МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Г.М. Жислин

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ КОНЕЧНЫХ ГРУПП С ПРИМЕНЕНИЯМИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией факультета
Высшая школа общей и прикладной физики
для студентов ННГУ, обучающихся
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика»

Нижний Новгород
2017

УДК 514.8, 51,72
ББК 22.144, 22.314
Ж-73

Ж-73 Жислин Г.М. ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ КОНЕЧНЫХ ГРУПП С ПРИМЕНЕНИЯМИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ: Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. – 93 с.

Рецензент: д.ф.-м.н. **И.А. Шерешевский**

В пособии основное внимание уделено изучению подходов и методов теории представлений конечных групп применительно к классификации по свойствам симметрии связанных состояний квантовых систем и к нахождению разрешённых и запрещённых переходов. Приведены примеры и даны задания для самостоятельной работы. Одновременно пособие может служить введением в общую теорию представлений.

Настоящее издание предназначено для студентов факультета «Высшая школа общей и прикладной физики» в качестве пособия по курсу «Теория групп и её приложения».

Ответственный за выпуск:
председатель методической комиссии факультета
«Высшая школа общей и прикладной физики» ННГУ,
д.ф.м.н., профессор **А.М. Фейгин**

УДК 514.8, 51,72
ББК 22.314,22.1447

ВВЕДЕНИЕ или : «О ЧЁМ ЭТОТ КУРС?»

«В науке нет широкой столбовой дороги…»
Карл Маркс (1818-1883)

В.1. Вводные замечания

Настоящий курс посвящен теории представлений конечных групп с применениями к некоторым задачам физики твердого тела. Одновременно предлагаемый материал можно использовать как введение в общую теорию представлений. Изложение ведется на математическом уровне строгости и требует для понимания (если отвлечься от некоторых примеров и приложений) главным образом знания линейной алгебры в объёме университетского курса.

Ниже мы обсудим ряд вопросов, ответы на которые могут быть даны с помощью теории представлений. Некоторые полученные при этом результаты будут использованы и в основной части курса.

В.2. Симметрия волновых функций

Пусть

$$h_0(x) = -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}\right)+V(\mathrm{x}) \tag{0.1}$$

– это оператор Штурма, где $p(x)\epsilon C^1[-l,+l]$, $l > 0$ – произвольное число. Оператор $h_0(x)$ рассматривается в пространстве $\mathcal{L}_2[-l,+l] = \left\{\psi(x)\middle| \int_{-l}^{+l}|\psi(x)|^2\,dx < +\infty\right\}$. Введём в пространстве $\mathcal{L}_2[-l,+l]$ скалярное произведение $(\varphi,\psi) = \int_{-l}^{+l}\varphi(x)\overline{\psi(x)}\,dx$, норму $\|\psi\| = (\psi,\psi)^{\frac{1}{2}}$ и определим оператор $h_0(x)$ в такой области $\mathcal{D}_{h_0} \subset \mathrm{C}^2[-l,+l]$, что оператор $h_0(x)$ в $\mathcal{D}_{h_0}$ будет эрмитов в $\mathcal{L}_2[-l,+l]$.

Предположим, что оператор $h_0(x)$ и область его определения $\mathcal{D}_{h_0}$ инвариантны относительно инверсии $ix = -x, \text{т. е.}, \text{что}$

$$a)\;\; h_0(-x) = h_0(x) \quad \text{и} \quad b)\;\; y(-x) \in \mathcal{D}_{h_0} \quad \text{при } \forall y(x) \in \mathcal{D}_{h_0}. \tag{0.2}$$

Для справедливости *a)* достаточно, чтобы $p(-x) = p(x), V(-x) = V(x)$, а для выполнения *b)* можно взять, например,

$$\mathcal{D}_{h_0} = \mathcal{D}'_{h_0} = \{y(x)|y(x)\epsilon C^2[-l,+l], y(x) = 0\;\; x = \pm l\}$$

$$\text{или}\;\; \mathcal{D}_{h_0} = \mathcal{D}''_{h_0} =$$

$$= \left\{y(x)|y(x)\epsilon C^2[-l,+l], \frac{dy(x)}{dx} + \sigma y(x) = 0\;\; x = -l, \frac{dy(x)}{dx} - \sigma y(x) = 0\;\; x = +l,\;\sigma \geq 0\right\}.$$

Отметим, что для выполнения ($0.2b$) граничные условия при $x = +l$ и $x = -l$ должны переходить друг в друга при замене $x \to -x$. Кроме того, очевидно, что это условие не будет выполняться, если вместо отрезка $[-l, +l]$ взять отрезок $[\text{c}, d]$ при $c \neq -d$.

B.3. Случай оператора Штурма

Выясним, какие свойства собственных функций оператора $h_0(x)$ в области $\mathcal{D}_{h_0}$ порождаются инвариантностью этого оператора и его области определения относительно преобразования инверсии: $x \to -x$. Пусть

$$U_\lambda = \{y(x) | y(x) \in \mathcal{D}_{h_0}, h_0(x)y(x) = \lambda y(x)\} -$$

собственное подпространство оператора $h_0(x)$, отвечающее его собственному значению λ. Если $y(x) \in \mathcal{D}_{h_0}$, то в силу (0.2b) и $y(-x) \in \mathcal{D}_{h_0}$. Поэтому и так как равенство $h_0(x)y(x) = \lambda y(x)$ верно при $y \in U_\lambda$ для $\forall x \epsilon[-l, +l]$, мы можем заменить в нём x на $-x$. Сделав это, получим $h_0(-x)y(-x) = \lambda y(-x)$, откуда вследствие (0.2a) имеем

$$h_0(x)y(-x) = \lambda y(-x). \tag{0.3}$$

В силу (0.3) $y(-x) \epsilon U_\lambda$; но собственное подпространство U_λ одномерно [1], и поэтому $\exists a \in \mathbb{R}$ такое, что $y(-x) = ay(x)$. Заменяя здесь x на $-x$, получим $y(x) = ay(-x) == a^2 y(x)$, откуда $a = \pm 1$, т.е. $y(-x) = y(x)$ или $y(-x) = -y(x)$. Таким образом, все собственные функции оператора $h_0(x)$, отвечающие произвольно взятому собственному значению λ, или чётные или нечётные. Следовательно, не находя собственных функций оператора $h_0(x)$, мы выяснили возможное их поведение при преобразовании, не меняющем $h_0(x)$ и область его определения. Из сказанного выше следует, что множество всех собственных значений оператора $h_0(x)$ распадается на подмножества:

$$B_\pm = \{\lambda | y(-x) = \pm y(x) \text{ при } \forall y \in U_\lambda\},$$

состоящие соответственно из собственных значений, которым отвечают чётные (B_+) и нечётные (B_-) собственные функции. Методами вариационного исчисления можно показать, что оба эти подмножества бесконечны; в случае постоянных коэффициентов ($p(x) = d_1 > 0, V(x) = d_2$) оператора $h_0(x)$ это проверяется непосредственно, ибо собственные функции и собственные значения оператора $h_0(x)$ находятся в явном виде; сделайте это для $\mathcal{D}_{h_0} = \mathcal{D}'_{h_0}, \mathcal{D}''_{h_0}$ (для $\mathcal{D}_{h_0} = \mathcal{D}''_{h_0}$ – при $\sigma = 0$).

В.4. Случай оператора Шредингера

В В2,В3 мы рассмотрели оператор очень простого вида в пространстве функций одной переменной. Именно поэтому множество преобразований, оставляющих инвариантным оператор и область его определения, состояло (не считая тождественного преобразования) только из инверсии, благодаря чему мы смогли описать поведение собственных функций оператора $h_0(x)$ при этом преобразовании (инверсии). Рассмотрим теперь более сложный оператор, зависящий от многих переменных.

Пусть H_0 – оператор энергии молекулы с n электронами и тремя тождественными ядрами, расположенными в вершинах A_i правильного треугольника $\Delta\, A_1 A_2 A_3$. Пусть e – заряд электрона, $-N_0$e – заряд ядра A_i $i = 1,2,3$. Тогда в атомных единицах оператор энергии рассматриваемой системы запишется в виде

$$H = H_0(r) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\Delta_{r_i} - N_0 \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{3} \frac{1}{|r_i - A_k|} + \sum_{\substack{i,j=1,\\ i<j}}^{n} \frac{1}{|r_i - r_j|} \ , \qquad (0.4)$$

где $\Delta_{r_i}=\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$, $r_i=(x_i, y_i, z_i)$ – радиус вектор i-го электрона, $r = (r_1, \dots, r_n)$. Пусть R^{3n}={r}. Оператор $H_0(r)$ рассмотрим в пространстве функций $\mathcal{L}_2(\, R^{3n}) = \{\, \psi(r)|\ \|\, \psi\, \| < +\infty\}$, где $\|\, \psi\, \|^2 = (\psi, \psi)$ и для $\forall \psi(r),\ \omega(r)$ из $\mathcal{L}_2(\, R^{3n})$ полагаем $(\psi, \omega) = \int_{R^{3n}} \psi(r)\overline{\omega(r)}\, dr$.

Пусть оператор $H_0(r)$ определён в области $\mathcal{D}_{H_0}$, состоящей из всех дважды кусочно-непрерывно дифференцируемых в R^{3n} функций ψ, для которых $\|\, \psi\, \| + \|\, |\nabla\psi|\, \| + \|\, H_0\psi\, \| < +\infty$. Легко видеть, что оператор $H_0(r)$ эрмитов в $\mathcal{D}_{H_0}$.

Покажем, что оператор $H_0(r)$ инвариантен относительно весьма широкого класса преобразований в R^{3n}. Обозначим через $S_n = \{s\}$ множество всех перестановок s=$\begin{pmatrix} 1 & 2\ \dots & n \\ s_1 & s_2\ \dots & s_n \end{pmatrix}$ из n элементов; здесь s_j – целые числа, $s_j \neq s_t$ при $j \neq t$, $1 \le s_j \le n$. При $g = s \in S_n$ положим $gr = (r_{s_1}, r_{s_2}, \dots, r_{s_n})$ и тогда, очевидно,

$$H_0(gr) = H_0\left(r_{s_1}, r_{s_2}, \dots, r_{s_n}\right) = H_0(r), \forall\ g = s \in S_n, \qquad (0.5)$$

ибо действие перестановки s приводит лишь к перестановке слагаемых в суммах в (0.4).

Пусть, далее, D_3=$\{C_l(\varphi)\}$ – множество всех вращений $C_l(\varphi)$ в R^3 относительно таких осей l и на такие углы φ , что эти вращения переводят треугольник $\Delta\, A_1A_2A_3$ в себя.[1]

Множество D_3 состоит из 6 элементов: вращений на угол π около биссектрис a_i углов $\angle A_i$ i=1,2,3 и вращений на углы $0, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ около оси l , перпендикулярной плоскости треугольника $\Delta\, A_1A_2A_3$ в точке пересечения биссектрис углов $\angle A_i$, i=1,2,3, принимаемой за начало координат. Других элементов D_3 не содержит, ибо каждое вращение определяет какую-либо перестановку вершин A_1, A_2, A_3 (и определяется ей), а общее число таких перестановок 3!=6 совпадает с числом элементов D_3.

Пусть $g \in D_3$, положим gr= ($gr_1, \dots\dots, gr_n$) и покажем, что $H_0(gr) = H_0(r)$. Предварительно заметим, что согласно определению множества D_3

$$(gA_1, gA_2, gA_3) = (A_{t_1}, A_{t_2}, A_{t_3}),$$

где t_1, t_2, t_3 – это набор чисел *1,2,3* переставленных в порядке, определяемом вращением $g \in D_3$. Поэтому при $\forall\, i$

$$\sum_{k=1}^{3} \frac{1}{|r_i - A_k|} = \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{|r_i - gA_k|} \text{ при } \forall g \in D_3. \qquad (0.6)$$

Используя (0.6) получаем, что

$$H_0(gr) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \Delta_{gr_i} - \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{3} \frac{N_0}{|gr_i - gA_k|} + \sum_{\substack{i,j=1,\\ i<j}}^{n} \frac{1}{|gr_i - gr_j|}$$

Так как любое вращение есть ортогональное преобразование [2], то $\Delta_{gr_i} = \Delta_{r_i}$ и

$$|gr_i - gA_k| = |g(r_i - A_k)| = |r_i - A_k|, \left|gr_i - gr_j\right| = \left|g(r_i - r_j)\right| = \left|r_i - r_j\right|.$$

Следовательно, $H_0(gr)$=$H_0(r)$ $\forall\, g = C_l(\varphi) \in D_3$. С учетом (0.5) нами доказано, что

$$H_0(gr) = H_0(r) \;\; \forall g = s \in S_n, \forall g = C_l(\varphi) \in D_3 \qquad (0.7)$$

Пусть G= $\{g | g = sC_l(\varphi), \forall s \in S_n, \forall C_l(\varphi) \in D_3\}$.[2]

---

[1] т.е. переводят ядра молекулы друг в друга.

[2] ясно, что G$\supset S_n$, т.к. $g = C_l(\varphi)s$= $s \in S_n$ при $\varphi = 0$ и G$\supset D_3$, ибо $g = sC_l(\varphi) = C_l(\varphi) \in D_3$ при s= $\begin{pmatrix} 1 & 2 \dots & n \\ 1 & 2 \dots & n \end{pmatrix}$.

