, ta cũng dễ suy ra các đẳng thức sau

$$w^0 = \mathbf{P}\,\mathbf{L}, \tag{3-4}$$

$$w = P_o\mathbf{L} - [\mathbf{P} \times \mathbf{N}], \tag{3-5}$$

với

$$\mathbf{L} = (M_{32},\ M_{13},\ M_{21}),\ \text{vectơ mômen xung lượng)}$$

$$\mathbf{N} = (M_{10},\ M_{20},\ M_{30}).$$

Ngoài ra có thể chứng minh rằng

$$w_\mu P^\mu = 0. \tag{3-6}$$

Giữa các toán tử w_μ, $M_{\mu\nu}$ và P_μ có các hệ thức giao hoán sau

$$[M_{\mu\nu},\ w_\rho] = i(g_{\nu\rho}\,w_\mu - g_{\mu\rho}\,w_\nu), \tag{3-7}$$

$$[w_\mu,\ P_\nu] = 0, \tag{3-8}$$

$$[w_\mu,\ w_\nu] = i\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\,w^\rho\,P^\sigma. \tag{3-9}$$

Đến đây, ta có thể lập toán tử vô hướng

$$W^2 = \frac{1}{6}\,v_{\nu\mu\rho}\,v^{\mu\nu\rho} = -\,w_\mu\,w^\mu = \frac{1}{2}\,M_{\rho\nu}\,M^{\mu\nu}\,P_\mu P^\rho - M_{\mu\nu}M^{\rho\nu}P^\mu P_\rho. \tag{3-10}$$

Vô hướng này chính là toán tử Casimir của nhóm Poincare, vì lượng đó giao hoán với các vi tử biểu diễn của nhóm. Thành thử, với những biểu diễn bất khả quy của nhóm, toán tử Casimir đó có những trị riêng xác định, trị riêng này có thể dùng để phân loại các biểu diễn bất khả quy của nhóm.

Bây giờ ta tiến hành phân loại các biểu diễn bất khả quy của nhóm Poincaré. Vì các biểu diễn bất khả quy này được xác định trước hết bởi vectơ $\mathbf{p}_\mu$ (trị riêng của toán tử $\mathbf{p}_\mu$), nên có bốn loại biểu diễn bất khả quy, tương ứng với bốn trường hợp sau của vectơ $\mathbf{p}_\mu$:

Loại 1.

Vectơ $\mathbf{p}_\mu$ thuộc loại đồng dạng thời gian, tức là

$$p_\mu\,p^\mu > 0.$$

Loại 2.

Vectơ $\mathbf{p}_\mu$ thuộc loại có chiều dài bằng không, tức là

$$p_\mu\,p^\mu = 0,$$

nhưng $\mathbf{p}_\mu \neq 0$.

Loại 3.

Vectơ $\mathbf{p}_\mu$ là vectơ không, tức là

$$p_\mu = 0.$$

Loại 4.

Vectơ $\mathbf{p}_\mu$ thuộc loại đồng dạng không gian, tức là

$$p_\mu\,p^\mu < 0.$$

Ta hãy lần lượt phân tích từng loại biểu diễn một.

Biểu diễn bất khả quy loại một

Trước hết ta có nhận xét sau. Vì với các phép biến đổi thuộc nhóm Lorentz thực sự, dấu của thành phần p^0 không thay đổi, nên các biểu diễn bất khả quy của nhóm không gian được đặc trưng bởi dấu đó. Tiếp theo, ta hãy chọn A như thế nào để đưa hệ vật lý về hệ quy chiếu đứng yên, tức là

$$A : p^{\mu} \to \overset{\circ}{p}{}^{\mu} = Ap = (\overset{\circ}{p}{}^{o}, 0, 0, 0). \qquad (3\text{-}12)$$

Vì

$$p_{\mu}\, p^{\mu} = M^2,$$

với M là khối lượng của hệ vật lý, nên ta được

$$\overset{\circ}{p}{}^{o} = +\sqrt{M^2}\,, \quad \text{khi } p^o > 0,$$

hay

$$\overset{\circ}{p}{}^{o} = -\sqrt{M^2}\,, \quad \text{khi } p^o < 0.$$

Với dạng (3-12) của vectơ $\overset{\circ}{p}{}^{\mu}$, rõ ràng nhóm $\mathcal{K}_{\overset{\circ}{p}_{\mu}}$ của vectơ đó là nhóm SO(3) hoạt động trong không gian (x^1, x^2, x^3). Các biểu diễn bé trong trường hợp này chính là các biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(3), tức là các biểu diễn $\mathcal{D}^{(j)}$, $j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$. Kết quả này cũng có thể thu được từ toán tử Casimir W^2. Quả vậy, trong hệ đứng yên nói trên, theo (3-2), ta có

$$w = M(o, M_{23}, M_{31}, M_{12}) = M(o, S_1, S_2, S_3),$$

trong đó các S_i $(i = 1, 2, 3)$ thỏa mãn các hệ thức giao hoán

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}\, S_k,$$

của phép quay SO(3). Như thế, theo (3-10), toán tử Casimir $W^2 \sim S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$ chính là toán tử Casimir của nhóm SO(3) (xem VII (10-2)).

Tóm lại, với các biểu diễn bất khả quy loại một của nhóm Poincaré, ta có thể phân loại các hệ vật lý theo cặp số $(M, j) \equiv (M, s)$ và dấu của năng lượng p^o. Số thứ nhất là khối lượng của hệ, còn số thứ hai là spin của hệ. Cũng cần nhắc lại là ở đây ta hiểu hệ vật lý là một hệ sao mà các thành phần của hàm sóng tuân theo những biểu diễn bất khả quy của nhóm Poincaré. Chỉ số α của hàm sóng $\psi(p, \alpha)$ ở đây lấy các giá trị

$$\alpha = 1, 2, \ldots, 2s + 1.$$

Các hệ vật lý nói trên không nhất thiết là các hạt cơ bản. Chẳng hạn với $s = 1/2$, hệ vật lý tuân theo biểu diễn bất khả quy loại một $(M, 1/2)$ của nhóm Poincaré có thể là một prôtôn; một êlectrôn hay một hạt nhân ^{207}Pb tự do ở trạng thái cơ bản. Với $s = 1$, hệ vật lý tuân theo biểu diễn $(M, 1)$ thuộc loại một có thể là một mêzôn vectơ hay một đơtêrôn tự do ở trạng thái cơ bản v.v...

Biểu diễn bất khả quy loại hai

Trong trường hợp này, ta có $M = 0$, các hệ vật lý tuân theo các biểu diễn bất khả quy loại này của nhóm Poincaré có khối lượng bằng không. Trường hợp này phân thành hai trường hợp con, tương ứng với $W = 0$ và $W \neq 0$.

Khi $W = 0$, tức là $w_\mu w^\mu = 0$ thì, vì $P_\mu P^\mu = 0$ và $w_\mu P^\mu = 0$ (theo (3-6)), nên giữa hai vectơ đẳng hướng w_μ và P_μ phải có hệ thức

$$w^\mu = \lambda P^\mu, \tag{3-13}$$

từ đó ta được hệ thức giữa các trị riêng

$$w^o = \lambda p^o. \tag{3-14}$$

Tiếp theo, phối hợp (3-13), (3-14) và (3-4), ta được

$$\lambda = \mathbf{L}\frac{\mathbf{p}}{p^o}. \tag{3-15}$$

Nhưng vì khi $M = 0$ thì $\mathbf{p}^2 = (p^o)^2$, nên (3-15) có thể viết dưới dạng

$$\lambda = \mathbf{L}\frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|},$$

tức là λ là hình chiếu của mômen xung lượng lên phương chuyển động của hệ. Nói cách khác, lượng λ chính là xoắn của hệ. Khi $\lambda \neq 0$, ta có hai trạng thái phân cực. Còn khi $\lambda = 0$, ta chỉ có một trạng thái phân cực.

Bây giờ ta hãy tìm nhóm của vectơ p_μ. Bằng một phép thay đổi hệ quy chiếu ta có thể giả sử

$$\mathbf{p}_\mu \to \mathring{\mathbf{p}}_\mu = (1, 0, 0, 1), \ \mathring{p}_0 = 1, \ \mathring{p}_1 = 0, \ \mathring{p}_2 = 0, \ \mathring{p}_3 = 1. \tag{3-16}$$

Trong trường hợp này, ta có các vi tử độc lập sau (xem (3-2))

$$w^o = M_{12} \, (= w^3),$$

$$w^1 = M_{02} + M_{23}, \quad w^2 = M_{01} + M_{13}.$$

Tương ứng với các vi tử này là các vi tử sau đây của nhóm của vectơ $\mathring{\mathbf{p}}_\mu$:

$$X_{12}, \ X_{02} + X_{23}, \ X_{01} + X_{13}.$$

Theo (1-2) dễ thấy rằng các vi tử này làm thành một đại số Lie đẳng cấu với đại số Lie của nhóm chuyển động trong không gian hai chiều (x^1, x^2) (xem VII § 6). Như thế, nhóm của vectơ $\mathring{\mathbf{p}}_\mu$ trong trường hợp $M = 0$, $W = 0$ là đẳng cấu với tích nửa trực tiếp $R^2 \otimes SO(2)$.

Tóm lại các biểu diễn loại hai khi $M = 0$ và $W = 0$ được đặc trưng bởi khối lượng bằng 0, spin s và số xoắn hay trạng thái phân cực. Ví dụ điển hình của hệ tuân theo biểu diễn này là phôton có khối lượng bằng không, spin bằng đơn vị và hai trạng thái phân cực ngang. Một ví dụ khác là hạt nơtrinô có spin bằng 1/2.

Trường hợp thứ hai của biểu diễn loại hai của nhóm Poincaré dẫn đến các hệ vật lý có spin liên tục, không tồn tại trong tự nhiên.

Với biểu diễn loại ba, dễ thấy rằng nhóm của vectơ $\mathbf{p}_\mu = 0$ chính là nhóm Lorentz thực sự.

Cuối cùng, với biểu diễn loại bốn ta có thể giả sử vectơ $\mathbf{p}_\mu$ có dạng

$$\mathring{\mathbf{p}} = (0, 1, 0, 0), \ \mathring{p}_0 = \mathring{p}_2 = \mathring{p}_3 = 0, \ \mathring{p}_1 = 1.$$

Từ đó, nhóm của vectơ này chính là nhóm SO(2, 1), hoạt động trong không gian giả Euclid (x^o, x^2, x^3).

Trường hợp sau này không có ý nghĩa vật lý nào.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [10], [20], [23], [24].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử

Không cần đọc chương này.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể

Không cần đọc chương này.

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử

Không cần đọc chương này.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân

Không cần đọc chương này.

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản

Đọc toàn chương

CHƯƠNG XI

CÁC NHÓM U(n) và SU(n)

§ 1. CÁC NHÓM U(n) và SU(n)

Định nghĩa

Như đã biết, nhóm U(n) là nhóm các phép biến đổi tuyến tính của một không gian phức n chiều, làm bất biến dạng hecmitic

$$z^1 z^{1*} + z^2 z^{2*} + \dots + z^n z^{n*},\ z^i \in C.$$

Tính chất

a) $$U^+U = UU^+ = I_n,\ U \in U(n). \qquad (1\text{-}1)$$

b) Các vi tử của nhóm U(n) là E_{ij}, do $[U(n)] = GL(n, C)$ (xem VII, § 7) và do các E_{ij} là vi tử của nhóm $GL(n, C)$. Ta có

$$[E_{ij} E_{kl}] = \delta_{jk} E_{il}. \qquad (1\text{-}2)$$

c) Nhóm U(n) là một *nhóm compăc*: các biểu diễn hữu hạn đều tương đương với các biểu diễn unita (xem VII, § 3 và § 9).

d) Nhóm U(n) là một *nhóm đơn liên*: các biểu diễn đều đơn trị. U(n) là những nhóm phủ phổ dụng (xem VII, § 4, § 7 và § 12).

đ) Một số nhóm con của nhóm U(n) là

$$SO(n),\ Sp(n) \subset SU(n) \subset U(n).$$

e) Nhóm U(n) là một nhóm *không đơn*: dễ thấy rằng nhóm SU(n) là nhóm con bất biến do $\det(UXU^{-1}) = \det X$ với mọi $X \in SU(n)$ và $U \in U(n)$.

Các tenxơ của nhóm U(n)

Vì với nhóm U(n), ta có

$$(U^{-1})^C = (U^+)^C = U^*,$$

tức là biểu diễn phản bộ của biểu diễn định nghĩa (đồng nhất) được thực hiện bởi các ma trận liên hiệp phức, nên định nghĩa VII (11-4) của tenxơ hỗn hợp có thể viết dưới dạng

$$\psi'^{i_1 \dots i_p}_{j_1 \dots j_q} = u_{i_1 k_1} \dots u_{i_p k_p} u^*_{j_1 l_1} \dots u^*_{j_q l_q} \psi^{k_1 \dots k_p}_{l_1 \dots l_q}. \qquad (1\text{-}3)$$

Nói riêng, với tenxơ hỗn hợp δ^i_j ta có quy luật biến đổi

$$\delta'^i_j = u_{ik} u^*_{jl} \delta^k_l = u_{ik} u^*_{jk} = \delta^i_j = \text{inv}. \qquad (1\text{-}4)$$

Tiếp theo ta xét các tenxơ hạng n

$$\varepsilon^{i_1\ldots i_n},\ \varepsilon_{i_1\ldots i_n}, \tag{1-5}$$

phản xứng đối với mọi hoán vị hai chỉ số (hay thường gọi là hoàn toàn phản xứng). Thế thì, theo quy luật biến đổi (1-3), ta có

$$\varepsilon'^{i_1\ldots i_n} = u_{i_1j_1}\ldots u_{i_nj_n}\ \varepsilon^{j_1\ldots j_n} = \det U\ \varepsilon^{i_1\ldots i_n},$$

$$\varepsilon'_{i_1\ldots i_n} = u^*_{i_1j_1}\ldots u^*_{i_nj_n}\ \varepsilon_{j_1\ldots j_n} = \det U\ \varepsilon_{i_1\ldots i_n}.$$

Thành thử, nếu hạn chế ở nhóm SU(n), ta có

$$\varepsilon'^{i_1\ldots i_n} = \varepsilon^{i_1\ldots i_n} = \text{inv}, \tag{1-6}$$

$$\varepsilon'_{i_1\ldots i_n} = \varepsilon_{i_1\ldots i_n} = \text{inv}. \tag{1-7}$$

Như thế, nhóm U(n) có một tenxơ hỗn hợp hạng hai bất biến, còn nhóm SU(n) có ba tenxơ bất biến, tenxơ hỗn hợp hạng hai δ^i_j và hai tenxơ phản biến hạng n hoàn toàn phản xứng và hiệp biến hạng n hoàn toàn phản xứng

$$\varepsilon^{i_1\ldots i_n},\ \varepsilon_{i_1\ldots i_n}. \tag{1-8}$$

Ngoài ra, theo tính chất chung của các tenxơ hỗn hợp đã trình bày ở VII§11, vết của các tenxơ hỗn hợp cũng là những bất biến.

§2. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA CÁC NHÓM U(n) và SU(n)

Các biểu diễn bất khả quy của U(n)

Do ta có dãy bất khả quy (xem VII(11-8))

$$SU(n) \subset U(n) \subset GL(n, C)$$

nên tất cả các biểu diễn bất khả quy của các nhóm U(n) và SU(n) đều được đặc trưng bởi những sơ đồ Young của nhóm S_p, nếu ta dùng tenxơ hạng p.

Vì các chỉ số $i_1\ldots i_p$ (phản biến hay hiệp biến) của tenxơ lấy những giá trị từ 1 đến n và vì tenxơ là phản xứng với các chỉ số cùng nằm trong cùng một cột của sơ đồ Young, nên các sơ đồ Young tương ứng với các biểu diễn bất khả quy của nhóm U(n) phải có số hàng không quá n. Quả vậy, trong trường hợp trái lại, ít nhất có một chỉ số nào đó có những giá trị lặp lại nhiều lần ở các cột có số ô lớn hơn n, do đó tenxơ phải đồng nhất bằng không và phải bỏ đi.

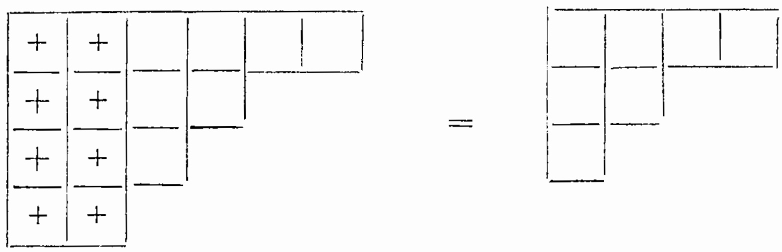
Thành thử, các biểu diễn bất khả quy bằng tenxơ hạng p của nhóm U(n) được phân loại theo ký hiệu $\{m_i\}$ với

$$m_1 + m_2 + \ldots + m_n = p, \tag{2-1}$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \ldots \geqslant m_n \geqslant 0. \tag{2-2}$$

Các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(n)

Riêng đối với nhóm SU(n), do các tenxơ hoàn toàn phản xứng là những bất biến, có thể bỏ tất cả các cột có n hàng. Chẳng hạn, ta có



(2-3)

hay

$$\{m_1, m_2, \ldots, m_n\} = \{m_1 - m_n, m_2 - m_n, \ldots, m_{n-1} - m_n, 0\} \quad (2\text{-}4)$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \ldots \geqslant m_{n-1} \geqslant m_n \geqslant 0. \quad (2\text{-}5)$$

Trên đây là những biểu diễn tenxơ với những tenxơ hoàn toàn phản biến hay hoàn toàn hiệp biến. Nếu ta dùng những tenxơ hỗn hợp để biểu diễn các nhóm SU(n) và U(n), như đã nói trước đây, các tenxơ bất khả quy sẽ là những tenxơ có vết bằng không với mọi cặp chỉ số, một phản biến và một hiệp biến, và có những tính chất đối xứng nhất định đối với các chỉ số phản biến nói riêng và các chỉ số hiệp biến nói riêng. Các tính chất đối xứng này tất nhiên là tương ứng với những sơ đồ Young.

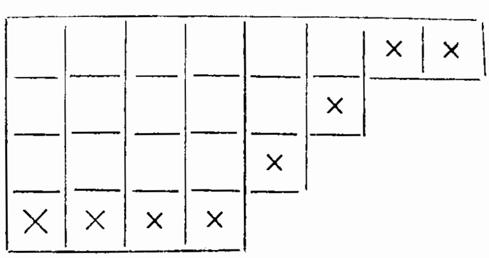
§3. BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM U(n) ↓ U(n-1)

U(n) ↓ U(n-1)

Tất nhiên, nếu trong không gian phức các z^i $(i = 1, \ldots, n)$, ta cố định z^n, thì ta sẽ thu được nhóm U(n—1), nhóm con của nhóm U(n). Vấn đề đặt ra là phân tích các biểu diễn bất khả quy của nhóm U(n) thành những biểu diễn bất khả quy của nhóm con U(n-1), tức là giải bài toán biểu diễn hạ cảm

U(n) ↓ U(n-1).

Bài toán này có thể giải quyết dựa vào các suy luận sau. Ta biết rằng các biểu diễn bất khả quy của nhóm U(n) được thực hiện bởi những sơ đồ Young và các thành phần độc lập của các tenxơ thực hiện các biểu diễn bất khả quy đó có thể biểu diễn bởi những bảng Young chuẩn, tương ứng với các sơ đồ Young đó (số bảng Young chuẩn này bằng chiều của không gian biểu diễn). Nhưng vì tính chất chuẩn đó của các bảng Young, số n chỉ có thể có mặt ở những ô cuối cùng của những hàng thứ i nào mà $m_i > m_{i+1}$. Ta gọi các ô đó là các ô thừa. Chẳng hạn với sơ đồ Young



thì hai ô cuối cùng của hàng đầu, ô cuối cùng của hàng thứ hai, ô cuối cùng của hàng thứ ba và các ô của hàng cuối là những ô thừa. Nếu trong bảng Young chuẩn tương ứng với nhóm U(n), ta bỏ một ô thừa nào đó trong đó có mặt số n, thì bảng thu được cũng vẫn là một bảng Young chuẩn ở đó chỉ có n-1 số, trừ số n. Và như thế, các bảng chuẩn đó biểu diễn các thành phần độc lập của những tenxơ với các chỉ số $i_k = 1, \dots, n-1$, tức là các sơ đồ Young tương ứng là những sơ đồ của các biểu diễn bất khả quy của nhóm con U(n-1). Thành thử, ta có

$$U(n) \downarrow U(n\text{-}1) : \{m_1, m_2, \dots, m_n\} = \sum \{m'_1, m'_2, \dots, m'_{n-1}\},$$

với

$$m_1 \geqslant m'_1 \geqslant m_2 \geqslant \dots \geqslant m_{n-1} \geqslant m'_{n-1} \geqslant m_n \geqslant 0. \qquad (3\text{-}1)$$

SU(n) ↓ SU(n-1)

Ta cũng có kết quả tương tự như thế cho nhóm SU(n). Ta có

$$SU(n) \downarrow SU(n-1):$$

$$\{m_1, m_2, \dots, m_{n-1}\} = \sum \{m'_1, m'_2, \dots, m'_{n-2}, m'_{n-1}\}, \ (m_n = 0)$$

với

$$m_1 \geqslant m'_1 \geqslant m_2 \geqslant \dots \geqslant m_{n-2} \geqslant m'_{n-2} \geqslant m_{n-1} \geqslant m'_{n-1} \geqslant 0. \qquad (3\text{-}2)$$

Các công thức (3-1) và (3-2) gọi là các *quy tắc chia nhánh* cho các nhóm U(n) và SU(n).

Ví dụ

$$SU(3) \downarrow SU(2):$$

$$\{2,1\} = \{2,0\} \oplus \{2,1\} \oplus \{1,1\} \oplus \{1,0\}.$$

Nhưng theo tính chất (2-3) cho nhóm SU(n), ta có

$$\{2,1\} = \begin{array}{|c|c|}\hline + & \\ \hline + \\ \cline{1-1}\end{array} = \begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline\end{array} = \{1\},$$

$$\{1,1\} = \begin{array}{|c|}\hline + \\ \hline + \\ \hline\end{array} = \{0\}.$$

Thành thử, tóm lại, ta được (xem XI (9-8))

$$SU(3) \downarrow SU(2):$$

$$\{2,1\} = \{2\} \oplus 2\{1\} \oplus \{0\} = \mathscr{D}^{(1)} \oplus 2\mathscr{D}^{(1/2)} \oplus \mathscr{D}^{(0)}.$$

Công thức truy toán về chiều biểu diễn.

Các công thức chia nhánh (3-1) và (3-2) cho phép tính các chiều biểu diễn theo phương pháp truy toán. Ta ký hiệu

$${}^nN\{m_1, m_2, \dots, m_n\}$$

là chiều của biểu diễn bất khả quy $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$ của nhóm U(n) hay SU(n) (các biểu diễn bất khả quy của nhóm U(n) đồng thời cũng bất khả quy đối với nhóm SU(n)!). Theo các quy tắc chia nhánh trên, ta được công thức truy toán sau cho chiều biểu diễn

$$^{n}N\{m_1, m_2, \ldots m_n\} = \sum {}^{n-1}N\{m'_1, m'_2, \ldots, m'_{n-1}\}\ . \qquad (3\text{-}3)$$

§4. CHUỖI CLEBSCH – GORDAN CHO CÁC NHÓM U(n) và SU(n)

Những trường hợp đơn giản nhất.

Bài toán này đã giải cho nhóm SU(2) ở VIII § 9. Ở đây, ta giải bài toán cho nhóm SU(n) nói chung. Ta bắt đầu bằng những trường hợp đơn giản nhất tương ứng với các biểu diễn bằng các tenxơ hạng p = 1, 2, 3.

p = 1

Đây chính là biểu diễn đồng nhất hay định nghĩa với tenxơ phản biến hạng một :

$$\psi^a : \{1\} = \boxed{a}\ , \ (a = 1, 2, \ldots, n)$$

p = 2

Theo định nghĩa (xem VII § 11), biểu diễn này là tích trực tiếp hai biểu diễn đồng nhất nói trên :

$$\psi^{ab} : \{1\} \otimes \{1\} = \boxed{a} \otimes \boxed{b}\ , \ (a, b = 1, \ldots, n) \qquad (4\text{-}1)$$

Nhưng vì ta luôn luôn có

$$\psi^{ab} = \psi^{ab,} + \psi^{a,b} \qquad (4\text{-}2)$$

với

$$\psi^{ab,} = \boxed{a \,|\, b} = \frac{1}{2}(\psi^{ab} + \psi^{ba})\ , \qquad (4\text{-}3)$$

$$\psi^{a,b} = \boxed{\begin{array}{c} a \\ \hline b \end{array}} = \frac{1}{2}(\psi^{ab} - \psi^{ba})\ , \qquad (4\text{-}4)$$

nên ta có ngay công thức phân tích biểu diễn sau

$$\{1\} \otimes \{1\} = \{2\} \oplus \{1^2\}, \qquad (4\text{-}6)$$

$$\square \otimes \square = \square\!\square \oplus \begin{array}{c}\square\\[-4pt]\square\end{array}.$$

Các số chiều biểu diễn tương ứng với hai vế là :

$$n^2 = \frac{n(n+1)}{2} + \frac{n(n-1)}{2} \qquad (4\text{-}7)$$

$p = 3$

Theo định nghĩa, tenxơ phản biến hạng ba thực hiện tích ba biểu diễn đồng nhất

$$\psi^{abc} : \{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1\} = \begin{array}{|c|}\hline a \\ \hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline b \\ \hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline c \\ \hline\end{array}, \quad (a, b, c = 1, \ldots, n). \tag{4-8}$$

Nhưng, như đã biết, ta có thể phân tích

$$\psi^{abc} = \psi^{abc,} + \psi^{ab,c} + \psi^{ac,b} + \psi^{a,b,c} \tag{4-9}$$

với

$$\psi^{abc,} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline a & b & c \\ \hline\end{array}, \quad \psi^{ab,c} = \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} \quad \psi^{ac,b} = \begin{array}{|c|c|}\hline a & c \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array}.$$

$$\psi^{a,b,c} = \begin{array}{|c|}\hline a \\ \hline b \\ \hline c \\ \hline\end{array} \tag{4-10}$$

Phân tích trên tương ứng với bốn bảng Young chuẩn của nhóm S_3.
Từ đó, đối chiếu (4-8) với (4-10) ta được đẳng thức

$$\{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1\} = \{3\} \oplus 2\{2,1\} \oplus \{1^3\} \tag{4-11}$$

hay

$$\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline\end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & \ \\ \hline\end{array} \oplus 2 \begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array} \oplus \begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array} \tag{4-12}$$

Số chiều :
$$n^3 = \frac{1}{6} n(n+1)(n+2) + \frac{2}{3} n(n-1) + $$
$$+ \frac{1}{6} n(n-1)(n-2), \tag{4-13}$$

(hai tenxơ $\psi^{ab,c}$ và $\psi^{ac,b}$ thực hiện những biểu diễn tương đương với nhau).

Nhưng từ (4-5) và (4-11) ta lại có

$$\{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1\} = \{1\} \otimes [\{1\} \otimes \{1\}] = \{1\} \otimes [\{2\} \oplus \{1^2\}] =$$
$$= \{1\} \otimes \{2\} \oplus \{1\} \otimes \{1^2\} = \{3\} \oplus 2\{2,1\} \oplus \{1^3\},$$

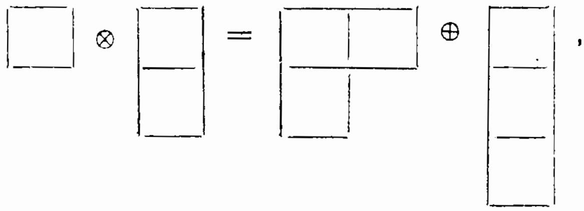
Từ đó, dựa vào chiều biểu diễn của mỗi biểu diễn, ta suy ra các công thức phân tích sau

$$\{1\} \otimes \{2\} = \{3\} \oplus \{2, 1\}, \tag{4-14}$$

$$\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline\end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & \ \\ \hline\end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array}, \tag{4-15}$$

$$n\,\frac{1}{2}\,n\,(n+1) = \frac{1}{6}\,n\,(n+1)\,(n+2) + \frac{1}{3}\,n\,(n^2-1), \qquad (4\text{-}16)$$

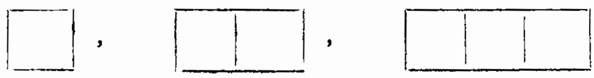
$$\{1\} \otimes \{1^2\} = \{2, 1\} \oplus \{1^3\}, \qquad (4\text{-}17)$$



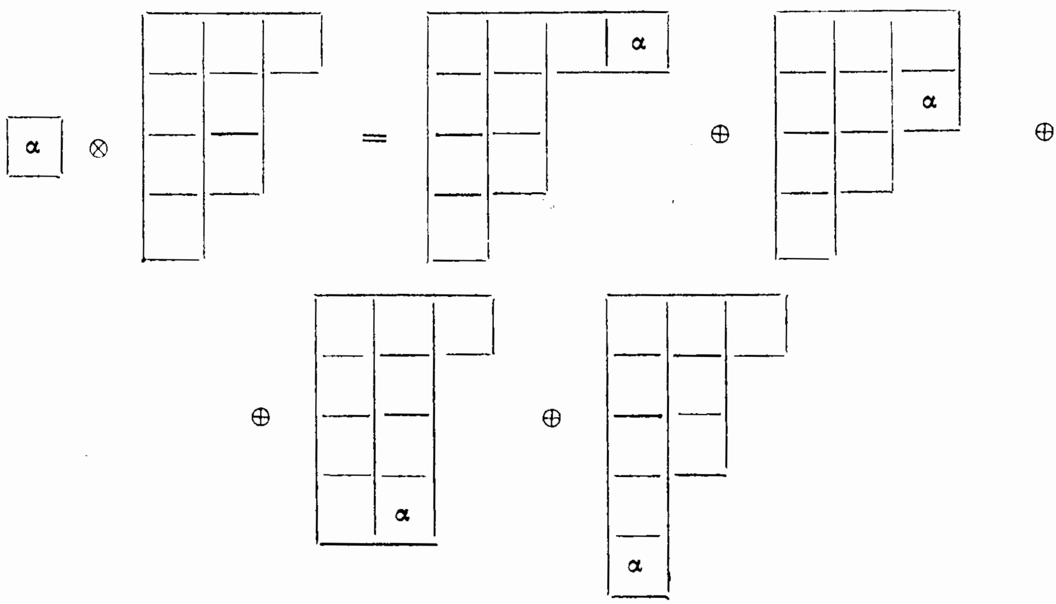
(4-18)

$$n\,\frac{1}{2}\,n\,(n-1) = \frac{1}{3}\,n\,(n^2-1) + \frac{1}{6}\,n\,(n-1)\,(n-2). \qquad (4\text{-}19)$$

Qua các công thức (4-6), (4-15) và (4-18), ta nhận xét rằng khi nhân sơ đồ Young □ với các sơ đồ



ta thêm bằng mọi cách ô của sơ đồ Young đó vào các sơ đồ Young phải nhân sao mà sơ đồ Young thu được là một sơ đồ cho phép. Người ta chứng minh rằng điều này đúng trong trường hợp chung. Chẳng hạn, ta có với nhóm U (5)



và, tương ứng với đẳng thức trên, ta được biểu thức phân tích biểu diễn

$$U(5):\quad \{1\} \otimes \{3, 2^2, 1\} = \{4, 2^2, 1\} \oplus \{3^2, 2, 1\} \oplus$$
$$\oplus \{3, 2^3\} \oplus \{3, 2^2, 1^2\}.$$

Với nhóm U (4), sơ đồ Young thu được cuối cùng là một sơ đồ không cho phép, nên phải bỏ đi. Như thế ta được

$$U(4):\quad \{1\} \otimes \{3, 2^2, 1\} = \{4, 2^2, 1\} \oplus \{3^2, 2, 1\} \oplus \{3, 2^3\}.$$

Quy tắc nhân sơ đồ Young

Nói chung, dựa vào các tính chất của lý thuyết biểu diễn các nhóm đối xứng và sự quan hệ với lý thuyết biểu diễn các nhóm U (n), người ta chứng minh được các quy tắc nhân sơ đồ Young sau.

Giả sử phải nhân

$$\{m_1, m_2, \ldots, m_n\} \otimes \{p_1, p_2, \ldots, p_n\}.$$

Trước hết ta nhân sơ đồ Young $\{p_1, p_2, \ldots, p_n\}$ với các ô của hàng thứ nhất của sơ đồ Young $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$, bắt đầu bằng cách nhân ô thứ nhất của hàng này theo quy tắc nói trên. Tiếp theo ta nhân các sơ đồ Young thu được với ô thứ hai của hàng thứ nhất của sơ đồ $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$, miễn là không được đặt quá một lần các ô của hàng thứ nhất của sơ đồ này vào cùng một cột của sơ đồ $\{p_1, p_2, \ldots, p_n\}$, và cứ như thế với tất cả các ô của hàng thứ nhất. Tiếp theo, ta nhân các sơ đồ Young thu được với các ô của hàng thứ hai theo quy tắc trên, và cứ tiếp tục như thế cho đến hết hàng cuối của sơ đồ $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$. Nhưng trong quá trình này phải tôn trọng quy tắc bổ sung sau:

Ta hãy điền số 1 vào các ô của hàng thứ nhất của sơ đồ $m_1, m_2, \ldots, m_n$, số 2 vào các ô của hàng thứ hai của sơ đồ đó v.v... Ta hãy xét một sơ đồ thu được sau khi nhân xong với tất cả các hàng của sơ đồ $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$. Tất nhiên trong sơ đồ này có những ô ở đó có điền các số $1, 2, \ldots, n$. Ta hãy gộp các số này lại với nhau thành dãy theo thứ tự từ phải sang trái theo cột và từ trên xuống dưới theo hàng của sơ đồ đang xét. Theo quy tắc bổ sung thì, với mọi số của dãy, tổng số các số 1 nằm trước nó không bé hơn tổng số các số 2 nằm trước nó, tổng số này phải không bé hơn tổng số các số 3 nằm trước v.v...

Ngoài ra, với các nhóm SU (n), người ta lại chứng minh được các định lý sau:

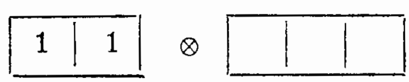
Khi nhân

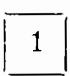
$$\{m\} \otimes \{p^r\}$$

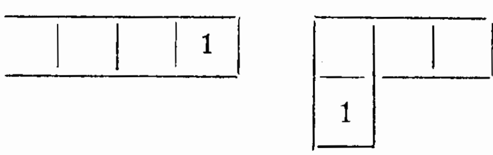
thì các sơ đồ trong cái phân tích không xuất hiện quá một lần. Tính chất này gọi là tính chất khả quy *đơn giản*.

Ví dụ

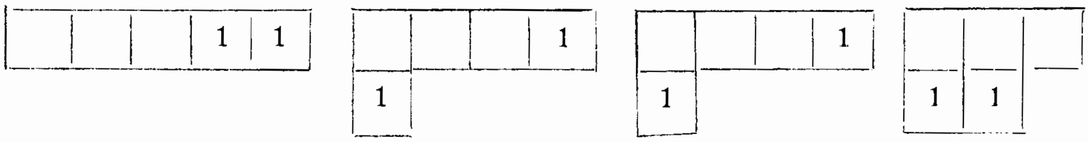
Ta hãy lấy vài ví dụ.



Thêm ô  với sơ đồ $\{3\}$, ta có các sơ đồ



Lại thêm ô $\boxed{1}$ còn lại vào hai sơ đồ trên với quy tắc không được đặt các ô $\boxed{1}$ vào cùng một cột của sơ đồ $\{3\}$, ta được



Thành thử theo tính chất khả quy đơn giản ta được

$$SU(n),\ n \geqslant 3:\ \{2\} \otimes \{3\} = \{5\} \oplus \{4, 1\} \oplus \{3, 2\},$$

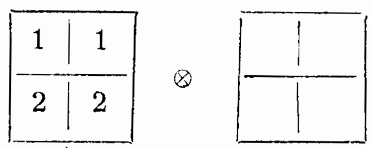
$$SU(2):\ \{2\} \otimes \{3\} = \{5\} \oplus \{3\} \oplus \{1\}\ \text{(theo tính chất (2-4))}.$$

Tương tự như thế ta có

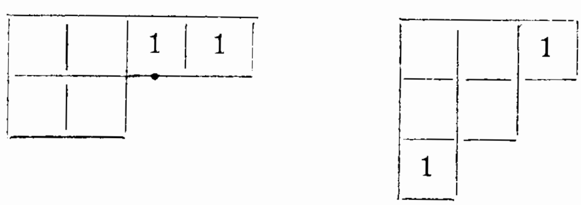
$SU(n),\ n \geqslant 4:\ \{3\} \otimes \{3^2\} = \{6, 3\} \oplus \{5, 3, 1\} \oplus \{4, 3, 2\} \oplus \{3^3\},$

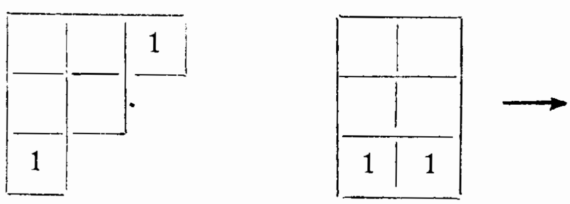
$SU(3):\ \{3\} \otimes \{3^2\} = \{6, 3\} \oplus \{4, 2\} \oplus \{2, 1\} \oplus \{0\}.$

Bây giờ ta nhân

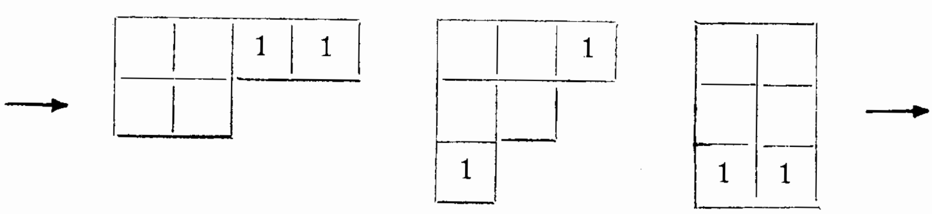


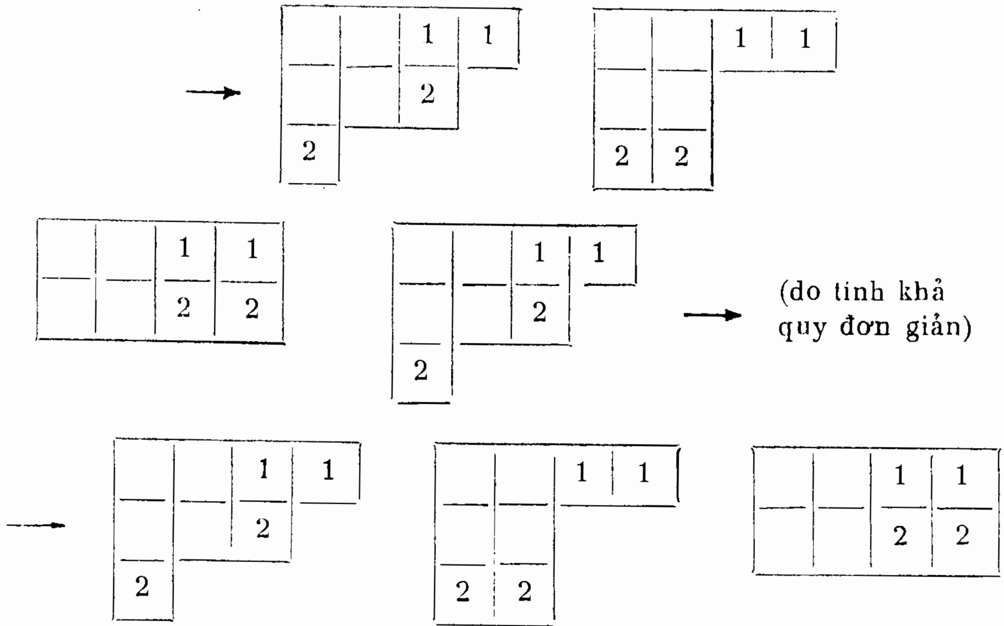
cho SU (4). Các kết quả theo các bước khác nhau là





(do tính chất khả quy đơn giản)





Các số 1 và 2 lập thành các dãy 1 1 2 2, 1 1 2 2, 1 1 2 2 phù hợp với quy tắc bổ sung nói trên.

Thành thử ta được

$$\text{SU }(4): \{2^2\} \otimes \{2^2\} = \{4^2\} \oplus \{4, 3, 1\} \oplus \{4, 2^2\},$$

$$\text{SU }(3): \{2^2\} \otimes \{2^2\} = \{4^2\} \oplus \{3, 2\} \oplus \{2\}. \qquad (4\text{-}20)$$

Tương tự như thế, ta tính được các công thức phân tích sau

$$\text{SU }(3): \{2, 1\} \otimes \{2, 1\} = \{4, 2\} \oplus \{3, 3\} \oplus \{3\} \oplus 2\,\{2, 1\} \oplus \{0\}, \qquad (4\text{-}21)$$

$$\text{SU }(6): \{2\ 1^4\} \otimes \{2, 1^3\} =$$

$$= \{0\} \oplus 2\{2,1^4\} \oplus \{2^2, 1^2\} \oplus \{3^2, 2^3\} \oplus \{3, 1^3\} \oplus \{4, 2\}.$$

Phân tích tenxơ hỗn hợp

Trên đây, ta chỉ dùng tenxơ hoàn toàn phản biến và cách tính các chuỗi Clebsch-Gordan ở trên tiến hành song song với sự phân tích các tenxơ hoàn toàn phản biến (hay hoàn toàn hiệp biến).

Bây giờ ta hãy lấy vài ví dụ về phân tích tenxơ hỗn hợp. Muốn thế, ta nhận xét rằng với nhóm SU(n), sự có mặt của tenxơ hoàn toàn phản xứng hạng n dẫn đến phép nhân sau

$$\psi_a \equiv \underbrace{\varepsilon_{ab\cdots f}}_{\text{n lần}}\, \psi^{b\cdots f}. \qquad (4\text{-}22)$$

Kết quả này dĩ nhiên là một tenxơ hạng n — 1, hoàn toàn phản xứng. Như thế, tenxơ hiệp biến ψ_a ở (4-22) tuân theo biểu diễn hoàn toàn phản xứng $\{1^{n-1}\}$:

$$\psi_a : \{1^{n-1}\} \qquad (4\text{-}23)$$

của nhóm SU(n). Từ đó, tenxơ hỗn hợp ψ_a^b, theo định nghĩa, biến đổi theo tích $\{1\} \otimes \{1^{n-1}\}$ của nhóm:

$$\psi_a^b : \{1\} \otimes \{1^{n-1}\} . \tag{4-24}$$

Nhưng theo quy tắc nhân sơ đồ Young, vế trái của (4-24) bằng $\{2,1^{n-2}\} \oplus \{1^n\}$. Thành thử ta có thể viết

$$\psi_a^b : \{2,1^{n-2}\} \oplus \{1^n\} = \{2, 1^{n-2}\} \oplus \{0\}. \tag{4-25}$$

Mặt khác, theo VII, § 8, ta có

$$\psi_a^b = \widetilde{\psi}_a^b + \frac{1}{n} \delta_a^b \psi_c^c , \tag{4-26}$$

với

$$\widetilde{\psi}_a^b = \psi_a^b - \frac{1}{n} \delta_a^b \psi_c^c , \tag{4-27}$$

là tenxơ hỗn hợp có vết bằng không. Nhưng vì tenxơ δ_a^b = inv biến đổi theo biểu diễn đơn vị $\{0\}$ của nhóm nên, đối chiếu các đẳng thức (4-25) và (4-26) với nhau, ta kết luận

$$\widetilde{\psi}_a^b : \{2,1^{n-2}\} . \tag{4-28}$$

Biểu diễn bất khả quy thực hiện bởi tenxơ (4-28) gọi là *biểu diễn phó* của nhóm SU(n). Như thế, tenxơ hỗn hợp hạng hai có vết bằng không thực hiện biểu diễn phó của nhóm SU(n). Dĩ nhiên, biểu diễn này có $n^2 - 1$ chiều.

Ta hãy lấy thêm một ví dụ đơn giản nữa: phân tích tenxơ hỗn hợp

$$\psi_a^{bc} \sim \psi^b \psi^c \psi_a , \tag{4-29}$$

biến đổi theo biểu diễn tích $\{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1^{n-1}\}$. Theo quy tắc nhân sơ đồ Young (để đơn giản ta lấy n = 3), ta được

$$\{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1^2\} = \{1\} \oplus \{1\} \oplus \{2^2\} \oplus \{3,1\}. \tag{4-30}$$

Mặt khác, lấy vết theo mọi cặp chỉ số và, sau đó, đối xứng hóa các chỉ số phản biến của tenxơ hỗn hợp (4-29), ta được biểu thức phân tích sau thành các thành phần bất khả quy

$$\psi_a^{bc} = \widetilde{\psi}_a^{bc} + \widetilde{\psi}_a^{b'c} + \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_d^{cd} + \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_d^{dc} , \tag{4-31}$$

với

$$\widetilde{\psi}_a^{bc} = \psi_a^{bc} - \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_d^{cd} - \frac{1}{3} \delta_a^c \psi_d^{db}, \tag{4-32}$$

$$\widetilde{\psi}_a^{b'c} = \psi_a^{b'c} - \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_d^{c'd} - \frac{1}{3} \delta_a^c \psi_d^{d'b} , \tag{4-33}$$

là những tenxơ đối xứng hóa (theo các chỉ số phản biến) và có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số.

So sánh các kết quả trên, ta thấy rằng hai tenxơ cuối cùng trong biểu thức phân tích (4-31) biến đổi theo các biểu diễn $\{1\}$ của nhóm SU(3), còn tenxơ (4-32) thì biến đổi theo biểu diễn $\{3,1\}$. Cuối cùng, tenxơ (4-33) biến đổi theo biểu diễn $\{2^2\}$ của SU(3).

§5. CÁC NHÓM SO(n), Sp(n) VÀ HỆ THỐNG CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY

Nhóm SO(n)

Định nghĩa

Nhóm SO(n) là nhóm gồm tất cả các phép biến đổi làm bất biến dạng toàn phương $x^C gx$, trong đó g là một metric đối xứng xác định dương:

$$g_{ik}x^i x^k = x^C gx = \text{inv}, \ g^C = g. \tag{5-1}$$

Tính chất

a) $A^C gA = g$, $A \in SO(n)$.

b) Nhóm SO(n) là một *nhóm compắc*: tất cả các biểu diễn hữu hạn đều unita (xem VIII, §3).

c) Nhóm SO(n) là một *nhóm nhị liên* (xem VII, §4) khi $n > 2$: có tồn tại những biểu diễn lưỡng trị (xem VII, § 12). Nhóm phủ phổ dụng là nhóm Spin (n) (xem VII, §7). (Các biểu diễn lưỡng trị này sẽ nghiên cứu ở phần đại số Lie).

Tenxơ

Từ tính chất a) ta suy ra

$$(A^C)^{-1} = (gA^{-1}g^{-1})^{-1} = gAg^{-1},$$

tức là biểu diễn phản bộ với biểu diễn đồng nhất là tương đương với chính biểu diễn đó: như thế các khái niệm tenxơ phản biến và hiệp biến là tương đương với nhau. Nói cụ thể hơn, do tính tương đương trên được thực hiện bởi ma trận g, sự tương đương giữa các tenxơ phản biến và hiệp biến hạng nhất (xem là cơ sở) được thực hiện bởi đẳng thức

$$\psi_i = g_{ik}\,\psi^k.$$

Nhóm Sp(n)

Định nghĩa

Nhóm Sp(n) là nhóm gồm tất cả các phép biến đổi làm bất biến dạng toàn phương $x^C hx$, trong đó h là một metric phản xứng, không suy biến:

$$h_{ik}x^i x^k = x^C hx = \text{inv}, \ h^C = -h\,, \ \det h \neq 0. \tag{5-2}$$

Tính chất

a) $A^C hA = h$, $A \in Sp(n)$.

b) Nhóm Sp(n) là một *nhóm compắc*: tất cả các biểu diễn hữu hạn đều unita (xem VII, § 3).

c) Nhóm Sp(n) là một *nhóm đơn liên* (xem VII, § 4): nhóm Sp(n) chỉ có những biểu diễn đơn trị. Đó là những nhóm phủ phổ dụng của chính mình.

d) Do tính chất phản xứng $h^C = -h$, ta suy ra ngay đẳng thức

$$\det h = (-1)^n \det h,$$

Từ đó, điều kiện không suy biến (tức là $\det h \neq 0$) buộc n phải chẵn, $n = 2l$, (l: nguyên, dương).

Tenxơ

Tương tự như với nhóm SO(n), từ tính chất a) ta suy ra đẳng thức

$$(A^C)^{-1} = hAh^{-1},$$

chứng tỏ rằng các khái niệm tenxơ phản biến và hiệp biến của nhóm Sp(n) là tương đương với nhau và

$$\psi_i = h_{ik}\,\psi^k.$$

Các biểu diễn bất khả quy

Có thể chứng minh rằng với một phép biến đổi cơ sở thích hợp ta có thể quy ma trận đối xứng xác định dương g về dạng

$$g = I_n. \tag{5-3}$$

Tương tự như thế, có thể quy ma trận phản xứng không suy biến h về các dạng sau

$$h = \begin{bmatrix} \begin{matrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{matrix} & & & \text{O} \\ & \begin{matrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{matrix} & & \\ & & \ddots & \\ \text{O} & & & \begin{matrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{matrix} \end{bmatrix}$$

hay

$$h = \left[\begin{array}{c|c} \text{O} & \begin{matrix} \text{O} & & 1 \\ & ⋰ & \\ 1 & & \text{O} \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} \text{O} & & -1 \\ & ⋰ & \\ -1 & & \text{O} \end{matrix} & \text{O} \end{array}\right]$$

hay dạng

$$h = \begin{bmatrix} 0 & I_l \\ -I_l & 0 \end{bmatrix}. \tag{5-4}$$

Các ma trận (5-4) thỏa mãn đẳng thức $h^2 = -I_{2l}$.

Bây giờ ta ký hiệu các ma trận g và h với ký hiệu chung là f, và đưa ra ma trận f^{ik} (vì các ma trận g và h là không suy biến) với

$$f^{ik}f_{kl} = \varepsilon\, \delta^i_l\ , \ \varepsilon = \begin{cases} 1 \text{ với nhóm } SO(n), \\ -1 \text{ với nhóm } Sp(n). \end{cases} \tag{5-5}$$

Thế thì, do các tính chất đối xứng và phản xứng tương ứng của g và h, ta có các quy luật biến đổi

$$f^{ik}, f_{ik} : \begin{array}{|c|c|}\hline \ \ & \ \ \\ \hline\end{array} \quad \text{hay} \quad \begin{array}{|c|}\hline \ \ \\ \hline \ \ \\ \hline\end{array}, \tag{5-6}$$

tùy theo f = g hay f = h.

Tiếp theo, ta hãy lập vết

$$\psi^i_i \equiv f_{ik}\, \psi^{ik}.$$

Theo định nghĩa của tenxơ và theo (5-1) và (5-2), ta có

$$\psi^i_i \sim f_{ik} x^i x^k = \text{inv}. \tag{5-7}$$

Như thế, vết (5-7) là một bất biến. Từ tính chất bất biến này, với các suy luận tương tự như ở VII, § 11, có thể suy rằng không gian tenxơ con

$$\psi^{i i_3 \ldots i_p}_{\ i} \equiv f_{ik}\, \psi^{ik i_3 \ldots i_p} \tag{5-8}$$

của không gian tenxơ

$$\psi^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p} \tag{5-9}$$

là một không gian con bất biến. Thành thử, các tenxơ bất khả quy của nhóm SO(n) hay Sp(n) là những tenxơ có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số và có các tính chất đối xứng nhất định.

Như thế, các không gian con tenxơ bất khả quy đối với dãy

$$SU(n) \subset U(n) \subset GL\,(n,\ C)$$

(xem VII, § 11), sẽ là khả quy đối với các nhóm SO(n) và Sp(n). Để được những không gian con tenxơ bất khả quy, cần phải tiến hành phân tích xa hơn các không gian con nói trên. Như thế, sự phân loại các biểu diễn bất khả quy của các nhóm SO(n) và Sp(n) dựa vào các sơ đồ Young là khác so với các nhóm SU(n). Cụ thể hơn, có thể chứng minh rằng (xem phần đại số Lie).

1. Các biểu diễn bất khả quy (đơn trị) của nhóm $SO(2l + 1)$ được đặc trưng bởi những sơ đồ Young không quá l hàng.

2. Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $SO(2l)$ được đặc trưng bởi những sơ đồ Young không quá l hàng.

3. Các biểu diễn bất khả quy của nhóm $Sp(2l)$ được đặc trưng bởi những sơ đồ Young không quá l hàng.

Ta ký hiệu các biểu diễn bất khả quy của các nhóm SO(2l + 1) và SO(2l) là

$$[n_1, n_2, \ldots, n_l],$$

còn các biểu diễn bất khả quy của nhóm Sp(2l) là

$$\langle p_1, p_2, \ldots, p_l \rangle .$$

§ 6. CÁC BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM SU(n)↓ SO(n), SU(n)↓ Sp(n)

Phép phân tích tenxơ hạng hai bất khả quy của nhóm SU(n)

Vì các tenxơ bất khả quy của nhóm SO(n) hay Sp(n) đều là những tenxơ có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số, đồng thời có những tính chất đối xứng nhất định mô tả bởi các sơ đồ Young, nên khi phân tích các biểu diễn của nhóm SU(n) thành các biểu diễn bất khả quy của các nhóm SO(n) và Sp(n), ta cần phải tách các vết khác nhau ra khỏi tenxơ đang xét. Sau đó, ta đối xứng hóa các tenxơ thu được bằng các sơ đồ Young. Chẳng hạn với tenxơ hạng hai, ta có thể viết (tương tự như khi phân tích tenxơ hỗn hợp hạng hai ψ^i_k của nhóm SU(n))

$$\psi^{ik} = \widetilde{\psi}^{ik} + \frac{\varepsilon}{n} f^{ik} \psi^j_j , \tag{6-1}$$

trong đó tenxơ $\widetilde{\psi}^{ik}$ có vết bằng không theo cặp chỉ số ik:

$$\widetilde{\psi}^{ik} = \psi^{ik} - \frac{\varepsilon}{n} f^{ik} \psi^j_j , \ \widetilde{\psi}^i_i = f_{ik} \widetilde{\psi}^{ki} = 0.$$

Như thế trong (6-1), ta đã tách riêng thành phần có vết bằng không. Tiếp theo, đối xứng hóa hai vế của (6-1) với các sơ đồ Young $\{2\}$ và $\{1^2\}$, và chú ý rằng

$$g^{ik,} \equiv \frac{1}{2} (g^{ik} + g^{ki}) = g^{ik} , \ g^{i,k} \equiv \frac{1}{2} (g^{ik} - g^{ki}) = 0,$$

$$h^{ik,} \equiv \frac{1}{2} (h^{ik} + h^{ki}) = 0. \ h^{i,k} \equiv \frac{1}{2} (h^{ik} - h^{ki}) = h^{ik,}$$

ta được

$$\psi^{ik,} = \widetilde{\psi}^{ik,} + \frac{1}{n} g^{ik} \psi^j_j ,$$

$$\psi^{i,k} = \widetilde{\psi}^{i,k}, \text{ với nhóm SO(n)} \tag{6-2}$$

$$\psi^{ik,} = \widetilde{\psi}^{ik,}$$

$$\psi^{i,k} = \widetilde{\psi}^{i,k} - \frac{1}{n} h^{ik} \psi^j_j , \text{ với nhóm Sp(n)} \tag{6-3}$$

Vì các vế trái là những tenxơ bất khả quy của nhóm SU(n), còn các vế phải là những tenxơ bất khả quy của các nhóm SO(n) và Sp(n) (trong đó tenxơ Ψ^j_j = inv. thực hiện biểu diễn một chiều [0] hay $\langle 0 \rangle$), nên ta có

$$\text{SU(n)} \downarrow \text{SO(n)}: \{2\} = [2] \oplus [0], \ \{1^2\} = [1^2], \tag{6-4}$$

$$\text{SU(n)} \downarrow \text{Sp(n)}: \{2\} = \langle 2 \rangle, \ \{1^2\} = \langle 1^2 \rangle \oplus \langle 0 \rangle. \tag{6-5}$$

Phép phân tích tenxơ bất khả quy hạng cao của nhóm SU(n)

Bây giờ ta chuyển sang trường hợp chung. Tương tự như trong trường hợp hạng hai, do vết của tenxơ làm một không gian bất khả quy đối với các nhóm SO(n) hay Sp(n), ta hãy tách vết đó theo tất cả các chỉ số và được biểu thức phân tích

$$\psi^{i_1 i_2 \ldots i_p} = \tilde{\psi}^{i_1 i_2 \ldots i_p} +$$
$$+ \text{tổng}\,(f^{i_{\alpha_1} i_{\beta_1}} \psi^{i_1 \ldots i_{\alpha_1 - 1}\, i_{\alpha_1 + 1}\, i_{\beta_1 - 1}\, i_{\beta_1 + 1} \ldots i_p}), \tag{6-6}$$

trong đó tenxơ thứ nhất ở vế phải có tất cả các vết theo mọi cặp chỉ số bằng không. Đối xứng hóa với một sơ đồ Young nào đó, tenxơ này sẽ là bất khả quy đối với các nhóm SO(n) hay Sp(n). Nhưng, vì có vết khác không, các tenxơ trong tổng ở vế phải vẫn còn là khả quy sau khi đối xứng hóa. Thành thử, ta lại tách tất cả các vết có thể từ các tenxơ đó. Tổng (6-6) sẽ có dạng

$$\psi^{i_1 i_2 \ldots i_p} = \tilde{\psi}^{i_1 i_2 \ldots i_p} +$$
$$+ \text{tổng}\,(f^{i_{\alpha_1} i_{\beta_1}} \tilde{\psi}^{i_1 \ldots i_{\alpha_1 - 1}\, i_{\alpha_1 + 1}\, i_{\beta_1 - 1}\, i_{\beta_1 + 1} \ldots i_p}) +$$
$$+ \text{tổng}\,(f^{i_{\alpha_1} i_{\beta_1}} f^{i_{\alpha_2} i_{\beta_2}} \psi^{i_1 \ldots i_{\alpha_1 - 1}\, i_{\alpha_1 + 1}\, i_{\beta_1 - 1}\, i_{\beta_1 + 1} \ldots}$$
$$\ldots {}^{i_{\alpha_2 - 1}\, i_{\alpha_2 + 1}\, i_{\beta_2 - 1}\, i_{\beta_2 + 1} \ldots i_p}) \tag{6-7}$$

trong đó các tenxơ trong tổng thứ nhất của vế phải là các tenxơ hạng p—2 có vết theo mọi cặp chỉ số bằng không và, do đó, sau khi đối xứng hóa, sẽ là những tenxơ bất khả quy của các nhóm nói trên. Các tenxơ trong tổng thứ hai, cũng như trên, vì có vết khác không, không phải là những tenxơ bất khả quy. Ta lại tách các vết khác nhau từ các tenxơ đó v.v... Quá trình này sẽ kết thúc cho đến khi ta được những tenxơ hạng không hay hạng một tùy theo p là chẵn hay lẻ. Nói chung, ta có thể viết

$$\text{tenxơ hạng } p = \text{tenxơ hạng } p \text{ có mọi vết bằng không} +$$
$$+ \text{tổng}\,(f^{i_{\alpha_1} i_{\beta_1}} \times \text{tenxơ hạng } p\text{—}2 \text{ có mọi vết bằng không}) +$$
$$+ \text{tổng}\,(f^{i_{\alpha_1} i_{\beta_1}} f^{i_{\alpha_2} i_{\beta_2}} \times \text{tenxơ hạng } p\text{—}4 \text{ có mọi vết bằng không}) + \ldots \tag{6-8}$$

Bây giờ ta nhắc lại định nghĩa : hai tenxơ hạng p

$$\psi^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p}, \quad \Phi^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p}$$

gọi là trực giao với nhau nếu

$$(\Psi, \Phi) \equiv \psi^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p} \Phi_{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p} = 0. \tag{6-9}$$

Thế thì, các tenxơ ở vế phải của (6-7) là trực giao với nhau. Quả vậy, ta có chẳng hạn (với các dạng (5-3) và (5-4) tương ứng của g và h, $f^{ik} = f_{ik}$)

$$\tilde{\psi}^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p} f_{i_1 i_2} \tilde{\psi}_{i_3 \ldots i_p} = f_{i_1 i_2} \tilde{\psi}^{i_1 i_2 i_3 \ldots i_p} \tilde{\psi}_{i_3 \ldots i_p} =$$
$$= \tilde{\psi}_i^{\,i i_3 \ldots i_p} \tilde{\psi}_{i_3 \ldots i_p} = 0 \times \tilde{\psi}_{i_3 \ldots i_p} = 0,$$

Các hệ thức trực giao khác cũng chứng minh tương tự như thế. Như thế biểu thức phân tích (6-8) là một biểu thức phân tích thành những không gian tenxơ trực giao với nhau, nói cách khác, đó là một tổng trực tiếp. Đối xứng hóa các tenxơ của tổng đó theo các sơ đồ Young khác nhau, ta sẽ được biểu thức phân tích của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(n) thành những biểu diễn bất khả quy của các nhóm SO(n) và Sp(n).

Bây giờ ta hãy xem quy luật phân tích. Theo (5-6), tenxơ f^{ik} biến đổi theo sơ đồ Young [2] (với nhóm SO(n)) hay theo sơ đồ Young $\langle 1^2 \rangle$ (với nhóm Sp(n)). Thành thử, nếu gọi $\{m\}_p$ là các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(n) tương ứng với các tenxơ bất khả quy ở vế phải của (6-8), $[n]_p$, $[n]_{p-2}$, $[n]_{p-4}$,... hay $\langle n \rangle_p$, $\langle n \rangle_{p-2}$, $\langle n \rangle_{p-4}$ ... là những biểu diễn bất khả quy của nhóm SO(n) hay Sp(n) tương ứng với các tenxơ bất khả quy ở vế phải của (6-8) (tất nhiên sau khi đối xứng hóa), ta được các khai triển hình thức sau:

$$SU(n) \downarrow SO(n):$$

$$\{m\}_p \to [n]_p \oplus [2] \otimes [n]_{p-2} \oplus [2] \otimes [2] \otimes [n]_{p-4} \oplus \ldots$$

$$[n]_p = [m]_p, \tag{6-10}$$

$$SU(n) \downarrow Sp(n):$$

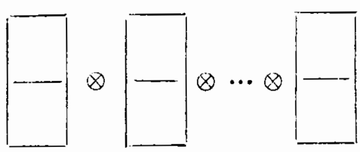
$$\{m\}_p \to \langle n \rangle_p \oplus \langle 1^2 \rangle \otimes \langle n \rangle_{p-2} \oplus \langle 1^2 \rangle \otimes \langle 1^2 \rangle \otimes \langle n \rangle_{p-4} \oplus \ldots$$

$$\langle n \rangle_p = \langle m \rangle_p . \tag{6-11}$$

Tiếp theo, ta thấy rằng trong khai triển (6-10) chỉ có thể có mặt các biểu diễn bất khả quy $[n]_{p-2k}$ nào của nhóm SO(n) sao mà ngoại tích của các sơ đồ Young tương ứng với tích

k lần

có chứa sơ đồ Young $\{m\} = \{m_1, m_2, \ldots\}$ mà ta cần phân tích. Tương tự như thế, trong cái khai triển (6-10) chỉ có thể có mặt các biểu diễn bất khả quy $\langle n \rangle_{p-2k}$ nào của nhóm Sp(n) sao mà ngoại tích của các sơ đồ Young tương ứng với tích



k lần

có chứa sơ đồ Young $\{m\}$.

Ví dụ

Với bài toán SU(n) ↓ SO(n), theo quy tắc nhân sơ đồ Young ở § 4, chỉ có sơ đồ Young $\{1^2\}$ khi nhân ngoài với $\{2\}$ mới cho sơ đồ Young $\{2, 1^2\}$. Mặt khác, chỉ có các sơ đồ Young $\{1^2\}$ và $\{2\}$ khi nhân ngoài với $\{1^2\}$ mới cho sơ đồ Young $\{2, 1^2\}$. Thành thử, ta được

$$SU(n) \downarrow SO(n): \{2, 1^2\} = [2, 1^2] \oplus [1^2], \ n \geqslant 6,$$

$$SU(n) \downarrow Sp(n): \{2, 1^2\} = \langle 2, 1^2 \rangle \oplus \langle 2 \rangle \oplus \langle 1^2 \rangle, \ n \geqslant 6.$$

Tương tự như thế cho biểu diễn $\{2^2, 1\}$ của nhóm SU(n): vì chỉ có sơ đồ Young $\{2, 1\}$ khi nhân ngoài với sơ đồ $\{2\}$ mới cho sơ đồ $\{2^2, 1\}$, và chỉ có sơ đồ Young $\{1\}$ khi nhân ngoài với $\{2\} \otimes \{2\}$ mới cho sơ đồ $\{2^2, 1\}$ đó, nên ta được

$$SU(n) \downarrow SO(n): \{2^2, 1\} = [2^2, 1] \oplus [2, 1] \oplus [1], \ n \geqslant 6.$$

Theo quy tắc trên ta cũng có kết quả

$$SU(n) \downarrow Sp(n): \{2^2, 1\} = [2^2, 1] \oplus \langle 1^3 \rangle \oplus \langle 2, 1 \rangle \oplus \langle 1 \rangle, \ n \geqslant 6.$$

Ta thấy rằng cách tính khá phức tạp khi hạng p của tenxơ cần phân tích là khá lớn.

§ 6. BÀI TOÁN SUY BIẾN NGẪU NHIÊN CỦA DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Sự phân loại các mức năng lượng

Ta hãy xét bài toán dao động tử điều hòa ba chiều với toán tử

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{r^2}{2} \ (\hbar = M = c = 1). \qquad (7\text{-}1)$$

Nhóm đối xứng của hệ vật lý ở đây, mới nhìn qua, là nhóm SO(3). Bây giờ ta hãy chứng tỏ rằng trong bài toán này ta có một sự suy biến ngẫu nhiên. Quả vậy, từ toán tử H, ta có thể suy ra dạng sau cho hàm sóng

$$\psi(\mathbf{r}) = Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{f(r)}{r} e^{-r^2/2},$$

trong đó hàm f(r) thỏa mãn phương trình

$$f'' - 2rf' + \left[2n + 2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] f = 0, \qquad (7\text{-}2)$$

với

$$E = n + 3/2. \qquad (7\text{-}3)$$

Nghiệm của phương trình (7-2) có dạng $(f(0) = 0)$

$$f(r) = r^{l+1} F\left[-\frac{n-1}{2}, 1 + \frac{3}{2}, r^2\right],$$

với F là hàm siêu bội suy biến.

Điều kiện giới nội tại $r = \infty$ buộc hàm siêu bội phải trở thành một chuỗi hữu hạn, một điều chỉ có thể xảy ra khi $(n - 1)/2$ là một số nguyên không âm. Từ đó n phải là một số nguyên. Với một giá trị xác định của n, ta lại có

$$l = n, n-2, n-4, \ldots \qquad (7\text{-}4)$$

Thành thử, theo (7-3) và (7-4), ta thấy rằng tương ứng với một mức năng lượng xác định E_n, các trạng thái của hệ không tuân theo một biểu diễn bất khả quy mà lại là tổng các biểu diễn bất khả quy sau

$$\mathcal{D}^{(n)} \oplus \mathcal{D}^{(n-2)} \oplus \mathcal{D}^{(n-4)} \oplus \ldots \qquad (7\text{-}5)$$

của nhóm SO(3). Như thế là có hiện tượng suy biến ngẫu nhiên. Ta hãy giải thích hiện tượng này.

Nhóm đối xứng ẩn của dao động tử điều hòa

Ta sẽ chứng minh rằng nhóm đối xứng của bài toán dao động tử điều hòa ba chiều thực ra không phải là nhóm SO(3), mà lại chính là nhóm U(3). Quả vậy, ta hãy xét dao động tử điều hòa m chiều với

$$H = \frac{1}{2} \sum_{1}^{m} (p_k + x_k^2),\ p_k = -i\partial_k,\ (\hbar = M = c = 1).$$

Thế thì, lập các lượng

$$a_k^+ = (x_k - ip_k)/\sqrt{2},\ a_k = (x_k + ip_k)/\sqrt{2}, \tag{7-7}$$

thỏa mãn các hệ thức giao hoán của các toán tử bôzôn (xem § 4, chương XI)

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij},\ [a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0, \tag{7-8}$$

ta có thể viết toán tử Hamilton (7-6) dưới dạng

$$H = \sum_{k=1}^{m} \left[a_k^+ a_k + \frac{1}{2}\right] = \sum_{k=1}^{m} \left[N_k + \frac{1}{2}\right], \tag{7-9}$$

với $N_k = a_k^+ a_k$ là toán tử số hạt thứ k. Các N_k với k khác nhau đều giao hoán với nhau. Như đã thấy ở chương XI, các trị riêng của các toán tử N_k là các số nguyên n_k. Thành thử, từ (7-9) ta được các trị riêng sau đây của năng lượng của dao động tử điều hòa m chiều

$$E_{n_1 n_2 \ldots n_m} = n + \frac{m}{2}, \tag{7-10}$$

với

$$n = n_1 + n_2 + \ldots + n_m. \tag{7-11}$$

Với $m = 3$, biểu thức (7-10) trùng với (7-3).

Như đã biết, (xem (4-21), chương VIII) các trạng thái chuẩn hóa tương ứng với mức năng lượng (7-10) là

$$|n_1, n_2, \ldots n_m\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \ldots (a_m^+)^{n_m}}{\sqrt{n_1!}\ \sqrt{n_2!} \ldots \sqrt{n_m!}}\ |0\rangle. \tag{7-12}$$

Nhưng, vì theo (7-8) các toán tử a_i^+ giao hoán với nhau, nên các trạng thái này làm thành một tenxơ đối xứng hạng n.

