ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА
Том 9, № 2
ноябрь
1971

ГРУППА SPIN(4) И ТАБЛИЦА МЕНДЕЛЕЕВА

Ю. Б. Румер, А. И. Фет

Показано, что описанная Вейлем и Брауэром группа Spin (4) управляет закономерностями периодической системы элементов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно система элементов объясняется с помощью структурной модели атома Резерфорда, состоящей из ядра и электронных оболочек; при этом основным параметром, различающим элементы, является атомный заряд. В этой работе атом рассматривается как бесструктурная частица, к которой применяются общие принципы физики симметрии, аналогично тому, как это делается для адронов в $SU(6)$-классификации (см. [1]). Кулоновское поле не входит явно в излагаемую здесь теорию, а учитывается лишь с помощью четырехмерной симметрии Фока [2]. В качестве основной группы мы берем вместо группы Фока $SO(4)$ ее двулистную накрывающую группу $\mathrm{Spin}(4)$, введенную Брауэром и Вейлем [3], но еще, по-видимому, не применявшуюся в физике. Мы называем бесструктурный атом «кулоновской системой»; состояния этой системы должны изображаться векторами пространства, где определено некоторое представление группы $\mathrm{Spin}(4)$. Мы задаем такое представление, называемое «кулоновским представлением», в пространстве двухкомпонентных функций от четырех переменных Фока. Предполагается, что состояния кулоновской системы различаются не только энергетическими уровнями, но и химической природой. Следуя дальше общей схеме групповой симметрии, мы выбираем в группе $\mathrm{Spin}(4)$ две различно расположенные в ней подгруппы, изоморфные $SU(2)$. Редукция кулоновского представления по первой из этих подгрупп приводит к энергетическому спектру кулоновской системы, описываемому четырьмя обычными квантовыми числами $(n, l, m, \pm)$ водородоподобного атома. Редукция же по второй подгруппе (не перестановочной с первой!) приводит к классификации атомов на мультиплеты, соответствующие их естественной группировке по атомному весу и валентности (ср. с редукцией группы $SU(6)$ по подгруппам $SU(3)$ и $SU(4)$, подробно описанной в [1]). Таким путем мы приходим к таблице химических элементов, полученной без использования модели Резерфорда из общих принципов симметрии, разработанных в теории адронов.

2. ГРУППА SPIN(4) И ЕЕ ПОДГРУППЫ

I. Рассмотрим четырехмерное действительное евклидово пространство R^4 с координатами $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ и метрической формой $\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2+\xi_4^2$. Ортогональные преобразования пространства R^4 с определителем 1 образуют группу $SO(4)$, введенную в физику Фоком [2]. Алгебра Ли группы $SO(4)$ состоит из действительных антисимметрических матриц и (в отличие от всех других $SO(n)$) разлагается в прямую сумму двух алгебр Ли, которые обе изоморфны обычной алгебре моментов. А именно, если в качестве образующих выбрать матрицы

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\beta_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\beta_3 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{1}$$

то получаем перестановочные состояния

$$[\alpha_i, \alpha_j] = \varepsilon_{ijk}\alpha_k, \quad [\beta_i, \beta_j] = \varepsilon_{ijk}\beta_k,$$
$$[\alpha_i, \beta_j] = 0. \tag{2}$$

Нам понадобится также система образующих

$$E_{12} = -E_{21} = \alpha_1 + \beta_1, \quad E_{31} = -E_{13} = \alpha_2 + \beta_2, \quad E_{23} = -E_{32} = \alpha_3 + \beta_3,$$
$$E_{34} = -E_{43} = \alpha_1 - \beta_1, \quad E_{24} = -E_{42} = \alpha_2 - \beta_2, \quad E_{14} = -E_{41} = \alpha_3 - \beta_3; \tag{3}$$

отметим перестановочные соотношения

$$[E_{12}, E_{31}] = E_{23}, \quad [E_{23}, E_{12}] = E_{31}, \quad [E_{31}, E_{23}] = E_{12}, \tag{4}$$

из которых видно, что E_{12}, E_{31}, E_{23} также порождают подалгебру Ли, изоморфную алгебре моментов. Эта подалгебра не является, однако, прямым слагаемым в алгебре Ли группы $SO(4)$ и, следовательно, расположена в ней существенно иным образом, чем описанные выше. Легко видеть, что этой подалгебре соответствует подгруппа $SO(3)$ группы $SO(4)$, состоящая из ортогональных преобразований, не меняющих координаты ξ_4. Заметим, что группа $SO(4)$ в целом не разлагается в прямое произведение каких-либо подгрупп.

