## Застосування теорії симетрії у фізиці

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@iop.kiev.ua) 19 вересня 2011 р.

| 1 | Симетрія фізичних тензорів                    | 1 |
|---|---|---|
|   | 1.1 Приклад: симетричний тензор другого рангу | 3 |
|   | 1.2 Приклад: тензор пружних модулів           | 3 |
| 2 | Просторова симетрія у класичній механіці      | 5 |
|   | 2.1 Малі коливання                            | 5 |
| 3 | Симетрія у квантовій механіці                 | 5 |
|   | 3.1 Теорія збурень                            | 6 |
|   | 3.2 Правила відбору                           | 6 |
|   | 3.3 Метод ЛКАО                                | 7 |
| 4 | Симетрія багаточастинкових систем             | 7 |
|   | 4.1 Симетрія молекул                          | 7 |

## §1. Симетрія фізичних тензорів

Нагадаємо, що (псевдо)тензором рангу k називається такий об'єкт A, що  $\sum_{i_1...i_k} A_{i_1...i_k} x_{i_1} \dots x_{i_k}$  – (псевдо)скаляр. При перетворенні системи координат  $x_i = \sum_j T_{ij} x_j'$ , тензор перетворюється за формулою  $A'_{i_1...i_k} = \sum_{j_1...j_k} T_{i_1j_1} \dots T_{i_kj_k} A_{j_1...j_k}$ , а для псевдотензора правий вираз слід домножити на  $\operatorname{sgn}(\det T)$ . Отож, якщо координати перетворюються по представленню V групи симетрії, то тензор k-го рангу перетворюється по прямому добутку представлень  $V \times \ldots \times V = V^k$ .

Всі фізичні величини є тензорами або псевдотензорами по відношенню до групи O(3). Приклади:

- скаляри: маса, заряд, температура, тощо;
- псевдоскаляри: хіральність, обертання площини поляризації світла;
- вектори: координата, швидкість і імпульс, напруженість електричного поля;
- псевдовектори: кутова швидкість і момент імпульсу, момент сили, напруженість магнітного поля;
- тензори 2-го порядку: момент інерції, тензори діелектричної і магнітної проникності;
- тензори 3-го порядку: п'єзоелектричний тензор, тензор електрооптичних коефіцієнтів;
- тензори 4-го порядку: тензор пружних модулів/сталих, тензор електрострикції/фотопружності.

Додаткова симетрія фізичних тензорів при перестановці індексів з'являється за рахунок загальнофізичного варіаційного принципу, який полягає в тому, що всі рівняння можна одержати варіюванням певної скалярної форми, побудованої на цьому тензорі. Наприклад, термодинамічний потенціал Гібса для деформованої речовини в електричному полі має вигляд

$$\Phi = -\sum_{i} P_{i}^{0} E_{i} - \frac{1}{8\pi} \sum_{ij} \left( \varepsilon_{ij} + \sum_{k} r_{ijk}^{(1)} E_{k} + \sum_{kl} r_{ijkl}^{(2)} E_{k} E_{l} \right) E_{i} E_{j}$$
$$-\sum_{ikl} \gamma_{i,kl} E_{i} \sigma_{kl} - \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \beta_{ij,kl} E_{i} E_{j} \sigma_{kl} - \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \mu_{ij,kl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} + \dots$$

де E — напруженість поля,  $\sigma$  — симетричний тензор механічних напружень,  $\varepsilon$  — діелектричний тензор,  $\mu$  — тензор пружних сталих. В цій формулі наявність спонтанної поляризації  $P^0$  описує піроелектричний ефект, тензори  $r^{(1,2)}$  описують, відповідно, лінійний (ефект Покельса) і квадратичний (ефект Керра) електрооптичні ефекти, тензор  $\gamma$  описує п'єзоелектричні ефекти, тензор  $\beta$  — явища електрострикції і фотопружності.