В силу (0.7) $H_0(gr)$=$H_0(r)$ при $g \in G$, т.е. оператор $H_0(r)$ инвариантен относительно преобразований $g \in G$. Очевидно, что и область $\mathcal{D}_{H_0}$ обладает этим свойством, т.е. $\psi(gr) \in \mathcal{D}_{H_0}$ при $\forall \psi(r) \in \mathcal{D}_{H_0}$ и $\forall g \in G$. Пусть

$$U_\lambda = \{u(r)|u(r) \in \mathcal{D}_{H_0}, H_0 u(r) = \lambda u(r)\} -$$

собственное подпространство оператора $H_0(r)$, отвечающее собственному значению λ. В общем случае $dim\, U_\lambda > 1$. Пусть $u(r) \in U_\lambda$, $u(r) \not\equiv 0$. Т.к. равенство $H_0 u(r) = \lambda u(r)$ верно при $\forall r$ и т.к. $u(gr) \in \mathcal{D}_{H_0}$ при $\forall g \in G$, то

$$H_0(gr)u(gr) = \lambda u(gr),$$

но $H_0(gr) = H_0(r)$ и, значит,

$$H_0(r)u(gr) = \lambda u(gr),$$

Следовательно, $u(gr) \in U_\lambda$. Пусть $u(r) = u_i(r)$ – i-ая базисная функция подпространства U_λ. Возникает вопрос: как функция $u_i(gr) \in U_\lambda$ будет выражаться через базис пространства U_λ или, что то же самое, каково поведение функции $u_i(gr)$ в зависимости от g? Ответ на этот вопрос нельзя получить элементарными рассуждениями типа проведённых в В2,В3, но идеи и методы данного курса позволят дать классификацию возможных типов поведения собственных функций $u_j(gr)$.

В.5. Разрешённые и запрещённые переходы

Пусть Z – произвольная квантовая система n частиц в потенциальном поле одного или нескольких неподвижных центров (обычно – ядер атомов), R^{3n}={$r|r$=$(r_1, r_2, \dots, r_n)$} – конфигурационное пространство системы Z; r_i – координата i-той частицы,

$$\mathcal{L}_2(R^{3n}) = \{\psi(r)| \int_{R^{3n}} |\psi|^2\, dr < +\infty\};$$

при $\psi, \varphi \in \mathcal{L}_2(R^{3n})$ положим

$$(\psi, \varphi) := \int_{R^{3n}} \psi\bar{\varphi}\, dr,\ \| \psi \|^2 = (\psi, \psi).$$

Обозначим через H_0=$H_0(r)$ оператор энергии системы Z, и пусть оператор H_0 эрмитов в какой-то области $\mathcal{D}_{H_0} \subset \mathcal{L}_2(R^{3n})$. Обозначим через λ и ν два различных изолированных собственных значения оператора H_0 (т.е. два различных уровня энергии системы Z), через U_λ и U_ν – соответствующие собственные подпространства (т.е. пространства связанных состояний с энергиями λ и ν). Пусть Q – некоторый возмущающий оператор с областью определения, содержащей $\mathcal{D}_{H_0}$, и $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon Q$, где $0 < \varepsilon \ll 1$. Далее считаем применимой теорию возмущений и обозначим через $\lambda_k(\varepsilon)$ при $k = 1,2,\dots,k_\varepsilon$ те собственные значения возмущённого оператора H_ε, для которых

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \lambda_k(\varepsilon) = \lambda,$$

и через $W_{\lambda_k(\varepsilon)}$ – собственные подпространства оператора H_ε, отвечающие этим собственным значениям.

Определение. Будем говорить, что переход с уровня энергии λ на уровень энергии ν рассматриваемой системы (далее переход «$\lambda \to \nu$») под действием возмущения εQ запрещен, если для любой функции $\omega(\varepsilon)$ из любого подпространства $W_{\lambda_k(\varepsilon)}$ и каждой функции $f \in U_\nu$ выполняется равенство

$$(\omega(\varepsilon), f) = 0 \tag{0.8}$$

Построим в пространствах $W_{\lambda_k(\varepsilon)}$, $k = 1,2,\dots k_\varepsilon$ базисы и, выписывая их последовательно, образуем базис $\psi_i(\varepsilon), i = 1,2,\dots,m$ подпространства $W(\varepsilon) = \sum_{k=1}^{k_\varepsilon} \oplus W_{\lambda_k(\varepsilon)}$.

Из сказанного следует, что равенства (0.8) эквивалентны соотношениям

$$(\psi_i(\varepsilon), f) = 0,\ i = 1,2,\dots m,\ \forall f \in U_\nu\,. \tag{0.9}$$

В силу теории возмущений [3] $dim\, W(\varepsilon) = dim\, U_\lambda$ и базисные функции $\psi_i(\varepsilon)$ подпространств $W_{\lambda_k(\varepsilon)}$ можно выбрать так, что в первом порядке теории возмущений

$$\psi_i(\varepsilon) = \varphi_i + \varepsilon u_i,\ i = 1,2,\dots m, \tag{0.10}$$

где функции φ_i образуют ортонормированный базис в собственном подпространстве U_λ оператора H_0, а u_i – некоторые функции из $\mathcal{D}_{H_0}$, не зависящие от ε. Так как $\varphi_i \in U_\lambda$, $f \in U_\nu$ и $\lambda \neq \nu$, то $(\varphi_i, f) = 0$. Поэтому, подставив разложения (0.10) в (0.9), мы получим условие запрещённости перехода (в первом порядке теории возмущений) в виде:

$$(u_i, f) = 0,\ i = 1,2,\dots m,\ \forall f \in U_\nu\,. \tag{0.11}$$

Функции u_i нам неизвестны, однако выражения (u_i, f) можно найти следующим образом. Пусть номер i фиксирован, и $\lambda_k(\varepsilon)$ – то собственное значение оператора H_ε, для которого $\psi_i \in W_{\lambda_k(\varepsilon)}$. В первом порядке теории возмущений

$$\lambda_k(\varepsilon) = \lambda + \varepsilon b_k, \tag{0.12}$$

где b_k – некоторое число. Подставим разложения (0.10), (0.12) в равенство $H_\varepsilon \psi_i(\varepsilon) = \lambda_k(\varepsilon)\psi_i(\varepsilon)$. Тогда, ограничиваясь членами нулевого и первого порядка по ε, получим

$$H_0\varphi_i + \varepsilon Q\varphi_i + \varepsilon H_0 u_i = \lambda\varphi_i + \varepsilon b_k\varphi_i + \varepsilon\lambda\, u_i.$$

Т.к. $H_0\varphi_i = \lambda\varphi_i$, то отсюда имеем

$$Q\varphi_i + H_0 u_i = \lambda\, u_i + b_k\varphi_i.$$

Умножив обе части этого равенства скалярно на произвольную функцию $f \in U_\nu$, получим

$$(Q\varphi_i, f) + (H_0 u_i, f) = \lambda\,(u_i, f) + b_k(\varphi_i, f). \tag{0.13}$$

Как мы уже говорили ранее, $(\varphi_i, f) = 0$. Далее, т.к. оператор H_0 – эрмитов и $f \in U_\nu$, то

$$(H_0 u_i, f) = (u_i, H_0 f) = (u_i, \nu f) = \nu(u_i, f).$$

Учитывая сказанное, из (0.13) получаем, что

$$(Q\varphi_i, f) = (\lambda - \nu)\,(u_i, f)$$

и, значит, условие (0.11) запрета перехода «λ → ν» при возмущении εQ можно записать в виде

$$(Q\varphi_i, f) = 0,\ i = 1,2,\dots m,\ \forall f \in U_\nu\,. \tag{0.14}$$

Так как равенство (0.14) должно быть верно для любой базисной функции φ_i подпространства U_λ, то оно должно быть верно при $\forall\varphi \in U_\lambda$ и, значит, выбор базиса в подпространстве U_λ роли не играет. Поэтому далее мы считаем ортонормированный базис $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$ из U_λ произвольным. Пусть $f_1, f_2, \dots . f_p$ – ортонормированный базис в подпространстве U_ν и тогда условие (0.14) можно переписать в эквивалентном виде

$$a_{ij} \coloneqq \left(Q\varphi_i, f_j\right) = 0,\ i = 1,2,\dots m;\ j = 1,2,\dots,p. \tag{0.15}$$

В.6. Переходы и симметрия

Вопрос о запрещенности перехода «$\lambda \to \nu$» обычно ставится не для конкретных уровней энергии λ и ν, а для любой пары уровней λ, ν с определёнными свойствами связанных состояний (т.е. функций из U_λ и U_ν) по отношению к преобразованиям их аргументов $r \to gr$ для тех преобразований g в R^{3n}, для которых $H_0(gr)= H_0(r)$. Эти преобразования называются преобразованиями симметрии системы Z, и поэтому свойства функций φ_i(r) $\in U_\lambda$ и $f_j(r) \in U_\nu$, проявляющиеся после замены аргументов $r \to gr$, часто называют свойствами симметрии. Возвращаясь к переходу «$\lambda \to \nu$» говорят, что он запрещен, если он запрещен из соображений симметрии, т.е. если (0.15) выполняется независимо от конкретного вида функций из U_λ и U_ν, а только в силу определенной их симметрии. Если свойства симметрии не позволяют установить (0.15), то говорят, что переход «$\lambda \to \nu$» разрешен, хотя случайно может оказаться, что для данных конкретных λ и ν равенства (0.15) выполняются и разрешенный симметрией переход не осуществляется.

Рассмотрим примеры.

В.7. Переходы для оператора Штурма

Пусть $h_\varepsilon(x)$=$h_0(x) + \varepsilon Q(x)$, где оператор $h_0(x)$ задан в (0.1), а $Q(x)-$ некоторый возмущающий оператор. Пусть λ и ν – произвольные собственные значения оператора $h_0(x)$ и U_λ и U_ν $-$ соответствующие одномерные собственные подпространства.

Повторяя для операторов $h_0(x)$ и $h_\varepsilon(x)$, определённых в области $\mathcal{D}_{H_0}$ (см. В2, В3), рассуждения В5 с упрощениями, вызванными одномерностью собственных подпространств ($k_\varepsilon = m = p = 1$), мы получим, что условия (0.15) можно записать в виде

$$a \coloneqq (Q\varphi, f) = \int_{-l}^{+l} Q\varphi\bar{f}dx = 0, \tag{0.16}$$

где φ и f – произвольные ненулевые функции соответственно из U_λ и U_ν. Будем предполагать, что оператор $h_0(x)$ и его область определения инвариантны относительно инверсии $x \to -x$. Мы уже знаем (см. В3), что в этом случае все собственные значения оператора $h_0(x)$ можно разбить на множества B_+ и B_- в зависимости от чётности или нечётности входящих в собственные подпространства функций. Рассмотрим сначала случай, когда возмущение $Q(x)$ есть чётная функция (оператор):

$$Q(-x)=Q(x).$$

Если $\lambda, \nu \in B_+$ или $\lambda, \nu \in B_-$, то подынтегральная функция в интеграле (0.16) – чётная и равенство $a=0$ не следует из свойств симметрии собственных функций. В то же время если $\lambda \in B_+$, $\nu \in B_-$ или $\lambda \in B_-$, $\nu \in B_+$, то в (0.16) мы имеем интеграл от нечётной функции в симметричных пределах $-l, +l$, который, разумеется, равен нулю.

Таким образом мы доказали, что при $Q(-x)=Q(x)$ переход «$\lambda \to \nu$» разрешен для уровней с одинаковой чётностью ($\lambda, \nu \in B_+$ или $\lambda, \nu \in B_-$) и запрещён для уровней с различной чётностью собственных функций.
Если $Q(-x)= -Q(x)$, то, рассуждая аналогично предыдущему, мы получим, что переход «$\lambda \to \nu$» запрещён между уровнями с одинаковой чётностью собственных функций, и разрешён в случае разной чётности ($\lambda \in B_+$, $\nu \in B_-$ или $\lambda \in B_-$, $\nu \in B_+$).

Следовательно, не зная собственных подпространств, мы смогли для любой пары λ,ν собственных значений оператора Штурма определить, разрешён или запрещён переход «$\lambda \to \nu$» в зависимости от свойств возмущающего оператора $Q(x)$ и чётности (нечётности) функций из U_λ и U_ν.

В.8. Переходы для оператора Шредингера

Рассмотрим теперь оператор H_ε=$H_0 + \varepsilon Q$, где оператор $H_0(r)$=$H(r)$ задан равенством (0.4), а $Q(r)$ – некоторый возмущающий оператор. Пусть λ и ν – произвольные собственные значения оператора H_0 в $\mathcal{D}_{H_0}$, а U_λ и U_ν – соответствующие собственные подпространства. Мы нашли множество G преобразований g в R^{3n}, для которых $H_0(gr)$= $H_0(r)$ (см. В4.). Однако мы ничего не можем сказать относительно перехода «$\lambda \to \nu$», ибо у нас нет ни математического аппарата для описания свойств симметрии возмущающего оператора $Q(r)$ и функций φ_i(r) $\in U_\lambda$ и $f_j(r) \in U_\nu$ (т.е. их поведения при замене $r \to gr$), ни критериев того, какие типы симметрии функций φ_i(r) и $f_j(r)$ и оператора $Q(r)$ обеспечивают выполнение равенств (0.15). В общем случае оператора H_ε=$H_0 + \varepsilon Q$ при произвольном H_0 ситуация полностью аналогична.

Таким образом, в сколько-нибудь сложной ситуации мы пока не можем выяснить, будет ли переход «$\lambda \to \nu$» разрешён или запрещён. Но мы сможем это сделать с помощью материала курса.