Bây giờ ta hãy chứng minh rằng nhóm đối xứng của bài toán là nhóm U(m). Ta biết rằng (xem chương X) cái phức hóa của nhóm U(m) là nhóm GL(m, C). Các vi tử của nhóm này là các ma trận E_{ij} $(i, j = 1, 2, \ldots, m)$, có thể xem như là các vi tử của nhóm U(m). Từ đó, đại số Lie của nhóm U(m) được xác định bởi các hệ thức giao hoán sau (xem (1-2))

$$[E_{ij}, E_{kl}] = \delta_{jk} E_{il} - \delta_{il} E_{kj}. \tag{7-13}$$

Tiếp theo, nếu ta đặt

$$F_{ik} = a_i^+ a_k,$$

thì, theo các hệ thức giao hoán (7-8), ta được

$$[F_{ij}, F_{kl}] = a_i^+ a_j a_k^+ a_l - a_k^+ a_l a_i^+ a_j =$$

$$= a_i^+ (\delta_{jk} + a_k^+ a_j) a_l - a_k^+ (\delta_{il} + a_i^+ a_l) a_j =$$

$$= \delta_{jk} a_i^+ a_l - \delta_{il} a_k^+ a_j + a_i^+ a_k^+ a_l - a_k^+ a_i^+ a_l.$$

Vì hai số hạng cuối cùng triệt tiêu nhau, nên ta được

$$[F_{ij}, F_{kl}] = \delta_{jk} F_{il} - \delta_{il} F_{kj},$$

một điều chứng tỏ rằng các F_{ij} có thể xem là các toán tử biểu diễn các vi tử E_{ij} của nhóm U(m). Mặt khác, một số phép tính đơn giản cho thấy rằng toán tử Hamilton (7-9) giao hoán với các toán tử F_{ij}. Do đó, nhóm đối xứng của bài toán dao động tử điều hòa thực ra là nhóm U(m). Tính đối xứng này là một tính đối xứng ẩn, như trong trường hợp nguyên tử H.

Tiếp theo, quay trở lại các trạng thái (7-12), ta thấy rằng các biểu diễn bất khả quy của nhóm U(m), tương ứng với mức năng lượng (7-10) chính là biểu diễn đối xứng $\{n\}$. Nhưng khi ta chuyển từ nhóm U(3) xuống nhóm SO(3), như đã trình bày ở § 6, ta có

$$U(3) \downarrow SO(3) = SU(3) \downarrow SO(3) : \{n\} = \mathcal{D}^{(n)} \oplus \mathcal{D}^{(n-2)} \oplus \mathcal{D}^{(n-4)} + \ldots$$

đó chính là biểu thức khai triển (7-5), bài toán giải thích hiện tượng suy biến của dao động tử điều hòa kết thúc.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [8], [10], [12].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này.

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc toàn chương.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc toàn chương.

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương.

CHƯƠNG XIV

PHÉP PHÂN LOẠI CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

Từ chương VII đến chương XIII chúng ta đã đề cập đến một loạt các nhóm Lie quan trọng. Tuy nhiên, ở một số nhóm, rõ ràng sự nghiên cứu chưa được đầy đủ (nhóm U(n), nhóm SO(n), nhóm Sp(2n)).

Trong các chương sau đây, chúng ta sẽ trình bày một phương pháp chung thường dùng để nghiên cứu các nhóm Lie một cách nhất quán, đó là phương pháp đại số Lie. Phương pháp này sẽ khắc phục những thiếu sót còn lưu lại ở các chương trước.

Có thể trình bày các đại số Lie dưới dạng một học thuyết toán học chặt chẽ (xem các sách của Jacobson, Chevalley, Jelobenko...). Nhưng trong tài liệu này một là do khuôn khổ hạn chế, hai là do mục đích cung cấp cho bạn đọc những kiến thức cụ thể, tương đối dễ hiểu, chúng tôi nhìn vấn đề dưới góc độ một phương pháp. Từ đó, chúng tôi chỉ giới thiệu và minh họa mà không chứng minh một số định lý cơ bản và tập trung vào việc ứng dụng các định lý đó trong những trường hợp cụ thể thường gặp. Các tài liệu kê ở trên có thể xem là những tài liệu bổ sung về mặt kiến thức chặt chẽ.

§1. ĐẠI SỐ LIE CÁC NHÓM LIE

Như đã thấy ở chương VII, lý thuyết các đại số Lie xuất hiện từ lý thuyết các nhóm Lie. Do tính chất giải tích và tính chất đồng nhất của các nhóm Lie, sự nghiên cứu cấu trúc của các nhóm Lie có thể quy về sự nghiên cứu cấu trúc của lân cận đơn vị của nhóm. Cấu trúc này chính là cấu trúc của đại số Lie của nhóm Lie. Các nhóm con của nhóm Lie đang xét là tương ứng với các đại số con của đại số Lie của nhóm, tính chất bất biến cũng bảo toàn trong sự tương ứng này, nghĩa là với các nhóm con bất biến ta có những đại số Lie con bất biến hay iđêan. Từ đó, các tính chất đơn và nửa đơn cũng bảo toàn. Thành thử sự phân loại các nhóm đơn hay nửa đơn quy về sự phân loại các đại số Lie đơn hay nửa đơn. Tuy nhiên, cần lưu ý đến các điểm sau:

1. Vấn đề « tích phân » các đại số Lie, tức là vấn đề tìm các nhóm Lie từ một đại số Lie cho sẵn không có một nghiệm duy nhất. Nói cách khác, tương ứng với một đại số Lie cho sẵn, nói chung có tồn tại nhiều nhóm Lie cũng nhận đại số Lie đó làm đại số Lie của mình. Các nhóm Lie này gọi là đẳng cấu

địa phương với nhau. Với các nhóm Lie kinh điển, ta đã đề cập đến vấn đề này ở chương VII.

2. Vì các nhóm Lie là những nhóm thực (có tham số thực), nên đại số Lie các nhóm Lie là những đại số Lie thực, tức là có các hệ số xác định trên trường số thực. Nhưng vì trường số thực không phải là một trường kín đại số, nên cần phải mở rộng trường này thành một trường rộng hơn và có tính chất kín đại số, để có thể giải quyết một số vấn đề đại số đến cùng. Do tính chất phổ biến của trường số phức, ta có thể lấy trường số phức làm trường mở rộng của trường số thực. Tất nhiên, để có thể ứng dụng lý thuyết đại số Lie vào lý thuyết các nhóm Lie, cần phải giải quyết bài toán tìm các dạng thực của các đại số Lie phức. Điểm này cũng đã được đề cập đến ở chương VII cho các đại số Lie kinh điển.

Ngoài ra, như đã nói ở chương VII, đại số Lie của các nhóm compắc là những đại số Lie compắc, tức là có dạng Killing xác định âm, một điểm khá đặc biệt vì tính chất tôpô compắc được chuyển thành một tính chất đại số đặc biệt.

Trong lý thuyết các đại số Lie, các hằng số cấu trúc đóng vai trò cơ bản. Các hằng số này có tính chất phản xứng theo các chỉ số dưới và thỏa mãn đồng nhất thức Jacobi. Ngoài ra, các hằng số đó phụ thuộc vào cách chọn cơ sở. Quả vậy, khi ta thay đổi cơ sở

$$X_\sigma \to Y_\sigma = a^\rho_\sigma X_\rho,$$

thì các hằng số cấu trúc trong cơ sở mới Y_σ

$$[Y_\rho, Y_\sigma] = C'^{\tau}_{\rho\sigma} Y_\tau$$

liên hệ với các hằng số cấu trúc trong cơ sở cũ X_ρ như sau

$$C'^{\tau}_{\rho\sigma}\, a^\lambda_\tau = a^\mu_\rho\, a^\nu_\sigma\, C^\lambda_{\mu\nu}.$$

Cuối cùng, cũng cần nói đến khái niệm đại số Lie thương. Giả sử $\mathcal{J}$ là một iđêan của đại số Lie $\mathcal{L}$. Không gian gồm tất cả các lớp đồng dư của $\mathcal{L}$ đối với iđêan $\mathcal{J}$, tức là gồm tất cả các phần tử $\bar{X}$ với

$$\bar{X} = X + \mathcal{J},\ X \in \mathcal{L},$$

có thể biến thành một đại số Lie với các hệ thức giao hoán xác định như sau

$$[\bar{X}, \bar{Y}] = [X, Y] + \mathcal{J},$$

(đẳng thức này không phụ thuộc vào cách chọn các phần tử X, Y trong các lớp đồng dư). Đại số Lie thu được gọi là *đại số Lie thương* của $\mathcal{L}$ đối với iđêan $\mathcal{J}$ và ký hiệu là $\mathcal{L}/\mathcal{J}$.

Ánh xạ

$$X \to \bar{X}$$

từ $\mathcal{L}$ lên trên $\mathcal{L}/\mathcal{J}$ là một ánh xạ đồng cấu và thường gọi là *ánh xạ tự nhiên*. Dĩ nhiên, đại số Lie thương là ảnh của đại số Lie $\mathcal{L}$ trong phép đồng cấu tự nhiên.

Định nghĩa

Cho một không gian tuyến tính n chiều $\mathcal{M}$. Ta biết rằng tập hợp tất cả các phép biến đổi tuyến tính trong không gian đó làm thành một đại số kết hợp, gọi là *đại số kết hợp các phép biến đổi tuyến tính* của không gian $\mathcal{M}$. Đại số kết hợp này ký hiệu là gl(C, $\mathcal{M}$), trường vô hướng chọn là trường số phức C. Nếu trong không gian $\mathcal{M}$ ta chọn một cơ sở xác định thì, như đã biết, các phép biến đổi tuyến tính có thể biểu diễn một cách duy nhất bằng các ma trận cấp n. Bây giờ, trên đại số kết hợp gl (C, $\mathcal{M}$) đó, ta hãy định nghĩa một phép nhân Lie như sau

$$[X, Y] \equiv XY - YX, \tag{2-1}$$

ở đó các phép nhân ở vế phải là những phép nhân ma trận thông thường. Vì phép nhân (2-1) thỏa mãn các điều kiện phản xứng và đồng nhất thức Jacobi, nên ta thu được một đại số Lie gọi là *đại số Lie các phép biến đổi tuyến tính trên không gian $\mathcal{M}$* và ký hiệu là $\mathcal{GL}$ (C, $\mathcal{M}$) $\equiv$ $\mathcal{GL}$ (n, C).

Ta hãy lấy một số ví dụ về các đại số Lie con của đại số Lie $\mathcal{GL}$ (C, $\mathcal{M}$).

Đại số Lie các ma trận có vết bằng không

Đại số Lie của nhóm SL (n, C), gồm tất cả các ma trận có vết bằng không (xem chương VII). Vì

$$\mathrm{Sp}\,[X, Y] = \mathrm{Sp}\,(XY - YX) = \mathrm{Sp}\,(XY) - \mathrm{Sp}\,(YX) = \mathrm{Sp}\,(XY) - \\ - \mathrm{Sp}\,(XY) = 0,$$

với mọi ma trận X và Y, nên đại số Lie này là một iđêan của đại số Lie $\mathcal{GL}$ (C, $\mathcal{M}$).

Đại số Lie trực giao 2l + 1 chiều

Ta hãy xét tập hợp tất cả các phép biến đổi tuyến tính A làm bất biến dạng toàn phương cơ bản

$$g_{ik}\, x^i x^k.$$

Theo VII, (4-1), ta biết rằng

$$A^C g A = g.$$

Tiếp theo, nếu đặt

$$A = E + \varepsilon B,\ \varepsilon \ll 1,$$

ta sẽ được một đại số Lie con của $\mathcal{GL}$(n, C), gồm các ma trận B thỏa mãn điều kiện

$$gB^C + Bg = 0 \tag{2-2}$$

Bây giờ, giả sử mêtric g của không gian $\mathcal{M}$ là đối xứng, xác định dương và có dạng cụ thể $g = I_{2l+1}$ hay $g = I_{2l}$. Thế thì có thể chứng tỏ rằng, khi $n = 2l+1$, với phép biến đổi cơ sở bằng ma trận

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{I_l}{\sqrt{2}} & \dfrac{I_l}{\sqrt{2}} \\ 0 & \dfrac{-iI_l}{\sqrt{2}} & \dfrac{iI_l}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{2-3}$$

ta có thể đưa mêtric g về dạng

$$g = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_l \\ 0 & I_L & 0 \end{bmatrix},$$

Trong trường hợp này, đặt B dưới dạng

$$B = \begin{bmatrix} a & u & v \\ w & B_{11} & B_{12} \\ z & B_{21} & B_{22} \end{bmatrix},$$

cùng cấu trúc như ma trận g, từ đẳng thức (2-2), ta được

$$a = 0,\ w = -v^C,\ z = -u^C;\ B_{11} = -B^C_{22},\ B_{12} = -B^C_{12},$$

$$B_{21} = -B^C_{21},$$

tức là ma trận B có dạng

$$B = \begin{bmatrix} 0 & u & v \\ -v^C & B_{11} & B_{12} \\ -u^C & B_{21} & -B^C_{11} \end{bmatrix}$$

B_{12} và B_{21} phản xứng. (2-4)

Đại số Lie các ma trận (2-4) gọi là *đại số Lie trực giao 2l+1 chiều.*

Đại số Lie trực giao 2l chiều

Khi n = 2l, với phép biến đổi cơ sở bằng ma trận

$$S = \begin{bmatrix} \frac{I_l}{\sqrt{2}} & \frac{I_l}{\sqrt{2}} \\ -\frac{iI_l}{\sqrt{2}} & \frac{iI_l}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \qquad (2\text{-}5)$$

ta có thể đưa mêtric g về dạng

$$g = \begin{bmatrix} 0 & I_l \\ I_l & 0 \end{bmatrix}.$$

Trong trường hợp này đặt B dưới dạng

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix},$$

có cùng cấu trúc như ma trận g, tương tự như trên, từ (2-2), ta được

$$B_{11} = -B^C_{22},\ B_{12} = -B^C_{12},\ B_{21} = -B^C_{21},$$

tức là ma trận B trong trường hợp này có dạng

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & -B_{11}^C \end{bmatrix}, \text{ } B_{12} \text{ và } B_{11} \text{ phản xứng.} \qquad (2\text{-}6)$$

Đại số Lie các ma trận (2-0) gọi là *đại số Lie trực giao 2l chiều.*

Đại số Lie symplectic

Bây giờ giả sử mêtric g là phản xứng không suy biến và $n = 2l$. Trong trường hợp này có thể chứng minh rằng bằng một phép biến đổi cơ sở nào đó, có thể đưa mêtric g về dạng

$$g = \begin{bmatrix} 0 & I_l \\ -I_l & 0 \end{bmatrix}. \qquad (2\text{-}7)$$

Tương tự như hai trường hợp trên, đặt

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

ta được

$$B_{11} = -B_{22}^C, \; B_{12} = B_{12}^C, \; B_{21} = B_{21}^C,$$

tức là ma trận B có dạng

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & -B_{11}^C \end{bmatrix}, \text{ } B_{12} \text{ và } B_{21} \text{ đối xứng.} \qquad (2\text{-}8)$$

Đại số Lie các ma trận (2-8) gọi là *đại số Lie symplectic.*

Đại số Lie $\mathcal{G}_2$

Ta hãy đặt

$$H_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & \\ & \lambda_1 & & & & O & \\ & & \lambda_2 & & & & \\ & & & \lambda_3 & & & \\ & & & & -\lambda_1 & & \\ & & & & & -\lambda_2 & \\ O & & & & & & -\lambda_3 \end{bmatrix}, \quad \begin{matrix} \lambda_i \in C, \\ \lambda_1+\lambda_2+\lambda_3 = 0, \end{matrix} \qquad (2\text{-}9)$$

$$E_{\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ik} & 0 \\ 0 & 0 & -E_{ki} \end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ki} & 0 \\ 0 & 0 & -E_{ik} \end{bmatrix}, \qquad (2\text{-}10)$$
$$i < k,$$

$$E_{\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{ik} - E_{ki} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -E_{ik} + E_{ki} & 0 \end{bmatrix}, \qquad (2\text{-}11)$$
$$i < k,$$

$$E_{\lambda_i} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e_i \\ -e_i^C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i} = \begin{bmatrix} 0 & -e_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ e_i^C & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{2-12}$$

trong đó các ma trận vuông E_{jk} là cấp 3, còn e_i là những ma trận hàng, 3 cột, với phần tử ở cột thứ i bằng 1 còn tất cả các phần tử khác đều bằng không.

Tiếp theo, ta lại đặt

$$\begin{aligned} G_{\lambda_i} &= \sqrt{2}\, E_{\lambda_i} \quad E_{\lambda_j - \lambda_k}, \\ G_{-\lambda_i} &= \sqrt{2}\, E_{-\lambda_i} + E_{\lambda_j + \lambda_k}, \\ G_{\lambda_i - \lambda_k} &= E_{\lambda_i - \lambda_k}, \ (i \neq k), \end{aligned} \tag{2.13}$$

trong hai đẳng thức đầu bộ ba (i, j, k) làm thành một hoán vị vòng quanh của (1, 2, 3). Thế thì, dễ chứng minh rằng các phần tử $H_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$, G_{λ_i}, $G_{-\lambda_i}$ và $G_{\lambda_i - \lambda_k}$ làm thành một đại số Lie nào đó, có chiều bằng 14. Quả vậy, ta có

$$\left[H_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}, G_\alpha\right] = \alpha G, \tag{2-14}$$

với α là ký hiệu chung

$$\alpha = \{\pm \lambda_i, \pm (\lambda_i - \lambda_k), \ i \neq k = 1, 2, 3\}, \tag{2-15}$$

$$\left[G_{\lambda_i}, G_{-\lambda_i}\right] = 3H_i \quad (H_1 + H_2 + H_3),$$

$$\left[G_{\lambda_i - \lambda_k}, G_{\lambda_k - \lambda_i}\right] = H_i - H_k,$$

$$\left.\begin{aligned} \left[G_{\lambda_i}, G_{\lambda_j}\right] &= -2G_{-\lambda_k}, \\ \left[G_{-\lambda_i}, G_{-\lambda_j}\right] &= 2G_{\lambda_k}, \end{aligned}\right\} \text{ với (i, j, k) là một hoán vị vòng quanh của (1, 2, 3),}$$

$$\left[G_{\lambda_i}, G_{-\lambda_j}\right] = 3G_{\lambda_i - \lambda_j}, \ (i \neq j),$$

$$\left[G_{\lambda_i - \lambda_j}, G_{\lambda_k}\right] = \delta_{jk} G_{\lambda_i},$$

$$\left[G_{\lambda_i - \lambda_j}, G_{-\lambda_k}\right] = -\delta_{ik} G_{-\lambda_j},$$

$$\left[G_{\lambda_i - \lambda_j}, G_{\lambda_k - \lambda_l}\right] = \delta_{jk} G_{\lambda_i - \lambda_l} - \delta_{il} G_{\lambda_k - \lambda_j}, \ (i \neq l, \ j \neq k),$$

$$H_1 \equiv H_{100}, \quad H_2 \equiv H_{010}, \quad H_3 \equiv H_{001}. \tag{2-16}$$

Đại số Lie này gọi là đại số Lie $\mathcal{G}_2$. Có thể chứng minh rằng đại số Lie này là một đại số Lie con của đại số Lie trực giao bảy chiều. Sau này, chúng ta sẽ thấy rằng $\mathcal{G}_2$ là đơn.

Theo cách xây dựng các đại số Lie ở trên và theo các kết quả về khuếch phức ở §7, VII, ta thấy rằng:

a) Đại số Lie của nhóm SL(n, C) là cái khuếch phức của đại số Lie thực của các nhóm SL(n, R), SU(p, q) (p + q = n), trong đó chỉ có nhóm SU(n) là compắc.

b) Đại số Lie trực giao $2l + 1$ chiều là đại số Lie của nhóm $SO(2l + 1, C)$ và là cái khuếch phức của đại số Lie thực của các nhóm $SO(p, q)$, $(p + q = 2l + 1)$, trong đó chỉ có nhóm $SO(2l + 1)$ là compắc.

c) Đại số Lie trực giao $2l$ chiều là đại số Lie của nhóm $SO(2l, C)$ và là cái khuếch phức của đại số Lie thực của các nhóm $SO(p, q)$, $(p + q = 2l)$, trong đó chỉ có nhóm $SO(2l)$ là compắc.

d) Đại số Lie symplectic là đai số Lie của nhóm $Sp(2l, C)$ và là cái khuếch phức của đại số Lie thực của các nhóm $Sp(2p, 2q)$, $(p + q = l)$, trong đó chỉ có nhóm $Sp(2l)$ là compắc.

§3. ĐẠI SỐ LIE CÁC ĐẠO TỬ

Định nghĩa

Cho một đại số Lie $\mathcal{L}$. Mọi ánh xạ tuyến tính D của đại số $\mathcal{L}$ vào trong chính nó, thỏa mãn điều kiện

$$D[X, Y] = [DX, Y] + [X, DY], \tag{3-1}$$

gọi là một *đạo tử* của đại số $\mathcal{L}$. Gọi $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ là tập hợp tất cả đạo tử của đại số $\mathcal{L}$. Ta có, với mọi D_1 và $D_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$

$$(D_1 + D_2)[X, Y] = D_1[X, Y] + D_2[X, Y] = [D_1X, Y] + [X, D_1Y] + \\ + [D_2X, Y] + [X, D_2Y] = [(D_1 + D_2)X, Y] + [X, (D_1 + D_2)Y],$$

tức là $D_1 + D_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$. Mặt khác, cũng dễ thấy rằng nếu $\lambda \in C$ thì $\lambda D \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$. Cuối cùng, ta có

$$D_1D_2[X, Y] = D_1(D_2[X, Y]) = D_1([D_2X, Y] + [X, D_2Y]) = \\ = [D_1D_2X, Y] + [D_2X, D_1Y] + [D_1X, D_2Y] + [X, D_1D_2Y].$$

Hoán vị D_1 với D_2 rồi trừ các vế với nhau, ta được

$$[D_1, D_2][X, Y] = [[D_1, D_2]X, Y] + [X, [D_1, D_2]Y],$$

tức là $[D_1, D_2] \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$. Thành thử, tập $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ cũng là một đại số Lie, gọi là *đại số Lie các đạo tử* trên đại số Lie $\mathcal{L}$.

Một thí dụ về đạo tử là toán tử adA (xem (8-7), chương XII):

$$\text{ad}A\,X = [A, X],\ A, X \in \mathcal{L}. \tag{3-2}$$

Theo đồng nhất thức Jacobi, ta có

$$\text{ad}A[X, Y] = [A, [X, Y]] = [[A, X], Y] + [X, [A, Y]] = \\ = [\text{ad}AX, Y] + [X, \text{ad}AY],$$

như thế toán tử adA là một đạo tử. Đạo tử này gọi là *nội đạo tử*.

Tính chất

Có thể chứng minh rằng đại số Lie các nội đạo tử của $\mathcal{L}$ là một iđêan của đại số Lie các đạo tử của $\mathcal{L}$. Quả vậy, với các phép tính đơn giản, ta được

$$[\text{ad}A, D] = \text{ad}DA. \tag{3-3}$$

Đại số đạo

Trước hết ta chứng minh rằng nếu $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$ là hai iđêan của một đại số Lie $\mathcal{L}$ thì $[\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2]$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$. Quả vậy, từ hệ thức

$$[\mathcal{A}, [\mathcal{B}, \mathcal{C}]] \subset [\mathcal{B}, [\mathcal{C}, \mathcal{A}]] + [\mathcal{C}, [\mathcal{A}, \mathcal{B}]],$$

đúng cho mọi tập con $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ và $\mathcal{C}$ của $\mathcal{L}$, ta có

$$[\mathcal{L}, [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2]] \subset [\mathcal{J}_1, [\mathcal{J}_2, \mathcal{L}]] + [\mathcal{J}_2, [\mathcal{L}, \mathcal{J}_1]] =$$
$$= [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] + [\mathcal{J}_2, \mathcal{J}_1] = [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2],$$

tức là $[\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2]$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$.

Thế thì $\mathcal{L}' \equiv [\mathcal{L}, \mathcal{L}]$ — gọi là *đại số đạo* của $\mathcal{L}$—là một iđêan của $\mathcal{L}$. Dĩ nhiên ta có $\mathcal{L}' \subset \mathcal{L}$.

Dãy dẫn xuất và dãy trung tâm

Bây giờ ta hãy dựng dãy sau bằng phương pháp quy nạp

$$\mathcal{L}^{0} \equiv \mathcal{L},\ \mathcal{L}^{(1)} \equiv \mathcal{L}' = [\mathcal{L}^{0}, \mathcal{L}^{0}],\ \mathcal{L}^{(2)} \equiv [\mathcal{L}^{(1)}, \mathcal{L}^{(1)}], \ldots,$$
$$\mathcal{L}^{(k)} \equiv [\mathcal{L}^{(k-1)}, \mathcal{L}^{(k-1)}], \ldots \tag{4-1}$$

Các tập của dãy này đều là những iđêan của $\mathcal{L}$, và dãy này gọi là *dãy dẫn xuất* của đại số Lie $\mathcal{L}$. Ta có

$$\mathcal{L}^{0} \supset \mathcal{L}' \supset \mathcal{L}'' \supset \ldots \supset \mathcal{L}^{(k-1)} \supset \mathcal{L}^{(k)} \supset \ldots \tag{4-2}$$

Tương tự như thế, ta định nghĩa dãy các tập con

$$\mathcal{L}^{0} \equiv \mathcal{L},\ \mathcal{L}^{2} \equiv \mathcal{L}' = [\mathcal{L}, \mathcal{L}],\ \mathcal{L}^{3} \equiv [\mathcal{L}^{2}, \mathcal{L}], \ldots,$$
$$\mathcal{L}^{k} \equiv [\mathcal{L}^{k-1}, \mathcal{L}], \ldots \tag{4-3}$$

các tập của dãy này cũng là những iđêan của đại số Lie $\mathcal{L}$ và ta có

$$\mathcal{L}^{0} \supset \mathcal{L}^{2} \supset \ldots \supset \mathcal{L}^{k-1} \supset \mathcal{L}^{k} \supset \ldots \tag{4-4}$$

Dãy (4-3) gọi là *dãy trung tâm* của đại số Lie $\mathcal{L}$.

Nếu có một phép đồng cấu η từ đại số Lie $\mathcal{L}$ vào trong một đại số Lie khác, thì ta có

$$\eta(\mathcal{L}^{(k)}) = (\eta\mathcal{L})^{(k)},$$
$$\eta(\mathcal{L}^{k}) = (\eta\mathcal{L})^{k}.$$

Quả vậy, hai đẳng thức trên đều đúng cho $k = 0$. Bằng phương pháp truy toán, dễ thấy rằng chúng cũng đúng cho mọi k. Chẳng hạn, ta có

$$\eta(\mathcal{L}^{(k)}) = \eta[\mathcal{L}^{(k-1)}, \mathcal{L}^{(k-1)}] =$$
$$= [\eta\mathcal{L}^{(k-1)}; \eta\mathcal{L}^{(k-1)}] = (\eta\mathcal{L})^{(k-1)}, (\eta\mathcal{L})^{(k-1)}] = (\eta\mathcal{L})^{(k)}.$$

Đại số Lie khả giải

Một đại số Lie gọi là *khả giải*, nếu có tồn tại một số nguyên dương n nào đấy, sao mà

$$\mathcal{L}^{(n)} = 0$$

Như thế, tất cả các đại số Lie giao hoán đều là khả giải vì $\mathcal{L}' = \mathcal{L}^1 = [\mathcal{L}, \mathcal{L}] = 0$, $n = 1$. Các đại số Lie một chiều là khả giải vì luôn luôn là giao hoán. Đại số Lie các ma trận tam giác trên (hay dưới) có dạng

$$\begin{bmatrix} a_{11} & & & * \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \left(\text{hay} \quad \begin{bmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ * & & & a_{nn} \end{bmatrix}\right)$$

là những đại số Lie khả giải.

Trước đây, ta đã định nghĩa đại số Lie nửa đơn là những đại số Lie không có iđêan giao hoán khác không. Định nghĩa này tương đương với định nghĩa: một đại số Lie gọi là nửa đơn nếu nó không có iđêan khả giải khác không. Quả vậy, mọi iđêan giao hoán dĩ nhiên là khả giải. Ngược lại, giả sử $\mathcal{L}$ là một iđêan khả giải khác không của $\mathcal{L}$. Như thế, còn tồn tại một số nguyên n sao mà $\mathcal{J}^{(n)} = 0$ và $\mathcal{J}^{(n-1)} \neq 0$. Như thế $\mathcal{J}^{(n-1)}$ là một iđêan giao hoán khác không của $\mathcal{L}$.

Khái niệm về đại số Lie khả giải là một khái niệm bao trùm khái niệm đại số Lie giao hoán, trong lúc đó thì khái niệm đại số Lie nửa đơn là một khái niệm trái với khái niệm giao hoán, vì mọi iđêan của mọi đại số Lie giao hoán là giao hoán. Từ đó, có thể chứng minh rằng tập hợp tất cả các đại số Lie chia làm hai lớp lớn, mâu thuẫn nhau, đó là lớp các đại số Lie khả giải và lớp các đại số Lie nửa đơn.

Với các đại số Lie khả giải, ta có thể chứng minh các tính chất sau:

— Các đại số Lie con của một đại số Lie khả giải là khả giải.

— Ảnh đồng cấu của một đại số Lie khả giải là khả giải.

— Nếu $\mathcal{L}$ có chứa một iđêan khả giải $\mathcal{J}$ sao mà đại số thương $\mathcal{L}/\mathcal{J}$ là khả giải, thì bản thân $\mathcal{L}$ cũng khả giải.

— Nếu $\mathcal{J}_1$ và $\mathcal{J}_2$ là hai iđêan khả giải của một đại số Lie, thì tổng $\mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2$ cũng là một iđêan khả giải.

Từ tính chất cuối cùng này ta suy rằng có tồn tại một iđêan $\mathcal{R}$ khả giải cực đại bao trùm tất cả các iđêan khả giải khác của đại số $\mathcal{L}$. Iđêan này gọi là *căn* của đại số $\mathcal{L}$, và ta có thể chứng minh rằng đại số thương $\mathcal{L}/\mathcal{R}$ là một đại số Lie nửa đơn.

Đại số Lie nilpôten

Nếu có tồn tại một số n nguyên sao mà

$$\mathcal{L}^n = 0$$

thì đại số Lie $\mathcal{L}$ gọi là *nilpôten*. Người ta có thể chứng minh rằng (bằng phương pháp truy toán) $\mathcal{L}^{(n)} \subset \mathcal{L}^{2^n}$, từ đó ta thấy rằng các đại số Lie nilpôten đều là khả giải.

Cũng như trong trường hợp đại số Lie khả giải, có thể chứng minh rằng có tồn tại một iđêan nilpôten, chứa tất cả các iđêan nilpôten khác của đại số Lie. Iđêan này gọi là *nil-căn* của $\mathcal{L}$, và được chứa trong căn $\mathcal{R}$ của $\mathcal{L}$.

§5. TIÊU CHUẨN CARTAN VỀ CÁC ĐẠI SỐ LIE KHẢ GIẢI VÀ NỬA ĐƠN

Các tính chất của dạng Kiling

Ở §8, chương VII, ta đã định nghĩa dạng Killing cho các đại số Lie

$$(A, B) = (B, A) \equiv \operatorname{Sp} \operatorname{ad}A \operatorname{ad}B, \tag{5-1}$$

$$(A, B) = g_{\rho\sigma}\, a^{\sigma} b^{\rho}, \tag{5-2}$$

với

$$A = a^{\sigma}X_{\sigma}\ ,\ B = b^{\rho}X_{\rho},$$

$$g_{\rho\sigma} = g_{\sigma\rho} = C^{\tau}_{\sigma\lambda}\, C^{\lambda}_{\sigma\tau}. \tag{5-3}$$

Ta hãy nêu lên một số tính chất của dạng Killing.

1. $$(\operatorname{ad}AX, Y) + (X, \operatorname{ad}AY) = 0 \text{ với mọi } A, X, Y \in \mathcal{L} \tag{5-4}$$

Quả vậy, theo định nghĩa (5-1) ta có

$$(\operatorname{ad}AX, Y) + (X, \operatorname{ad}AY) = \operatorname{Sp}\operatorname{ad}[A, X]\operatorname{ad}Y + \operatorname{Sp}\operatorname{ad}X\operatorname{ad}[A, Y] =$$
$$= \operatorname{Sp}\operatorname{ad}A\operatorname{ad}X\operatorname{ad}Y - \operatorname{Sp}\operatorname{ad}X\operatorname{ad}A\operatorname{ad}Y + \operatorname{Sp}\operatorname{ad}X\operatorname{ad}A\operatorname{ad}Y - \operatorname{Sp}\operatorname{ad}A\operatorname{ad}X\operatorname{ad}Y = 0.$$

Tính chất (5-4) gọi là tính chất *bất biến* của dạng Killing.

Tính chất này có hệ quả trực tiếp sau. *Cho $\mathcal{L}$ là một đại số Lie nào đó, $\mathcal{J}$ là một iđêan của nó và*

$$\mathcal{K} = \{X \mid X \in \mathcal{L} \text{ và } (X, Y) = 0 \text{ với mọi } Y \in \mathcal{J}\}.$$

Thế thì $\mathcal{K}$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$.

Quả vậy, trước hết dễ thấy rằng $\mathcal{K}$ cũng là một không gian con của $\mathcal{L}$ Tiếp theo, với $X \in \mathcal{K}$ và $A \in \mathcal{L}$, theo tính chất bất biến (5-4), ta có

$$([A, X], Y) = -(X, [A, Y]) = 0,$$

với mọi $Y \in \mathcal{J}$. Kết quả này chứng tỏ rằng $[A, X] \in \mathcal{K}$, tức là $\mathcal{K}$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$.

2. *Cho σ là một phép tự đẳng cấu của đại số Lie $\mathcal{L}$. Thế thì*

$$(\sigma(X), \sigma(Y)) = (X, Y) \text{ với mọi } X, Y \in \mathcal{L}. \tag{5-5}$$

Quả vậy, nếu X_{ρ} là một cơ sở nào đó của $\mathcal{L}$ thì, do tính chất tự đẳng cấu, $\sigma(X_{\rho})$ cũng là một cơ sở của $\mathcal{L}$. Bây giờ giả sử

$$[X, X_{\rho}] = a_{\lambda\rho}X_{\lambda},\ a_{\lambda\rho} \in C,$$

trong đó $a_{\sigma\rho}$ là ma trận của toán tử adX trong cơ sở X_{ρ}. Áp dụng phép tự đẳng cấu σ vào hai vế của đẳng thức trên, ta được

$$[\sigma(X), \sigma(X_{\rho})] = a_{\lambda\rho}\, \sigma(X_{\lambda}),$$

tức là ma trận của toán tử $\operatorname{ad}\sigma(X)$ trong cơ sở $\sigma(X_{\rho})$, bằng ma trận của toán tử adx trong cơ sở X_{ρ} từ đó ta suy ra ngay đẳng thức (5-6).

3. Tiếp theo, *giả sử $\mathcal{J}$ là một idêan nào đó của đại số Lie $\mathcal{L}$. Giả sử $X, Y \in \mathcal{J}$. Nếu ký hiệu $(X, Y)_{\mathcal{J}}$ là dạng Killing hạn chế trên $\mathcal{J}$, thì ta có*

$$(X, Y)_{\mathcal{J}} = (X, Y). \tag{5-6}$$

Quả vậy, ta hãy chọn một cơ sở nào đó X_ρ ($\rho = 1,\ldots, r$), của đại số $\mathcal{L}$ sao cho p vectơ đầu tiên của cơ sở $X_1, X_2, \ldots X_p$, ($p \leqslant r$), tạo thành cơ sở của idêan $\mathcal{J}$. Ma trận của toán tử adX, $X \in \mathcal{J}$, tác dụng trong không gian $\mathcal{J}$, ký hiệu là $\mathrm{ad}_{\mathcal{J}}X$, là một ma trận cấp p. Theo định nghĩa của idêan, ma trận của toán tử adX — xem là toán tử tác dụng trong toàn bộ không gian $\mathcal{L}$ — có dạng

$$\mathrm{ad}X = \begin{bmatrix} \mathrm{ad}_{\mathcal{J}}X & * \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ta cũng có đẳng thức tương tự như thế cho toán tử adY, $Y \in \mathcal{J}$. Từ đó, ta có

$$(X, Y) = \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}X\mathrm{ad}Y = \mathrm{Sp}\begin{bmatrix} \mathrm{ad}_{\mathcal{J}}X & * \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathrm{ad}_{\mathcal{J}}Y & * \\ 0 & 0 \end{bmatrix} =$$

$$= \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}_{\mathcal{J}}X\mathrm{ad}_{\mathcal{J}}Y = (X, Y)_{\mathcal{J}}.$$

Dựa vào dạng Killing, Cartan đã chứng minh được tiêu chuẩn khả giải và nửa đơn cho các đại số Lie. Nói cụ thể hơn, ta có

Định lý 1 (không chứng minh)

Điều kiện cần và đủ để một đại số Lie là khả giải là dạng Killing xác định trên đại số Lie đó đồng nhất bằng không.

Từ tiêu chuẩn này có thể chứng minh tiêu chuẩn sau.

Định lý 2

Điều kiện cần và đủ để một đại số Lie là nửa đơn là dạng Killing xác định trên đại số Lie đó là không suy biến.

Chứng minh

Trước hết, giả sử dạng Killing xác định trên đại số $\mathcal{L}$ là không suy biến. Ta hãy chứng minh rằng $\mathcal{L}$ là nửa đơn. Quả vậy, giả sử $\mathcal{J}$ là một điêan giao hoán của $\mathcal{L}$. Thế thì với mọi $A \in \mathcal{J}$ và mọi $X, Y \in \mathcal{L}$ ta có

$$[A, [X, [A, [X, Y]]]] = 0,$$

tức là

$$(\mathrm{ad}A\mathrm{ad}X)^2 Y = 0,$$

từ đó

$$\mathrm{ad}A\mathrm{ad}X = 0 \text{ với mọi } X \in \mathcal{L},$$

hay

$$(A, X) = 0 \text{ với mọi } X \in \mathcal{L}.$$

Vì dạng Killing giả thiết không suy biến, nên từ đó ta suy ra ngay $A = 0$, tức là $\mathcal{J} = 0$. Như thế, đại số Lie $\mathcal{L}$ là nửa đơn.

Ngược lại, ta giả thiết dạng Killing của đại số $\mathcal{L}$ là suy biến. Điều này có nghĩa là tập hợp $\mathcal{J}$ tất cả các phần tử X có tính chất

$$\mathcal{J} = \{X \mid (X, Y) = 0, \ Y \in \mathcal{L}\}$$

là một tập hợp khác không. Nhưng theo tính chất 1 của dạng Killing, tập $\mathcal{J}$ là một iđêan của $\mathcal{L}$. Tiếp theo, theo tính chất 3 của dạng Killing, ta có

$$(X, Y)_{\mathcal{J}} = (X, Y) = 0 \text{ với mọi } X, Y \in \mathcal{J}.$$

Như thế, theo tiêu chuẩn Cartan về đại số Lie khả giải (định lý 1), $\mathcal{J}$ là một đại số Lie khả giải, tức $\mathcal{L}$ là một đại số Lie không nửa đơn (xem § 4). Định lý chứng minh xong.

Tiêu chuẩn Cartan còn cho phép giải quyết một số vấn đề cơ bản về đại số Lie nửa đơn, trước hết là vấn đề cấu trúc của các đại số Lie nửa đơn. Ta có

Định lý 3

Một đại số Lie $\mathcal{L}$ là nửa đơn khi và chỉ khi đại số đó là một tổng trực tiếp của nhiều iđêan của nó, các iđêan này đồng thời là đại số Lie đơn.

Chứng minh

Ta chứng minh phần thứ nhất của định lý. Cho $\mathcal{J}$ là một iđêan cực tiểu khác không nào đó của $\mathcal{L}$, tức là $\mathcal{J}$ không chứa một iđêan nào khác của $\mathcal{L}$, khác không và khác chính nó. Thế thì tập hợp

$$\mathcal{K} = \{X \mid X \in \mathcal{L} \text{ sao mà } (X, Y) = 0 \text{ với mọi } Y \in \mathcal{J}\}$$

cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$, theo tính chất 1 của dạng Killing. Từ đó, cái giao $\mathcal{J} \cap \mathcal{K}$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$. Nhưng vì $\mathcal{J}$ là một iđiêan cực tiểu của $\mathcal{L}$ theo giả thiết, nên chỉ có hai khả năng, hoặc $\mathcal{J} \cap \mathcal{K} = \mathcal{J}$, hoặc $\mathcal{J} \cap \mathcal{K} = 0$. Nếu $\mathcal{J} \cap \mathcal{K} = \mathcal{J}$, tức là $\mathcal{J} \subset \mathcal{K}$ thì, theo tính chất bất biến của dạng Killing, với mọi phần tử X, $Y \in \mathcal{J}$ và $A \in \mathcal{L}$, ta có

$$([X, Y], A) = -(Y, [X, A]) = 0.$$

Nhưng vì dạng Killing của $\mathcal{L}$ là không suy biến, nên $[X, Y] = 0$ tức là $\mathcal{J}' = [\mathcal{J}, \mathcal{J}] = 0$, $\mathcal{J}$ là một iđêan giao hoán của $\mathcal{L}$, một điều mâu thuẫn với giả thiết $\mathcal{L}$ là nửa đơn. Thành thử chỉ còn lại khả năng thứ hai $\mathcal{J} \cap \mathcal{K} = 0$, tức là $\mathcal{L} = \mathcal{J} \oplus \mathcal{K}$ (1). Bây giờ ta chứng minh rằng iđêan cực tiểu $\mathcal{J}$ đồng thời là một đại số Lie đơn. Quả vậy, giả sử $\mathcal{A} \subset \mathcal{J}$ là một iđêan của $\mathcal{J}$. Nhưng vì $[\mathcal{J}, \mathcal{K}] \subset \mathcal{J} \cap \mathcal{K} = 0$ nên ta có

$$[\mathcal{A}, \mathcal{L}] = [\mathcal{A}, \mathcal{J} \oplus \mathcal{K}] = [\mathcal{A}, \mathcal{J}] + [\mathcal{A}, \mathcal{K}] \subset$$
$$\subset [\mathcal{A}, \mathcal{J}] + [\mathcal{J}, \mathcal{K}] \subset \mathcal{A},$$

tức là $\mathcal{A}$ cũng là một iđêan của $\mathcal{L}$. Nhưng do tính chất cực tiểu của $\mathcal{J}$, ta phải có $\mathcal{A} = 0$. Như thế $\mathcal{J}$ là một đại số Lie đơn.

Tiếp theo, theo tính chất 3 của dạng Killing, dạng này hạn chế trên iđêan $\mathcal{K}$ cũng không suy biến, vì $\mathcal{L}$ là nửa đơn theo giả thiết. Do đó, $\mathcal{K}$ cũng là một

---

(1) Ta có tổng $\mathcal{L} = \mathcal{J} \oplus \mathcal{K}$ do dạng Killing là không suy biến trên $\mathcal{L}$.

đại số Lie nửa đơn. Từ đó, bằng phương pháp quy nạp theo số chiều của không gian, ta có thể giả thiết đại số nửa đơn $\mathcal{K}$ có thể phân tích thành

$$\mathcal{K} = \mathcal{L}_2 \oplus \mathcal{L}_3 \oplus \dots \oplus \mathcal{L}_m,$$

trong đó các $\mathcal{L}_i$ ($i = 2, \dots, m$) là các iđêan cực tiểu đồng thời là những đại số Lie đơn. Thế thì với $\mathcal{J}$ ký hiệu là $\mathcal{L}_1$, cuối cùng ta được đẳng thức

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{L}_m.$$

Ta công nhận phần thứ hai của định lý. Ngoài ra có thể chứng minh rằng biểu thức phân tích trên là duy nhất. Độc giả lưu ý rằng các đại số kết hợp cũng có các tính chất tương tự như trên.

Ta cũng có

Định lý 4

Mọi đạo tử của các đại số Lie nửa đơn đều là nội đạo tử.

Chứng minh

Ta hãy xét ánh xạ tuyến tính

$$X \to \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}XD$$

từ đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$ vào trong không gian đối ngẫu $\widetilde{\mathcal{L}}$ các hàm tuyến tính xác định trên $\mathcal{L}$, D trỏ một đạo tử tùy ý của $\mathcal{L}$. Vì dạng Killing xác định trên $\mathcal{L}$ là không suy biến, nên với mỗi $X \in \mathcal{L}$, ta luôn luôn tìm được một phần tử $A \in \mathcal{L}$ xác định, thỏa mãn đẳng thức

$$(A, X) = \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}XD. \tag{5-7}$$

Thế thì, với

$$E \equiv D - \mathrm{ad}A$$

theo (5-1) và (5-7), ta có

$$\mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}XE = \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}XD - \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}X\mathrm{ad}A = (A, X) - (A, X) = 0,$$

tức là

$$\mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}XE = 0, \text{ với mọi } X \in \mathcal{L}. \tag{5-8}$$

Thế thì, với mọi $X, Y \in \mathcal{L}$ ta có (theo (3-3))

$$\begin{aligned}(EX, Y) &= \mathrm{Sp}\,\mathrm{ad}EX\mathrm{ad}Y = \mathrm{Sp}\,[\mathrm{ad}X, E]\,\mathrm{ad}Y = \\ &= \mathrm{Sp}\,[\mathrm{ad}XE\mathrm{ad}Y - E\mathrm{ad}X\mathrm{ad}Y] = \mathrm{Sp}E(\mathrm{ad}Y\mathrm{ad}X - \mathrm{ad}X\mathrm{ad}Y) = \\ &= -\mathrm{Sp}E\mathrm{ad}\,[X, Y] = 0, \text{ với mọi } Y \in \mathcal{L}\end{aligned}$$

theo (5-8). Nhưng vì dạng Killing trên $\mathcal{L}$ là không suy biến nên ta phải có $EX = 0$ với mọi $X \in \mathcal{L}$, tức là $E = 0$, hay

$$D = \mathrm{ad}A, \text{ với mọi đạo tử } D,$$

tức là mọi đạo tử của các đại số Lie nửa đơn đều là nội đạo tử.

Tiếp theo, có định lý rất quan trọng sau

Định lý 5 (không chứng minh)

Mọi đại số Lie, xem như không gian tuyến tính, là tổng trực tiếp của hai không gian con

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{R} ,$$

trong đó $\mathcal{R}$ là căn của đại số Lie $\mathcal{L}$, còn $\mathcal{L}_1$ là một đại số con nửa đơn của $\mathcal{L}$. Đại số $\mathcal{L}_1$ gọi là **nhân tử Lêvi** *của $\mathcal{L}$. Nhân tử Lêvi không được xác định duy nhất mà sai khác một phép đẳng cấu.*

Theo thuật ngữ dùng ở chương VII, ta thấy rằng $\mathcal{L}$ là tổng nửa trực tiếp của đại số con $\mathcal{L}_1$ và iđêan $\mathcal{R}$.

Như đã thấy ở chương VII, đại số Lie của tích nửa trực tiếp xây dựng trên các không gian R^{p+q} (nhóm Poincaré chẳng hạn) gồm có một iđêan giao hoán cực đại (đại số Lie các vi tử tương ứng với các phép tịnh tiến) và một đại số Lie con gồm các vi tử tương ứng với các phép tự đẳng cấu thuộc Aut $\mathcal{G}$. Trong trường hợp này, iđêan này chính là căn $\mathcal{R}$ của định lý 5, còn đại số con đó chính là nhân tử Lêvi. Định lý 5 chính là sự khái quát của trường hợp trên.

§6. DẠNG CHÍNH TẮC CỦA CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

Dạng chính tắc

Ở §8 chương X, ta đã nói đến biểu diễn phó $A \to \mathrm{ad}A$, $A \in \mathcal{L}$. Bây giờ, ta hãy xét bài toán trị riêng

$$\mathrm{ad}AX_k \equiv [A\,,X_k] = a_k X_k\,, \tag{6-1}$$

trong đó a_k là các trị riêng của toán tử adA, còn X_k là các vectơ riêng tương ứng. Vấn đề đề ra là xem với một đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$ thì những trị riêng a_k nào là suy biến. Cartan đã chứng minh rằng với các đại số Lie nửa đơn thì chỉ có trị riêng $a = 0$ là suy biến. Ta hãy chọn toán tử adA sao mà bậc suy biến đó là tối đa và giả sử bằng l : số l này gọi là *hạng* của đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$. Vì không gian biểu diễn phó chính là $\mathcal{L}$ và có r chiều, nên còn lại $r-l$ trị riêng khác không α, không suy biến. Như thế, ta có thể viết

$$\mathrm{ad}AH_i = [A\,,H_i] = 0\,,\ (i = 1, 2 ,..., l)\,, \tag{6-2}$$

$$\mathrm{ad}AE_\alpha = [A\,,E_\alpha] = \alpha E_\alpha\,,\ (\alpha = 1, 2 ,... r-l)\,, \tag{6-3}$$

trong đó H_i là các vectơ riêng tương ứng với trị riêng bằng 0, còn E_α là các vectơ riêng ứng với các trị riêng không suy biến α.

Tiếp theo, ta hãy tính các giao hoán tử $[H_i\,,E_\alpha]$. Theo (6-2) và (6-3) ta có thể viết

$$[A\,,[H_i\,,E_\alpha]] = [A\,,H_iE_\alpha] - [A\,,E_\alpha H_i] = [A\,,H_i]\,E_\alpha + H_i\,[A, E_\alpha] -$$
$$- [A, E_\alpha]\,H_i - E_\alpha\,[A\,,H_i] = \alpha\,[H_i\,,E_\alpha]\,,$$

tức là phần tử $[H_i\,,E_\alpha]$ cũng là một vectơ riêng của toán tử adA, tương ứng với trị riêng α. Vì các trị riêng α là không suy biến, nên phải có

$$[H_i\,,E_\alpha] = \alpha\,(H_i)\,E_\alpha\,,\ (i = 1, 2 ,..., l) \tag{6-4}$$

trong đó $\alpha\,(H_i) = C^{\alpha}_{i\alpha}$ là những hằng số tỉ lệ nào đó.

Bây giờ ta tính các giao hoán tử $[E_\alpha, E_\beta]$. Theo đồng nhất thức Jacobi và theo (6-3) ta có

$$[A, [E_\alpha, E_\beta]] = [[A, E_\alpha], E_\beta] + [E_\alpha, [A, E_\beta]] = (\alpha + \beta)[E_\alpha, E_\beta]. \quad (6\text{-}5)$$

Từ đó có ba khả năng :

a) Nếu $\alpha + \beta$ cũng là một trị riêng khác không của toán tử adA, thì $[E_\alpha, E_\beta]$ phải tỉ lệ với $E_{\alpha+\beta}$, tức là

$$[E_\alpha, E_\beta] = C^{\alpha+\beta}_{\alpha,\beta} E_{\alpha+\beta}, (\alpha + \beta \text{ là trị riêng}). \quad (6\text{-}6)$$

b) Nếu $\alpha + \beta = 0$ thì, theo định nghĩa các H_i, $[E_\alpha, E_\beta]$ phải là một tổ hợp tuyến tính các H_i

$$[E_\alpha, E_\beta] = [E\alpha, E_{-\alpha}] = C^i_{\alpha,-\alpha} H_i, (\alpha + \beta = 0). \quad (6\text{-}7)$$

c) Nếu $\alpha + \beta$ không phải là một trị riêng của toán tử adA, thì

$$[E_\alpha, E_\beta] = 0, (\alpha + \beta \text{ không phải trị riêng}). \quad (6\text{-}8)$$

Tiếp theo, theo (6-1), ta nhận xét rằng bản thân A là một vectơ riêng tương ứng với trị riêng $\alpha = 0$. Thành thử ta có thể viết $A = \lambda^i H_i$, và đẳng thức (6-2) cho ngay các hệ thức giao hoán

$$[H_i, H_j] = 0, (i, j = 1, 2, ..., l). \quad (6\text{-}9)$$

Tóm lại, ta có các hệ thức giao hoán chính tắc sau của các đại số Lie nửa đơn

$$\begin{aligned}
[H_i, H_j] &= 0, (i, j = 1, 2, ..., l), \\
[H_i, E_\alpha] &= C^\alpha_{1,\alpha} E_\alpha = \alpha(H_i) E_\alpha, \\
[E_\alpha, E_{-\alpha}] &= C^1_{\alpha,-\alpha} H_i, \\
[E_\alpha, E_\beta] &= C^{\alpha+\beta}_{\alpha,\beta} E_{\alpha+\beta},
\end{aligned} \quad (6\text{-}10)$$

với $C^{\alpha+\beta}_{\alpha,\beta} = 0$, nếu $\alpha + \beta$ không phải là một trị riêng của toán tử ad $\lambda^i H_i$.

Nghiệm và đại số con Cartan

Các lượng $\alpha(H_i)$ gọi là các *nghiệm* khác không của đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$. Tập hợp các nghiệm khác không α của $\mathcal{L}$ thường ký hiệu là $\Sigma(\mathcal{L})$. Các phần tử E_α gọi là các *vectơ nghiệm* tương ứng với các nghiệm α. Tập hợp tất cả các tổ hợp tuyến tính các H_i gọi là *đại số con Cartan* của $\mathcal{L}$ và ký hiệu là $\mathcal{H}$. Ta thấy rằng chiều của đại số con Cartan bằng hạng l của đại số con giao hoán cực đại (trong cơ sở H_i, E_α) của $\mathcal{L}$. Có thể chứng minh rằng đại số con Cartan của một đại số Lie nửa đơn được xác định sai khác một phép đẳng cấu.

§7. TÍNH CHẤT CÁC NGHIỆM CỦA CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

Bây giờ ta hãy vận dụng tiêu chuẩn Cartan cho các đại số Lie nửa đơn để chứng minh một số tính chất của các nghiệm. Ta có

Bổ đề

Nếu $\alpha + \beta \neq 0$ *thì* $(E_\alpha, E_\beta) = 0$, *và* $(E_\alpha, E_{-\alpha}) \neq 0$. (7-1)

Chứng minh

Quả vậy, theo đẳng thức cuối cùng ở (6-10), toán tử $adE_\alpha\, adE_\beta$ chuyển vectơ E_γ thành vectơ $E_{\alpha+\beta+\gamma}$. Nếu $\alpha + \beta \neq 0$, thì $E_\gamma \neq E_{\alpha+\beta+\gamma}$. Thành thử, nếu chọn cơ sở của không gian $\mathcal{L}$ gồm các vectơ H_i và E_α thì, trong cơ sở này, các phần tử trên đường chéo chính của toán tử $adE_\alpha\, adE_\beta$ sẽ bằng không khi $\alpha + \beta \neq 0$, tức là $(E_\alpha, E_\beta) = \mathrm{Sp}\, adE_\alpha\, adE_\alpha = 0$. Nói riêng với $\beta = 0$, $\alpha \neq 0$, ta có

$$(H_i, E_\alpha) = 0 . \tag{7-2}$$

Hệ quả trực tiếp của bổ đề này là : nếu α là một nghiệm khác không của đại số Lie nửa đơn thì $-\alpha$ cũng là một nghiệm. Quả vậy, trong trường hợp trái lại, tất cả các tổng $\alpha + \beta$ của các nghiệm đều khác không, từ đó, theo bổ đề, ta có $(E_\alpha, E_\beta) = 0$ với mọi nghiệm β, tức là $(E_\alpha, \mathcal{L}) = 0$, $E_\alpha \neq 0$, một điều mâu thuẫn với tính chất không suy biến của dạng Killing trên đại số $\mathcal{L}$.

Cuối cùng, cũng vì lý do không suy biến của dạng Klling, ta có

$$(E_\alpha, E_{-\alpha}) \neq 0.$$

Định lý 1

Nếu $\mathcal{L}$ là một đại số Lie nửa đơn, thì dạng Killing xác định trên đại số con Cartan $\mathcal{H}$ của nó cũng không suy biến.

Chứng minh

Theo phần thứ hai của bổ đề trên, với $\alpha = 0$, ta suy ra ngay định lý.

Vì dạng Killing trên đại số con Cartan $\mathcal{H}$ là không suy biến, nên với mêtric

$$g_{ik} = (H_i, H_k), \ (i, k = 1, \dots, l) \tag{7-3}$$

$\det g_{ik} \neq 0$, ta có thể tìm được mêtric g^{ik} có tính chất

$$g^{il} g_{lk} = \delta^i_k . \tag{7-4}$$

Với tính chất này ta sẽ chứng minh rằng

$$C^i_{\alpha,-\alpha} = g^{ik}\alpha_k \text{ với } \alpha_k \equiv \alpha(H_k). \tag{7-5}$$

Quả vậy, từ tính chất bất biến (5-4) của dạng Killing, ta có

$$([E_\alpha, E_{-\alpha}], H_i) + (E_{-\alpha}, [E_\alpha, H_i]) = 0,$$

hay, theo (6-10),

$$C^k_{\alpha,-\alpha}(H_k, H_i) = (E_{-\alpha}, E_\alpha)\,\alpha_i. \tag{7-6}$$

Nhưng, theo bổ đề trên, $(E_\alpha, E_{-\alpha}) \neq 0$, từ đó bằng cách chuẩn hóa thích hợp, ta có thể giả thiết

$$(E_{-\alpha}, E_\alpha) = 1. \tag{7-7}$$

Tiếp theo, nhân hai vế của đẳng thức (7-6) với g^{il} và chú ý đến (7-3), (7-4) và (7-7) ta được

$$C^{k}_{\alpha,-\alpha}\, g_{ki} g^{il} = g^{il}\,\alpha_i,$$

$$C^{l}_{\alpha,-\alpha} = g^{li}\,\alpha_i \equiv \alpha^{l}, \tag{7-8}$$

đó là điều phải chứng minh.

Cũng do tính chất không suy biến của dạng Killing trên đại số con Cartan $\mathcal{H}$, với mọi phần tử ρ của không gian đối ngẫu $\widetilde{\mathcal{H}}$ của $\mathcal{H}$ (tức là gồm tất cả các hàm tuyến tính ρ (H) xác định trên $\mathcal{H}$), ta luôn luôn tìm được một phần tử duy nhất $H_\rho \in \mathcal{H}$ sao mà

$$(H, H_\rho) = \rho\,(H). \tag{7-9}$$

Nhưng vì ánh xạ $\rho \to H_\rho$ là một ánh xạ một đối một, ta có thể đồng nhất $\widetilde{\mathcal{H}}$ với $\mathcal{H}$. Sự đồng nhất này cho phép xem không gian đối ngẫu $\mathcal{H}$ có trang bị mêtric (7-3) như $\mathcal{H}$. Nói cụ thể hơn, với hai vectơ $\rho = \{\rho^i\}$ và $\sigma = \{\sigma^k\}$ của không gian $\widetilde{\mathcal{H}}$, ta có thể xác định dạng đối xứng không suy biến.

$$(\rho, \sigma) \equiv (H_\rho, H_\sigma) = g_{ik}\,\rho^i\,\sigma^k = \rho_k\,\sigma^k. \tag{7-10}$$

Nhưng vì $g_{ik} = (H_i, H_k)$ nên đẳng thức (7-10) cho thấy rằng

$$H_\rho = \rho^i H_i \tag{7-11}$$

Mặt khác từ (7-9) và (7-10), ta có các đẳng thức sau:

$$(\rho, \sigma) = \rho(H_\sigma) = \sigma(H_\rho). \tag{7-12}$$

Các kết quả mới tìm được cho phép viết các hệ thức giao hoán (6-10) của các đại số Lie nửa đơn dưới một dạng khác. Quả vậy, vì các nghiệm α là những hàm tuyến tính xác định trên đại số con Cartan $\mathcal{H}$, tức là thuộc không gian đối ngẫu $\widetilde{\mathcal{H}}$ nên, theo (7-8) và (7-11), các công thức (6-10) có thể lấy dạng sau

$$[H_\lambda, H_{\lambda'}] = 0,$$

$$[H, E_\alpha] = \alpha(H)E_\alpha,$$

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = H_\alpha,$$

$$[E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta}\, E_{\alpha+\beta}. \tag{7-13}$$

Ngoài ra, có thể chứng minh rằng với một sự chuẩn hóa thích hợp ta có thể giả thiết (xem (7-7))

$$(E_\alpha, E_{-\alpha}) = 1,$$

$$N_{\alpha\beta} = -N_{-\alpha,\,-\beta}. \tag{7-14}$$

Cơ sở $X_\rho = \{H_i, E_\alpha\}$ của đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$ trong đó các đẳng thức (7-14) được thỏa mãn gọi là *cơ sở Weyl-Cartan*.

Định lý 2

Nếu α và β là hai nghiệm của đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$, thì

$$\frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)}$$

là một số nguyên và

$$\beta - \frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)} \alpha$$

cũng là một nghiệm.

Chứng minh

Quả vậy, theo (7-12) và các hệ thức giao hoán (7-13), ta có

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = H_\alpha,$$
$$[H_\alpha, E_\alpha] = \alpha(H_\alpha) E_\alpha = (\alpha, \alpha) E_\alpha,$$
$$[H_\alpha, E_{-\alpha}] = -(\alpha, \alpha) E_{-\alpha},$$

tức là tập hợp các phần tử H_α, E_α và $E_{-\alpha}$ làm thành một đại số con nào đó của đại số Lie $\mathcal{L}$, ký hiệu là $\mathcal{A}_\alpha$.

Tiếp theo, ta hãy xét dãy nghiệm

$$\beta + q\alpha, \beta + (q-1)\alpha, \ldots, \beta, \beta - \alpha, \ldots,$$
$$\beta - (p-1)\alpha, \beta - p\alpha \tag{7-15}$$

trong đó hai số nguyên p và q được chọn sao mà

$$\beta + (q+1)\alpha \text{ và } \beta - (p+1)\alpha$$

không phải là nghiệm. Dãy này gọi là *dãy α chứa* β. Theo công thức (7-13) và cách chọn p và q dễ thấy rằng các vectơ

$$E_{\beta+q\alpha}, \ldots, E_\beta, \ldots, E_{\beta-p\alpha} \tag{7-16}$$

tương ứng với các nghiệm (7-15), căng một không gian con bất biến đối với đại số con $\mathcal{A}_\alpha$.

Nhưng vì theo (7-13) và (7-12) ta có

$$[H_\alpha, E_{\beta+k\alpha}] = (\beta + k\alpha)(H_\alpha) E_{\beta+k\alpha} = [(\alpha, \beta) + k(\alpha, \alpha)] E_{\beta+k\alpha}$$

với k đi từ q đến $-$ p, nên

$$\text{Spad}H_\alpha = \sum_k (\alpha, \beta) + k(\alpha, \alpha).$$

Mặt khác, vì $H_\alpha = [E_\alpha, E_{-\alpha}]$ là một giao hoán tử, nên $\text{Spad}H_\alpha = 0$. Thành thử, từ đẳng thức trên ta được

$$(\alpha, \beta) \sum_k 1 = -(\alpha, \alpha) \sum_k k,$$

hay

$$(p+q+1)(\alpha, \beta) = \left(\sum_{k=1}^{q} k - \sum_{k=1}^{p} k\right)(\alpha, \alpha) = (p-q)(p+q+1)(\alpha, \alpha)/2,$$

hay

$$(\alpha, \beta) = \frac{p-q}{2}(\alpha, \alpha). \tag{7-17}$$

Tất nhiên $(\alpha, \alpha) \neq 0$ vì, nếu trái lại thì, theo (7-17), ta sẽ có $(\alpha, \beta) = 0$ với mọi nghiệm β, một điều mâu thuẫn với tính không suy biến của dạng Killing xác định trên không gian đối ngẫu $\widetilde{\mathcal{H}}$. Thành thử, từ (7-17) ta được

$$\frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)} = p-q, \qquad p-q \text{ nguyên.} \tag{7-18}$$

Tiếp theo ta thấy dĩ nhiên lượng

$$\beta - \frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)}\alpha = \beta + (q-p)\alpha,$$

là thuộc dãy (7-16), do đó cũng là một nghiệm của đại số nửa đơn $\mathcal{L}$. Định lý chứng minh xong.

Về dãy nghiệm, ta lưu ý rằng do

$$[E_\alpha, E_\alpha] = 0,$$

lượng 2α không phải là một nghiệm khi α là một nghiệm. Thành thử, các bội duy nhất của mọi nghiệm α là

$$-\alpha, 0, \alpha. \tag{7-19}$$

Ví dụ.

Ta hãy lấy đại số $\mathcal{G}_2$ ở § 2 làm ví dụ.

Theo (2-14) và (2-15), hệ nghiệm khác không $\sum(\mathcal{G}_2)$ của đại số Lie $\mathcal{G}_2$ là

$$\sum(\mathcal{G}_2) = \{\pm\lambda_i, \pm(\lambda_i - \lambda_k), i \neq k = 1, 2, 3\}.$$

Nhưng vì $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$, nên hệ nghiệm có thể viết dưới dạng

$$\sum(\mathcal{G}_2) = \{\pm\lambda_1, \pm\lambda_2, \pm(\lambda_1+\lambda_2), \pm(\lambda_1-\lambda_2), \pm(2\lambda_1+\lambda_2), \pm(\lambda_1+2\lambda_2)\}. \tag{7-20}$$

Bây giờ ta hãy tính dạng Killing trên đại số con Cartan. Theo các hệ thức giao hoán của các đại số Lie nửa đơn, ta thấy rằng các phần tử trên đường chéo chính của toán tử adH là 0 l lần và các nghiệm α. Thành thử, giá trị của dạng Killing trên đại số con Cartan là

$$(H_\lambda, H_\mu) = \sum_\alpha \alpha(H_\lambda)\,\alpha(H_\mu). \tag{7-21}$$

Từ đó, với đại số $\mathcal{G}_2$, theo (7-20) ta có

$$\begin{aligned}(H_\lambda, H_\mu) &= 2\lambda_1\mu_1 + 2\lambda_2\mu_2 + 2(\lambda_1+\lambda_2)(\mu_1+\mu_2) + \\ &+ 2(\lambda_1-\lambda_2)(\mu_1-\mu_2) + 2(2\lambda_1+\lambda_2)(2\mu_1+\mu_2) + 2(\lambda_1+2\lambda_2)(\mu_1+2\mu_2) = \\ &= 8(2\lambda_1\mu_1 + 2\lambda_2\mu_2 + \lambda_1\mu_2 + \lambda_2\mu_1).\end{aligned} \tag{7-22}$$

Nói riêng, ta có

$$(H_\lambda, H_\lambda) = 16(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1\lambda_2). \tag{7-23}$$

Tiếp theo, ta tìm ảnh của các nghiệm của $\mathcal{G}_2$ trong không gian $\mathcal{H}$. Gọi ảnh của nghiệm λ_1 là H_ρ. Theo các công thức (7-22) và (7-9), ta có

$$\lambda_1 = (H_\lambda, H_\rho) = \lambda_1(16\rho_1 + 8\rho_2) + \lambda_2(16\rho_2 + 8\rho_1).$$

Đồng nhất hai vế của đẳng thức này, ta được

$$16\rho_1 + 8\rho_2 = 1,\ 16\rho_2 + 8\rho_1 = 0,$$

tức là

$$\rho_1 = \frac{1}{12},\ \rho_2 = -\frac{1}{24},$$

$$H_{\rho ik} = 0, i \neq k,\ H_{\rho 11} = 0,$$

$$H_{\rho 22} = -H_{\rho 55} = \frac{1}{12}$$

$$H_{\rho 33} = -H_{\rho 66} = -\frac{1}{24}$$

$$H_{\rho 44} = -H_{\rho 77} = -\frac{1}{12} + \frac{1}{24}$$

Từ đó, các công thức (7-23) và (7-10) cho

$$(\lambda_1, \lambda_1) \equiv (H\rho, H\rho) = 16(\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_1\rho_2) =$$

$$= 16\left(\frac{1}{(12)^2} + \frac{1}{(24)^2} - \frac{1}{12}\,\frac{1}{24}\right) = \frac{1}{12}.$$

Tương tự như thế, ta tính được

$$(\lambda_i, \lambda_i) = \frac{1}{12},\ (i = 1, 2),\ (\lambda_1, \lambda_2) = -\frac{1}{24},$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2, \lambda_1 - \lambda_2) = \frac{1}{4}. \tag{7-24}$$

Tiếp theo, ta hãy tìm dãy λ_1 chứa λ_2 nghĩa là tìm tất cả các nghiệm có dạng $\lambda_2 + k\lambda_1$. Theo (7-20) ta có dãy

$$\lambda_2 + 2\lambda_1,\ \lambda_2 + \lambda_1,\ \lambda_2,\ \lambda_2 - \lambda_1,$$

tức là $p = 1$, $q = 2$, $p - q = -1$. Kết quả này cũng có thể tìm thấy theo (7.24), vì ta có

$$p - q = \frac{2(\lambda_1, \lambda_2)}{(\lambda_1, \lambda_1)} = \frac{-1/12}{1/12} = -1$$

Như thế, ta đã minh họa được công thức (7-18).

Định lý 3

Không gian các nghiệm — cũng ký hiệu là $\widetilde{\mathcal{H}}$ — được xác định trên trường các số hữu tỷ và có chiều bằng l. Dạng Killing xác định trên $\widetilde{\mathcal{H}}$ có giá trị là những số hữu tỷ và là một dạng đối xứng xác định dương.

Chứng minh

Quả vậy, chỉ cần chứng minh rằng nếu $\alpha_1, \ldots, \alpha_l$ là một cơ sở của không gian $\widetilde{\mathcal{H}}$, thì mọi nghiệm β sẽ là một tổ hợp tuyến tính các nghiệm $\alpha_1, \ldots, \alpha_l$ với những hệ số hữu tỷ nào đó.

Giả sử

$$\beta = \lambda^i \alpha_i,$$

thế thì ta có

$$\frac{2(\beta, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)} = \frac{2\lambda^i(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)}. \tag{7-25}$$

Nhưng, theo định lý 2, các lượng $2(\beta, \alpha_j)/(\alpha_j, \alpha_j)$ và $2(\alpha_i, \alpha_j)/(\alpha_i, \alpha_i)$ là những số nguyên. Mặt khác định thức

$$\det \left| \frac{2(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)} \right| = \frac{2^l}{\Pi(\alpha_j, \alpha_j)} \det |(\alpha_i, \alpha_j)|$$

của hệ phương trình (7-25) là khác không do dạng Killing xác định trên $\widetilde{\mathcal{H}}$ là không suy biến. Thành thử, hệ (7-25) nhận một nghiệm duy nhất λ^i và các giá trị của nghiệm là những số hữu tỷ.