II. Группа $SO(4)$, как известно, неодносвязна. Брауер и Вейль [3] построили для всех ортогональных групп $SO(n)$ двулистные универсальные (односвязные) накрывающие — так называемые спинорные группы $\mathrm{Spin}(n)$. В частности, группа $\mathrm{Spin}(3)$, накрывающая $SO(3)$, изоморфна $SU(2)$; группа же $\mathrm{Spin}(4)$, накрывающая $SO(4)$, не изоморфна какой-либо из унитарных или ортогональных групп и до сих пор, по-видимому, не встречалась в физике.

Обозначим через ψ гомоморфизм накрытия, отображающий группу $\mathrm{Spin}(4)$ на $SO(4)$; тогда ψ переводит в каждую матрицу из $SO(4)$ в точности два элемента группы $\mathrm{Spin}(4)$. Алгебра Ли группы $\mathrm{Spin}(4)$ может быть, как всегда в случае накрывающих групп, отождествлена с алгеброй Ли группы $SO(4)$, рассмотренной выше.

III. Подалгебра Ли, порожденная образующими E_{12}, E_{31}, E_{23}, соответствует связной подгруппе G группы $\mathrm{Spin}(4)$, которую накрывающий гомоморфизм ψ отображает на подгруппу $SO(3)$ группы $SO(4)$. Можно показать, что подгруппа G односвязна и, следовательно, изоморфна $SU(2)$; обозначим G в отличие от других подгрупп, изоморфных $SU(2)$, через $SU(2)_M$ (смысл этого обозначения выясняется в разделе 3).

IV. Подалгебра Ли, порожденная образующими α_1, α_2, α_3, соответствует связной подгруппе группы $\mathrm{Spin}(4)$, которая, как можно показать, изоморфна $SU(2)$ и обозначается через $SU(2)_C$ (обозначение выясняется в разделе 3). Аналогично образующим β_1, β_2, β_3 соответствует подгруппа $SU(2)_{C'}$. Подгруппы $SU(2)_C$, $SU(2)_{C'}$ одинаково расположены в группе $\mathrm{Spin}(4)$ в том смысле, что существует автоморфизм группы $\mathrm{Spin}(4)$, переводящий эти подгруппы друг в друга. Их расположение существенно иное, чем у подгруппы $SU(2)_M$, как это видно уже при рассмотрении их подалгебр Ли (п. I).

V. Построим гомоморфизм группы $\mathrm{Spin}(4)$ на группу $SU(2)$, с помощью которого дальше будет определено «кулоновское представление». Для этого фиксируем в алгебре Ли группы $SU(2)$ образующие γ_1, γ_2, γ_3 с обычными перестановочными соотношениями $[\gamma_i, \gamma_j] = \varepsilon_{ijk}\gamma_k$. Тогда формулы $\varphi_0(\alpha_i) = \gamma_i$, $\varphi_0(\beta_i) = 0$ $(i = 1, 2, 3)$ определяют линейное отображение φ_0 алгебры Ли группы $\mathrm{Spin}(4)$ в алгебру Ли группы $SU(2)$, сохраняющее коммутирование и, следовательно, являющееся гомоморфизмом алгебр Ли. Этот гомоморфизм, как можно показать, соответствует гомоморфизму группы $\mathrm{Spin}(4)$ в группу $SU(2)$, который мы обозначим через φ.

VI. Построим теперь специальное представление группы $\mathrm{Spin}(4)$, которое лежит в основе излагаемой теории.

Группа $SU(2)$ естественно действует в двумерном комплексном евклидовом пространстве $C(2)$. Поэтому, сопоставляя элементам ζ группы $\mathrm{Spin}(4)$ матрицы $\varphi(\zeta)$, мы получаем двухрядное представление группы $\mathrm{Spin}(4)$; обозначим его через $P_2^{(4)}$.

С другой стороны, рассмотрим гильбертово пространство $C(\infty)$ комплексных функций $\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$, определенных на сфере $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2 = 1$ пространства R^4. Тогда в пространстве $C(\infty)$ можно построить, следуя Фоку, бесконечномерное представление $Q_\infty^{(4)}$ группы $SO(4)$ по формуле $Q_O\psi(\xi) = \psi(O^{-1}\xi)$, где O — матрица из $SO(4)$, а Q_O — представляющий ее оператор в $C(\infty)$. Определим теперь представление группы $\mathrm{Spin}(4)$ с помощью композиции $P_\infty^{(4)} = Q_\infty{}^4 \circ \psi$; это значит, что элементу ζ группы $\mathrm{Spin}(4)$ ставится в соответствие оператор Q_O, где $O = \psi(\zeta)$. Легко видеть, что оба представления $P_2^{(4)}$, $P_\infty^{(4)}$ унитарны. Построим их тензорное произведение

$$P^{(4)} = P_2^{(4)} \otimes P_\infty^{(4)}, \tag{5}$$

$P^{(4)}$ — унитарное бесконечномерное представление группы $\mathrm{Spin}(4)$, которое мы назовем **кулоновским.**