В.9. Принцип Паули

Пусть Z – n-частичная квантовая система, r_i и η_i координаты и спин i-ой частицы, q_i=(r_i, η_i), $\Phi(q_1, \ldots\ldots q_n)$ – волновая функция системы Z (собственная функция оператора Гамильтона). Принцип Паули говорит, что все частицы делятся на 2 типа: бозоны и фермионы. Функция $\Phi(q_1, \ldots\ldots q_n)$ имеет физический смысл лишь в том случае, если она a) меняет знак при перестановке координат $q_p \leftrightarrow q_m$ двух тождественных фермионов (является антисимметричной); b) не меняется при перестановке координат $q_s \leftrightarrow q_t$ двух тождественных бозонов (является симметричной). В квантовой механике часто пренебрегают так называемым спин-орбитальным взаимодействием и записывают:

$$\Phi(q_1, \ldots, q_n) = \sum_{i,j} \varphi_i(r_1, \ldots, r_n)\sigma_j(\eta_1, \ldots \eta_n),$$

где $\varphi_i(r_1, \ldots r_n)$ – волновые функции координатного оператора, σ_j $(\eta_1 \ldots\ldots \eta_n)$ – спиновые функции, η_s – величина спина s-ой частицы, которая может принимать конечное число значений. Допустим, что мы отыскиваем координатные функции φ_i (точно или приближенно – не принципиально). Тогда нам надо знать, какова должна быть их симметрия (т.е. поведение) по отношению к перестановкам координат r_p тождественных частиц, чтобы можно было найти такие спиновые функции σ_j, для которых функция $\Phi(q_1,\ldots q_n)$ обладает нужной симметрией. Для определённости пусть Z есть n- электронный атом с неподвижным ядром. Электрон –это фермион. Значит функция Φ должна быть антисимметрична при перестановках $q_p \leftrightarrow q_m$, *А* функции φ_i? Очевидный ответ: можно взять функции φ_i антисимметричными, а σ_j – симметричными, тогда Φ – антисимметрична относительно перестановок $q_p \leftrightarrow q_m$, и, значит, антисимметричные φ_i имеют физический смысл. Второй очевидный ответ – возьмем функции $\varphi_i(r_1, \ldots, r_n)$– симметричными, а σ_j – антисимметричными. Тогда Φ – антисимметрична. Однако этот ответ верен только при n=2, т.к. при $n \geq 3$ антисимметричных ненулевых функций σ_j – не существует! Действительно, для электронов значение спина $\eta_s = \pm 1/2$. Поэтому у функции $\sigma_j(\eta_1 \ldots \eta_n)$ при $n \geq 3$ не меньше двух аргументов должны совпадать. Действительно, пусть, например, n=3, $\eta_2 \neq \eta_3$. Тогда $\eta_1 = \eta_2$ или $\eta_1 = \eta_3$ и при перестановке $\eta_1 \leftrightarrow \eta_2$ или $\eta_1 \leftrightarrow \eta_3$ аргументов функции $\sigma_j(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$ эта функция не изменится. А если $\eta_2 = \eta_3$, то функция $\sigma_j(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$ не изменится при перестановке $\eta_2 \leftrightarrow \eta_3$.Таким образом, функция $\sigma_j(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$ не может быть антисимметричной, и, следовательно, при n≥3 симметричные функции $\varphi_i(r_1, r_2, r_3)$ для гамильтониана H не имеют физического смысла. А какие имеют (кроме антисимметричных)? Ответ на этот вопрос при любом $n \geq 3$ даст знание теории представлений [4], хотя в данном пособии мы его решать не будем.

Разумеется, указанными приложениями не исчерпываются возможности того предмета, который мы начнём изучать, но мы ограничимся этими.

Содержание данного пособия соответствует первой половине курса лекций, читавшегося автором студентам факультета Высшая школа общей и прикладной физики Нижегородского государственного университета имени Н.И. Лобачевского.

Теория представления точечных групп и групп пространственной симметрии кристаллов, составлявшая вторую половину курса, в данное пособие не включена. Автор предполагает изложить этот материал в отдельной брошюре.

ГЛАВА I. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

«Когда сомневаешься – говори правду».
Марк Твен (1835 – 1910)

§ 1. 1 Группа. Примеры групп

1.1.1. Преобразования симметрии квантовых систем

Пусть G=$\{g\}$ – множество всех преобразований в пространстве R^3=$\{r|r = (x, y, z)\}$, переводящих некоторую квантовую систему Z саму в себя. Ясно, что множество G содержит единичное (тождественное) преобразование и для каждого $g \in G$ обратное преобразование g^{-1} также принадлежит G. Наконец, ясно, что если $f, g, h \in G$ то $fg \in G$ и $(fg)\,h$=$f(g\,h)$.

Множество G определяется свойствами рассматриваемой системы Z. Мы видели во Введении, что когда, например, Z представляет собой трёхатомную молекулу с n электронами и тождественными ядрами, расположенными в вершинах правильного треугольника, то G содержит перестановки n тождественных электронов и вращения множества D_3 (см. B4), а также их произведения друг на друга. А если Z – это бесконечный кристалл (т.е. периодическая решетчатая структура с тождественными атомами в узлах решётки), то G содержит сдвиги (трансляции), t_n: $t_n r = r + n$, в которых $n = \sum_{j=1}^{3} n_j\, a_j$, где $n_j -$ целые числа, $a_j -$ некомпланарные вектора, соединяющие фиксированный узел решетки с тремя соседними.

Мы видим, что элементами, входящими в G, могут быть преобразования различной природы. Поэтому для изучения свойств G целесообразно отвлечься от «внутренних» характеристик элементов из G и рассматривать только те их свойства, которые являются общими для различных множеств G и которые мы упомянули в начале параграфа. Так мы приходим к понятию абстрактной группы.

1.1.2. Что такое группа?

<u>Определение.</u> Множество элементов $G = \{g, f, h, \dots\}$ называется группой, если любым двум элементам f, g из G по определённому закону ставится в соответствие какой-либо элемент h из G и этот закон – «групповое умножение» – обладает следующими свойствами:

I. *для* $\forall f, g \in G \quad h \coloneqq fg \in G$;

II. *для* $\forall f, g, h \in G$ *выполняется* $(fg)h = f(gh)$ *(ассоциативность умножения);*

III. $\exists e \in G$ *такой, что* $eg = ge = g$ *для* $\forall g \in G$ *(существование единичного элемента);*

IV. *для* $\forall g \in G \;\; \exists \tilde{g} \in G$ *такой, что* $g\tilde{g} = \tilde{g}g = e$ *(существование обратного элемента).*

Элемент $\tilde{g}$ называется обратным к g и обозначается через g^{-1}. Умножение в группе может быть не коммутативным, т.е., вообще говоря, $gf \neq fg$; если $gf = fg$ для $\forall f, g \in G$, то группа называется коммутативной или абелевой. Число элементов в группе называется её порядком и обозначается $|G|$. Если $|G| < \infty$, то группа называется конечной, если $|G| = +\infty$, то группа – бесконечна. Мы будем изучать, в основном, конечные группы.

Из аксиом *I-IV* вытекает, что единичный элемент e и обратный элемент g^{-1}для каждого g - единственные. Действительно, если для некоторого $e' \in G$ и $\forall g \in G$ выполняется $e'g = ge' = g$, то при $g = e$ имеем

$$e'e = ee' = e = e'.$$

Далее, если для данного g и какого-то $g' \in G$ имеем $gg' = e$, то, умножив это равенство слева на g^{-1}, получим

$$g^{-1}gg' = (g^{-1}g)g' = eg' = g' = g^{-1}e = g^{-1}$$

и т.д.

Задание. Показать, что $(fg)^{-1}$=$g^{-1}f^{-1}$.

Отметим, что групповая операция, которая традиционно называется «умножением», на самом деле может не быть умножением в обычном смысле. Так например, n-мерное векторное пространство R^n=$\{r | r = (x_1, \dots, x_n)\ \}$ является группой по сложению: единичный элемент – это нуль-вектор, обратный элемент для r есть $-r$ и т.д.

1.1.3. Конечные группы

Рассмотрим теперь примеры групп. Во всех примерах групповая операция – умножение (чисел, матриц, операторов).

Конечные группы:

1. $G = \{1\}$ – группа, состоящая из одного элемента;
2. $G = \{1, -1\}$ – группа, из двух элементов;
3. $G = \{e^{\frac{2\pi i}{n}k}, k = 0,1, \dots, n-1\}$ – множество корней n-ой степени из единицы;
4. Множество S_n перестановок n-ой степени: элементы группы – перестановки g, $g = g_b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots n \\ b_1 & b_2 & \dots b_n \end{pmatrix}$, где $b_1, \dots, b_n$ – это числа 1,2,…, n, переставленные произвольным (но фиксированным для g_b) способом. Если имелось n объектов, расположенных на занумерованных местах 1,2,…, n (или в «ящиках» с номерами 1,2,…, n), то перестановка g_b перемещает объект с k-ого места (из k-ого ящика) на место (в ящик) с но-

мером b_k. Произведением двух перестановок $g_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots n \\ a_1 & a_2 & \dots a_n \end{pmatrix}$ и g_b является перестановка $g_a g_b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots n \\ a_{b_1} & a_{b_2} & \dots a_{b_n} \end{pmatrix}$, единичный элемент группы S_n − это тождественная перестановка $e = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots n \\ 1 & 2 & \dots n \end{pmatrix}$, обратным элементом для g_b является перестановка $g_b{}^{-1} = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \dots b_n \\ 1 & 2 & \dots n \end{pmatrix}$. Легко проверить, что для перестановок g_a, g_b и $g_c = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots n \\ c_1 & c_2 & \dots c_n \end{pmatrix}$ выполняется $(g_a\, g_b)\, g_c = g_a(\, g_b\, g_c)$. Таким образом, множество S_n действительно образует группу. Очевидно $|\, S_n| = n!$. Группа S_n называется симметрической группой порядка n.

5. $G = D_3$ – множество вращений, переводящих правильный треугольник в себя (см. Введение). Обозначим вершины этого треугольника A_1, A_2, A_3, а оси, проходящие через вершины A_i и лежащие на биссектрисах углов $\angle A_i$, через a_i, $i = 1,2,3$. Выберем далее систему координат так, чтобы $\Delta A_1, A_2, A_3$ лежал в плоскости x, y и чтобы начало координат (точка O) совпало с точкой пересечения биссектрис углов A_i, i=1,2,3; ось x направим по оси a_1, а ось z − перпендикулярно плоскости чертежа в точке O (положительное направление – на читателя). Пусть $C_l(\varphi)$ – это поворот на угол φ около произвольной (ориентированной) оси l. Тогда $D_3 = \{C_z(\frac{2\pi}{3}k)$, k=0,1,2; $C_{a_j}(\pi)$, j =1,2,3$\}$. Докажем, что D_3 – группа по умножению. Положим $g_j = C_z\left(\frac{2\pi}{3}(j-1)\right)$ j=1,2,3; $g_4 = C_{a_1}$, $g_5 = C_{a_2}$, $g_6 = C_{a_3}$, где $C_{a_j} = C_{a_j}(\pi)$. Очевидно, что $g_1 = C_z(0) = e$ – единичный элемент, далее легко проверить, что $g_2{}^{-1} = g_3$, $g_3{}^{-1} = g_2$ и $g_j{}^{-1} = g_j$ j=4,5,6. Следовательно, требования III и IV в определении группы выполнены. Требование II также выполняется, ибо g_i, $i = 1, \dots 6$ − это линейные операторы в R^3, а для линейных операторов умножение ассоциативно. Таким образом, для доказательства того, что D_3 − группа, нам остаётся только проверить справедливость включения $g_i g_j \in D_3$, $i, j = 1,2, \dots 6$. Для этого сначала заметим, что произведение двух любых вращений есть вращение, поскольку множество вращений в R^3 совпадает с множеством $O^+(3)$ ортогональных операторов, матрицы которых имеют определитель +1, а произведение операторов из $O^+(3)$ лежит в $O^+(3)$ [2]. Тот факт, что $g_i g_j$ есть вращение

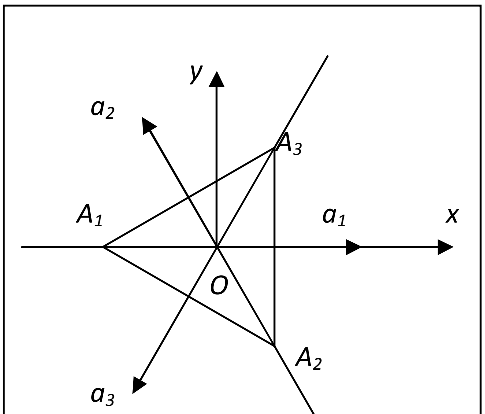

Рис.1

именно из D_3 был доказан во Введении, но без нахождения элементов $g_s, s = s(i,j)$, для которых $g_s = g_i g_j$. Однако, в дальнейшем нам понадобится находить произведения элементов из D_3, и поэтому покажем, как это делать. Чтобы получить элемент $g_s = g_i g_j$ применим операторы g_i и g_j последовательно к произвольной точке $M(x,y,z) \in R^3$, введя предварительно в R^3 цилиндрические координаты $\rho = \sqrt{x^2+y^2}$, $\alpha = arctg(yx^{-1}), z = z$. Тогда $M = M(\rho,\alpha,z)$ и, например,

$$g_2 g_4(\rho,\alpha,z) = g_2(\rho,-\alpha,-z) = (\rho, \frac{2\pi}{3} - \alpha, -z) = g_6(\rho,\alpha,z) = g_6 M,$$

т.е. $g_6 = g_2 g_4$. Чтобы проверить это равенство, рассмотрим проекцию $M_0 = M_0(\rho,\alpha)$ точки M на плоскость x, y и воспользуемся очевидными соотношениями (см. рис.2).

$$g_4 M_0 = M_0'(\rho,-\alpha), g_2 M_0' = M_0''\left(\rho, \frac{2\pi}{3} - \alpha\right) = g_2 g_4 M_0$$

$$g_6 M_0 = \left(\rho, \frac{\pi}{3} + \frac{\pi}{3} - \alpha\right) = \left(\rho, \frac{2\pi}{3} - \alpha\right) = M_0''$$

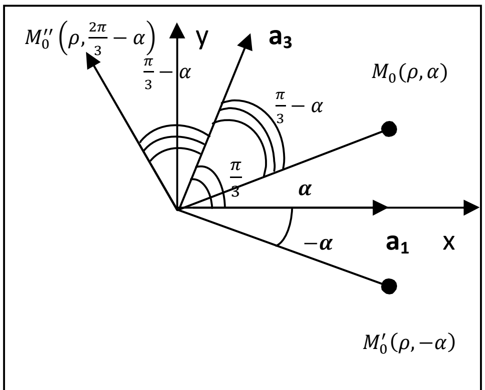

Рис.2

Задание. Построить для группы D_3 «таблицу умножения», т.е. заполнить таблицу,

	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6
g_1						
g_2				g_6		
g_3						
g_4						
g_5						
g_6						

где в клеточке на пересечении строки g_i со столбцом g_j должен быть записан элемент $g_s = g_i\, g_j$.