Bây giờ ta chứng minh dạng Killing xác định trên $\widetilde{\mathcal{H}}$ có giá trị là những số hữu tỷ. Quả vậy, theo (7-21) và (7-12), ta có

$$(\rho, \sigma) = (H_\rho, H_\sigma) = \sum_\alpha \alpha(H_\rho)\, \alpha(H_\sigma) = \sum_\alpha (H_\rho, H_\alpha)(H_\sigma, H_\alpha)$$

tức là

$$(\rho, \sigma) = \sum_\alpha (\rho, \alpha)(\sigma, \alpha). \tag{7-26}$$

Áp dụng công thức (7-26) cho nghiệm β, ta được

$$(\beta, \beta) = \sum_\alpha (\beta, \alpha)^2. \tag{7-27}$$

Bây giờ ta hãy xét dãy nghiệm β chứa α

$$\alpha + q\beta, \ldots, \alpha, \ldots, \alpha - p\beta.$$

Theo công thức (7-18), ta được

$$(\alpha, \beta) = \frac{p - q}{2} (\beta, \beta). \tag{7-28}$$

Thay biểu thức này của (α, β) vào đẳng thức (7-27), ta được

$$(\beta, \beta) = \frac{\sum_\alpha (p - q)^2}{4} (\beta, \beta)^2,$$

hay, vì $(\beta, \beta) \neq 0$ và $\sum_\alpha (q - p)^2 \neq 0$, ta được

$$(\beta, \beta) = \frac{4}{\sum_\alpha (p - q)^2},$$

tức là (β, β) là một số hữu tỷ. Từ đó, theo (7-28), (α, β) là một số hữu tỷ với mọi nghiệm α và β.

Bây giờ gọi M là ma trận

$$M_{\alpha\beta} = \{(\alpha, \beta)\}$$

Thế thì, theo đẳng thức (7-26), ta được

$$M = M^C M$$

Vì M là một ma trận thực, nên $M^C M$ là xác định dương, do đó, M là xác định dương. Từ đó, dạng Killing xác định trên $\widetilde{\mathcal{H}}$

$$(\rho, \sigma) = \lambda^\alpha \mu^\beta (\alpha, \beta) = \lambda^\alpha \mu^\beta M_{\alpha\beta}, \qquad (\rho = \lambda^\alpha \alpha,\ \sigma = \mu^\beta \beta \in \widetilde{\mathcal{H}})$$

là xác định dương.

Nhóm Weyl

Theo các kết quả thu được, ta thấy rằng không gian $\widetilde{\mathcal{H}}$ các nghiệm có thể nhúng vào trong một không gian Euclid l chiều (do $\widetilde{\mathcal{H}}$ có mêtric xác định dương). Từ đó, ta có thể nói đến chiều dài các nghiệm, góc giữa các nghiệm v.v... như đối với các vectơ của các không gian Euclid thông thường. Trong không gian Euclid các nghiệm, dễ thấy rằng phép biến đổi

$$S_\alpha(\beta) = \beta - \frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)}\alpha \tag{7-29}$$

là một phép phản chiếu qua mặt siêu phẳng thẳng góc với vectơ α. Các phép biến đổi này là những phép biến đổi trực giao và làm thành một nhóm trực giao nào đó đối với dạng (ρ, σ). Nhóm này gọi là *nhóm Weyl* của đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$ đang xét. Nhóm Weyl đóng một vai trò rất quan trọng trong lý thuyết biểu diễn các đại số Lie nửa đơn.

Theo định lý 2, tập hợp các nghiệm của đại số Lie nửa đơn làm thành một tập hợp bất biến đối với các phép biến đổi thuộc nhóm Weyl. Nhưng vì tổng số các nghiệm khác nhau của các đại số Lie nửa đơn là hữu hạn, nhóm Weyl của các đại số Lie nửa đơn là những nhóm hữu hạn.

Ví dụ

Ta lại lấy đại số $\mathcal{G}_2$ làm ví dụ. Theo (7-29) và (7-24), ta được các phép biến đổi Weyl sau

$$S_{\lambda_1}(\lambda_1) = -\lambda_1, \qquad S_{\lambda_1}(\lambda_2) = \lambda_1 + \lambda_2,$$

$$S_{\lambda_2}(\lambda_1) = \lambda_1 + \lambda_2, \qquad S_{\lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_2,$$

$$S_{\lambda_1 + 2\lambda_2}(\lambda_1) = \lambda_1, \qquad S_{\lambda_1 + 2\lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_1 - \lambda_2,$$

$$S_{\lambda_2 + 2\lambda_1}(\lambda_1) = -\lambda_1 - \lambda_2, \qquad S_{\lambda_2 + 2\lambda_1}(\lambda_2) = \lambda_2,$$

$$S_{\lambda_1 + \lambda_2}(\lambda_1) = -\lambda_2, \qquad S_{\lambda_1 + \lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_1,$$

$$S_{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_1) = \lambda_2, \qquad S_{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2) = \lambda_1.$$

Từ đó, bằng phương pháp tính trực tiếp, có thể thấy rằng nhóm Weyl của đại số $\mathcal{G}_2$ gồm 12 phần tử sau

$$e,\ S_{\lambda_1},\ S_{\lambda_2},\ S_{\lambda_1+\lambda_2},\ S_{\lambda_1-\lambda_2},\ S_{\lambda_1+2\lambda_2},\ S_{\lambda_2+2\lambda_1},$$

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_2},\ S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+\lambda_2},\ S_{\lambda_1}S_{\lambda_1-\lambda_2},\ S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+2\lambda_2},\ S_{\lambda_1}S_{\lambda_2+2\lambda_1}. \tag{7-30}$$

Tác dụng của các phần tử ở dòng thứ hai là

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_2}(\lambda_1) = \lambda_2, \qquad S_{\lambda_1}S_{\lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_1 - \lambda_2,$$

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+\lambda_2}(\lambda_1) = -\lambda_1 - \lambda_2, \qquad S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+\lambda_2}(\lambda_2) = \lambda_1,$$

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_1-\lambda_2}(\lambda_1) = \lambda_1 + \lambda_2, \qquad S_{\lambda_1}S_{\lambda_1-\lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_1,$$

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+2\lambda_2}(\lambda_1) = -\lambda_1, \qquad S_{\lambda_1}S_{\lambda_1+2\lambda_2}(\lambda_2) = -\lambda_2,$$

$$S_{\lambda_1}S_{\lambda_2+2\lambda_1}(\lambda_1) = -\lambda_2, \qquad S_{\lambda_1}S_{\lambda_2+2\lambda_1}(\lambda_2) = \lambda_1 + \lambda_2. \qquad (7\text{-}31)$$

§ 8. NGHIỆM ĐƠN

Định nghĩa

Theo các hệ thức giao hoán (7-13) ta thấy rằng một đại số Lie nửa đơn được xác định bởi hệ nghiệm của nó (sai khác một phép đẳng cấu). Bây giờ ta hãy tìm cách quy hệ nghiệm này về một hệ nghiệm đơn giản hơn. Muốn thế, trong không gian nghiệm ta hãy đưa ra một khái niệm thứ tự như sau. Trước hết, trong không gian đó ta hãy chọn một cơ sở gồm các nghiệm $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_l$ nào đó và gọi mọi vectơ $\rho = \lambda^i\alpha_i$ (λ^i hữu tỉ) là dương nếu hệ số khai triển đầu tiên khác không là dương. Vectơ dương ký hiệu là $\rho > 0$. Một vectơ ρ gọi là cao hơn một vectơ khác σ nếu $\rho - \sigma > 0$ và ký hiệu là $\rho > \sigma$. Như thế, không gian nghiệm biến thành một không gian có thứ tự. Thế thì, một nghiệm α gọi là *đơn* nếu đối với thứ tự trên $\alpha > 0$, và nếu α không thể phân thành tổng $\alpha = \beta + \gamma$ của hai nghiệm dương β và γ nào đó.

Tính chất

Các nghiệm đơn có các tính chất sau.

1. *Nếu α và β là hai nghiệm đơn thì $\alpha - \beta$ không phải là một nghiệm.*

Quả vậy, nếu $\alpha - \beta$ là một nghiệm, giả sử là dương, thì $\alpha = \beta + (\alpha - \beta)$ sẽ là tổng của hai nghiệm dương, một điều mâu thuẫn với giả thiết α là một nghiệm đơn. Ta cũng rút ra một kết luận như thế nếu $\alpha - \beta$ là âm.

2. *Với mọi cặp nghiệm đơn $\alpha \neq \beta$, luôn luôn ta có*

$$(\alpha, \beta) \leqslant 0.$$

Quả vậy, ta xét dãy nghiệm

$$\beta + q\alpha, \ldots, \beta, \ldots, \beta - p\alpha.$$

Theo tính chất 1, ta phải có $p = 0$, và công thức (7-18) cho

$$\frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)} = -q \leqslant 0,$$

tức là

$$(\alpha, \beta) \leqslant 0,$$

vì $(\alpha, \alpha) > 0$.

2. *Các nghiệm đơn là độc lập tuyến tính với nhau.*

Quả vậy, giả thiết

$$\lambda^i \alpha_i = 0.$$

Nhân đẳng thức này với α_j, ta thấy rằng các hệ số λ^i thỏa mãn một hệ phương trình thuần nhất với các hệ số (α_i, α_j). Như thế, các phần thực và ảo của λ^i đều là nghiệm của hệ, một điều cho phép ta giả sử các hệ số λ^i đều là thực. Ta hãy phân các lượng λ^i thành hai loại, một loại không âm ký hiệu là a^j và một loại âm ký hiệu là $-b^k$. Như thế, đẳng thức trên có thể viết dưới dạng

$$a^j \alpha_j = b^k \alpha_k = h,$$

với h là giá trị chung của cả hai vế. Nhưng theo tính chất 2, ta có

$$(h, h) = a^j b^k(\alpha_1, \alpha_k) \leqslant 0,$$

do a^j và b^k là những số thực không âm. Vì dạng Killing xác định trên $\mathcal{H}$ là không suy biến, nên $h = 0$, tức là $a^j = b^k = 0$, từ đó $\lambda^i = 0$. Như thế, các nghiệm đơn là độc lập tuyến tính với nhau.

4. Do tính chất 3 này, ta có thể chọn các nghiệm đơn làm cơ sở của không gian nghiệm. Một cơ sở như thế thường gọi là *cơ sở nghiệm đơn*. Ta hãy chứng minh rằng *trong cơ sở nghiệm đơn mọi nghiệm dương* β *đều có thể viết dưới dạng*

$$\beta = k^i \alpha_i,$$

trong đó các hệ số k^i *đều là những số nguyên không âm* (*tính chất đặc trưng*). Quả vậy, vì tập hợp các nghiệm dương là hữu hạn và từ đó có thể sắp xếp theo thứ tự được, nên ta có thể chứng minh tính chất này bằng phương pháp truy toán. Giả sử nghiệm β là không đơn. Thế thì ta có $\beta = \gamma + \delta$, trong đó γ và δ là hai nghiệm dương. Nhưng, theo tinh thần của phương pháp truy toán, γ và δ đã là tổng của những nghiệm đơn α_i với những hệ số nguyên không âm. Thành thử, nghiệm dương β có tính chất nói trên. Tương tự như thế, mọi nghiệm âm đều có các khai triển với những hệ số nguyên không dương.

Tập hợp

$$\Pi = \{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_l\}$$

các nghiệm đơn gọi là *hệ nghiệm đơn* của đại số nửa đơn $\mathcal{L}$.

Ma trận Cartan.

Tập hợp các lượng

$$A_{ij} = \frac{2(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_i, \alpha_i)} \tag{8-1}$$

gọi là *ma trận Cartan* của đại số Lie $\mathcal{L}$. Theo định nghĩa, ta luôn luôn có

$$A_{ii} = 2.$$

Như đã nói ở trên, với mêtric xác định dương trong không gian các nghiệm, ta có thể xem các nghiệm là những vectơ trong một không gian Euclid (hay nhúng vào trong một không gian Euclid) nào đó. Từ đó, dễ thấy rằng ma trận Cartan (8.1) hoàn toàn xác định các tính chất hình học của các nghiệm đơn.

Ví dụ

Ta hãy lấy đại số $\mathcal{G}_2$ làm ví dụ. Nếu đặt

$$\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2, \ \alpha_2 = \lambda_2 \tag{8-2}$$

thì, theo (7-20), dễ thấy rằng các nghiệm khác nhau của $\mathcal{G}_2$ có thể viết dưới dạng

$$\sum(\mathcal{G}_2) =$$

$$= \{\pm \alpha_1, \pm \alpha_2, \pm(\alpha_1 + \alpha_2), \pm(\alpha_1 + 2\alpha_2), \pm(\alpha_1 + 3\alpha_2), \pm(2\alpha_1 + 3\alpha_2)\}. \quad (8\text{-}3)$$

Như thế, các nghiệm α_1 và α_2 là những nghiệm đơn của đại số $\mathcal{G}_2$:

$$\Pi(\mathcal{G}_2) = \{\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2,\ \alpha_2 = \lambda_2\}. \quad (8\text{-}4)$$

Tiếp theo, theo (7-24), ma trận Cartan của đại số Lie $\mathcal{G}_2$ có dạng

$$A_{ij} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 2 \end{bmatrix}. \quad (8\text{-}5)$$

Vị trí các nghiệm đơn

Vị trí quan trọng của các nghiệm đơn nằm ở hai định lý sau.

Định lý 1 (không chứng minh)

Hệ nghiệm $\sum$ được hoàn toàn xác định bởi hệ nghiệm đơn Π.

Ta hãy minh họa định lý này cho đại số $\mathcal{G}_2$.

Theo (7-24) và (8-1), công thức (7-18) cho các nghiệm đơn α_1 và α_2 có thể viết dưới dạng

$$p_{ij} - q_{ij} = A_{ij}. \quad (8\text{-}6)$$

Vì theo tính chất 1) của các nghiệm đơn, hiệu hai nghiệm đơn $\alpha_1 - \alpha_2$ không phải là một nghiệm, nên trong dãy

$$\alpha_2 + q_{21}\alpha_1, \ldots, \alpha_2, \ldots, \quad \alpha_2 - p_{21}\alpha_1$$

ta phải có $p_{21} = 0$, từ đó các công thức (8-5) và (8-6) cho $q_{21} = 1$, tức là ta được hai nghiệm dương

$$\alpha_2,\ \alpha_2 + \alpha_1. \quad (8\text{-}7)$$

Cũng tương tự như thế, vì $\alpha_2 - \alpha_1$ không phải là một nghiệm nên trong dãy

$$\alpha_1 + q_{12}\alpha_2, \ldots, \alpha_1, \ldots, \alpha_1 - p_{12}\alpha_2$$

ta phải có $p_{12} = 0$. Thành thử từ (8-5) và (8-6), ta được $q_{12} = 3$, tức là ta có thêm các nghiệm dương

$$\alpha_1,\ \alpha_1 + 2\alpha_2,\ \alpha_1 + 3\alpha_2. \quad (8\text{-}8)$$

Tiếp theo ta xét dãy α_1 chứa $\alpha_1 + 3\alpha_2$. Vì

$$\frac{2(\alpha_1 + 3\alpha_2, \alpha_1)}{(\alpha_1, \alpha_1)} = A_{11} + A_{21} = 2 - 3 = -1$$

và vì lượng $(\alpha_1 + 3\alpha_2) - \alpha_1 = 3\alpha_2$ không phải là một nghiệm theo (7-19), nên

$$(\alpha_1 + 3\alpha_2) + \alpha_1 = 2\alpha_1 + 3\alpha_2. \quad (8\text{-}9)$$

cũng là một nghiệm dương. Vì đại số $\mathcal{G}_2$ có chiều bằng 14, nên tổng số nghiệm của $\mathcal{G}_2$ bằng 14, trong đó có 12 nghiệm khác không và hai nghiệm bằng không. Chính các nghiệm dương (8-7), (8-8), (8-9) và các nghiệm âm tương ứng là toàn bộ 12 nghiệm khác không đó của $\mathcal{G}_2$.

Qua vi dụ này, ta thấy ma trận Cartan biểu thị các tính chất hình học của các nghiệm đơn, hoàn toàn xác định hệ nghiệm của đại số $\mathcal{G}_2$ và, do đó, xác định hoàn toàn cấu trúc của đại số. Điều này cũng đúng trong trường hợp chung của các đại số Lie nửa đơn. Tiếp theo ta có

Định lý 2 (không chứng minh)

Đại số Lie $\mathcal{L}$ là đơn khi và chỉ khi hệ nghiệm đơn Π của nó không thể phân giải được, tức là không thể phân thành hai phần không giao nhau và trực giao với nhau như sau:

$$\Pi = \Pi' \cup \Pi'', \ \Pi' \cap \Pi'' = 0, \ (\alpha_i, \alpha_j) = 0, \ \alpha_i \in \Pi', \quad \alpha_j \in \Pi''.$$

Như thế, tính chất đơn hay nửa đơn của một đại số Lie nửa đơn (nói chung) quy về tính chất phân giải được hay không phân giải được của hệ nghiệm đơn.

Chẳng hạn, với đại số Lie $\mathcal{G}_2$, theo (7-24), ta có

$$(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{8} \neq 0,$$

hệ nghiệm đơn của đại số là không phân giải được. Như thế $\mathcal{G}_2$ là đơn.

§9. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

Giản đồ Dynkin

Vì cấu trúc các đại số Lie nửa đơn được hoàn toàn xác định bởi các ma trận Cartan của chúng, nên có hai vấn đề cần giải quyết:

1. Tìm các ma trận Cartan khả dĩ, tương ứng với các hệ nghiệm đơn không thể phân giải được (hay thường gọi là *liên thông*).

2. Dựng các đại số Lie đơn tương ứng với các ma trận Cartan tìm được.

Ta hãy giải quyết vấn đề thứ nhất bằng phương pháp giản đồ như sau. Ta hãy biểu diễn trên mặt phẳng các nghiệm đơn bằng những điểm $\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_l$, sau đó nối các cặp điểm α_i, α_j $(i \neq j)$ bởi

$$s_{ij} = A_{ij} A_{ji}$$

đoạn thẳng, đồng thời ghi tại các điểm đó những số

$$w_i = (\alpha_i, \alpha_i),$$

gọi là *trọng số*. Nếu $s_{ij} \neq 0$, các điểm α_i và α_j gọi là có *quan hệ với nhau hạng* s_{ij}.

Giản đồ thu được bằng cách đó hoàn toàn xác định ma trận Cartan. Quả vậy, dựa vào giản đồ ta biết được tích $A_{ij} A_{ji}$ và thương $A_{ji}/A_{ij} = (\alpha_i, \alpha_i)/(\alpha_j, \alpha_j) = w_i/w_j$. Nhưng vì $A_{ii} = 2$ và $A_{ij} \leqslant 0$ (theo tính chất 2 của các nghiệm đơn), nên các phần tử của ma trận Cartan được hoàn toàn xác định từ tích và thương đó. Giản đồ nói trên thường gọi là *giản đồ Dynkin*.

Tính chất các giản đồ Dynkin các đại số Lie nửa đơn

Bây giờ ta hãy nghiên cứu các tính chất của các giản đồ Dynkin, từ đó suy ra các giản đồ khả dĩ, tương ứng với những hệ nghiệm đơn không phân giải được, sau cùng tiến hành phân loại các đại số Lie đơn.

Như đã biết, do tính chất xác định dương của mêtric của không gian nghiệm, ta có thể nói đến chiều dài và góc giữa các nghiệm. Gọi góc giữa hai vectơ α_i và α_j, giả sử khác nhau, là θ_{ij} thì, theo (8-1), ta có thể viết

$$s_{ij} = A_{ij} A_{ji} = \frac{4(\alpha_i, \alpha_j)^2}{(\alpha_i, \alpha_i)\ (\alpha_j, \alpha_j)} = 4\cos^2 \theta_{ij} < 4.$$

Từ đó ta thấy rằng hạng s_{ij} cao nhất của các quan hệ giữa các nghiệm là 3. Các giản đồ trong đó các hạng quan hệ giữa các nghiệm có giá trị không quá 3 gọi là *giản đồ cho phép*. Dĩ nhiên, trong các giản đồ này, các vectơ α_i là độc lập tuyến tính với nhau. Một giản đồ, tương ứng với một hệ nghiệm đơn không phân giải được, gọi là *giản đồ không phân giải được* (hay *liên thông*). Rõ ràng theo định lý 2, § 8, các giản đồ cho phép và không phân giải được là tương ứng với những đại số Lie đơn. Từ nay về sau, ta chỉ xét các giản đồ có các tính chất đó. Số điểm α_i của giản đồ gọi là *hạng* của giản đồ.

Các giản đồ cho phép và không phân giải được có các tính chất sau:

1. Các giản đồ đó không có đường kín, tức là trong giản đồ không có một loạt điểm $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ sao mà α_1 quan hệ với α_2, α_2 với $\alpha_3, \dots, \alpha_{m-1}$ với α_m và, cuối cùng, α_m với α_1.

Quả vậy, nếu có tồn tại một đường kín như thế thì, theo định nghĩa của lượng s_{ij}, ta có

$$(\alpha_1, \alpha_2) \neq 0, \dots, (\alpha_{m-1}, \alpha_m) \neq 0,\ (\alpha_m, \alpha_1) \neq 0.$$

Đặt

$$\alpha_{m+1} = \alpha_1,$$

ta được

$$\left(\sum_1^m \frac{\alpha_i}{|\alpha_i|}, \sum_1^m \frac{\alpha_i}{|\alpha_i|}\right) = \sum_1^m \frac{(\alpha_i, \alpha_i)}{|\alpha_i|^2} + 2\sum_1^m \frac{(\alpha_i, \alpha_{i+1})}{|\alpha_i|\ |\alpha_{i+1}|} =$$

$$= m + 2\sum_1^m \cos(\alpha_i, \alpha_{i+1}) \leqslant m - m = 0,$$

một điều trái với tính chất của dạng Killing xác định trong không gian các nghiệm.

2. Số đoạn thẳng (kể cả số bội của nó) xuất phát từ một điểm không quá 3.

Quả vậy, giả sử có k đoạn thẳng xuất phát từ một điểm α nào đó và nối điểm α với các điểm α_i. Các điểm α_i và α_j này không quan hệ với nhau vì, nếu trái lại, hóa ra ta sẽ có một đường kín, một điều trái với tính chất 1). Thành thử, các vectơ α_i và α_j là trực giao với nhau.

Bây giờ giả sử γ là một vectơ trực giao với tất cả các vectơ α_i và nằm trong không gian con chứa các vectơ α và α_i. Gọi θ_0 là góc giữa γ với α, còn θ_i là góc giữa γ với α_i. Thế thì, theo định lý Pythagore, ta có

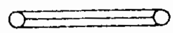
$$\cos^2\theta_0 + \sum_i \cos^2\theta_i = 1.$$

Tiếp theo, vì α là độc lập tuyến tính đối với các α_i, mà γ lại trực giao với các α_i, nên α không thể trực giao với γ được, tức là $\cos\theta_0 \neq 0$. Thành thử đẳng thức trên cho

$$\sum_i s_{oi} = \sum_i 4\cos^2\theta_i < 4,$$

với s_{oi} là số đoạn thẳng xuất phát từ điểm α.

3. Giản đồ duy nhất có quan hệ hạng 3 là giản đồ



Hình 14-1

Tính chất này là một hệ quả trực tiếp của tính chất 2).

Để bước sang các tính chất khác của các giản đồ Dynkin, ta hãy đưa ra thêm định nghĩa sau. Cho một giản đồ S. Ta gọi *xích* C là một dãy điểm $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_{n+1}$ thuộc giản đồ S, trong đó các quan hệ duy nhất giữa các cặp điểm là các quan hệ giữa các điểm β_i và β_{i+1}. Một xích gọi là *đơn*, nếu các quan hệ trên đều là hạng 1. Dĩ nhiên, mọi điểm $\alpha \in S$, $\alpha \overline{\in} C$, chỉ quan hệ nhiều nhất với một điểm nào đó của xích C, vì trong trường hợp trái lại, sẽ tồn tại những đường kín trong giản đồ S, một điều mâu thuẫn với tính chất 1). Thế thì ta có tính chất sau:

4. Nếu xem toàn bộ xích đơn C như một điểm β

$$\beta = \sum_1^{n+1} \beta_i,$$

mà quan hệ với mọi điểm $\alpha \in S$, $\alpha \overline{\in} C$, có hạng bằng hạng của quan hệ giữa α và phần tử của xích, thì giản đồ S' thu được cũng là một giản đồ cho phép, nếu S là một giản đồ cho phép.

Quả vậy, vì các điểm của S là độc lập tuyến tính với nhau, nên các điểm của S' cũng độc lập tuyến tính với nhau. Tiếp theo, theo định nghĩa của xích đơn, ta được

$$(\beta, \beta) = \Big(\sum_1^{n+1} \beta_i, \sum_1^{n+1} \beta_i\Big) =$$

$$= \sum_1^{n} \{(\beta_i, \beta_i) + 2(\beta_i, \beta_{i+1})\} + (\beta_{n+1}, \beta_{n+1}) =$$

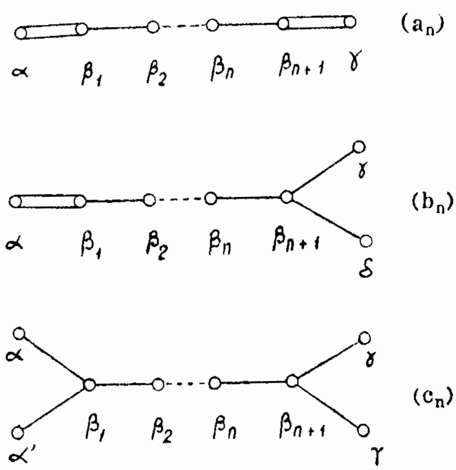
$$= (\beta_{n+1}, \beta_{n+1}) = (\beta_k, \beta_k) \text{ với mọi } k.$$

Ngoài ra, nếu $\alpha \in S$ có quan hệ với điểm β_i thuộc xích C, thì α phải trực giao với mọi điểm khác của xích C, do đó ta có

$$(\alpha, \beta) = (\alpha, \beta_i).$$

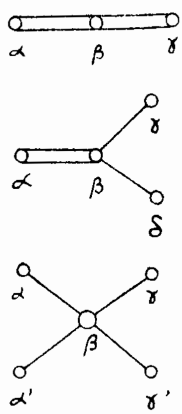
Thành thử, tất cả các điều kiện của một giản đồ cho phép đều được thỏa mãn với S', khi đã được thỏa mãn với S.

Như thế, các giản đồ S sau đây



Hình 14-2

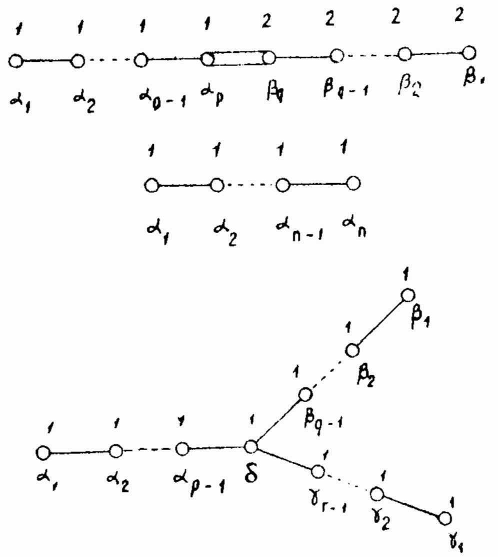
là không cho phép, vì các giản đồ S' tương ứng (thu được bằng cách thay xích đơn trong S bằng một điểm)



Hình 14-3

là không cho phép theo tính chất 2).

5. *Các giản đồ không phân giải được và cho phép là thuộc các loại sau*



Hình 14-4

Tất nhiên, theo tính chất 2), các giản đồ có hạng $n \geqslant 3$ không thể chứa các quan hệ hạng 3 được. Vì thế, trước hết ta giả sử giản đồ S có chứa một quan hệ hạng 2. Giả sử xích cực đại chứa quan hệ hạng 2 đó là C. Trước hết, C chỉ chứa một quan hệ hạng 2, vì nếu trái lại hóa ra C sẽ thuộc loại không cho phép a_n. Nếu $S \neq C$ thì trong giản đồ S sẽ có ít nhất một điểm $\beta \overline{\in} C$ chỉ quan hệ với một điểm nào đó của C. Nhưng vì điểm này không thể là điểm cuối của C do C là cực đại, nên buộc S phải chứa một giản đồ con thuộc loại b_n, một điều không thể xảy ra được. Như thế, giản đồ S chứa quan hệ hạng 2 chỉ có thể có dạng $a'_{p,q}$.

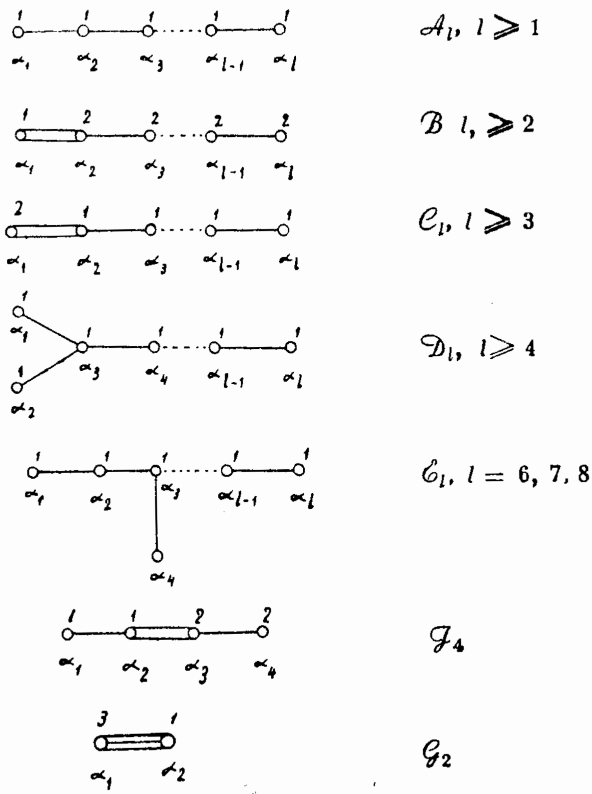
Bây giờ, giả sử giản đồ S chỉ chứa các quan hệ hạng 1, và giả sử từ mỗi điểm của S không xuất phát quá hai đoạn thẳng. Lại giả sử C là một xích tối đa nào đó của S. C phải trùng với S vì nếu $C \neq S$ thì sẽ có một điểm $\beta \overline{\in} C$, $\beta \in S$, quan hệ với S với hai khả năng sau: hoặc là quan hệ với một điểm cuối của C, hoặc là quan hệ với một điểm không phải là điểm cuối của C. Cả hai khả năng này đều bị loại trừ, thứ nhất vì C được chọn là cực đại, thứ hai do giả thiết về dạng của S. Thành thử, S phải có dạng b'_n.

Cuối cùng, giả sử S chỉ chứa các quan hệ hạng 1, nhưng có tồn tại một điểm của S từ đó xuất phát ba đoạn thẳng. Thành thử S sẽ chứa một giản đồ con có hình sao ba cạnh E nào đó. Ta chọn E là cực đại. E phải trùng với S vì nếu $E \neq S$ thì khả năng điểm $\beta \overline{\in} E$, $\beta \in S$, được quan hệ với một điểm cuối của E bị loại trừ do E là cực đại, cũng như khả năng được quan hệ với một điểm khác điểm cuối của E cũng bị loại trừ do giản đồ loại c_n là không cho phép. Thành thử, trong trường hợp này S phải có dạng $c'_{p,q,r}$.

Vấn đề còn lại là tìm các hạn chế đối với ba loại giản đồ trên. Ta có

Định lý về sự phân loại các đại số Lie nửa đơn

Các giản đồ Dynkin cho phép và không phân giải là thuộc các loại sau



Hình 14-5

Chứng minh

Trước hết ta giả sử có một xích đơn gồm các điểm $\alpha_1, \dots, \alpha_n$, cùng trọng số $w = (\alpha_i, \alpha_i)$. Đặt

$$\alpha = \sum_1^n i\,\alpha_i, \quad (i \neq \sqrt{-1}\ !)$$

ta có

$$|\alpha|^2 = \sum_1^n i^2(\alpha_i, \alpha_i) + 2\sum_1^{n-1} i(i+1)(\alpha_i + \alpha_{i+1}) =$$

$$= \sum_1^n i^2 w - \sum_1^{n-1} i(i+1)\,w = n^2 w - \sum_1^{n-1} i w,$$

hay

$$|\alpha|^2 = \frac{n(n+1)}{2}\,w. \tag{9-1}$$

Thế thì đối với giản đồ loại $a'_{p,q}$ ở đây $w = 1$, và với cách ký hiệu

$$\alpha = \sum_{1}^{p} i\,\alpha_i\,, \quad \beta = \sum_{1}^{q} k\,\beta_k\,,$$

theo (9-1), ta được

$$|\,\alpha\,|^2 = \frac{p(p+1)}{2}\,, \ |\,\beta\,|^2 = q\,(q+1)\,. \qquad (9\text{-}2)$$

Ngoài ra, ta còn có

$$(\alpha, \beta) = p\,q(\alpha_p, \beta_q) = -\,p\,q. \qquad (9\text{-}3)$$

Mặt khác, vì $\alpha_1,\ldots, \alpha_p$, $\beta_1,\ldots, \beta_q$ độc lập tuyến tính với nhau nên α và β không tỷ lệ với nhau. Thành thử, theo bất đẳng thức Schwartz

$$(\alpha,, \beta)^2 < (\alpha, \alpha)^2\,(\beta, \beta)^2,$$

và theo (9-2) và (9-3), ta được

$$p^2q^2 < \frac{1}{2}\,p\,q(p+1)\,(q+1)\,,$$

hay

$$(p-1)\,(q-1) < 2\,.$$

Bất phương trình này có ba nghiệm (p và q : nguyên dương)

a) $p = 1$, q tùy ý,

b) $q = 1$, p tùy ý,

c) $p = 2$, $q = 2$.

Tương ứng với ba nghiệm này, ta có ba giản đồ sau thuộc loại $a'_{p,q}$:

$$a'_{1,q}\,,\ a'_{p,1}\,,\ a'_{2,2}.$$

Các giản đồ này tương ứng ký hiệu là $\mathcal{B}_l$, $\mathcal{C}_l$ và $\mathcal{F}_4$.

Tiếp theo, ta xét giản đồ loại b'_n. Giản đồ này không chịu một hạn chế nào và ký hiệu là $\mathcal{A}_l$.

Cuối cùng, ta xét giản đồ loại $c'_{p,q,r}$ Đặt

$$\alpha = \sum_{1}^{p-1} i\,\alpha_i\,, \beta = \sum_{1}^{q-1} j\,\beta_j\,, \gamma = \sum_{1}^{r-1} k\,\gamma_k\,,$$

theo (9-1), ta được

$$(\alpha, \alpha) = \frac{1}{2}\,p(p-1)\,,\ (\beta, \beta) = \frac{1}{2}\,q\,(q-1)\,,$$

$$(\gamma, \gamma) = \frac{1}{2}\,r\,(r-1).$$

Ngoài ra, ta còn có

$$(\delta, \delta)) = 1\,, (\alpha, \delta) = -\,\frac{1}{2}\,(p-1)\,,\ (\beta, \delta) = -\,\frac{1}{2}\,(q-1)$$

$$(\gamma, \delta) = -\,\frac{1}{2}\,(r-1)\,.$$

Từ đó và từ các đẳng thức trên, ta được

$$\cos^2(\gamma, \delta) = \frac{1}{2}(1-1/p), \cos^2(\beta, \delta) = \frac{1}{2}(1-1/q),$$

$$\cos^2(\gamma, \delta) = \frac{1}{2}(1-1/r). \tag{9-4}$$

Tiếp theo, vì các vectơ α, β và γ trực giao với nhau nên, tương tự như khi chứng minh tính chất 2), ta có

$$\cos^2(\alpha, \delta) + \cos^2(\beta, \delta) + \cos^2(\gamma, \delta) < 1$$

hay, theo (9.4),

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r} > 1. \tag{9-5}$$

Nhưng theo giả thiết, ta có $p \geqslant q \geqslant r \geqslant 2$, tức là

$$\frac{1}{p} \leqslant \frac{1}{q} \leqslant \frac{1}{r}.$$

Thành thử, từ (9-5), ta được kiều kiện

$$\frac{3}{r} > 1,$$

tức là $r = 2$. Từ đó, (9-5) cho điều kiện

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} > \frac{1}{2},$$

hay

$$\frac{2}{q} > \frac{1}{2},$$

tức là $q < 4$, nghĩa là ta có hai khả năng $q = 2$ và $q = 3$. Khi $q = 2$ thì

$$\frac{1}{p} > 0,$$

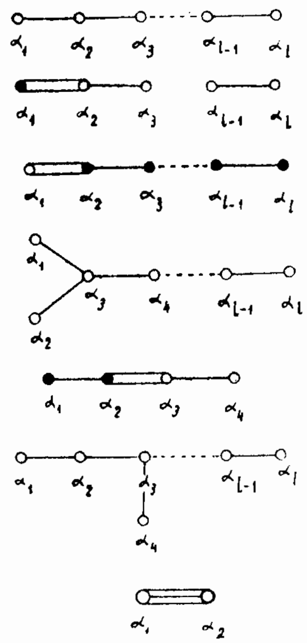
tức là $p \geqslant 2$. Ta được giản đồ loại $c'_{p,2,2}$, thường ký hiệu là $\mathcal{D}_l$. Còn khi $q = 3$ th

$$\frac{1}{p} > \frac{1}{6},$$

tức là $p < 6$. Mặt khác vì $q \geqslant p$, nên ta được các điều kiện $p = 3, 4, 5$. Ta được các giản đồ loại $c'_{p,3,2}$, thường ký hiệu là $\mathcal{E}_6$, $\mathcal{E}_7$ và $\mathcal{E}_8$.

Cuối cùng, giản đồ duy nhất có quan hệ hạng ba thường ký hiệu là $\mathcal{G}_2$. Định lý chứng minh xong.

Thông thường người ta có thể bỏ các trọng số w_i ở các giản đồ Dynkin nhưng lại tô đen các nghiệm có chiều dài ngắn nhất. Cụ thể là ta có các giản đồ Dynkin sau :



$\mathcal{A}_l$

$\mathcal{B}_l,\ l \geqslant 2$

$\mathcal{C}_l,\ l \geqslant 3$

$\mathcal{D}_l,\ l \geqslant 4$

$\mathcal{F}_4$

$\mathcal{E}_6,\ \mathcal{E}_7,\ \mathcal{E}_8$

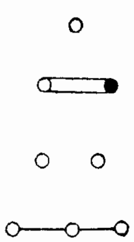
$\mathcal{G}_2.$

Hình 14-6

Sự đẳng cấu giữa một số đại số Lie nửa đơn có chiều bé

Từ định lý 2 về các nghiệm đơn, từ tính chất đẳng cấu với nhau của các đại số Lie có cùng ma trận Cartan và từ cách xây dựng các giản đồ Dynkin, ta có thể suy ra các kết quả sau đây về tính chất đẳng cấu giữa một số đại số Lie có chiều bé :

Giản đồ Dynkin chung — Đại số Lie đẳng cấu với nhau



$\mathcal{A}_1 \approx \mathcal{B}_1 \approx \mathcal{C}_1$

$\mathcal{B}_2 \approx \mathcal{C}_2$

$\mathcal{D}_2 \approx \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_1$

$\mathcal{D}_3 \approx \mathcal{A}_3$

Hình 4-7

Theo các kết quả thu được ở chương này, chúng ta thấy rằng vấn đề phân loại các đại số Lie nửa đơn (hay nhóm Lie nửa đơn) có thể tiến hành đến cùng.

Trái lại, sự nghiên cứu các đại số Lie khả giải còn đang vấp phải rất nhiều khó khăn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [2], [4], [5], [6], [7], [15].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc §1 — §2 ; §4 ÷ §9.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc như C

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương

CHƯƠNG XV

PHÉP BIỂU DIỄN CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

§1. CÁC PHÉP TÍNH VỀ BIỂU DIỄN CÁC ĐẠI SỐ LIE

Phép biểu diễn các đại số Lie

Cho $\mathcal{G}$ là một nhóm Lie và giả sử $\mathcal{L}$ là đại số Lie của nhóm $\mathcal{G}$. Lại giả sử ρ là một biểu diễn của nhóm $\mathcal{G}$ trong một không gian tuyến tính $\mathcal{M}$ nào đó. Tất nhiên, ρ đồng thời là biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{L}$ của nhóm $\mathcal{G}$, tức là ta có (xem VII, §8)

$$\rho(\lambda X + \mu Y) = \lambda\rho(X) + \mu\rho(Y),\ \lambda, \mu \in C,$$
$$\rho[X, Y] = [\rho(X), \rho(Y)], \text{ với mọi } X, Y \in \mathcal{L}. \tag{1-1}$$

Biểu diễn tổng

Từ khái niệm biểu diễn tổng

$$\rho = \rho_1 \oplus \rho_2 \oplus \ldots \oplus \rho_p$$

của nhóm $\mathcal{G}$ trong không gian tổng trực tiếp

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \oplus \mathcal{M}_2, \oplus \ldots \oplus \mathcal{M}_p,$$

suy ra biểu diễn tổng

$$\rho(X)(\psi^1 + \psi^2 + \ldots + \psi^p) = \rho_1(X)\psi^1 + \rho_2(X)\psi^2 + \ldots + \rho_p(X)\psi^p,$$
$$(\psi^i \in \mathcal{M}^i) \tag{1-2}$$

của đại số Lie $\mathcal{L}$ trong không gian tổng nói trên.

Biểu diễn tích

Bây giờ, cho tích Kronecker hai biểu diễn ρ_1 và ρ_2 của nhóm tương ứng trong hai không gian $\mathcal{M}_1$ và $\mathcal{M}_2$ tức là, theo định nghĩa

$$\rho(g)(\psi^1\psi^2) = (\rho_1(g)\psi^1)\psi^2 + \psi^1\rho_2(g)\psi^2,\ g \in \mathcal{G}. \tag{1-3}$$

(để được đơn giản, ta đã viết $\psi^1\psi^2$ thay cho $\psi^1 \otimes \psi^2$). Giả sử phần tử g có thể viết dưới dạng (xem II, (5-33) với $I_\sigma \to X_\sigma$)

$$g = \exp(ia^\sigma X_\sigma),$$

Thế thì ta có (xem II, § 8)

$$\rho(g) = \exp(ia^{\sigma}\rho(X_{\sigma})).$$

Thay biểu thức này và những biểu thức tương tự vào đẳng thức (1-3), ta được

$$[e + ia^{\sigma}\rho(X_{\sigma})](\psi^1\psi^2) = [e + ia^{\sigma}\rho_1(X_{\sigma})]\psi^1.[e + ia^{\sigma}\rho_2(X_{\sigma})]\psi^2$$

$$a^{\sigma} \ll 1.$$

Từ đó, bỏ rơi các vô cùng bé bậc hai, ta được

$$\rho(X)(\psi^1\psi^2) = [\rho_1(X)\psi^1]\psi^2 + \psi^1\rho_2(X)\psi^2. \tag{1-4}$$

Đẳng thức (1-4) là nội dung của biểu diễn tích

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$$

đối với các đại số Lie. Đẳng thức này có thể suy rộng ngay cho trường hợp tích nhiều biểu diễn.

Biểu diễn phản bộ

Tiếp theo, tương tự như trên, từ khái niệm biểu diễn phản bộ $\bar{\rho}$ (xem II, § 14) của biểu diễn ρ đối với nhóm $\mathcal{G}$,

$$\bar{\rho}(g) = \rho^C(g^{-1}),\ g \in \mathcal{G},$$

ta đi đến khái niệm biểu diễn đối ngẫu phản bộ (hay đối ngẫu)

$$\bar{\rho}(X) = -\rho^C(X),\ X \in \mathcal{L} \tag{1-5}$$

đối với đại số Lie $\mathcal{L}$, vì ta có

$$\bar{\rho}(g) \equiv \exp(ia^{\sigma}\bar{\rho}(X_{\sigma}) \equiv \rho^C(g^{-1}) = (\rho^{-1})^C(g) = \exp(-ia^{\sigma}\rho^C(X_{\sigma})).$$

Ta lưu ý rằng cách lập hàm mũ của toán tử không phải khi nào cũng có thể thực hiện được. Tuy nhiên, khi $\rho(X)$ là hecmitic thì có thể chứng minh hàm mũ $\exp i\rho(x)$ là tồn tại, điều này xảy ra khi biểu diễn $\rho(g)$ là unita (chẳng hạn đối với các nhóm compăc).

Trọng biểu diễn

Một khái niệm hết sức quan trọng nữa trong lý thuyết biểu diễn các đại số Lie, cũng như trong các ứng dụng vật lý, là khái niệm trọng. Cho một đại số Lie $\mathcal{L}$. Giả sử $\mathcal{H}$ là đại số con Cartan của $\mathcal{L}$ và ρ là một biểu diễn nào đó trong không gian $\mathcal{M}$. Thế thì, mọi hàm tuyến tính $\lambda(H)$, $H \in \mathcal{H}$, xác định trên $\mathcal{H}$, gọi là *trọng* của biểu diễn ρ nếu có tồn tại một vectơ $\psi \in \mathcal{M}$, $\psi \neq 0$, sao mà

$$\rho(H)\psi = \lambda(H)\psi,\ \text{với mọi}\ H \in \mathcal{H}. \tag{1-6}$$

Vectơ ψ gọi là *vectơ trọng*, tương ứng với trọng λ. Người ta chứng minh rằng với mọi đại số Lie nửa đơn, trọng bao giờ cũng tồn tại. Theo định nghĩa này, nghiệm chính là một loại trọng, tương ứng với biểu diễn phó. Rõ ràng trọng là một loại trị riêng.

Bây giờ cho hai biểu diễn ρ_1 và ρ_2 của đại số Lie $\mathcal{L}$. Gọi $\lambda_1(H)$ và $\lambda_2(H)$ là các trọng tương ứng của hai biểu diễn đó, các vectơ trọng tương ứng ký hiệu là ψ^1, ψ^2. Thế thì, theo định nghĩa của trọng và của tích biểu diễn (1-4), ta được

$$\rho(H)(\psi^1\psi^2) = [\rho_1(H)\psi^1]\psi^2 + \psi^1\rho_2(H)\psi^2 = $$
$$= [\lambda_1(H) + \lambda_2(H)](\psi^1\psi^2), \tag{1-7}$$

tức là trọng của biểu diễn tích bằng tổng các trọng các biểu diễn thành phần.

Biểu diễn lũy thừa

Bây giờ giả sử ta có tích Krônecker của k không gian như nhau

$$\mathcal{M}^k = \underbrace{\mathcal{M} \otimes \dots \otimes \mathcal{M}}_{\text{k số hạng}}.$$

Như đã biết (xem II, §16) một tích như thế gọi là lũy thừa Krônecker bậc k của không gian. Tích biểu diễn (viết $\rho^{\otimes k}$ giản đơn là ρ^k)

$$\rho^k = \underbrace{\rho \otimes \dots \otimes \rho}_{\text{k số hạng}}$$

với ρ là biểu diễn trong không gian $\mathcal{M}$ của đại số Lie, gọi là *lũy thừa bậc k* của biểu diễn ρ. Như đã biết, (xem II, §11) nói chung biểu diễn lũy thừa ρ^k trong không gian $\mathcal{M}^k$ là khả quy, không gian này có thể phân thành nhiều không gian tenxơ con bất biến có những tính chất đối xứng nhất định. Biểu diễn cảm ứng của biểu diễn ρ^k trong không gian tenxơ con các tenxơ hạng k hoàn toàn đối xứng gọi là *biểu diễn lũy thừa bậc k đối xứng* của biểu diễn ρ và ký hiệu là $\rho^{[k]}$. Biểu diễn cảm ứng của ρ trong không gian con các tenxơ hạng k hoàn toàn phản xứng gọi là *lũy thừa bậc k phản xứng* của biểu diễn ρ, và ký hiệu là $\rho^{\{k\}}$. Các biểu diễn ở II, § 17 chỉ là một trường hợp đặc biệt, $k = 2$.

Bây giờ ta hãy tìm các trọng của các biểu diễn tenxơ trong các không gian tenxơ lũy thừa nói trên. Giả sử biểu diễn bất khả quy có các trọng $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, các vectơ trọng tương ứng là $\psi^1, \psi^2, \dots, \psi^p$. Thế thì, theo kết quả (1-7), ta có các kết quả sau

Biểu diễn ρ^k

Hệ trọng: $\lambda_i + \lambda_j + \dots + \lambda_l$ (k thành phần),

Vectơ trọng tương ứng: $\psi^i\psi^j \dots \psi^l$. (1-8)

Biểu diễn $\rho^{[k]}$

Hệ trọng: $\lambda_i + \lambda_j + \dots + \lambda_l$, $(i \leqslant j \dots \leqslant l)$,

Vectơ trọng tương ứng: $P(\psi^i\psi^j \dots \psi^l)$ (1-9)

với P là toán tử đối xứng hóa hoàn toàn. Chính do điều kiện đối xứng hoàn toàn này, nên ta có thể giả sử các chỉ số i, j, ..., l được sắp xếp theo thứ tự trên.

Biểu diễn $\rho^{\{k\}}$

Hệ trọng: $\lambda_i + \lambda_j + \dots + \lambda_l$, $(i < j < \dots < l)$,

Vectơ trọng tương ứng: $Q(\psi^i\psi^j \dots \psi^l)$, (1-10) với Q là toán tử phản xứng hóa hoàn toàn. Chính do điều kiện phản xứng hóa hoàn toàn này, ta có thể giả sử các chỉ số i, j, ..., l được sắp xếp theo thứ tự trên.

Tất nhiên, cũng như đối với lý thuyết biểu diễn nhóm, một trong những vấn đề quan trọng nhất của lý thuyết biểu diễn các đại số Lie là vấn đề phân loại tất cả các biểu diễn bất khả quy. Như ta sẽ thấy sau này, với các đại số Lie nửa đơn, nói riêng với các đại số Lie kinh điển, vấn đề phân loại các biểu diễn bất khả quy có thể tiến hành đến cùng.

Các thuật ngữ dùng trong đại số Lie

Các tính chất khả quy, bất khả quy, hoàn toàn khả quy của các biểu diễn các nhóm được bảo toàn khi chuyển sang các đại số Lie tương ứng, và ngược lại. Nếu xét biểu diễn các đại số Lie một cách độc lập, các danh từ trên cũng hiểu theo nghĩa thông thường.

§2. CÁC BIỂU DIỄN BẤT KHẢ QUY CỦA CÁC ĐẠI SỐ LIE NỬA ĐƠN

Định lý 1 (không chứng minh)

Cho một đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$, có đại số con Cartan $\mathcal{H}$ và hệ nghiệm đơn $\Pi = \{\alpha_1, \dots \alpha_l\}$. Giả sử ρ là một biểu diễn bất khả quy của $\mathcal{L}$, thực hiện trong không gian $\mathcal{M}$. Thế thì

I.

1. Nếu λ là một trọng đơn của biểu diễn ρ và α là một nghiệm của $\mathcal{L}$, thì

$$\frac{2(\lambda, \alpha)}{(\alpha, \alpha)} = \textit{số nguyên}$$

và

$$S_\alpha(\lambda) = \lambda - \frac{2(\lambda, \alpha)}{(\alpha, \alpha)}\alpha, \quad \alpha \in \sum$$

cũng là một trọng, với S_α là phép biến đổi Weyl tương ứng với nghiệm α. Các trọng $S_\alpha(\lambda)$, $\alpha \in \sum$ đều có cùng bội số.

2. Có tồn tại một trọng duy nhất Λ, gọi là trọng trưởng của biểu diễn ρ, sao mà tất cả các trọng khác của biểu diễn đầu *có dạng*[1].

$$\Lambda - \alpha_{i_1} - \alpha_{i_2} - \dots - \alpha_{i_k}, \ (\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_k} \in \Pi) \tag{2-1}$$

Trọng Λ là một trọng đơn.

II. Các biểu diễn bất khả quy của các đại số Lie nửa đơn có cùng trọng trưởng đều tương đương với nhau.

Ta lưu ý rằng phần thứ nhất của định lý cơ bản này là một sự mở rộng của định lý 2, §2, XIV.

1) Như thế, theo cơ sở nghiệm đơn (II, §8), Λ là trọng cao nhất.

Minh họa

Ta biết rằng đại số Lie $\mathcal{A}_1$ của nhóm SO(3) hay SU(2) là

$$[H_1, E_1] = E_1,\ [H_1, E_{-1}] = -E_{-1},\ [E_1, E_{-1}] = 2H_1. \tag{2-2}$$

Các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie này là $\rho_j \equiv \mathcal{D}^{(j)}$:

$$\rho_j(E_1) = \frac{A_1 + iA_2}{\sqrt{2}},\ \rho_j(E_{-1}) = \frac{A_1 - iA_2}{\sqrt{2}},\ \rho_j(H_1) = A_3, \tag{2-3}$$

với

$$\rho_j(H_1)\psi_\lambda = \lambda(H_1)\psi_\lambda,\quad \lambda(H_1) = m,\ j \geqslant m \geqslant -j,$$

$$\psi_\lambda = e_m = |\, j,\ m>,$$

$$\rho_j(E_1)\,\psi_\lambda = \frac{\sqrt{(j+\lambda+1)(j-\lambda)}}{\sqrt{2}}\,\psi_{\lambda+1},$$

$$\rho_j(E_{-1})\psi_\lambda = \frac{\sqrt{(j-\lambda+1)(j+\lambda)}}{\sqrt{2}}\,\psi_{\lambda-1},$$

$$\rho_j(E_1)\,\psi_j = 0\ ,\ \rho_j(E_{-1})\,\psi_{-j} = 0. \tag{2-4}$$

Đại số con Cartan là $\mathcal{H} = \{H_1\}$. Các nghiệm là 1 và -1 (theo 2-2). Các trọng là $-j \leqslant m \leqslant j$. Trọng trưởng của biểu diễn là j (nguyên hay bán nguyên).

Các biểu diễn cơ sở của các đại số Lie nửa đơn

Giả sử có tồn tại các hàm Λ_i xác định trên đại số con Cartan $\mathcal{H}$, thỏa mãn các điều kiện

$$\frac{2(\Lambda_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)} = \delta_{ij},\ (\alpha_j \in \Pi). \tag{2-5}$$

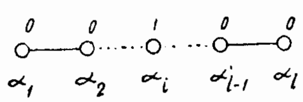
Thế thì, nếu trọng trưởng Λ của biểu diễn bất khả quy ρ của $\mathcal{L}$ — theo định lý trên — thỏa mãn đẳng thức

$$\frac{2(\Lambda, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = k_i\ (k_i: \text{số nguyên, không âm, } \alpha_i \in \Pi), \tag{2-6}$$

thì ta sẽ có

$$\Lambda = \sum k_i \Lambda_i. \tag{2-7}$$

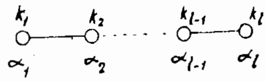
Theo định nghĩa, các biểu diễn bất khả quy $\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_l$, của $\mathcal{L}$, nhận $\Lambda_1, \Lambda_2, \ldots, \Lambda_l$, làm trọng trưởng gọi là các *biểu diễn cơ sở* của $\mathcal{L}$. Thông thường, các biểu diễn cơ sở ký hiệu theo giản đồ Dynkin như sau

ρ_i :


(2-8)

(trong trường hợp cần thiết, thay chấm trắng bằng chấm đen và các quan hệ hạng một bằng quan hệ hạng cao).

Biểu diễn bất khả quy với trọng trưởng Λ ký hiệu như sau

Λ : 

(2-9)

Theo các kết quả về biểu diễn lũy thừa, ta thấy rằng biểu diễn với trọng trưởng Λ là

$$\overset{(\overline{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad})}{\rho_1^{k_1} \otimes \rho_2^{k_1} \otimes \cdots \otimes \rho_l^{k_l}}\,,$$

trong đó $\overset{(-)}{\rho}$ trỏ biểu diễn bất khả quy nằm trong biểu diễn ρ và chứa trọng cao nhất của biểu diễn đó (thường gọi là thành phần bất khả quy lớn nhất của ρ).

Nhánh

Gọi β là một điểm đầu của giản đồ Dynkin của một đại số Lie nửa đơn $\mathcal{L}$ nào đấy. Ta gọi *nhánh* là một dãy điểm có các tính chất sau :

1. Mỗi một điểm của nhánh

$$\beta_1 = \beta\ ,\ \beta_2, \ldots, \beta_k$$

chỉ nối liền với hai điểm bên cạnh, nếu điểm đó không phải là một điểm mút.

2. Mỗi quan hệ giữa hai điểm β_i và β_{i+1} của nhánh chỉ có thể thuộc ba loại sau

và loại cuối cùng này chỉ xảy ra trong trường hợp điểm β_{i+1} (điểm trắng) phải là một điểm cuối β_k của nhánh.

3. Nhánh có tính chất cực đại đối với hai tính chất trên.

Theo định nghĩa trên, ta có các nhánh sau đây (xem hình 15-1 trong đó ta đã sắp xếp lại thứ tự các nghiệm đơn ở các giản đồ Dynkin)

$$\mathcal{A}_l : \begin{cases} 1, 2, \ldots, l\,; \\ l,\ l-1, \ldots, 1\,; \end{cases} \qquad \mathcal{G}_4 : \begin{cases} 1, 3, 4\,; \\ 2, 4\,; \end{cases}$$

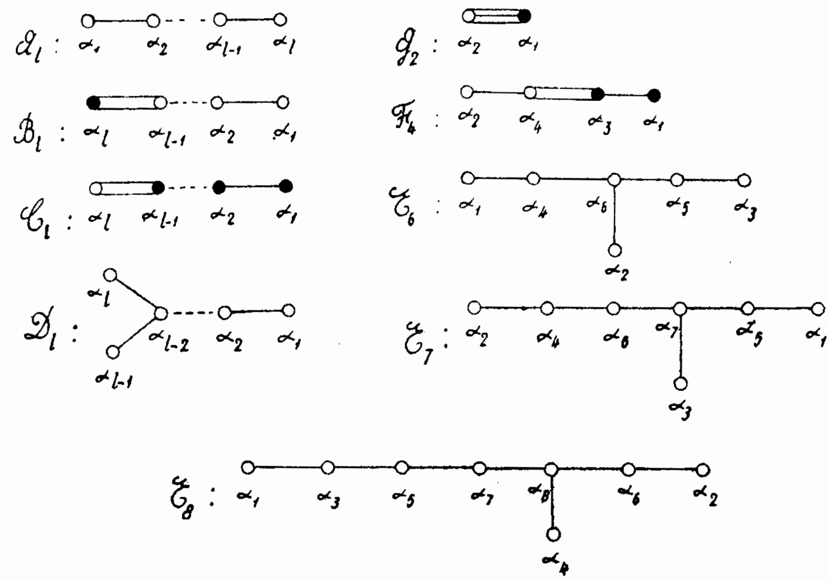
$$\mathcal{B}_l : \begin{cases} l,\ l-1\,; \\ 1, 2, \ldots, l-1\,; \end{cases} \qquad \mathcal{E}_6 : \begin{cases} 1, 4, 6\,; \\ 2, 6\,; \\ 3, 5, 6\,; \end{cases}$$

$$\mathcal{C}_l : \ 1, 2, \ldots, l\,;$$

$$\mathcal{D}_l : \begin{cases} l-1, l-2, \\ l, l-2, \\ 1, 2, \ldots, l-2\,; \end{cases} \qquad \mathcal{E}_7 : \begin{cases} 1, 5, 7\,; \\ 2, 4, 6, 7\,; \\ 3, 7\,; \end{cases}$$

$$\mathcal{E}_8 : \begin{cases} 1, 3, 5, 7, 8\,; \\ 2, 6, 8\,; \\ 4, 8\,; \end{cases}$$

(2-10)



Hình 15-1

Các biểu diễn sơ đẳng của các đại số Lie nửa đơn

Các biểu diễn cơ sở tương ứng với các điểm đầu các nhánh gọi là *biểu diễn sơ đẳng*. Ta có định lý sau

Định lý 2

Giả thiết

$$\beta_1 = \beta, \beta_2, \dots, \beta_k$$

là một nhánh của đại số Lie $\mathcal{L}$. Thế thì

$$\rho_{\beta_r} = \rho_{\beta_1}^{\overset{(\text{—})}{\{r\}}}, \ (r = 1, 2, \dots, k).$$

Theo định lý này, các biểu diễn cơ sở đều có thể quy về các biểu diễn sơ đẳng.

Chứng minh

Gọi $\Lambda = \Lambda_1$ là trọng trưởng của biểu diễn sơ đẳng ρ_{β_1}, tức là, theo định nghĩa (2-5), ta phải có

$$\frac{2(\Lambda, \beta_1)}{(\beta_1, \beta_1)} = 1, \quad \frac{2(\Lambda, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = 0, \ (\alpha_i \in \Pi, \ \alpha_i \neq \beta_1). \tag{2-11}$$

Tiếp theo, vì theo định lý 1, trọng trưởng Λ là một trọng đơn nên ta có

$$\frac{2(\Lambda, \tilde{\alpha})}{(\tilde{\alpha}\ \tilde{\alpha})} = p - q \ . \ (\tilde{\alpha} = \in \Pi),$$

trong đó p và q là hai số nguyên không âm sao mà dãy

$$\Lambda - p\tilde{\alpha}, \ \Lambda - (p-1)\tilde{\alpha}, \dots, \Lambda, \ \Lambda + \tilde{\alpha}, \dots, \Lambda + q\tilde{\alpha}$$

là một dãy trọng của đại số $\mathcal{L}$, tương ứng với biểu diễn cơ sở ρ_{β_1}.

Nhưng vì trọng trưởng $\wedge$ là trọng cao nhất, nên $q = 0$. Từ đó, với $\alpha = \beta_1$, theo (2-11), ta được

$$p = \frac{2(\wedge, \beta_1)}{(\beta_1, \beta_1)} = 1,$$

nghĩa là $\wedge - \beta_1$ là một trọng, còn $\wedge - 2\beta_1$ không phải là một trọng. Nhưng vì

$$\wedge - \beta_1 = S_{\beta_1}(\wedge)$$

nên trọng $\wedge - \beta_1$ cũng là một trọng đơn như trọng $\wedge$ (theo định lý 1). Mặt khác, theo (2-11), với $\tilde{\alpha} = \alpha_i \neq \beta_1$, ta có

$$p = \frac{2(\wedge, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = 0,$$

tức là $\wedge - \alpha_i$ không phải là một trọng. Như thế, sau trọng trưởng $\wedge$ thì trọng $\wedge - \beta_1$ là trọng cao thứ hai của biểu diễn ρ_{β_1}.

Tiếp theo, ta dễ thấy rằng theo định nghĩa của nhánh thì

$$\frac{2(\beta_i, \beta_{i+1})}{(\beta_{i+1}, \beta_{+1})} = -1,$$

từ đó, lại theo (2-11), ta được

$$\frac{2(\wedge - \beta_1, \beta_1)}{(\beta_1, \beta_1)} = 1 - 2 = -1, \quad \frac{2(\wedge - \beta_1, \beta_2)}{(\beta_2, \beta_2)} = 0 - (-1) = 1,$$

$$\frac{2(\wedge - \beta_1, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = 0 - 0 = 0, \ (\alpha_i \in \Pi, \ \alpha_i \neq \beta_1, \beta_2).$$

Từ đó, ta thấy rằng $\wedge - \beta_1 - \alpha_i$ không phải là trọng, $\wedge - \beta_1 - \beta_2$ là một trọng đơn và $\wedge - \beta_1 - 2\beta_2$ không phải là trọng của biểu diễn ρ_{β_1}. Như thế, trọng cao nhất thứ ba của biểu diễn ρ_{β_1} là trọng đơn $\wedge - \beta_1 - \beta_2$. Cứ tiếp tục suy luận như thế, ta sẽ thấy rằng tập hợp các trọng đầu tiên của biểu diễn sơ đẳng ρ_{β_1}, sắp xếp theo thứ tự thấp dần là

$$\wedge, \wedge - \beta_1, \wedge - \beta_1 - \beta_2, \ldots, \wedge - \beta_1 - \beta_2 - \ldots - \beta_k. \tag{2-12}$$

Tiếp theo, phối hợp kết quả này với (1-10), ta thấy rằng trọng trưởng $\overline{\wedge}_r$ của biểu diễn lũy thừa bất khả quy bậc r phản xứng $\rho_{\beta_1}^{\overline{\{r\}}}$ của biểu diễn ρ_{β_1} là

$$\overline{\wedge}_r = \wedge + \wedge - \beta_1 + \ldots + \wedge - \beta_1 - \beta_2 - \ldots - \beta_{r-1},$$

hay

$$\overline{\wedge}_r = r\wedge - (r-1)\beta_1 - (r-2)\beta_2 - \ldots - (r-i+1)\beta_{i-1} -$$
$$- (r-i)\beta_i - (r-i-1)\beta_{i+1} - \ldots - 2\beta_{r-2} - \beta_{r-1}, \ (1 \leqslant r \leqslant k).$$

Từ kết quả này, theo định nghĩa của nhánh, ta được

$$\frac{2(\overline{\wedge}_r, \beta_i)}{(\beta_i, \beta_i)} = -2(r-i+1)\frac{(\beta_{i-1}, \beta_i)}{(\beta_i, \beta_i)} - 2(r-i)\frac{(\beta_i, \beta_i)}{(\beta_i, \beta_i)} -$$
$$-2(r-i-1)\frac{(\beta_{i+1}, \beta_i)}{(\beta_i, \beta_i)} = (r-i+1) - 2(r-i) + (r-i-1) = 0,$$
$$(i = 1, 2, \ldots, r-2),$$

và

$$\frac{2(\bar{\Lambda}_r, \beta_{r-1})}{(\beta_{r-1}, \beta_{r-1})} = 2\,\frac{2(\beta_{r-2}, \beta_{r-1})}{(\beta_{r-1}, \beta_{r-1})} - 2\,\frac{(\beta_{r-1}, \beta_{r-1})}{(\beta_{r-1}, \beta_{r-1})} = 2 - 2 = 0,$$

$$\frac{2(\bar{\Lambda}_r, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = 0 \text{ với } \alpha_i \in \Pi,\ \alpha_i \neq \beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_r,$$

tức là

$$\frac{2(\bar{\Lambda}_r, \beta_r)}{(\beta_r, \beta_r)} = 1,\quad \frac{2(\bar{\Lambda}_r, \alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)} = 0,\ (\alpha_i \neq \beta_r).$$

Theo định nghĩa, trọng $\bar{\Lambda}_r$ chính là trọng trường Λ_r của biểu diễn cơ sở ρ_{β_r}.

Theo định lý này, rõ ràng các biểu diễn cơ sở quy về các biểu diễn sơ đẳng. Phối hợp kết quả này với kết quả trước đây, ta thấy rằng vấn đề xây dựng các biểu diễn bất khả quy của các đại số Lie nửa đơn quy về vấn đề xây dựng các biểu diễn sơ đẳng.

Về đặc biểu biểu diễn bất khả quy của các đại số Lie nửa đơn, Weyl đã chứng minh

Định lý 3 (không chứng minh)

Đặc biểu của biểu diễn bất khả quy của đại số Lie nửa đơn tương ứng với trọng trưởng Λ bằng

$$\chi(\Lambda\,;\varphi) = \frac{\sum\limits_{S\in\mathcal{W}} \det S \exp i\,(S(\Lambda+\delta), \varphi))}{\sum\limits_{S\in\mathcal{W}} \det S \exp i\,(S\,\delta, \varphi)}, \tag{2-13}$$

trong đó $\mathcal{W}$ trỏ nhóm Weyl của $\mathcal{L}$ và

$$\delta = \frac{1}{2}\sum_{\alpha>0}\alpha \tag{2-14}$$

*gọi là **nửa tổng nghiệm dương** của đại số.*

Tất nhiên, chiều biểu diễn bằng (ta chỉ xét những biểu diễn hữu hạn)

$$N = \chi\,(\Lambda\,;0). \tag{2-15}$$

Minh họa

Ta hãy minh họa định lý này cho đại số Lie $\mathcal{A}_1$. Hai nghiệm duy nhất của đại số là 1 và -1, trong đó 1 là nghiệm dương. Thành thử $\delta = 1/2$. Với biểu diễn bất khả quy $\{2j\} = \mathcal{D}^{(j)}$ có trọng trưởng $\Lambda = j$, ta có

$$\Lambda + \delta = j + \frac{1}{2}.$$

Mặt khác, vì trong trường hợp này nhóm Weyl, ngoài phần tử e, chỉ gồm có một phần tử khác là phép phản chiếu qua mặt phẳng thẳng góc với trục thực để biến nghiệm 1 thành -1 nên, theo công thức Weyl, ta được

$$\chi(j\,;\varphi) = \frac{\exp i(j+1/2)\varphi - \exp(-i(j+1/2)\varphi)}{\exp i\,\varphi/2 - \exp(-i\,\varphi/2)} = \frac{\sin\,(j+1/2)\varphi}{\sin\,\varphi/2}.$$

Chiều biểu diễn $N = \chi(j;0) = 2j + 1$.

Các kết quả này đã thu được ở chương VIII.

Toán tử Casimir

Ở chương VII ta đã nói đến khái niệm toán tử Casimir. Ở đây ta sẽ tính biểu thức của toán tử đó theo trọng trưởng của biểu diễn.