VII. Представление $P^{(4)}$ приводимо. Его разложение осуществляется следующим образом. Сначала разложим на неприводимые составляющие представление $Q_\infty^{(4)}$ группы $SO(4)$, т. е. так называемое квазирегулярное представление. Известно, что

$$Q_\infty^{(4)} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} Q_{n^2}^{(4)}, \tag{6}$$

где $\oplus$ обозначает ортогональную сумму представлений, а $Q_{n^2}^{(4)}$ — неприводимое представление степени n^2 в пространстве гармонических полиномов степени $n-1$ от четырех переменных ξ_1, ξ_2, ξ_3, ξ_4 ([4], гл. IX). Отсюда следует соответствующее разложение

$$P^{(4)} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} P_2^{(4)} \otimes P_{n^2}^{(4)}; \tag{7}$$

n-е слагаемое в (7) есть представление группы $\mathrm{Spin}(4)$ степени $2n^2$.

VIII. Произведем теперь редукцию представления $P^{(4)}$ по подгруппе $SU(2)_M$, т. е. рассмотрим представление только для элементов этой подгруппы. Так как гомоморфизм φ изоморфно отображает $SU(2)_M$ на $SU(2)$, то в каждом слагаемом (7) редукция представления $P_2^{(4)}$ приводит к представлению $P_{2,M}^{(3)}$, эквивалентному фундаментальному представлению $SU(2)$ в пространстве $C(2)$.

Далее, представление $Q_{n^2}^{(4)}$ группы $SO(4)$, редуцированное на подгруппу $SO(3)$, как известно, разлагается по формуле

$$Q_{n^2}^{(4)} = \bigoplus_{l=0}^{n-1} Q_{2l+1}^{(3)}, \tag{8}$$

где $Q_{2l+1}^{(3)}$ — представление группы $SO(3)$ в пространстве гармонических полиномов степени l от трех переменных ξ_1, ξ_2, ξ_3; степень этого представления равна $2l+1$ (см. [4]).

Разложению (8) соответствует разложение представления $P_{n^2}^{(4)}$ по формуле

$$P_{n^2}^{(4)} = \bigoplus_{l=0}^{n-1} P_{2l+1}^{(3)} \tag{9}$$

с теми же инвариантными подпространствами. Из (7) имеем теперь формулу для редукции по подгруппе $SU(2)_M$

$$P_M^{(3)} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \bigoplus_{l=0}^{n-1} P_{2,M}^{(3)} \otimes P_{2l+1}^{(3)}. \tag{10}$$

Для редукции по подгруппе $SU(2)_C$ получаем аналогичную формулу

$$P_C^{(3)} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \bigoplus_{\lambda=0}^{n-1} P_{2,C}^{(3)} \otimes P_{2\lambda+1}^{(3)}. \tag{11}$$

Слагаемое с индексами (n, l), (n, λ) в каждой из формул (10)—(11) есть унитарное представление группы $SU(2)_M$, соответственно $SU(2)_C$, степени $2l+1$, соответственно $2\lambda+1$. Как известно, тензорное произведение представлений $P_2^{(3)}$ и $P_{2\lambda+1}^{(3)}$ группы $SU(2)$ разлагается на два неприводимых представления степеней 2λ и $2\lambda+2$:

$$P_2^{(3)} \otimes P_{2\lambda+1}^{(3)} = P_{2\lambda}^{(3)} \oplus P_{2\lambda+2}^{(3)}. \tag{12}$$

Следующий дальше выбор базиса в пространстве кулоновского представления $P^{(4)}$ не учитывает последнего разложения (12) и исходит из разложения (10); этот выбор связан, как известно, с традиционным обозначением квантовых чисел в теории атомных спектров. Выберем в пространстве представления $P_{2l+1}^{(3)}$ канонический базис e_m $(m=-l, -l+1, \ldots, l-1, l)$, состоящий из собственных векторов проекции момента M_3, а в пространстве представления $P_{2,M}^{(3)}$ — базис f_+, f_- из собственных векторов оператора спина. Тогда векторы $f_\pm \otimes e_m$ составляют базис в пространстве представления $P_{2,M}^{(3)} \otimes P_{2l+1}^{(3)}$, и полный базис в пространстве кулоновского представления $P^{(4)}$ нумеруется квантовыми числами $n, l, m, \pm$.

