Симметрия квантовомеханических систем и вырождение

Если квантовомеханич. система обладает определённой С., то операторы сохраняющихся физ. величин, соответствующих этой С., коммутируют с гамильтонианом системы. Если нек-рые из этих операторов не коммутируют между собой, уровни энергии системы оказываются вырожденными (см. *Вырождение*): определённому уровню энергии отвечают неск. различных состояний, преобразующихся друг через друга при преобразованиях С. В матем. отношении эти состояния представляют базис неприводимого представления группы С. системы. Это обусловливает плодотворность применения методов теории групп в квантовой механике.

Помимо вырождения уровней энергии, связанного с явной С. системы (напр., относительно поворотов системы как целого), в ряде задач существует дополнит. вырождение, связанное с т. н. скрытой С. взаимодействия. Такие скрытые С. существуют, напр., для кулоновского взаимодействия и для изотропного осциллятора. Скрытая С. кулоновского взаимодействия, приводящая к вырождению состояний с разл. орбитальными моментами, обусловлена, как показал В. А. Фок (1935), явной С. кулоновского взаимодействия в 4-мерном импульсном пространстве.

Если система, обладающая к.-л. С., находится в поле сил, нарушающих эту С. (но достаточно слабых, чтобы их можно было рассматривать как малое возмущение), происходит расщепление вырожденных уровней энергии исходной системы: разл. состояния, к-рые в силу С. системы имели одинаковую энергию, под действием «несимметричного» возмущения приобретают разл. энергетич. смещения, а в случаях, когда возмущающее поле обладает нек-рой С., составляющей часть С. исходной системы, вырождение уровней энергии снимается не полностью: часть уровней остаётся вырожденной в соответствии с С. взаимодействия, «включающего» возмущающее поле.

Наличие в системе вырожденных по энергии состояний в свою очередь указывает на существование С. взаимодействия и позволяет в принципе найти эту С., когда она заранее неизвестна. Последнее обстоятельство играет важнейшую роль, напр., в физике элементарных частиц.

Динамические симметрии

Оказалось плодотворным понятие т. н. динамич. С. системы, к-рое возникает, когда рассматриваются преобразования, включающие переходы между состояниями системы с разл. энергиями. Неприводимым представлением группы динамич. С. будет весь спектр стационарных состояний системы. Понятие динамич. С. можно распространить и на случаи, когда гамильтониан системы зависит от времени, причём в одно неприводимое представление динамич. группы С. объединяются в этом случае все состояния квантовомеханич. системы, не являющиеся стационарными (т. е. не обладающие заданной энергией).

Лит.: Вигнер Е., Этюды о симметрии, пер. с англ., М., 1971; Гибсон У., Поллард Б., Принципы симметрии в физике элементарных частиц, пер. с англ., М., 1979; Пуанкаре А., О науке, пер. с франц., М., 1983; Эллиот Дж., Добер П., Симметрия в физике, пер. с англ., т. 1—2, М., 1983; Логунов А. А., Лекции по теории относительности и гравитации, М., 1987; Фейнман Р., Характер физических законов, пер. с англ., М., 1987.

С. С. Герштейн.

СИММЕ́ТРИ́Я КРИСТА́ЛЛОВ — свойство кристаллов совмещаться с собой при поворотах, отражениях, параллельных переносах либо при части или комбинации этих операций. Симметрия внеш. формы (огранки) кристалла определяется симметрией его атомного строения, к-рая обусловливает также и симметрию физ. свойств кристалла.

На рис. 1*а* изображён кристалл кварца. Внеш. его форма такова, что поворотом на 120° вокруг оси *3* он может быть совмещён сам с собой (совместимое равенство). Кристалл метасиликата натрия (рис. 1, *б*) преобразуется в себя отражением в плоскости симметрии *m* (зеркальное равенство).

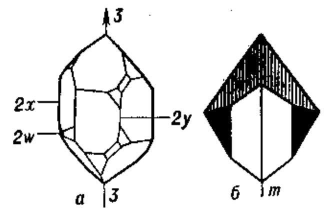

Рис. 1. *а* — кристалл кварца; *3* — ось симметрии 3-го порядка, 2_x, 2_y, 2_w — оси 2-го порядка; *б* — кристалл водного метасиликата натрия; *m* — плоскость симметрии.

Если $F(x_1, x_2, x_3)$ — функция, описывающая объект, напр. форму кристалла в трёхмерном пространстве или к.-л. его свойство, а операция $g[x_1, x_2, x_3]$ осуществляет преобразование координат всех точек объекта, то g является операцией, или преобразованием симметрии, а F — симметричным объектом, если выполняются условия:

$$g[x_1, x_2, x_3] = x_1', \ x_2', \ x_3', \tag{1а}$$

$$F(x_1, x_2, x_3) = F\left[x_1', x_2', x_3'\right]. \tag{1б}$$

В наиб. общей формулировке симметрия — неизменность (инвариантность) объектов и законов при нек-рых преобразованиях описывающих их переменных. Кристаллы — объекты в трёхмерном пространстве, поэтому классич. теория С. к. — теория симметричных преобразований в себя трёхмерного пространства с учётом того, что внутр. атомная структура кристаллов дискретная, трёхмерно-периодическая. При преобразованиях симметрии пространство не деформируется, а преобразуется как жёсткое целое. Такие преобразования наз. ортогональными или изометрическими. После преобразования симметрии части объекта, находившиеся в одном месте, совпадают с частями, находящимися в др. месте. Это означает, что в симметричном объекте есть равные части (совместимые или зеркальные).

С. к. проявляется не только в их структуре и свойствах в реальном трёхмерном пространстве, но также и при описании энергетич. спектра электронов кристалла (см. *Зонная теория*), при анализе процессов *дифракции рентгеновских лучей*, *дифракции нейтронов* и *дифракции электронов* в кристаллах с использованием обратного пространства (см. *Обратная решётка*) и т. п.

Группы симметрии кристаллов. Кристаллу может быть присуща не одна, а неск. операций симметрии. Так, кристалл кварца (рис. 1, *а*) совмещается с собой не только при повороте на 120° вокруг оси *3* (операция g_1), но и при повороте вокруг оси *3* на 240° (операция g_2), а также при поворотах на 180° вокруг осей 2_x, 2_y, 2_w (операции g_3, g_4, g_5). Каждой операции симметрии может быть сопоставлен элемент симметрии — прямая, плоскость или точка, относительно к-рой производится данная операция. Напр., ось *3* или оси 2_x, 2_y, 2_w являются осями симметрии, плоскость *m* (рис. 1, *б*) — плоскостью зеркальной симметрии и т. п. Совокупность операций симметрии $\{g_1, g_2, ..., g_n\}$ данного кристалла образует группу симметрии $G \in (g_1, ..., g_n)$ в смысле матем. теории *групп*. Последоват. проведение двух операций симметрии также является операцией симметрии. В теории групп это обозначают как произведение операций: $g_i g_k = g_l$. Всегда существует операция идентичности g_0, ничего не изменяющая в кристалле, наз. отождествлением, она геометрически соответствует неподвижности объекта или повороту его на 360° вокруг любой оси. Число операций, образующих группу G, наз. порядком группы.