Ta chọn cơ sở của đại số Lie là $X_\sigma = \{H_i, E_\alpha, E_{-\alpha}\}$. Thế thì, theo XIV (7-1) (7-2) và (7-7), các phần tử của ma trận g của dạng Kiling sẽ là

$$g^{ik},\ g^{i\alpha} = 0,\ g^{\alpha\beta} = 0 \text{ khi } \alpha + \beta \neq 0,\ g^{\alpha, -\alpha} = 1.$$

Từ đó, theo biểu thức VII, (10-1) ta được

$$C_2 = g^{ik}\rho(H_i)\rho(H_k) = \sum_{\alpha > 0} \rho(E_\alpha)\rho(E_{-\alpha}). \tag{2-16}$$

Tiếp theo, giả sử ψ_Λ là vectơ trọng tương ứng với trọng trưởng Λ của biểu diễn ρ. Nhưng vì (theo XIV, (7-13))

$$\rho(H)\rho(E_\alpha)\psi_\lambda = \rho([H, E_\alpha])\psi_\lambda + \rho(E_\alpha)\rho(H)\psi_\lambda =$$

$$= \rho(\alpha(H)E_\alpha)\psi_\lambda + \rho(E_\alpha)\rho(H)\psi_\lambda = (\lambda + \alpha)(H)\rho(E_\alpha)\psi_\lambda,$$

$$(\text{do } \rho(H)\psi_\lambda = \lambda(H)\psi_\lambda),$$

nên ta thấy rằng nếu $\rho(E_\alpha)\psi_\lambda \neq 0$, thì $\lambda + \alpha$ cũng là một trọng của biểu diễn ρ, tương ứng với vectơ trọng $\rho(E_\alpha)\psi_\lambda$. Còn nếu $\lambda + \alpha$ không phải là trọng thì $\rho(E_\alpha)\psi_\lambda = 0$. Nói riêng khi $\lambda = \Lambda$, ta có ngay $\rho(E_\alpha)\psi_\Lambda = 0$. Từ đó, theo XIV (7-13), ta được

$$\rho(E_\alpha)\rho(E_{-\alpha})\psi_\Lambda = [\rho(E_\alpha), \rho(E_{-\alpha})]\psi_\Lambda = \rho(H_\alpha)\psi_\Lambda = \Lambda(H_\alpha)\psi_\Lambda.$$

Nhân hai vế của (2-16) với ψ_Λ và lưu ý đến kết quả này, ta được

$$C_2\psi_\Lambda = g^{ik}\Lambda_i\Lambda_k\psi_\Lambda + \sum_{\alpha>0} \Lambda(H_\alpha)\psi_\Lambda, \tag{2-17}$$

với

$$\Lambda_i \equiv \Lambda(H_i), \quad \Lambda_k \equiv \Lambda(H_k).$$

Nhưng theo XIV, (7-12), ta có

$$\Lambda(H_\alpha) = (\Lambda, \alpha).$$

Mặt khác, theo XIV, (7-10), ta có

$$g^{ik}\Lambda_i\Lambda_k = (\Lambda, \Lambda).$$

Thành thử, từ (2-17), cuối cùng ta được biểu thức sau của toán tử Casimir C_2

$$C_2 = (\Lambda, \Lambda + 2\delta). \tag{2-18}$$

Theo (2-18), ta thấy rằng trọng trưởng Λ của biểu diễn bất khả quy ρ hoàn toàn xác định biểu thức của toán tử Casimir C_2 của đại số nửa đơn. Nhưng, ngược lại, toán tử Casimir C_2 không đủ để xác định biểu diễn bất khả quy ρ, vì rằng các biểu diễn bất khả quy với trọng trưởng Λ được xác định bởi l điều kiện, chẳng hạn là l giá trị $k_1, k_2, \ldots, k_l$.

Từ đó, người ta đi đến những khái niệm toán tử Casimir mở rộng, xét tập hợp các toán tử

$$C_p = g^{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_p}\,\rho(X_{\alpha_1})\,\rho(X_{\alpha_2})\ldots\rho(X_{\alpha_p}) \tag{2-19}$$

với

$$g^{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_p} = C^{\alpha_1\beta_1}_{\beta_2}\,C^{\alpha_2\beta_2}_{\beta_3}\ldots C^{\alpha_p\beta_p}_{\beta_1}, \quad (p \leqslant l)$$

trong đó $C^{\alpha\beta}_{\gamma}$ là các hằng số cấu trúc của nhóm.

Các tính toán trực tiếp cho thấy rằng các toán tử (2-19) giao hoán với mọi biểu diễn $\rho(X_\alpha)$. Như thế, theo bổ đề Schur thứ nhất, các toán tử đó là bội của đơn vị nếu biểu diễn ρ là bất khả quy. Các toán tử này gọi chung là *toán tử Casimir*. Khi p thay đổi, ta có l toán tử Casimir, về hình thức có khả năng đặc trưng những biểu diễn bất khả quy khác nhau của đại số nửa đơn đang xét. Nhưng thực ra, người ta thấy rằng với những biểu diễn phản bộ với nhau và không tương đương với nhau, thì các toán tử trên lại có thể có những trị riêng như nhau và, như thế, không đủ khả năng phân biệt những biểu diễn phản bộ với nhau đó.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [1], [2], [4], [5], [6], [7].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc toàn chương

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc toàn chương

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương

CHƯƠNG XVI

CÁC ĐẠI SỐ LIE KINH ĐIỂN

Trong các chương XIV và XV, chúng ta đã giới thiệu các khái niệm và định lý quan trọng nhất về sự phân loại và phép biểu diễn các đại số Lie nửa đơn.

Trong chương này, chúng ta sẽ xây dựng một số đại số Lie tương ứng với các ma trận Cartan đã tìm được ở § 9, XIV. Tiếp theo là vận dụng các định lý cơ bản của chương XV để tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của các đại số Lie đó.

Chúng ta sẽ dựng các đại số Lie $\mathcal{A}_l$, $\mathcal{B}_l$, $\mathcal{C}_l$ và $\mathcal{D}_l$, thường gọi là *đại số Lie kinh điển*. Ngoài ra, chúng ta cũng đề cập đến đại số Lie $\mathcal{G}_2$.

§ 1. ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{A}_l$

Ta hãy trở lại đại số Lie $\mathcal{L}$ gồm tất cả các ma trận cấp $n = l + 1$, có vết bằng không, như đã giới thiệu ở § 2, XIV. Sau này ta sẽ chứng minh rằng đấy chính là đại số $\mathcal{A}_l$.

Đại số con Cartan

Ta xét tập hợp tất cả các ma trận chéo có vết bằng không, thuộc tập hợp trên:

$$\mathcal{H} = \{H_\lambda\} = \left\{ \sum_{1}^{n=l+1} \lambda_i E_{ii} \right\}, \sum_{1}^{n=l+1} \lambda_i = 0, \ \lambda_i \in C. \tag{1-1}$$

Tập hợp này là đại số Lie con giao hoán cực đại của đại số Lie đang xét, đó chính là *đại số con Cartan* của đại số (xem § 6, XIV).

Hạng

Hạng của đại số Lie bằng chiều của đại số con Cartan (xem § 6, XIV), tức là bằng số phần tử độc lập của đại số đó. Nhưng do $\sum_{1}^{n} \lambda_i = 0$, $\mathcal{H}$ chỉ có l phần tử độc lập. Như thế, hạng của đại số Lie nói trên bằng l.

Nghiệm

Dựa vào hệ thức VII (6-17) giữa các ma trận E_{ik}, dễ thấy rằng

$$\mathrm{ad}H_\lambda E_{ik} \equiv [H_\lambda, E_{ik}] = (\lambda_i - \lambda_k)E_{ik}, \tag{1-2}$$

tức là ta có hệ nghiệm

$$\sum = \{\alpha\} = \{\lambda_i - \lambda_k\}, (i \neq k = 1, 2, ..., l+1). \tag{1-3}$$

Các vectơ nghiệm tương ứng là

$$E_\alpha = E_{ik} \quad , \quad E_{-\alpha} = E_{ki}, \quad i < k. \tag{1-4}$$

Chiều

Theo định nghĩa, chiều của đại số Lie bằng tổng số nghiệm của đại số đó. Ở đây ta có l nghiệm bằng không và các nghiệm (1-3). Một số phép tính cho thấy rằng chiều của đại số đang xét là

$$\dim \mathcal{L} = l(l+2). \tag{1-5}$$

Nghiệm đơn

Ta có

$$\Pi = \{\lambda_1 - \lambda_2, \lambda_2 - \lambda_3, ..., \lambda_l - \lambda_{l+1}\}, \tag{1-6}$$

các nghiệm đơn là

$$\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2, \quad \alpha_2 = \lambda_2 - \lambda_3, ..., \alpha_{l-1} = \lambda_{l-1} - \lambda_l, \quad \alpha_l = \lambda_l - \lambda_{l+1}, \tag{1-7}$$

vì tất cả các nghiệm (1-3) đều là những tổ hợp tuyến tính với hệ số nguyên cùng dấu (âm hay dương) của các nghiệm (1-7).

Chẳng hạn, ta có

$$\begin{aligned}
&\lambda_1 - \lambda_2 = \alpha_1 \quad , \quad \lambda_1 - \lambda_3 = \alpha_1 + \alpha_2 \quad , \\
&\lambda_1 - \lambda_4 = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \ ,..., \\
&\lambda_1 - \lambda_{l+1} = \alpha_1 + \alpha_2 + ... + \alpha_l \quad , \\
&\lambda_2 - \lambda_3 = \alpha_2 \quad , \quad \lambda_2 - \lambda_4 = \alpha_2 + \alpha_3 \ ,..., \\
&\lambda_2 - \lambda_{l+1} = \alpha_2 + ... + \alpha_l \ ,...
\end{aligned}$$

Như thế, theo tính chất đặc trưng 3. của các nghiệm đơn, ta thấy rằng các nghiệm α_i $(i = 1 ,..., l)$ chính là toàn bộ các nghiệm đơn của đại số.

Dạng Killing trên đại số con Cartan

Theo XIV (7-21) và (1-3), ta được

$$(H_\lambda, H_\mu) = \sum_{\alpha} \alpha(H_\lambda)\alpha(H_\mu) = \sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^{n} (\lambda_i - \lambda_k)(\mu_i - \mu_k) =$$

$$= \sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^{n} (\lambda_i\mu_i + \lambda_k\mu_k - \lambda_i\mu_k - \mu_i\lambda_k) = 2(n-1)\sum_{i=1}^{n} \lambda_i\mu_i -$$

$$- 2\sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^{n} \lambda_i\mu_k = 2(n-1)\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\mu_i - 2\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\sum_{k=1}^{n}\mu_k +$$

$$+ 2\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\mu_i = 2n\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\mu_i ,$$

tức là

$$(H_\lambda H_\mu) = 2n \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mu_i . \tag{1-8}$$

Nói riêng, ta có

$$(H_\lambda , H_\lambda) = 2n \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 . \tag{1-9}$$

Tính chất hình học các nghiệm

Ta hãy tính phần tử H_α tương ứng với nghiệm $\alpha = \lambda_i - \lambda_k$. Muốn thế, ta đặt

$$H_\alpha = \sum^{n} \nu_i E_{ii} , \sum^{n} \nu_i = 0 ,$$

Theo (1-8) và XIV, (7-9) ta được đồng nhất thức

$$2n \sum^{n} \lambda_i \nu_i = \lambda_i - \lambda_k .$$

Từ đó, lưu ý rằng

$$\sum^{n} \nu_i = 0 ,$$

ta được

$$\nu_i = - \nu_k = \frac{1}{2n} , \nu_j = 0 , (j \neq i \neq k) .$$

Như thế, ảnh của nghiệm $\alpha = \lambda_i - \lambda_k$ là

$$H_\alpha = H_{\lambda_i - \lambda_k} = \frac{1}{2n} (E_{ii} - E_{kk}). \tag{1-10}$$

Đặt

$$e_i = \frac{1}{2n} E_{ii} = \begin{bmatrix} 0 & & & & & 0 \\ & \cdot & & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \frac{1}{2n} & & \\ & & & & \cdot & \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix} , \left(\frac{1}{2n} \text{ ở hàng i cột i} \right) \tag{1-11}$$

thỏa mãn các đẳng thức (xem (1-8))

$$(e_i , e_j) = \frac{\delta_{ij}}{2n} . \tag{1-12}$$

Thế thì, theo (1-10), ta được

$$H_{\lambda_i - \lambda_k} = e_i - e_k .$$

Tiếp theo, đồng nhất α với H_α, ta được

$$\lambda_i - \lambda_k = e_i - e_k, \tag{1-14}$$

từ đó, ta có hệ nghiệm đơn

$$\Pi = \{e_1 - e_2, e_2 - e_3, \ldots, e_l - e_{l+1}\}.$$

Từ (1-12), ta có các tính chất hình học sau của các nghiệm của đại số đang xét

$$(e_i - e_k, e_i - e_k) = (\lambda_i - \lambda_k, \lambda_i - \lambda_k) = \frac{1}{n}. \tag{1-15}$$

Nói riêng, với các nghiệm đơn, theo § 9, XIV, ta có các trọng số

$$w_i = (\alpha_i, \alpha_i) = \frac{1}{n}. \tag{1-16}$$

Tính chất đơn

Dựa vào các tính chất hình học (1-15), dễ thấy rằng ma trận Cartan XIV (8-1) và, từ đó, giản đồ Dynkin của đại số đang xét quả thật là thuộc loại $\mathcal{A}_l$ ở hình 14-5. Như thế, đại số Lie các ma trận có vết bằng không là đơn. Mặt khác, theo VII (5-36), ta biết rằng đại số Lie $\mathcal{A}_l$ chính là đại số Lie của nhóm SL(n, C). Như thế, theo các kết quả ở VII, § 7, nhóm SL(n, C) là đơn. Ngoài ra, do [SU(n)], [SL(n, R)] hay [SU(p, q)] = SL(n, C), (p + q = n) (xem VII, § 7), ta kết luận rằng các nhóm SL(n, R), SU(p, q) cũng là đơn. (Ta lưu ý rằng nhóm U(p, q) là không đơn).

Nhóm Weyl

Theo kết quả chung, không gian nghiệm $\widetilde{\mathcal{H}}$ của $\mathcal{A}_l$ có thể nhúng vào trong một không gian Euclid n chiều có cơ sở trực giao gồm các vectơ e_i (xem 1-12). Như thế, mọi vectơ X với khai triển $X = a^k \alpha_k$, $a^k \in R$, có thể viết dưới dạng

$$X = x^k e_k,\ x^k \in R,\ \sum^n x^k = 0 \quad (\text{do } \sum^n \lambda_i = 0).$$

Thế thì, theo XIV, (7-29) và (1-12), ta được

$$S_{e_i - e_k}(X) = X - \frac{2(X, e_i - e_k)}{(e_i - e_k)^2}(e_i - e_k) =$$

$$= x^k e_k - \frac{x^i - x^k}{2}(e_i - e_k) = x_1 e_1 + \ldots + x^k e_i + \ldots + x^i e_k + \ldots + x^n e_n.$$

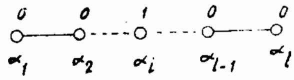
Như thế, tác dụng của các phần tử của nhóm Weyl là hoán vị các hệ số x^k và x^i với nhau: Nhóm Weyl $\mathcal{W}$ của đại số $\mathcal{A}_l$ là nhóm đối xứng S_{l+1}.

Các biểu diễn sơ đẳng và biểu diễn cơ sở

Bây giờ cho một biểu diễn bất khả quy nào đó của đại số Lie $\mathcal{A}_l$, với trọng trưởng Λ. Ta hãy xét trong những điều kiện nào thì biểu diễn này trở nên biểu diễn cơ sở hay sơ đẳng của đại số. Muốn thế, ta khai triển trọng trưởng theo các e_i như sau

$$\Lambda = a^i e_i,\ a^i \in R,\ \sum^n a^i = 0,$$

và xét biểu diễn cơ sở ρ_i (xem XV, (2-8))

ρ_i :


ở đấy trọng trưởng ký hiệu là $\Lambda = \Lambda_i$. Thế thì, theo, XV (2-5) và (1-12) ta được các hệ thức

$$a^1 - a^{i+1} = 1,\ a^j - a^{j+1} = 0,\ j \neq i.$$

Cùng với hệ thức $\sum^n a^i = 0$, các hệ thức trên cho ngay các giá trị sau khi $i = 1$:

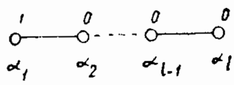
$$a_1 = \frac{1}{n},\ a^2 = a^3 = \ldots = a^n = -\frac{1}{n},$$

tức là

$$\Lambda_1 = \frac{1}{n}(le_1 - e_2 - \ldots - e_n) = \frac{1}{n}(e_1 - e_2 + e_1 - e_3 + \ldots + e_1 - e_n).$$

Từ đó, theo (1-14), ta được trọng trưởng của biểu diễn sơ đẳng thứ nhất $\omega \equiv \rho_1$:

$$\Lambda_1 = \lambda_1,$$

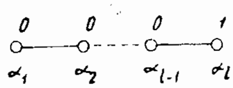
ρ_1 :


Nói chung, các phép tính tương tự như trên cho kết quả

$$\Lambda_i = \lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_i,\ (i = 1, 2, \ldots, l), \tag{1-17}$$

Nói riêng, do $\sum^n \lambda_i = 0$, ta được trọng trưởng của biểu diễn sơ đẳng thứ hai

$$\Lambda_l = -\lambda_{l+1}, \tag{1-18}$$

ρ_l :


Muốn tìm hệ trọng của các biểu diễn cơ sở, ta hãy ứng dụng công thức XV, (2-12) và sử dụng các nhánh XV, (2-10). Chẳng hạn, với các biểu diễn sơ đẳng thứ nhất và thứ hai, ta được các hệ trọng

$$\Lambda_1 = \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{l+1}. \tag{1-19}$$

tương ứng

$$\Lambda_l = -\lambda_{l+1}, -\lambda_l, \ldots, -\lambda_2, -\lambda_1. \tag{1-20}$$

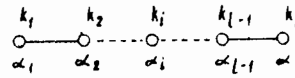
Theo (1-1), rõ ràng các hệ trọng (1-19) và (1-20) tương ứng là các trị riêng của các ma trận H_λ và $-H_\lambda^c$. Như thế, theo XV, (1-5), các biểu diễn sơ đẳng trên chính là biểu diễn đồng nhất và biểu diễn phản bộ của biểu diễn đồng nhất.

Ngoài ra, với đại số $\mathcal{A}_l$ có thể chứng minh rằng các biểu diễn lũy thừa phản xứng là bất khả quy, từ đó, theo định lý 2, XV, ta được

$$\rho_r = \rho_1^{\{r\}},\ (r = 1, \ldots, l). \tag{1-21}$$

Kết quả này cho phép dựng các biểu diễn cơ sở khác nhau ρ_r từ biểu diễn sơ đẳng thứ nhất $\omega = \rho_1$, bằng cách lập các biểu diễn lũy thừa phản xứng.

Cuối cùng, trọng trưởng của biểu diễn bất khả quy XV, (2-9)



theo XV, (2-7) và (1-17), bằng

$$\Lambda = \sum_{1}^{l} m_i \lambda_i, \tag{1-22}$$

với

$$\begin{aligned} m_1 &= k_1 + k_2 + \dots + k_l, \\ m_2 &= \quad\;\; k_2 + \dots + k_l, \\ m_l &= \qquad\qquad\quad k_l, \\ &\quad \cdot \;\; \cdot \;\; \cdot \;\; \cdot \end{aligned} \tag{1-23}$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant m_3 \geqslant \dots \geqslant m_l. \tag{1-24}$$

Các hệ thức cho thấy rằng các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{A}_l$ được phân loại theo các sơ đồ Young $\{m_i\} = \{m_1, m_2, \dots m_l\}$ của nhóm đối xứng, một điều đã biết với các nhóm SU(n).

Toán tử Casimir

Ta giả sử có điều kiện chuẩn hóa sau (cho mọi dại số đơn)

$$(\alpha_{max}, \alpha_{max}) = 2 \tag{1-25}$$

(α_{max} trỏ nghiệm đơn có chuẩn cực đại bằng $\sqrt{2}$).

Thế thì, do tính chất đối xứng giữa các nghiệm đơn của đại số $\mathcal{A}_l$, từ (1-15) ta suy ra các đẳng thức

$$(\lambda_i, \lambda_i) = \frac{1}{n}, \; (\lambda_i, \lambda_k) = -\frac{1}{n}, \; (i \neq k). \tag{1-26}$$

Mặt khác, vì hệ nghiệm dương là $\{\lambda_i - \lambda_k, (i < k)\}$ nên nửa tổng nghiệm dương bằng

$$\delta = \frac{1}{2} \sum_{i<k} (\lambda_i - \lambda_k) = l\lambda_1 + (l-1)\lambda_2 + (l-2)\lambda_3 + \dots + \lambda_l. \tag{1-27}$$

Từ đó, theo XV, (2-18), (1-22) và (1-26), ta được biểu thức sau cho toán tử Casimir của biểu diễn với trọng trưởng Λ:

$$C_2 = \frac{1}{l+1} \sum_{1}^{l+1} m_i^2 + \frac{2}{l+1} \sum_{i<j}^{l+1} m_i m_j + \sum_{i<j}^{l+1} (m_i - m_j), \; (m_{l+1} = 0). \tag{1-28}$$

Đặc biểu

Theo định lý Wely, đặc biểu của biểu diễn bất khả quy có trọng trưởng Λ tính theo công thức XV, (2-13). Nhân tố chủ yếu là nhóm Weyl S_{l+1} của đại số $\mathcal{A}_l$. Vì các phép biến đổi Weyl là những phép phản chiếu (xem cuối XIV, § 7), nên detS sẽ bằng 1 hoặc -1, tùy theo S là một hoán vị chẵn hay lẻ (vì mọi phép biến đổi Weyl có định thức bằng -1 là tương ứng với một chuyển vị). Chẳng hạn với đại số $\mathcal{A}_2$, theo (1-22), (1-3), (1-24) và (1-27) ta có

$$\Lambda + \delta = l_1\lambda_1 + l_2\lambda_2,\ l_1 = m_1 + 2,\ l_2 = m_2 + 1.$$

Ta lập bảng

S	e	(1,2)	(1,3)	(2,3)	(1, 2, 3)	(1, 3, 2)
$S(l_1\lambda_1 + l_2\lambda_2)$	$l_1\lambda_1 + l_2\lambda_2$	$l_2\lambda_1 + l_1\lambda_2$	$l_3\lambda_1 + l_2\lambda_2$	$l_1\lambda_1 + l_3\lambda_2$	$l_2\lambda_1 + l_3\lambda_2$	$l_3\lambda_1 + l_1\lambda_2$
detS	1	-1	-1	-1	1	1

Từ đó, đặt

$$z_j = \exp i\,(\lambda_j, \varphi),\ (j = 1, 2, 3)$$

với

$$z_1z_2z_3 = 1. \tag{1-30}$$

do $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$), theo công thức Weyl XV, (2-13), ta được đặc biểu

$$\chi\,\{m_1, m_2\,;\, z\} = \begin{vmatrix} z_1^{l_1} & z_2^{l_1} & z_3^{l_1} \\ z_1^{l_2} & z_2^{l_2} & z_3^{l_2} \\ z_1^{l_3} & z_2^{l_3} & z_3^{l_3} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} z_1^2 & z_2^2 & z_3^2 \\ z_1 & z_2 & z_3 \\ z_1^0 & z_2^0 & z_3^0 \end{vmatrix},\ l_3 = 0. \tag{1-31}$$

Sự suy rộng cho trường hợp tổng quát là hoàn toàn hình thức. Ta có đặc biểu

$$\chi\,\{m_i\,;\, z\} = \begin{vmatrix} z_1^{l_1} & z_2^{l_1} & \dots & z_{l+1}^{l_1} \\ z_1^{l_2} & z_2^{l_2} & & z_{l+1}^{l_2} \\ \cdot & \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot \\ z_1^{l_{l+1}} & z_2^{l_{l+1}} & \dots & z_{l+1}^{l_{l+1}} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} z_1^{l_1^0} & z_2^{l_1^0} & z_{l+1}^{l_1^0} \\ z_1^{l_2^0} & z_2^{l_2^0} & z_{l+1}^{l_2^0} \\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot \\ z_1^{l_{l+1}^0} & z_2^{l_{l+1}^0} \dots & z_{l+1}^{l_{l+1}^0} \end{vmatrix}, \tag{1-32}$$

với

$$z_i = \exp i\,(\lambda_i, \varphi),\ (i = 1, 2, \dots, l + 1), \tag{1-33}$$

$$z_1z_2 \dots z_{l+1} = 1, \tag{1-34}$$

$$l_1 = m_1 + l,\ l_2 = m_2 + l - 1, \dots, l_{l+1} = m_{l+1} = 0,$$

$$l_1^0 = l,\ l_2^0 = l - 1, \dots, l_{l+1}^0 = 0. \tag{1-35}$$

Một điềm cần lưu ý là do $m_{l+1} = 0$, ta có thể viết

$$\{m_1, m_2, \ldots, m_l\} \equiv \{m_1, m_2, \ldots, m_l, m_{l+1}\}.$$

Tiếp theo, nếu ta thực hiện sự thay thế $m_i \to m_i + m$ (m : nguyên) thì, theo (1-34), tử số của đặc biểu (1-32) sẽ nhân lên với

$$z_1^m z_2^m \ldots z_{l+1}^m = 1$$

Thành thử ta có đẳng thức quen thuộc (xem XIII, (2-4))

$$\{m_1 + m, m_2 + m, \ldots, m_{l+1} + m\} = \{m_1, m_2, \ldots, m_{l+1}\}. \qquad (1\text{-}36)$$

Kết quả này cho phép bỏ những cột có $l + 1$ hàng trong các sơ đồ Young tương ứng với những biểu diễn bất khả quy của đại số $\mathcal{A}_l$.

Chiều biểu diễn

Để tìm các chiều biểu diễn bất khả quy, ta dùng công thức XV, (2-15). Nhưng tại $\varphi = 0$, ta có $z_i = 1$, biểu thức (1-32) sẽ có dạng vô định 0/0. Tính theo quy tắc l'Hopital, ta được

$$N\{m_i\} = \prod_{j<k} (l_j - l_k) : \prod_{j<k} (l_j^\circ - l_k^\circ). \qquad (1\text{-}37)$$

Chẳng hạn, với $l = 2$, ta được

$$N\{m_1, m_2\} = (m_1 - m_2 + 1)(m_2 + 1)(m_1 + 2)/2! =$$
$$= (1 + k_1)(1 + k_2) + (k_1 + k_2 + 1/2). \qquad (1\text{-}38)$$

Với $l = 3$, ta có

$$N\{m_1, m_2, m_3\} = (m_1 - m_2 + 1)(m_2 - m_3 + 1)(m_3 + 1).$$
$$.(m_1 - m_3 + 2)(m_2 + 2).(m_1 + 3)/2!\,3!. \qquad (1\text{-}39)$$

Với $l = 5$, ta có

$$N\{m_1,m_2,m_3,m_4,m_5\} = (m_1-m_2+1)(m_2-m_3+1)(m_3-m_4+1)(m_4-m_5+1)(m_5+1).$$
$$.(m_1 - m_3 + 2)(m_2 - m_4 + 2)(m_3 - m_5 + 2)(m_4 + 2).$$
$$.(m_1 - m_4 + 3)(m_2 - m_5 + 3)(m_3 + 3).$$
$$.(m_1 - m_5 + 4)(m_2 + 4).$$
$$.(m_1 + 5)/2!\,3!\,4!\,5!. \qquad (1\text{-}40)$$

Biểu thức của đặc biểu theo các hàm đối xứng

Ta nhận xét rằng đặc biểu nói trên là một hàm đối xứng của các lượng z_i, $(i = 1, 2, \ldots, l + 1)$. Do đó ta hãy đưa ra các hàm đối xứng

$$a_1 = \sum_{i=1}^{l+1} z_i,\ a_2 = \sum_{i<k}^{l+1} z_i z_k,\ a_3 = \sum_{i<k<j}^{l+1} z_i z_k z_j, \ldots,$$

$$a_{l+1} = z_1 z_2 \ldots z_{l+1} = 1,\ a_i = 0 \text{ khi } i > l + 1, \qquad (1\text{-}41)$$

gọi là các *hàm đối xứng sơ cấp* và các hàm đối xứng

$$h_1 = \sum_{i=1}^{l+1} z_i = a_1,\ h_2 = \sum_{i\leqslant k}^{l+1} z_i z_k,\ h_3 = \sum_{i\leqslant k\leqslant j}^{l+1} z_i z_k z_j, \ldots, \tag{1-42}$$

gọi là các *hàm đối xứng hoàn toàn*. Ta lưu ý rằng $h_i \neq 0$ ngay khi $i > l + 1$. Nếu ký hiệu

$$a_o = 1,\ a_i = 0 \text{ khi } i < 0,\ h_o = 1,\ h_i = 0 \text{ khi } i < 0, \tag{1-43}$$

thì có thể chứng minh các hệ thức sau giữa các hàm đối xứng nói trên

$$h_1 = a_1,\ h_2 = h_1 a_1 - a_2,$$

$$h_3 = h_2 a_1 - h_1 a_2 + a_3 = a_1^3 - 2a_1 a_2 + a_3, \ldots,$$

$$h_r = h_{r-1}a_1 - h_{r-2}a_2 + \ldots + (-1)^r h_o a_r = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_{r-1} & a_r \\ 1 & a_1 & \ldots & a_{r-2} & a_{r-1} \\ 0 & 1 & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & a_1 \end{vmatrix}, \tag{1-44}$$

$$0 \leqslant r \leqslant \infty,$$

và ngược lại :

$$a_r = \begin{vmatrix} h_1 & h_2 & \ldots & h_{r-1} & h_r \\ 1 & h_1 & \ldots & h_{r-2} & h_{r-1} \\ 0 & 1 & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & & 1 & h_1 \end{vmatrix}. \tag{1-45}$$

Vì $a_i = 0$ khi $i > l + 1$, nên ta thấy rằng các hàm $h_{l+2}, h_{l+3}, \ldots$ đều có thể biểu diễn qua các hàm h_i với $i \leqslant l + 1$.

Littlewood đã tính được các kết quả sau của các đặc biểu qua các hàm đối xứng hoàn toàn

$$\chi\{m_i ; z\} = \begin{vmatrix} h_{m_1} & h_{m_1+1} & \ldots & h_{m_1+l-1} \\ h_{m_2-1} & h_{m_2} & \ldots & h_{m_2+l-1} \\ . & . & . & . \\ h_{m_l-(l-1)} & h_{m_l-l+2} & & h_{m_l} \end{vmatrix} \tag{1-46}$$

Nếu thay các hàm h_i bằng các hàm a_i theo công thức (1-44), sau một vài phép tính, ta được công thức

$$\chi\{m_i ; z\} = \begin{vmatrix} a_{p_1} & a_{p_1+1} & \ldots & a_{p_1+r-1} \\ a_{p_2-1} & a_{p_2} & \ldots & a_{p_2+r-2} \\ . & . & . & . \\ a_{p_r-r+1} & a_{p_r-r+2} & \ldots & a_{p_r} \end{vmatrix} \tag{1-47}$$

trong đó $\{p_1, p_2, \ldots, p_r\}$ là sơ đồ Young liên hợp với sơ đồ Young $\{m_1, m_2, \ldots, m_l\}$.

Đặc biểu của các biểu diễn hoàn toàn đối xứng và phản xứng. Từ (1-46) ta thấy ngay rằng

$$\chi\{m_1, 0, \ldots, 0; z\} = \begin{vmatrix} h_{m_1} & h_{m_1+1} & \ldots & h_{m_1+l-1} \\ 0 & 1 & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 1 \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 \ldots & 1 \end{vmatrix}$$

tức là

$$\chi\{m, 0, 0, \ldots, 0; z\} = h_m. \tag{1-48}$$

Tương tự như thế, ta được

$$\chi\{1^r; z\} = \begin{vmatrix} h_1 & h_2 & \ldots & h_r \\ 1 & h_1 & & h_{r-1} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{vmatrix}$$

tức là, theo (1-45)

$$\chi\{1^r; z\} = a_r. \tag{1-49}$$

Hai kết quả đặc biệt (1-47) và (1-49) đóng một vị trí rất quan trọng trong nhiều bài toán về lý thuyết biểu diễn của đại số $\mathcal{A}$.

Đại số Lie $\mathcal{A}_2$

Ta hãy xét một trường hợp riêng rất quan trọng cho sự ứng dụng lý thuyết biểu diễn nhóm vào vật lý các hạt cơ bản. Đó là đại số Lie $\mathcal{A}_2$ hay, tương ứng với đại số đó, nhóm compắc SU(3). Tất nhiên, ở đây chỉ là cụ thể hóa các kiến thức đã trình bày trong lý thuyết biểu diễn chung các đại số nửa đơn $\mathcal{A}_l$.

Trước hết, ta biết rằng các biểu diễn bất khả quy của đại số $\mathcal{A}_2$ hay nhóm SU(3) được đặc trưng bởi các sơ đồ Young

$$\{m_1, m_2, m_3\} = \{m_1 - m_3, m_2 - m_3, m_3 - m_3\} \equiv \{m_1 - m_3, m_2 - m_3\}.$$

Công thức về chiều biểu diễn tính theo (1-38).

Thông thường, người ta hay ký hiệu các biểu diễn bất khả quy của đại số $\mathcal{A}_2$ bởi số chiều của chúng. Để phân biệt các biểu diễn bất khả quy khác nhau có chiều biểu diễn như nhau, có thể dùng thêm một số dấu hiệu nào đó, như dấu sao (cho biểu diễn phản bộ), dấu phẩy v.v... Chẳng hạn, ta có

$$\begin{aligned} \{m_1, m_2\}: \ & \{0,0\} = 1, \ \{1,0\} = 3, \ \{1,1\} = 3^*, \ \{2,0\} = 6, \\ & \{2,2\} = 6^*, \ \{2,1\} = 8, \ \{3,0\} = 10, \ \{3,3\} = 10^*, \\ & \{3,1\} = 15, \ \{3,2\} = 15^*, \ \{4,0\} = 15', \ \{4,4\} = 15'^*, \\ & \{5,0\} = 21, \ \{5,5\} = 21^*, \ \{4,1\} = 24, \ \{4,3\} = 24^*, \\ & \{4,2\} = 27, \ \{6,0\} = 28, \ \{6,6\} = 28^*, \ \{5,1\} = 35, \\ & \{5,4\} = 35^*, \ \{7,0\} = 36, \ \{7,7\} = 36^*, \ \{5,2\} = 42, \\ & \{5,3\} = 42^*, \text{ v v...} \end{aligned} \tag{1-50}$$

Trong trường hợp riêng đại số Lie $\mathcal{A}_2$, do không gian nghiệm có hai chiều, các trọng có thể biểu diễn cụ thể. Ta có các hệ trọng sau

Biểu diễn đồng nhất $\{1\}$: $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, $(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0)$.

Biểu diễn phản bộ $\{1^2\}$: $-\lambda_1, -\lambda_2, -\lambda_3$.

Biểu diễn lũy thừa đối xứng: hệ trọng tính theo XV (1-9),

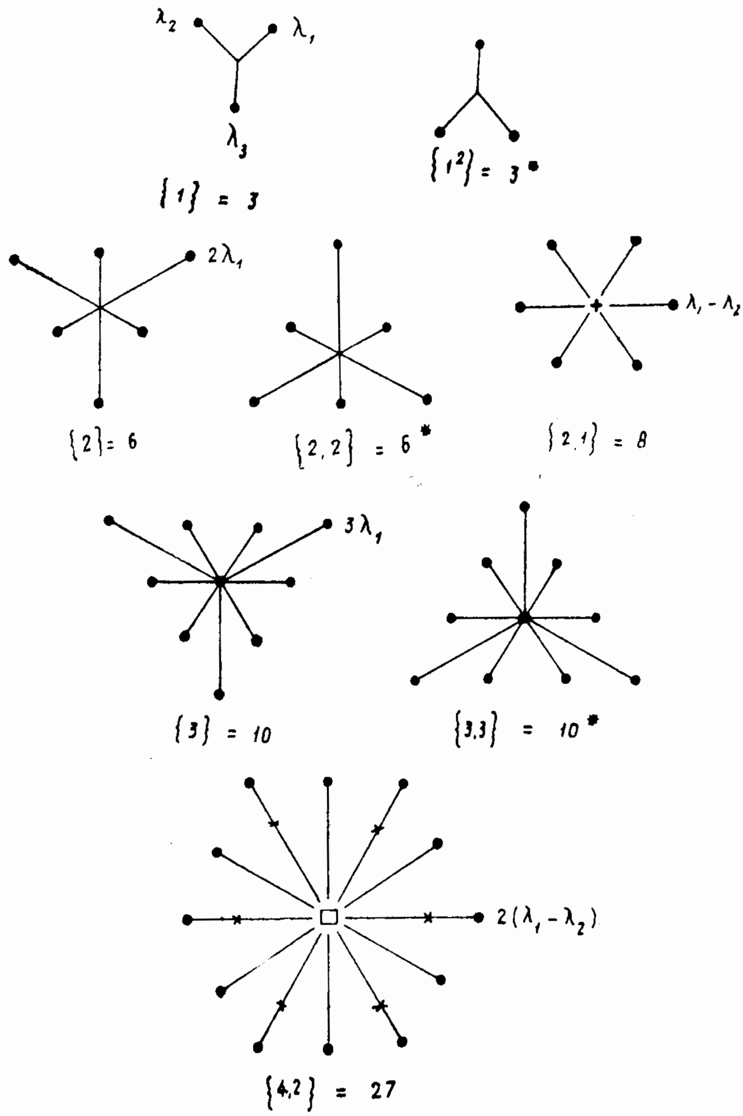
Chẳng hạn : $\{2\}$: $\lambda_i + \lambda_j$, $(i \leqslant j = 1, 2, 3)$.

$\{2^2\} = -\lambda_i - \lambda_j$, $(i \leqslant j = 1, 2, 3)$,

(biểu diễn sau này là bình phương đối xứng của biểu diễn $\{1^2\}$).

Biểu diễn phó $\{2, 1\}$: hệ nghiệm $0, 0, \lambda_i - \lambda_j$.

Các giản đồ thu được gọi là *giản đồ trọng*. Riêng trong trường hợp biểu diễn phó, giản đồ còn gọi là *giản đồ nghiệm*. Trong các giản đồ trọng, dấu ● trỏ trọng đơn, dấu × trỏ trọng kép, còn dấu □ trỏ trọng ba.



Hình 16-1

Tiếp theo, sử dụng phép nhân ngoài các sơ đồ Young, ta có thể lập bảng Clebsh — Gordan sau cho đại số $\mathcal{A}_2$.

Chuỗi Celbsch-Gordan cho nhóm SU(3) ($\mathcal{A}_2$)

Biểu diễn	Cơ sở	3	6	8	10
1	inv	3	6	8	10
3	ψ^i	6 + 3*	10 + 8	15 + 6* + 3	15' + 15
3*	ψ_i	8 + 1	15 + 3	15* + 6 + 3*	24 + 6
6	$\psi^{ij'}$	10 + 8	15' + 15 + 6*	24 + 15* + 6 + 3*	24 + 21 + 15*
6*	$\psi_{ij'}$	15* + 3*	27 + 8 + 1	24* + 15 + 6* + 3	42 + 15 + 3
8	$\widetilde{\Psi}^i_j$	15+6*+3	24 + 15* + 6+3*	27+10+10*+8+8+1	35 + 27 + 10 + 8
10	ψ^{ijk},	15'+15	24 + 21 + 15*	35 + 27 + 10 + 8	35 + 28 + 27 + 10
10*	$\psi_{ijk'}$	24*+6*	42* + 15* + 3*	35* + 27 + 10* + 8	64 + 27 + 8 + 1

(1-51)

Chú thích. Để được giản đơn ta đã thay dấu ⊕ bằng dấu +.

Ta ghi thêm chuỗi Clebsch-Gordan của nhóm SU(4), cần dùng cho các tính toán sau này.

Chuỗi Clebsch-Gordan cho nhóm SU(4) ($\mathcal{A}_3$)

	4	6	10	15
4	6 + 10			
4*	1 + 15			
6	4* + 20'	1 + 15 + 20'		
10	20 + 20'.	15 + 45	20'' + 35 + 45	
10*	4* + 36*	15* + 45*	1 + 15 + 84	
15	4 + 20'* + 36	6 + 10 + 10* + 64	6 + 10 + 64 + 70	1 + 15 + 15* + 20'' + + 45 + 45' + 84
20	35 + 45	36 + 84*	56 + 60 + 84'	20 + 20' + 120* + 140''*
20*	10* + 70*	36* + 84*	4* + 36* + 160*	20* + 20'* + 120*+140''
20'	15 + 20'' + 45	4* + 20'* + 36+ 60	20'* + 36 + 60 + 84'	
20'*	6 + 10' + 64	4*+ 20' + 36* 60*		
20''	20'* + 60	6 + 50 + 64		

với

$$1 = \{0\},\ 4 = \{1\},\ 4^* = \{1, 1, 1\},$$
$$10 = \{2\},\ 6 = \{1, 1\},\ 20 = \{2, 1\},$$
$$20' = \{2, 2\},\ 15 = \{2, 1, 1\} \text{ v.v...}$$

§2. ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{B}_l$

Ta hãy xét đại số Lie trực giao các ma trận $2l + 1$ chiều XIV (2-5). Ta sẽ thấy rằng đây chính là đại số Lie $\mathcal{B}_l$.

Đại số con Cartan

Tương tự như đối với đại số Lie $\mathcal{A}_l$, ở đây đại số con Cartan gồm các ma trận chéo có dạng

$$\mathcal{H} : H_\lambda = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & & & 0 \\ & \lambda_1 & & & & & & & \\ & & \lambda_2 & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & \\ & & & & \lambda_l & & & & \\ & & & & & -\lambda_1 & & & \\ & & & & & & -\lambda_2 & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & & & -\lambda_l \end{bmatrix} \tag{2-1}$$

Hạng

Rõ ràng, không gian các H_λ chỉ có l chiều. Như thế hạng của đại số này là l.

Nghiệm

Ta đặt :

$$E_{\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ik} & 0 \\ 0 & 0 & -E_{ki} \end{bmatrix},\ E_{-\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ki} & 0 \\ 0 & 0 & -E_{ik} \end{bmatrix},\ i < k,$$

$$E_{\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{ik} - E_{ki} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\ E_{-\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -E_{ik} + E_{ki} & 0 \end{bmatrix},\ i < k$$

$$E_{\lambda_i} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e_i \\ -e_i^C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\ E_{-\lambda_i} = \begin{bmatrix} 0 & -e_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ e_i^C & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{2-2}$$

trong đó các ma trận E_{ik} là cấp l còn e_i là những ma trận hàng, l cột, ở đó chỉ có phần tử ở cột thứ i là khác không và bằng 1.

Các tính toán đơn giản cho thấy rằng

$$\mathrm{ad}H_\lambda E_\alpha = \alpha E_\alpha ,$$

với

$$\alpha = \{ \pm \lambda_i \pm \lambda_k , \pm \lambda_i , (i < k = 1 ,.., l)\} ,$$

một điều chứng tỏ rằng các α là các nghiệm của đại số đang xét. Các vectơ nghiệm tương ứng là E_α . Như thế

$$\Sigma = \{ \pm \lambda_i \pm \lambda_k , \pm \lambda_i , (i < k = 1 ,..., l)\} \tag{2-3}$$

Chiều

Bằng cách tính số các vectơ nghiệm (2-2), ta được chiều

$$\dim \mathcal{L} = l(2l + 1) . \tag{2-4}$$

Nghiệm đơn

Nếu đặt

$$\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2 , \alpha_2 = \lambda_2 - \lambda_3 ,..., \alpha_{l-1} = \lambda_{l-1} - \lambda_l , \alpha_l = \lambda_l \tag{2-5}$$

thì dễ thấy rằng tất cả các nghiệm (2-3) đều có thể viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các α_i ($i = 1 ,..., l$) với những hệ số nguyên không âm hoặc không dương. Như thế, các lượng α_i chính là các nghiệm đơn của đại số. Ta có

$$\Pi = \{ \lambda_1 - \lambda_2 , \lambda_2 - \lambda_3 ,..., \lambda_l - \lambda_{l+1} , \lambda_l \} . \tag{2-6}$$

Dạng Killing trên đại số con Cartan

Theo XIV (7-21) và (2-3), dạng Killing trên đại số con Cartan là

$$(H_\lambda , H_\mu) = \sum_{i<k}^{l} (\pm \lambda_i \pm \lambda_k)(\pm \mu_i \pm \mu_k) + \sum_{i}^{l} (\pm \lambda_i)(\pm \mu_i) =$$

$$= \sum_{i<k}^{l} \{(\lambda_i + \lambda_k)(\mu_i + \mu_k) + (\lambda_i - \lambda_k)(\mu_i - \mu_k) +$$

$$+ (-\lambda_i + \lambda_k)(-\mu_i + \mu_k) + (-\lambda_i - \lambda_k)(-\mu_i - \mu_k)\} + \sum_{i} \{ \lambda_i \mu_i +$$

$$+ (-\lambda_i)(-\mu_i)\} = 2 \sum_{i<k}^{l} (\lambda_i + \lambda_k)(\mu_i + \mu_k) + (\lambda_i - \lambda_k)(\mu_i - \mu_k) +$$

$$+ 2 \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i = 2 \sum_{i<k}^{l} (\lambda_i \mu_i + \lambda_i \mu_k + \lambda_k \mu_i + \lambda_k \mu_k + \lambda_i \mu_i -$$

$$- \lambda_i \mu_k - \lambda_k \mu_i + \lambda_k \mu_k) + 2 \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i = 4 \sum_{i<k}^{l} (\lambda_i \mu_i + \lambda_k \mu_k) +$$

$$+ 2 \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i = 4(l - 1) \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i + 2 \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i = (4l - 2) \sum_{i}^{l} \lambda_i \mu_i ,$$

tức là

$$(H_\lambda, H_\mu) = (4l - 2) \sum_{1}^{l} \lambda_i \mu_i . \tag{2-7}$$

Nói riêng, ta có

$$(H_\lambda, H_\lambda) = (4l - 2) \sum_{1}^{l} \lambda_i^2 . \tag{2-8}$$

Tính chất hình học các nghiệm.

Ta hãy tính phần tử H_α, tương ứng với nghiệm α. Đặt

$$H_\alpha = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & & & & 0 \\ & v_1 & & & & & & & & \\ & & v_2 & & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & v_l & & & & & \\ & & & & & -v_1 & & & & \\ & & & & & & -v_2 & & & \\ & & & & & & & \ddots & & \\ 0 & & & & & & & & & -v_l \end{bmatrix}$$

thì, từ đẳng thức (2-7), ta được

$$(4l - 2) \sum \lambda_i v_i = \alpha = \lambda_i + \lambda_k ,$$

từ đó, đồng nhất hai vế, ta được

$$v_i = v_k = \frac{1}{4l - 2} , \; v_l = 0, \text{ khi } l \neq i, k ,$$

tức là

$$H_{\lambda_i + \lambda_k} = \frac{1}{4l - 2} (E_i + E_k) ,$$

với

$$E_i = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & -E_{ii} \end{bmatrix} .$$

Tương tự như thế, ta tính được

$$H_{\pm\lambda_i \pm \lambda_k} = \frac{1}{4l - 2} (\pm E_i \pm E_k) ,$$

$$H_{\pm\lambda_i} = \frac{1}{4l - 2} (\pm E_i) .$$

Đến đây, đồng nhất $\alpha \equiv H_\alpha$ và đặt

$$e_i = \frac{1}{4l-2} E_i,$$

thỏa mãn hệ thức

$$(e_i, e_k) = \frac{\delta_{ik}}{4l-2}, \tag{2-9}$$

(đẳng thức này suy từ (2-7)). Thế thì hệ nghiệm đơn (2-6) có dạng

$$\Pi = \{e_1 - e_2, e_2 - e_3, \ldots, e_{l-1} - e_l, e_l\}, \tag{2-10}$$

từ đó ta được các tính chất hình học sau của các nghiệm

$$s_{12} = 1, \quad s_{23} = 1, \ldots, s_{l-2, l-1} = 1, \; s_{l-1, l} = 2, \tag{2-11}$$

các s_{ik} khác đều bằng không, và

$$w_1 = w_2 = \ldots = w_{l-1} = 2 w_l = \frac{1}{2l-1}. \tag{2-12}$$

Tính chất đơn

Dựa vào các tính chất hình học (2-11), ta có thể tính được ma trận Cartan của đại số và, từ đó vẽ giản đồ Dynkin. Các kết quả cho phép kết luận rằng đại số này chính là đại số $\mathcal{B}_l$ ở hình (14-5). Như thế là ta đã xây dựng được cụ thể đại số đơn $\mathcal{B}_l$.

Nhưng do đại số trên là cái khuếch phức của đại số Lie của nhóm $SO(2l+1)$, cũng như của các nhóm $SO(p, q)$, $(p + q = 2l + 1)$, nên rõ ràng các nhóm $SO(p, q)$ đều là đơn.

Nhóm Weyl

Ta hãy chọn cơ sở của không gian nghiệm gồm các vectơ e_i ở trên. Thế thì với mọi phần tử

$$X = x^i e_i,$$

theo (2-9), ta có

$$S_{\pm\lambda_i \pm \lambda_k}(X) = X - \frac{2(x^j e_j, \pm\lambda_i \pm \lambda_k)}{(\pm\lambda_i \pm \lambda_k)^2}(\pm\lambda_i \pm \lambda_k) =$$

$$= x^j e_j - \frac{2x^j(e_j, \pm e_i \pm e_k)}{(\pm e_i \pm e_k)^2}(\pm e_i \pm e_k) = x^j e_j - \frac{2(\pm x^i \pm x^k)}{2}(\pm e_i \pm e_k) =$$

$$= x^1 e_1 + \ldots + x^i e_i + \ldots + x^k e_k + \ldots + x^l e_l -$$

$$- (x^i e_i \pm x^i e_k \pm x^k e_i + x^k e_k) = x^1 e_1 + \ldots \mp x^i e_k + \ldots \mp x^k e_i + \ldots + x^l e_l.$$

Tương tự như thế ta được

$$S_{\pm\lambda_i}(X) = x^j e_j - \frac{2x^j(e_j, \pm e_i)}{(\pm e_i)^2}(\pm e_i) =$$

$$= x^1 e_1 + \ldots + x^i e_i + \ldots + x^l e_l - 2x^i e_i =$$

$$= x^1 e_1 + \ldots - x^i e_i + \ldots + x^l e_l.$$

Như thế nhóm Weyl của đại số $\mathcal{B}_l$ gồm các phép hoán vị của nhóm S_l, kèm theo phép đổi dấu một số lần tùy ý.

Các biểu diễn cơ sở và sơ đẳng

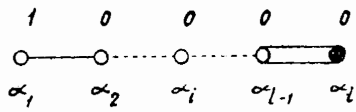
Ta hãy khai triển trọng trưởng

$$\Lambda = a^i e_i$$

của biểu diễn sơ đẳng thứ nhất, tương ứng với nhánh $(1, 2, \dots, l-1)$ (xem XV (2-10)). Điều kiện XV, (2-5) cho ngay kết quả

$$a^1 - a^2 = 1 \quad , \quad a^2 = a^3 = \dots = 2a^l = 0 \; .$$

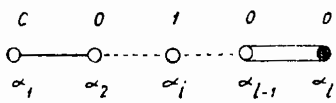
Như thế biểu diễn sơ đẳng thứ nhất $\omega = \rho_1$



có trọng trưởng

$$\Lambda_1 = \lambda_1 \; . \tag{2-13}$$

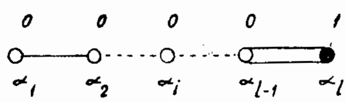
Tương tự như thế, trọng trưởng của các biểu diễn cơ sở



bằng

$$\Lambda_i = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_i \quad , \quad (i = l, \dots l-1) \; . \tag{2-14}$$

Còn trọng trưởng của biểu diễn sơ đẳng thứ hai



bằng

$$\Lambda_l = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_l) \; . \tag{2-15}$$

Sử dụng các nhánh XV (2-10) và công thức XV (2-12), dễ thấy rằng hệ trọng của biểu diễn sơ đẳng thứ nhất với $\Lambda_1 = \lambda_1$ là

$$\pm\lambda_1, \pm\lambda_2, \dots, \pm\lambda_l, 0 \; .$$

So sánh kết quả này với dạng của ma trận (2-1), ta kết luận rằng biểu diễn sơ đẳng thứ nhất chính là biểu diễn đồng nhất.

Ta lưu ý rằng, với đại số Lie $\mathcal{B}_l$, các ma trận H_λ và $-H^C_\lambda$ đều như nhau, chỉ sai khác về thứ tự các phần tử trên đường chéo chính. Từ đó các biểu diễn đồng nhất và phản bộ với biểu diễn đồng nhất là tương đương với nhau. Điều này, trước đây chúng ta đã lưu ý tới (xem § 5, XI).

Biểu diễn sơ đẳng thứ hai với trọng trưởng (2-15) chính là biểu diễn lưỡng trị của nhóm quay (theo tính chất đa liên của không gian nhóm của nhóm). Biểu diễn này còn gọi là biểu diễn spinơ, ký hiệu là σ. Dựa vào tính chất tương đương giữa các biểu diễn bất khả quy có cùng trọng trưởng, (xem định lý 1, § 2, chương XV và XV, (1-10)) có thể chứng tỏ được các đẳng thức sau

$$\overset{(-)}{\sigma^2} = \rho_1^{\{l\}} , \qquad (2\text{-}16)$$

$$\overset{(-)}{\sigma}{}^{\{2\}} = \rho_1^{\{l-1\}} . \qquad (2\text{-}17)$$

Cuối cùng, trọng trưởng của biểu diễn bất khả quy XV (2-9) có dạng

$$\Lambda = \sum m_i \lambda_i ,$$

với

$$m_1 = k_1 + k_2 + \ldots + k_{l-1} + k_l/2 ,$$
$$m_2 = k_2 + \ldots + k_{l-1} + k_l/2 , \ldots$$
$$m_{l-1} = k_{l-1} + k_l/2 ,$$
$$m_l = k_l/2 \qquad (2\text{-}18)$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \ldots \geqslant m_l . \qquad (2\text{-}19)$$

Theo (2-19), ta thấy các biểu diễn bất khả quy của đại số $\mathcal{B}_l$ với k_l chẵn, được đặc trưng bởi những sơ đồ Young l hàng. Theo (2-7), các biểu diễn này là đơn trị. Các biểu diễn spinơ của đại số khi k lẻ sẽ trình bày sau.

Toán tử Casimir

Theo (2-3), ta có nửa tổng nghiệm dương

$$\delta = \frac{1}{2}\left[(2l-1)\lambda_1 + (2l-3)\lambda_2 + \ldots + \lambda_l\right] . \qquad (2\text{-}20)$$

Từ đó, với điều kiện chuẩn hóa sau suy từ (1-25)

$$(\lambda_i , \lambda_k) = \delta_{ik} , \qquad (2\text{-}21)$$

từ biểu thức XV (2-18) và các đẳng thức (2-9), ta được biểu thức sau của toán tử Casimir.

$$C_2 = m_1(m_1 + 2l - 1) + m_2(m_2 + 2l - 3) + \ldots + m_l(m_l + 1) . \qquad (2\text{-}22)$$

Đặc biểu

Trước hết ta tính các đặc biểu biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{B}_2$. Như đã thấy ở trên, nhóm Weyl của đại số Lie $\mathcal{B}_l$ gồm các phần tử của nhóm đối xứng S_l, kèm theo một phép đổi dấu tùy ý các hệ số. Thành thử, với đại số Lie $\mathcal{B}_2$, ta thấy rằng det S = 1 khi có phép biến đổi đơn vị e và không có phép đổi dấu hay có một phép đổi dấu một số chẵn hệ số, hoặc khi có phép hoán vị (1, 2) kèm theo một phép đổi dấu một số lẻ hệ số. Trong các trường khác, thì det S = − 1. Thành thử đặt

$$\psi_1 = (\lambda_1 , \varphi) \quad , \quad \psi_2 = (\lambda_2 , \varphi) ,$$

ta có biểu thức sau của tử số của đặc biểu XV, (2-13) :

$$\sum_S \det S \operatorname{expi}(S(\Lambda + \delta), \varphi) = \sum_S \det S \operatorname{expi}(S(l_1\psi_1 + l_2\psi_2)) =$$
$$= \operatorname{expi}(l_1\psi_1 + l_2\psi_2) - \operatorname{expi}(-l_1\psi_1 + l_2\psi_2) -$$
$$- \operatorname{expi}(l_1\psi_1 + l_2\psi_2) - \operatorname{expi}(-l_1\psi_1 - l_2\psi_2) +$$
$$+ \operatorname{expi}(-l_2\psi_1 - l_1\psi_2) + \operatorname{expi}(l_2\psi_1 - l_1\psi_2) +$$
$$+ \operatorname{expi}(-l_2\psi_1 + l_1\psi_2) - \operatorname{expi}(l_2\psi_1 + l_1\psi_2),$$

với

$$l_1 = m_1 + \frac{3}{2},\ l_2 = m_2 + \frac{1}{2}.$$

Biểu thức trên có thể viết dưới dạng định thức sau (sai khác một hệ số không đổi)

$$\begin{vmatrix} \exp i(l_1\psi_1) - \exp i(-l_1\psi_1) & \exp i(l_1\psi_2) - \exp i(-l_1\psi_2) \\ \exp i(l_2\psi_1) - \exp i(-l_2\psi_1) & \exp i(l_2\psi_2) - \exp i(-l_2\psi_2) \end{vmatrix}$$

$$\sim \begin{vmatrix} \sin l_1\psi_1 & \sin l_1\psi_2 \\ \sin l_2\psi_1 & \sin l_2\psi_2 \end{vmatrix},$$

Thành thử, đặc biểu của biểu diễn bất khả quy $[m_i]$ với trọng trưởng Λ của đại số Lie $\mathcal{B}_2$ có dạng

$$\chi[m_1,\ m_2;\ \psi] = \begin{vmatrix} \sin l_1\psi_1 & \sin l_1\psi_2 \\ \sin l_2\psi_1 & \sin l_2\psi_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} \sin l_1^o\psi_1 & \sin l_1^o\psi_2 \\ \sin l_2^o\psi_1 & \sin l_2^o\psi_2 \end{vmatrix} \qquad (2\text{-}23)$$

với

$$l_1^o = \frac{3}{2},\ l_2^o = \frac{1}{2}.$$

Sự suy rộng cho trường hợp chung là hoàn toàn hình thức. Ta có đặc biểu

$$\chi[m_i;\ \psi] = \begin{vmatrix} \sin l_1\psi_1 & \sin l_1\psi_2 \ldots & \sin l_1\psi_l \\ \sin l_2\psi_1 & \sin l_2\psi_2 \ldots & \sin l_2\psi_l \\ \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot \\ \sin l_l\psi_1 & \sin l_l\psi_2 \ldots & \sin l_l\psi_l \end{vmatrix} :$$

$$\begin{vmatrix} \sin l_1^o\psi_1 & \sin l_1^o\psi_2 \ldots & \sin l_1^o\psi_l \\ \sin l_2^o\psi_1 & \sin l_2^o\psi_2 \ldots & \sin l_2^o\psi_l \\ \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot \\ \sin l_l^o\psi_1 & \sin l_l^o\psi_2 \ldots & \sin l_l^o\psi_l \end{vmatrix}, \qquad (2\text{-}24)$$

với

$$l_1 = m_1 + l - \frac{1}{2},\ l_2 = m_2 + l - \frac{3}{2}, \ldots, l_l = m_l + \frac{1}{2},$$

$$l_1^o = l - \frac{1}{2},\ l_2^o = l - \frac{3}{2}, \ldots, l_l^o = \frac{1}{2}. \qquad (2\text{-}25)$$

Chiều biểu diễn

$$N[m_1,\ m_2, \ldots, m_l] = P(l_1,\ l_2, \ldots, l_l) : P(l_1^o,\ l_2^o, \ldots, l_l^o),$$

với

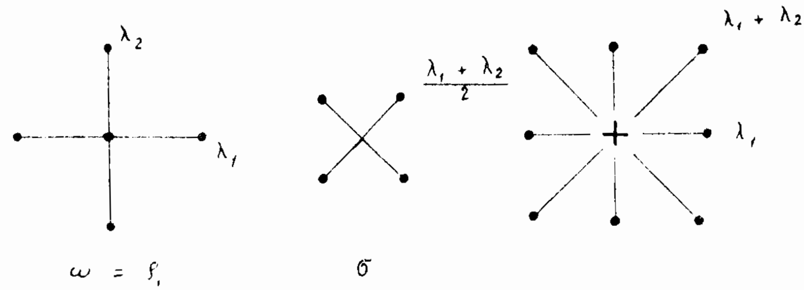
$$P(l_1,\ l_2, \ldots, l_l) = \prod_i l_i \prod_{i<j} (l_i - l_j)(l_i + l_j). \qquad (2\text{-}26)$$

Chẳng hạn :

$$N[m_1, m_1] = \frac{1}{6}(k_1 + 1)(k_2 + 1)(2k_1 + k_2 + 3)(k_1 + k_2 + 2). \qquad (2\text{-}27)$$

$$m_1 = k_1 + \frac{k_2}{2}, \quad m_2 = \frac{k_2}{2}.$$

Sau đây, ta vẽ một số giản đồ trọng của đại số Lie $\mathcal{B}_2$ (các biểu diễn tương ứng là $[1,0]$, $\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$, $[1, 1]$).



Hình 16-2

Biểu diễn thứ ba chính là biểu diễn phó.

Về chuỗi Clebsch-Gordan của đại số Lie $\mathcal{B}_2$, xem biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{C}_2$ (do hai đại số này đẳng cấu với nhau).

§3. ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{D}_l$

Ta hãy xét đại số Lie các ma trận trực giao $2l$ chiều XIV, (2-6). Sau đây ta sẽ thấy rằng đây chính là đại số Lie $\mathcal{D}_l$.

Đại số con Cartan

Đại số con Cartan của đại số là

$$\mathcal{H} : H\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & \lambda_l & & & \\ & & & -\lambda_1 & & \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & -\lambda_l \end{bmatrix} \qquad (3\text{-}1)$$

Hạng

Rõ ràng hạng của đại số là l.

Nghiệm

Ta đặt

$$E_{\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} E_{ik} & 0 \\ 0 & -E_{ki} \end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} E_{ki} & 0 \\ 0 & -E_{ik} \end{bmatrix}, \quad i < k,$$

$$E_{\lambda_i + \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & E_{ik} - E_{ki} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i - \lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -E_{ik} + E_{ki} & 0 \end{bmatrix}, \quad i < k. \qquad (3\text{-}2)$$

Thế thì, ta được

$$\mathrm{ad}H_\lambda E_\alpha = \alpha E_\alpha,$$

với

$$\alpha = \pm\lambda_i \pm \lambda_k, \quad (i < k = l, 2, \ldots, l).$$

Như thế

$$\sum = \{\alpha\} = \{\pm\lambda_i \pm \lambda_k, \ (i < k = 1, \ldots, l)\}, \tag{3-3}$$

các vectơ nghiệm là các vectơ (3-2).

Chiều

$$\mathrm{Dim}\,\mathcal{L} = l(2l - 1). \tag{3-4}$$

Nghiệm đơn

$$\Pi = \{\lambda_1 - \lambda_2, \ \lambda_2 - \lambda_3, \ldots, \ \lambda_{l-1} - \lambda_l, \ \lambda_{l-1} + \lambda_l\}. \tag{3-5}$$

Dạng Killing trên đại số con Cartan

$$(H_\lambda, H_\mu) = \sum_{i<k} (\pm\lambda_i + \lambda_k)(\pm\mu_i \pm \mu_k) =$$

$$= 2\sum_{i<k} (\lambda_i + \lambda_k)(\mu_i + \mu_k) + (\lambda_i - \lambda_k)(\mu_i - \mu_k) =$$

$$= 4\sum_{i<k} (\lambda_i\mu_i + \lambda_k\mu_k),$$

tức là

$$(H_\lambda, H_\mu) = (4l - 4)\sum_{i=1}^{l} \lambda_i\mu_i. \tag{3-6}$$

Nói riêng, ta có

$$(H_\lambda, H_\lambda) = (4l - 4)\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2. \tag{3-7}$$

Tính chất hình học các nghiệm

Từ công thức (3-6), ta tính được ảnh

$$H_{\pm\lambda_i \pm\lambda_k} = H_\alpha = \frac{1}{4l-4}(\pm F_i \pm F_k),$$

với

$$F_i = \begin{bmatrix} E_{ii} & 0 \\ 0 & -E_{ii} \end{bmatrix}.$$

Từ đó, phép đồng nhất $\alpha \equiv H_\alpha$ cho

$$\pm\lambda_i \pm\lambda_k = \pm e_i \pm e_k, \tag{3-8}$$

với

$$e_i = \frac{1}{4l-4} F_i,$$

$$(e_i, e_k) = \frac{\delta_{ik}}{4l-4}. \tag{3-9}$$

và ta được hệ nghiệm đơn có dạng

$$\Pi = \{e_1 - e_2, e_2 - e_3, \ldots, e_{l-1} - e_l, e_{l-1} + e_l\}. \tag{3-10}$$

Từ các kết quả trên ta được các tính chất hình học sau

$$s_{12} = s_{23} = \ldots = s_{l-3, l-2} = 1 \ , \ s_{l-2, l-1} = s_{l-2, l} = 1 \ , \tag{3-11}$$

còn tất cả các quan hệ s_{ij} khác đều bằng không, và

$$w_i = \frac{1}{4l-4} \ , (i = 1, \ldots, l). \tag{3-12}$$

Tính chất đơn

Từ các kết quả trên về các tính chất hình học, ta dễ thấy rằng đại số đang xét chính là đại số đơn $\mathcal{D}_l$. Từ đó các nhóm SO(p, q), $(p + q = 2l)$, đều là đơn.

Nhóm Weyl

Theo (3-9), với mọi nghiệm

$$X = x^j e_j$$

ta có

$$S_{\pm\lambda_i \pm \lambda_k}(X) = x^j e_j - \frac{2x^j (e_j, \pm e_i \pm e_k)}{(\pm e_i \pm e_k)^2} (\pm e_i \pm e_k) =$$

$$= x^1 e_1 + \ldots + x^i e_i + \ldots + x^k e_k + \ldots + x^l e_l -$$

$$- (x^i e_i \pm x^i e_k \pm x^k e_i + x^k e_k) =$$

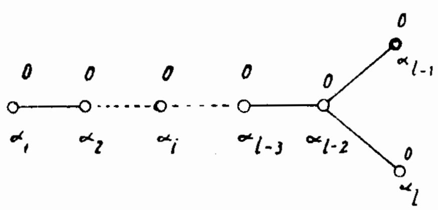
$$= x^1 e_1 + \ldots \mp x^k e_i + \ldots \mp x^i e_k + \ldots + x^l e_l \ ,$$

tức là nhóm Weyl của đại số $\mathcal{D}_l$ gồm các hoán vị của nhóm S_l, kèm theo các phép đổi dấu các hệ số một số chẵn lần tùy ý.

Các biểu diễn cơ sở và sơ đẳng

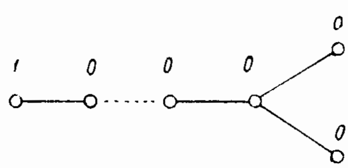
Cách tìm các biểu diễn cơ sở và sơ đẳng hoàn toàn tương tự như đối với hai trường hợp trên. Ta có các kết quả sau.

Biểu diễn ρ_i:



$$\Lambda_i = \lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_i \ , (i = 1, \ldots, l-2). \tag{3-13}$$

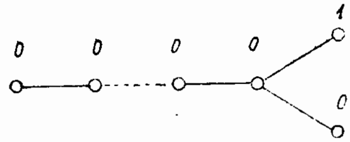
Biểu diễn sơ đẳng thứ nhất (biểu diễn đồng nhất) $\omega \equiv \rho_1$;



$$\Lambda_1 = \lambda_1 \tag{3-14}$$

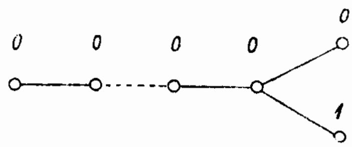
Biểu diễn này tương đương với biểu diễn phản bộ của nó.

Biểu diễn sơ đẳng thứ hai σ_1 (xem các nhánh ở XV):



$$\Lambda_{l-1} = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_{l-1} - \lambda_l). \tag{3-15}$$

Biểu diễn sơ đẳng thứ ba σ_2:



$$\Lambda_l = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_{l-1} + \lambda_l) \tag{3-16}$$

Hai biểu diễn sơ đẳng cuối cùng là các biểu diễn lưỡng trị của đại số (các nhóm quay là đa liên!).

Dựa vào tính tương đương giữa những biểu diễn bất khả quy có cùng trọng trưởng, có thể chứng minh rằng

$$\overset{(\text{———})}{\sigma_1 \otimes \sigma_2} = \rho_1^{\{l-1\}}, \tag{3-17}$$

$$\overset{(-)}{\sigma_1^2} \oplus \overset{(-)}{\sigma_2^2} = \rho_1^{\{l\}}, \tag{3-18}$$

$$\overset{(\text{——})}{\sigma_1^{\{2\}}} = \overset{(\text{——})}{\sigma_2^{\{2\}}} = \rho_1^{\{l-2\}}. \tag{3-19}$$

Trọng trưởng của biểu diễn XV (2-9) có dạng

$$\Lambda = \sum m_i \lambda_i$$

với

$$\begin{aligned}
m_1 &= k_1 + k_2 + \ldots + k_{l-1}/2 + k_l/2,\\
m_2 &= k_2 + \ldots + k_{l-1}/2 + k_l/2,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
m_{l-2} &= k_{l-2},\\
m_{l-1} &= k_{l-1}/2 + k_l/2,\\
m_l &= k_{l-1}/2 - k_l/2.
\end{aligned} \tag{3-20}$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \ldots \geqslant m_{l-1} \geqslant 0, \; m_{l-1} \geqslant |m_l|. \tag{3-21}$$

Với $\mathcal{D}_4$, ký hiệu $\rho_1 = \sigma_3$, ta có đẳng thức

$$\sigma_1^{\{2\}} = \sigma_2^{\{2\}} = \sigma_3^{\{2\}} = \rho_{\lambda_2 - \lambda_3}. \tag{3-22}$$

Toán tử Casimir

Theo (3-3), ta có

$$\delta = (l-1)\,\lambda_1 + (l-2)\,\lambda_2 + \ldots + \lambda_{l-1}. \tag{3-23}$$

Từ đó, với điều kiện chuẩn hóa sau suy từ (1-25)

$$(\lambda_i, \lambda_k) = \delta_{ik}, \tag{3-24}$$

ta được

$$C_2 = m_1\,[m_1 + 2\,(l-1)] + m_2\,[m_2 + 2\,(l-2)] + \ldots + m_l^2. \tag{3-25}$$

Đặc biểu

Dựa vào tính chất của nhóm Weyl của đại số, tương tự như trên ta tính được đặc biểu

$$\underset{(m_l = 0)}{\chi\,[m_i\,;\ \psi]} = \frac{|\cos(l\psi)|}{|\cos(l^\circ\psi)|}$$

với

$$|\cos(l\psi)| = \begin{vmatrix} \cos l_1\psi_1 & \cos l_1\psi_2 \ldots & \cos l_1\psi_l \\ \cos l_2\psi_1 & \cos l_2\psi_2 \ldots & \cos l_2\psi_l \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \cos l_l\psi_1 & \cos l_l\psi_2 \ldots & \cos l_l\psi_l \end{vmatrix} \tag{3-26}$$

$$l_1 = m_1 + l - 1,\ l_2 = m_2 + l - 2, \ldots,\ l_{l-1} = m_{l-1} + 1,$$

$$l^\circ = l - 1,\ l_2^\circ = l - 2, \ldots\ l_{l-1}^\circ = 1,\ l_l^\circ = 0. \tag{3-27}$$

Trong trường hợp $m_l \neq 0$ ($m_l = l_l$) biểu diễn với trọng trưởng $\wedge$ phân thành hai phần bất khả quy tương ứng có các đặc biểu sau :

$$\chi\,[m_i\,;\,\psi] = \chi_+\,[m_i\,;\,\psi] + \chi_-\,[m_i\,;\,\psi],\quad m_l \neq 0$$

$$\chi_{\pm}\,[m_i;\ \psi] = \frac{|\cos(l\psi)| \pm |\sin(l\psi)|}{|\cos(l^\circ\psi)|} \tag{3-28}$$

Chiều biểu diễn

Với $m_l = 0$, ta có

$$N\,[m_i] = P\,(l_1, l_2, \ldots, l_l) : P\,(l_1^\circ, l_2^\circ, \ldots, l_l^\circ)$$

với

$$P(l_1, l_2, \ldots, l_l) = \prod_{i<j} (l_i^2 - l_j^2). \tag{3-29}$$

Với $m_l \neq 0$, ($l_l = m_l$), các chiều biểu diễn χ_+ và χ_- đều bằng nhau và bằng $\frac{1}{2}\,N\,[m_i]$.