3. МЕХАНИЧЕСКИЕ И ХИМИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ

I. Связь между волновыми функциями Фока $\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ и обычными шредингеровскими волновыми функциями (в импульсном представлении $\psi(p_1, p_2, p_3)$) задается известным преобразованием Фока [2], при котором вращениям в импульсном пространстве соответствуют ортогональные преобразования переменных ξ_1, ξ_2, ξ_3, тогда как ξ_4 остается неизменной. Поэтому естественно считать, что механические состояния кулоновской системы описываются редукцией кулоновского представления по подгруппе $SU(2)_M$, действие которой на волновые функции $\psi_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ $(i = 1, 2)$ в точности такое же, как обычное действие операторов вращения на двухкомпонентные волновые функции. По этой причине мы назовем подгруппу $SU(\mathbf{2})_M$ **механической** подгруппой группы $\mathrm{Spin}(4)$.

Редукция кулоновского представления $P^{(4)}$ на подгруппу $SU(2)$ приводит, как мы видим, к ортонормированному базису, нумеруемому обычными квантовыми числами $(n, l, m, \pm)$ и описывающему дискретный энергетический спектр водорода. В этом случае энергетические уровни, различающиеся лишь квантовыми числами $\pm$, весьма близки друг к другу; это оправдывает способ нумерации базисных векторов с данными (n, l) при помощи квантовых чисел $(m, \pm)$. Заметим, что при такой нумерации не учитывается последнее разложение (12) на неприводимые представления. Операторы подалгебры Ли, соответствующей подгруппе $SU(2)_M$, можно рассматривать как обычные операторы момента M_1, M_2, M_3. Собственные векторы одного из них, например M_3, изображают состояния кулоновской системы, которые естественно назвать **энергетически чистыми.**

II. Ясно, что подгруппа $SU(2)_C$ группы $\mathrm{Spin}(4)$ не имеет отношения к вращениям обычного пространства; в самом деле, ее операторы в кулоновском представлении изменяют переменную ξ_4. Поэтому редукция кулоновского представления по подгруппе $SU(2)_C$ должна описывать совсем иную группировку состояний кулоновской системы, чем в случае подгруппы $SU(2)_M$. Выберем для каждого неприводимого представления этой редукции канонический базис и занумеруем базисные векторы числами n, λ, χ, μ, где n — одно и то же в обеих редукциях (поскольку n возникает еще при разложении кулоновского представления группы $\mathrm{Spin}(4)$); λ аналогично обычному параметру l; χ принимает два значения $<$, $>$ и служит для указания неприводимых представлений в правой части (12) ($<$ для размерности 2λ, $>$ для размерности $2\lambda+2$); наконец, параметр μ нумерует векторы канонического базиса неприводимого представления группы

	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$	
	H 1 He 4	Li 6,9 Be 9	Na 23 Mg 24,3	K 39,1 Ca 40,1	Rb 85,5 Sr 87,6	Cs 132,9 Ba 137,4	Fr [223] Ra 226	$\lambda=0$
$<$		B 10,8 C 12	Al 27 Si 28,1	Ga 69,7 Ge 72,6	In 114,8 Sn 118,7	Tl 204,4 Pb 207,2		$\lambda=1$
$>$		N 14 O 16 F 19 Ne 20,2	P 31 S 32 Cl 35,5 Ar 39,9	As 74,9 Se 79 Br 79,9 Kr 83,8	Sb 121,8 Te 127,6 J 126,9 Xe 131,3	Bi 209,0 Po [210] At [210] Rn 222		$\lambda=1$
$<$			Sc 45 Ti 47,9 V 51 Cr 52	Y 88,9 Zr 91,2 Nb 92,9 Mo 96	Lu 175 Hf 178,6 Ta 180,9 W 183,9	Ac 227 Ku		$\lambda=2$
$>$			Mn 54,9 Fe 55,9 Co 58,9 Ni 58,7 Cu 63,5 Zn 65,4	Tc [99] Ru 101,1 Rh 102,9 Pd 106,4 Ag 107,9 Cd 112,4	Re 186,3 Os 190,2 Ir 192,2 Pt 195,2 Au 197 Hg 200,6			$\lambda=2$
$<$				La 138,9 Ce 140,1 Pr 140,9 Nd 144,2 Pm [145] Sm 150,3	Th 232 Pa [231] U 238,1 Np [237] Pu [242] Am [243]			$\lambda=3$
$>$				Eu 152 Gd 157,3 Tb 158,9 Dy 162,5 Ho 164,9 Er 167,3 Tu 168,9 Yb 173	Cm [247] Bk [247] Cf [249] Es [254] Fm [253] Md Lw			$\lambda=3$