1.1.4. Бесконечные группы

1. $G = \mathbb{C}\backslash\{0\}$, где $\mathbb{C}$ – множество всех комплексных чисел.
2. $G = \mathbb{R}\backslash\{0\}$, где $\mathbb{R}$ – множество всех вещественных чисел.
3. $G = G_0\backslash\{0\}$, где G_0– множество всех рациональных чисел. [3]
4. $G = \{g | g = a - b\sqrt{3}, \forall a, b\ \in G_0, g \neq 0\}$.
5. $G -$ множество обратимых квадратных матриц произвольного фиксированного порядка *n.*
6. G – множество унитарных матриц произвольного фиксированного порядка *n.*

Пусть далее K – линейное пространство над полем $F, n = dim\, K$ и мы в примерах 7)-10) рассматриваем линейные операторы, действующие из K в K.

7. $G -$ множество обратимых операторов.
8. $G -$ множество унитарных операторов, $F = \mathbb{C}$.
9. $G = O(n) -$ множество ортогональных операторов, $F = \mathbb{R}$.
10. $G = O^+(n) -$ множество ортогональных операторов, матрицы которых имеют определитель равный единице, $F = \mathbb{R}$.
11. Множество $SO(3)$ вращений $g = C_l(\varphi)$ точек трёхмерного пространства на любые углы φ около всех осей $l = \vec{l}$, проходящих через начало координат. В курсе линейной алгебры [2] доказывается, что $SO(3)$ совпадает с множеством $O^+(3)$ ортогональных операторов в R^3, матрицы которых имеют определитель равный единице. Поскольку для $\forall g, h \in O^+(3)$ выполняется
$gh \in O^+(3),\ g^{-1} \in O^+(3)$,
$(gh)f = g(hf)$ и $det\|gh\| =\ det\|g\|\ det\|h\| = 1$, то $SO(3) \equiv O^+(3)$ есть группа. Далее используем для $SO(3)$ обозначение $O^+(3)$. При $g\ =\ C_l(\varphi)\ \in O^+(3)$ положение оси l будем задавать орбитальным углом θ с осью z, $0 \leq \theta \leq \pi$, и азимутальным углом ψ между проекцией оси l на плоскость x, y и осью x, $0 \leq \psi < 2\pi$. Угол поворота φ около оси l считаем лежащим в промежутке $0 \leq \varphi \leq \pi$. Это не мешает рассматривать вращения $C_l(\varphi)$ при $\forall\varphi$, ибо при $\pi \leq \varphi < 2\pi$ выполняется $C_l(\varphi) = C_{-l}(\varphi')$, где $\varphi' = 2\pi - \varphi\ \in [0, \pi]$, а при $-2\pi < \varphi \leq 0$ очевидно $C_l(\varphi) = C_{-l}(-\varphi)$, где $-\varphi > 0$. Так как элементы группы $O^+(3)$ определяются тремя непрерывно меняющимися параметрами φ, θ, ψ, то группа $O^+(3)$ называется трёхпараметрической непрерывной группой.

[3] рациональные числа – это числа вида $\frac{p}{q}$, где p и q – любые целые, $q \neq 0$.

12. Полная группа вращений $O(3)$. Элементами этой группы являются все вращения из $O^+(3)$ и их произведения на инверсию $i: ir = -r$ при $r \in R^3$. Т.к. $\|i\| = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, то $\|i\|\|g\| = \|g\|\|i\|$ при $\forall\, g \in O^+(3)$. Следовательно $gi = ig$. Отсюда легко следует, что $O(3)$ – группа.

Задание.
Проверить, будут ли группами следующие множества (групповая операция – умножение (соответственно чисел, матриц или операторов)).

1. Множества G в примерах 1-10.
2. $G = \{g | g = a + b\sqrt[3]{3}, \forall a, b \in G_0, g \neq 0\}$.
3. G – множество обратимых эрмитовых операторов.
4. $G = O^-(n)$ – множество ортогональных операторов, матрицы которых имеют определитель равный -1.

1.1.5. Лемма о сдвиге

Пусть $g_1, \dots, g_N$ – все элементы группы G порядка N, записанные в произвольной последовательности. Тогда для любого элемента $g \in G$ элементы $gg_1, \dots, gg_N$ различны и с точностью до порядка записи совпадают с $g_1, \dots, g_N$.

Доказательство. Так как $|G| = N$, то достаточно доказать, что $gg_i \neq gg_j$ при $i \neq j$. Но это очевидно, т.к. при $gg_i = gg_j$, умножив это равенство слева на g^{-1}, мы получили бы, что $g_i = g_j$.

Замечание. Аналогичный результат справедлив и для правого сдвига, т.е. для множества $g_1 g, \dots, g_N g$.

Задание. Доказать Лемму о сдвиге для бесконечных групп.

§ 1.2 Подгруппа. Смежные классы

1.2.1. Подгруппа

Определение. Подгруппой группы G называется такое подмножество элементов группы G, которое само образует группу относительно групповой операции в G.

Простейшие подгруппы: единичный элемент и сама группа. Их называют несобственными, и, когда говорят о подгруппах, обычно имеют в виду остальные (собственные) подгруппы, если они есть. Поскольку нас будут интересовать конечные группы, дадим достаточное (и необходимое) условие того, что конечное множество $H \subset G$ является подгруппой. Это условие таково:

(A) Для любых g, h из H произведение gh должно принадлежать H.

Покажем, что если (A) выполняется, то H − подгруппа. Так как $H \subset G$, нам надо проверить только наличие в H единичного элемента и для каждого $g \in H$ наличие в H элемента g^{-1}. Пусть $g \neq e$. Тогда в последовательности $g^k, k =$

1,2,3, ..., все члены которой принадлежат H, все элементы не могут быть различны, ибо $|H| < +\infty$. Пусть m есть наименьшее значение показателя k, для которого g^m=g^p для какого-то p, p< m. Тогда g^{m-1}=g^{p-1}, что невозможно по определению числа m при $p \geq 2$. Значит, $p = 1$, т.е. $g^m = g, g^{m-1} = e$, и $g^{m-2} = g^{-1}$ ибо $g^{m-2}g = e$. Значит, $H \ni e = g^{m-1}$ и $H \ni g^{-1} = g^{m-2}$, где $m \neq 2$, т.к. при $m = 2$ выполняется g^2= $g \rightarrow g = e$, что исключено.

Задание.

Построить пример, показывающий , что если множество H (и группа G) бесконечны, то условие (А) не является достаточным для того, чтобы множество H было подгруппой.

<u>*Примеры подгрупп*</u>: В группе корней из единицы степени $2n$ – множество H={$e^{\left(\frac{\pi i}{n}\right)k}, k -$ чётное}, в группе $O^+(3)$ - множество C_n вращений около оси z на углы, кратные $\frac{2\pi}{n}$, в группе D_3 – множество вращений $C_3 = \left\{C_z(0), C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), \left(\frac{4\pi}{3}\right)\right\}$.

Подгруппа H, образованная степенями $g, g^2, \dots g^k$ одного и того же элемента, называется циклической, наименьший показатель k, для которого $g^k = e$, называется порядком элемента g. Ясно, что $|H| = k$.

1.2.2. Смежные классы

<u>*Определение.*</u> *Пусть H- произвольная подгруппа группы G, g- фиксированный элемент из G. Множество элементов $Hg = \{hg|\forall h \in H\}$ называется правым смежным классом по подгруппе H.*

Образуем все возможные правые смежные классы по подгруппе H, перебирая все элементы $g \in G$, и покажем, что два любых смежных класса или совпадают, или не имеют общих элементов.

Действительно, если классы Hg и Hf имеют общий элемент, то $\exists\, h, h_0 \in H$ такие, что $hg = h_0 f$. Отсюда $g = h^{-1}h_0 f$. Но тогда $Hg = Hh^{-1}h_0 f = Hf$, ибо в силу Леммы о сдвиге $Hh^{-1}h_0 = H$. Таким образом мы показали , что наличие хотя бы одного общего элемента у двух смежных классов приводит к их совпадению.

Далее считаем группу G конечной и занумеруем элементы G так, что совокупность классов $Hg_1, Hg_2, \dots, Hg_p$ исчерпывает все различные смешанные классы. Тогда, поскольку любой элемент $g_0 \in G$ принадлежит одному из смежных классов (Hg_0), то

$$G = \sum_{i=1}^{p} Hg_i. \tag{1.1}$$

Поскольку число элементов в каждом смежном классе равно $|H|$ и, т.к. смежные классы не содержат общих элементов, то из (1.1) следует, что

$$|G| = |H|p, \qquad (1.2)$$

т.е. что порядок подгруппы является делителем порядка группы. Это утверждение называется теоремой Лагранжа.

Подобно правым смежным классам мы можем определить левые смежные классы gH, которые обладают теми же свойствами, что и правые.

Задания.

1. Пусть $|G|$ – простое число. Доказать, что для любого элемента $g \in G, g \neq e$, множество $g, g^2, g^3 \dots g^k (k -$ порядок элемента g) совпадает с G.
2. Написать разложение группы D_3 (см. пример 5 из §1.1) на правые смежные классы по подгруппе $H=\{C_z(0), C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), \left(\frac{4\pi}{3}\right)\}$.

§ 1. 3 Классы сопряжённых элементов

1.3.1. Определение классов

Определение. *Пусть* $g, f \in G$. *Будем говорить что* g *сопряжён элементу* f *и писать* $g{\sim}f$, *если найдётся элемент* $h \in G$ *такой, что* $g = hfh^{-1}$.

Ясно, что каждый элемент сопряжён самому себе (т. е. $g{\sim}g$), и что если $g{\sim}f$, то $f{\sim}g$. Кроме того, если $g{\sim}f$ и $f{\sim}\omega$, то $g{\sim}\omega$ (транзитивность понятия сопряжения). Действительно, если $g{\sim}f$ и $f{\sim}\omega$, то для некоторых $h_1, h_2 \in G$ выполняется $g = h_1fh_1{}^{-1}$ и $f = h_2\omega h_2{}^{-1}$. Поэтому $g = h_1h_2\omega h_2{}^{-1}h_1{}^{-1} = h\omega h^{-1}$, где $h = h_1h_2 \in G$. Следовательно, $g{\sim}\omega$. Из сказанного следует, что группу G можно разбить на не пересекающиеся между собой классы сопряжённых друг с другом элементов. Заметим, что один из этих классов всегда совпадает с единичным элементом группы.

Задания.

1. Пусть $\mathrm{C}_1, \dots, \mathrm{C}_m$ – все классы сопряжённых элементов конечной группы G. Показать, что множество произведений элементов классов C_i и C_j состоит из целых классов C_s, т. е. что
$$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_j = \sum_{s=1}^{m} a_{ij,s}\,\mathrm{C}_s, \qquad (1.3)$$
где $a_{ij,s}$ – натуральные числа.
2. Показать, что для абелевых групп число классов сопряжённых элементов равно порядку группы.

1.3.2. Классы сопряженных элементов группы чистых вращений

Проиллюстрируем смысл понятия «сопряжённый элемент» для группы G, элементами которой являются какие-либо линейные обратимые преобразования (операторы) в любом конечномерном линейном пространстве K. Если элементы (преобразования) f и g из G сопряжены, то найдётся такое преобразование $h \in G,$ что

$$g = hfh^{-1}. \tag{1.4}$$

Из операторного равенства (1.4) следует матричное равенство

$$\|g\| = \|h\| \cdot \|f\| \cdot \|h\|^{-1},$$

где $\|f\|, \|h\|$ и т.д. – матрицы соответствующих операторов в каком-либо фиксированном базисе $e = (e_1, e_2, \dots, e_n)$ в K. Положим $h_0 = h^{-1}$. Тогда $\|h_0\| = \|h\|^{-1}$ и

$$\|g\| = \|h_0\|^{-1}\|f\|\|h_0\|. \tag{1.5}$$

Из курса линейной алгебры известно, что правая часть равенства (1.5) даёт вид матрицы $\|f\|$ в новом базисе $e' = (\,e_1',\ e_2', \dots,\ e_n')$, полученном из базиса e с помощью оператора перехода h_0: $e_i' = h_0 e_i$. Таким образом, согласно (1.5) , матрица $\|g\|$ оператора g в базисе e совпадает с матрицей оператора f в базисе e'. Другими словами, сопряжённые друг другу преобразования можно описать одной и той же матрицей, но отнесённой к разным базисам: $\|g\|_e = \|f\|_{e'}$.

Пусть, например, $G = O^+(3)$ и f- вращение на угол φ около некоторой оси l. Тогда для $\forall h \in G$ элементы $g = hfh^{-1}$ и f сопряжены. Преобразование g является вращением, так как оно есть произведение 3-х вращений. В то же время оно сохраняет элементы на оси hl, ибо $ghl = hfh^{-1}hl = hfl = hl$, так как вращение f не меняет оси l. Таким образом g – вращение около оси hl. Так как g и f имеют в подходящих базисах одну и ту же матрицу, то g, как и f, есть вращение на угол φ, но около оси hl. Из этих же рассуждений вытекает, что если $g = C_{l_0}(\varphi)$ и $f = C_l(\varphi)$ – суть повороты на один и тот же угол φ около разных осей (l_0 и l), то для любого вращения h_0 из $O^+(3)$, переводящего ось l в l_0 (т.е. $l_0 = h_0 l$) выполняется $g = h_0 f {h_0}^{-1}$.

Из сказанного следует, что в группе $O^+(3)$ каждый класс сопряжённых элементов $K(\varphi)$ состоит из поворотов на один и тот же угол φ около всех осей, проходящих через начало координат, и различные классы сопряжённых элементов отличаются друг от друга величиной φ.