Biểu diễn spino các đại số Lie $\mathcal{B}_l$ và $\mathcal{D}_l$

Trong phần này sẽ xây dựng cụ thể các biểu diễn spino của các đại số Lie $\mathcal{B}_l$ và $\mathcal{D}_l$, trên cơ sở ba ánh xạ đẳng cấu sau

1. Ánh xạ đẳng cấu φ

$$p_i \leftrightarrow P_i = J_2 \otimes \dots \otimes J_2 \otimes P \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2,$$

$$q_i \leftrightarrow Q_i = J_2 \otimes \dots \otimes J_2 \otimes Q \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2.$$

(P và Q ở vị trí thứ i của vế phải, $i = 1, 2, \dots, l$), với

$$J_2 = \sigma_3,\ P = \sigma_1,\ Q = -\sigma_2,\ (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3: \text{ ma trận Pauli})$$

$$p_i = e_i,\ q_i = e_{l+i},\ (i = 1, 2, \dots, l), \quad e_m e_n + e_n e_m = 2\delta_{mn}.$$

Ánh xạ này là ánh xạ đẳng cấu từ đại số kết hợp đơn Clifford $\mathcal{C}(2l)$ các phần tử p_i và q_i lên đại số ma trận toàn phần cấp 2^l (xem định lý Vedderburn).

2. Ánh xạ đẳng cấu τ

$$\tau_1: \sum_{i<j} a_{ij} e_i e_j \overset{\tau_1}{\leftrightarrow} 2 \sum_{i<j} a_{ij} (E_{ij} - E_{ji}),\ a_{ij} \in C,$$

từ đại số Lie phức xây dựng trên các phần tử $e_i e_j$ lên đại số Lie các ma trận phản xứng cấp $2l$ phức, hoặc

$$\tau_2: \sum_i a_i e_i + \sum_{i<j} a_{ij} e_i e_j \overset{\tau_2}{\leftrightarrow} 2 \sum_i i a_i (E_{oi} - E_{io}) + 2 \sum_{i<j} a_{ij}(E_{ij} - E_{ji}),$$

$$a_i,\ a_{ij} \in C,$$

từ đại số Lie xây dựng trên các phần tử e_i, $e_i e_j$ lên đại số Lie các ma trận phản xứng cấp $2l + 1$ phức.

Quả vậy, ta có các đẳng thức song song sau giữa các $e_i e_k$ và $E_{ik} - E_{ki}$:

a) $$i \neq k;\ j \neq h,$$

$$[e_i e_k,\ e_j e_h] = e_i e_k e_j e_h - e_j e_h e_i e_k = e_i e_k e_j e_h - e_i e_k e_j e_h = 0,$$

$$[E_{ik} - E_{ki},\ E_{jh} - E_{hj}] = 0,$$

b) $$i \neq h \neq k,$$

$$[e_i e_k,\ e_k e_h] = e_i e_k e_k e_h - e_k e_h e_i e_k = e_i e_h - e_h e_i = 2\, e_i e_h,$$

$$[E_{ik} - E_{ki},\ E_{kh} - E_{hk}] = E_{ih} - E_{hi},$$

c) $$[e_i e_k,\ e_i e_k] = 0,$$

$$[E_{ik} - E_{ki},\ E_{ik} - E_{ki}] = 0.$$

Các đẳng thức này chứng tỏ rằng τ_1 quả thật là một phép đẳng cấu.

Tiếp theo, ngoài các điểm a, b và c ở trên, ta còn có các đẳng thức song song sau giữa các e_k và $E_{ok} - E_{ko}$:

d) $$i \neq k,$$

$$[e_i, e_k] = e_ie_k - e_ke_i = 2\, e_ie_k,$$

$$[2i\,(E_{oi} - E_{io}),\ 2i\,(E_{ok} - E_{ko})] = -4\,\{-E_{io}E_{ok} - (-E_{ko})\,E_{oi}\} = 4\,(E_{ik} - E_{ki}),$$

e) $$i \neq k,$$

$$[e_i, e_ie_k] = e_ie_ie_k - e_ie_ke_i = e_k + e_k = 2\, e_k,$$

$$[2i\,(E_{oi} - E_{io}),\ 2\,(E_{ik} - E_{ki})] = 4i\,(E_{ok} - E_{ko}),$$

f) $$i \neq j \neq k,$$

$$[e_i, e_je_k] = e_ie_je_k - e_je_ke_i = 0,$$

$$[2i\,(E_{oi} - E_{io}),\ 2(E_{jk} - E_{kj})] = 0.$$

Các đẳng thức ở các điểm a, b, c, d, e và f chứng tỏ rằng τ_2 quả thật là một phép đẳng cấu.

3. Ánh xạ đẳng cấu ψ

$$\psi_2 : X \leftrightarrow SXS^{-1},\ \text{S có biểu thức XIV (2-3)}$$

từ đại số Lie $\mathcal{B}_l$ lên đại số Lie các ma trận phản xứng cấp $2l + 1$ phức, hoặc

$$\psi_1 : X \leftrightarrow SXS^{-1},\ \text{S có biểu thức XIV (2-4)}$$

từ đại số Lie $\mathcal{D}_l$ lên đại số Lie các ma trận phản xứng cấp $2l$ phức. Các ánh xạ này biến các metric

$$g = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_l \\ 0 & I_l & 0 \end{bmatrix},$$

$$g = \begin{bmatrix} 0 & I_l \\ I_l & 0 \end{bmatrix}$$

(xem XIV, §2) tương ứng thành các mêtric I_{2l+1} và I_{2l}.

Tiếp theo, ta xét ánh xạ $\varphi\tau_2^{-1}\,\psi_2$ từ đại số Lie $\mathcal{B}_l$ vào trong đại số Lie các ma trận cấp 2^l trên C. Rõ ràng ánh xạ này là một phép đồng cấu, tức là một phép biểu diễn của đại số Lie $\mathcal{B}_l$. Muốn xác định biểu diễn này ta hãy tìm các trọng của biểu diễn. Muốn thế, ta hãy tìm dạng của các toán tử

$$\varphi\tau_2^{-1}\,\psi_2(H_\lambda),\ H_\lambda \in \mathcal{H},$$

$\mathcal{H}$ là đại số con Cartan của đại số Lie $\mathcal{B}_l$. Như đã biết, H_λ có dạng

$$H_\lambda = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & 0 \\ & \lambda_1 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \lambda_l & & & \\ & & & & -\lambda_1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & -\lambda_l \end{bmatrix}$$

Từ đó ta có

$$\psi_2(H_\lambda) = SH_\lambda S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{I_l}{\sqrt{2}} & \frac{I_l}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{iI_l}{\sqrt{2}} & \frac{iI_l}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} H_\lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{I_l}{\sqrt{2}} & \frac{iI_l}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{I_l}{\sqrt{2}} & -\frac{iI_l}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_l \end{bmatrix} \\ 0 & -i\begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_l \end{bmatrix} & 0 \end{bmatrix} = i\sum_{i=1}^{l} \lambda_i\,(E_{i,l+i} - E_{l+i,i}).$$

Tiếp theo, ta có

$$\tau_2^{-1}\psi_2(H_\lambda) = \tau_2^{-1}\left[i\sum_{i=1}^{l} \lambda_i\,(E_{i,l+i} - E_{l+i,i})\right] = \frac{1}{2}\,i\sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_i e_{l+i}\ .$$

Và, cuối cùng

$$\varphi\,\tau_2^{-1}\psi_2(H_\lambda) = \varphi\left[\frac{1}{2}\,i\sum_{i=1}^{l}\lambda_i e_i e_{l+i}\right] = \frac{1}{2}\,i\sum_{i=1}^{l} \lambda_i P_i Q_i =$$

$$= \frac{1}{2}\,i\sum_{i=1}^{l} \lambda_i I_2 \otimes \dots \otimes I_2 \otimes PQ \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{l} I_2 \otimes \dots \otimes I_2 \otimes \begin{bmatrix} \frac{\lambda_i}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\lambda_i}{2} \end{bmatrix} \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2.$$

Rõ ràng vế phải của đẳng thức này là một ma trận chéo mà các trị riêng là

$$\frac{1}{2}(\pm \lambda_1 \pm \lambda_2 \pm \dots \pm \lambda_l).$$

Các trị riêng này chính là các trọng của biểu diễn $\varphi\tau_2^{-1}\psi_2$ của đại số Lie $\mathcal{B}_l$. Biểu diễn này chính là biểu diễn spinơ của đại số. Nhóm Lie nhận các toán tử của biểu diễn spinơ này làm đại số Lie của mình chính là nhóm Spin$(2l+1)$mà ta đã nói ở § 7, chương VII.

Tương tự như thế, vì đại số con Cartan của $\mathcal{D}_l$ gồm các phần tử có dạng

$$H_\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & & & & \\ & \cdot & & & & & 0 & \\ & & \cdot & & & & & \\ & & & \lambda_l & & & & \\ & & & & -\lambda_1 & & & \\ & & 0 & & & \cdot & & \\ & & & & & & \cdot & \\ & & & & & & & -\lambda_l \end{bmatrix}$$

nên ta lần lượt có

$$\varphi\tau_1^{-1}\psi_1(H_\lambda) = \psi\tau_1^{-1}\begin{bmatrix} 0 & 0 \quad i\begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_l\end{bmatrix} \\ 0 \quad -i\begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_l\end{bmatrix} & 0 \end{bmatrix} =$$

$$= \varphi\tau_1^{-1}\left[i\sum_{i=1}^{l}\lambda_i(E_{i,l+i} - E_{l+i,i})\right] = \varphi\left[\frac{1}{2}\, i\sum_{i=1}^{l}\lambda_i e_i e_{l+i}\right] = \frac{1}{2}\, i\sum_{i=1}^{l}\lambda_i P_i Q_i =$$

$$= \sum_{i=1}^{l} I_2 \otimes \dots \otimes I_2 \otimes \begin{bmatrix} \frac{\lambda_i}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\lambda_i}{2}\end{bmatrix} \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2.$$

Như thế, biểu diễn $\sigma = \varphi\tau_1^{-1}\psi_1$ có hệ trọng là

$$\frac{1}{2}(\pm \lambda_1 \pm \lambda_2 \pm \dots \pm \lambda_l),$$

và là tổng trực tiếp của hai biểu diễn bất khả quy tương ứng có các trọng trưởng bằng

$$\frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_l) \text{ và } \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots - \lambda_l).$$

Đó chính là các trọng trưởng của các biểu diễn spinơ σ_1 và σ_2 nói trước đây. Chiều biểu diễn là 2^l.

Chẳng hạn với đại số Lie $\mathcal{D}_4$, các hệ trọng tương ứng với các biểu diễn spinơ σ_1 và σ_2 là

$$\begin{aligned}\sigma_1 : &\pm(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4), \quad \pm(\lambda_1+\lambda_2-\lambda_3-\lambda_4),\\ &\pm(\lambda_1-\lambda_2+\lambda_3-\lambda_4), \quad \pm(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4),\\ \sigma_2 : &\pm(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3-\lambda_4), \quad \pm(\lambda_1+\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4),\\ &\pm(\lambda_1-\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4), \quad \pm(-\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4).\end{aligned}$$

§ 4. ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{C}_l$

Ta hãy xét đại số Lie symplectic các ma trận XIV (2-8). Ta sẽ thấy rằng đại số Lie này là đại số Lie $\mathcal{C}_l$.

Đại số con Cartan

$$\mathcal{H} : H_\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & \\ & & \lambda_l & & & & \\ & & & -\lambda_1 & & & \\ & 0 & & & \ddots & & \\ & & & & & & -\lambda_l \end{bmatrix} \tag{4-1}$$

Hạng

Hạng l.

Nghiệm

Đặt:

$$\begin{aligned} E_{\lambda_i-\lambda_k} &= \begin{bmatrix} E_{ik} & 0 \\ 0 & -E_{ki}\end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i+\lambda_k} = \begin{bmatrix} E_{ki} & 0 \\ 0 & -E_{ik}\end{bmatrix}, \quad i<k,\\ E_{\lambda_i+\lambda_k} &= \begin{bmatrix} 0 & E_{ik}+E_{ki} \\ 0 & 0\end{bmatrix}, \quad E_{-\lambda_i-\lambda_k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ E_{ik}+E_{ki} & 0\end{bmatrix}, \quad i<k,\\ E_{2\lambda_i} &= \begin{bmatrix} 0 & E_{ii} \\ 0 & 0\end{bmatrix}, \quad E_{-2\lambda_i} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ E_{ii} & 0\end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4-2}$$

ta sẽ thấy rằng

$$\sum = \{\pm\lambda_i \pm \lambda_k, \pm 2\lambda_i, (i<k=1,\dots,l)\}, \tag{4-3}$$

các vectơ (4-2) chính là các vectơ nghiệm.

Chiều

$$\dim \mathcal{L} = l(2l+1). \tag{4-4}$$

Nghiệm đơn

$$\Pi = \{\lambda_i - \lambda_{i+1}, (i=1,2,\dots l-1), \alpha_l = 2\lambda_l\}. \tag{4-5}$$

Dạng Killing trên đại số con Cartan

$$(H_\lambda, H_\mu) = \sum_{i<k} (\pm \lambda_i \pm \lambda_k)(\pm \mu_i \pm \mu_k) + \sum_i (\pm 2\lambda_i)(\pm 2\mu_i) =$$

$$= 2\sum_{i<k} \{(\lambda_i + \lambda_k)(\mu_i + \mu_k) + (\lambda_i - \lambda_k)(\mu_i - \mu_k)\} +$$

$$+ 8\sum_i \lambda_i \mu_i = 4\sum_{i<k} (\lambda_i \mu_i + \lambda_k \mu_k) + 8\sum_i \lambda_i \mu_i =$$

$$= 4(l-1)\sum_i \lambda_i\mu_i + 8\sum_i \lambda_i \mu_i,$$

tức là

$$(H_\lambda, H_\mu) = 4(l+1)\sum_i \lambda_i\mu_i. \tag{4-6}$$

Nói riêng

$$(H_\lambda, H_\lambda) = 4(l+1)\sum_i \lambda_i^2 \tag{4-7}$$

Tính chất hình học các nghiệm

Tính toán hoàn toàn tương tự như với các trường hợp trên, ta được

$$H_{\lambda_i \pm \lambda_k} = \frac{1}{4(l+1)}(\pm F_i \pm F_k),\ H_{\pm 2\lambda_i} = \frac{1}{4(l+1)}(\pm 2F_i),$$

với

$$F_i = \begin{pmatrix} E_{ii} & 0 \\ 0 & -E_{ii} \end{pmatrix}.$$

Từ đó, đồng nhất $\alpha = H_\alpha$, ta được hệ nghiệm đơn

$$\Pi = \{e_1 - e_2, e_2 - e_3, \ldots, e_{l-1} - e_l, 2e_l\}, \tag{4-8}$$

với

$$e_i = \frac{1}{4(l+1)} F_i,$$

$$(e_i, e_k) = \frac{\delta_{ik}}{4(l+1)} \tag{4-9}$$

Với các kết quả này ta dễ thấy rằng

$$s_{12} = s_{23} = \ldots = s_{l-2, l-1} = 1,\ s_{l-1, l} = 2, \tag{4-10}$$

còn tất cả các quan hệ khác đều bằng không, và

$$w_1 = w_2 = \ldots = w_{l-1} = \frac{1}{2} w_l = \frac{1}{2(l+1)}. \tag{4-11}$$

Tính chất đơn

Các kết quả trên cho phép kết luận rằng đại số symplectic đang xét quả thật là đại số Lie $\mathcal{C}_l$. Từ đó ta thấy rằng tất cả các nhóm Sp (2p, 2q), (p + q = l), nói riêng nhóm Sp($2l$), đều là đơn.

Nhóm Weyl

Đặt

$$X = x^j e_j,$$

ta có

$$S_{\pm\lambda_i\pm\lambda_k}(X) = x^1 e_1 + \ldots \pm x^k e_i + \ldots \pm x^i e_k + \ldots + x^l e_l,$$

$$S_{\pm 2\lambda_i}(X) = x^1 e_1 + \ldots - x^i e_i + \ldots + x^l e_l,$$

tức là nhóm Weyl của đại số $\mathcal{C}_l$ giống như nhóm Weyl của đại số $\mathcal{B}_l$.

Ta lưu ý rằng (dựa vào biểu tbức của H_λ) biểu diễn đồng nhất và biểu diễn phản bộ của biểu diễn này là tương đương với nhau, như đã biết.

Các biểu diễn cơ sở và sơ đẳng

Biểu diễn ρ_i: Trọng trường

$$\Lambda_i = \lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_i, \ (i = 1, 2, \ldots, l). \tag{4-12}$$

Biểu diễn sơ đẳng $\omega \equiv \rho_1$ (biểu diễn đồng nhất):

$$\Lambda_1 = \lambda_1. \tag{4-13}$$

Biểu diễn bất khả quy XV (2-9): trọng trưởng

$$\Lambda = \sum m_i \lambda_i, \tag{4-14}$$

với

$$\begin{aligned} m_1 &= k_1 + k_2 + \ldots + k_l, \\ m_2 &= k_2 + \ldots + k_l, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ m_l &= k_l. \end{aligned} \tag{4-15}$$

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant \ldots \geqslant m_l. \tag{4-16}$$

Theo (4-16), các biểu diễn bất khả quy của đại số $\mathcal{C}_l$ được đặc trưng bởi những sơ đồ Young l hàng.

Toán tử Casimir

Với điều kiện chuẩn hóa sau suy từ (1-25)

$$(\lambda_i, \lambda_k) = \delta_{ik}, \tag{4-17}$$

và biểu thức

$$\delta = l\lambda_1 + (l-1)\lambda_2 + (l-2)\lambda_3 + \ldots + \lambda_l, \tag{4-18}$$

ta được toán tử Casimir

$$C_2 = m_1(m_1 + 2l) + m_2(m_2 + 2(l-1)) + \ldots + m_l(m_l + 2). \tag{4-19}$$

Đặc biểu

Vì nhóm Weyl của các đại số Lie $\mathcal{C}_l$ và $\mathcal{B}_l$ là như nhau, nên đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy của hai đại số Lie này đều có dạng như nhau, chỉ khác nhau ở chỗ các l và l° có giá trị khác nhau.

Cụ thể hơn, đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy (với trọng trưởng (4-14)) của đại số Lie $\mathcal{C}_l$ có dạng

$$\chi\langle m_i;\psi\rangle = \frac{|\sin(l\psi)|}{|\sin(l^o\psi)|}, \tag{4-20}$$

với

$$l_1 = m_1 + l,\ l_2 = m_2 + l - 1, \ldots, l_l = m_l,$$

$$l_1^o = l,\ l_2^o = l - 1, \ldots, l_l^o = 0. \tag{4-21}$$

Chiều biểu diễn

$$N\langle m_i\rangle = P(l_1, l_2, \ldots, l_l) : P(l_1^o, l_2^o, \ldots, l_l^o), \tag{4-22}$$

với

$$P(l_1, l_2, \ldots, l_l) = \prod_i l_i \prod_{i\,j} (l_i - l_j)(l_i + l_j). \tag{4-23}$$

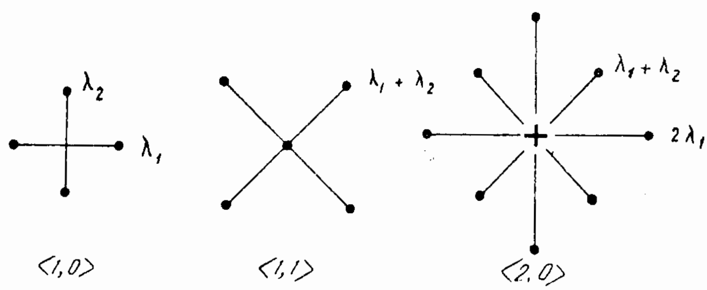
Chẳng hạn ta có

$$N\langle m_1, m_2\rangle = \frac{1}{6}(k_1+1)(k_2+1)(k_1+2k_2+3)(k_1+k_2+1). \tag{4-24}$$

$$m_1 = k_1 + k_2,\ m_2 = k_2.$$

Sau đây, ta vẽ một số giản đồ trọng của đại số Lie $\mathcal{C}_2$, (theo ký hiệu $< m_1, m_2 >$) trong số đó, giản đồ $< 2, 0 >$ chính là giản đồ nghiệm.

Ta lưu ý rằng tính chất đẳng cấu giữa biểu diễn của các đại số Lie $\mathcal{B}_2$ và $\mathcal{C}_2$ có thể thực hiện bằng phép thay thế $k_1 \leftrightarrow k_2$ (xem các giản đồ Dynkin của hai đại số đó, hay đối chiếu các công thức (2-27) và (4-24)).



Hình 16-3

Cuối cùng, ta có bảng nhân biểu diễn sau của đại số Lie $\mathcal{C}_2$ (và cũng đồng thời của đại số Lie $\mathcal{B}_2$).

Chuỗi Clebsch-Gordan cho đại số Lie $\mathcal{C}_2$ ($\mathcal{B}_2$)

	4	5	10	14
4	10+5+1	16+4	20+16+4	40+16
5	16+4	14+10+1	35'+10+5	35'+30+5
10	20+16+4	35'+10+5	35+35'+14+10+5+1	
14	40+16	35 +30+5		
16	35+14+10+5	40+20+16+4		

$$< m_1 , m_2 >: < 0, \ 0 > = 1,$$
$$< 1,0 > = 4, < 1, \ 1 > = 5,$$
$$< 2, \ 0 > = 10,$$
$$< 2, \ 2 > = 14,$$
$$< 2,1 > = 16,$$
$$< 3,0 > = 20, \ < 3, 3 > = 30,$$
$$< 3,1 > = 35', \ < 3,2 > = 40,$$
$$< 4,0 > = 35 \ldots$$

Như thế là chúng ta đã xây dựng được các đại số Lie tương ứng với các giản đồ Dynkin đầu tiên ở hình 16-6. Các đại số Lie này thường gọi là *đại số Lie kinh điển* .

Các đại số Lie tương ứng với các giản đồ Dynkin còn lại gọi là *đại số Lie ngoại lệ*. Trong số này, ta chỉ lưu ý đến đại số $\mathcal{G}_2$ vì đại số Lie này có chiều tương đối bé và cũng đã có tác giả đề nghị ứng dụng vào vật lý học trong một số bài tính nào đó (bài tính phân loại hệ nhiều hạt đồng nhất). Đại số Lie này chính là đại số Lie mà chúng ta đã nêu làm ví dụ nhiều lần ở các chương trước. Ở đây chúng ta sẽ nói thêm một số nét của đại số Lie đó.

§5. ĐẠI SỐ LIE $\mathcal{G}_2$

Đại số Lie $\mathcal{G}_2$ là đại số Lie con của đại số Lie $\mathcal{B}_3$ với các giao hoán tử XIV (2-14), (2-16).

Đại số con Cartan

Xem VIV, (2-9).

Hạng : 2

Nghiệm

Xem XIV, (7-20)

Chiều : 14

Nghiệm đơn

$\Pi(\mathcal{G}_2) = \{\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2, \alpha_2 = \lambda_2\}$

(xem XIV, (8-4)).

Dạng Killing trên $\mathcal{H}$

$(H_\lambda, H_\mu) = 8(2\lambda_1\mu_1 + 2\lambda_2\mu_2 + \lambda_1\mu_2 + \lambda_2\mu_1)$

(xem VIV, (7-22)).

Tính chất hình học các nghiệm

$$(\lambda_1, \lambda_1) = (\lambda_2, \lambda_2) = \frac{1}{12},$$

$$(\lambda_1, \lambda_2) = -\frac{1}{24},$$

(xem XIV, (7-24)).

Nhóm Lie đơn tương ứng gọi là nhóm $\mathcal{G}_2$.

Nhóm Weyl

Nhóm này có 12 phần tử :

$$e, S_{\lambda_1}, S_{\lambda_2}, S_{\lambda_1+\lambda_2}, S_{\lambda_1-\lambda_2}, S_{\lambda_1+2\lambda_2}, S_{\lambda_2+2\lambda_1}$$

$$S_{\lambda_1} S_{\lambda_2} ; S_{\lambda_1} S_{\lambda_1+\lambda_2}, S_{\lambda_1} S_{\lambda_1-\lambda_2}, S_{\lambda_1} S_{\lambda+2\lambda_2} \text{ và } S_{\lambda_1} S_{\lambda_2+2\lambda_1},$$

(xem XIV (7-30), (7-31)).

Các biểu diễn cơ sở

Biểu diễn cơ sở thứ nhất ω: $\Lambda_1 = \lambda_1 + \lambda_2$ (Như hình dưới, hoán vị 0 và 1) (5-1)

Biểu diễn cơ sở thứ hai : $\Lambda_2 = 2\lambda_1 + \lambda_2$ 

(5-2)

Các biểu diễn bất khả quy khác có trọng : $\Lambda = k_1 \Lambda_1 + k_2 \Lambda_2$

hay

$$\Lambda = m_1 \lambda_1 + m_2 \lambda_2,$$

với

$$m_1 = k_1 + 2k_2, m_2 = k_1 + k_2. \tag{5-3}$$

Toán tử Casimir

$$\delta = 3\lambda_1 + 2\lambda_2, \tag{5-4}$$

$$C_2 = \frac{1}{3}\left[m_1(m_1 + 6) + m_2(m_2 + 4) - m_1 m_2 - 2m_1 - 3m_2\right]. \tag{5-5}$$

Đặc biểu

Theo biểu thức của nhóm Weyl và theo biểu thức của nửa tổng nghiệm dương, ta có thể suy ra biểu thức sau của đặc biểu của biểu diễn bất khả quy với trọng trưởng Λ :

Tử số của đặc biểu bằng

$$\begin{aligned} &\det S \operatorname{expi}(S(\Lambda + \delta), \varphi) = \operatorname{expi}(l_1\psi_1 + l_2\psi_2) + \operatorname{expi}(-l_1\psi_1 - l_2\psi_2) - \\ &- \operatorname{expi}(l_1\psi_2 + l_2\psi_1) - \operatorname{expi}(-l_1\psi_2 - l_2\psi_1) + \operatorname{expi}(-l_1(\psi_1 + \psi_2) + \\ &+ l_2\psi_2) + \operatorname{expi}(-l_1(\psi_1 + \psi_2) + l_2\psi_1) - \operatorname{expi}(l_1(\psi_1 + \psi_2) - l_2\psi_1) - \\ &- \operatorname{expi}(l_1(\psi_1 + \psi_2) - l_2\psi_2) - \operatorname{expi}(l_1\psi_1 - l_2(\psi_1 + \psi_2)) - \operatorname{expi}(-l_1\psi_1 + \\ &+ l_2(\psi_1 + \psi_2)) + \operatorname{expi}(-l_1\psi_2 + l_2(\psi_1 + \psi_2)) + \operatorname{expi}(l_1\psi_2 - l_2(\psi_1 + \psi_2)), \end{aligned}$$

với

$$l_1 = m_1 + 3, \; l_2 = m_2 + 2,$$

$$\psi_1 = (\lambda_1, \varphi), \; \psi_2 = (\lambda_2, \varphi).$$

Mẫu số của đặc biểu suy từ biểu thức trên bằng cách cho $m_1 = m_2 = 0$.

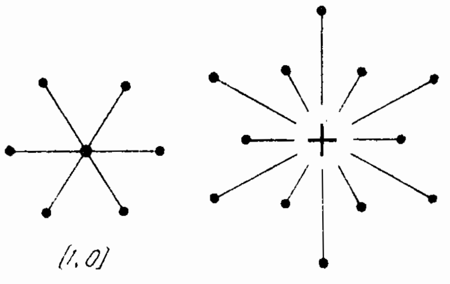
Chiều biểu diễn

$$N[m_1, m_2] =$$

$$= (1 + k_1)(1 + k_2)\left[1 + \frac{1}{2}(k_1+k_2)\right]\left[1 + \frac{1}{3}(k_1 + 2k_2)\right] \times$$

$$\times \left[1 + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_2)\right]\left[1 + \frac{1}{5}(2k_1 + 3k_2)\right]. \qquad (5\text{-}6)$$

Giản đồ trọng (theo ký hiệu $[k_1, k_2]$)



Hình 16-4

Giản đồ [0, 1] chính là giản đồ nghiệm của đại số.

Chuỗi Clebsch — Gordan cho đại số Lie $\mathcal{G}_2$

	7	14	27
7	27 + 14 + 7 + 1	64 + 27 + 7	77 + 64 + 27 + 14 + 7
14	64 + 27 + 7	77 + 77' + 27 + 14 + 1	
27	77 + 64 + 27 + 14 + 7		

$[k_1, k_2]$: [1, 0] = 7, [0, 1] = 14, [2, 0] = 27, [1, 1] = 64, [3, 0] = 77, [0, 2] = 77'...

§ 6. TÍNH CHẤT ĐẲNG CẤU GIỮA MỘT SỐ NHÓM LIE CÓ CHIỀU BÉ

Trước đây (xem XIV, (9-6)) ta đã nói đến sự đẳng cấu giữa các đại số Lie có chiều bé

$$\mathcal{A}_1 \approx \mathcal{B}_1 \approx \mathcal{C}_1, \ \mathcal{B}_2 \approx \mathcal{C}_2, \ \mathcal{A}_3 \approx \mathcal{D}_3, \ \mathcal{D}_2 \approx \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_1.$$

Mặt khác (chương VII, § 3 và § 7), ta cũng đã thấy rằng giữa các nhóm Lie kinh điển có những quan hệ sau :

Dạng phức	Dạng thực	Dạng thực compăc
SL (n, C)	SL (n, R)	SU (n)
	và SU (p, q), p + q = n	
SO (n, C)	SO (p, q), p + q = n	SO (n)
Sn (n, C)	Sp (p + q), p + q = n	Sp (n)

Thành thử các kết quả thu được vừa rồi cho phép lập được các sự đẳng cấu địa phương sau đây giữa một số nhóm không compăc với nhau và một số nhóm compăc với nhau:

$\mathcal{A}_1 \approx \mathcal{B}_1 \approx \mathcal{C}_1$: SU (2) $\approx$ SO (3) $\approx$ Sp (2),
SL (2, R) $\approx$ SU (1, 1) $\approx$ SO (1, 2).

$\mathcal{B}_2 \approx \mathcal{C}_2$: SO (5) $\approx$ Sp (4),
SO (1, 4) $\approx$ Sp (2, 2) (nhóm De Sitter 1 + 4)

$\mathcal{A}_3 \approx \mathcal{D}_3$: SU (4) $\approx$ SO (6), SL (4, R) $\approx$ SO (3, 3).
SU (2, 2) $\approx$ SO (1, 5) (nhóm bảo giác).

$\mathcal{D}_2 \approx \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_1$: SO (4) $\approx$ SO (3) $\otimes$ SO (3).

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [2], [4], [5], [6], [7].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — *Những kiến thức cần cho vật lý phân tử*
Không cần đọc chương này

B — *Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể*
Không cần đọc chương này

C — *Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử*
Đọc toàn chương

D — *Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân*
Đọc toàn chương

E — *Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản*
Đọc toàn chương

CHƯƠNG XVI

MỘT SỐ QUY TẮC VỀ PHÉP NHÚNG NHÓM VÀ BIỂU DIỄN HẠ CẢM

§1. PHÉP NHÚNG NHÓM

Trong việc ứng dụng lý thuyết nhóm vào vật lý, một vấn đề rất quan trọng là phép nhúng nhóm (hay đại số Lie). Bài toán này xuất hiện trong vấn đề mở rộng hay thu hẹp tính đối xứng vật lý. Sau đây, chúng ta sẽ nêu ra vài quy tắc cần thiết để giải quyết vấn đề này.

Định nghĩa

Nếu có một phép đẳng cấu giữa một nhóm $\mathcal{G}'$ và một nhóm con nào đó $\mathcal{H}$ **của một** nhóm $\mathcal{G}$ khác. thì ta nói đã nhúng nhóm $\mathcal{G}'$ vào trong nhóm $\mathcal{G}$ và ký hiệu

$$f : \mathcal{G}' \subset \mathcal{G}, \ (\mathcal{H} \approx f(\mathcal{G}')).$$

Với các đại số Lie, cũng định nghĩa tương tự như thế.

Hai phép nhúng f_1 và f_2 gọi là *tương đương* với nhau, nếu với mọi biểu diễn hữu hạn chiều ρ của nhóm $\mathcal{G}$, các biểu diễn ρf_1 và ρf_2 cảm ứng trên các nhóm con $f_1(\mathcal{G}')$ và $f_2(\mathcal{G}')$ của $\mathcal{G}$ là tương đương với nhau.

Định nghĩa này là cần thiết, vì một nhóm có thể nhúng bằng nhiều cách vào trong một nhóm khác (xem I § 5).

Sau đây ta chỉ giới hạn ở những nhóm SL(n, C), SU(n), SO(n, C), Sp(2n, C), G_2 (nhóm Lie tương ứng với đại số Lie $\mathcal{G}_2$).

Điều kiện nhúng nhóm.

a) Tất nhiên, do nhóm SL(n, C) là nhóm đơn môđula lớn nhất, mọi nhóm đơn môđula cấp n như SO(n, C), Sp(n, C), đều có thể nhúng vào trong nhóm SL(n, C).

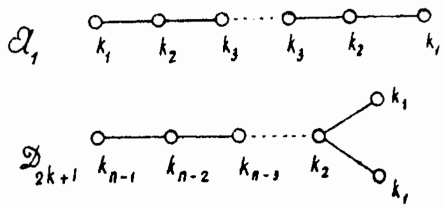
b) Vì các nhóm SO(n, C) và Sp(n, C) tương ứng là các nhóm bảo toàn các dạng song tuyến tính đối xứng và phản xứng, nên một nhóm $\mathcal{G}'$ nào đó chỉ có thể nhúng vào các nhóm trên khi và chỉ khi nhóm $\mathcal{G}'$ có một dạng song tuyến tính đối xứng hay phản xứng.

Ta lưu ý rằng tính chất có một dạng song tuyến tính bất biến là không thay đổi khi chuyển từ dạng thực compăc sang dạng phức và ngược lại, vì tính chất này là một tính chất đại số (một đồng nhất thức nào đó giữa các phần tử ma trận), được bảo toàn khi chuyển từ trường số thực sang trường số phức, và ngược lại.

Như thế, cần xem trong những điều kiện nào thì các nhóm nửa đơn có một dạng song tuyến tính bất biến. Người ta chứng minh các quy tắc sau :

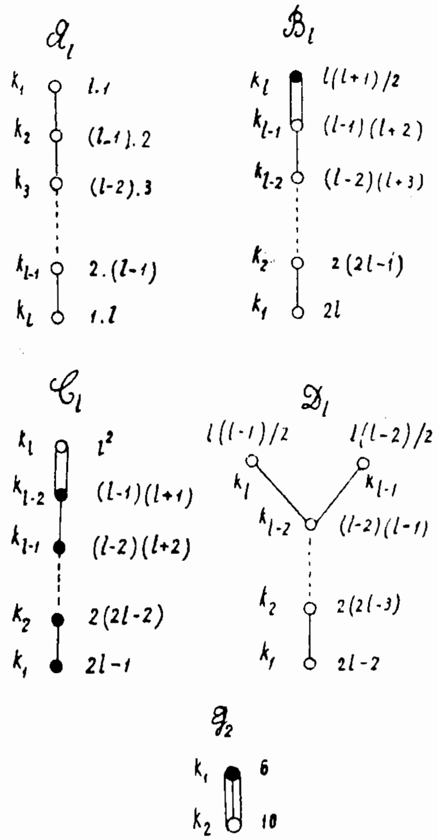
1. Tất cả các biểu diễn bất khả quy của các nhóm đơn thuộc loại $\mathcal{B}_l$, $\mathcal{C}_l$, $\mathcal{D}_{2k}$, $\mathcal{G}_2$ đều có dạng song tuyến tính bất biến.

2. Các biểu diễn bất khả quy của các nhóm thuộc loại $\mathcal{A}_l$ và $\mathcal{D}_{2k+1}$ chỉ có dạng song tuyến tính bất biến khi chúng có dạng



3. Tất nhiên, các nhóm nửa đơn, do có cấu trúc tích trực tiếp của những nhóm đơn, sẽ có dạng song tuyến tính bất biến khi các nhân tử này có những dạng đó.

4. Muốn xác định tính chất đối xứng hay phản xứng của các dạng song tuyến tính bất biến trên, cần nhân các số k_i, đặc trưng biểu diễn, với các số tương ứng ở (1-1) (hình 17-1) rồi cộng các kết quả lại với nhau. Dạng song tuyến tính sẽ là đối xứng hay phản xứng tùy theo tổng số thu được là chẵn hay lẻ.



Hình 17-1

Ví dụ.

Ta hãy xét đại số $\mathcal{B}_l$, $l = 1$. Ta có (theo 1-1)

$$k_1 = 2j \bullet l(l-1)/2 = 1$$

vì các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie $\mathcal{B}_1$ (SO(3)) có dạng $\mathcal{D}^{(j)} = \langle 2j \rangle$.

Số thu được

$$2j \cdot 1 = 2j,$$

là chẵn khi j nguyên và lẻ khi j là bán nguyên. Trong trường hợp thứ nhất (biểu diễn đơn trị) nhóm có một dạng song tuyến tính đối xứng, còn trong trường hợp thứ hai (biểu diễn spinơ) nhóm có một dạng song tuyến tính phản xứng. Điều này có thể minh họa bằng các kết quả cụ thể thu được ở VIII, § 5. Quả vậy, dạng

$$\sum_m (-1)^{j-m} \psi_m \psi_{-m} = (-1)^j \sum_m (-1)^{-m} \psi_m \psi_{-m},$$

là đối xứng khi m nguyên (tức là khi j nguyên), vì trong trường hợp này, ta có

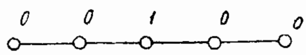
$$(-1)^{-m} = (-1)^m.$$

Còn khi m bán nguyên (tức là khi j bán nguyên), ta lại có

$$(-1)^{-m} = -(-1)^m,$$

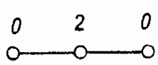
tức là dạng có tính chất phản xứng.

Với nhóm SU(6) và biểu diễn ($l = 5$)



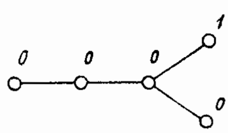
ta thu được số $1.(l-2)3 = 9$, tức là nhóm này với biểu diễn trên chỉ có thể nhúng vào một nhóm Sp nào đó (ngoài các nhóm SU).

Với nhóm SU(4) và biểu diễn ($l = 3$)



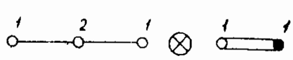
ta thu được số $2(l-1)2 = 8$, tức là nhóm này với biểu diễn trên chỉ có thể nhúng vào một nhóm SO nào đó (ngoài các nhóm SU).

Nhóm SO(10) với biểu diễn ($l = 5$)



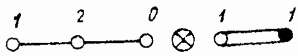
không có một dạng song tuyến tính nào. Thành thử nhóm này với biểu diễn trên không thể nhúng vào một nhóm SO hay Sp nào (ngoài các nhóm SU).

Nhóm nửa đơn SU (4) ⊗ Sp (4) với biểu diễn



cho số (1.3 + 2.4 + 1.3) + (1.4 + 1.3) = 21. Như thế, nhóm nửa đơn đó với biểu diễn trên chỉ có thể nhúng vào một nhóm Sp nào đó.

Với biểu diễn



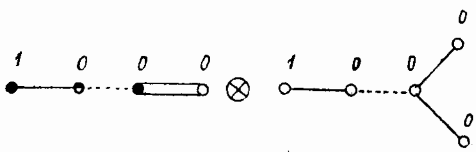
nhóm nửa đơn SU (4) ⊗ Sp (4) không nhận một dạng song tuyến tính bất biến đối xứng hay phản ứng nào, vì thành phần liên thông thứ nhất (bên trái) không nhận một dạng song tuyến tính bất biến nào. Từ đó, nhóm nửa đơn trên không thể nhúng vào một nhóm SO hay Sp nào.

Nhóm SL (m, C) ⊗ SL (n, C) với biểu diễn đồng nhất {1} ⊗ {1}:

chỉ có thể nhúng vào một nhóm SL nào đó, do các thành phần liên thông đều không nhận một dạng song tuyến tính bất biến nào. Với $m \geqslant n \geqslant 2$, nhóm đơn cực tiểu chứa nhóm nửa đơn nói trên là nhóm SL (m + n, C).

Tương tự như thế, nhóm nửa đơn Sp (m, C) ⊗ SO (n, C) với biểu diễn đồng nhất ⟨ 1 ⟩ ⊗ [1]:

hay



tương ứng cho các số

$$1.(2u - 1) + 1.2v \text{ với } u = m/2,\ v = (n - 1)/2,$$
$$1.(2u - 1) + 1.(2v - 2) \text{ với } u = m/2,\ v = n/2.$$

Do các số này đều lẻ, nhóm nửa đơn trên chỉ có thể nhúng vào một nhóm Sp nào đó.

Cuối cùng, nhóm nửa đơn Sp (m, C) ⊗ Sp (p, C) với biểu diễn đồng nhất ⟨ 1 ⟩ ⊗ ⟨ 1 ⟩ cho số 1. (2u − 1) + 1. (2v − 1) chẵn, từ đó nhóm đó có thể nhúng vào một nhóm SO nào đó.

Cách đặc trưng các phép nhúng nhóm

Dynkin đã chứng minh được các tiêu chuẩn sau:

a) Đối với các nhóm loại $\mathcal{A}_l$, $\mathcal{B}_l$, $\mathcal{C}_l$, $\mathcal{G}_2$, hai phép nhúng f_1 và f_2 là tương đương với nhau khi và chỉ khi các biểu diễn cảm ứng ωf_1 và ωf_2 (ω: biểu diễn đồng nhất) là tương đương với nhau.

b) Đối với nhóm loại $\mathcal{D}_l$, hai phép nhúng trên là tương đương với nhau khi và chỉ khi

1. cặp biểu diễn ωf_1, ωf_2 là tương đương với nhau,
2. cặp biểu diễn $\sigma_1 f_1$, $\sigma_1 f_2$ là tương đương với nhau.

Như thế, ta thấy rằng phép nhúng được đặc trưng bằng biểu diễn ωf trong trường hợp a và các biểu diễn ωf và $\sigma_1 f$ trong trường hợp b.

§ 2. PHƯƠNG PHÁP CHUNG ĐỂ GIẢI BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM

Phương pháp hàm tuyến tính f^+

Giả sử nhóm $\mathcal{G}'$ được nhúng vào trong nhóm $\mathcal{G}$ bởi phép nhúng f. Biểu diễn đồng nhất (trong trường hợp a sẽ cảm ứng một biểu diễn ωf nào đó của nhóm con $\mathcal{G}'$, Nhưng do các nhóm đơn đều có tính chất hoàn toàn khả quy, biểu diễn ωf sẽ là tổng trực tiếp của nhiều biểu diễn bất khả quy nào đó của nhóm $\mathcal{G}'$.

Ta sắp xếp các trọng μ_i, ν_i của các biểu diễn ω của $\mathcal{G}$ và ωf của $\mathcal{G}'$ theo thứ tự cao dần trong cơ sở nghiệm đơn (xem XIV § 3)

$$\Delta(\omega) = \{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_{N(\omega)}\}, \tag{2-1}$$

$$\Delta(\omega f) = \{\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_{N(\omega)}\}, \; N(\omega) = \dim\omega, \tag{2-2}$$

và xác định hàm f^+ theo các đẳng thức sau

$$f^+(\mu_i) = \nu_i, \; (i = 1, 2, \ldots, N(\omega)). \tag{2-3}$$

Có thể chứng minh rằng hàm f^+ là một hàm tuyến tính và hệ trọng $\Delta(\rho f)$ của biểu diễn ρf cảm ứng trên nhóm con $\mathcal{G}'$ được tính theo công thức

$$\triangle(\rho f) = f^+(\triangle(\rho)), \tag{2-4}$$

trong đó $\Delta(\rho)$ là hệ trọng của biểu diễn ρ của nhóm $\mathcal{G}$. Phân hệ trọng ở vế trái của (2-4) theo các hệ trọng của các biểu diễn bất khả quy của nhóm con $\mathcal{G}'$, ta sẽ giải được bài toán biểu diễn hạ cảm đặt ra.

Trong trường hợp b, ta cũng tiến hành tương tự như thế.

Ví dụ

Ta hãy giải bài toán biểu diễn hạ cảm

$\mathcal{G} \downarrow \mathcal{G}' = \mathbf{SU}(3) \downarrow \mathbf{SU}(2)$ cho biểu diễn $\rho = \{2, 1\}$.

Đây là trường hợp loại a. Do đó, chỉ cần xét đến biểu diễn đồng nhất $\omega = \{1\}$ của nhóm SU(3). Ta có

$$\omega = \{1, 0\}, \; N(\omega) = 3,$$

và hệ nghiệm

$$\Delta(\omega) = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}.$$

Bây giờ cần sắp xếp các nghiệm nói trên theo thứ tự cao dần trong cơ sở nghiệm đơn (xem XIV, § 7). Theo XV, (1-7), ta có cơ sở nghiệm đơn sau của nhóm $\mathcal{G} = \mathrm{SU}(3)$

$$\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2, \; \alpha_2 = \lambda_2 - \lambda_3,$$

với

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0.$$

Trong cơ sở này, các tính toán đơn giản cho thấy rằng

$$\lambda_1 = \frac{2\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \; \lambda_2 = \frac{-\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \; \lambda_3 = -\lambda_1 - \lambda_2.$$

Từ đó, ta được thứ tự (2-1)

$$\Delta(\omega) = \{\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3\}. \tag{2-5}$$

Tiếp theo, ta hãy xác định phép nhúng nhóm (nói chung, cần nhớ rằng có thể có nhiều phép nhúng nhóm khác nhau). Dựa vào số chiều biểu diễn, ta có thể chọn phép nhúng sau

$$\omega f = \{1\} \oplus \{0\} \subset \{1, 0\}$$

vì biểu diễn dồng nhất $\{1\}$ của nhóm SU(2) có hai chiều, biểu diễn đơn vị $\{0\}$ có một chiều, trong lúc đó thì biểu diễn dồng nhất $\{1, 0\} = \{1\}$ của nhóm SU(3) lại có ba chiều.

Bây giờ, ta hãy xác định thứ tự (2-2). Vì các trọng của biểu diễn $\{1\}$ của nhóm SU(2) là

$$\lambda' = 1, \; -\lambda' = -1,$$

còn trọng của biểu diễn đơn vị là 0, nên ta có ngay thứ tự sau

$$\Delta(\omega f) = \{\lambda' > 0 > -\lambda'\}. \tag{2-6}$$

Như thế, theo định nghĩa (2-3) và các kết quả (2-5), (2-6), ta được hàm f+ sau:

$$f^+(\lambda_1) = \lambda', \; f^+(\lambda_2) = 0, \; f^+(\lambda_3) = -\lambda'. \tag{2-7}$$

Với hàm f+ này ta có thể tìm hệ nghiệm $\Delta(\rho f)$ của biểu diễn cảm ứng ρf của nhóm SU(2) với $\rho = \{2, 1\}$ (biểu diễn phó). Ta có (xem XVI, (1-3))

$$\Delta(\rho) = \{\lambda_1 - \lambda_2, \lambda_2 - \lambda_3, \lambda_3 - \lambda_1, 0, 0, \lambda_2 - \lambda_1, \lambda_3 - \lambda_2, \lambda_1 - \lambda_3\}.$$

Thế thì, theo (2-4), ta được

$$\Delta(\rho f) = f^+(\Delta(\rho)) = \{f^+(\lambda_1 - \lambda_2), f^+(\lambda_2 - \lambda_3), f^+(\lambda_3 - \lambda_1),$$
$$f^+(0), f^+(0), f^+(\lambda_2 - \lambda_1), f^+(\lambda_3 - \lambda_2), f^+(\lambda_1 - \lambda_3)\}.$$

Cuối cùng, theo (2-7) và tính chất tuyến tính của f^+ ta được

$$\Delta(\rho f) = \{\lambda', \lambda', -2\lambda', 0, 0, 2\lambda', -\lambda', -\lambda'\},$$

vì

$$f^+(0) = f^+(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) = \lambda' - \lambda' = 0.$$

Nhưng vì $\{2\lambda', 0, -2\lambda'\}$ là hệ trọng của biểu diễn $\{2\}$, $\{\lambda', -\lambda'\}$ là hệ trọng của biểu diễn $\{1\}$, còn 0 là hệ trọng của biểu diễn $\{0\}$ của nhóm SU(2), nên ta được

$$\rho f = \{2\} \oplus 2\{1\} \oplus \{0\},$$

tức là

$$SU(3) \downarrow SU(2): \{2, 1\} = \{2\} \oplus 2\{1\} \oplus \{0\}.$$

Nói chung dễ tính được các kết quả sau:

SU(n) ↓ SO(3)

n = 3.
$$\omega = \{1, 0\}, \; \Delta(\omega) = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\},$$
$$\omega f = [1] \subset \{1, 0\}, \; \Delta(\omega f) = \{v, 0, -v\},$$
$$f^+(\lambda_1) = v, \; f^+(\lambda_2) = 0, \; f^+(\lambda_3) = -v.$$

n = 4.
$$\omega = \{1, 0, 0\}, \; \Delta(\omega) = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\},$$
$$\omega f = [3/2] \subset \{1, 0, 0\}, \; \Delta(\omega f) = \{3v/2, v/2, -v/2, -3v/2\},$$
$$f^+(\lambda_1) = 3v/2, \; f^+(\lambda_2) = v/2, \; f^+(\lambda_3) = -v/2,$$
$$f^+(\lambda_4) = -3v/2.$$

Trường hợp chung

$$SU(n) \downarrow SO(3): \omega = \{1, 0, \ldots, 0\}, \ \omega f = \left[\frac{n-1}{2}\right].$$

Sp(n) ↓ SO(3):

$n = 4.$ $\quad \omega = \langle 1, 0\rangle, \ \Delta(\omega) = \{\lambda_1, \lambda_2, -\lambda_2, -\lambda_1\},$

$\omega f = [3/2] \subset \langle 1, 0\rangle, \ \Delta(\omega f) = \{3\nu/2, \nu/2, -\nu/2, -3\nu/2\},$

$f^{+}(\lambda_1) = 3\nu/2, \ f^{+}(\lambda_2) = \nu/2, \ f^{+}(-\lambda_2) = -\nu/2,$

$f^{+}(-\lambda_1) = -3\nu/2.$

$n = 6.$ $\quad \omega = \langle 1, 0, 0\rangle, \ \Delta(\omega) = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, -\lambda_3, -\lambda_2, -\lambda_1\},$

$\omega f = [5/2] \subset \langle 1, 0, 0\rangle, \ \Delta(\omega f) = \{5\nu/2, 3\nu/2, \nu/2, -\nu/2, -3\nu/2, -5\nu/2\},$

$f^{+}(\lambda_1) = 5\nu/2, \ f^{+}(\lambda_2) = 3\nu/2, \ f^{+}(\lambda_3) = \nu/2,$

$f^{+}(-\lambda_3) = -\nu/2, \ f^{+}(-\lambda_2) = -3\nu/2, \ f^{+}(-\lambda_1) = -5\nu/2.$

Trường hợp chung:

$$Sp(2l) \downarrow SO(3): \omega = \langle 1, 0 \ldots, 0\rangle, \ \omega f = \left[l - \frac{1}{2}\right].$$

Trong trường hợp chung, sau khi tìm được hệ trọng $\Delta(\rho f)$, để phân hệ trọng này thành tổng các hệ trọng con tương ứng với những biểu diễn bất khả quy của nhóm con $\mathcal{G}'$, ta có thể dựa trên một số công thức phụ để tránh một phần các mò mẫm.

Chẳng hạn, ta xét lượng

$$l(\rho) = \frac{N(\rho)}{r} C_2 = \frac{N(\rho)}{r} (\Lambda, \Lambda + 2\delta), \tag{2-8}$$

trong đó $N(\rho)$ là chiều của biểu diễn ρ của nhóm $\mathcal{G}$, r là chiều của đại số Lie của nhóm.

Lượng $l(\rho)$ gọi là *chỉ số* của biểu diễn và có tính chất cộng được sau

$$l(\rho_1 + \rho_2 + \ldots + \rho_m) = l(\rho_1) + l(\rho_2) + \ldots + l(\rho_m). \tag{2-9}$$

Chính tính chất này, trong nhiều trường hợp, có thể cho phép chúng ta tránh được nhiều mò mẫm khi phân tích hệ trọng $\Delta(\rho f)$.

§3. BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM SU(mn) ↓ SU(m) ⊗ SU(n)

Phân tích các biểu diễn $\{1^r\}$

Theo định nghĩa, nhóm SU(mn) là nhóm bảo toàn dạng hecmitic

$$|z^1|^2 + \ldots + |z^{mn}|^2 = \sum_A |z^A|^2, \ (A = 1, 2, \ldots, mn).$$

Ta có thể đặt $A = \alpha i$ với $\alpha = 1, 2, \ldots, m$, $i = 1, 2, \ldots, n$ và viết lại dạng hecmitic trên như sau

$$\sum_{\alpha, i} |z^{\alpha i}|^2 = \text{inv}.$$

Rõ ràng, khi α cố định thì dạng trên bất biến đối với nhóm SU(n) còn khi i cố định thì nhóm bất biến lại là nhóm SU(m). Thành thử, nhóm nửa đơn $SU(m) \otimes SU(n)$ là một nhóm con của nhóm SU(mn). Đồng thời xác định được phép nhúng nhóm.

Bây giờ ta hãy xét bài toán biểu diễn hạ cảm $SU(mn) \downarrow SU(m) \otimes SU(n)$, dùng các đặc biểu đã thu được ở XVI § 1. Ta chỉ xét hai trường hợp $m = 2$, $n = 2$ và $m = 2$, $n = 3$.

a) $m = 2$, $n = 2$

Theo XVI (1-33) và (1-34), ta có thể xem các z_i có mặt trong đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(p) là trị riêng của các ma trận của nhóm. Từ đó, ta có thể viết

$$X = \begin{bmatrix} z_1 & & & 0 \\ & z_2 & & \\ & & z_3 & \\ 0 & & & z_4 \end{bmatrix}, \quad X \in SU(4). \tag{3-1}$$

Đặt

$$z_1 = ab,\ z_2 = ab^{-1},\ z_3 = a^{-1}b,\ z_4 = a^{-1}b^{-1},\ |a| = |b| = 1, \tag{3-2}$$

ta có thể viết (3-1) lại dưới dạng

$$X = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{-1} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b & 0 \\ 0 & b^{-1} \end{bmatrix}. \tag{3-3}$$

Nhưng do $|a| = |b| = 1$, các lượng a và a^{-1} hay b và b^{-1} có thể xem là các trị riêng của nhóm SU(2). Thành thử đẳng thức (3-3) cho kết quả (ta ký hiệu hai nhóm SU(2) có các phần tử ở vế phải của (3-3) là $SU(2)_1$ và $SU(2)_2$)

$$SU(4) \downarrow SU(2)_1 \otimes SU(2)_2 : \{1\} = \{1\}_1 \otimes \{1\}_2 . \tag{3-4}$$

Kết quả này có thể suy từ đẳng thức

$$\chi\{1\} = a_1 = z_1 + z_2 + z_3 + z_4 = (a + a^{-1})(b + b^{-1}).$$

Tiếp theo, theo XVI (1-49) và (3-2), dựa vào định nghĩa của các hàm đối xứng sơ cấp, ta được

$$\begin{aligned} \chi\{1^2\} = a_2 &= z_1z_2 + z_1z_3 + z_1z_4 + z_2z_3 + z_2z_4 + z_3z_4 = \\ &= (a^2 + 1 + a^{-2}) \cdot 1 + 1 \cdot (b^2 + 1 + b^{-2}). \end{aligned}$$

Nhưng vì $a^2 + 1 + a^{-2}$ là một hàm đối xứng toàn phần của nhóm SU(2), tức là bằng đặc biểu của biểu diễn $\{2\}$ của nhóm, nên kết quả trên cho

$$SU(4) \downarrow SU(2)_1 \otimes SU(2)_2 : \{1^2\} = \{2\}_1 \otimes \{0\}_2 \oplus \{0\}_1 \otimes \{2\}_2, \tag{3-5}$$

do $\chi\{0\}$ bằng đơn vị với mọi nhóm (đặc biểu của biểu diễn đơn vị!).

Cuối cùng ta chú ý rằng với nhóm SU(4) thì

$$\{1^3\} = \{1\} \tag{3-6}$$

b) $m = 2,\ n = 3$

Trong trường hợp này, các z_i ($i = 1, 2, \ldots, 6$) ở XVI (1-33), (1-34) là các trị riêng của các phần tử của nhóm SU(6). Ta lại đặt

$$\begin{gathered} z_1 = ab_1,\ z_2 = ab_2,\ z_3 = ab_3, \\ z_4 = a^{-1}b_1,\ z_5 = a^{-1}b_2,\ z_6 = a^{-1}b_3, \\ |a| = |b_1| = |b_2| = |b_3| = 1,\ b_1b_2b_3 = 1. \end{gathered} \tag{3-7}$$

Thế thì, với mọi $X \in SU(6)$, ta có thể viết

$$X = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{-1} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 \end{bmatrix} \quad X \in SU(6),$$

tức là được cái phân tích

$$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(3) : \{1\} = \{1\} \otimes \{1\}', \tag{3-8}$$

trong đó lượng không có dấu phẩy ở vế phải là tương ứng với nhóm SU(2), còn lượng có dấu phẩy là tương ứng với nhóm SU(3).

Tiếp theo, trong biểu thức của các hàm đối xứng sơ cấp a_i ($i = 1, 2, \ldots, 6$) của nhóm SU(6), ta thay các z_i bằng các biểu thức (3-7). Sau đó ta chú ý rằng với nhóm SU(2), thì

$$\chi\{1\} = a + a^{-1},\ \chi\{2\} = a^2 + 1 + a^{-2},\ \chi\{3\} = a^3 + a + a^{-1} + a^{-3},$$

còn với nhóm SU(3) thì (xem XVI (1-32))

$$\chi\{m, m_2\}' = \begin{vmatrix} b_1^{m+2} & b_2^{m+2} & b_3^{m+2} \\ b_1^{m_2+1} & b_2^{m_2+1} & b_3^{m_2+1} \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} b_1^2 & b_2^2 & b_3^2 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}. \tag{3-9}$$

Thế thì, ta sẽ được các phân tích sau

$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(4)$:

$$\begin{aligned} \{1\} &= \{1\} \otimes \{1\}' \\ \{1^2\} &= \{2\} \otimes \{2\}' \oplus \{0\} \otimes \{1^2\}', \\ \{1^3\} &= \{1\} \otimes \{2,1\}' \oplus \{3\} \otimes \{0\}', \\ \{1^4\} &= \{0\} \otimes \{2^2\}' \oplus \{2\} \otimes \{1\}', \\ \{1^5\} &= \{1\} \otimes \{1^2\}'. \end{aligned} \tag{3-10}$$

2. Phân tích các biểu diễn $\{m\}$

a) Bây giờ, ta hãy chứng minh đẳng thức sau:

$SU(4) \downarrow SU(2)_1 \otimes SU(2)_2$:

$$\{m\} = \{m\}_1 \otimes \{m\}_2 \oplus \{m-2\}_1 \otimes \{m-2\}_2 \oplus \{m-4\}_1 \otimes \{m-4\}_2 \oplus \ldots$$

$$\ldots \oplus \begin{cases} \{1\}_1 \otimes \{1\}_2 & \text{với m lẻ,} \\ \{0\}_1 \otimes \{0\}_2 & \text{với m chẵn,} \end{cases} \tag{3-11}$$

hay, viết theo đặc biểu

$$\chi\{m\} = \chi\{m\}_1\,\chi\{m\}_2 + \chi\{m-2\}_1\,\chi\{m-2\}_2 + \chi\{m-4\}_1\,\chi\{m-4\}_2 + \ldots + \begin{cases} \chi\{1\}_1\,\chi\{1\}_2 \text{ với m lẻ} \\ \chi\{0\}_1\,\chi\{0\}_2 \text{ với m chẵn.} \end{cases} \quad (3\text{-}12)$$

Đẳng thức (2-12) đúng cho $m = 0$ và $m = 1$. Do đó, có thể dùng phương pháp truy toán để chứng minh đẳng thức đó, giả sử đã đúng đến một giá trị $m \leqslant q$ nào đó. Nhưng đã đúng cho m, (3-12) là đúng cho $m-2$, tức là ta có

$$\chi\{m-2\} = \chi\{m-2\}_1\,\chi\{m-2\}_2 + \chi\{m-4\}_1\,\chi\{m-4\}_2 + \ldots \quad (3\text{-}13)$$

Phối hợp (3-12) với (3-13) và chú ý rằng $\chi\{m\} = h_m$, ta được

$$h_m - h_{m-2} = \chi\{m\}_1\,\chi\{m\}_2\,,\ m \leqslant q\,. \quad (3\text{-}14)$$

Như thế, bài toán quy về chứng minh (3-14) cho những giá trị của m lớn hơn q, khi công thức đó đã đúng cho $m \leqslant q$. Quả vậy, theo XVI (1-43) và (1-44) ta được

$$h_{q+1} - h_{q-1} = a_1(h_q - h_{q-2}) - a_2(h_{q-1} - h_{q-3}) + a_3(h_{q-2} - h_{q-4}) - (h_{q-3} - h_{q-5}). \quad (3\text{-}15)$$

Tiếp theo, thay các hiệu ở vế phải của (3-15) bởi các biểu thức (3-14), các a_i bởi các biểu thức (3-4), (3-5), (3-6) rồi dùng chuỗi Clebsch — Gordan của nhóm SU(2), ta sẽ chứng minh được công thức (3-14) cho $m > q$.

b) $m = 2$, $n = 3$

Tương tự như trên, có thể chứng minh rằng

$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(3)$:

$$\{m\} = \{m\} \otimes \{m\}' \oplus \{m-2\} \otimes \{m-1, 1\}' \oplus \{m-4\} \otimes \{m-2, 2\}' \oplus \ldots \oplus \begin{cases} \{1\} \otimes \{m/2\,,\ m/2\}' \text{ với m lẻ,} \\ \{1\} \otimes \{(m+1)/2\,,\ (m-1)/2\}' \text{ với m chẵn.} \end{cases} \quad (3\text{-}16)$$

3. Phân tích các biểu diễn tổng quát

Trong trường hợp tổng quát, với các biểu diễn bất khả quy $\{m_i\}$ của nhóm SU(mn), ta dùng các công thức XVI (1-46), (1-47), các phân tích loại (3-4), (3-5), (3-6), (3-10), các phân tích loại (3-11), (3-16), các chuỗi Clebsch — Gordan cho các nhóm SU(2) và SU(3).

Ví dụ:

$SU(4) \downarrow SU(2)_1 \otimes SU(2)_2$:

$$\chi\{2, 2, 0\} = \begin{vmatrix} h_2 & h_3 & h_4 \\ h_1 & h_2 & h_3 \\ h_{-2} & h_{-1} & h_0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_2 & h_3 & h_4 \\ h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = h_2\,h_2 - h_1\,h_3 =$$

$$= [\chi\{2\}_1\,\chi\{2\}_2 + \chi\{0\}_1\,\chi\{0\}_2]\,.\,[\chi\{2\}_1\,\chi\{2\}_2 + \chi\{0\}_1\,\chi\{0\}_2] - \chi\{1\}_1\,\chi\{1\}_2\,.\,[\chi\{3\}_1\,\chi\{3\}_2 + \chi\{1\}_1\,\chi\{1\}_2] =$$

$$= \chi\{2\}_1\,\chi\{2\}_1\,\chi\{2\}_2\,\chi\{2\}_2 + \chi\{2\}_1\,\chi\{0\}_1\,\chi\{2\}_2\,\chi\{0\}_2 + \chi\{0\}_1\,\chi\{2\}_1\,\chi\{0\}_2\,\chi\{2\}_2 + \chi\{0\}_1\,\chi\{0\}_1\,\chi\{0\}_2 - \chi\{1\}_1\,\chi\{3\}_1\,\chi\{1\}_2\,\chi\{3\}_2 - \chi\{1\}_1\,\chi\{1\}_1\chi\{1\}_2\chi\{1\}_2.$$

Dùng chuỗi Clebsch — Gordan của SU(2), từ kết quả trên, ta được

$SU(4) \downarrow SU(2)_1 \otimes SU(2)_2 =$

$$\{2, 2, 0\} = \{4\}_1 \otimes \{0\}_2 \oplus \{0\}_1 \otimes \{4\}_2 \oplus \{2\}_1 \otimes \{2\}_2 \oplus \{0\}_1 \otimes \{0\}_2 \quad (3\text{-}17)$$

Tương tự như thế, ta được

$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(3):$

$$\chi\{2,1\} = \begin{vmatrix} h_2 & h_3 \\ 1 & h_1 \end{vmatrix} = h_1 h_2 - h_3 = \chi\{1\}\,\chi\{1\}' \,[\chi\{2\}\,\chi\{2\}' +$$
$$+ \chi\{0\}\,\chi\{1^2\}'] - [\chi\{3\}\,\chi\{3\}' + \chi\{1\}\,\chi\{2,1\}'] =$$
$$= \chi\{1\}\,\chi\{2\}\,\chi\{1\}'\,\chi\{2\}' + \chi\{1\}\,\chi\{0\}\,\chi\{1\}'\,\chi\{1^2\}' -$$
$$- \chi\{3\}\,\chi\{3\}' - \chi\{1\}\,\chi\{2,1\}'$$

Dùng các chuỗi Clebsch — Gordan của SU(2) và SU(3), từ đó ta được

$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(3):$

$$\{2,1\} = \{1\} \otimes \{3\}' \oplus \{3\} \otimes \{2,1\}' \oplus \{1\} \otimes \{2,1\}' \oplus \{1\} \otimes \{0\}' \quad (3\text{-}18)$$

Tương tự như thế, dùng XVI (1-47), ta được

$SU(6) \downarrow SU(2) \otimes SU(3):$

$$\{2, 1^4\} = \{2\} \otimes \{2,1\}' \oplus \{2\} \otimes \{0\}' \oplus \{0\} \otimes \{2,1\}' . \quad (3\text{-}19)$$

§4. BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM $SU(m+n) \downarrow SU(m) \otimes SU(n)$

Các hàm đối xứng sơ cấp và toàn phần

Theo định nghĩa, nhóm $SU(m+n)$ là nhóm bảo toàn dạng hecmitic

$$|z^1|^2 + \ldots |z^m|^2 + |z^{m+1}|^2 + \ldots + |z^{m+n}|^2 = \text{inv} .$$

Cho cố định $z^1, \ldots, z^m$, ta được nhóm con SU(n). Cho cố định $z^{m+1}, \ldots, z^{m+n}$, ta được nhóm con SU(m). Như thế $SU(m) \otimes SU(n)$ là một nhóm con của nhóm $SU(m+n)$ (Xem XVII, §1). Cách nhúng nhóm con này vào trong nhóm $SU(m+n)$ cũng được xác định bởi sự phân tích trên. Theo sự phân tích này, ta có thể viết

$$X = \begin{bmatrix} X' & 0 \\ 0 & X'' \end{bmatrix}, \; X \in SU(m+n), \; X' \in SU(m), \; X'' \in SU(n),$$
$$z_1 z_2 \ldots z_m = 1 , \; z_{m+1} z_{m+2} \ldots z_{m+n} = 1 .$$

Thế thì, các hàm đối xứng sơ cấp và đối xứng toàn phần của các nhóm SU(m) và SU(n) sẽ là

$$a'_i = a'_i(z_1, \ldots, z_m) , \; h'_i = h'_i(z_1, \ldots, z_m) , \; a'_0 = h'_0 = 1 ,$$
$$a'_i = h'_i = 0 \text{ khi } i < 0 , \; a'_i = 0 \text{ khi } i > m ,$$
$$a''_i = a''_i(z_{m+1}, \ldots, z_{m+n}) , \; h''_i = h''_i(z_{m+1}, \ldots, z_{m+n}) ,$$
$$a''_0 = h''_0 = 1 , \; a''_i = h''_i = 0 \text{ khi } i < 0 , \; a''_i = 0 \text{ khi } i > n . \quad (4\text{-}1)$$

Các phép tính cho các hàm đối xứng sơ cấp và đối xứng toàn phần sau của nhóm SU(m + n)

$$h_p = \sum_{i=0}^{p} h'_{p-i}\, h''_i\,,\ a_p = \sum_{i=0}^{p} a'_{p-i}\, a''_i\,, \tag{4-2}$$

$$a_o = h_o = 1,\quad a_p = h_p = 0 \text{ khi } p < 0,\quad a_p = 0 \text{ khi } p > m + n. \tag{4-3}$$

Chẳng hạn, với m = 2, n = 4, từ (4-2), ta được

$$a_1 = a'_1 + a''_1\,,\ a_2 = 1 + a'_1 a''_1 + a''_2\,, a_3 = a''_1 + a'_1 a''_2 + a''_3\,,$$

$$a_4 = a''_2 + a'_1 a''_3 + 1,\ a_5 = a''_3 + a'_1. \tag{4-4}$$

Từ đó, theo XVI (1-49), ta được (các lượng có dấu phẩy tương ứng với nhóm SU(2), các lượng với hai dấu phẩy tương ứng với nhóm SU(4)):
SU(4 + 2) ↓ SU(2) ⊗ SU(4):

$$\{1\} = \{1\}' \otimes \{0\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{1\}'',$$
$$\{1^2\} = \{0\}' \otimes \{0\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{1\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{1^2\}'',$$
$$\{1^3\} = \{0\}' \otimes \{1\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{1^2\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{1^3\}'',$$
$$\{1^4\} = \{0\}' \otimes \{1^2\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{1^3\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{0\}'',$$
$$\{1^5\} = \{0\}' \otimes \{1^3\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{0\}''. \tag{4-5}$$

Các công thức (4-2), (4-3), các công thức XVI, (1-46) ÷ (1-49) và các chuỗi Clebsch-Gordan của các nhóm SU(2) và SU(4) sẽ cho phép giải bài toán biểu diễn hạ cảm đặt ra.