$SU(2)_C$, занумерованного параметрами (n, λ, χ), и пробегает 2λ значений при $\chi = <$ и $2\lambda+2$ при $\chi = >$. Редукция кулоновского представления по подгруппе $SU(2)_C$ изображена в таблице. Оказывается, что представлениям (n, λ) можно поставить в соответствие мультиплеты элементов, причем соблюдаются следующие условия:

1) мультиплеты элементов, занумерованные числами (n, λ), естественно классифицируют их по атомному весу, а именно: в пределах каждого мультиплета атомные веса оказываются ближе друг к другу, чем между

разными мультиплетами, так что при переходе к соседним мультиплетам наблюдается заметный разрыв. Числа n нумеруют супермультиплеты элементов;

2) в каждой строке таблицы, соответствующей фиксированным значениям параметров (λ, χ, μ), находятся химические аналоги [1]. Это дает основание назвать $SU(2)_C$ **химической** подгруппой группы Spin (4). Векторам канонического базиса (n, λ, χ, μ) соответствуют состояния кулоновской системы, которые естественно назвать **элементно чистыми**; этим состояниям можно сопоставить химические элементы, подобно тому как различным квантовым числам в представлениях группы $SU(6)$ соответствуют различные адроны.

Операторы подалгебры Ли подгруппы $SU(2)_C$ удовлетворяют таким же перестановочным соотношениям, как операторы момента, но не перестановочны с ними.

Заметим, что для атомных весов элементов не наблюдается явления, аналогичного спиновому расщеплению энергетических уровней; нельзя выделить пары элементов, атомные веса которых были бы значительно ближе, чем атомные веса в разных парах. Поэтому неестественно было бы вводить «химический спин» по аналогии с механическим, и мы сочли более правильным непосредственно следовать классификации, подсказываемой редукцией кулоновского представления.

III. Мы принимаем в этой работе общее правило, по которому так называемые «двузначные» представления устраняются переходом к универсальной накрывающей группе, как это обычно делается для группы вращений и группы Лоренца, и в соответствии с современным пониманием общих принципов квантовомеханического описания (см. [5], § 2).

Переход от группы $SO(4)$ к ее двулистной универсальной накрывающей Spin (4) и выбор кулоновского представления в пространстве двухкомпонентных функций $\psi_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$, $i = 1, 2$, мотивируются также тем, что при редукции по подгруппе $SU(2)_M$ кулоновского представления получается обычное представление группы $SU(2)$ в пространстве двухкомпонентных волновых функций $\psi_i(p_1, p_2, p_3)$, $i = 1, 2$, описывающее полный энергетический спектр водородоподобного атома с учетом спина. Но тогда редукция по «химической» подгруппе $SU(2)_C$ дает таблицу векторов состояний кулоновской системы, в точности вмещающую химические элементы. Однокомпонентное представление Фока группы $SO(4)$ дало бы вдвое меньшее число клеток, так что на каждую клетку приходилось бы **два** элемента. Поскольку, как мы видели, в химическом случае не наблюдается чего-либо похожего на «спиновое» раздвоение энергетических уровней, из этого положения нельзя выйти формальным введением «химического спина». Все эти соображения говорят в пользу четырехмерной спинорной группы и ее кулоновского представления.

Институт ядерной физики Сибирского отделения
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
8 января 1971 г.

---

[1] Для соблюдения близости масс в пределах мультиплетов мы исключили лютеций из мультиплета лантаноидов, заменив его лантаном.

Литература

[1] Ю. Б. Румер, А. И. Фет. Теория унитарной симметрии, «Наука», 1970.
[2] В. А. Фок. Изв. АН СССР, отд. матем. и естеств. наук, № 2, 169, 1935.
[3] Brauer, H. Weyl. Amer. J. Math., **57**, 425, 1935.
[4] Н. Я. Виленкин. Специальные функции и теория представлений групп, «Наука», 1965.
[5] D. J. Simms. Lie groups and quantum mechanics, Springer, 1968.

SPIN(4) GROUP AND THE MENDELEEV SYSTEM

Yu. B. Rumer, A. I. Fet

It is shown that the group Spin(4) described by Weyl and Brower governs the laws of the periodical system of chemical elements.