1.3.3. Классы сопряженных элементов полной группы вращений

Рассмотрим теперь классы сопряжённых элементов группы $O(3)$, состоящей из всех вращений $g = C_l(\varphi)$ группы $O^+(3)$ и их произведений f=gi на инверсию i. Пусть $\{hfh^{-1} |\ \forall h \in O(3)\}$ – класс элементов группы $O(3)$, сопряжённых с элементом f. Пусть сначала $f = C_l(\varphi) \in O^+(3)$. Тогда при $\forall h \in O^+(3)$ мы получим элементы класса $K(\varphi)$ (см. выше). Если $h = h_0 i,$ где $h_0 \in$

$O^+(3)$, то поскольку $if = fi$ при $\forall f \in O^+(3)$ и т. к. i^2 есть единичный оператор, то

$$hfh^{-1} = h_0 ifih_0{}^{-1} = h_0 g h_0{}^{-1} \in O^+(3).$$

Таким образом, доказано, что при $f \in O^+(3)$ и $\forall\ h \in O(3)$ выполняется

$$\{\, hfh^{-1} | \forall h \in O(3)\, \} = K(\varphi).$$

Пусть теперь $f = gi$, где $g = C_l(\varphi) \in O^+(3)$. Очевидно, $hfh^{-1} = ihgh^{-1} = ig_0$, где, по доказанному выше, $g_0 = hg_0h^{-1} \in K(\varphi)$. Поэтому при $f=gi$, имеем:

$$\{\, hfh^{-1} | \forall h \in O(3)\, \} = iK(\varphi) = \{ih_0 | h_0 \in K(\varphi)\} = \{C_l(\varphi)i | \forall l\}.$$

Таким образом, классы сопряжённых элементов группы $O(3)$ – это

$$K_+(\varphi) \coloneqq K(\varphi) \text{ и } K_-(\varphi) \coloneqq K(\varphi)i\ , \forall\ \varphi,\ 0 \leq \varphi < 2\pi,$$

где знаки «+» и «–» соответствуют знакам определителей матриц операторов из $K_\pm(\varphi)$.

1.3.4. Классы сопряженных элементов подгруппы

Обсудим вопрос о том, что происходит с классами сопряжённых элементов при переходе от группы G к произвольной подгруппе $H \subset G$. Ясно, что элементы, находившиеся в различных классах группы G, не могут оказаться в одном классе группы H. В то же время элементы, сопряжённые между собой в G, могут не быть сопряжены в H. Действительно, пусть $g\ , f \in H$ и $g \sim f$ в G. Обозначим через $h_s, s = 1,2, \dots$ все элементы из G, для которых $g = h_s f h_s^{-1}$. Если хотя бы один элемент $h_s \in H$, то $g \sim f$ в H. Однако, если $h_s \notin H$ ни при каком s, то g и f не сопряжены в H, т.е. элементы из одного класса сопряжённых элементов в G могут оказаться в различных классах сопряжённых элементов подгруппы H. Таким образом, если, например, $H \subset O^+(3)$ и H содержит повороты $C_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$ и $C_y\left(\frac{\pi}{2}\right)$ на угол $\frac{\pi}{2}$ около осей Ox и Oy, лежащие в одном классе сопряжённых элементов в $O^+(3)$, то $C_x\left(\frac{\pi}{2}\right) \sim C_y\left(\frac{\pi}{2}\right)$ в H, только если H содержит вращение, переводящее ось Ox в ось Oy.

Задание. Найти классы сопряжённых элементов для группы D_3 (пример 3 в § 1.1) и выяснить, что происходит с этими классами при переходе к подгруппе $C_3 = \left\{C_z(0), C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right)\right\}$.

§ 1.4 Инвариантная подгруппа

1.4.1. Определение

Пусть H подгруппа G. Образуем множество элементов $H^0 \equiv gHg^{-1}$ для фиксированного $g \in G$. Легко проверить, что $H^0 -$ подгруппа G. Если $H^0 = H$ при $\forall g \in G$, то H называется инвариантной подгруппой (другое название: нормальный делитель). Выясним некоторые свойства инвариантных подгрупп. Пусть H - инвариантная подгруппа. Так как для $\forall h \in H$ все элементы $ghg^{-1}, g \in G,$ принадлежат $H,$ то H содержит весь класс элементов, сопряжённых с $h.$ Следовательно, инвариантная подгруппа состоит из целых классов сопряжённых элементов. Далее, для инвариантных подгрупп левый и правый смежные классы совпадают, ибо $H = gHg^{-1}$, т.е. $gH = Hg$ для $\forall g \in G$.

1.4.2. Фактор-группа

С помощью инвариантной подгруппы H можно построить так называемую фактор-группу G/H. Пусть g_iH, i=1,..., - все различные смежные классы по подгруппе H. Определим произведение смежных классов g_iH и g_jH как множество элементов $g_ih'g_jh''$, где h', h'' пробегают всю подгруппу H, и покажем, что это множество совпадает с множеством g_ig_jH, т.е. со смежным классом, отвечающим элементу g_ig_j. Действительно,

$$g_ih'g_jh''=g_ig_jg_j^{-1}h'g_jh'' = g_ig_j\tilde{h}'h'',$$

где $\tilde{h}' = g_j^{-1}h'g_j \in H$ и $\tilde{h}'h''$ пробегает всю группу H вместе с h'' в силу Леммы о сдвиге. Таким образом,

$$g_iH \cdot g_jH = g_ig_jH. \tag{1.6}$$

Мы определили операцию умножения на совокупности смежных классов по инвариантной подгруппе. Эта операция удовлетворяет аксиомам *I-IV* группы. Роль единичного элемента играет класс $eH = H$, обратным элементом для класса g_jH является в силу (1.6) класс $g_j^{-1}H$. Следовательно, смежные классы можно рассматривать как элементы некоторой группы. Она называется фактор-группой по подгруппе и обозначается через G/H.

ГЛАВА II. ИЗОМОРФИЗМ И ГОМОМОРФИЗМ. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП

«Когда идёшь на тигра, бери длинную палку».
Мао Цзе-Дун (1893 – 1976)

§ 2. 1 Изоморфные группы

2.1.1. Изоморфизм групп

Определение. *Группы G и $\widetilde{G}$ назовём изоморфными и будем писать $G \approx \widetilde{G}$, если между их элементами можно установить взаимно – однозначное соответствие, сохраняющееся при выполнении групповой операции.*

Другими словами, если $g, f \in G, \tilde{g}, \tilde{f} \in \widetilde{G}$ и $g \leftrightarrow \tilde{g}, f \leftrightarrow \tilde{f}$, то $fg \leftrightarrow \tilde{f}\tilde{g}$. В силу взаимно-однозначного соответствия между элементами G и $\widetilde{G}$ изоморфные конечные группы имеют одинаковый порядок. Поэтому мы можем занумеровать их элементы так, что

$$G = \{ g_1, \dots, g_N\}, \quad \widetilde{G} = \{\tilde{g}_1, \dots, \tilde{g}_N\} \text{ и } \quad g_i \leftrightarrow \tilde{g}_i.$$

Составим таблицу умножения для группы G, т.е. определим такую функцию $s(i,j)$ целочисленных аргументов i,j со значениями $1, 2, \dots, N$, что $g_{s(i,j)} = g_i g_j$ для $i,j = 1, 2, \dots, N$. Тогда изоморфизм $G \approx \widetilde{G}$ означает, что таблица умножения для группы G будет такой же, как для $\widetilde{G}$, т.е.

$$\tilde{g}_{s(i,j)} = \tilde{g}_i \tilde{g}_j.$$

Таким образом, если для группы G произведение $i-$ого и $j-$ого элементов даёт $k-$й элемент, тогда то же самое имеет место для группы $\widetilde{G}$. Приведём примеры изоморфизма.

1. Пусть элементы группы G –линейные обратимые операторы, действующие в линейном пространстве K над полем F, а элементы группы $\widetilde{G}$ – матрицы этих операторов в каком-либо базисе пространства K. Групповые операции – умножение операторов (в G) и матриц (в $\widetilde{G}$). Каждому оператору поставим в соответствие его матрицу. Как доказывалось в курсе линейной алгебры, это соответствие – изоморфизм.

2. Группы: $G = \{-1,+1\}$ (групповая операция – умножение), $W = \{e,i\}$ (i – инверсия $ir=-r$, e – тождественное преобразование) и $C_z=\{e, C_z(\pi)\}$ – изоморфны между собой.

Задание. Доказать, что все группы, состоящие из двух элементов, изоморфны друг другу.

2.1.2. Гомоморфизм групп

Рассмотрим теперь класс отображений группы G на группу $\widetilde{G}$ более широкий, чем изоморфизм.

<u>Определение.</u> *Пусть отображение группы G на группу $\widetilde{G}$ таково, что каждому элементу $g \in G$ соответствует единственный элемент $\tilde{g}$ из $\widetilde{G}$ и это отображение сохраняется при выполнении групповой операции. Тогда говорят, что группа $\widetilde{G}$ гомоморфна группе G, или что имеет место гомоморфизм группы G на группу $\widetilde{G}$, и пишут $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$.*

<u>Замечание.</u> Гомоморфное отображение $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$ является изоморфизмом, если оно взаимно однозначно.

Примеры гомоморфизма.

1. Пусть $G = O(3)$, $\widetilde{G} = \{+1,-1\}$. Поставим в соответствие элементу g из $O(3)$ число d, равное определителю матрицы $\|g\|$ в произвольном базисе пространства R^3. То есть, если $g \in O^+(3)$, то $g \to +1$, если $g \in O(3) \setminus O^+(3)$, то $g \to -1$. Легко видеть, что данное отображение – гомоморфизм.

2. Пусть $G = D_3$ (см. 1.1.3), $\widetilde{G} = \{1,-1\}$. Отображение $G \to \widetilde{G}$ определим так: $e \to 1$ $C_3^1 \to 1$, $C_3^2 \to 1$, $C_{a_i} \to -1$ $i=1,2,3$. Используя таблицу умножения группы D_3, легко проверить, что данное отображение – гомоморфизм.

Задание. Показать, что если $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$, то $e \to \tilde{e}$ и $g^{-1} \to \tilde{g}^{-1}$, если $g \to \tilde{g}$; здесь $g \in G, \tilde{g} \in \widetilde{G}$ и $e, \tilde{e}$ – единичные элементы групп $G, \widetilde{G}$.

Пусть $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$. Тогда множество $G^0 = \{g | g \in G, g \to \tilde{e}\}$ образует инвариантную подгруппу группы G. Действительно, если $g_1 \to \tilde{e}$, $g_2 \to \tilde{e}$, то в силу гомоморфизма $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$ $g_1 g_2 \to \tilde{e}$, поэтому H^0 - подгруппа. Далее, если $g_1 \in H^0$, то $g g_1 g^{-1} \to \tilde{g}\tilde{e}\tilde{g}^{-1} = \tilde{e}$, т.е. элементы, сопряжённые с g_1, также принадлежат H^0 и, значит, H^0 – инвариантная подгруппа. Рассмотрим все левые смежные классы по подгруппе H^0 и построим фактор-группу G/H^0.

Задание. Доказать, что группы G/H^0 и $\widetilde{G}$ изоморфны (каждому «элементу» $g_i H^0$ из G/H^0 поставить в соответствие элемент $\tilde{g}_i \in \widetilde{G}$, отвечающий элементу g_i в гомоморфизме $G \xrightarrow{HOM} \widetilde{G}$).

§ 2. 2 Конечномерные представления групп

2.2.1. Определение представления

Пусть K – произвольное линейное пространство над полем F.

Рассмотрим какую-либо группу T, элементы которой суть линейные обратимые операторы, действующие из K в K с обычной операцией умножения между операторами:

$$(T'T'')x = T'(T''x) \text{ при } \forall x \in K, \forall\, T', T'' \text{ из } T.$$

<u>Определение.</u> *Пусть задан гомоморфизм группы G на группу $T{:}g \to T_g,\ g \in G,\ T_g \in T$. Тогда мы говорим, что группа операторов T_g образует представление группы G в пространстве K. Пространство K называется пространством представления, его размерность $dimK = n$ – размерностью представления.*

Таким образом, однозначное отображение $g \to T_g,\ g \in G,\ T_g \in T$ называется представлением группы G, если из соотношений $g \to T_g$, $f \to T_f$ вытекает, что $T_{gf} = T_g T_f$ при $\forall g, f \in G$.

Выберем в пространстве K произвольный базис $e = (e_1, \dots, e_n)$. Тогда каждому оператору можно поставить в соответствие его матрицу D_g в этом базисе. Напомним, что матричные элементы $\left(D_g\right)_{ki}$ этой матрицы суть коэффициенты разложения вектора $T_g e_i$ по базису e:

$$T_g e_i = \sum_{k=1}^{n} \left(D_g\right)_{ki} e_k.$$

Мы уже говорили, что группа операторов $\{T_g\}$ изоморфна группе их матриц $\{D_g\}$. Поэтому, если задано представление $g \to T_g,\ g \in G$, то соответствие $g \to D_g$ будет гомоморфизмом группы G на группу матриц D_g. Часто понятие представления определяют не с помощью операторов, а с помощью матриц.

<u>Определение.</u> *Пусть задан гомоморфизм группы G на какую-то группу матриц $\{D_g\}$: $g \to D_g,\ g \in G,\ D_g \in \{D_g\}$. Тогда мы говорим, что группа матриц D_g образует представление группы G, размерность матриц D_g мы назовём размерностью представления.*

Пусть $g \to D_g$ представление группы G матрицами D_g размерности n. Тогда, взяв произвольное n –мерное пространство K и зафиксировав в нём какой-либо базис $e_1, \dots, e_n$, мы можем рассматривать каждую матрицу D_g как матрицу некоторого линейного оператора T_g в K в базисе $e_1, \dots, e_n$. Ясно, что группы $\{D_g\}$ и $\{T_g\}$ будут изоморфны, поэтому соответствие $g \to T_g$ есть гомоморфизм. Из сказанного следует, что определения представления с помощью операторов и с помощью матриц эквивалентны и мы можем пользоваться любым из них.

2.2.2. Эквивалентные представления

Рассмотрим, что происходит с представлением $g \to D_g$, когда мы переходим в пространстве K к новому базису. Пусть $A = \{a_{ij}\}$ – произвольная обратимая матрица и $\widetilde{e_j} = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\, e_i\,, j = 1, \ldots n -$ новый базис в K. Тогда как известно из курса линейной алгебры, в новом базисе матрицы D_g принимают вид

$$\widetilde{D}_g = A^{-1} D_g A.$$

Таким образом, линейное преобразование базиса в K приводит к преобразованию подобия матриц D_g. Легко видеть, что соответствие $g \to \widetilde{D}_g,\ g \in G$ также является представлением группы G. Оно называется эквивалентным представлению $g \to D_g$. Дадим общее

<u>Определение.</u> *Представления $g \to D'_g$ и $g \to D''_g$ группы G, называются эквивалентными, если существует такая неособенная матрица B, что*

$$D''_g = B^{-1} D'_g B \quad \forall g \in G. \tag{2.1}$$

Из сказанного следует, что эквивалентные матричные представления можно рассматривать как одно и то же операторное представление, матрицы которого записаны в различных базисах.