Ví dụ

Chẳng hạn, theo XVI (1-46) và (4-5) ta có

$$X\{2, 1\} = \begin{vmatrix} h_2 & h_3 \\ 1 & h_1 \end{vmatrix} = h_1 h_2 - h_3 = (h'_1 + h''_1).$$

$$(h'_2 + h'_1 h''_1 + h''_2) - (h'_3 + h'_2 h''_1 + h'_1 h''_2 + h''_3).$$

Thay các h' và h'' bởi các đặc biểu của các biểu diễn bất khả quy theo XVI (1-48) và dùng các chuỗi Clebsch-Gordan của các nhóm SU (2) và SU (4), ta được kết quả

SU(6) ↓ SU(2) ⊗ SU(4):

$$70 = \{2, 1\} = \{1\}' \otimes \{0\}'' \oplus \{2\}' \otimes \{1\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{1\}'' \oplus$$
$$\oplus \{1\}' \otimes \{2\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{1^2\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{2, 1\}''. \tag{4-6}$$

Ta xét biểu diễn $\{2, 1^4\}$. Theo XVI (1-47) ta được

$$X\{2, 1^4\} = a_1 a_5 - a_6 = a_1 a_5 - 1 = (a'_1 + a''_1)(a''_3 + a'_1) - 1.$$

Từ đó, các chuỗi Clebsch-Gordan cho các nhóm SU(4) và SU(2) cho kết quả

SU(6) ↓ SU(2) ⊗ SU(4) :

$$35 = \{2, 1^4\} = \{2\}' \otimes \{0\}' \oplus \{0\}' \otimes \{0\}'' \oplus \{0\}' \otimes \{2, 1^2\}'' \oplus$$
$$\oplus \{1\}' \otimes \{1^3\}'' \oplus \{1\}' \otimes \{1\}''. \qquad (4\text{-}7)$$

§ 5. CÁC BÀI TOÁN BIỂU DIỄN HẠ CẢM SO(n) ↓ SO(n−1) và Sp(2n) ↓ Sp(2n−2)

Trên đây ta đã dùng phương pháp hàm f^+ để giải một số các bài toán biểu diễn hạ cảm. Trong một số bài toán khác, như các bài toán SO(n) ↓ SO(n−1), Sp(2n) ↓ Sp(2n−2), có thể dùng một phương pháp khác là phương pháp đặc biểu (như ở § 3 và 4) với các đặc biểu đã tính ở § 2, 3, 4 chương XV. Tuy nhiên, vì các trường hợp biểu diễn hạ cảm này rất ít gặp phải trong các ứng dụng vật lý, nên ở đây ta chỉ nêu lên các quy tắc chia nhánh sau

1.

a) SO(2l + 1) ↓ SO(2l) :

$$[m_1, \ldots, m_l] = \sum_{m'_1, \ldots, m'_l} [m'_1, \ldots, m'_l] \qquad (5\text{-}1)$$

tổng lấy theo tất cả các m'_i thỏa mãn các bất đẳng thức

$$m_1 \geqslant m'_1 \geqslant m_2 \geqslant m'_2 \geqslant m_3 \geqslant \ldots \geqslant m_l \geqslant |m'_l|, \qquad (5\text{-}2)$$

các m'_i là nguyên hay bán nguyên tùy theo các m_i là nguyên hay bán nguyên.

b) SO(2l) ↓ SO(2l − 1) :

$$[m_1, \ldots, m_l] = \sum_{m'_1, \ldots, m'_{l-1}} [m'_1, \ldots, m'_{l-1}], \qquad (5\text{-}3)$$

tổng lấy theo tất cả các m'_i thỏa mãn các bất đẳng thức

$$m_1 \geqslant m'_1 \geqslant m_2 \geqslant m'_2 \geqslant m_3 \geqslant \ldots \geqslant m_{l-1} \geqslant |m_l|, \qquad (5\text{-}4)$$

các m'_i là nguyên hay bán nguyên tùy theo các m_i là nguyên hay bán nguyên.

Trong hai trường hợp trên, phép nhúng nhóm được thực hiện bằng cách cố định tọa độ x^n trong dạng

$$(x^1)^2 + \ldots (x^n)^2.$$

2.

Sp(2l) ↓ Sp(2l − 2) :

$$\langle m_1, \ldots, m_l \rangle = \sum_{m'_1, \ldots, m'_l} \cdot \sum_{m''_l, \ldots, m''_{l-1}} \langle m''_1, \ldots, m''_{l-1} \rangle \qquad (5\text{-}5)$$

trong đó các m_i' thỏa mãn các bất đẳng thức

$$m_1 \geqslant m'_1 \geqslant m_2 \geqslant m'_2 \geqslant m_3 \geqslant \ldots \geqslant m_l \geqslant m'_l \geqslant 0, \qquad (5\text{-}6)$$

và tiếp theo đó, các m_i'' thỏa mãn các bất đẳng thức

$$m'_1 \geqslant m''_1 \geqslant m'_2 \geqslant m''_2 \geqslant m_3' \geqslant \dots \geqslant m''_{l-1} \geqslant m_l'. \qquad (5\text{-}7)$$

Phép nhúng nhóm có thể thực hiện bằng cách cho cố định một không gian con hai chiều nào đó của không gian trong đó nhóm Sp(2l) tác dụng

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [24], [25], [26].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Đọc §1, §2, §3, §5.

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Đọc như C

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương.

CHƯƠNG XVIII

ỨNG DỤNG LÝ THUYẾT NHÓM VÀO VIỆC PHÂN LOẠI CÁC TRẠNG THÁI NGUYÊN TỬ VÀ HẠT NHÂN

§1. CÁC CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA BÀI TOÁN HỆ NHIỀU HẠT ĐỒNG NHẤT

Chúng ta hãy nhắc lại một số cơ sở vật lý của bài toán hệ nhiều hạt đồng nhất. Tất cả các điểm sau đây đều có trình bày trong mọi giáo trình cơ học lượng tử.

Nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất

Các hạt trong cơ học lượng tử không có quỹ đạo, trạng thái của các hạt được đặc trưng bằng hàm sóng. Hàm sóng của hệ bôzôn là hoàn toàn đối xứng, còn hàm sóng của hệ fecmion là hoàn toàn phản xứng đối với mọi hoán vị từng cặp hạt.

Nguyên lý loại trừ Pauli

Trong một hệ hạt fecmiôn đồng nhất các hạt đều ở những trạng thái khác nhau. Nguyên lý này là hệ quả của nguyên lý thứ nhất.

Phương pháp tính gần đúng Hartree-Fock

Trong một hệ êlectron của nguyên tử, mỗi êlectron đều có thể gần đúng xem như chuyển động độc lập với nhau trong một *trường xuyên tâm* nào đó sinh bởi các êlectrôn khác và các hạt nhân nguyên tử.

Trong một hệ nuclôn (tạo nên hạt nhân), mỗi nuclôn đều có thể gần đúng xem như chuyển động độc lập với nhau trong một *trường xuyên tâm* nào đó tạo nên bởi các nuclôn khác.

Các trường xuyên tâm trên thường gọi là *trường tự thích* (hợp).

Phương pháp tính gần đúng với các giả thiết trên do Hartree-Fock đề ra, gọi là phương pháp tính gần đúng Hartree-Fock.

Tương tác L - S

Đó là tương tác giữa các hạt khi không kể đến tương tác spin-oocbitan. Tương tác L-S xảy ra đối với các nguyên tử nhẹ hoặc với các hạt nhân ở đó lực hạt nhân xem như không phụ thuộc đáng kể vào spin của các nuclôn. Tương tác L-S còn gọi là *liên kết L-S*.

Tương tác j-j

Trong trường hợp ta có kể đến tương tác spin-oocbitan, tương tác gọi là j-j hay *liên kết j-j*.

Dạng các hàm sóng

Hàm sóng của hạt thứ i của hệ (hệ êlectrôn hay hệ nuclôn) có dạng

Liên kết j-j

Êlectrôn thứ i : $\Phi_{n_i j_i m_{j_i}}(\mathbf{r}_i)$, $-j \leqslant m_j \leqslant j$.

Nuclôn thứ i : $\Phi_{n_i j_i m_{j_i}}(\mathbf{r}_i)\, \chi_{m_{\tau_i}}(\tau_i)$, $m_{\tau_i} = \pm 1/2$,

Liên kết L-S

Electrôn thứ i : $\Phi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i)\, \chi_{m_{s_i}}(\sigma_i)$, $m_{s_i} = \pm 1/2$, $-l \leqslant m_l \leqslant l$,

Nuclôn thứ i : $\Phi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_i)\, \chi_{m_{s_i}}(\sigma_i)\, \chi_{m_{\tau_i}}(\tau_i)$.

Trong các biểu thức trên, hàm $\Phi(\mathbf{r})$ gọi là *hàm sóng tọa độ*, hàm $\chi(\sigma)$ gọi là *hàm sóng spin*, hàm $\chi(\tau)$ gọi là *hàm sóng spin đồng vị* và hàm $\chi(\sigma)\,\chi(\tau)$ gọi là hàm sóng *spin-spin đồng vị*.

Cấu hình

Các hạt thuộc hệ có thể có những số lượng tử khác nhau. Trong trường hợp hệ N hạt, nếu $l_i = l$ (và $n_i = n$) ta nói có một cấu hình nào đó và ký hiệu l^N. Đối với số lượng tử j cũng thế. Thực nghiệm cho thấy tương tác giữa các êlectrôn thuộc những cấu hình khác nhau là không đáng kể (ít nhất là với những cấu hình tương ứng với mức năng lượng cơ bản và các mức năng lượng kích thích thấp nhất). Đối với nuclôn, ta cũng có một *giả thiết* như thế.

Như thế, ở mức gần đúng bậc không, ta có thể giới hạn ở những hệ trong đó các hạt thuộc cùng một cấu hình (tức là có cùng l hay cùng j).

§2. CÁC TÍNH CHẤT ĐỐI XỨNG

Sự phân loại hệ các hạt đồng nhất phụ thuộc chủ yếu vào các tính chất đối xứng của hệ. Như thế, cần phải tìm các nhóm đối xứng. Có các loại đối xứng khác nhau sau đây.

Tính đối xứng spin

Đó là tính đối xứng giữa hai thành phần khác nhau của spin của mỗi hạt, dẫn đến nhóm đối xứng $SU(2)_S$, đẳng cấu với nhóm SO(3), vì nguồn gốc của tính đối xứng này là tính đẳng hướng của không gian ba chiều thông thường (xem XI, §7).

Do hàm spin của mỗi hạt đều tuân theo một phép biến đổi như nhau của nhóm $SU(2)_S$, hàm spin toàn phần của toàn hệ, tích của hàm spin mỗi hạt, sẽ tạo nên một không gian tenxơ hạng N nào đó, thực hiện một biểu diễn (nói chung khả quy) nào đó của nhóm đối xứng $SU(2)_S$ (xem VII, § 11).

Tính đối xứng spin đồng vị hay đối xứng unita

Đó là tính đối xứng giữa hai hình thái khác nhau là prôtôn và nơtrôn của hạt nuclôn, dẫn đến nhóm unita $SU(2)_T$. Nguồn gốc vật lý của tính đối xứng này là tính chất độc lập điện tích của các lực hạt nhân. Tính đối xứng này thường gọi là tính đối xứng unita. Về hình thức cách giải quyết tính đối xứng này giống như đối với tính đối xứng spin.

Hàm sóng spin đồng vị toàn phần của toàn hệ, tích của các hàm sóng spin của mỗi nuclôn, sẽ tạo nên một không gian tenxơ hạng N nào đó, thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm $SU(2)_T$.

Tính đối xứng spin-spin unita

Ta hãy xét một hệ nuclôn với tương tác L-S. Hàm sóng spin-spin đồng vị

$$\chi_{m_S}(\sigma)\chi_{m_\tau}(\tau),\ m_s = \pm\frac{1}{2},\ m_\tau = \pm\frac{1}{2}.$$

có bốn thành phần. Hàm sóng này có thể xem là thực hiện biểu diễn đồng nhất $\{1\}$ của nhóm $SU(4) \supset SU(2)_S \otimes SU(2)_T$. Nhóm đối xứng này gọi là nhóm đối xứng spin-spin unita. Hàm sóng spin-spin đồng vị toàn phần của toàn hệ nuclôn—tích của các hàm sóng spin-spin đồng vị từng hạt—sẽ tạo nên một không gian tenxơ hạng N nào đó, thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm SU(4).

Tính đối xứng do phương pháp Hartree-Fock

Giá trị lý thuyết tầm rộng của phương pháp tính gần đúng Hartree-Fock là chuyển bài tính hệ phức tạp nhiều hạt đồng nhất về bài tính chuyển động trong trường xuyên tâm với nhóm đối xứng SO(3) (« khôi phục » lại tính đối xứng!). Từ đó, các trạng thái cùng năng lượng của mỗi hạt sẽ làm thành những không gian nào đó, thực hiện những biểu diễn bất khả quy $2j+1$ chiều $\mathcal{D}^{(j)}$ của nhóm SO(3).

Nhưng do nhóm SO(3) là một nhóm compăc, các biểu diễn của nhóm đều có thể xem là unita. Mặt khác các trạng thái có thể xem là chuẩn hóa và trực giao với nhau. Thành thử, các không gian nói trên có thể xem là những không gian thực hiện biểu diễn đồng nhất của nhóm $SU(2j+1)$, (j là số nguyên hay bán nguyên tùy trường hợp).

Hàm sóng tọa độ toàn phần của toàn hệ—tích của hàm tọa độ mỗi hạt—sẽ tạo nên một không gian tenxơ hạng N nào đó, thực hiện một biểu diễn nào đó của nhóm $SU(2j+1)$.

Tính đối xứng loại trừ các hệ fecmiôn

Từ nay về sau, ta chỉ xét các hệ fecmiôn. Ta biết rằng hàm sóng toàn phần của toàn hệ có thể viết dưới dạng tích của hàm tọa độ toàn phần với hàm spin toàn phần hay hàm spin-spin đồng vị toàn phần (tùy theo từng trường hợp cụ thể). Mặt khác, do nguyên lý Pauli, hàm sóng toàn phần đó phải có tính chất phản xứng hoàn toàn. Điều này có nghĩa là giữa các biểu diễn của các nhóm đối xứng nói trên (nhóm $SU(2j+1)$, $SU(2)_S$, $SU(2)_T$, SU(4)) có tồn tại một quan hệ nào đó, đảm bảo nguyên lý Pauli. Tính chất này cũng là một tính chất đối xứng rất đặc biệt của cơ học lượng tử, và gọi là tính đối xứng loại trừ.

Nói tóm lại, ta có các nhóm đối xứng sau : (N là số hạt của hệ)

1a). Liên kết L-S, cấu hình êlectrôn l^N:

Nhóm nửa đơn $\qquad \mathcal{G} = SU(2l+1) \otimes SU(2)_S.$ (2-1)

1b). Liên kết L-S, cấu hình nuclôn l^N:

Nhóm nửa đơn $\qquad \mathcal{G} = SU(2l+1) \otimes SU(4).$ (2-2)

2a). Liên kết j-j, cấu hình êlectrôn j^N:

Nhóm đơn $\qquad \mathcal{G} = SU(2j+1).$ (2-3)

2b). Liên kết j-j, cấu hình nuclôn j^N:

Nhóm nửa đơn $\qquad \mathcal{G} = SU(2j+1) \otimes SU(2)_T.$ (2-4)

§ 3. BÀI TOÁN TOÁN HỌC VỀ PHÂN LOẠI

Hệ quả của tính đối xứng loại trừ

Theo phương pháp phân loại nói chung, ta cần tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng của hệ. Nhưng do tính đối xứng loại trừ, chỉ có các biểu diễn bất khả quy hoàn toàn phản xứng của $\mathcal{G}$ là cho phép. Nhưng vì biểu diễn này là tích của các biểu diễn bất khả quy của các nhân tử, nên vấn đề quy về tìm các biểu diễn bất khả quy $\{\lambda\}$ của nhân tử thứ nhất và các biểu diễn bất khả quy $\{\nu\}$ của nhân tử thứ hai ở (2-1)$\div$(2-4) sao cho tích $\{\lambda\} \otimes \{\nu\}$ chứa biểu diễn hoàn toàn phản xứng.

Như đã biết, biểu diễn hoàn toàn phản xứng có đặc biểu là $\chi(p) = \delta_p$. Thành thử số lần biểu diễn này nằm trong biểu diễn $\{\lambda\} \otimes \{\nu\}$, theo II(10-4), là

$$c = \frac{1}{N!} \sum_p \delta_p \, \chi^{\{\lambda\}}(p) \, \chi^{\{\nu\}}(p).$$

Nhưng, theo IV, §7, gọi $\{\tilde{\nu}\}$ là sơ đồ liên hợp của sơ đồ $\{\nu\}$, ta có (xem IV (7-23))

$$\delta_p \chi^{\{\nu\}}(p) = \chi^{\{\tilde{\nu}\}}(p).$$

Thành thử, theo công thức trực giao II(9-10), ta được

$$c = \frac{1}{N!} \sum_p \chi^{\{\lambda\}}(p) \, \chi^{\{\tilde{\nu}\}}(p) = \delta_{\{\lambda\}\{\tilde{\nu}\}},$$

$$c = 1 \text{ khi và chỉ khi } \tilde{\nu} = \lambda.$$

Điều này chứng tỏ rằng biểu diễn phản xứng của nhóm nửa đơn chỉ xuất hiện khi các sơ đồ Young của các biểu diễn bất khả quy của các nhân tử là liên hợp với nhau, và chỉ xuất hiện một lần.

Tính chất liên hợp này đề ra một số hạn chế trực tiếp như sau : vì các biểu diễn bất khả quy của các nhóm SU(n) là tương ứng với những sơ đồ Young có không quá n hàng, nên ta được ngay các kết quả sau :

1a). Liên kết L-S, cấu hình êlectrôn l^N :

Các sơ đồ có không quá $2l + 1$ hàng và 2 cột,

$$N \leqslant 2(2l + 1).$$

1b). Liên kết L-S, cấu hình nuclôn l^N :

Các sơ đồ có không quá $2l + 1$ hàng và 4 cột,

$$N \leqslant 4(2l + 1).$$

2a). Liên kết j-j, cấu hình êlectrôn j^N :

Các sơ đồ có không quá $2j + 1$ hàng, ta có biểu diễn $\{1^N\}$ với

$$N \leqslant 2j + 1.$$

2b). Liên kết j-j, cấu hình nuclôn j^N :

Các sơ đồ có không quá $2j + 1$ hàng và 2 cột,

$$N \leqslant 2(2j + 1).$$

Phương pháp chung về lý thuyết nhóm để đánh số các trạng thái

Nói chung, khi phân loại các mức năng lượng theo các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng, các mức năng lượng đều suy biến. Do đó, cần phải phân biệt các trạng thái cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau, bằng cách đánh số các trạng thái đó với nhiều số lượng tử khác nhau.

Chẳng hạn, trong bài toán chuyển động trọng trường xuyên tâm, các mức năng lượng được phân loại theo các biểu diễn bất khả quy $\mathcal{D}^{(j)}$ của nhóm SO(3). Nhưng tương ứng với số lượng tử j xác định (trọng trưởng của biểu diễn) ta có $2j + 1$ (bậc suy biến) trạng thái. Để phân biệt các trạng thái này với nhau, thông thường ta đánh số bằng một số lượng tử thứ hai là m_j, có giá trị đi từ $-j$ đến j. Thành thử các trạng thái, vectơ riêng của toán tử H, có thể viết dưới dạng Φ_{jm_j} (nói chính xác hơn, dưới dạng Φ_{njm_j} với n xem là cố định).

Điểm quan trọng cần đặc biệt lưu ý ở đây là các chỉ số m_j, ràng buộc bởi điều kiện $-j \leqslant m_j \leqslant j$, chính là các trọng biểu diễn của nhóm con SO(2) $\subset$ SO(3), xuất hiện trong bài toán biểu diễn hạ cảm SO(3) $\downarrow$ SO(2). Thành thử, ta có thể nói rằng: xích nhóm và bài tính biểu diễn hạ cảm

$$SO(3) \supset SO(2), \; SO(3) \downarrow SO(2): \mathcal{D}^{(j)} = \sum \oplus\, a_{m_j}\, \mathcal{D}_z^{(m_j)}$$

($a_{m_j} = 1$) là nội dung của phương pháp đánh số các hàm sóng: chính các đại lượng j và m_j đặc trưng các biểu diễn bất khả quy, xuất hiện trong bài toán biểu diễn hạ cảm của xích nhóm, được dùng để đánh số các trạng thái.

Trong trường hợp chung, tình hình cũng tương tự như thế. Các đại lượng đặc trưng các biểu diễn bất khả quy $\{\lambda\}$ và $\{\tilde{\lambda}\}$ của các nhân tử của nhóm đối xứng $\mathcal{G}$ của hệ hạt, nói chung không đủ để phân biệt các trạng thái khác nhau cùng tương ứng với một mức năng lượng như nhau. Thành thử, tương tự như trong trường hợp chuyển động xuyên tâm, ta có thể tìm một số nhóm con của các nhân tử của nhóm đối xứng. Từ đó ta được một số xích nhóm nào đó mà các bài tính biểu diễn hạ cảm sẽ cho một số đặc trưng nào đó (của các biểu diễn bất khả quy), đủ để đánh số các trạng thái cùng tương ứng với một mức năng lượng suy biến.

Rõ ràng phương pháp đánh số này dẫn đến ba bài toán toán học sau đây về lý thuyết nhóm:

Bài toán nhúng nhóm, bài toán tìm hệ thống các biểu diễn bất khả quy của các nhóm có mặt trong các xích nhóm và bài toán biểu diễn hạ cảm.

Đối với các nhóm đơn thông thường (nhóm kinh điển, nhóm $\mathcal{G}_2$) các bài toán này đã được giải quyết ở các chương trước.

§ 4. BÀI TOÁN PHÂN LOẠI VỚI LIÊN KẾT j-j

1. Cấu hình êlectrôn j^N

Theo (2-3), nhóm đối xứng là nhóm đơn SU(2j + 1). Trong trường hợp này, đơn giản nhất là chọn xích nhóm sau: (nhóm SO(3) bao giờ cũng có thể nhúng vào nhóm SU(n), với $n \geqslant 3$)

$$SU(2j+1) \supset SO(3) \supset SO(2), \tag{4-1}$$

từ đó, ta có các bài toán biểu diễn hạ cảm

$$SU(2j+1) \downarrow SO(3) : \{\lambda\} = \sum \oplus\, a_J \mathcal{D}^{(J)}, \tag{4-2}$$

$$SO(3) \downarrow SO(2) : \mathcal{D}^{(J)} = \sum_{M_J} \oplus\, \mathcal{D}_z^{(M_J)}. \tag{4-3}$$

Bài toán (4-2) cho các giá trị mômen xung lượng toàn phần J và bài toán (4-3) cho các giá trị mômen chiếu toàn phần M_J, $-J \leqslant M_J \leqslant J$, của hệ êlectrôn đang xét.

Hàm sóng có thể đánh số bằng các đặc trưng $\{\lambda\}$, J và M_J của các biểu diễn bất khả quy của các nhóm của xích nhóm (4-1):

$$\Phi_{\{\lambda\}JM_J} \text{ hay } \{\lambda\}JM_J. \tag{4-4}$$

Các giá trị J thu được gọi là *J–cấu trúc* của cấu hình đang xét.

Tất nhiên, xích nhóm trên trở nên không đầy đủ khi trong số các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(2j + 1) (j cho trước!), có những biểu diễn cho nhiều giá trị J như nhau ($a_J > 1$).

Chẳng hạn với (4-6) ta có trường hợp $j = 7/2$: giá trị của $J = 4$ hay $J = 2$ xuất hiện hai lần trong biểu thức khai triển của biểu diễn $\{1^4\}$ của nhóm SU(8), ($j = 7/2$, $N = 4$). Trong các trường hợp $j = 9/2$, $N = 3$ (nhóm SU(10)), $j = 9/2$, $N = 4$ (nhóm SU(10))... ta cũng có tình hình tương tự như thế. Trong các trường hợp này, cần dùng một số nhóm phụ $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \ldots, \mathcal{G}_p$ nào đó và ta có các xích nhóm như sau

$$SU(2j+1) \supset \mathcal{G}_1 \supset \ldots \supset \mathcal{G}_p \supset SO(3) \supset SO(2). \tag{4.5}$$

Vấn đề, như đã nói ở trên, là phải xét các điều kiện nhúng nhóm.

Bảng J—cấu trúc của các cấu hình j^N

Cấu hình j^N	J—cấu trúc
3/2	3/2
$(3/2)^2$	2,0
5/2	5/2
$(5/2)^2$	4, 2, 0
$(5/2)^3$	9/2, 5/2, 3/2
7/2	7/2
$(7/2)^2$	6, 4, 2, 0
$(7/2)^3$	15/2, 11/2, 9/2, 7/2, 5/2, 3/2
$(7/2)^4$	8, 6, 5, $(4)^2$, $(2)^2$, 0
9/2	9/2
$(9/2)^2$	8, 6, 4, 2, 0
$(9/2)^3$	21/2, 17/2, 15/2, 13/2, 11/2, $(9/2)^2$, 7/2 5/2, 3/2
$(9/2)^4$	12, 10, 9, $(8)^2$, 7, $(6)^3$, 5, $(4)^3$, 3, $(2)^2$, $(0)^2$
$(9/2)^5$	25/2, 21/2, 19/2, $(17/2)^2$, $(15/2)^2$, $(13/2)^2$, $(11/2)^2$, $(9/2)^3$, $(7/2)^2$, $(5/2)^2$, 3/2, 1/2.

(4-6)

Ta hãy xét trường hợp đơn giản nhất chỉ cần một nhóm phụ $\mathcal{G}_1$ nào đó. Vì với j bán nguyên, nhóm SO(3) chỉ có những dạng song tuyến tính phản xứng (xem XVII, §1) nên, nếu chúng ta chỉ hạn chế ở những nhóm phụ trong hàng ngũ các nhóm SO hay Sp, ta thấy rằng nhóm phụ cần tìm phải thuộc loại Sp, cụ thể là nhóm $Sp(2j+1)$. Các đặc trưng của các biểu diễn bất khả quy của nhóm phụ $Sp(2j+1)$ này, cùng với các đặc trưng $\{\lambda\}$, J và M_J, có thể cho phép đánh số các trạng thái một cách đầy đủ. Thông thường, người ta lấy đặc trưng của biểu diễn $\langle\mu\rangle$ của nhóm $Sp(2j+1)$ là số N của cấu hình j^N, ở đó biểu diễn $\langle\mu\rangle$ xuất hiện lần đầu tiên trong bài toán biểu diễn hạ cảm

$$SU(2j+1) \downarrow Sp(2j+1) \; : \; \{\lambda\} = \sum \oplus a_\mu \langle\mu\rangle .$$

Đặc trưng này gọi là *số trưởng thành* và ký hiệu là v.

Bảng JT—cấu trúc của cấu hình hạt nhân j^N

j	N	$\{\lambda\}SU(2j+1)$	$\langle\mu\rangle Sp(2j+1)$	v	T	J
3/2	0	$\{0\}$	$\langle 0,0\rangle$	0	0	0
	1	$\{1\}$	$\langle 1,0\rangle$	1	1/2	3/2
	2	$\{2\}$	$\langle 2,0\rangle$	2	0	1, 3
		$\{1^2\}$	$\langle 0,0\rangle$	0	1	0
			$\langle 1^2\rangle$	2		2
5	3	$\{2,1\}$	$\langle 1,0\rangle$	1	1/2	3/2
			$\langle 2,1\rangle$	3		1/2, 5/2, 7/2
		$\{1^3\}=\{1\}$	$\langle 1,0\rangle$	1	3/2	3/2
	4	$\{2^2\}$	$\langle 0,0\rangle$	0	0	0
			$\langle 1^2\rangle$	2		2
			$\langle 2^2\rangle$	4		2, 4
		$\{2,1^2\}$	$\langle 2,0\rangle$	2	1	1, 3
			$\langle 1^2\rangle$	2		2
5/2	0	$\{0\}$	$\langle 0,0,0\rangle$	0	0	0
	1	$\{1\}$	$\langle 1,0,0\rangle$	1	1/2	5/2
	2	$\{2\}$	$\langle 2,0,0\rangle$	2	0	1, 3, 5
		$\{1^2\}$	$\langle 0,0,0\rangle$	0	1	0
			$\langle 1^2,0\rangle$	2		2, 4
	3	$\{2,1\}$	$\langle 1,0,0\rangle$	1	1/2	5/2
			$\langle 2,1,0\rangle$	3		1/2, 3/2, 5/2, (7/) ^{2}
						9/2, 11/2, 13/2
		$\{1^3\}$	$\langle 1,0,0\rangle$	1	3/2	5/2
			$\langle 1^3\rangle$	3		3/2, 9/2

2. Cấu hình nuclôn j^N (4.7)

Nhóm đối xứng theo (2-4) là nhóm nửa đơn $SU(2j+1)\otimes SU(2)_T$. Bài toán tìm J—cấu trúc tương ứng với nhân tử thứ nhất $SU(2j+1)$ của nhóm đối xứng đã trình bày ở trên. Đối với nhân tử thứ hai $SU(2)_T$, biểu diễn $\{\tilde{\lambda}\}$ sẽ cho spin đồng vị tổng T và spin đồng vị tổng chiếu M_T. Xích nhóm và bài toán biểu diễn hạ cảm là

$$SU(2)_T \approx SO(3) \supset SO(2),$$

$$SO(3)\downarrow SO(2)\ :\ \mathcal{D}^{(T)} = \sum \oplus \mathcal{D}_z^{(M_T)}\ ,\quad -T \leqslant M_T \leqslant T. \tag{4-8}$$

Theo VIII, (9-8), ta có ngay

$$T = \tilde{\lambda}/2. \tag{4-9}$$

Chẳng hạn, theo (4-7), với biểu diễn $\{\lambda\} = \{1^2\}$ của nhóm SU(4) khi $j = 3/2$, $N = 2$ (tức là với cấu hình nuclôn $3/2^2$), ta có $\{\tilde{\lambda}\} = \{2\}$, $\tilde{\lambda} = 2$, từ đó công thức (4-9) cho $T = 2/2 = 1$.

Trong trường hợp phức tạp, khi một biểu diễn của nhóm SU(2j + 1) cho nhiều giá trị của J, ta cũng có thể dùng các nhóm phụ như trong trường hợp 1). Nói riêng, trong trường hợp đơn giản nhất chỉ dùng một nhóm phụ, ta có thể dùng số trưởng thành v để đánh số các trạng thái cùng chung giá trị J như trên.

Với cấu hình nuclôn j^N, bài toán đánh số trạng thái còn gọi là bài toán tìm *JT—cấu trúc* của hệ hạt.

TÓM TẮT VỀ LIÊN KẾT j-j VỚI CÁC CẤU HÌNH j^N

Hệ electrôn

1. Xích nhóm (trường hợp đơn giản nhất) và các đặc trưng của biểu diễn

$$\begin{array}{ccccc} SU(2j+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \{\lambda\} & & J & & M_J \end{array} \qquad (4\text{-}10)$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}\, JM_J. \qquad (4\text{-}11)$$

2. Xích nhóm (trường hợp phức tạp hơn) và các đặc trưng các biểu diễn

$$\begin{array}{ccccccc} SU(2j+1) & \supset & Sp(2j+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \{\lambda\} & & v & & J & & M_J \end{array} \qquad (4\text{-}12)$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}\, {}_vJM_J. \qquad (4\text{-}15)$$

Hệ nuclôn

Xích nhóm (trường hợp một nhóm phụ) và các đặc trưng của biểu diễn

$$\begin{array}{ccccccc} SU(2j+1) & \supset & Sp(2j+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2), \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \{\lambda\} & & v & & J & & M_J \end{array} \qquad (4\text{-}16)$$

$$\begin{array}{ccccc} SU(2)_T & \approx & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \{\tilde{\lambda} = 2T\} & & T & & M_T \end{array}$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}\, {}_vJM_JTM_T, \qquad (4\text{-}17)$$

§5. BÀI TOÁN PHÂN LOẠI VỚI LIÊN KẾT L-S

1. Cấu hình electrôn l^N

Theo (2-1), nhóm đối xứng là nhóm nửa đơn $SU(2l + 1) \otimes SU(2)_S$. Bài toán đánh số các trạng thái giải quyết tương tự như bài toán cấu hình nuclôn trong trường hợp liên kết j-j với một số điểm thay đổi sau:

Thay mômen tổng J (và M_J) bằng mômen tổng L (và M_L), do trong trường hợp đang xét l là những số nguyên.

Thay spin đồng vị tổng T (và M_T) bằng spin tổng S (và M_S).

Trong trường hợp cần đưa thêm nhóm phụ, ta thay nhóm $Sp(2j+1)$ bằng nhóm $SO(2l+1)$, do với l nguyên thì ta có dạng song tuyến đối xứng (xem XVII §1). Ta cũng đưa ra khái niệm số trưởng thành v của các biểu diễn bất khả quy của nhóm $SO(2l+1)$, có nội dung như với nhóm $Sp(2j+1)$.

TÓM TẮT VỀ LIÊN KẾT L-S VỚI CẤU HÌNH ÊLECTRÔN l^N

1. Xích nhóm (trường hợp giản đơn nhất) và các đặc trưng của biểu diễn.

$$\begin{array}{ccccccccc} SU(2l+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) & , & SU(2)_S \approx SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \quad\quad \downarrow & & \downarrow \\ \{\lambda\} & & L & & M_L & & \{\tilde{\lambda}=2S\} \quad S & & M_S \end{array} \tag{5-1}$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}\, LM_L\, SM_S \text{ hay } \{\lambda\}^{2S+1}LM_L \text{ hay } \{\lambda\}^{2S+1}L. \tag{5-2}$$

2. Xích nhóm (trường hợp phức tạp hơn) và các đặc trưng của biểu diễn

$$\begin{array}{ccccccccccccc} SU(2l+1) & \supset & SO(2l+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2), & SU(2)_S & \approx & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \{\lambda\} & & v & & L & & M_L & \{\tilde{\lambda}=2S\} & & S & & M_S \end{array} \tag{5-3}$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}_v LM_L\, SM_S \text{ hay } \{\lambda\}_v^{2S+1} LM_L \text{ hay } \{\lambda\}_v^{2S+1} L. \tag{5-4}$$

Bài toán trình bày trên còn gọi là bài toán tìm *LS—cấu trúc* của các cấu hình êlectrôn.

Bảng LS—cấu trúc cho các cấu hình êlectrôn p^N

N	$\{\lambda\}$, L	$\{\tilde{\lambda}\}$, S	Các đa tuyến ^{2S+1}L
1	$\{1\}$, $L=1$	$\{1\}$, $S=\frac{1}{2}$	^2P
2	$\{2\}$, $L=2,0$	$\{1^2\}$, $S=0$	^1S, ^1D
	$\{1^2\}$, $L=1$	$\{2\}$, $S=1$	^3P
3	$\{2,1\}$, $L=2,1$	$\{2,1\}$, $S=\frac{1}{2}$	^2P, ^2D
	$\{1^3\}$, $L=0$	$\{3\}$, $S=\frac{3}{2}$	^4S

(5-5)

Bảng LS—cấu trúc cho các cấu hình electron d^N

N	$\{\lambda\}$, L	$\{\tilde{\lambda}\}$, S	Các đa tuyến $2S+1_L$
1	$\{1\}$, $L=2$	$\{1\}$, $S=\frac{1}{2}$	^2D
2	$\{2\}$, $L=4,2,0$	$\{1^2\}$, $S=0$	^1S, ^1D, ^1G
	$\{1^2\}$ $L=3,1$	$\{2\}$, $S=1$	^3P, ^3F
3	$\{2,1\}$, $L=5,4,3,2^2,1$	$\{2,1\}$, $S=\frac{1}{2}$	^2P, $(^2D)^2$, ^2F, ^2G, ^2H
	$\{1^3\}$, $L=3,1$	$\{3\}$, $S=\frac{3}{2}$	^4P, ^4F
4	$\{1^4\}$, $L=2$	$\{4\}$, $S=2$	^5D
	$\{2,1^2\}$, $L=5,4,3^2,2,1^2$	$\{3,1\}$, $S=1$	^3H, ^3G, $(^3F)^2\ldots$
	$\{2^2\}$, $L=6,4^2\,3,2^2,0^2$	$\{2^2\}$, $S=0$	^1I, $(^1G)^2$, $^1F\ldots$
5	$\{1^5\}$, $L=0$	$\{5\}$, $S=\frac{5}{2}$	^6S
	$\{2,1^3\}$, $L=4,3,2,1$	$\{4,1\}$, $S=\frac{3}{2}$	^4G, ^4F, ^4D, ^4P
	$\{2^2,1\}$, $L=6,5,4^2,3^2,2^3,1,0$	$\{3,2\}$, $S=\frac{1}{2}$	^2I, ^2H, $(^2G)^2\ldots$

(5-6)

Với cấu hình f^N, một nhóm phụ $\mathcal{G}_1 = SO(7)$ không đủ để đặc trưng các trạng thái (suy biến theo L). Người ta chứng minh rằng trong trường hợp này, có thể dùng thêm một nhóm phụ thứ hai là nhóm $\mathcal{G}_2$, do nhóm này là một nhóm con của nhóm SO(7) (xem trang 460).

Ta có xích nhóm sau

$$SU(7) \supset SO(7) \supset \mathcal{G}_2 \supset SO(3) \supset SO(2),$$

và nội dung của việc đánh số trạng thái quy về các bài toán biểu diễn hạ cảm sau

$$SU(7) \downarrow SO(7),\quad SO(7) \downarrow \mathcal{G}_2,\quad \mathcal{G}_2 \downarrow SO(3),\quad SO(3) \downarrow SO(2).$$

2. Cấu hình nuclôn l^N

Bài toán đánh số trạng thái trong trường hợp này tương đối phức tạp. Ta có nhóm đối xứng $SU(2l+1) \otimes SU(4)$.

Bảng LS—cấu trúc của các cấu hình electrôn d^N

N	$\{\lambda\}$ SU(5)	$[\mu]$ SO(5)	v	L	$\{\tilde{\lambda}\}$ S	Các mức năng lượng
0	$\{0\}$	$[0, 0]$	0	S	$\{0\}$ 0	${}^1_0S$
1	$\{1\}$	$[1, 0]$	1	D	$\{1\}$ 1/2	${}^2_1D$
2	$\{2\}$	$[0, 0]$	0	S	$\{1^2\}$ 0	${}^1_0S$
		$[2, 0]$	2	D, G	$\{1^2\}$ 0	${}^1_2D$ ${}^1_2G$
	$\{1^2\}$	$[1^2]$	2	P, F	$\{2\}$ 1	${}^3_2P$ ${}^3_2F$
3	$\{2, 1\}$	$[1, 0]$	1	D	$\{2, 1\}$ 1/2	${}^2_1D$
		$[2, 1]$	3	P, D, F, G, H	$\{2, 1\}$ 1/2	${}^2_3P$ ${}^2_3D$ ${}^2_3F$ ${}^2_3G$ ${}^2_3H$
	$\{1^3\}$	$[1^2]$	2	P, F	$\{3\}$ 3/2	${}^4_2P$ ${}^4_2F$
4	$\{1^4\}$	$[1, 0]$	1	D	$\{4\}$ 2	${}^5_1D$
	$\{2, 1^2\}$	$[1^2]$	2	P, F	$\{3, 1\}$ 1	${}^3_2P$ ${}^3_2F$
		$[2, 1]$	3	P, D, F, G, H	$\{3, 1\}$ 1	${}^3_3P$ ${}^3_3D$ ${}^3_3F$ ${}^3_3G$ ${}^3_3H$
	$\{2^2\}$	$[0, 0]$	0	S	$\{2^2\}$ 0	${}^1_0S$
		$[2, 0]$	2	D, G	$\{2^2\}$ 0	${}^1_2D$ ${}^1_2G$
		$[2^2]$	4	S, D, F, G, I	$\{2^2\}$ 0	${}^1_4S$ ${}^1_4D$ ${}^1_4F$ ${}^1_4G$ ${}^1_4I$
5	$\{1^5\}$	$[0, 0]$	0	S	$\{5\}$ 5/2	${}^6_0S$
	$\{2, 1^3\}$	$[1^2]$	2	P, F	$\{4, 1\}$ 3/2	${}^4_2P$ ${}^4_2F$
		$[2, 0]$	2	D, G	$\{4, 1\}$ 3/2	${}^4_2D$ ${}^4_2G$
	$\{2^2, 1\}$	$[1, 0]$	1	D	$\{3, 2\}$ 1/2	${}^2_1D$
		$[2, 1]$	3	P, D, F, G, H	$\{3, 2\}$ 1/2	${}^2_3P$ ${}^2_3D$ ${}^2_3F$ ${}^2_3G$ ${}^2_3H$
		$[2^2]$	4	S, D, F, G, I	$\{3, 2\}$ 1/2	${}^2_4S$ ${}^2_4D$ ${}^2_4F$ ${}^2_4G$ ${}^2_4I$

(5-7)

Bảng LS—cấu trúc cho các cấu hình êlectrôn f^N

N	$\{\lambda\}$ SU(7)	$[\mu]$ SO(7)	v	L	$\{\tilde{\lambda}\}$ S
0	$\{0\}$	$[0, 0, 0]$	0	S	$\{0\}$ 0
1	$\{1\}$	$[1, 0, 0]$	1	F	$\{1\}$ 1/2
2	$\{2\}$	$[0, 0, 0]$	0	S	$\{1^2\}$ 0
		$[2, 0, 0]$	2	D, G, I	$\{1^2\}$ 0
	$\{1^2\}$	$[1, 1, 0]$	2	P, F, H	$\{2\}$ 1
3	$\{2, 1\}$	$[1, 0, 0]$	1	F	$\{2, 1\}$ 1/2
		$[2, 1, 0]$	3	P, D^2, F, G^2, H^2, I, K, L	$\{2, 1\}$ 1/2
	$\{1^3\}$	$[1^3]$	3	S, D, F, G, I	$\{3\}$ 3/2
4	$\{2^2\}$	$[0, 0, 0]$	0	S	$\{2^2\}$ 0
		$[2, 0, 0]$	2	D, G, I	$\{2^2\}$ 0
		$[2^2, 0]$	4	S, D^3, F, G^3, H^2, I^2, K,	
				L^2, M	$\{2^2\}$ 0
	$\{2, 1^2\}$	$[1^2, 0]$	2	P, F, H	$\{3, 1\}$ 1
		$[2, 1^2]$	4	P^2, D^2, F^3, G^3, H^3, I^2	
				K^2, L, M	$\{3, 1\}$ 1
	$\{1^4\} = \{1^3\}$	$[1^3]$	3	S, D, F, G, I	$\{4\}$ 2
5	$\{2^2, 1\}$	$[1, 0, 0]$	1	F	$\{3, 2\}$ 1/2
		$[2, 1, 0]$	3	P, D^2, F, G^2, H, I, K, L	$\{3, 2\}$ 1/2
		$[2^2, 1]$	5	P^3, D^3, F^5, G^4, H^5, I^4, K^4, L^2,	
				M^2, N,O	$\{3, 2\}$ 1/2
	$\{2, 1^3\}$	$[1^3]$	3	S, D, F, G, I	$\{4, 1\}$ 3/2
		$[2, 1^2]$	4	P^2, D^2, F^3, G^3, H^3, I^2, K^2, L, M	$\{4, 1\}$ 3/2
	$\{1^5\} = \{1^2\}$	$[1^2, 0]$	2	P, F, H	$\{5\}$ 5/2
6	$\{2^3\}$	$[0, 0, 0]$	0	S	$\{3^2\}$ 0
		$[2, 0, 0]$	2	D, G, I	$\{3^2\}$ 0
		$[2^2, 0]$	4	S, D^3, F, G^3, H^2, I^2, K, L^2, N	$\{3^2\}$ 0
		$[2^3]$	6	S^2, P, D^2, F^3, G^4, H^2, I^4	
				K^2, L^2, M^2, N, R	$\{3^2\}$ 0
	$\{2^2\ 1^2\}$	$[1^2, 0]$	2	P, F, H	$\{4, 2\}$ 1
		$[2, 1^2]$	4	P^2, D^2, F^3, G^3, H^3, I^2, K^2, L, M	$\{4, 2\}$ 1
		$[2^2\ 1]$	5	P^3, D^3, F^5, G^4, H^5, I^4, K^4, L^2,	
				M^2, N, Q	$\{4, 2\}$ 1
...	...	...	...	...	...

Với nhân tử thứ nhất của nhóm đối xứng, vấn đề đánh số giải quyết như với nhân tử thứ nhất của nhóm đối xứng của cấu hình êlectrôn ở mục 1).

Với nhân tử thứ hai là nhóm đơn SU(4), bài toán đánh số trạng thái spin-spin đồng vị chính là tìm các đại lượng spin tổng S và spin đồng vị tổng T. Đó chính là bài toán biểu diễn hạ cảm

$$SU(4) \downarrow SU(2)_T \otimes SU(2)_S, \tag{5-9}$$

đã giải ở XVII § 3. Ở đấy, ta đã đưa ra một số ví dụ để minh họa.

Các phép tính cụ thể cho phép lập bảng (5-14), trong bảng này ta đã dùng ký hiệu tắt như sau:

Theo XVII (3-17), chẳng hạn ta có
$SU(4) \downarrow SU(2)_T \otimes SU(2)_S$:

$$\{2,2\} = \{0\}_T \otimes \{0\}_S \oplus \{0\}_T \otimes \{4\}_S \oplus \{4\}_T \otimes \{0\}_S \oplus \{2\}_T \otimes \{2\}_S$$

và kết quả này đã ghi vắn tắt như sau trong bảng (5-14)

$$\{2, 2\} \rightarrow (0, 0), (0, 2), (2, 0), (1, 1),$$

theo công thức chung VIII (9-8).

TÓM TẮT VỀ LIÊN KẾT L-S VỚI CẤU HÌNH NUCLON l^N

1. Xích nhóm (trường hợp đơn giản nhất) và các đặc trưng của biểu diễn

$$\begin{array}{cccccc} SU(2l+1) \supset & SO(3) \supset & SO(2), & SU(4) \supset & SU(2)_T \otimes & SU(2)_S \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \{\lambda\} & L & M_L & \{\tilde{\lambda}\} & T & S \end{array} \tag{5-10}$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}\, LM_L\, TM_T\, SM_S \text{ hay } \{\lambda\}\, {}^{2T+1,2S+1}L. \tag{5-11}$$

2. Xích nhóm (trường hợp phức tạp hơn) và các đặc trưng của biểu diễn

$$\begin{array}{ccccccc} SU(2l+1) \supset & SO(2l+1) \supset & SO(3) \supset & SO(2), & SU(4) \supset & SU(2)_T \otimes & SU(2)_S \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \{\lambda\} & v & L & M_L & \{\tilde{\lambda}\} & T & S \end{array} \tag{5-12}$$

Trạng thái:

$$\{\lambda\}_v\, LM_L TM_T\, SM_S \text{ hay } \{\lambda\}_v\, {}^{2T+1,2S+1}L. \tag{5-13}$$

Bảng (TS)—cấu trúc của các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU (4)

{λ}	(T, S)
{0}	(0, 0)
{1}	(1/2, 1/2)
{2}	(0, 0) (1, 1)
{1, 1}	(0, 1) (1, 0)
{3}	(1/2, 1/2) (3/2, 3/2)
{2, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2)
{4}	(0, 0) (1, 1) (2, 2)
{3, 1}	(0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1)
{2, 2}	(0, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 1)
{2, 1, 1}	(0,1) (1, 0) (1, 1)
{5}	(1/2, 1/2) (3/2, 3/2) (5/2, 5/2)
{4, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (3/2, 3/2) (3/2, 5/2) (5/2, 3/2)
{3, 2}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (1/2, 5/2) (5/2, 1/2) (3/2, 3/2)
{3, 1, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (3/2, 3/2)
{6}	(0, 0) (1, 1) (2, 2) (3, 3)
{5, 1}	(0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1) (2, 2) (2, 3) (3, 2)
{4, 2}	(0, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 1)^2 (1, 2) (2, 1) (1, 3) (3, 1) (2, 2)
{4, 1, 1}	(0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1) (2, 2)
{3, 3}	(0, 1) (1, 0) (0, 3) (3, 0) (1, 2) (2, 1)
{3, 2, 1}	(0, 1) (1, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 1)^2 (1, 2) (2, 1)
{7}	(1/2, 1/2) (3/2, 3/2) (5/2, 5/2) (7/2, 7/2)
{6, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (3/2, 3/2) (3/2, 5/2) (5/2, 3/2) (5/2, 5/2) (5/2 7/2) (7/2, 5/2)
{5, 2}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (1/2, 5/2) (5/2, 1/2) (3/2, 3/2)^2 (3/2, 5/2) (5/2, 3/2) (5/2, 5/2) (3/2, 7/2) (7/2, 3/2) (5/2, 5/2)
{5, 1, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (3/2, 3/2) (3/2, 5/2) (5/2, 3/2) (5/2, 5/2)
{4, 3}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2) (1/2, 5/2) (5/2, 1/2) (1/2, 7/2) (7/2, 1/2) (3/2, 3/2) (3/2, 5/2) (5/2, 3/2)
{4, 2, 1}	(1/2, 1/2) (1/2, 3/2)^2 (3/2, 1/2)^2 (1/2, 5/2) (5/2, 1/2) (3/2, 3/2)^2, (3/2, 5/2) (5/2, 3/2)
{8}	(0, 0) (1, 1) (2, 2) (3, 3) (4, 4)
{7, 1}	(0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1) (2, 2) (2, 3) (3, 2) (3, 3) (3, 4) (4, 3)
{6, 2}	(0, 0) (1, 1)^2 (2, 2)^2 (3, 3) (0, 2) (2, 0) (1, 2) (2, 1) (1, 3) (3, 1) (2, 3) (3, 2) (2, 4) (4, 2)
{6, 1, 1}	(1, 1) (2, 2) (3, 3) (0, 1) (1, 0) (1, 2) (2, 1) (2, 3) (3, 2)
{5, 3}	(1, 1) (2, 2) (0, 1) (1, 0) (0, 3) (3, 0) (1, 2)^2 (2, 1)^2 (1, 3) (3, 1) (1, 4) (4, 1) (2, 3) (3, 2)
{5, 2, 1}	(1, 1)^2 (2, 2)^2 (0, 1) (1, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 2)^2 (2, 1)^2 (1, 3) (3, 1) (2, 3) (3, 2)
{4, 4}	(0, 0) (1, 1) (2, 2) (0, 2) (2, 0) (0, 4) (4, 0) (1, 3) (3, 1)
{4, 3, 1}	(0, 1) (1, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 1)^2 (1, 2)^2 (2, 1)^2 (1, 3) (3, 1) (2, 2)
{4, 2, 2}	(0, 0) (0, 2) (2, 0) (1, 1)^2 (1, 2) (2, 1) (2, 2)

(5-14)

Bảng L (T. S) — cấu trúc cho các cấu hình hạt nhân d^N

N	$\{\lambda\}$ SU (5)	$[\mu]$ SO (5)	v	$\{\tilde{\lambda}\}$ SU (4)	L (T, S)
0	$\{0\}$	$[0, 0]$	0	$\{0\}$	S (0, 0)
1	$\{1\}$	$[1, 0]$	1	$\{1\}$	D (1/2, 1/2)
2	$\{2\}$	$[0, 0]$	0	$\{1^2\}$	S (0, 1) (1, 0)
		$[2, 0]$	2		GD (0, 1) (1, 0)
	$\{1^2\}$	$[1^2]$	2	$\{2\}$	FP (0, 0) (1, 1)
3	$\{3\}$	$[1, 0]$	1	$\{1^3\} = \{1\}$	D (1/2, 1/2)
		$[3, 0]$	3		I G F S (1/2, 1/2)
	$\{2, 1\}$	$[1, 0]$	1	$\{2, 1\}$	D (1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2)
		$[2, 1]$	3		H D F G P (1/2, 1/2) (1/2, 3/2) (3/2, 1/2)
	$\{1^3\} = \{1^2\}$	$[1]$	2	$\{3\}$	F P (1/2, 1/2) (3/2, 3/2)
4	$\{4\}$	$[0, 0]$	0	$\{1^4\} = \{0\}$	S (0, 0)
		$[2, 0]$	2		G D (0, 0)
		$[4, 0]$	4		L I H G D (0, 0)
	$\{3, 1\}$	$[1^2]$	2	$\{2, 1^2\}$	FP (0, 1) (1, 0) (1, 1)
		$[2, 0]$	2		G D (0, 1) (1, 0) (1, 1)
		$[3, 1]$	4		K I H^2 G F^2 D P (0, 1) (1, 0) (1, 1)
	$\{2^2\}$	$[0, 0]$	0	$\{2^2\}$	S (0, 0) (1, 1) (0, 2) (2, 0)
		$[2, 0]$	2		G D (0, 0) (1, 1) (0, 2) (2, 0)
		$[2^2]$	4		I G F D S (0, 0) (1, 1) (0, 2) (2, 0)
	$\{2, 1^2\}$	$[1^2]$	2	$\{3, 1\}$	F P (0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1)
		$[2, 1]$	3		H G F D P (0, 1) (1, 0) (1, 1) (1, 2) (2, 1)
	$\{1^4\} = \{1\}$	$[1, 0]$	1	$\{4\}$	D (0, 0) (1, 1) (2, 2)

(5-15)

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [10], [12], [17].

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — *Những kiến thức cần cho vật lý phân tử*
Không cần đọc chương này.

B – *Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể*
Không cần đọc chương này.

C — *Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử*
Đọc toàn chương.

D — *Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân*
Đọc toàn chương.

E — *Những kiến thức cần cho các hạt cơ bản*
Không cần đọc chương này.

CHƯƠNG XIX

ỨNG DỤNG LÝ THUYẾT NHÓM VÀO VẬT LÝ HỌC CÁC HẠT CƠ BẢN

§ 1. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC HẠT CƠ BẢN THEO NHÓM ĐỐI XỨNG SU(2)

Tính đối xứng unita

Trong chương này ta hãy ứng dụng lý thuyết biểu diễn nhóm vào lý thuyết các hạt cơ bản. Ta chỉ hạn chế trong một số vấn đề quan trọng nhất và hiểu dưới danh từ hạt cơ bản là các hạt cơ bản chính cống cùng với các cộng hưởng.

Tác giả coi bạn đọc đã có những kiến thức cần thiết về vật lý các hạt cơ bản.

Ta biết rằng các hạt cơ bản có nhiều đặc trưng lượng tử có tính chất gián đoạn như điện tích Q, khối lượng M, spin S, spin đồng vị T, siêu tích Y, số barion B, số lạ, các số chẵn lẻ khác nhau v.v... Giữa điện tích Q, spin đồng vị T_3 và siêu tích Y có hệ thức

$$Q = T_3 + \frac{Y}{2}. \tag{1-1}$$

Sự phân loại các hạt cơ bản dựa trên một số trong số các đặc trưng đó. Trong quá trình phát triển của lý thuyết các hạt cơ bản, số đặc trưng cần thiết cho sự phân loại ngày càng tăng. Trước hết là phân loại theo spin đồng vị T, sau đó theo spin đồng vị T và siêu tích Y, sau nữa theo spin đồng vị T, siêu tích Y và spin thông thường S. Thành thử nhóm đối xứng làm cơ sở của sự phân loại dựa vào lý thuyết biểu diễn nhóm, ngày càng được mở rộng. Từ đó xuất hiện danh từ *đối xứng cao*, thường gọi là *đối xứng unita*.

Phép phân loại theo nhóm SU(2)

Như đã biết, tính chất các lực hạt nhân không phụ thuộc vào điện tích các nuclôn (tức là p và n) đã đưa đến quan niệm xem các hạt p và n là hai hình thái của cùng một hạt nuclôn. Hai hạt này làm thành một tenxơ hạng nhất hai chiều, căng không gian thực hiện biểu diễn đồng nhất của nhóm $SU(2)_T$.

Tiếp theo, thực nghiệm lại cho thấy rằng có những họ hạt có khối lượng xấp xỉ như nhau, như Σ^+, Σ^o, Σ^- hay Ξ^-, Ξ^o, có tính chất tham gia một cách đối xứng vào các tương tác mạnh. Sự kiện này gọi là tính bất biến đồng vị. Điều này dẫn đến quan niệm có một không gian ba chiều nào đó, gọi là không gian spin đồng vị, và người ta thừa nhận nhóm quay

$$SO(3)_T \approx SU(2)_T$$

trong không gian đó làm nhóm đối xứng, cơ sở của sự phân loại bước đầu. Các hạt cơ bản được phân loại theo các biểu diễn bất khả quy $\{2T\}$ của nhóm đó, tập hợp tất cả các hạt cùng tương ứng với biểu diễn $\{2T\}$, gọi là một *đa tuyến đồng vị* hay một *T — đa tuyến*. Theo lý thuyết biểu diễn nhóm, T — đa tuyến có $2T+1$ thành phần. Chẳng hạn ta có

Các T — đơn tuyến Λ, Ω^-, $T = 0$,

Các T — lưỡng tuyến (p, n), (Ξ^-, Ξ^o), (K^+, K^o), $(\overline{K}^o, K^-)$, $T = 1/2$,

Các T — tam tuyến (π^+, π^o, π), $(\Sigma^+, \Sigma^o, \Sigma^-)$, $(\Sigma^+_\delta, \Sigma^o_\delta, \Sigma^-_\delta)$, $T = 1$,

T — tứ tuyến $(\Delta^{++}_\delta, \Delta^+_\delta, \Delta^o_\delta, \Delta^-_\delta)$, $T = 3/2$, v.v...

Đặc biệt ta xét các T — tam tuyến, biến đổi theo biểu diễn phó $\{2, 1^{2-2}\} = \{2\}$, $(T = 1)$, của nhóm $SU(2)_T$. Các trạng thái được mô tả bởi các thành phần của tenxơ hỗn hợp có vết bằng không (xem XI (4-27))

$$\widetilde{\psi}^i_j = \psi^i_j - \frac{1}{2}\delta^i_j\psi^k_k = \begin{bmatrix} \widetilde{\psi}^1_1 & \widetilde{\psi}^1_2 \\ \widetilde{\psi}^2_1 & \widetilde{\psi}^2_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\psi^1_1 - \psi^2_2) & \psi^1_2 \\ \psi^2_1 & -\frac{1}{2}(\psi^1_1 - \psi^2_2) \end{bmatrix} \tag{1-2}$$

Ta có thể viết các tam tuyến này dưới dạng ma trận

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\Sigma^o & \Sigma^+ \\ \Sigma^- & -\frac{1}{\sqrt{2}}\Sigma^o \end{bmatrix}, \quad \Pi = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^o & \pi^+ \\ \pi^- & -\frac{1}{\sqrt{2}}\pi^o \end{bmatrix}, \text{ v.v...}$$

với $1/\sqrt{2}$ là thừa số chuẩn hóa.

§ 2. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC HẠT CƠ BẢN THEO NHÓM ĐỐI XỨNG SU (3)

Các điều kiện về nhóm đối xứng

Trên đây, ta đã lấy nhóm SU(2) làm nhóm đối xứng của các hạt cơ bản và đã tiến hành phân loại theo spin đồng vị T. Bây giờ ta hãy giả sử có một tính chất đối xứng cao hơn, cho phép phân loại cả theo spin đồng vị T, cả theo siêu tích Y. Trước hết, cũng như đối với nhóm SU(2), ta buộc điều kiện nhóm đối xứng phải là một nhóm đơn. Tiếp theo, vì trong thực nghiệm các lượng T_3 và Y đo được đồng thời, nên ta lại giả sử các đại lượng đó căng không gian hai chiều của đại số con Cartan $\mathcal{H}$ của đại số Lie của nhóm đơn đó, do đại số con Cartan là một đại số giao hoán (cực đại). Hai hình chiếu

$$\lambda_{T_3},\ \lambda_Y, \qquad \lambda = (\lambda_{T_3},\ \lambda_Y),\ \lambda \in \widetilde{\mathcal{H}},$$

của trọng λ của các biểu diễn bất khả quy của đại số Lie đơn đó, theo cách đặt vấn đề nói trên, sẽ phải tỷ lệ với các đại lượng T_3 và Y. Như thế, đại số Lie của nhóm đối xứng phải là một đại số Lie đơn hạng $l = 2$. Nhưng theo sự phân loại Cartan về đại số Lie đơn, chỉ có bốn đại số Lie đơn hạng hai. Đó là $\mathcal{A}_2$, $\mathcal{B}_2$, $\mathcal{C}_2$ và $\mathcal{G}_2$. Nếu giới hạn trong các nhóm compăc tương ứng với các đại số đó, ta chỉ có bốn nhóm đơn compăc sau thỏa mãn các yêu cầu trên: SU(3), SO(5), Sp(4) và $\mathcal{G}_2$ Sự lựa chọn nhóm nào trong số các nhóm đó làm nhóm đối xứng tùy thuộc vào chỗ các hệ quả của lý thuyết có phù hợp hay không với các số liệu thực nghiệm. Người ta thấy rằng nhóm SU(3) cho các kết quả phù hợp nhất.

Cách đánh số các siêu tuyến

Như thế, sự phân loại các hạt cơ bản theo (T, Y) — cấu trúc dựa vào các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(3).

Các hạt cơ bản được phân loại theo « các mức khối lượng », nghĩa là được xem như những trạng thái khối lượng và làm thành những cái gọi là *siêu tuyến*. Số thành phần của siêu tuyến, tức là bậc suy biến của các mức khối lượng, theo tinh thần chung của phương pháp phân loại theo lý thuyết nhóm, bằng số chiều của biểu diễn bất khả quy tương ứng của nhóm SU(3). Để phân biệt các thành phần khác nhau trong mỗi siêu tuyến, nghĩa là để đánh số các trạng thái khác nhau tương ứng với cùng một mức khối lượng, cần phải dùng một số số lượng tử nào đó. Theo cách đặt vấn đề ở trên, các số lượng tử này chính là T_3(T) và Y.

Bài tính toán học ở đây như thế là bài tính phân loại các biểu diễn bất khả quy của nhóm đối xứng SU(3) và bài tính tìm (T, Y) — cấu trúc của từng biểu diễn đó. Bài tính thứ nhất đã được giải quyết: các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(3) có thể thực hiện bởi các tenxơ hỗn hợp có vết bằng không theo mọi cặp chỉ số và có những tính chất đối xứng nhất định (sơ đồ Young) đối với các chỉ số. Để giải quyết bài tính thứ hai, cần tìm trọng của các biểu diễn khác nhau và chiếu vectơ trọng lên hai trục thích hợp thẳng góc với nhau của không gian $\widetilde{\mathcal{H}}$. Ta biết rằng trọng tương ứng với tenxơ

$$\psi^{ij\cdots k}_{lm\cdots n}$$

có dạng

$$\lambda_i + \lambda_j \dots + \lambda_k - (\lambda_l + \lambda_m + \dots + \lambda_n), \tag{2-1}$$

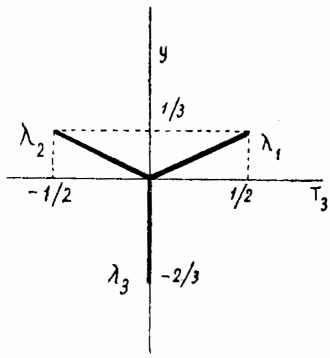
vì các chỉ số phản biến là tương ứng với biểu diễn đồng nhất với hệ trọng λ_1, λ_2 và λ_3, còn các chỉ số hiệp biến là tương ứng với biểu diễn phản bộ của biểu diễn đồng nhất với hệ trọng $-\lambda_1$, $-\lambda_2$ và $-\lambda_3$. Tất nhiên, các chỉ số trong biểu thức (2-1) phải tuân theo một số điều kiện về thứ tự nào đấy tùy theo các tính chất đối xứng của các tenxơ nói trên. Chẳng hạn, với biểu diễn {3}, được thực hiện với tenxơ hạng ba hoàn toàn đối xứng

$$\psi^{ijk},$$

các chỉ số i, j, k phải tuân theo điều kiện (xem XV, §1).

$$i \leqslant j \leqslant k.$$

Vì đại lượng T đặc trưng biểu diễn bất khả quy $\{2T\}$ của nhóm $SU(2)_T \subset SU(3)$ nên, để tránh sự mò mẫm, ta có thể tìm ngay các giá trị của T từ bài toán biểu diễn hạ cảm $SU(3) \downarrow SU(2)_T$. Mặt khác, vì các trọng của các biểu diễn bất khả quy khác nhau của nhóm đều là nhưng tổ hợp tuyến tính của các trọng $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, còn phép chiếu là một toán tử tuyến tính nên, trước hết, cần phải tìm các hình chiếu của các trọng này trên một hệ trục thẳng góc nào đó của không gian $\widetilde{\mathcal{H}}$. Ta hãy chọn trục thứ nhất nằm dọc theo một trong các nghiệm $\lambda_1 - \lambda_2, \lambda_2 - \lambda_3, \lambda_3 - \lambda_1$ của đại số Lie $\mathcal{A}_2$, chẳng hạn dọc theo nghiệm $\lambda_1 - \lambda_2$. Sau đó, ta co trục thứ nhất theo tỷ số $\sqrt{3}$ và trục thứ hai theo tỷ số 3/2. Hai trục này tương ứng lấy làm trục T_3 và trục Y. Thế thì, với $|\lambda_i|$ giả sử bằng 1, ta được



Hình 19-1

$$\lambda_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right), \quad \lambda_2 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right),$$

$$\lambda_3 = \left(0, -\frac{2}{3}\right). \tag{2-2}$$

Theo (2-2) và VII, (6-19), ta thấy rằng

$$T_3 = \frac{1}{2} F_3, \quad Y = \frac{1}{\sqrt{3}} F_8, \qquad F_3, F_8 \in \widetilde{\mathcal{H}}. \tag{2-3}$$

Ngoài các hệ thức VII (6-20), các vi tử F còn thỏa mãn các hệ thức sau

$$\mathrm{Sp}(F_i F_j) = 2\delta_{ij}, \tag{2-4}$$

$$[F_i, F_j]_+ \equiv F_i F_j + F_j F_i = 2d_{ijk} + \frac{4}{3}\delta_{ij}, \tag{2-5}$$

với d_{ijk} là hoàn toàn đối xứng đối với mọi hoán vị các chỉ số và

$$d_{811} = d_{822} = d_{833} = -d_{888} = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$d_{844} = d_{855} = d_{866} = d_{877} = -\frac{1}{2\sqrt{3}},$$

$$d_{146} = d_{157} = -d_{247} = d_{256} = d_{344} = d_{355} = -d_{366} = -d_{377} = \frac{1}{2}, \tag{2-6}$$

các thành phần độc lập khác đều bằng không.

Biểu diễn đồng nhất và các quoăc

Đến đây ta hãy tính (T, Y) — cấu trúc cho các biểu diễn bất khả quy của nhóm SU(3). Các kết quả thu được sẽ cho phép đồng nhất các thành phần của các tenxơ thực hiện biểu diễn với các hạt cơ bản. Trước hết, ta xét biểu diễn đồng nhất $\{1\}$ với tenxơ biểu diễn là $\psi^i (i = 1, 2, 3)$.

Theo XIII (3-2), ta có

$$SU(3) \downarrow SU(2) : \{1\} = \{1\} \oplus \{0\},$$

hay

$$\{1\} \rightarrow T = 1/2, 0 \qquad (2\text{-}7)$$

tức là siêu tuyến $\{1\}$ của nhóm SU(3) phân thành một T — đơn tuyến và một T — lưỡng tuyến.

Mặt khác, công thức (2-2) cho (T_3, Y) — cấu trúc của biểu diễn:

$$\{1\} \rightarrow (T_3, Y) = (1/2, 1/3), (-1/2, 1/3), (0, -2/3). \qquad (2\text{-}8)$$

Phối hợp các kết quả (2-7) và (2-8), ta được

$$\{1\} \rightarrow (T, Y) = (1/2, 1/3), (0, -2/3). \qquad (2\text{-}9)$$

Đến nay, chưa thấy có những hạt cơ bản nào xếp thành siêu tuyến $\{1\} = 3$ của nhóm SU(3). Nếu có, những hạt này gọi là *quoăc*. Quoăc chia làm hai loại, loại quoăc có $(T, Y) = (1/2, 1/3)$ gọi là *quoăc không lạ*, và loại quoăc có $(T, Y) = (0, -2/3)$, gọi là *quoăc lạ*. Theo (1-1), hai thành phần của quoăc không lạ có điện tích không nguyên $Q = 2/3$ và $-1/3$. Quoăc lạ có điện tích bằng $-1/3$. Vấn đề phát hiện các quoăc hay chứng minh chúng hoàn toàn không tồn tại là một vấn đề có tính chất cơ bản của lý thuyết đối xứng SU(3), vì biểu diễn $\{1\} = 3$ là biểu diễn cơ bản của nhóm.

Biểu diễn phó và các ôctet

Trước khi chuyển sang các biểu diễn khác của nhóm SU(3), từ biểu thức (2-1) của trọng biểu diễn và các đẳng thức (2-2), ta có thể nhận xét rằng với biểu diễn $\{p + q, q\}$, lượng Y có những giá trị sau

$$p + \frac{2}{3}(q - p) = Y_{max}, \; p + \frac{2}{3}(q - p) - 1, \ldots, -q - \frac{2}{3}(p - q).$$

Từ đó ta thấy rằng chỉ với những biểu diễn trong đó

$$p - q = 3n, \quad n : \text{nguyên}$$

thì siêu tích Y mới có những giá trị nguyên. Vì thế sau đây ta chỉ lần lượt xét các biểu diễn

$$8 = \{2, 1\}, \quad p = 1, \quad q = 1,$$
$$10 = \{3, 0\}, \quad p = 3, \quad q = 0,$$
$$27 = \{4, 2\}, \quad p = 2, \quad q = 2.$$

Như thế ta xét biểu diễn phó $\{2, 1\}$ thực hiện bởi tenxơ $\widetilde{\psi}^i_j$ có vết bằng không. Trước hết ta có

$SU(3) \downarrow SU(2)_T$:

$$\{2, 1\} = \{2, 0\} \oplus \{2, 1\} \oplus \{1, 0\} \oplus \{1, 1\} = \{2\} \oplus 2\,\{1\} \oplus \{0\},$$
$$\{2, 1\} \rightarrow T = 1, (1/2)^2, 0,$$

tức là siêu tuyến $\{2, 1\} = 8$ phân thành một T — tam tuyến, hai T — lưỡng tuyến và một T — đơn tuyến. Kết quả này cho ta một thông tin để nhóm các thành phần trực chuẩn khác nhau của tenxơ biểu diễn $\tilde{\psi}^i_j$ (i, j = 1, 2, 3), thành các nhóm khác nhau, tương ứng với các T — đa tuyến (xem (2-2) và lưu ý rằng trọng tương ứng với thành phần $\tilde{\psi}^i_j$ là $\lambda_i - \lambda_j$):

T — lưỡng tuyến: $(\tilde{\psi}^1_3, \tilde{\psi}^2_3)$, trọng: $\lambda_1 - \lambda_3, \lambda_2 - \lambda_3$,

$$(T_3, Y) = (1/2, 1), (-1/2, 1), (T, Y) = (1/2, 1);$$

T — lưỡng tuyến: $(\tilde{\psi}^3_2, \tilde{\psi}^3_1)$, trọng: $\lambda_3 - \lambda_2, \lambda_3 - \lambda_1$,

$$(T_3, Y) = (1/2, -1), (-1/2, -1), (T, Y) = (1/2, -1);$$

T — đơn tuyến: $\frac{1}{\sqrt{6}}(\tilde{\psi}^1_1 + \tilde{\psi}^2_2 - 2\tilde{\psi}^3_3)$, trọng: 0,

$$(T_3, Y) = (0, 0), (T, Y) = (0, 0);$$

T — tam tuyến: $(\tilde{\psi}^1_2, \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}^1_1 - \tilde{\psi}^2_2), \tilde{\psi}^2_1)$, trọng: $\lambda_1 - \lambda_2, 0, \lambda_2 - \lambda_1$,

$$(T_3, Y) = (1, 0), (0, 0), (-1, 0), (T, Y) = (1, 0).$$

Tiếp theo, so sánh các kết quả này với bảng các hạt cơ bản, ta có thể phân loại như sau (các hạt có khối lượng xấp xỉ như nhau và có cùng giá trị của spin S, cũng như số chẵn lẻ P, được xếp vào cùng một siêu tuyến):

Siêu tuyến	**Siêu tuyến mêzon**	**Trạng thái tương ứng**
Barion $\frac{1}{2}+$	*Giả vô hướng* 0^-	
(p, n) ,	(K^+, K^0)	$= (\tilde{\psi}^1_3, \tilde{\psi}^2_3)$,
$(\Xi^0, -\Xi^-)$,	$(K^0, -K^-)$	$= (\tilde{\psi}^3_2, \tilde{\psi}^3_1)$,
Λ ,	η	$= \frac{1}{\sqrt{6}}(\tilde{\psi}^1_1 + \tilde{\psi}^2_2 - 2\tilde{\psi}^3_3)$,
$(\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-)$	(π^+, π^0, π^-)	$= (\tilde{\psi}^1_2, \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}^1_1, -\tilde{\psi}^2_2), \tilde{\psi}^2_1)$. (2-10)

Ngoài các siêu tuyến này, còn có các siêu tuyến khác cũng tuân theo biểu diễn phó của nhóm SU(3). Cách sắp xếp các siêu tuyến trên gọi là *mẫu ôctet* của các hạt tương ứng.

Theo (2-10), ta có chẳng hạn.

$$\Sigma^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}^1_1 - \tilde{\psi}^2_2), \quad \Lambda = \frac{1}{\sqrt{6}}(\tilde{\psi}^1_1 + \tilde{\psi}^2_2 - 2\tilde{\psi}^3_3).$$

Mặt khác vì

$$\tilde{\psi}^1_1 + \tilde{\psi}^2_2 + \tilde{\psi}^3_3 = 0,$$

nên ta được các đẳng thức

$$\tilde{\psi}_1^1 = \frac{\Sigma^o}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}}, \quad \tilde{\psi}_2^2 = -\frac{\Sigma^o}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}}, \quad \tilde{\psi}_3^3 = -\frac{2\Lambda}{\sqrt{6}}. \tag{2-11}$$

Từ các đẳng thức này, nếu ký hiệu các ôctet bằng ma trận, ta được

$$B = \{\tilde{\psi}_k^i\} = \begin{bmatrix} \frac{\Sigma^o}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}} & \Sigma^+ & p \\ \Sigma^- & -\frac{\Sigma^o}{\sqrt{2}} + \frac{\Lambda}{\sqrt{6}} & n \\ -\Xi^- & \Xi^o & -\frac{2\Lambda}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \tag{2-12}$$

Tương tự như thế, ta được

$$P = \begin{bmatrix} \frac{\pi^o}{\sqrt{2}} + \frac{\eta}{\sqrt{6}} & \pi^+ & K^+ \\ \pi^- & -\frac{\pi^o}{\sqrt{2}} + \frac{\eta}{\sqrt{6}} & K^o \\ -K^- & \bar{K}^o & -\frac{2\eta}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \tag{2-13}$$

Vì các hạt và phản hạt tương ứng có các giá trị T_3 và Y khác dấu nhau, tức là tương ứng với các trọng khác dấu nhau, nên rõ ràng các hạt và các phản hạt thực hiện những biểu diễn bất khả quy phản bộ lẫn nhau. Các trạng thái của phản hạt là những thành phần của các tenxơ suy từ các trạng thái của hạt bằng cách đổi các chỉ số phản biến thành hiệp biến và ngược lại. Nói riêng, với mẫu ôctet, ta có chẳng hạn

$$\bar{B} = \begin{bmatrix} \frac{\bar{\Sigma}^o}{\sqrt{2}} + \frac{\bar{\Lambda}}{\sqrt{6}} & \bar{\Sigma}^- & -\bar{\Xi}^- \\ \bar{\Sigma}^+ & -\frac{\bar{\Sigma}^o}{\sqrt{2}} + \frac{\bar{\Lambda}}{\sqrt{6}} & \bar{\Xi}^o \\ \bar{p} & \bar{n} & -\frac{2\bar{\Lambda}}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \tag{2-14}$$

Biểu diễn $\{3\}$ và các décuplet

Bây giờ ta chuyển sang biểu diễn $\{3\} = 10$, thực hiện bởi tenxơ hoàn toàn đối xứng ψ^{ijk}. Trước hết, để có một thông tin về cấu trúc T—đa tuyến của siêu tuyến $\{3\}$, ta tính

$$SU(3) \downarrow SU(2)_T : \{3\} = \{3\} \oplus \{2\} \oplus \{1\} \oplus \{0\},$$
$$\{3\} \rightarrow T = 3/2, 1, 1/2, 0,$$

tức là siêu tuyến $\{3\}$ phân thành một T— tứ tuyến, một T— tam tuyến, một T— lưỡng tuyến và một T—đơn tuyến. Tiếp theo, vì các trọng của biểu diễn $\{3\}$ tương ứng với các thành phần ψ^{ijk} là

$$\lambda_i + \lambda_j + \lambda_k\,,\ (i \leqslant j \leqslant k = 1, 2, 3),$$

nên một số phép tính đơn giản cho ngay cách sắp xếp sau

$$(\Delta_\delta^{++}\,,\Delta_\delta^{+}\,,\Delta_\delta^{0}\,,\Delta_\delta^{-}) = (\psi^{111}\,,\psi^{112}\,,\psi^{122}\,,\psi^{222})\,,\ (T, Y) = (3/2,1),$$

$$(\Sigma_\delta^{+}\,,\ \Sigma_\delta^{0},\ \Sigma_\delta^{-}) = (\psi^{113}\,,\psi^{123}\,,\psi^{223})\,,\quad (T, Y) = (1, 0),$$

$$(\Xi^0\,,\Xi^-) \quad = \quad (\psi^{133}\,,\psi^{233}) \quad ,\ (T, Y) = (1/2, -1),$$

$$\Omega^- \quad = \quad \psi^{333} \quad ,\ (T, Y) = (0, -2). \tag{2-15}$$

Mẫu (2-15) gọi là *mẫu đècuplet.* Ta chú ý rằng với các đêcuplet thì

$$Y = 2T - 2\,. \tag{2-16}$$

Khi xếp các hạt vào mẫu đêcuplet, người ta chưa phát hiện được hạt Ω^-. Sự phát hiện này về sau là một trong những thành công lớn của lý thuyết đối xứng SU (3).

Biểu diễn $\{4, 2\}$

Bây giờ ta chuyển sang biểu diễn $\{4, 2\} = 27$. Ta có SU (3) $\downarrow$ SU $(2)_T$:

$$\{4,2\} = \{4, 0\} \oplus \{4, 1\} \oplus \{4, 2\} \oplus \{3, 0\} \oplus \{3, 1\} \oplus \{3, 2\} \oplus$$
$$\oplus \{2, 0\} \oplus \{2, 1\} \oplus \{2, 2\} =$$
$$= \{4\} \oplus 2\{3\} \oplus 3\{2\} \oplus 2\{1\} \oplus \{0\},$$
$$\{4, 2\} \rightarrow T = 2, (3/2)^2, (1)^3, (1/2)^2, 0\,.$$

Nếu tính thêm giá trị của siêu tích Y (Y có giá trị như nhau trong mỗi T—đa tuyến !.) hoặc bằng phương pháp trên, hoặc dựa ngay vào giản đồ trọng của biểu diễn $\{3\}$, ta được

$$\{4, 2\} \rightarrow (T, Y) =$$
$$= (2, 0)\,, (3/2, 1), (3/2, -1), (1, 0), (1, 2), (1, -2), (1/2, 1), (1/2, -1), (0, 0). \tag{2-17}$$

Từ đó, các trạng thái của siêu tuyến phân phối trong các T-đa tuyến trên như sau:

1. (2, 0) — đa tuyến:

$$\psi_{22}^{11}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{22}^{12} + \psi_{22}^{21} - \psi_{12}^{11} - \psi_{21}^{11}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{22}^{22} + \psi_{11}^{11} - \psi_{12}^{12} - \psi_{21}^{12} - \psi_{12}^{21} - \psi_{21}^{21}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{12}^{22} + \psi_{21}^{22} - \psi_{11}^{12} - \psi_{11}^{21}\right],$$

$$\psi_{11}^{22},$$

2. *(3/2,1) — đa tuyến* :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{23}^{11} + \psi_{32}^{11}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{23}^{21} + \psi_{23}^{12} - \psi_{13}^{11} + \psi_{32}^{21} + \psi_{32}^{12} - \psi_{11}^{11}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{13}^{21} + \psi_{13}^{12} - \psi_{23}^{22} + \psi_{31}^{21} + \psi_{31}^{12} - \psi_{32}^{22}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{13}^{22} + \psi_{31}^{22}\right],$$

3. *(3/2,—1) — đa tuyến* :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{22}^{13} + \psi_{22}^{31}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{21}^{13} + \psi_{12}^{31} - \psi_{22}^{23} + \psi_{21}^{31} + \psi_{12}^{31} - \psi_{22}^{32}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{21}^{23} + \psi_{12}^{23} - \psi_{11}^{13} + \psi_{21}^{32} + \psi_{12}^{32} - \psi_{11}^{31}\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{11}^{23} + \psi_{11}^{32}\right],$$

4. *(1,0) — đa tuyến* :

$$\frac{1}{\sqrt{20}}\left[(\psi_{22}^{12} + \psi_{22}^{21} + \psi_{12}^{11} + \psi_{21}^{11}) - 2\,(\psi_{23}^{13} + \psi_{23}^{31} + \psi_{32}^{13} + \psi_{32}^{31})\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{10}}\left[(\psi_{22}^{22} - \psi_{11}^{11}) - (\psi_{23}^{23} - \psi_{13}^{31} + \psi_{23}^{32} - \psi_{13}^{31} + \psi_{32}^{32} - \psi_{31}^{31} + \psi_{32}^{23} - \psi_{31}^{13})\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{20}}\left[(\psi_{12}^{22} + \psi_{21}^{22} + \psi_{11}^{21} + \psi_{11}^{21}) - 2\,(\psi_{13}^{23} + \psi_{31}^{23} + \psi_{13}^{32} + \psi_{13}^{32})\right],$$

5 *(1,2) — đa tuyến* :

$$\psi_{33}^{11},$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\psi_{33}^{12} + \psi_{33}^{21}),$$

$$\psi_{33}^{22},$$

6. *(1, —2) — đa tuyến* :

$$\psi_{22}^{33},$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\psi_{21}^{33} + \psi_{12}^{33}),$$

$$\psi_{11}^{33}$$

7. *(1/2,1) — đa tuyến :*

$$\frac{1}{\sqrt{30}}\left[(\psi^{21}_{23} + \psi^{12}_{23} + \psi^{11}_{13} + 2\psi^{21}_{32} + \psi^{12}_{32} + 2\psi^{11}_{31}) - 3(\psi^{31}_{33} + \psi^{13}_{33})\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{30}}\left[(\psi^{21}_{13} + \psi^{12}_{13} + 2\psi^{22}_{23} + \psi^{21}_{31} + \psi^{12}_{13} + 2\psi^{22}_{33}) - 3(\psi^{32}_{33} + \psi^{23}_{33})\right]$$

8. *(1/2,—1) — đa tuyến :*

$$\frac{1}{\sqrt{30}}\left[(\psi^{13}_{21} + \psi^{31}_{12} + 2\psi^{23}_{22} + \psi^{31}_{21} + 2\psi^{31}_{12} + 2\psi^{32}_{22}) - 3(\psi^{33}_{32} + \psi^{33}_{23})\right],$$

$$\frac{1}{\sqrt{30}}\left[(\psi^{23}_{21} + \psi^{23}_{12} + 2\psi^{13}_{11} + \psi^{32}_{21} + 2\psi^{31}_{11} + \psi^{23}_{12}) - 3(\psi^{33}_{31} + \psi^{33}_{13})\right],$$

9. *(0,0)— đa tuyến :*

$$\frac{1}{\sqrt{20}}\Big[2(\psi^{22}_{22} + \psi^{11}_{11}) + (\psi^{12}_{12} + \psi^{12}_{21} + \psi^{21}_{12} + \psi^{21}_{21}) - 3(\psi^{23}_{33} + \psi^{13}_{13} +$$

$$+ \psi^{23}_{32} + \psi^{13}_{31} + \psi^{32}_{23} + \psi^{31}_{13}) + 6\psi^{33}_{33}\Big]. \tag{2-21}$$

Ngoài các siêu tuyến cao 8 và 10 hoặc 27 nói trên, còn có các siêu tuyến khác. Đặc biệt ta có chẳng hạn đơn tuyến ω, tương ứng với biểu diễn $\{0\} = 1$ của nhóm SU(3).

§ 3. U - SPIN VÀ V - SPIN TRONG LÝ THUYẾT ĐỐI XỨNG SU(3)

Ở § 2, ta đã nói đến ba khả năng chọn trục T_3 và ta đã chọn một trong các khả năng đó, tức là chọn trục T_3 nằm dọc theo nghiệm $\lambda_1 - \lambda_2$. Bây giờ ta hãy đi sâu vào vấn đề đó.

Ta biết rằng mọi đại số Lie đơn, tức là mọi nhóm đơn, đều chứa những đại số đơn đẳng cấu với đại số Lie $\mathcal{A}_\alpha \approx \mathcal{A}_1$. Các hệ thức giao hoán của các đại số con đó là (xem § 7, chương XIV)

$$[H_\alpha, E_\alpha] = (\alpha, \alpha) E_\alpha, \ [H_\alpha, E_{-\alpha}] = -(\alpha, \alpha) E_{-\alpha}, \ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = H_\alpha,$$

trong đó α trỏ các nghiệm dương của đại số Lie đang xét. Nói riêng, đại số Lie $\mathcal{A}_2$, tương ứng với nhóm SU(3), có ba đại số Lie con

$$(E_{\alpha_i}, E_{-\alpha_i} H_{\alpha_i}), \ (i = 1, 2, 3)$$

tương ứng với ba nghiệm dương

$$\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2, \ \alpha_2 = \lambda_2 - \lambda_3, \ \alpha_3 = \lambda_3 - \lambda_1.$$

Tương ứng với ba đại số con đó là ba nhóm con compắc SU(2) của nhóm SU(3). Sự kiện ta có ba khả năng chọn trục T_3 nói trên chính là tương ứng với sự kiện nhóm SU(3) có ba nhóm con SU(2) này. Ba nhóm con này thường ký hiệu là

$$SU(2)_T, \ SU(2)_U, \ SU(2)_V,$$

và các số lượng tử U và V, đóng vai trò tương tự như T, tương ứng gọi là *U-spin* và *V-spin*. Cũng tương tự như trên, các biểu diễn bất khả quy khác nhau của nhóm SU(3) có thể phân thành những U-đa tuyến hay V-đa tuyến với các bài toán biểu diễn hạ cảm $SU(3)\downarrow SU(2)_U$ hay $SU(3)\downarrow SU(2)_V$. Tất nhiên ta có những (U,Y_u)-cấu trúc và (V,Y_v)-cấu trúc giống như các (T, Y)−cấu trúc đã tìm được, vì các bài toán biểu diễn hạ cảm đều đối xứng với nhau. Chỉ có một điểm khác là sự phân phối các thành phần khác nhau của tenxơ biểu diễn trong T−đa tuyến, U−đa tuyến và V−đa tuyến là khác nhau. Ta hãy tìm phương pháp chuyển từ các thành phần tenxơ của các T-đa tuyến chẳng hạn sang các U-đa tuyến.

Giả sử các T-đa tuyến tương ứng với đại số Lie con

$$(E_{\alpha_1},\ E_{-\alpha_1},\ H_{\alpha_1})$$

còn các U−đa tuyến tương ứng với đại số Lie con

$$(E_{\alpha_2},\ E_{-\alpha_2},\ H_{\alpha_2})$$

Vì nghiệm $\alpha_2 = \lambda_2 - \lambda_3$ có thể thu từ nghiệm $\alpha_1 = \lambda_1 - \lambda_2$ bằng phép biến đổi Weyl $(1, 2, 3) \in S_3$, nên, tác dụng phần tử này lên các chỉ số phản biến và hiệp biến của các thành phần tenxơ trong các T—đa tuyến, ta được các thành phần tenxơ trong các U-đa tuyến. Chẳng hạn, từ (2—10) ta có các kết quả sau

U-lưỡng tuyến

$$(U,\ Y_u) = (1/2,1) : (\tilde{\psi}_1^2, \tilde{\psi}_1^3) = (\Sigma^-, -\Xi^-),$$

U-lưỡng tuyến

$$(U,\ Y_u) = (1/2,-1) : (\tilde{\psi}_2^1, \tilde{\psi}_3^1) = (\Sigma^+, p),$$

U-tam tuyến

$$(U,\ Y_u) = (1,0) : (\tilde{\psi}_3^2, \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}_2^2 - \tilde{\psi}_3^3), \tilde{\psi}_2^3) = (n, -\frac{\Sigma^0}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\Lambda, \Xi^0),$$

U-đơn tuyến

$$(U,\ Y_u) = (0,\ 0) : \frac{1}{\sqrt{6}}(\tilde{\psi}_2^2 + \tilde{\psi}_3^3 - 2\tilde{\psi}_1^1) = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\Sigma^0 - \frac{\Lambda}{2}\right). \qquad (3\text{-}1)$$

Tương tự như thế, muốn tìm các thành phần tenxơ thuộc trường hợp V-spin, ta chỉ cần tác dụng phần tử Weyl (1, 3, 2) lên các chỉ số của các trạng thái thuộc các T-đa tuyến. Ta được chẳng hạn

V-lưỡng tuyến

$$(V,\ Y_v) = (1/2,\ 1) : (\tilde{\psi}_2^3,\ \tilde{\psi}_2^1) = (\Sigma^+,\ \Xi^0),$$

V-lưỡng tuyến

$$(V,\ Y_v) = (1/2,\ -1) : (\tilde{\psi}_3^2,\ \tilde{\psi}_1^2) = (n,\ \Sigma^-),$$

V-tam tuyến

$$(V,\ Y_v) = (1,\ 0) : (\tilde{\psi}_1^3,\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}_3^3 - \tilde{\psi}_1^1),\ \tilde{\psi}_3^1) =$$

$$= \left(p,\ \frac{\Sigma^0}{2} + \frac{\sqrt{3}\,\Lambda}{2},\ -\Xi^-\right)$$

V-đơn tuyến

$$(V, Y_v) = (0, 0) : \frac{1}{\sqrt{6}} (\tilde{\psi}_3^3 + \tilde{\psi}_1^1 - 2\tilde{\psi}_2^2) = \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \Sigma^0, - \frac{\Lambda}{2}\right]. \qquad (3\text{-}2)$$

§ 4. MẪU HẠT KẾT HỢP TRONG LÝ THUYẾT ĐỐI XỨNG SU (3)

Quan niệm về mẫu hạt kết hợp

Trong lý thuyết các hạt cơ bản, có xu hướng cho rằng một số hạt nào đó (như mêzôn và một số barion) là kết quả kết hợp của một số hạt « cơ bản nhất » nào đó. Cách giải quyết sự kết hợp này dựa vào lý thuyết biểu diễn nhóm, cụ thể hơn, dựa vào các chuỗi Clebsch-Gordan của các tích biểu diễn. Ta giả thiết rằng các hạt « cơ bản nhất » là các quoac lạ và không lạ đã nói đến ở § 2. Ta ký hiệu các quoac ấy tương ứng là q_Λ, q_p và q_n. Ta lại giả thiết các quoac này có số barion bằng 1/3 và spin S bằng 1/2. Các phản quoac $\overline{q}_\Lambda$, $\overline{q}_p$ và $\overline{q}_n$ có các đặc trưng lượng tử trái dấu so với các quoac. Như thế, ta có bảng

	q_Λ	q_p	q_n	$\overline{q}_\Lambda$	$\overline{q}_p$	$\overline{q}_n$
Q	$-\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
Y	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
S_3	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
B	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$

(4-1)

Các ôctet mêzon xem là những hạt kết hợp

Vì các quoac tuân theo biểu diễn $\{1\}$ của nhóm SU (3) và các phản quoac tuân theo biểu diễn $\{1^2\}$ của nhóm, nên ta có thể viết

$$q_p \sim \psi^1, \; q_n \sim \psi^2, \; q_\Lambda \sim \psi^3$$
$$\overline{q}_p \sim \psi_1, \; \overline{q}_n \sim \psi_2, \; \overline{q}_\Lambda \sim \psi_3 . \qquad (4\text{-}2)$$

Tiếp theo, dựa vào chuỗi Clebsch-Gordan

$$\{1\} \otimes \{1^2\} = \{2, 1\} \oplus \{0\},$$
$$\psi_j^i = \tilde{\psi}_j^i + \frac{1}{3} \delta_j^i \psi_k^k , \qquad (4\text{-}3)$$

và định nghĩa

$$\psi_j^i \sim \psi^i \psi_j ,$$

từ (4-2) và (2-10), ta thấy rằng có thể xem ôctet mêzon giả vô hướng và đơn tuyến χ là kết quả kết hợp của hệ thống quoac (q_p , q_n , q_Λ) và hệ thống phản quoac (q_p , q_n , q_Λ) như sau

$$\pi^+ \sim q_p \overline{q_n} \,,\; \pi^0 \sim \frac{1}{\sqrt{2}} (q_p \overline{q_p} - q_n \overline{q_n}) \,,\; \pi^- \sim \overline{q_p}\, q_n \,,$$

$$K^+ \sim q_p \overline{q_\Lambda} \,,\; K^0 \sim q_n \overline{q_\Lambda} \,,$$

$$K^- \sim \overline{q_p}\, q_\Lambda \,,\; \overline{K^0} \sim \overline{q_n}\, q_\Lambda \,,$$

$$\eta \sim \frac{1}{\sqrt{6}} (q_p \overline{q_p} + q_n \overline{q_n} - 2\, q_\Lambda \overline{q_\Lambda}) \,,$$

$$\chi \sim \frac{1}{\sqrt{3}} (q_p \overline{q_p} + q_n \overline{q_n} + q_\Lambda \overline{q_\Lambda}) \,.$$

Đêcuplet và ôctet bariôn xem là những hạt kết hợp

Tương tự như thế, từ chuỗi Clebsch-Gordan

$$\{1\} \otimes \{1\} \otimes \{1\} = \{3\} \oplus 2\,\{2,\, 1\} \oplus \{0\}$$

$$\psi^{ijk} = \psi^{ijk'} + \psi^{ij'k} + \psi^{ik'j} + \psi^{i'j'k} \,,$$

và định nghĩa

$$\psi^{ijk} \sim \psi^i\, \psi^j\, \psi^k \,,$$

thì, từ (4, 2) và (2, 15), ta có thể viết (sai khác một thừa số chuẩn hóa)

$$(\Delta_\delta^{++} , \Delta_\delta^{+} , \Delta_\delta^{0} , \Delta_\delta^{-}) \sim \left[\begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_p & q_p \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_p & q_n \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_n & q_n \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_n & q_n & q_n \\ \hline \end{array} \right] ,$$

$$(\Sigma_\delta^{+} , \Sigma_\delta^{0} , \Sigma_\delta^{-}) \sim \left[\begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_p & q_\Lambda \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_n & q_\Lambda \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_n & q_n & q_\Lambda \\ \hline \end{array} \right] ,$$

$$(\Xi_\delta^{0} , \Xi_\delta^{-}) \sim \left[\begin{array}{|c|c|c|}\hline q_p & q_\Lambda & q_\Lambda \\ \hline \end{array} , \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_n & q_\Lambda & q_\Lambda \\ \hline \end{array} \right]$$

$$\Omega^- \sim \begin{array}{|c|c|c|}\hline q_\Lambda & q_\Lambda & q_\Lambda \\ \hline \end{array} \,.$$

Cũng tương tự như thế, có thể viết dạng của octet barion từ tenxơ bất khả quy $\psi^{ij,k}$, tức là có thể xem octet này là kết quả kết hợp của ba tam tuyến quoac.

Dĩ nhiên, tính đúng đắn của giả thuyết về hạt kết hợp phụ thuộc trước hết vào sự tồn tại của các quoac. Với mục đích chỉ giới thiệu những nét chính của phương pháp lý thuyết nhóm trong thuyết kết hợp các hạt, ta hãy kết thúc vấn đề này tại đây.

§5. CÁC CÔNG THỨC KHỐI LƯỢNG TRONG LÝ THUYẾT ĐỐI XỨNG SU (3)

Biểu thức chung của toán tử khối lượng

Ta hãy tìm các công thức khối lượng của các hạt cơ bản, một vấn đề có tầm quan trọng cơ bản trong lý thuyết các hạt cơ bản. Đây là một loại phổ đặc biệt — gọi là *khối phổ.*

Muốn thế, ta hãy dùng các vi tử của nhóm SU(3), suy từ các vi tử của nhóm GL(3, C) bằng cách cho vết bằng không (các vi tử của các nhóm đơn modula đều có vết bằng không!). Các vi tử $A_k^{(o)i}$ của nhóm U(n) có dạng

$$A_k^{(o)i} = E_{ik}\ ,\ (A_k^{(o)i})_{\mu\nu} = \delta_{i\mu}\delta_{k\nu}\,.$$

Từ đó, chuyền sang các ma trận có vết bằng không, ta được các vi tử của nhóm SU(n) ($n = l + 1$) như sau

$$(A_k^i)_{\mu\nu} = \delta_{i\mu}\,\delta_{k\nu} - \frac{1}{l+1}\,\delta_{ik}\,\delta_{\mu\nu}\,.$$

Cụ thể là

$$A_1^1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},\ A_2^2 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$A_3^3 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix},\ A_k^i = E_{ik}\,,\ (i \neq k)\,.$$

Giữa các vi tử A_k^i và các vi tử F_i ($i = 1,\ldots, 8$) (xem VII (6-19)), có những hệ thức sau

$$A_1^1 = \frac{1}{2}\left[F_3 + \frac{1}{\sqrt{3}}F_8\right] \equiv Q\ ,\ A_2^2 = \frac{1}{2}\left[-F_3 + \frac{1}{\sqrt{3}}F_8\right] \equiv Y - Q\,,$$

$$A_3^3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}F_8 \equiv -Y,$$

$$A_1^2 = \frac{1}{2}(F_1 + iF_2) \equiv T_+\ ,\ A_2^1 = \frac{1}{2}(F_1 - iF_2) \equiv T_-,$$

$$A_1^3 = \frac{1}{2}(F_4 + iF_5) \equiv U_+\ ,\ A_3^1 = \frac{1}{2}(F_4 - iF_5) \equiv U_-,$$

$$A_2^3 = \frac{1}{2}(F_6 + iF_7) \equiv V_+\ ,\ A_3^2 = \frac{1}{2}(F_6 - iF_7) \equiv V_-, \qquad (5\text{-}1)$$

trong đó

$$T_+ = T_1 + iT_2\ ,\ T_- = T_1 - iT_2,$$

$$T_1 = \frac{1}{2}F_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\ ,\ T_2 = \frac{1}{2}F_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$U_+ = U_1 + iU_2\ ,\ U_- = U_1 - iU_2,$$

$$U_1 = \frac{1}{2}F_4\ ,\ U_2 = \frac{1}{2}F_5,$$

$$V_+ = V_1 + iV_2\ ,\ V_- = V_1 - iV_2,$$

$$V_1 = \frac{1}{2}F_6 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix},\ V_2 = \frac{1}{2}F_7 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix},$$

Ta định nghĩa thêm

$$T_3 = \begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2} F_3 = Q - \frac{Y}{2},$$

$$V_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix}, \; U_3 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix},$$

$$\mathbf{T}^2 = T_1^2 + T_2^2 + T_3^2 ,$$

$$\mathbf{U}^2 = U_1^2 + U_2^2 + U_3^2 ,$$

$$\mathbf{V}^2 = V_1^2 + V_2^2 + V_3^2 .$$

Tất nhiên, các trị-riêng của các toán tử bình phương ở trên sẽ là

$$\mathbf{T}^2 \to T(T+1) \quad , \quad \mathbf{U}^2 \to U(U+1) \quad , \quad \mathbf{V}^2 \to V(V+1).$$

Theo (5-1), ta có thể viết các vi tử A^i_k dưới dạng sau

$$A^i_k = \begin{bmatrix} A^1_1 & A^1_2 & A^1_3\\ A^2_1 & A^2_2 & A^2_3\\ A^3_1 & A^3_2 & A^3_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q & T_- & U_-\\ T_+ & Y-Q & V_-\\ U_+ & V_+ & -Y\end{bmatrix}. \qquad (5\text{-}2)$$

Bây giờ ta hãy nói đến công thức khối lượng các hạt cơ bản trong lý thuyết đối xứng SU(3). Trước hết, bằng các phép tính toán trực tiếp, độc giả dễ thấy rằng các toán tử [1])

$$SpAA = A^i_k A^k_i ,$$

$$SpAAA = A^i_j A^j_k A^k_i , \ldots$$

$$SpAAA \ldots A, \; (l \text{ lần nhân tử } A),$$

(trong đó A^i_j trỏ biểu diễn $\rho(A^i_j)$) là giao hoán với các vi tử A^i_j. Như thế, các toán tử trên là các toán tử Casimir mở rộng của nhóm SU(l).

Từ đó, ký hiệu $C_2^{(3)}$ và $C_3^{(3)}$ là các toán tử Casimir của nhóm SU(3), ta có thể viết

$$C_2^{(3)} \sim SpAA, \; C_3^{(3)} \sim SpAAA.$$

Theo (5-1) và (5-2), ta có thể tính được

$$C_2^{(3)} \sim SpAA = [T_+, T_-]_+ + [U_+, U_-]_+ + [V_+, V_-]_+ + \\ + 2(Q^2 + Y^2 - YQ), \qquad (5\text{-}3)$$

---

1 Đây là trường hợp cụ thể của XV, (2-19), áp dụng cho $\mathcal{A}_l$

trong đó T_+ trở $\rho(T_+)$ v.v... và

$$[U_+, U_-]_+ \equiv U_+U_- + U_-U_+ \text{ v.v...}$$

Đến đây ta hãy tính toán tử khối lượng. Nếu nhóm đối xứng của các hạt cơ bản đúng là nhóm SU(3) thì, theo lý thuyết chung, tất cả các thành phần khác nhau của mỗi siêu tuyến đều có cùng khối lượng. Nhưng các khối lượng đo được của các thành phần của mỗi siêu tuyến thực ra là khác nhau. Như thế, nhóm đối xứng của các hạt cơ bản trong thực tế phải thấp hơn, do một nguyên nhân nhiễu loạn nào đó. Người ta giả thiết rằng trong thực tế tính đối xứng SU(3) của các hạt cơ bản bị nhiễu loạn bởi một nhân tố T^i_k nào đó có tính chất tenxơ của octet, và chính thành phần T^3_3 của nhân tố này là nguyên nhân sinh ra sự tách các mức khối lượng trong mỗi siêu tuyến. Theo các kết quả trên (xem (2-12) hoặc (2-13) chẳng hạn, ở đó các thành phần trên tương ứng là Λ và η), thành phần này có spin đồng vị, điện tích và số lạ bằng không.

Giả sử nhóm đối xứng đúng là nhóm SU(3). Thế thì do khối lượng của tất cả các hạt cùng thuộc một siêu tuyến là như nhau, ta có thể viết biểu thức của toán tử khối lượng dưới dạng

$$M = c + aC_2^{(3)} + bC_3^{(3)}, \ (a, b, c = \text{const}).$$

Nhưng do nhân tố nhiễu loạn trên có tính chất biến đổi như sau

$$T^3_3 \sim A^3_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}} F_8,$$

ta có thể giả thiết toán tử khối lượng thực sự có dạng

$$M = c + M^3_3,$$

với

$$M^3_3 = a\frac{\partial C_2^{(3)}}{\partial F_8} + b\frac{\partial C_3^{(3)}}{\partial F_8},$$

và các phép tính toán trực tiếp cho kết quả

$$M^3_3 = \alpha A^3_3 - \beta\left(A^3_i A^i_3 + A^i_3 A^3_i - \frac{2}{3}\,\mathrm{SpAA}\right), \ (\alpha, \beta = \text{const}). \qquad (5\text{-}4)$$

Tiếp theo, ta xét tenxơ có vết bằng không

$$D^i_j = \frac{1}{2}\left(A^i_k A^k_j + A^k_j A^i_k - \frac{2}{3}\,\mathrm{SpAA}\ \delta^i_j\right). \qquad (5\text{-}5)$$

Ta có

$$D^3_3 = \frac{1}{2}\left[[U_+, U_-]_+ + [V_+, V_-]_+ + 2Y^2 - \frac{2}{3}\,\mathrm{SpAA}\right]$$

hay, theo (5-3),

$$D^3_3 = \frac{1}{4}Y^2 - T(T+1) + \frac{1}{6}\,\mathrm{SpAA}, \qquad (5\text{-}6)$$

Tương tự như thế, ta được

$$D_2^2 = \frac{1}{4}(Q - Y)^2 - V(V + 1) + \frac{1}{6}\,\mathrm{SpAA}\,,$$

$$D_1^1 = \frac{1}{4}Q^2 - U(U + 1) + \frac{1}{6}\,\mathrm{SpAA}\,. \tag{5-7}$$

Thế thì theo (5-1), (5-4), (5-5) và (5-6) ta có thể viết

$$M_3^3 = M_1 Y + M_2\,T(T + 1) - \frac{1}{4}\,Y^2 + \frac{1}{6}\,\mathrm{SpAA}\,, \tag{5-8}$$

với M_1 và M_2 là những hằng số nào đó.

Công thức khối lượng cho ôctet bariôn

Vì trong mỗi siêu tuyến, toán tử Casimir hay SpAA có một giá trị xác định, nên từ (5-8) ta có thể viết biểu thức sau cho khối lượng

$$M = M_0 + M_1 Y + M_2\,T(T + 1) - \frac{1}{4}\,Y^2\,. \tag{5-9}$$

Công thức (5-9) được xem là công thức khối lượng cho các ôctet bariôn, trong mỗi ôctet đó, các hằng số M_0, M_1 và M_2 đều có những giá trị xác định.

Công thức khối lượng cho ôctet mêzôn.

Với các ôctet mêzôn, khi ta hoán vị hàng và cột với nhau trong các ma trận hạt, Y đổi dấu trong lúc M và T không đổi dấu (xem chẳng hạn (2-13)). Thành thử số hạng bậc nhất của Y ở (5-8) mất đi và ta có

$$M^2 = M_0^2 + M_2\,T(T + 1) - \frac{1}{4}\,Y^2\,, \tag{5-10}$$

(người ta nhất trí thừa nhận rằng các công thức khối lượng cho các mêzon là tính theo các bình phương khối lượng!).

Công thức khối lượng cho đêcuplet

Cuối cùng do với các đêcuplet (theo (2-16)) ta có $Y = 2T - 2$, nên từ (5-9) một phép tính toán đơn giản cho công thức khối lượng

$$M = (M_0 + 2M_2) + \left(M_1 + \frac{3}{2}\,M_2\right)Y\,, \tag{5-11}$$

các hằng số M_0, M_1 và M_2 có giá trị như với công thức (5-9).

Các hệ thức khối lượng

Từ các công thức khối lượng trên, có thể suy ra các hệ thức sau giữa các khối lượng các hạt thuộc cùng một siêu tuyến:

1) $$M_N + M_\Xi = \frac{1}{2}(M_\Sigma + 3M_\Lambda)\,,$$

hay

$$(M_N - M_\Sigma) + (M_\Xi - M_\Sigma) = \frac{3}{2}\,(M_\Lambda - M_\Sigma)$$

(sai khác 10% so với thực nghiệm).

2) $$M_{\Omega^-} - M_{\Xi_\delta} = M_{\Xi_\delta} - M_{\Sigma_\delta} = M_{\Sigma_\delta} - M_{\Delta_\delta},$$

(sai khác 1% so với thực nghiệm),

3) $$M^2_K = \frac{1}{4}(M^2_\pi + 3M^2_\eta),$$

(sai khác 3% so với thực nghiệm).

Những hạn chế của các công thức khối lượng trong thuyết SU(3).

Lý thuyết đối xứng SU(3) không giải thích được các hệ thức khối lượng sau:

1) $$M_\omega \approx M_\rho,$$

2) $$M^2_{K_\delta} - M^2_\rho \neq \frac{3}{4}(M^2_\varphi - M^2_\rho),$$

3) $M^2_{K_\delta} - M^2_\rho = M^2_K - M^2_\pi$ (thuộc các octet mêzôn khác nhau).

4) Không thể giải thích tại sao công thức khối lượng (5-9) và từ đó (5-10) lại có thể áp dụng cả cho octet, cả cho đêcuplet (tức là cho hai siêu tuyến khác nhau) với cùng những giá trị như nhau của các hằng số M_1 và M_2.

Chính hai sự kiện cuối cùng này đã đưa đến vấn đề mở rộng nhóm đối xứng SU(3) thành một nhóm đối xứng rộng hơn, có khả năng chứa cả hai ôctet mêzon trên vào cùng một siêu tuyến nào đó, cũng như hai đêcuplet và ôctet barion trên vào cùng một siêu tuyến khác. Như ta sẽ thấy, nhóm này là nhóm SU(6).

§ 6. MÔMEN TỪ CÁC HẠT CƠ BẢN TRONG LÝ THUYẾT ĐỐI XỨNG SU(3)

Bây giờ ta hãy tìm cách suy các hệ thức giữa các mômen từ của các hạt cơ bản từ lý thuyết đối xứng SU(3).

Ta biết rằng mômen từ μ tại trạng thái $|a>$ của hạt a biến đổi như dòng điện J, tức là ta có thể viết (theo tính chất biến đổi như nhau)

$$\mu(a) \sim \langle a | J | a \rangle . \quad (6\text{-}1)$$

Nhưng dòng điện J lại có tính chất biến đổi như điện tích $Q = A^1_1$ (xem (5-1)). Thành thử, ta có thể giả thiết J biến đổi như thành phần T^1_1 của một toán tử tenxơ hỗn hợp có vết bằng không nào đó, tức là, tương tự như (5-4), ta có thể xem

$$J = \alpha' A^1_1 + \beta'\left(A^1_i A^i_1 + A^i_1 A^1_i - \frac{2}{3}\,\mathrm{Sp}AA\right) =$$

$$= \alpha' A^1_1 - 2\beta' D^1_1, \quad (\alpha', \beta' = \mathrm{const}) \quad (6\text{-}2)$$

Như thế, các đẳng thức (6-1), (6-2) cùng với (5-1) và (5-7) cho giá trị

$$\mu(a) = \alpha Q + \beta U(U+1) + \frac{1}{4} Q^2 + \frac{1}{6} \mathrm{SpAA}\,, \tag{6-3}$$

của mômen từ $\mu(a)$ tại U — biểu diễn, trong đó α và β là những hằng số nào đó.

Các trạng thái của ôctet barion tại U — biểu diễn đã được tính theo (3-1). Từ đó ta được ngay

$$\mu(\Sigma^-) = \mu(\Xi^-) \quad , \quad \mu(n) = \mu(\Xi^o) \quad , \quad \mu(p) = \mu(\Sigma^+) \quad ,$$

vì các hạt trong mỗi đẳng thức trên cùng thuộc một U — đa tuyến và có điện tích Q như nhau. Ngoài ra, bằng cách tính trực tiếp cũng có thể suy ra hệ thức sau

$$\mu(\Sigma^-) = -\,[\mu(p) + \mu(n)]\ .$$

Để tính mômen từ của các hạt còn lại của ôctet là Σ^o và Λ, ta lưu ý rằng các vectơ

$$-\,\Sigma^o + \sqrt{3}\,\Lambda\ ,\ \sqrt{3}\,\Sigma^o + \Lambda$$

là những vectơ riêng của toán tử $\mathbf{U}^2$ (xem (3-1)), vectơ thứ nhất tương ứng với trị riêng $U(U+1) = 2$ khi $U = 1$, còn vectơ thứ hai, tương ứng với trị riêng $U = 0$.

Tất nhiên, hai vectơ này là trực giao với nhau. Với các nhận xét này, ta được

$$\langle -\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\,|\,\mathbf{U}^2\,|-\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\rangle = \langle -\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\,|\,U(U+1)\,|-\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\rangle = 2,$$
$$\langle \sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\,|\,\mathbf{U}^2\,|\sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\rangle = \langle \sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\,|\,U(U+1)\,|\sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\rangle = 0,$$
$$\langle -\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\,|\,\mathbf{U}^2\,|\sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\rangle = \langle -\Sigma^o + \sqrt{3}\Lambda\,|\,U(U+1)\,|\sqrt{3}\Sigma^o + \Lambda\rangle = 0.$$

Từ các hệ thức trên, ta suy ra

$$\langle \Lambda\,|\,U(U+1)\,|\,\Lambda\rangle = \frac{3}{2},$$
$$\langle \Sigma^o\,|\,U(U+1)\,|\,\Sigma^o\rangle = \frac{1}{2},$$
$$\langle \Sigma^o\,|\,U(U+1)\,|\,\Lambda\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}. \tag{6-4}$$

Từ (6-3) và (6-4), ta suy ra được các hệ thức sau

$$\mu(\Lambda) = -\,\mu(\Sigma^o) = \frac{1}{2}\,\mu(n),$$
$$2\mu(\Sigma^o) = \mu(\Sigma^+) + \mu(\Sigma^-),$$
$$6\mu(\Lambda) = \mu(p) + \mu(\Sigma^-) + 4\mu(n),$$
$$2\sqrt{3}\,\mu(\Sigma^o \to \Lambda) = 3\mu(\Lambda) + \mu(\Sigma^o) - 2\mu(n) - 2\mu(\Xi^o).$$

§7. SỰ TÁCH CÁC MỨC KHỐI LƯỢNG DO TRƯỜNG ĐIỆN TỪ

Từ giả thiết không gian spin đồng vị là đẳng hướng trong các tương tác mạnh, các mức khối lượng của các hạt thuộc cùng một T—đa tuyến là bằng nhau.

Khi có tương tác điện từ, tính chất đẳng hướng này bị vi phạm. Do đó, theo lý luận chung, các mức khối lượng trong mỗi đa tuyến tách ra thành nhiều mức khác nhau. Trong lý thuyết đối xứng SU(3), toán tử khối lượng bổ chính δM do điện từ trường được xem là biến đổi như thành phần T^{11}_{11} của tenxơ T^{ik}_{jh}. Tương tự như các trường hợp trên, thành phần này có thể viết dưới dạng

$$M^{11}_{11} = \alpha' + \beta' A^1_1 + \gamma' (A^1_i A^i_1 + A^i_1 A^1_i) + \delta' A^1_1 A^1_1 + \varepsilon' A^1_1 (A^1_i A^i_1 + A^i_1 A^1_i) +$$

$$+ \varphi' (A^1_i A^i_1 + A^i_1 A^1_i)(A^1_k A^k_1 + A^k_1 A^1_k), (\alpha', \beta', \gamma', \delta', \varepsilon', \varphi' = \text{const}). \quad (7\text{-}1)$$

Thành thử, nếu ta viết (theo tính chất biến đổi như nhau)

$$\delta Ma = \langle a | \delta M | a \rangle = \langle a | M^{11}_{11} | a \rangle$$

thì, với các trạng thái chéo hóa toán tử U—spin, ta được biểu thức có dạng

$$\delta Ma = \alpha + \beta Q + \gamma \left[\frac{1}{4} Q^2 - U(U+1)\right] + \delta Q^2 + \varepsilon Q \left[\frac{1}{4} Q^2 - U(U+1)\right] +$$

$$+ \varphi \left[\frac{1}{4} Q^2 - U(U+1)\right]^2. \quad (7\text{-}2)$$

Từ công thức này có thể suy ra nhiều hệ thức khác nhau về các đại lượng bổ chính δM. Chẳng hạn, ta có hệ thức (xem (3-1))

$$\delta M_{\Xi^-} - \delta M_{\Xi^0} = \delta M_{\Sigma^-} - \delta M_{\Sigma^+} + \delta M_p - \delta M_n,$$

khá phù hợp với thực nghiệm.

§8. PHÉP PHÂN LOẠI CÁC HẠT CƠ BẢN THEO NHÓM ĐỐI XỨNG SU(6).

Nhóm đối xứng SU(6) và các siêu siêu tuyến 35 và 56

Trên đây ta đã phân loại các hạt cơ bản theo số lượng tử T với nhóm SU(2), sau đó theo cặp (T,Y) với nhóm SU(3). Ta cũng đã nêu lên một số điểm hạn chế của nhóm SU(3) khi tính các hệ thức khối lượng. Các hạn chế này đồng thời với xu hướng mở rộng sự phân loại các hạt cơ bản theo cả số lượng tử spin S tất nhiên sẽ dẫn đến một nhóm đối xứng rộng hơn.

Vì số lượng tử spin được mô tả với nhóm

$$SO(3) \approx SU(2)_S$$

nên nhóm đối xứng mở rộng phải chứa cả nhóm SU(3), cả nhóm $SU(2)_S$. Nếu chỉ giới hạn trong phạm vi các nhóm đơn compăc SU(n), thì nhóm bé nhất (xem XVII, §5) thỏa mãn điều kiện trên sẽ là nhóm SU (3 + 2) = SU (5). Nhưng nếu buộc thêm điều kiện cấp các ma trận của nhóm phải tìm bằng hai lần (!) cấp các ma trận của nhóm SU(3), tức là bằng 6, thì rõ ràng nhóm đó là SU(6). Như thế, ta chọn nhóm SU(6) làm nhóm đối xứng, cơ sở của sự phân loại các hạt cơ bản theo các số lượng tử S(T,Y). Bài toán toán học của sự phân loại sẽ là bài toán biểu diễn hạ cảm

$$SU(6) \downarrow SU(2)_S \otimes SU(3).$$

Bài toán này đã được giải quyết ở chương XVII. Nếu ký hiệu các biểu diễn bất khả quy của các nhóm SU(2) và SU(3) bằng số chiều biểu diễn thì, theo các kết quả của chương XVII, ta được

$$35 = 3 \otimes 8 \oplus 3 \otimes 1 \oplus 1 \otimes 8, \tag{8-1}$$

$$56 = 4 \otimes 10 \oplus 2 \otimes 8, \tag{8-2}$$

$$70 = 2 \otimes 10 \oplus 4 \otimes 8 \oplus 2 \otimes 8 \oplus 2 \otimes 1 \text{ v.v...}$$

Các kết quả này cho phép xếp một số siêu tuyến khác nhau của nhóm SU(3) thành một « siêu siêu tuyến » của nhóm SU(6). Chẳng hạn, từ (8-1) ta thấy biểu diễn 35 chứa một ôctet với $S = 1$, một đơn tuyến với $S = 1$ và một ôctet khác với $S = 0$. Thành thử, ta có thể đồng nhất

$$35 = (\rho, K_\sigma, \overline{K}_\delta, \varphi) + \omega + (\pi, K, \overline{K}, \eta), \tag{8-3}$$

thành phần thứ nhất của (8-3) có S(T,Y) —cấu trúc bằng

$$S(T,Y) = 1(1,0)\ ,\ 1(1/2,1),\ 1\ (1/2,\ -1),\ 1(0,0),$$

thành phần thứ hai có

$$S(T,Y) = 1\,(0,0).$$

còn thành phần cuối cùng có

$$S(T,Y) = 0(1,0),\ 0(1/2,1)\ ,\ 0\,(1/2,-1),\ 0(0,0).$$

Tương tự như thế, từ (8-2) ta thấy rằng biểu diễn 56 chứa một đêcuplet với $S = 3/2$ và một ôctet với $S = 1/2$. Thành thử ta có thể đồng nhất

$$56 = (\Delta_\delta\ ,\ \Sigma_\delta\ ,\ \Xi_\delta\ ,\ \Omega^-) + (N, \Sigma\ ,\ \Lambda,\ \Xi), \tag{8-4}$$

thành phần thứ nhất của (8-4) có

$$S(T,Y) = 3/2(3/2,1),\ 3/2(1,0),\ 3/2(1/2,-1),\ 3/2(0,-2),$$

còn thành phần thứ hai có

$$S(T,Y) = 1/2(1/2,1),\ 1/2(1,0),\ 1/2(0,0),\ 1/2(1/2,\ -1).$$

Do ω và ρ cùng nằm trong một siêu siêu tuyến, ta có thể giải thích được đẳng thức

$$M_\omega \approx M_\rho\ .$$

Mặt khác, cũng do các siêu tuyến

$$(\rho, \sigma\, K_\delta, \overline{K}_\delta\ ,\ \varphi)\ ,\ (\pi,\ K.\ \overline{K},\ \eta)$$

cùng nằm trong một siêu siêu tuyến, nên cũng có thể giải thích được hệ thức

$$M^2_{K_\delta} - M^2_\rho = M^2_K - M^2_\pi.$$

Như thế, thuyết đối xứng SU(6) có thể tránh được những khó khăn đã nói ở trên (cuối §5) của thuyết đối xứng SU(3).

Phép phân tích các tenxơ của các biểu diễn 35 và 56

Bây giờ ta hãy thực hiện sự phân tích tenxơ tương ứng với các phân tích (8-3) và (8-4). Trước hết ta xét biểu diễn phó 35. Như đã biết, các chỉ số của các tenxơ của nhóm SU(6) có thể viết dưới dạng

$$A = (\alpha, i),\ B = (\beta\ ,\ j)\ ,\ C = (\gamma\ ,\ k),\ldots$$

với

$$\alpha, \beta, \gamma, \ldots = 1, 2; \ i, j, k, \ldots = 1, 2, 3.$$

Các chỉ số $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$ đánh số các tenxơ của nhóm SU(2) còn các chỉ số i, j, k... đánh số các tenxơ của nhóm SU(3). Thế thì, tenxơ thực hiện biểu diễn phó của nhóm SU(6) là tenxơ hỗn hợp có vết bằng không

$$\psi^{A}_{B}, \ \psi^{A}_{A} = 0 \text{ hay } \psi^{(\gamma, k)}_{(\gamma, k)} = 0. \tag{8-5}$$

Tiếp theo, ta có thể viết

$$\psi^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} = \psi^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} - \frac{1}{3}\delta^{i}_{j}\psi^{(\alpha,k)}_{(\beta,k)} + \frac{1}{3}\delta^{i}_{j}\psi^{(\alpha,k)}_{(\beta,k)}, \tag{8-6}$$

hay, nếu đặt

$$\psi^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} = \tilde{\psi}^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} + \frac{1}{3}\delta^{i}_{j}\psi^{(\alpha,k)}_{(\beta,k)} \tag{8-7}$$

ta có

$$\psi^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} = \approx{\psi}^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} + \frac{1}{2}\delta^{\alpha}_{\beta}\tilde{\psi}^{(\gamma,i)}_{(\gamma,j)} + \frac{1}{3}\delta^{i}_{j}\psi^{(\alpha,k)}_{(\beta,k)} \tag{8-8}$$

với

$$\approx{\psi}^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} = \tilde{\psi}^{(\alpha,i)}_{(\beta,j)} - \frac{1}{2}\delta^{\alpha}_{\beta}\tilde{\psi}^{(\gamma,i)}_{(\gamma,j)}. \tag{8-9}$$

Cái phân tích (8-8) chính là biểu thức phân tích cần tìm. Quả vậy, số hạng thứ ba của (8-8) gồm hai nhân tử, nhân tử thứ nhất

$$\delta^{i}_{j}$$

thực hiện biểu diễn $1 = \{0\}$ của nhóm SU(3), còn nhân tử thứ hai

$$\psi^{(\alpha,k)}_{(\beta,k)}$$

ba thành phần và có vết bằng không (xem (8-5), thực hiện biểu diễn 3 của nhóm SU(2). Như thế là thành phần thứ ba này thực hiện biểu diễn $3 \otimes 1$ của nhóm $SU(2) \otimes SU(3)$. Tương tự như thế, số hạng thứ hai ở (8-8) thực hiện biểu diễn $1 \otimes 8$ của nhóm $SU(2) \otimes SU(3)$, vì nhân tử

$$\tilde{\psi}^{(\gamma,i)}_{(\gamma,j)}$$

có vết bằng không theo (8-7). Cuối cùng, số hạng thứ nhất chính là tenxơ thực hiện biểu diễn $3 \otimes 8$ của nhóm $SU(2) \otimes SU(3)$.

Bây giờ ta chuyển sang biểu diễn 56 với biểu thức phân tích (8-2). Tenxơ thực hiện biểu diễn $\{3\} = 56$ của nhóm SU(6) là tenxơ hoàn toàn đối xứng

$$\psi^{ABC}.$$

Trước hết chính biểu thức phân tích này cho phép ta lập lượng

$$\chi^{\alpha\beta\gamma}, \ \psi^{ijk},$$

trong đó tenxơ hoàn toàn đối xứng $\chi^{\alpha\beta\gamma}$ là tenxơ thực hiện biểu diễn 4 của nhóm SU(2), còn tenxơ hoàn toàn đối xứng ψ^{ijk} là tenxơ thực hiện biểu diễn 10 của nhóm SU(3). Tiếp theo, để lập tenxơ thực hiện biểu diễn $2 \otimes 8$ còn lại trong biểu thức phân tích (8-2), ta sử dụng các tenxơ hoàn toàn phản xứng $\varepsilon^{\alpha\beta}$ và ε^{ijk} tương ứng của các nhóm SU(2) và SU(3). Do tenxơ $\widetilde{\psi}_i^k$ thực hiện biểu diễn phó 8 của nhóm SU(3) và tenxơ χ^α thực hiện biểu diễn 2 của nhóm SU(2), ta thấy rằng tenxơ đối xứng hóa

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\chi^\gamma \varepsilon^{ijh}\widetilde{\psi}_h^k + \varepsilon^{\beta\gamma}\chi^\alpha \varepsilon^{jkh}\widetilde{\psi}_h^i + \varepsilon^{\gamma\alpha}\chi^\beta \varepsilon^{kih}\widetilde{\psi}_h^j$$

chính là tenxơ thực hiện biểu diễn $2 \otimes 8$. Tóm lại ta có biểu thức phân tích

$$\psi^{ABC} = \chi^{\alpha\beta\gamma}\,\psi^{ijk} +$$

$$+ \frac{1}{3\sqrt{2}}\left(\varepsilon^{\alpha\beta}\chi^\gamma \varepsilon^{ijh}\widetilde{\psi}_h^k + \varepsilon^{\beta\gamma}\chi^\alpha \varepsilon^{jkh}\widetilde{\psi}_h^i + \varepsilon^{\gamma\alpha}\chi^\beta \varepsilon^{kih}\widetilde{\psi}_h^j\right)$$

tương ứng với biểu thức phân tích (8-2), trong đó $1/3\sqrt{2}$ là thừa số chuẩn hóa.

Cấu trúc (YS_1S_2ST) của các siêu siêu tuyến 35 và 56

Đến đây ta chuyển sang một vấn đề khác. Ta hãy trở lại bài toán biểu diễn hạ cảm $SU(6) \downarrow SU(2)_S \otimes SU(3)$. Vì ngay đối với các tương tác mạnh tính đối xứng SU(3) cũng không thực hiện được, nên cần hạ nhóm SU(3) xuống thành tích nhiều nhóm con khác nào đó. Quả vậy, có thể chứng minh rằng

$$SU(n) \supset U(1) \otimes SU(n-1)$$

hay, cụ thể hơn, với trường hợp đang xét

$$SU(3) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_T, \tag{8-11}$$

vì lượng Y nguyên có thể xem là đặc trưng cho các biểu diễn đơn trị của nhóm biến đổi

$$U(1): \psi \to \psi' = e^{iY\alpha}\psi$$

(gọi là nhóm biến đổi calibra). Thế thì, ta được xích nhóm

$$SU(6) \supset SU(2)_S \otimes SU(3) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_S \otimes SU(2)_T. \tag{8-12}$$

Nhưng xích nhóm (8-12) không phải là xích duy nhất cho phép đi từ nhóm SU(6) đến các nhóm $U(1)_Y$, $SU(2)_S$ và $SU(2)_T$, cần thiết cho sự phân loại của chúng ta. Quả vậy, ta có thể chứng minh rằng

$$SU(6) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_{S_1} \otimes SU(4),$$

trong đó nhóm $SU(2)_{S_1}$ được xem là nhóm spin của các quoac lạ. Tiếp theo, ta có thể phân

$$SU(4) \supset SU(2)_{S_2} \otimes SU(2)_T,$$

trong đó nhóm $SU(2)_{S_2}$ được xem là nhóm spin của các quoac không lạ. Phối hợp hai kết quả trên, và giả sử spin thông thường S là kết quả kết hợp của spin S_1 của các quoac lạ và spin S_2 của các quoac không lạ, tức là

$$\mathcal{D}^{(S_1)} \otimes \mathcal{D}^{(S_2)} = \sum_S \oplus \mathcal{D}^{(S)},$$

ta sẽ được xích nhóm thứ hai

$$SU(6) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_{S_1} \otimes SU(4) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_{S_1} \otimes$$
$$\otimes SU(2)_{S_2} \otimes SU(2)_T \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_S \otimes SU(2)_T. \qquad (8\text{-}13)$$

Với xích nhóm này, bài toán tìm S(T, Y) — cấu trúc quy về các bài toán

$$SU(6) \downarrow SU(2)_{S_1} \otimes SU(4),$$
$$SU(4) \downarrow SU(2)_{S_2} \otimes SU(2)_T,$$
$$SU(2): \mathcal{D}^{(S_1)} \otimes \mathcal{D}^{(S_2)} = \sum_S \oplus \mathcal{D}^{(S)}.$$

Các giá trị của Y được tính bằng phương pháp so sánh với các kết quả của xích (8-12).

Các bài toán biểu diễn hạ cảm nói trên đã được giải quyết ở chương XVII. Chẳng hạn, ta có

$$SU(6) \downarrow SU(2)_{S_1} \otimes SU(4):$$
$$35 = \{2,1^4\} = \{2\}_{S_1} \otimes \{0\} \oplus \{0\}_{S_1} \otimes \{0\} \oplus$$
$$\oplus \{0\}_{S_1} \otimes \{2,1^2\} \oplus \{1\}_{S_1} \otimes \{1^3\} \oplus \{1\}_{S_1} \otimes \{1\}.$$
$$SU(4) \downarrow SU(2)_{S_2} \otimes SU(2)_T:$$
$$\{1\} = \{1\}_{S_2} \otimes \{1\}_T, \quad \{0\} = \{0\}_{S_2} \otimes \{0\}_T,$$
$$\{2,1^2\} = \{0\}_{S_2} \otimes \{2\}_T \oplus \{2\}_{S_2} \otimes \{0\}_T \oplus \{2\}_{S_2} \otimes \{2\}_T,$$
$$\{1^3\} = \{1\}_{S_2} \otimes \{1\}_T.$$

Từ đó, dùng chuỗi Clebsch-Gordan cho nhóm SU(2), ta được kết quả sau

$$SU(6) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_{S_1} \otimes SU(4) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_S \otimes SU(2)_T$$

35	$(0)\{2\}_{S_1} \otimes \{0\}$	$(0)\{0\}_{S_1} \otimes \{0\}$	$(0)\{0\}_{S_1} \otimes \{2,1^2\}$	$(-1)\{1\}_{S_1} \otimes \{1^3\}$	$(1)\{1\}_{S_1} \otimes \{1\}$
(YS_1S_2ST)	(0, 1, 0, 1, 0)	(0, 0, 0, 0, 0)	(0, 0, 0, 0, 1) (0, 0, 1, 1, 0) (0, 0, 1, 1, 0)	$\left(-1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right)$ $\left(-1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$	$\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right)$ $\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$
Hạt	φ	η	π ρ ω	K_δ K	$\bar{K}_\delta$ $\bar{K}$

(hàng đầu của bảng trên trỏ các kết quả phân tích của biểu diễn 35 và các giá trị của Y).

Tương tự như thế, với biểu diễn $\{3\} = 56$ ta có.

$$SU(6) \downarrow SU(2)^{S_1} \otimes SU(4):$$

$$56 = \{3\}_{S_1} \otimes \{0\} \oplus \{2\}_{S_1} \otimes \{1\} \oplus \{1\}_{S_1} \otimes \{2\} \oplus \{0\}_{S_1} \otimes \{3\},$$

$$SU(4) \downarrow SU(2)_{S_2} \otimes SU(2)_T:$$

$$\{3\} = \{3\}_{S_2} \otimes \{3\}_T \oplus \{1\}_{S_2} \otimes \{1\}_T,$$

$$\{2\} = \{2\}_{S_2} \otimes \{2\}_T \oplus \{0\}_{S_2} \otimes \{0\}_T,$$

$$\{1\} = \{1\}_{S_2} \otimes \{1\}_T, \ \{0\} = \{0\}_{S_2} \otimes \{0\}_T,$$

Sau đó dùng chuỗi Clebsch — Gordan cho nhóm SU(2) ta được kết quả sau

$$SU(6) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_{S_1} \otimes SU(4) \supset U(1)_Y \otimes SU(2)_S \otimes SU(2)_T$$

56	$(-2)\{3\}_{S_1} \otimes \{0\}$	$(-1)\{2\}_{S_1} \otimes \{1\}$	$(0)\{1\}_{S_1} \otimes \{2\}$	$(1)\{0\}_{S_1} \otimes \{3\}$
(YS_1S_2ST)	$\left(-2, \frac{3}{2}, 0, \frac{3}{2}, 0\right)$	$\left(-1, 1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 1\right)$	$\left(1, 0, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)$
		$\left(-1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}, 1\right)$	$\left(1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$
			$\left(0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0\right)$	
Hạt		Ξ_δ	Σ_δ	Δ_δ
	Ω^-		Σ	N
		Ξ	Λ	

Trong lý thuyết đối cao SU(6), có thể giải quyết một số hạn chế tồn tại trong lý thuyết đối xứng SU(3) như đã nói ở trên, hoặc mở rộng một số kết quả khác. Nhưng ta hãy dừng tại đây với nhận xét rằng lý thuyết đối xứng SU(6) là một lý thuyết phi tương đối tính về thực chất. Quả vậy, trong lý thuyết này ta chỉ dùng hệ đứng yên của các hạt. Nếu chuyển sang hệ quy chiếu trong đó hạt chuyển động thì, như đã thấy ở § 8, chương XII, spin **S** không bảo toàn, lượng bảo toàn phải là tổng mômen oocbitan **L** và spin **S**, tức là ta phải kể đến tương tác spin — oocbitan. Do tương tác này, tính đối xứng giữa spin S và các đại lượng nội tại (T, Y) bị vi phạm. Do đó, cần phải mở rộng nhóm SU(6) thành một nhóm nào đó bao trùm cả nhóm Poincaré (để đảm bảo tính chất tương đối tính), cả nhóm đối xứng nội tại xem như những nhóm con.

Về mặt toán học, có thể dùng định lý Lêvi — Malcev (xem chương XIV).

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Xem [16]

HƯỚNG DẪN CÁCH ĐỌC

A — Những kiến thức cần cho vật lý phân tử
Không cần đọc chương này

B — Những kiến thức cần cho vật lý tinh thể
Không cần đọc chương này

C — Những kiến thức cần cho vật lý nguyên tử
Không cần đọc chương này

D — Những kiến thức cần cho vật lý hạt nhân
Không cần đọc chương này

E — Những kiến thức cần cho vật lý các hạt cơ bản
Đọc toàn chương.