С другой стороны, пусть даны эквивалентные матричные представления $g \to D'_g,\ g \to D''_g$ и пусть для некоторой матрицы B выполняется равенство (2.1). Тогда, если ввести в пространстве K операторы $P,\ T'_g$ и T''_g так, что в базисе пространства K выполняется $\|T'_g\| = D'_g,\ \|T''_g\| = D''_g,\ \|P\| = B$, то, очевидно, отображения $g \to T'_g,\ g \to T''_g$ будут представлениями группы G в пространстве K, и в силу (2.1) будет справедливо соотношение

$$T''_g = P^{-1} T'_g P. \tag{2.2}$$

<u>Определение.</u> *Представления $g \to T'_g$ и $g \to T''_g$ группы G в линейном пространстве K назовём эквивалентными, если существует такой линейный обратимый оператор P, действующий из K в K, что выполняется равенство (2.2).*

Из сказанного следует, что определения эквивалентности представлений в матричной и в операторной форме равносильны.

§ 2. 3 Представления в пространствах со скалярным произведением

2.3.1. Унитарные операторы и матрицы

Пусть K – унитарное n – мерное пространство, т.е. линейное n – мерное пространство со скалярным произведением $(\cdot,\cdot)$ над комплексным полем. Напомним определения унитарного оператора и унитарной матрицы. Линейный оператор U, действующий из K в K, называется унитарным, если он сохраняет скалярное произведение:

$$(Ux, Uy) = (x, y) \text{ для } \forall\, x, y \in K. \qquad (2.3)$$

Важное свойство унитарных операторов – равенство обратного и сопряжённого: $U^* = U^{-1}$ т.е.

$$(Ux, y) = (x, U^*y) = (x, U^{-1}y). \qquad (2.4)$$

<u>Определение.</u> *Матрица D=* $\left(D_{ji}\right)$ = $\|U\|$ *унитарного оператора U в ортонормированном базисе называется унитарной.* Для неё верно равенство $D^* = D^{-1}$и выполняются равенства

$$(Dx, Dy) = (x, y),\ (Dx, y) = (x, D^*y) = (x, D^{-1}y), \qquad 2.5)$$

где *x,y* – любые вектора из *K, Dx* – произведение матрицы *D* на вектор-столбец $x=\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \xi_n \end{pmatrix}$, то есть $Dx = \begin{pmatrix} (Dx)_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ (Dx)_n \end{pmatrix}$, ξ_i – координаты вектора x в ортонормированном базисе $e_1, \dots, e_n$, $(Dx)_j = \sum_{i=1}^{n} (D)_{ji}\, \xi_i$, следовательно, $Dx = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} (D)_{ji}\, \xi_i \right) e_j = Ux$. Напомним также определение унитарной матрицы через свойства её элементов. Матрица *D* называется унитарной, если её столбцы суть ортонормированные вектора, т.е. если

$$\sum_{s=1}^{n} D_{si}\, \overline{D}_{sj} = \delta_{ij}\,. \qquad (2.6)$$

Равенства (2.5), (2.6) с одной стороны следуют из унитарности оператора *U*, для которого *D*=$\|U\|$, а с другой – любое из них может быть принято за определение унитарной матрицы.

2.3.2. Существование унитарного представления

Матричное {операторное} представление $g \to D_g$ { $g \to T_g$} называется унитарным, если матрица D_g {оператор T_g в пространстве K} унитарна {унитарен} при $\forall g \in G$.

Теорема 2.1. *Конечномерное представление конечной группы эквивалентно унитарному.*

Доказательство мы проведём для представлений, заданных в операторной форме. Пусть $g \to T'_g$ – представление конечной группы G в линейном пространстве *K* со скалярным произведением (·,·) и ортонормированным базисом $e =$

$\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$. Пусть P – произвольный линейный обратимый оператор, действующий из K в K и $T''_g = P^{-1}T'_gP$. Покажем, что можно найти такой оператор P, что операторы T''_g будут унитарны в K, а т.к. базис e – ортонормированный, то и матрицы

$$D''_g = \left\|T''_g\right\| = \|P\|^{-1}\left\|T'_g\right\|\|P\|$$

операторов T''_g будут унитарными.

Введём в пространстве K новое скалярное произведение $(x, y)_1$ равенством

$$(x, y)_1 =: \frac{1}{|G|}\sum_{f\in G}(T'_fx, T'_fy) \tag{2.7}$$

(проверьте, что формула (2.7) действительно определяет скалярное произведение). Пусть $e' = \{e'_1, e'_2, \dots, e'_n\}$ – базис в K, ортонормированный в смысле нового скалярного произведения, и P – оператор перехода от базиса e к базису e':

$$e'_j = Pe_j, j = 1,2, \dots, n. \tag{2.8}$$

Утверждается, что операторы $T''_g = P^{-1}T'_gP$ унитарны в старом скалярном произведении. Для доказательства этого факта нам понадобятся соотношения:

$$(Pu, Pv)_1 = (u, v) \text{ при } \forall u, v \in K, \tag{2.9}$$

$$\left(T'_gu, T'_gv\right)_1 = (u, v)_1 \text{ при } \forall g,\ \forall u, v \in K. \tag{2.10}$$

Докажем их.
Пусть $u = \sum_{i=1}^{n}\xi_i\, e_i,\ v = \sum_{j=1}^{n}\eta_j\, e_j$ − произвольные вектора из K. Очевидно,

$$(Pu, Pv)_1 = \sum_{i,j=1}^{n}\xi_i\,\overline{\eta_j}\left(Pe_i, Pe_j\right)_1 = \sum_{i,j=1}^{n}\xi_i\,\overline{\eta_j}\left(e'_i, e'_j\right)_1 = \sum_{i=1}^{n}\xi_i\,\overline{\eta_i} = (u, v),$$

т.е. (2.9) доказано.

Переходим к доказательству (2.10). Имеем:

$$\left(T'_gu, T'_gv\right)_1 = \frac{1}{|G|}\sum_{f\in G}\left(T'_fT'_gu, T'_fT'_gv\right) = \frac{1}{|G|}\sum_{f\in G}\left(T'_{fg}u, T'_{fg}v\right) = \frac{1}{|G|}\sum_{h\in G}(T'_hu, T'_hv) = (u, v)_1$$

Здесь мы использовали равенство $T'_fT'_g = T'_{fg}$, верное потому, что операторы T'_g образуют представление группы G, и Лемму о сдвиге, согласно которой при любом фиксированном $g \in G$ выполняется $\{h|h = fg, \forall f \in G\} = G$. Таким образом, соотношения (2.9), (2.10) доказаны. Покажем теперь, что оператор T''_g - унитарен. Используя (2.9) с $u = P^{-1}T'_gPx$, $v = P^{-1}T'_gPy$ видим, что

$$\left(T''_g x, T''_g y\right) = \left(P^{-1}T'_gPx, P^{-1}T'_gPy\right) = \left(T'_gPx, T'_gPy\right)_1 \ \forall g. \qquad (2.11)$$

Далее сначала в силу (2.10) с $u = Px, v = Py$, а потом в силу (2.9) с $u = x, v = y$ имеем

$$\left(T'_gPx, T'_gPy\right)_1 = (Px, Py)_1 = (x, y). \qquad (2.12)$$

Из (2.11), (2.12) следует утверждение Теоремы.

§ 2.4 Представления групп в задачах квантовой механики

2.4.1. Инвариантность гамильтонианов при преобразованиях симметрии

Прежде, чем изучать свойства представлений, покажем, как они естественным образом возникают в задачах квантовой механики. Рассмотрим, например, квантовую систему Z, состоящую из n электронов в кулоновском поле одного или нескольких неподвижных ядер[4]. Гамильтониан такой системы $H(r)$ имеет вид

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_{r_i} + V(r),$$

где $\hbar=h/2\pi$, h – постоянная Планка, m- масса электрона, $r_i =(x_i, y_i, z_i)$– координаты i -го электрона, $r = (r_1,\ldots,r_n)$, $\Delta_{r_i}= \frac{\partial^2}{\partial {x_i}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {y_i}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {z_i}^2}$, $V(r)$ – сумма потенциалов взаимодействия электронов между собой и с неподвижными ядрами, R^{3n}={ r}. Оператор $H(r)$ рассматривается в пространстве $\mathcal{L}_2(R^{3n})$ в области

$$\mathcal{D}_H = \{\psi(r)|\psi(r) \in \mathrm{C}^2(R^{3n}) \text{ кусочно}, \int_{R^{3n}} (|\psi|^2 + |\nabla\psi|^2 + |H\psi|^2)\, dr < +\infty\}.$$

Пусть G={g} – группа преобразований в R^3, для которых $gZ = Z$. Такая группа называется группой симметрии системы Z. Т.к. $gZ = Z$ при $g \in G$, то и

$$H(gr) = H(r) \quad \forall g \in G, \qquad (2.13)$$

где $gr = (gr_1, gr_2, \ldots, gr_n)$. Для систем типа атомов или молекул G состоит из перестановок тождественных частиц, некоторых вращений из $O(3)$ и их произведений друг на друга. Поэтому при $g \in G$ всегда выполняется равенство:

---

[4] Если ядро одно, то мы принимаем его положение за начало координат.

$$\sum_{i=1}^{n} \Delta_{gr_i} = \sum_{i=1}^{n} \Delta_{r_i} \qquad (2.14)$$

(проверить самостоятельно!). Следовательно, для справедливости (2.13) надо , чтобы

$$V(gr) = V(r) \quad \text{при } \forall g \in G, \qquad (2.15)$$

Именно это требование математически определяет, из каких преобразований g состоит группа G. Например, если Z – трёхатомная молекула с n электронами и тождественными ядрами, расположенными в вершинах правильного треугольника, то (2.15) выполняется при $g = g'g''$, где $g' \in S_n, g'' \in D_3$ (см. Введение). Если Z – n- электронный атом, то (2.15) верно для $g = g'g''$, где $g' \in S_n, g'' \in O(3)$ и т.д. Очевидно, что при $\psi(r) \in \mathcal{D}_H$ выполняется $\psi(gr) \in \mathcal{D}_H$ при любом $g \in G$.

2.4.2. Представления групп симметрии в собственных подпространствах

Пусть λ – собственное значение оператора $H(r)$ и U_λ – соответствующее собственное подпространство, т.е. для $\forall u \in U_\lambda$

$$H(r)u(r) = \lambda u(r).$$

Т.к. это соотношение верно при $\forall r$, то оно сохраняется при замене r на $g^{-1}r$. Имеем

$$H(g^{-1}r)u(g^{-1}r) = \lambda u(g^{-1}r), \quad g \in G.$$

Отсюда в силу (2.13)

$$H(r)u(g^{-1}r) = \lambda u(g^{-1}r)$$

Следовательно, функция $u(g^{-1}r) \in U_\lambda$. Определим в собственном подпространстве U_λ оператора $H(r)$ операторы $T_g, g \in G$, равенствами

$$T_g u(r) = u(g^{-1}r)$$

и покажем, что соответствие $g \to T_g$ есть представление группы G в пространстве U_λ. Действительно, по доказанному, пространство U_λ инвариантно для операторов T_g и при $g, h \in G$ имеем

$$T_g T_h u(r) = T_g u(h^{-1}r) = T_g \tilde{u}(r) = \tilde{u}(g^{-1}r) = u(h^{-1}g^{-1}r) = u((gh)^{-1}r) = T_{gh}\, u(r),$$

где мы полагали $\tilde{u}(r) = u(h^{-1}r)$. Таким образом, доказано, что $T_g T_h = T_{gh}$ и, значит, отображение $g \to T_g$ есть представление группы G в U_λ. Так как элементы g

есть ортогональные преобразования в R^3, то представление $g \to T_g$ унитарно, ибо

$$\left(T_g u, T_g v\right) = \int\limits_{R^{3n}} u(g^{-1}r)\overline{v(g^{-1}r)}\, dr = \int\limits_{R^{3n}} u(r)\overline{v(r)} dr = (u, v).$$

Таким образом, в собственном подпространстве оператора *H(r)*, отвечающем собственному значению λ, построено унитарное представление группы симметрии этого оператора. Тип этого представления и его свойства определяются свойствами волновых функций $\psi(r)$ из U_λ. Поэтому, классифицируя представления групп симметрии гамильтонианов квантовых систем, мы тем самым узнаём и классифицируем возможные свойства симметрии функций из U_λ. Именно на этом основано применение теории представлений в задачах квантовой механики и физики твёрдого тела.

Отметим, что для перехода от представления группы G унитарными операторами T_g к представлению унитарными матрицами достаточно выбрать в U_λ ортонормированный базис $\psi_1(r), \dots, \psi_m(r)$ и построить матрицы D_g операторов T_g обычным образом:

$$T_g \psi_i = \sum_{s=1}^{m} \left(D_g\right)_{si} \psi_s, \qquad g \in G\,.$$

ГЛАВА III. ПРИВОДИМЫЕ И НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

«Назвался груздем – полезай в кузов».
Русская пословица

§ 3. 1 Приводимые представления и их разложение на неприводимые

3.1.1. Определения приводимых и неприводимых представлений

Пусть $g\rightarrow T_g$ – представление группы G в унитарном n – мерном пространстве K. Подпространство K'из K назовём инвариантным для представления $g\rightarrow T_g$, если для $\forall\ x'\epsilon\ K'$и $\forall g\ \in\ G$ выполняется $T_g x'\ \in\ K'$.

<u>*Определение*</u>.

Представление группы G операторами T_g называется неприводимым в K, если в пространстве K не существует инвариантных для всех операторов T_g, $g\ \in\ G$, подпространств, не совпадающих с K или с нуль – вектором.

Представление $g\rightarrow T_g$ группы G операторами T_g в пространстве K назовём приводимым, если в пространстве K существует подпространство K', $K'\neq K$, $K'\neq\{\theta\}$, инвариантное для всех операторов T_g.

Выясним, какой вид имеют матрицы операторов T_g приводимого в пространстве K представления при подходящем выборе базиса. Пусть $\widetilde{K}^{(1)}$- инвариантное для всех операторов T_g, $g\ \in\ G$, подпространство из K и $m=dim\widetilde{K}^{(1)}$. Построим в K базис, взяв в качестве первых m базисных векторов базисные вектора пространства $\widetilde{K}^{(1)}$. Тогда матрица D_g оператора T_g в K будет иметь вид, в котором матричные элементы m первых столбцов, начиная с $(m+1)$-ой строки, равны нулю:

$$\left(D_g\right)_{is}=0\ \ s=1,\dots,m,\qquad i=m+1,\dots,n,$$

т.е.

$$D_g=\begin{pmatrix}\widetilde{D}_g^{(1)} & \widetilde{D}_g^{(2)}\\ 0 & \widetilde{D}_g^{(3)}\end{pmatrix},$$

где $\widetilde{D}_g^{(k)}$ – матрицы размерностей $m\times m$ при $k=1$, $m\times(n-m)$ при $k=2$, $(n-m)\times(n-m)$ при $k=3$. Очевидно, $\widetilde{D}_g^{(1)}=\left\|T_g\right\|_{\widetilde{K}^{(1)}}$ – матрица оператора T_g в подпространстве $\widetilde{K}^{(1)}$. Пусть $\widetilde{K}^{(2)}$ – ортогональное дополнение пространства $\widetilde{K}^{(1)}$ до K:

$$\widetilde{K}^{(2)}=\{y|y\ \in\ K,(y,x)=0\text{ для }\forall x\ \in\widetilde{K}^{(1)}\}.$$

Как известно [2],

$$K = \widetilde{K}^{(1)} \oplus \widetilde{K}^{(2)}.$$

Если операторы T_g унитарны в K, то подпространство $\widetilde{K}^{(2)}$ также инвариантно для операторов T_g, ибо $T_g^* = T_g^{-1}$ и, значит, для $\forall y \in \widetilde{K}^{(2)}$ и $\forall x \in \widetilde{K}^{(1)}$ выполняется

$$(T_g y, x) = (y, T_g^{-1} x) = (y, T_{g^{-1}} x) = (y, x') = 0,$$

где $x' = T_{g^{-1}} x \in \widetilde{K}^{(2)}$. Поэтому, если в качестве базиса в пространстве K взять базис, составленный из базисов подпространств $\widetilde{K}^{(1)}$ и $\widetilde{K}^{(2)}$, то матрица D_g примет блочно- диагональный вид

$$\begin{pmatrix} D_g^{(21)} & 0 \\ 0 & D_g^{(22)} \end{pmatrix},$$

где первый блок размерности $m \times m$ есть матрица $D_g^{(21)} = \widetilde{D}_g^{(1)}$ оператора T_g в $\widetilde{K}^{(1)}$ и второй – матрица $D_g^{(22)}$ размерности $(n-m) \times (n-m)$ – это матрица оператора T_g в $\widetilde{K}^{(2)}$.

3.1.2. Разложение пространства представления

Обозначим через $T_g^{(i)}$ оператор T_g, рассматриваемый в пространстве $\widetilde{K}^{(i)}$, i=1,2. Очевидно, $D_g^{(2i)}$ есть матрица оператора $T_g^{(i)}$ в $\widetilde{K}^{(i)}$ и соответствия $g \to T_g^{(i)}$ и $g \to D_g^{(2i)}$ i=1,2 суть представления группы G в пространствах $\widetilde{K}^{(i)}$, i=1,2. Если хотя бы одно из этих представлений, например $g \to T_g^{(s)}$, приводимо, то мы можем повторить для него в пространстве $\widetilde{K}^{(s)}$ те же рассуждения, которые были проведены для представления $g \to T_g$ в пространстве K: представить пространство $\widetilde{K}^{(s)}$ в виде суммы двух подпространств, инвариантных для операторов $T_g^{(s)}$, $g \in G$, образовать базис в $\widetilde{K}^{(s)}$ из базисов этих подпространств и убедиться, что матрицы операторов $T_g^{(s)}$ в этом базисе будут иметь в $\widetilde{K}^{(s)}$ блочно-диагональный вид.

Продолжая этот процесс, мы, в итоге, разложим исходное пространство K в прямую сумму инвариантных для операторов $T_g, g \in G$, подпространств $K^{(i)}$:

$$K = \sum_{i=1}^{k} \oplus K^{(i)}, k \geq 2,$$

причём в каждом из этих подпространств представление $g \to T_g$ неприводимо. Взяв в качестве базиса в K выписанные последовательно базисные вектора пространств $K^{(1)}, K^{(2)}, \dots, K^{(k)}$, мы получим, что матрицы $\widetilde{D}_g$ операторов T_g в построенном базисе будут иметь (для всех $g \in G$), одинаковую блочно-диагональную структуру из k блоков $D_g^{(i)}$ i=1,2,…, k, размерностей $m_i = dimK^{(i)}$, расположенных для каждого i на пересечении строк с номерами $M_{i-1} + s$ и столбцов с номерами $M_{i-1} + t$, где $s, t = 1,2, \dots, m_i$, $M_{i-1} = m_0 + \dots + m_{i-1}, m_0 = 0$

$$\widetilde{D}_g \equiv \begin{pmatrix} D_g^{(1)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & D_g^{(2)} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & D_g^{(k)} \end{pmatrix}$$

Рис.3.

Таким образом, мы видим, что каждое унитарное приводимое представление $g \to T_g$ может быть разложено на неприводимые. При этом матрицы D_g операторов T_g становятся блочно-диагональными матрицами $\widetilde{D}_g$ с одинаковым расположением и размером блоков для всех $g \in G$. Приведение матриц D_g к блочно – диагональному виду $\widetilde{D}_g$ осуществляется с помощью выбора в пространстве представления K нового базиса, составленного из базисов подпространств $K^{(i)} \subseteq K$, инвариантных для операторов T_g. Если A есть матрица перехода от старого базиса к новому, то $\widetilde{D}_g = A^{-1} D_g A$. Следовательно, условием приводимости представления $g \to D_g$, заданного в матричной форме (матрицы D_g - унитарные!), является существование такой неособенной матрицы A, что матрицы $\widetilde{D}_g$ – блочно-диагональны.

Ближайшие цели курса : получить критерии неприводимости (и приводимости) представлений, оценить число не эквивалентных неприводимых представлений данной группы и научиться практически разлагать данное приводимое представление на неприводимые, включая нахождение подпространств исходного пространства, в которых представление неприводимо.

§ 3. 2 Леммы Шура

Изучение свойств неприводимых представлений базируется на двух леммах, названных в честь их автора – математика Шура.

3.2.1. Первая лемма Шура

Пусть $g \to D_g$ - неприводимое представление группы G и матрица A коммутирует с матрицами D_g для всех $g \in G$:

$$AD_g = D_g A \quad \forall g \in G \tag{3.1}$$

Тогда матрица A кратна единичной, т.е.

$$A = \lambda E,$$

где E - единичная матрица, λ - константа, определяемая матрицей A.

Доказательство. Рассмотрим уравнение $Ax = \lambda x$ в унитарном пространстве представления K. Так как в унитарном пространстве любая матрица имеет по крайней мере одно собственное значение, то найдётся такое λ_0 и вектор $x_0 \epsilon K$, $x_0 \neq \theta$, что $Ax_0 = \lambda_0 x_0$. В силу (3.1)

$$AD_g x_0 = D_g A x_0 = \lambda_0 D_g x_0, \tag{3.2}$$

и, значит, вектора $D_g x_0$ для всех $g \in G$ являются собственными для матрицы A и отвечают тому же собственному значению λ_0, что и x_0. Пусть U_{λ_0} – собственное подпространство матрицы A, отвечающее собственному числу λ_0. Из (3.2) следует, что подпространство U_{λ_0} инвариантно для матриц D_g. Но представление $g \rightarrow D_g$ неприводимо и поэтому или $U_{\lambda_0} = \{\theta\}$, или $U_{\lambda_0} = K$. Первый случай невозможен, ибо $U_{\lambda_0} \ni x_0 \neq \theta$. Значит, $U_{\lambda_0} = K$ и, следовательно, действие матрицы A на любой вектор $x \in U_{\lambda_0} \equiv K$ – это умножение x на число λ_0. Поэтому матрица A кратна единичной матрице E (равна $\lambda_0 E$).

Отметим, что для приводимых представлений лемма не верна. Действительно, в подходящем базисе матрицы приводимых представлений имеют блочно-диагональный вид D_g и состоят не менее чем из двух блоков размерностей m и $n - m$, т.е.

$$\left(D_g\right)_{st} = \left(D_g\right)_{ts} = 0 \text{ при } s = 1, \dots, m, \; t = m + 1, \dots, n.$$

Поэтому они будут коммутировать с диагональными матрицами $A = (a_{ij})$, $a_{ij} = 0 \;\; i \neq j$, $a_{ii} = a, i = 1, \dots, m$, $a_{ii} = b, i = m + 1, \dots, n$ при любых a и b.

Таким образом, мы установили следующий факт: для того, чтобы представление $g \rightarrow D_g$ было неприводимо, необходимо и достаточно, чтобы равенство (3.1) выполнялось только для матриц A, кратных единичной.

3.2.2. Вторая Лемма Шура

Пусть $g \rightarrow D_g^{(s)}$, s=i,j – какие-либо неприводимые представления группы G размерностей n_i и n_j и матрица A, имеющая n_i строк и n_j столбцов, такова, что

$$AD_g^{(j)} = D_g^{(i)} A. \tag{3.3}$$

Тогда, если представления $D_g^{(i)}$ и $D_g^{(j)}$ не эквивалентны, то матрица A – нулевая.

Доказательство. Пусть R_i и R_j – два линейных пространства размерностей n_i и n_j, θ_i и θ_j – нуль-вектора этих пространств и

$$R_j^0 = \{x | x \in R_j, Ax = \theta_i\}.$$

Если $x \in R_j^0$, то в силу (3.3)

$$AD_g^{(j)}x = D_g^{(i)}Ax = D_g^{(i)}\theta_i = \theta_i,$$

т.е. $D_g^{(j)}x \in R_j^0$ при $\forall x \in R_j^0$ и, значит, подпространство R_j^0 инвариантно для представления $D_g^{(j)}$. Но представление $g \to D_g^{(j)}$ неприводимо в R_j. Следовательно $R_j^0 = \{\theta_j\}$ или $R_j^0 = R_j$. Если $R_j^0 = R_j$, то $Ax = \theta_i$ при $\forall x \in R_j$ и, значит, матрица A - нулевая, т.е. если $R_j^0 = R_j$, то Лемма доказана.

Рассмотрим случай $R_j^0 = \{\theta_j\}$ и покажем, что он невозможен. Пусть

$$\hat{R}_i = \{Ax | x \in R_j\}.$$

Докажем, что $\hat{R}_i = R_i$. Действительно, для $\forall y_0 \in \hat{R}_i$ найдётся $x_0 \in R_j$, так что $y_0 = Ax_0$. В силу соотношения (3.3)

$$AD_g^{(j)}x_0 = D_g^{(i)}Ax_0 = D_g^{(i)}y_0 \qquad (3.4)$$

и, значит, подпространство $\hat{R}_i$ инвариантно для матриц $D_g^{(i)}$. Т.к. представление $g \to D_g^{(i)}$ неприводимо, то либо $\hat{R}_i = \{\theta_i\}$, либо $\hat{R}_i = R_i$. Случай $\hat{R}_i = \{\theta_i\}$ невозможен, ибо он означает, что подпространство $R_j^0 = \{x | x \in R_j, Ax = \theta_j\}$ совпадает со всем пространством R_j, а мы рассматриваем ситуацию, когда $R_j^0 = \{\theta_j\}$. Значит $\hat{R}_i = R_i$, т.е. $AR_j = R_i$. Кроме того, заметим, что поскольку $R_j^0 = \{\theta_j\}$, то $Ax_1 \neq Ax_2$ при $x_1 \neq x_2$, ибо иначе $A(x_1 - x_2) = \theta_i$, а $(x_1 - x_2) \neq \theta_j$, что невозможно при $R_j^0 = \{\theta_j\}$. Следовательно, отображение $R_j \xrightarrow{A} R_i$ взаимооднозначно. Поэтому и т.к. $AR_j = R_i$, обратная матрица A^{-1} существует; применив её к обеим частям равенства (3.3), получим соотношение

$$D_g^{(j)} = A^{-1}D_g^{(i)}A,$$

показывающее, что представления $D_g^{(i)}$ и $D_g^{(j)}$ эквивалентны. А это запрещено условием Леммы. Полученное противоречие есть следствие предположения, что $R_j^0 = \{\theta_j\}$. Поэтому $R_j^0 \neq \{\theta_j\}$ и Лемма доказана.

Задания.

1. Выяснить, нужна ли для справедливости лемм Шура унитарность матриц, участвующих в формулировках лемм?
2. Найти общий вид матриц, коммутирующих с матрицами D_g приводимого представления.
3. Доказать, что для любого неприводимого представления. $g \to D_g$ сумма матриц, отвечающих всем элементам произвольного класса C сопряженных элементов группы G, равна λE, где λ - некоторая константа, зависящая от C, и E - единичная матрица.
4. Пусть для матриц неприводимых представлений $D_g^{(i)}$ и $D_g^{(j)}$ и матрицы A выполняется равенство (3.3) и известно, что $D_g^{(j)} = B^{-1} D_g^{(i)} B$ для некоторой матрицы B. Что можно сказать о матрице A?

§ 3.3 Соотношения ортогональности

3.3.1. Случай неэквивалентных представлений

Используя леммы Шура, можно получить соотношения между элементами матриц неприводимых представлений.