BẢNG ĐẶC BIỂU ĐƠN TRỊ CÁC NHÓM ĐIỂM

$\mathcal{C}_2$			e	C_2
x^2, y^2, z^2, xy	L_z, z	$\mathcal{A}$	1	1
xz, yz	x, y, L_x, L_y	$\mathcal{B}$	1	-1

$\mathcal{C}_3$			e	C_3	C_3^2
x^2+y^2, z^2	L_z, z	$\mathcal{A}$	1	1	1
xz, yz	x, y	$\mathcal{E}$	1	ε	ε^2
x^2-y^2, xy	L_x, L_y		1	ε^2	ε

$$\varepsilon = \exp 2\pi i/3$$

$\mathcal{C}_4$			e	C_4	C_4^2	C_4^3
x^2+y^2, z^2	L_z, z	$\mathcal{A}$	1	1	1	1
x^2-y^2, xy		$\mathcal{B}$	1	1	-1	1
	(x, y)	$\mathcal{E}$	1	-1	i	$-i$
(xz, yz)	(L_x, L_y)		1	-1	$-i$	i

$\mathcal{C}_5$			e	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4
x^2+y^2, z^2	L_z, z	$\mathcal{A}$	1	1	1	1	1
	(x, y)	$\mathcal{E}_1$	1	ω	ω^2	ω^3	ω^4
(xz, yz)	(L_x, L_y)		1	ω^4	ω^3	ω^2	ω
		$\mathcal{E}_2$	1	ω^2	ω^4	ω	ω^3
(x^2-y^2, xy)			1	ω^3	ω	ω^4	ω^2

$$\omega = \exp 2\pi i/5$$

$\mathcal{C}_6$			e	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5
$x^2+y^2,\ z^2$	$L_z,\ z$	$\mathcal{A}$	1	1	1	1	1	1
		$\mathcal{B}$	1	−1	1	−1	1	−1
$(xz,\ yz)$	$(x,\ y)$, $(L_x,\ L_y)$	$\mathcal{E}_1$	1	τ	τ^2	τ^3	τ^4	τ^5
			1	τ^5	τ^4	τ^3	τ^2	τ
$(x^2-y^2,\ xy)$		$\mathcal{E}_2$	1	τ^2	τ^4	1	τ^2	τ^4
			1	τ^4	τ^2	1	τ^4	τ^2

$\tau = \exp 2\pi i/6$

$\mathcal{C}_{2v}$			e	C	σ_v	$\sigma_{v'}$
$x^2,\ y^2,\ z^2$	z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1
xy	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	−1	−1
xz	$L_y,\ x$	$\mathcal{B}_1$	1	−1	1	−1
yz	$L_x,\ y$	$\mathcal{B}_2$	1	−1	−1	1

$\mathcal{C}_{3v}$			e	$2C_3$	$3\sigma_v$
$x^2+y^2,\ z^2$	z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1
	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	−1
$(x^2-y^2,\ xy)$, $(xz,\ yz)$	$(x,\ y)$, $(L_x,\ L_y)$	$\mathcal{E}$	2	−1	0

$\mathcal{C}_{4v}$			e	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_{v'}$
$x^2+y^2,\ z^2$	z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1
	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	−1	−1
x^2-y^2		$\mathcal{B}_1$	1	1	−1	1	−1
xy		$\mathcal{B}_2$	1	1	−1	−1	1
$(xz,\ yz)$	$(x,\ y)$, $(L_x,\ L_y)$	$\mathcal{E}$	2	−2	0	0	0

$\mathcal{C}_{5v}$			e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5\sigma_v$
$x^2+y^2,\ z^2$	z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1
	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	−1
$(xz,\ yz)$	$(x,\ y)$, $(L_x,\ L_y)$	$\mathcal{E}_1$	2	$2\cos\alpha$	$2\cos 2\alpha$	0
$(x^2-y^2,\ xy)$		$\mathcal{E}_2$	2	$2\cos 2\alpha$	$2\cos 4\alpha$	0

$\alpha = \exp 2\pi i/5$

$\mathcal{C}_{6v}$				e	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_v$	$3\sigma_{v'}$
$x^2+y^2,\ z^2$		z	$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1	1
		L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	1	−1	−1
			$\mathcal{B}_1$	1	−1	1	−1	−1	1
			$\mathcal{B}_2$	1	−1	1	−1	1	−1
(xz, yz)		$\left.\begin{matrix}(x, y)\\(L_x, L_y)\end{matrix}\right\}$	$\mathcal{E}_1$	2	−2	−1	1	0	0
$(x^2-y^2,\ xy)$			$\mathcal{E}_2$	2	2	−1	−1	0	0

$\mathcal{C}_{1h} = \mathcal{C}_s$			e	σ
x , y , z , xy	L_z , x , y	$\mathcal{A}'$	1	1
xz , yz	L_x , L_y , z	$\mathcal{A}''$	1	−1

$\mathcal{C}_{2h} = \mathcal{C}_2 \otimes \mathcal{C}_i$			e	C_2	σ_h	I
x^2 , y^2 , z^2 , xy	L_z	$\mathcal{A}_g$	1	1	1	1
	z	$\mathcal{A}_u$	1	1	−1	−1
xz , yz	L_x , L_y	$\mathcal{B}_g$	1	−1	−1	1
	x , y	$\mathcal{B}_u$	1	−1	1	−1

$\mathcal{C}_{3h} = \mathcal{C}_3 \otimes \mathcal{C}_s$			e	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	$\sigma_h C_3^2$
x^2+y^2 , z^2	L_z	$\mathcal{A}'$	1	1	1	1	1	1
	z	$\mathcal{A}''$	1	1	1	−1	−1	−1
$(x^2-y^2$, xy)	(x , y)	$\mathcal{E}'$	1	ε	ε^2	1	ε	ε^2
			1	ε^2	ε	1	ε^2	ε
(xz , yz)	$(L_x$, $L_y)$	$\mathcal{E}''$	1	ε	ε^2	−1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$
			1	ε^2	ε	−1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$

$\varepsilon = \exp 2\pi i/3$

$$\mathcal{C}_{4h} = \mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_i\ ,\ \mathcal{C}_{5h} = \mathcal{C}_5 \otimes \mathcal{C}_s\ ,\ \mathcal{C}_{6h} = \mathcal{C}_6 \otimes \mathcal{C}_i$$

$\mathcal{S}_2 = \mathcal{C}_i$			e	I
x^2+y^2 , z^2	L_x , L_y , L_z	$\mathcal{A}_g$	1	1
xy , yz , zx	x , y , z	$\mathcal{A}_u$	1	−1

$\mathcal{S}_6 = \mathcal{C}_6 \otimes \mathcal{C}_i$

$\mathcal{D}_2$			e	C_x	C_y	C_z
x^2, y^2, z^2		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1
xy	L_z, z	$\mathcal{B}_1$	1	1	−1	−1
xz	L_y, y	$\mathcal{B}_2$	1	−1	1	−1
yz	L_x, x	$\mathcal{B}_3$	1	−1	−1	1

$\mathcal{D}_3$			e	$2C_3$	$3C_2$
$x^2 + y^2$, z^2		$\mathcal{A}_1$	1	1	1
	L_z, z	$\mathcal{A}_2$	1	1	−1
(xz, yz) $(x^2 - y^2, xy)$	(x, y) (L_x, L_y)	$\mathcal{E}$	2	−1	0

$\mathcal{D}_4$			e	C_2	$2C_4$	$2C_2$	$2C_{2'}$
$x^2 + y^2$, z^2		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1
	L_z, z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	−1	−1
xy		$\mathcal{B}_1$	1	1	−1	1	−1
$x^2 - y^2$		$\mathcal{B}_2$	1	1	−1	−1	1
(xz, yz)	(x, y) (L_x, L_y)	$\mathcal{E}$	2	−2	0	0	0

$\mathcal{D}_6$			e	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3C_{2'}$	$3C_{2''}$
$x^2 + y^2$, z^2		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1	1
	L_z, z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	1	−1	−1
		$\mathcal{B}_1$	1	−1	1	−1	1	−1
		$\mathcal{B}_2$	1	−1	1	−1	−1	1
(xz, yz)	(x, y) (L_x, L_y)	$\mathcal{E}_1$	2	−2	−1	1	0	0
$(x^2 - y^2, xy)$		$\mathcal{E}_2$	2	2	−1	−1	0	0

$\mathcal{D}_{2d}$			e	C_2	$2S_4$	$2C_2'$	$2\sigma_d$
x^2+y^2, z^2		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1
	L_z	$\mathcal{A}_2$	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		$\mathcal{B}_1$	1	1	-1	1	-1
xy	z	$\mathcal{B}_2$	1	1	-1	-1	1
(xz, yz)	$\left.\begin{array}{c}(x, y)\\(L_x, L_y)\end{array}\right\}$	$\mathcal{E}$	2	-2	0	0	0

$$\mathcal{D}_{2h} = \mathcal{D}_2 \otimes \mathcal{C}_i,\ \mathcal{D}_{3h} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{C}_s,\ \mathcal{D}_{4h} = \mathcal{D}_4 \otimes \mathcal{C}_i,$$

$$\mathcal{D}_{5h} = \mathcal{D}_5 \otimes \mathcal{C}_s, \quad \mathcal{D}_{6h} = \mathcal{D}_6 \otimes \mathcal{C}_i,$$

$$\mathcal{D}_{3d} = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{C}_i.$$

$\mathcal{T}$			e	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
		$\mathcal{A}$	1	1	1	1
$(\varepsilon x^2+\varepsilon^2 y^2+z^2,$		$\mathcal{E}$	1	1	ε	ε^2
$\varepsilon^2 x^2+\varepsilon y^2+z^2)$			1	1	ε^2	ε
(xy, yz, zx)	(L_x, L_y, L_z)	$\mathcal{F}$	3	-1	0	0

$$\varepsilon = \exp 2\pi i/3.$$

$$\mathcal{T}_h = \mathcal{T} \otimes \mathcal{C}_i$$

$\mathcal{O}$			e	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_2$	$6C_4$
		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1
		$\mathcal{A}_2$	1	1	1	-1	-1
(x^2-y^2, z^2)		$\mathcal{E}$	2	-1	2	0	0
	$\left.\begin{array}{c}(L_x, L_y, L_z)\\(x, y, z)\end{array}\right\}$	$\mathcal{F}_1$	3	0	-1	-1	1
(xy, yz, zx)		$\mathcal{F}_2$	3	0	-1	1	-1

$$\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \otimes \mathcal{C}_i$$

$\mathcal{T}_d$			e	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
		$\mathcal{A}_1$	1	1	1	1	1
		$\mathcal{A}_2$	1	1	1	-1	-1
(x^2-y^2, z^2)		$\mathcal{E}$	2	-1	2	0	0
(xy, yz, zx)	(x, y, z)	$\mathcal{F}_2$	3	0	-1	1	-1
	(L_x, L_y, L_z)	$\mathcal{F}_1$	3	0	-1	-1	1

$\mathscr{C}_{\infty v}$			e	$2C(\varphi)$	σ_v
$x^2 + y^2, z^2$	z	$\Sigma^+ = \mathscr{A}_1$	1	1	1
	L_z	$\Sigma^- = \mathscr{A}_2$	1	1	−1
(xz, yz)	$\left.\begin{matrix}(x, y)\\ (L_x, L_y)\end{matrix}\right\}$	$\Pi = \mathscr{E}_1$	2	$2\cos\varphi$	0
$(x^2 - y^2, xy)$		$\Delta = \mathscr{E}_2$	2	$2\cos 2\varphi$	0
		$\mathscr{E}_3$	2	$2\cos 3\varphi$	0
		$\mathscr{E}_m$	2	$2\cos m\varphi$	0

$\mathscr{D}_{\infty h}$		e	$2C(\varphi)$	σ_v	I	$2IC(\varphi)$	$I\sigma_v$
$x^2 + y^2, z^2$	$\Sigma_g^+ = \mathscr{A}_{1g}$	1	1	1	1	1	1
z	$\Sigma_u^+ = \mathscr{A}_{1u}$	1	1	1	−1	−1	−1
L_z	$\Sigma_g^- = \mathscr{A}_{2g}$	1	1	−1	1	1	−1
	$\Sigma_u^- = \mathscr{A}_{2u}$	1	1	−1	−1	−1	1
(xz, yz) (L_x, L_y)	$\Pi_g = \mathscr{E}_{1g}$	2	$2\cos\varphi$	0	2	$2\cos\varphi$	0
$(x; y)$	$\Pi_u = \mathscr{E}_{1u}$	2	$2\cos\varphi$	0	−2	$-2\cos\varphi$	0
$(x^2 - y^2, xy)$	$\Delta_g = \mathscr{E}_{2g}$	2	$2\cos 2\varphi$	0	2	$2\cos 2\varphi$	0
	$\Delta_u = \mathscr{E}_{2u}$	2	$2\cos 2\varphi$	0	−2	$-2\cos 2\varphi$	0

. . . .

BẢNG ĐẶC BIỀU LƯỠNG TRỊ CÁC NHÓM ĐIỂM

$\mathcal{C}'_n$	C_n^m	$C_n^m R$
	$\exp \frac{2\pi i k m}{n}$	$-\exp \frac{2\pi i k m}{n}$

$k = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, n - \frac{1}{2}$

$\mathcal{D}'_2$	e	R	C_2 C_2R	u_1 u_1R	u_2 u_2R
$\mathcal{E}'$	2	−2	0	0	0

$\mathcal{D}'_3$	e	R	C_3 C_3^2R	C_3^2 C_3R	3u	3uR
$\mathcal{E}'_1$	1	−1	−1	1	i	−i
	1	−1	−1	1	−i	i
$\mathcal{E}_2$	2	−2	1	−1	0	0

$\mathcal{D}'_4$	e	R	C_4^2 C_4^2R	C_4 C_4^3R	C_4^3 C_4R	u_1 u_1R	u_2 u_2R
	2	−2	0	2	−2	0	0
	2	−2	0	−2	2	0	0

$\mathcal{D}'_6$	e	R	C_6 C_6^5R	C_6^2 C_6^4R	C_6^5 C_6R	C_6^4 C_6^2R	C_6^3 C_6^3R	$3u_1$ $3u_1R$	$3u_2$ $3u_2R$
$\mathcal{E}'_1$	2	−2	$\sqrt{3}$	1	$-\sqrt{3}$	−1	0	0	0
$\mathcal{E}'_2$	2	−2	$-\sqrt{3}$	1	$\sqrt{3}$	−1	0	0	0
$\mathcal{E}'_3$	2	−2	0	−2	0	2	0	0	0

$\mathcal{T}'$	e	R	$4C_3$	$4C_3R$	$4C_3^2$	$4C_3^2R$	$3C_2$ $3C\ R$
$\mathcal{E}'$	2	-2	1	-1	-1	1	0
$\mathcal{G}'$	2	-2	ε	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon^2$	ε^2	0
	2	2	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε	0

$\mathcal{O}'$	e	R	$4C_3$ $4C_3^2R$	$4C_3^2$ $4C_3R$	$3C_4$ $4C_4^3R$	$3C_4^3$ $3C_4R$	$3C_4^2$ $3C_4^2R$	$6C_2$ $6C_2R$
$\mathcal{E}'_1$	2	-2	1	-1	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
$\mathcal{E}'_2$	2	-2	1	-1	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0
$\mathcal{G}'$	4	-4	-1	1	0	0	0	0

BẢNG CÁC NHÓM ĐIỂM ĐẲNG CẤU VỚI NHAU

$\mathcal{C}_i$	e	I
$\mathcal{C}_2$	e	C_2
$\mathcal{C}_s$	e	σ

$\mathcal{C}_{2h}$	e	C_2	σ_h	I
$\mathcal{C}_{2v}$	e	C_2	σ_v	σ_v
$\mathcal{D}_2$	e	C_x	C_y	C_z

$\mathcal{C}_4$	e	C_4	C_4^2	C_4^3
$\mathcal{S}_4$	e	S_4	S_4^2	S_4^3

$\mathcal{C}_{3v}$	e	C_3	σ_v
$\mathcal{D}_3$	e	C_3	C_2

$\mathcal{C}_{4v}$	e	C_4^2	C_4	σ_v	σ_v'
$\mathcal{D}_4$	e	C_4^2	C_4	C_2	C_2'
$\mathcal{D}_{2d}$	e	C_2	S_4	C_2	σ_d

$\mathcal{D}_6$	e	C_6^3	C_6^2	C_6	C_2	C_2'
$\mathcal{C}_{6v}$	e	C_6^3	C_6^2	C_6	σ_v	σ_v'
$\mathcal{D}_{3h}$	e	σ_h	S_6^2	S_6	C_2	σ_v

$\mathcal{O}$	e	C_3	C_4^2	C_2	C_4
$\mathcal{T}_d$	e	C_3	S_4	σ_d	S_4

BẢNG CÁC MA TRẬN BIỂU DIỄN NHIỀU CHIỀU CÁC NHÓM ĐIỂM

$\mathcal{D}_3$ Biểu diễn $\mathcal{E}$.

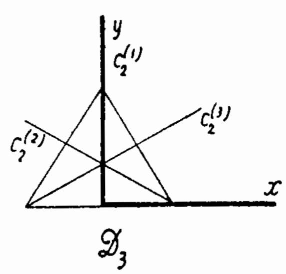
$$e: \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_3: \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^2: \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$C_2^{(1)}: \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)}: \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(3)}: \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

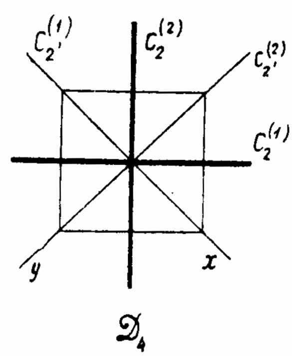
$\mathcal{D}_4$ — Biểu diễn $\mathcal{E}$

$$e: \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_4: \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2: \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_4^3: \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_2^{(1)}: \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)}: \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_{2'}^{(1)}: \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)}: \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$



$\mathcal{D}_3$ Hình B-1



$\mathcal{D}_4$ Hình B-2

$\mathcal{D}_6$ — Các biểu diễn $\mathcal{E}_1$ và $\mathcal{E}_2$.

Biểu diễn $\mathcal{E}_1$.

$$\begin{array}{ccc} e & C_3 & C_3^2 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} C_2 & C_6 & C_6^5 \\ \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} C_2^{(1)} & C_2^{(2)} & C_2^{(3)} \\ \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} C_{2'}^{(2)} & C_{2'}^{(1)} & C_{2'}^{(3)} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array}$$

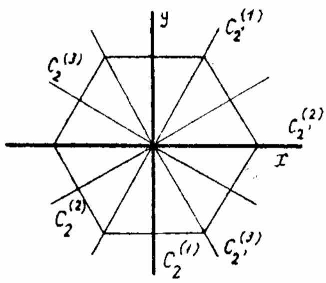
Biểu diễn $\mathcal{E}_2$.

$$\begin{array}{ccc} e & C_3 & C_3^2 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array}$$

$$C_2 \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_6 \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_6^5 \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$C_2^{(1)} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(3)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$C_{2'}^{(2)} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_{2'}^{(1)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_{2'}^{(3)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$



$\mathcal{D}_6$

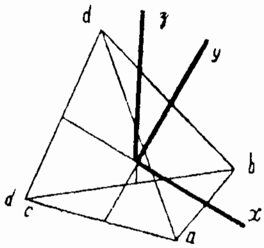
Hình B_3

$\mathcal{C}$ — Biểu diễn $\mathcal{G}$.

$$e \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^z \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^y \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^x \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$C_3^a \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (C_3^a)^2 \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_3^b \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (C_3^b)^2 \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_3^c \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (C_3^c)^2 \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_3^d \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (C_3^d)^2 \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$



$\mathcal{E}$

Hình B-4

$\mathcal{O}$ — Các biểu diễn $\mathcal{E}$, $\mathcal{F}_1$ và $\mathcal{F}_2$

Biểu diễn $\mathcal{E}$.

$$e \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^x \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^y \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^z \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_4^x \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_4^y \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_4^z \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad (C_4^x)^3 \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(C_4^y)^3 \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad (C_4^z)^3 \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(1)} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$C_2^{(3)} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(4)} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_2^{(5)} \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(6)} \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_3^{(a)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(b)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(c)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(d)} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$C_3^{(a)2} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(b)2} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(c)2} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad C_3^{(d)2} \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Biểu diễn $\mathcal{F}_1$.

$$e \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^x \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^y \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^z \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_4^x \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_4^y \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_4^z \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (C_4^x)^3 \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(C_4^y)^3 \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (C_4^z)^3 \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(1)} \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(2)} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$C_2^{(3)} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(4)} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(5)} \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2^{(6)} \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$
\begin{array}{cccc}
C_3^{(a)} & C_3^{(b)} & C_3^{(c)} & C_3^{(d)} \\
\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc}
C_3^{(a)2} & C_3^{(b)2} & C_3^{(c)2} & C_3^{(d)2} \\
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

Biểu diễn $\mathcal{F}_2$

$$
\begin{array}{cccc}
e & C_2^x & C_2^y & C_2^z \\
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

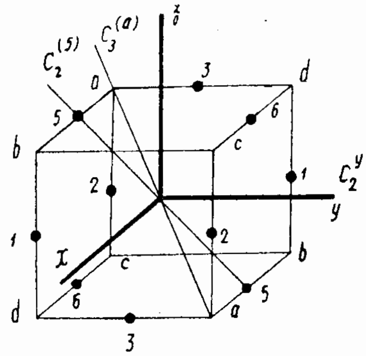
$$
\begin{array}{cccc}
C_4^x & C_4^y & C_4^z & (C_4^x)^3 \\
\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc}
(C_4^y)^3 & (C_4^z)^3 & C_2^{(1)} & C_2^{(2)} \\
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc}
C_2^{(3)} & C_2^{(4)} & C_2^{(5)} & C_2^{(6)} \\
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc}
C_3^{(a)} & C_3^{(b)} & C_3^{(c)} & C_3^{(d)} \\
\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}. &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} &
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$C_3^{(a)2} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_3^{(b)2} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_3^{(c)2} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_3^{(d)2} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



$\mathcal{O}$

Hình B-5

$\mathcal{C}_{\infty v}$ Các biểu diễn $\mathcal{E}_m$.

$$C(\varphi) \quad \begin{bmatrix} \exp im\varphi & 0 \\ 0 & \exp(-im\varphi) \end{bmatrix} \qquad \sigma_v \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad e \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

BẢNG CÁC NHÓM KHÔNG GIAN

Hệ tam tà

Lớp $\mathcal{C}_o$. Lớp này chỉ có một nhóm không gian duy nhất là nhóm $\mathcal{C}_o^1$ gồm chỉ các phép tịnh tiến. Nhóm này thuộc loại Γ_t.

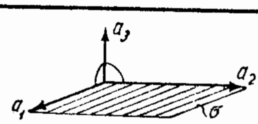
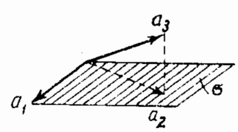
Lớp $\mathcal{S}_2 = \mathcal{C}_i$. Lớp này chỉ gồm một nhóm không gian

$$\mathcal{S}_2^1 = \mathcal{T}_a \otimes \mathcal{C}_i.$$

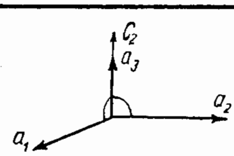
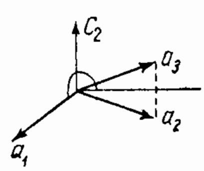
Nhóm này thuộc loại Γ_t.

Hệ đơn tà

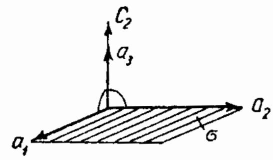
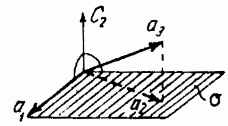
Lớp $\mathcal{C}_s$

Nhóm không gian	Loại	σ_h	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_s^1$ $\mathcal{C}_s^2$	Γ_m	$0\ 0\ 0$ $\frac{1}{2}\ 0\ 0$	
$\mathcal{C}_s^3$ $\mathcal{C}_s^4$	Γ_m^b	$0\ 0\ 0$ $\frac{1}{2}\ 0\ 0$	

Lớp $\mathcal{C}_2$.

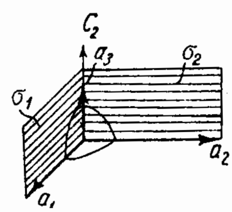
Nhóm không gian	Loại	C_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_2^1$ $\mathcal{C}_2^2$	Γ_m	$0\ 0\ 0$ $0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_2^3$	Γ_m^b	$0\ 0\ 0$	

Lớp $\mathcal{C}_{2h}$

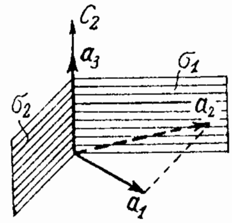
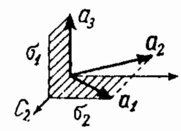
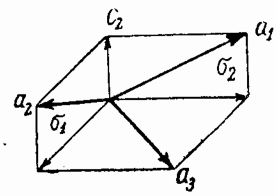
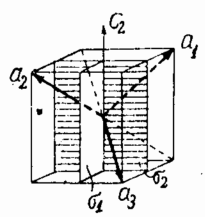
Nhóm không gian	Loại	C_2	σ_h	I	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{2h}^{1}$	Γ_m	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2h}^{2}$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2h}^{4}$		0 0 0	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	
$\mathcal{C}_{2h}^{5}$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2h}^{3}$	Γ_m^b	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2h}^{6}$		0 0 0	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	

Hệ rombic $\mathcal{D}_{2h}$

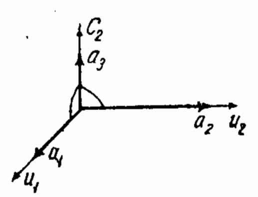
Lớp $\mathcal{C}_{2v}$

Nhóm không gian	Loại	C_2	σ_1	σ_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{2v}^{1}$	Γ_o	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{2}$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{3}$		0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{4}$		$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{5}$		$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{6}$		$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{7}$		$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{8}$		$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$0\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathcal{C}_{2v}^{9}$		$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	$0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{10}$		$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	

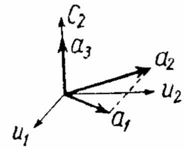
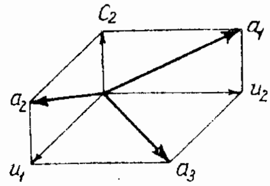
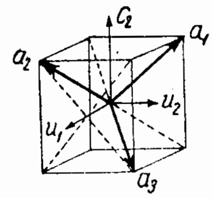
Lớp $\mathcal{C}_{2v}$ *(tiếp theo)*

Nhóm không gian	Loại	C_2	σ_1	σ_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{2v}^{11}$	Γ_o^b	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{12}$		0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{13}$		0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{14}$	Γ_o^b	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{15}$		0 0 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{16}$		0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{17}$		0 0 0	$\frac{1}{1}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{2v}^{18}$	Γ_o^f	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{19}$		0 0 $\frac{1}{2}$	0 $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{20}$	Γ_o^v	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{21}$		$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	0 0 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	
$\mathcal{C}_{2v}^{22}$		0 0 0	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	

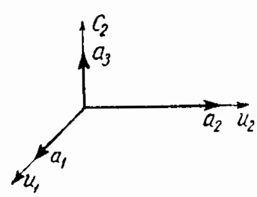
Lớp $\mathcal{D}_2$

Nhóm không gian	Loại	u_1	u_2	C_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_2^1$	Γ_o	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_2^2$		0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_2^3$		$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_2^4$		$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ 0 $\frac{1}{2}$	

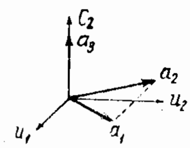
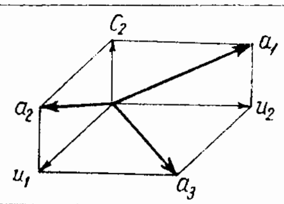
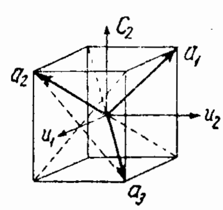
Lớp $\mathcal{D}_2$ (*tiếp theo*)

Nhóm không gian	Loại	u_1	u_2	C_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_2^5$	Γ_o^b	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_2^6$		$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_2^7$	Γ_o^f	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_2^8$	Γ_o^v	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_2^9$		$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$	

Lớp $\mathcal{D}_{2h}$ ($\mathcal{D}_{2h} = \mathcal{D}_2 \otimes \mathcal{C}_i$)

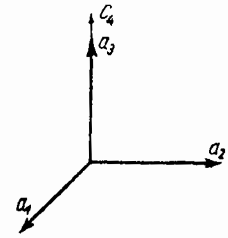
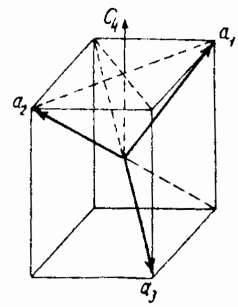
Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}_2$	I	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{2h}^1$	Γ_o	$\mathcal{D}_2^1$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^2$			$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^3$			$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^4$			$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^5$		$\mathcal{D}_2^2$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^6$			$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^7$			$\frac{1}{2}\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^8$			$0\ \frac{1}{2}\ 0$	

Lớp $\mathcal{D}_{2h}$ (tiếp theo)

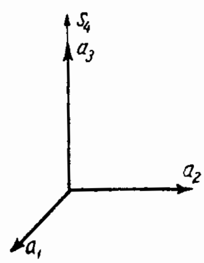
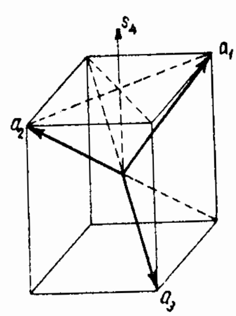
Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}2$	I	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{2h}^{9}$		$\mathcal{D}_{2}^{3}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{10}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{11}$			$0 \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{12}$			$0 \quad 0 \quad \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{13}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{14}$			$\frac{1}{2} \quad 0 \quad \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{15}$		$\mathcal{D}_{2}^{4}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{16}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{17}$	Γ_o^b	$\mathcal{D}_{2}^{5}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{18}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{19}$		$\mathcal{D}_{2}^{6}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{20}$			$0 \quad 0 \quad \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{21}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{22}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{23}$	Γ_o^f	$\mathcal{D}_{2}^{7}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{24}$			$\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}$	
$\mathcal{D}_{2h}^{25}$	Γ_o^v	$\mathcal{D}_{2}^{8}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{26}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{27}$		$\mathcal{D}_{2}^{9}$	$0 \quad 0 \quad 0$	
$\mathcal{D}_{2h}^{28}$			$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$	

Hệ tứ giác $\mathcal{D}_{4h}$

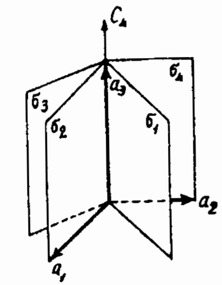
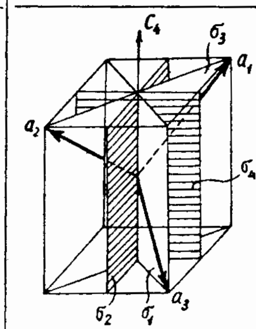
Lớp $\mathcal{C}_4$

Nhóm không gian	Loại	C_4	C_4^2	C_4^3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_4^1$	Γ_q	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{C}_4^2$		$0\ 0\ \frac{1}{4}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{3}{4}$	
$\mathcal{C}_4^3$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_4^4$		$0\ 0\ \frac{3}{4}$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ \frac{1}{4}$	
$\mathcal{C}_4^5$	Γ_q^v	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{C}_4^6$		$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ 0$	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	

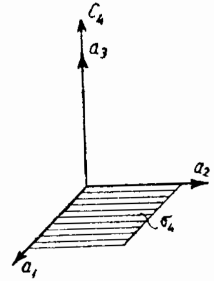
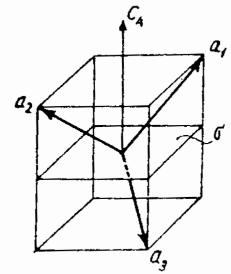
Lớp $\mathcal{S}_4$

Nhóm không gian	Loại	S_4	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{S}_4^1$	Γ_q	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{S}_4^2$	Γ_q^v	$0\ 0\ 0$	

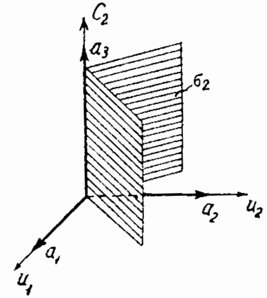
Lớp $\mathscr{C}_{4v}$

Nhóm không gian	Loại	C_4	C_4^2	C_4^3	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathscr{C}_{4v}^1$	Γ_q	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathscr{C}_{4v}^2$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathscr{C}_{4v}^3$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathscr{C}_{4v}^4$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathscr{C}_{4v}^5$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathscr{C}_{4v}^6$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathscr{C}_{4v}^7$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	
$\mathscr{C}_{4v}^8$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathscr{C}_{4v}^9$	Γ_q^v	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathscr{C}_{4v}^{10}$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathscr{C}_{4v}^{11}$		$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	0 0 0	
$\mathscr{C}_{4v}^{12}$		$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	

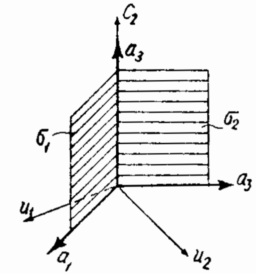
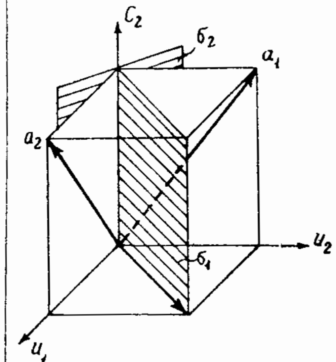
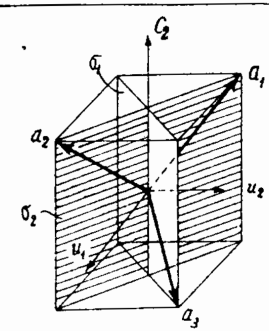
Lớp $\mathcal{C}_{4h}$

Nhóm không gian	Loại	S_4^3	C_4^2	S_4	σ_h	C_4^3	I	C_4	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{4h}^1$	Γ_q	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{4h}^2$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{4h}^3$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathcal{C}_{4h}^4$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{4h}^5$	Γ_q^v	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{2d}^6$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}$	

Lớp $\mathcal{D}_{2d}$

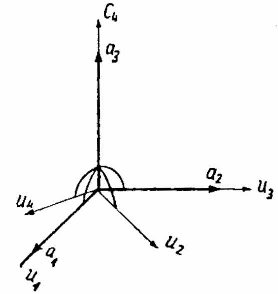
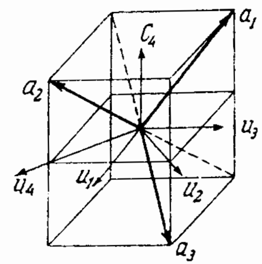
Nhóm không gian	Loại	S_4	C_2	S_4^3	σ_1	u_1	σ_2	u_2	
$\mathcal{D}_{2d}^1$	Γ_q	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_{2d}^2$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2d}^3$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2d}^4$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	

Lớp $\mathcal{D}_{2d}$ *(tiếp theo)*

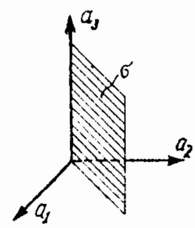
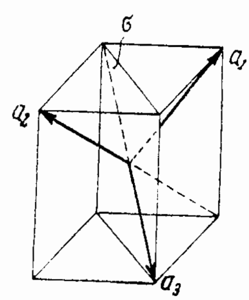
Nhóm không gian	Loại	S_4	C_2	S_4^3	σ_1	u_1	σ_2	u_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{2d}^5$	Γ_q	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_{2d}^6$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2d}^7$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$	
$\mathcal{D}_{2d}^8$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2d}^9$	Γ_q^v	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_{2d}^{10}$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{2d}^{11}$	Γ_q^v	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_{2d}^{12}$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}$	

35 1

Lớp $\mathcal{D}_4$

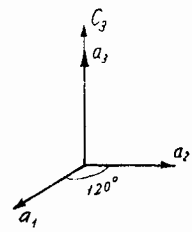
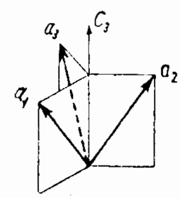
Nhóm không gian	Loại	C_4	C_4^2	C_4^3	u_1	u_2	u_3	u_4	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_4^1$	Γ_q	0 0 0	0 0 0	0 0 0	6 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_4^2$		0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	
$\mathcal{D}_4^3$		0 0 $\frac{1}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{3}{4}$	0 0 0	0 0 $\frac{1}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{3}{4}$	
$\mathcal{D}_4^4$		0 0 $\frac{1}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{3}{4}$	
$\mathcal{D}_4^5$		0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 θ	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_4^6$		0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 0	0 0 $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_4^7$		0 0 $\frac{3}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{4}$	0 0 0	0 0 $\frac{3}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{4}$	
$\mathcal{D}_4^8$		0 0 $\frac{3}{4}$	0 0 $\frac{1}{2}$	0 0 $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}$	
$\mathcal{D}_4^9$	Γ_q^v	0 0 0	0 θ 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 1 0	
$\mathcal{D}_4^{10}$		$\frac{3}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{2}$	0 0 0	$\frac{3}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{2}$	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ 0	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ 0	

Lớp $\mathcal{D}_{4h}$

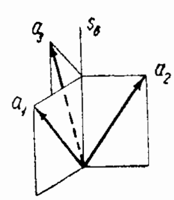
Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}_{2h}$	σ	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}^{1}_{4h}$	F_q	$\mathcal{D}^{1}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{2}_{4h}$		$\mathcal{D}^{3}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{3}_{4h}$		$\mathcal{D}^{4}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{4}_{4h}$		$\mathcal{D}^{2}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{5}_{4h}$		$\mathcal{D}^{9}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{6}_{4h}$		$\mathcal{D}^{12}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{7}_{4h}$		$\mathcal{D}^{13}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{8}_{4h}$		$\mathcal{D}^{10}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{9}_{4h}$		$\mathcal{D}^{1}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{10}_{4h}$		$\mathcal{D}^{3}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{11}_{4h}$		$\mathcal{D}^{4}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{12}_{4h}$		$\mathcal{D}^{2}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{13}_{4h}$		$\mathcal{D}^{9}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{14}_{4h}$		$\mathcal{D}^{12}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{15}_{4h}$		$\mathcal{D}^{13}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{16}_{4h}$		$\mathcal{D}^{10}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{17}_{4h}$	Γ^{v}_{q}	$\mathcal{D}^{25}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{18}_{4h}$		$\mathcal{D}^{26}_{2h}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}^{19}_{4}$		$\mathcal{D}^{28}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}^{20}_{4h}$		$\mathcal{D}^{27}_{2h}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	

Hệ tam giác $\mathcal{D}_{3d}$ và hệ lục giác $\mathcal{D}_{6h}$

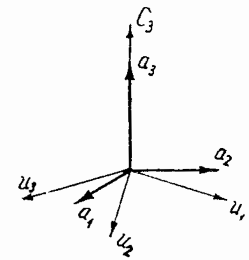
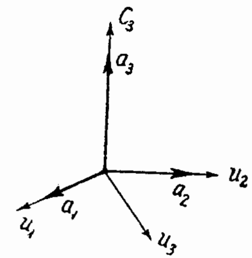
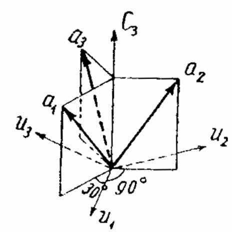
Lớp $\mathcal{C}_3$

Nhóm không gian	Loại	C_3	C_3^2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_3^1$	Γ_h	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_3^2$		$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	
$\mathcal{C}_3^3$		$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	
$\mathcal{C}_3^4$	Γ_{rh}	0 0 0	0 0 0	

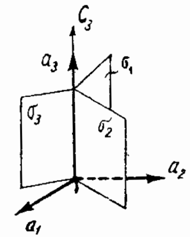
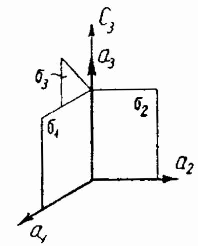
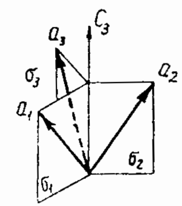
Lớp $\mathcal{S}_6$

Nhóm không gian	Loại	S_6	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{S}_6^1$	Γ_h	0 0 0	Như hình ở $\mathcal{C}_3^1 - \mathcal{C}_3^3$, chỉ thay C_3 bằng S_6
$\mathcal{S}_6^2$	Γ_{rh}	0 0 0	

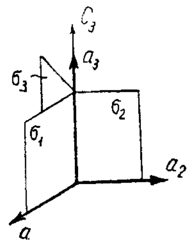
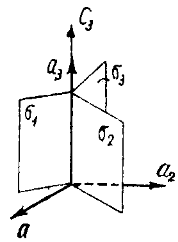
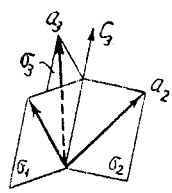
Lớp $\mathcal{D}_3$

Nhóm không gian	Loại	C_3	C_3^2	u_1	u_2	u_3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_3^1$	Γ_h	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^3$		$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^5$		$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^2$	Γ_h	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^4$		$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^6$		$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ 0$	
$\mathcal{D}_3^7$	Γ_{rh}	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	$0\ 0\ 0$	

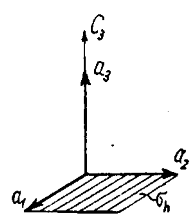
Lớp $\mathcal{C}_{3v}$

Nhóm không gian	Loại	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{3v}^1$	Γ_h	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{3v}^3$		0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{3v}^2$	Γ_h	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{3v}^4$		0 0 0	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{3v}^5$	Γ_{rh}	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_{3v}^6$		0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	

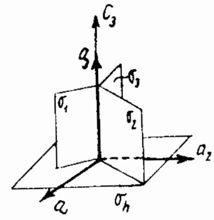
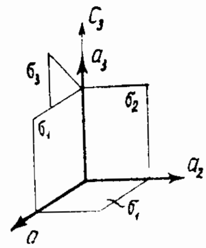
Lớp $\mathcal{D}_{3d}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{S}_6$	σ_3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{3d}^1$	Γ_h	$\mathcal{S}_6^1$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3d}^2$		$\mathcal{S}_6^1$	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{3d}^3$	Γ_h	$\mathcal{S}_6^1$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3d}^4$		$\mathcal{S}_6^1$	0 0 $\frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{3d}^5$	Γ_{rh}	$\mathcal{S}_6^2$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3d}^6$		$\mathcal{S}_6^2$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	

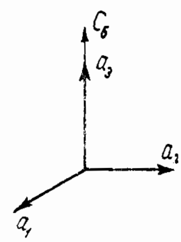
Lớp $\mathcal{C}_{3h}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}_3$	σ_h	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{3h}^1$	Γ_h	$\mathcal{C}_3^1$	0 0 0	

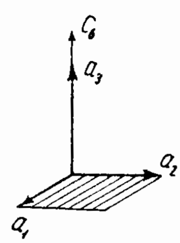
Lớp $\mathcal{D}_{3h}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}_{3v}$	σ_h	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{3h}^1$	Γ_h	$\mathcal{C}_{3v}^1$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3h}^2$		$\mathcal{C}_{3v}^3$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3h}^3$	Γ_h	$\mathcal{C}_{3v}^2$	0 0 0	
$\mathcal{D}_{3h}^4$		$\mathcal{C}_{3v}^4$	0 0 0	

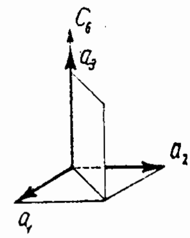
Lớp $\mathcal{C}_6$

Nhóm không gian	Loại	C_6	C_6^k	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_6^1$	Γ_h	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_6^2$		$0\ 0\ \frac{5}{6}$	$0\ 0\ \frac{5k}{6}$	
$\mathcal{C}_6^3$		$0\ 0\ \frac{1}{6}$	$0\ 0\ \frac{k}{6}$	
$\mathcal{C}_6^4$		$0\ 0\ \frac{2}{3}$	$0\ 0\ \frac{2k}{3}$	
$\mathcal{C}_6^5$		$0\ 0\ \frac{1}{3}$	$0\ 0\ \frac{k}{3}$	
$\mathcal{C}_6^6$		$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{k}{2}$	

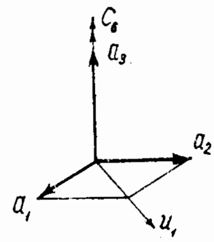
Lớp $\mathcal{C}_{6h}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}_{3h}$	C_6^3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{6h}^1$	Γ_h	$\mathcal{C}_{3h}^1$	0 0 0	
$\mathcal{C}_{6h}^2$		$\mathcal{C}_{3h}^1$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	

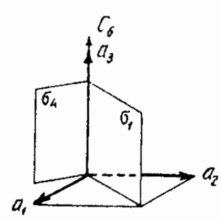
Lớp $\mathcal{C}_{6v}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}_6$	σ_1	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_{6v}^1$	Γ_h	$\mathcal{C}_6^1$	0 0 0	
$\mathcal{C}_{6v}^2$		$\mathcal{C}_6^1$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_{6v}^3$		$\mathcal{C}_6^6$	0 0 0	
$\mathcal{C}_{6v}^4$		$\mathcal{C}_6^6$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	

Lớp $\mathcal{D}_6$

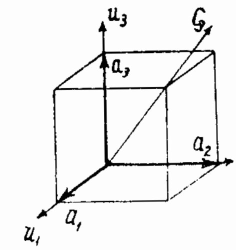
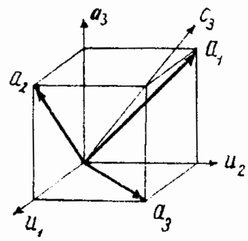
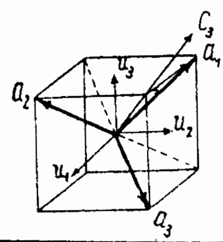
Nhóm không gian	Loại	Nhóm con loại $\mathcal{C}_6$	u_1	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_6^1$	Γ_h	$\mathcal{C}_6^1$	0 0 0	
$\mathcal{D}_6^2$		$\mathcal{C}_6^2$	0 0 0	
$\mathcal{D}_6^3$		$\mathcal{C}_6^3$	0 0 0	
$\mathcal{D}_6^4$		$\mathcal{C}_6^4$	0 0 0	
$\mathcal{D}_6^5$		$\mathcal{C}_6^5$	0 0 0	
$\mathcal{D}_6^6$		$\mathcal{C}_6^6$	0 0 0	

Lớp $\mathcal{D}_{6h}$

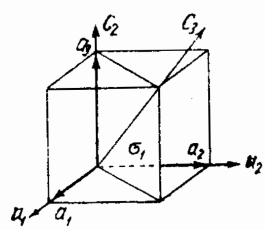
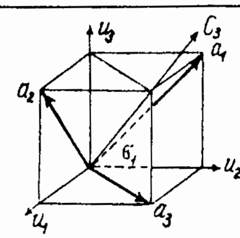
Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{S}_6$	C_6	σ_1	σ_2	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{D}_{6h}^1$	Γ_h	$\mathcal{S}_6^1$	0 0 0	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{D}_{6h}^2$			0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{6h}^3$			$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{D}_{6h}^4$			$0\ 0\ \frac{1}{2}$	$0\ 0\ \frac{1}{2}$	0 0 0	

Hệ lập phương $\mathcal{O}_h$

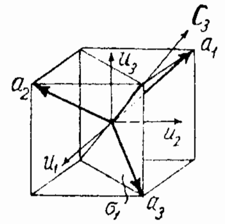
Lớp $\mathcal{C}_h$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}_2$	C_3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}^1$ $\mathcal{C}^4$	Γ_c	$\mathcal{D}_2^1$ $\mathcal{D}_2^4$	0 0 0 0 0 0	
$\mathcal{C}^2$	Γ_c^f	$\mathcal{D}_2^7$	0 0 0	
$\mathcal{C}^3$ $\mathcal{C}^5$	Γ_c^v	$\mathcal{D}_2^8$ $\mathcal{D}_2^9$	0 0 0 0 0 0	

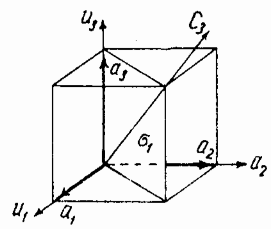
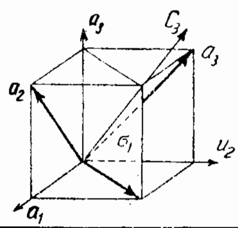
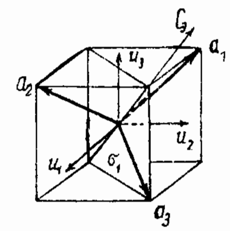
Lớp $\mathcal{C}_h$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}_{2h}$	C_3	σ_1	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_h^1$ $\mathcal{C}_h^2$ $\mathcal{C}_h^6$	Γ_c	$\mathcal{D}_{2h}^1$ $\mathcal{D}_{2h}^2$ $\mathcal{D}_{2h}^{15}$	0 0 0 0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0 0 0	
$\mathcal{C}_h^3$ $\mathcal{C}_h^4$	Γ_c^f	$\mathcal{D}_{2h}^{23}$ $\mathcal{D}_{2h}^{24}$	0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0	

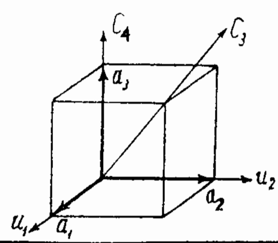
Lớp $\mathcal{C}_h$ *(tiếp theo)*

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{D}_{2h}$	C_3	σ_1	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_h^5$	Γ_c^v	$\mathcal{D}_{2h}^{25}$	0 0 0	0 0 0	
$\mathcal{C}_h^7$		$\mathcal{D}_{2h}^{27}$	0 0 0	0 0 0	

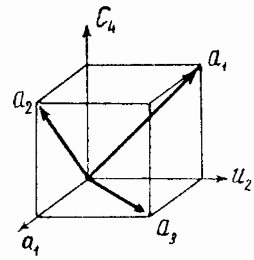
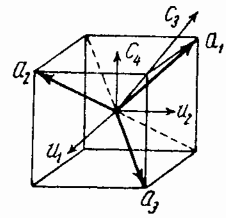
Lớp $\mathcal{C}_d$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}$	σ_1	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{C}_d^1$	Γ_c	$\mathcal{C}^1$	0 0 0	
$\mathcal{C}_d^4$		$\mathcal{C}^1$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_d^2$	Γ_c^f	$\mathcal{C}^2$	0 0 0	
$\mathcal{C}_d^5$		$\mathcal{C}^2$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{C}_d^3$	Γ_c^v	$\mathcal{C}^3$	0 0 0	
$\mathcal{C}_d^6$		$\mathcal{C}^5$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	

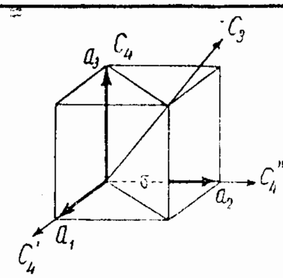
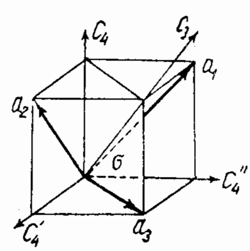
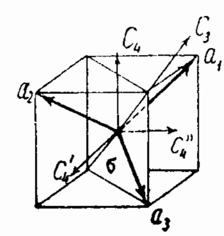
Lớp $\mathcal{O}$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}$	C_4^3	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{O}^1$	Γ_c	$\mathcal{C}^1$	0 0 0	
$\mathcal{O}^2$		$\mathcal{C}^1$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{O}^6$		$\mathcal{C}^4$	$\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$	
$\mathcal{O}^7$		$\mathcal{C}^4$	$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$	

Lớp $\mathcal{O}$ (*tiếp theo*)

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{C}$	σ	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{O}^3$	Γ_c^f	$\mathcal{C}^2$	0 0 0	
$\mathcal{O}^4$		$\mathcal{C}^2$	$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$	
$\mathcal{O}^5$	Γ_c^v	$\mathcal{C}^3$	0 0 0	
$\mathcal{O}^8$		$\mathcal{C}^5$	0 0 $\frac{1}{2}$	

Lớp $\mathcal{O}_h$

Nhóm không gian	Loại	Nhóm con lớp $\mathcal{O}$	σ	Vị trí các vectơ cơ sở
$\mathcal{O}_h^1$	Γ_c	$\mathcal{O}^1$	0 0 0	
$\mathcal{O}_h^2$		$\mathcal{O}^1$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{O}_h^3$		$\mathcal{O}^2$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{O}_h^4$		$\mathcal{O}^2$	0 0 0	
$\mathcal{O}_h^5$	Γ_c^f	$\mathcal{O}^3$	0 0 0	
$\mathcal{O}_h^6$		$\mathcal{O}^3$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{O}_h^7$		$\mathcal{O}^4$	0 0 0	
$\mathcal{O}_h^8$		$\mathcal{O}^4$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	
$\mathcal{O}_h^9$	Γ_c^v	$\mathcal{O}^5$	0 0 0	
$\mathcal{O}_h^{10}$		$\mathcal{O}^8$	0 0 $\frac{1}{2}$	

CÁC BẢNG BIỂU DIỄN HẠ CẢM

Biểu diễn hạ cảm SU(3)↓SO(3)

Biểu diễn ρ	Các L trong $\rho = \sum \oplus \mathcal{D}(L)$	N(ρ)
$\{0\}$	0	1
$\{1\}$	1	3
$\{2\}$	0,2	6
$\{1, 1\}$	1	3
$\{3\}$	1, 3	10
$\{2, 1\}$	1, 2	8
$\{1^3\}$	0	1
$\{4\}$	0, 2, 4	15
$\{3, 1\}$	1, 2, 3	15
$\{2^2\}$	0, 2	6
$\{2, 1^2\}$	1	3
$\{4, 1\}$	1, 2, 3, 4	24
$\{3, 2\}$	1, 2, 3	15
$\{3, 1^2\}$	0, 2	6
$\{2^2, 1\}$	1	3
$\{4, 2\}$	0, $(2)^2$, 3, 4	27
$\{4, 1^2\}$	1, 3	10
$\{3^2\}$	1, 3	10
$\{3, 2, 1\}$	1, 2	8
$\{2^3\}$	0	1

Chú thích: Các biểu diễn $\mathcal{D}^{(L)}$ hay $\mathcal{D}^{(J)}$ xuất hiện a lần được ký hiệu là $(L)^a$ hay $(J)^a$.

Biểu diễn hạ cảm SU(4)↓SO(3)

Biểu diễn ρ	J	N(ρ)
$\{0\}$	0	1
$\{1\}$	3/2	4
$\{2\}$	1,3	10
$\{1^2\}$	0,2	6
$\{2, 1\}$	1/2, 3/2, 5/2, 7/2	20
$\{2^2\}$	0, $(2)^2$, 4	20
$\{2, 1^2\}$	1, 2, 3	15

Biểu diễn hạ cảm $SU(5) \downarrow SO(3)$

ρ	L = 0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	N(ρ)
{0}	1													1
{1}			1											5
{2}	1		1		1									15
{1, 1}		1		1										10
{3}	1		1	1	1		1							35
{2, 1}		1	2	1	1	1								40
{4}	1		2		2	1	1		1					70
{3,1}		2	2	3	2	2	1	1						105
{2,2}	2		2	1	2		1							50
{2, 1, 1}		2	1	2	1	1								45
{4, 1}	1	2	3	4	4	3	3	2	1	1				224
{3, 2}	1	2	4	3	4	3	2	1	1					175
{3, 1, 1}		3	2	4	2	3	1	1						126
{2, 2, 1}	1	1	3	2	2	1	1							75
{2, 1, 1, 1}		1	1	1	1									24
{4, 2}	3	2	7	5	8	5	6	3	3	1	1			420
{4, 1, 1}		4	3	6	4	5	3	3	1	1				280
{3, 3}		3	1	5	2	3	2	2		1				175
{3, 2, 1}	1	4	6	6	6	5	3	2	1					280
{3, 1, 1, 1}	1	1	2	2	2	1	1							70
{4, 3}	1	4	7	7	8	8	6	5	4	2	1	1		560
{4, 2, 1}	3	6	10	11	12	10	9	6	4	2	1			700
{3, 3, 1}		5	4	7	5	6	3	3	1	1				315
{4, 1, 1, 1}		2	3	3	3	3	2	1	1					160
{3, 2, 2}	2	2	5	4	5	3	3	1	1					210
{3, 2, 1, 1}	1	3	4	5	4	3	2	1						175
{4, 4}	4	1	6	4	8	4	7	3	4	2	2		1	490
{4, 3, 1}	2	9	12	16	15	15	12	10	6	4	2	1		1050
{4, 2, 2}	4	3	10	7	11	8	4	4	1	1				560
{4, 2, 1, 1}	1	6	6	9	8	8	5	4	2	1				450

Biểu diễn hạ cảm SU(6) ↓ SO(3)

ρ	J	N(ρ)
{0}	0	1
{1}	5/2	6
{2}	1, 3, 5	21
{1, 1}	0, 2, 4	15
{2, 1}	$1/2,\ 3/2,\ (5/2)^2,\ (7/2)^2,\ 9/2,\ 11/2,\ 13/2$	70
{1, 1, 1}	3/2, 5/2, 9/2	20
{2, 2}	$(0)^2,\ (2)^3,\ 3,\ (4)^3,\ 5,\ (6)^2,\ 8$	105
{2, 1, 1}	$(1)^2,\ (2)^2,\ (3)^3,\ (4)^2,\ (5)^2,\ 6,\ 7$	105
{2, 2, 1}	$(1/2)^2, (3/2)^3, (5/2)^4, (7/2)^4, (9/2)^4, (11/2)^3, (13/2)^2, 15/2, 17/2$	210
{2, 1, 1, 1}	$1/2,\ (3/2)^2,\ (5/2)^2,\ (7/2)^2,\ (9/2)^2,\ 11/2,\ 13/2$	84
{2, 2, 2}	$(1)^3,\ 2,\ (3)^5,\ (4)^2,\ (5)^3,\ (6)^2,\ (7)^2,\ 9$	175
{2, 2, 1, 1}	$(0)^2,\ 1,\ (2)^5,\ (3)^3,\ (4)^5,\ (5)^2,\ (6)^3,\ 7,\ 8$	189
{2,1, 1, 1, 1}	1, 2, 3, 4, 5	35

Biểu diễn hạ cảm SU(7) ↓ SO(3)

ρ	L = 0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	N(ρ)
{0}	1													1
{1}				1										7
{2}	1		1		1		1							28
{1, 1}		1		1		1								21
{3}		1		2	1	1	1	1		1				84
{2, 1}		1	2	2	2	2	1	1	1					112
{1, 1, 1}	1		1	1	1		1							35
{4}	2		2	1	3	1	3	1	2	1	1		1	210
{3, 1}		3	3	5	4	5	4	4	2	2	1	1		378
{2, 2}	2		4	1	4	2	3	1	2		1			196
{2, 1, 1}		3	2	4	3	4	2	2	1	1				210

Biểu diễn hạ cảm $Sp(4) \downarrow SO(3)$

ρ	J	$N(\rho)$
$\langle 0, 0\rangle$	0	1
$\langle 1, 0\rangle$	3/2	4
$\langle 2, 0\rangle$	1, 3	10
$\langle 1, 1\rangle$	2	5
$\langle 2, 1\rangle$	1/2, 5/2, 7/2	16
$\langle 2, 2\rangle$	2, 4	14

Biểu diễn hạ cảm $Sp(6) \downarrow SO(3)$

ρ	J	$N(\rho)$
$\langle 0, 0, 0\rangle$	0	1
$\langle 1, 0, 0\rangle$	5/2	6
$\langle 2, 0, 0\rangle$	1, 3, 5	21
$\langle 1, 1, 0\rangle$	2, 4	14
$\langle 2, 1, 0\rangle$	$1/2,\ 3/2,\ 5/2,\ (7/2)^2,\ 9/2,\ 11/2,\ 13/2$	
$\langle 1, 1, 1\rangle$	3/2, 9/2	
$\langle 2, 2, 0\rangle$	$0,\ (2)^2,\ 3,\ (4)^2,\ 5,\ (6)^2,\ 7$	
$\langle 2, 1, 1\rangle$	$1,\ 2,\ (3)^2,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7$	
$\langle 2, 2, 1\rangle$	$1/2,\ 3/2,\ (5/2)^2,\ (7/2)^2,\ (9/2)^2,\ (11/3)^2,\ 13/2,\ 15/2,\ 17/2$	
$\langle 2, 2, 2\rangle$	$1,\ (3)^2,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ 9$	

Biểu diễn hạ cảm $Sp(8) \downarrow SO(3)$

ρ	J	$N(\rho)$
$\langle 0, 0, 0, 0\rangle$	0	1
$\langle 1, 0, 0, 0\rangle$	7/2	8
$\langle 2, 0, 0, 0\rangle$	1, 3, 5, 7	
$\langle 1, 1, 0, 0\rangle$	2, 4, 6	
$\langle 2, 1, 0, 0\rangle$	$1/2, 3/2, (5/2)^2, (7/2)^2, (9/2),^2, (11/2)^2, (13/2)^2, (15/2), 17/2, 19/2$	
$\langle 1, 1, 1, 0\rangle$	3/2, 5/2, 9/2, 11/2, 15/2	
$\langle 2, 2, 0, 0\rangle$	$(0)^2,\ (2)^3,\ (3)^2,\ (4)^4,\ (5)^2,\ (6)^4,\ (7)^2,\ (8)^3,\ 9,\ (10)^2,\ 12$	
$\langle 1, 1, 1, 1\rangle$	2, 4, 5, 8	
$\langle 2, 1, 1, 0\rangle$	$1^2,\ 2^2,\ 3^4,\ 4^3,\ 5^4,\ 6^3,\ 7^3,\ 8^2,\ 9^2,\ 10,\ 11$	

Biểu diễn hạ cảm SU (5) ↓ SO (5)

ρ	$[m_1, m_2]$	$N(\rho)$
{0}	[0, 0]	1
{1}	[1, 0]	5
{2, 0}	[2, 0], [0, 0]	15
{1, 1}	[1, 1]	10
{3}	[3, 0[, [1, 0]	35
{2, 1}	[2, 1], [1, 0]	40
{4}	[4, 0], [2, 0], [0, 0]	70
{3, 1}	[3, 1], {2, 0], [1, 1]	105
{2, 2}	[2, 2[, [2, 0], [0, 0]	50
{2, 1, 1}	[2, 1], [1, 1]	45
{4, 1}	[4, 1], [2, 1], [3, 0], [1, 0]	224
{3, 2}	[3, 2], [3, 0], [2, 1], [1, 0]	175
{3, 1, 1}	[3, 1], [2, 1], [1, 1]	126
{2, 2, 1{	[2, 2], [2, 1], [1, 0]	75
{2, 1, 1, 1}	[2, 0], [1, 1[	24
{4, 2{	[4, 2], [4, 0], [3, 1[, [2, 2], [2, 0]^2, [0, 0]	420
{4, 1, 1}	[4, 1], [3, 1], [2, 1], [1, 1]	280
{3, 3}	[3, 3], 3, 1], [1, 1]	175
{3, 2, 1}	[3, 2], [3, 1], [2, 2], [2, 1], [2, 0], [1, 1]	280
{3, 1, 1, 1}	[3, 0], [2, 1], [1, 0]	70
{4, 3}	[4, 3], [4, 1], [3, 2], [3, 0], [2, 1], [1, 0]	560
{4, 2, 1}	[4, 2], [4, 1], [3, 2], [3, 1], [2, 2], [3, 0], [2, 1]^2, [1, 0],	700
{3, 3, 1}	[3, 3], [3, 2], [3, 1], [2, 1], [1, 1]	315
{4, 1, 1, 1}	[4, 0], [3, 1}, [2, 0], [1, 1]	160
{3, 2, 2}	[3, 2], [3, 0], [2, 2], [2, 1], [1, 0]	210
{3, 2, 1, 1}	[3, 1], [2, 2], [2, 1], [2, 0], [1, 1]	175
{4, 4}	[4, 4], [4, 2], [4, 0], [2, 2], [2, 0], [0, 0]	490
{4, 3, 1}	[4, 3], [4, 2], [3, 3], [4, 1], [3, 2], [3, 1]^2, [2, 2], [2, 1],]2, 0], [1, 1]	1050
{4, 2, 2}	[4, 2], [3, 2], [4, 0], [3, 1], [2, 2]^2, [2, 0]^2, [0, 0]	560
{4, 2, 1, 1}	[4, 1], [3, 2], [3, 1], [3, 0], [2, 1]^2, [1, 1]	450

Biểu diễn hạ cảm $SU(7) \downarrow SO(7)$

ρ	$[m_1, m_2, m_3]$	$N(\rho)$
$\{0\}$	$[0, 0, 0]$	1
$\{1\}$	$[1, 0, 0]$	7
$\{2\}$	$[2, 0, 0], [0, 0, 0]$	28
$\{1, 1\}$	$[1, 1, 0]$	21
$\{3\}$	$[1, 0, 0], [3, 0, 0]$	84
$\{2, 1\}$	$[1, 0, 0]\ [2, 1, 0]$	112
$\{1^3\}$	$[1, 1, 1]$	35
$\{4\}$	$[0, 0, 0], [2, 0, 0], [4, 0, 0]$	210
$\{3, 1\}$	$[1, 1, 0], [2, 0, 0], [3, 1, 0]$	378
$\{2^2\}$	$[0, 0, 0], [2, 0, 0], [2, 2, 0]$	196
$\{2, 1^2\}$	$[1, 1, 0], [2, 1, 1]$	210
$\{4, 1\}$	$[1, 0, 0], [2, 1, 0], [3, 0, 0], [4, 1, 0]$	1008
$\{3, 2\}$	$[1, 0, 0], [2, 1, 0], [3, 0, 0], [3, 2, 0]$	882
$\{3, 1^2\}$	$[1, 1, 1]\ [2, 1, 0], [3, 1, 1]$	756
$\{2, 2, 1\}$	$[1, 0, 0], [2, 1, 0], [2, 2, 1]$	490
$\{2, 1^3\}$	$[1, 1, 1], [2, 1, 1]$	224
$\{4, 2\}$	$[0, 0, 0], [2, 0, 0]^2, [2, 2, 0], [3, 1, 0], [4, 0, 0], [4, 2, 0]$	2646
$\{4, 1^2\}$	$[1, 1, 0], [2, 1, 1], [3, 1, 0], [4, 1, 1]$	2100
$\{3^2\}$	$[1, 1, 0], [3, 1, 0], [3, 3, 0]$	1176
$\{3, 2, 1\}$	$[1, 1, 0], [2, 0, 0], [2, 1, 1], [2, 2, 0], [3, 1, 0], [3, 2, 1]$	2352
$\{2^3\}$	$[0, 0, 0], [2, 0, 0], [2, 2, 0], [2, 2, 2]$	490
$\{3, 1^3\}$	$[1, 1, 1], [2, 1, 1], [3, 1, 1]$	840
$\{2^2, 1^2\}$	$[1, 1, 0], [2, 1, 1], [2, 2, 1]$	588
$\{2, 1^4\}$	$[1, 1, 1], [2, 1, 0]$	140

Biểu diễn hạ cảm $SU(4) \downarrow Sp(4)$

ρ	$\langle m_1, m_2 \rangle$	$N(\rho)$
$\{0\}$	$\langle 0, 0\rangle$	1
$\{1\}$	$\langle 1, 0\rangle$	4
$\{2\}$	$\langle 2, 0\rangle$	10
$\{1, 1\}$	$\langle 0, 0\rangle, \langle 1, 1\rangle$	6
$\{2, 1\}$	$\langle 1, 0\rangle, \langle 2, 1\rangle$	20
$\{2, 2\}$	$\langle 0, 0\rangle, \langle 1, 1\rangle, \langle 2, 2\rangle$	20
$\{2, 1, 1\}$	$\langle 2, 0\rangle, \langle 1, 1\rangle$	15

Biểu diễn hạ cảm $SU(6)\downarrow Sp(6)$

$\langle m_1, m_2, m_3\rangle$

$\{0\}$	$\langle 0, 0, 0\rangle$
$\{1\}$	$\langle 1, 0, 0\rangle$
$\{2\}$	$\langle 2, 0, 0\rangle$
$\{1, 1\}$	$\langle 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0\rangle$
$\{2, 1\}$	$\langle 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0\rangle$
$\{1, 1, 1\}$	$\langle 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1\rangle$
$\{2, 2\}$	$\langle 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0\rangle, \langle 2, 2, 0\rangle$
$\{2, 1, 1\}$	$\langle 2, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0\rangle, \langle 2, 1, 1\rangle$
$\{2, 2, 1\}$	$\langle 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0\rangle, \langle 1, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 1\rangle$
$\{2,1,1,1\}$	$\langle 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1\rangle, \langle 2, 1, 0\rangle$
$\{2, 2, 2\}$	$\langle 2, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 2\rangle$
$\{2,2,1,1\}$	$\langle 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0\rangle^2, \langle 2, 2, 0\rangle, \langle 2, 1, 1\rangle$
$\{2, 1^4\}$	$\langle 2, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0\rangle$

Biểu diễn hạ cảm $SU(8)\downarrow Sp(8)$

$\langle m_1, m_2, m_3\ m_4\rangle$

$\{0\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle$
$\{1\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle$
$\{2\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle$
$\{1, 1\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle$
$\{2, 1\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle$
$\{1, 1, 1\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle$
$\{2, 2\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 2, 0, 0\rangle$
$\{2, 1, 1\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 0\rangle$
$\{1^4\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 1\rangle$
$\{2, 2, 1\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle, \langle 2, 2, 1, 0\rangle$
$\{2, 1^3\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 1\rangle$
$\{2, 2, 2\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 2, 0\rangle, \langle 2, 2, 2, 0\rangle$
$\{2,2,1,1\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle^2, \langle 2, 2, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 0\rangle,$ $\langle 1, 1, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 1, 1\rangle$
$\{2, 1^4\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 1\rangle$
$2^3, 1\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle. \langle 2, 2, 1, 0\rangle,$ $\langle 2, 1, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 2, 1\rangle$
$\{2^2, 1^3\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle^2$ $\langle 2, 2, 1, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 1\rangle$
$\{2, 1^5\}$	$\langle 1, 0, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 0\rangle$
$\{2^4\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 2, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 1\rangle,$ $\langle 2, 2, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 2, 2\rangle$
$\{2^3, 1^2\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle, \langle 2, 1, 1, 0\rangle^2,$ $\langle 1, 1, 1, 1\rangle, \langle 2, 2, 2, 0\rangle, \langle 2, 2, 1, 1\rangle$
$\{2^2, 1^4\}$	$\langle 0, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle^2, \langle 2, 2, 0, 0\rangle,$ $\langle 2, 1, 1, 0\rangle, \langle 1, 1, 1, 1\rangle$
$\{2, 1^6\}$	$\langle 2, 0, 0, 0\rangle, \langle 1, 1, 0, 0\rangle$

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Boerner N.Darstellungen von Gruppen. Berlin. 1955.

[2] Weyl H.The classical groups. Princeton. 1946.

[3] Falk G.Algebra (Hanbuch der Physik, BandII). Berlin. 1955.

[4] Jacobson N.Lie algebras. New Yord. 1964.

[5] Seminaire Sophus Lie. Theorie des algebres de Lie. Topologie des groupes de Lie. Paris. 1955.

[6] Vạn Triết tiên Đại số Lie. Bắc kinh. 1964.

[7] Желобенко Д. П. Компактные группы и их представления Москва. 1970.

[8] Виленкин Н. Я. Специальные функции и теория представлений групп. Москва. 1965.

[9] Петрашень М. И. Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. Москва. 1967.

[10]. Hamermesh M. Group theory and its applications to physical problems. London. 1964.

[11] Wigner E. P. Group theory and its applications to quantum mechanics of atomic spectra. New Yord. 1959.

[12] Bayman B. F. Some lectures ou groups and their applications to spectroscopy. Copenhague. 1957.

[13] Гельфанд И. М., Минлос Р. А. и Шапиро З. Я. Представления группы вращениий и группы лоренца, их применения. Моска 1958.

[14] Любарский Г. И. Теория групп и применение в Физике. Москва. 1967.

[15]. Kahan T. Theorie des groupes en physiqne classique et quantique. Paris. 1960.

[16] Нгуен ван хьеу. Лекции по теории унитарной симметрии элементарных частиц. Москва. 1967.

[17] Каплан И. Г. Симмерия многоэлектронных систем. Москва. 1969.

[18] Jones H. The theory of Brillouin and electronic states in cristals. London. 1960.

[19] Balhausen C. J. and Gray H. B. Molecular orbital theory. New Yord. 1964.

[20] Schweber S. An introduction to relativistic field theory. New Yord. 1961.

[21] Ландау Л. и Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Москва. 1967.

[22] Давыдов А. С. Квантовая механика. Москва. 1967.

[23] Боголюбов Н. Н., Логунов А. А. и Тодоров И. Т. Основы аксиоматического подхода в квантовой теории поля. Москва. 1969.

[24] Jost R.The general theory of quantized fields. Island. 1965.

[25] Malcev A. I. Am. Math. Soc. Transl. Serie 1,9, 172. 1950.

[26] Navon A. and Patera. J. Journal Math. Phys. 8,489. 1957.

[27] Hegerfeld G. C. Journal Math. Phys. 8,1195.1967.

DANH LỤC

C.

D.

Đ.

G.

H.

I.

K.

L.

M.

N.

O.

P.

Q.

S.

T.

V.

X.

MỤC LỤC

NGUYỄN HOÀNG PHƯƠNG

LÝ THUYẾT NHÓM VÀ ỨNG DỤNG VÀO VẬT LÝ HỌC LƯỢNG TỬ

Chịu trách nhiệm xuất bản : PGS.TS. TÔ ĐĂNG HẢI
Biên tập : LÊ NGỌC KHUÊ
Vẽ bìa : HƯƠNG LAN

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT
70 TRẦN HƯNG ĐẠO

In 700 cuốn khổ 19 x 27 tại Công ty in Tổng hợp Hà Nội.
Giấy phép xuất bản số : 978 - 1 cấp ngày 20-7-2001.
In xong và nộp lưu chiểu tháng 2/2002

201289

8 935048 912034

Giá : 84.000đ