Пусть $D_g^{(i)}$ и $D_g^{(j)}$ – матрицы двух неприводимых унитарных представлений группы G порядка N; n_i и n_j – размерности этих представлений. Докажем, что

$$\sum_{g \epsilon G} \left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu} \left(\overline{D}_g^{(j)}\right)_{\lambda\beta} = 0, \tag{3.5}$$

при $\forall \mu, \nu, \lambda, \beta,$ если $D_g^{(j)}$ и $D_g^{(i)}$ не эквивалентны, и

$$\sum_{g \epsilon G} \left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu} \left(\overline{D}_g^{(j)}\right)_{\lambda\beta} = |G| \delta_{\lambda\mu} \delta_{\beta\nu} n_i^{-1}, \tag{3.6}$$

если $D_g^{(i)} \equiv D_g^{(j)}$.

Доказательство равенств (3.5), (3.6) целиком основано на леммах Шура и состоит в построении таких матриц A, которые удовлетворяют условиям (3.3) или (3.1) и для которых матричные элементы (равные нулю или константе, согласно леммам Шура) совпадают с левыми частями равенств (3.5), (3.6).

Итак, пусть

$$A := \sum_{g \epsilon G} D_g^{(i)} X \, D_{g^{-1}}^{(j)},$$

где X – произвольная матрица с числом строк n_i и столбцов n_j. Покажем, что

$$A D_g^{(j)} = D_g^{(i)} A. \tag{3.7}$$

Действительно

$$D_g^{(i)}A = D_g^{(i)}\sum_{g'\epsilon G} D_{g'}^{(i)}\, XD_{g'^{-1}}^{(j)} = \sum_{g'\epsilon G} D_{gg'}^{(i)}\, XD_{g'^{-1}}^{(j)} =$$

$$= \sum_{g''\epsilon G} D_{g''}^{(i)}\, XD_{(g^{-1}g'')^{-1}}^{(j)} = \sum_{g''\epsilon G} D_{g''}^{(i)}\, XD_{(g'')^{-1}}^{(j)} D_g^{(j)} = AD_g^{(j)},$$

т.е. (3.7) верно.

Если представление $D_g^{(j)}$ не эквивалентно представлению $D_g^{(i)}$, то в силу второй леммы Шура все матричные элементы $A_{\mu\lambda}$ матрицы A равны нулю при любых матричных элементах X_{st} матрицы X, т.е.

$$A_{\mu\lambda} = \sum_{g\epsilon G}\sum_{s,t}\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu s} X_{st}\left(D_{g^{-1}}^{(j)}\right)_{t\lambda} = 0.$$

Фиксируем здесь μ, λ и положим $X_{st} = 0$ при $(s,t) \neq (\nu, \beta)$, $X_{\nu\beta}$=1. Тогда

$$A_{\mu\lambda} = \sum_{g\epsilon G}\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}\left(D_{g^{-1}}^{(j)}\right)_{\beta\lambda} = 0. \tag{3.8}$$

Для унитарных представлений $\left(D_{g^{-1}}^{(j)}\right)_{\beta\lambda} = \left(\overline{D}_g^{(j)}\right)_{\lambda\beta}$ и равенство (3.5) следует из (3.8).

3.3.2. Случай эквивалентных представлений

Пусть теперь $j = i$, т.е.

$$A = \sum_{g\epsilon G} D_g^{(i)} X\, D_{g^{-1}}^{(i)},$$

В этом случае, очевидно, равенство (3.7) переходит в (3.1), если там положить $D_g = D_g^{(i)}$. В силу первой леммы Шура

$$A = \lambda E, \tag{3.9}$$

где число λ зависит от выбора матрицы X. Следовательно

$$A_{\mu\alpha} = \sum_{g\epsilon G}\sum_{s,t}\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu s} X_{st}\left(D_{g^{-1}}^{(i)}\right)_{t\alpha} = \lambda\delta_{\mu\alpha}.$$

Выбираем $X_{st} = 0$ при $(s,t) \neq (\nu,\beta)$, $X_{\nu\beta}$=1. Тогда последнее равенство примет вид

$$A_{\mu\alpha} = \sum_{g\epsilon G} \left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu} \left(D_{g^{-1}}^{(i)}\right)_{\beta\alpha} = \lambda_{\nu\beta}\delta_{\mu\alpha}. \qquad (3.10)$$

Чтобы найти, чему равно число $\lambda_{\nu\beta}$, положим в (3.10) $\mu = \alpha$ и просуммируем по α от 1 до n_i. Получим

$$\sum_{g\epsilon G} \sum_{\alpha=1}^{n_i} \left(D_{g^{-1}}^{(i)}\right)_{\beta\alpha} \left(D_g^{(i)}\right)_{\alpha\nu} = \sum_{g\epsilon G} \left(D_e^{(i)}\right)_{\beta\nu} = \lambda_{\nu\beta} n_i,$$

где e – единичный элемент группы G. Поскольку $\left(D_e^{(i)}\right)_{\beta\nu}$=$\delta_{\beta\nu}$, то отсюда следует, что $\lambda_{\nu\beta} = |G|\delta_{\beta\nu}{n_i}^{-1}$. Подставляя выражение для $\lambda_{\nu\beta}$ в (3.10), получаем (3.6).

Равенства (3.5), (3.6) называются соотношениями ортогональности, их можно объединить в одно

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g\epsilon G} \left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu} \left(\overline{D}_g^{(j)}\right)_{\alpha\beta} = n_i^{-1}\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}\delta_{ij}. \qquad (3.11)$$

3.3.3. Общая формулировка результатов в терминах унитарных пространств

Запишем соотношение (3.11) в более простом и естественном виде. Пусть $N = |G|$ и $g_1, \dots, g_N$ – все элементы группы G. Введём N-мерное векторное пространство $\mathcal{F}$, базисные вектора которого, а, следовательно, и координаты любых векторов будут последовательно занумерованы элементами группы. Т.е.

$$\mathcal{F} = \left\{\mathcal{F}_g \middle| \mathcal{F}_g = \left(\mathcal{F}_{g_1}, \mathcal{F}_{g_2}, \dots, \mathcal{F}_{g_N}\right),\ \mathcal{F}_{g_i} \epsilon \mathbb{C}\right\}.$$

Определим в пространстве $\mathcal{F}$ для любой пары векторов $\mathcal{F}_g = \left(\mathcal{F}_{g_1}, \mathcal{F}_{g_2}, \dots, \mathcal{F}_{g_N}\right)$ и $\mathcal{F}'_g = \left(\mathcal{F}'_{g_1}, \mathcal{F}'_{g_2}, \dots, \mathcal{F}'_{g_N}\right)$ скалярное произведение

$$\left(\mathcal{F}_g, \mathcal{F}'_g\right)_G = \frac{1}{|G|}\sum_{i=1}^{N} \mathcal{F}_{g_i} \overline{\mathcal{F}}'_{g_i}. \qquad (3.12)$$

Поскольку вектора

$$\left(D_g^{(s)}\right)_{\gamma\delta} = \left\{\left(D_{g_1}^{(s)}\right)_{\gamma\delta}, \left(D_{g_2}^{(s)}\right)_{\gamma\delta}, \dots, \left(D_{g_N}^{(s)}\right)_{\gamma\delta}\right\}$$

при любых фиксированных s, γ, δ лежат в $\mathcal{F}$, то равенство (3.11) можно переписать в виде

$$\left(\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}, \left(D_g^{(j)}\right)_{\alpha\beta}\right)_G = \delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}\delta_{ij}n_j^{-1}. \qquad (3.13)$$

Равенство (3.13) означает, что вектора $\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}$ взаимно ортогональны для различных i, μ, ν.

Для каждого фиксированного i число векторов $\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}$ равно n_i^2, где $n_i = dimD_g^{(i)}$, и, следовательно, общее число взаимно ортогональных векторов $\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}$ равно $\sum_{i=1}^{q} n_i^2$, где $q -$ число не эквивалентных неприводимых представлений группы G. Так как в N-мерном пространстве $\mathcal{F}$ не может быть больше чем N взаимно ортогональных векторов, то

$$\sum_{i=1}^{q} n_i^2 \leq N = |G|. \qquad (3.14)$$

В следующей главе мы докажем, что в соотношении (3.14) имеет место равенство.

ГЛАВА IV. ТЕОРИЯ ХАРАКТЕРОВ

«Что было, то и будет;
что делалось, то и будет делаться.»
Экклезиаст

§ 4. 1 Характеры и их свойства

4.1.1. Определение и простейшие свойства характеров

Пусть $g \to D_g$ представление группы G матрицами D_g размерности n.
<u>Определение.</u> *След матрицы D_g назовём характером представления D_g и обозначим его через χ_g, то есть*

$$\chi_g = TrD_g = \sum_{i=1}^{n} \left(D_g\right)_{ii}.$$ [5]

Характер – числовая функция, заданная на элементах группы.

Но поскольку группа G – конечна, то характер можно рассматривать и как вектор из $\mathcal{F}$: χ_g=($\chi_{g_1}, \chi_{g_2}, \dots, \chi_{g_N}$), где χ_{g_s}= TrD_{g_s}. Из курса линейной алгебры известно, что след матрицы не меняется при преобразовании подобия, т.е.

$$TrD = Tr(A^{-1}DA) \tag{4.1}$$

для любых квадратных матриц D и A размерности n (A - не особая). Поэтому:

а) характеры сопряженных друг другу элементов f и g совпадают в любом представлении $g \to D_g$;
б) характеры всех представлений $\widetilde{D}_g$, эквивалентных данному представлению, совпадают между собой.

4.1.2. Характеры классов сопряженных элементов

Из свойства а) и равенства (1.3) вытекает следующее полезное соотношение для значений характеров. χ_l=$\chi(C_l)$ на классах сопряжённых элементов C_l группы G для произвольного неприводимого представления $g \to D_g$ этой группы:

$$k_i k_j \chi_i \chi_j = n \sum_{s=1}^{m} a_{ij,s}\, k_s \chi_s, \tag{4.2}$$

[5] *Tr* – от английского слова *trace* – след; ранее использовалось обозначение *Sp* – от немецкого *spur* (было даже слово «прошпурить» -найти след).

где $k_l = \#\{g | g \in C_l\}, n = dimD_g$. Докажем (4.2).

Пусть $g_1^{(l)},\ldots, g_{k_l}^{(l)}$ все элементы класса C_l. Тогда равенство (1.3) можно переписать в виде

$$\sum_{r=1}^{k_i} g_r^{(i)} \sum_{t=1}^{k_j} g_t^{(j)} = \sum_{s=1}^{m} a_{ij,s} \sum_{p=1}^{k_s} g_p^{(s)}, \tag{4.3}$$

где суммы обозначают объединения элементов. Так как матрицы D_g образуют представление, то при равенстве $g_r^{(i)} g_t^{(j)} = g_p^{(s)}$ выполняется $D_{g_r^{(i)}} D_{g_t^{(j)}} = D_{g_p^{(s)}}$. Поэтому равенство (4.3) сохранится, если вместо элементов $g_r^{(i)}, g_t^{(j)}, g_p^{(s)}$ подставить отвечающие им матрицы. Сделав это, получим

$$\sum_{r=1}^{k_i} D_{g_r^{(i)}} \sum_{t=1}^{k_j} D_{g_t^{(j)}} = \sum_{s=1}^{m} a_{ij,s} \sum_{p=1}^{k_s} D_{g_p^{(s)}}, \tag{4.4}$$

В силу Задания 3(**§3.2**) при $l = i, j, s$ имеем

$$\sum_{p=1}^{k_l} D_{g_p^{(l)}} = b_l E_n, \tag{4.5}$$

где E_n– единичная матрица, n=$dim\ D_g$, b_l – константа. Из (4.5) следует, что

$$k_l \chi_l = b_l n. \tag{4.6}$$

Из (4.5), (4.6) при $s = i, j, k$ и (4.4) вытекает равенство (4.2) при любых i, j, k.

<u>*Вопрос*</u>: Где использовалась неприводимость представления $g \to T_g$?

4.1.3. Характеры неприводимых представлений – ортонормированные векторы

Рассмотрим теперь неэквивалентные представления и покажем, что характеры неэквивалентных неприводимых представлений ортогональны.

Теорема 4.1. *Пусть $g \to D_g^{(i)}, g \to D_g^{(j)}$ два не эквивалентных при $i \neq j$ неприводимых представления группы G, $\chi_g^{(i)}$ и $\chi_g^{(j)}$ – их характеры. Тогда*

$$\left(\chi_g^{(i)}, \chi_g^{(j)}\right)_G = \frac{1}{|G|} \sum_{g \epsilon G} \chi_g^{(i)} \bar{\chi}_g^{(j)} = \delta_{ij}. \tag{4.7}$$

Доказательство. В силу (4.1) можно считать представления $D_g^{(i)}$ и $D_g^{(j)}$ унитарными. Тогда, подставляя в (4.7)

$$\chi_g^{(t)} = \sum_{\nu=1}^{n_t} \left(D_g^{(t)}\right)_{\nu\nu}, t = i, j,$$

и используя равенство (3.11), мы сразу получаем (4.7). Утверждение (4.7) можно записать в другом виде. Для этого разобьём группу G на классы C_s $s = 1,2,\dots,m,$ сопряжённых между собой элементов и заметим, что значение характера одинаково для всех элементов одного и того же класса. Поэтому (4.7) можно переписать в виде

$$\left(\chi_g^{(i)}, \chi_g^{(j)}\right)_G = \frac{1}{|G|}\sum_{s=1}^{m} k_s\, \chi_s^{(i)} \bar{\chi}_s^{(j)} = \delta_{ij}, \tag{4.8}$$

где k_s – число элементов класса C_s, а $\chi_s^{(t)}$– значение характера неприводимого представления типа t на классе $C_s, t = i, j$.

Следствие. Неприводимые представления, имеющие равные характеры, эквивалентны. Действительно, если бы представления не были эквивалентны, то их характеры были бы ортогональны.

4.1.4. Разложение приводимых представлений на неприводимые с помощью теории характеров

Свойство ортогональности характеров не эквивалентных неприводимых представлений, выражаемое равенствами (4.7) или (4.8), даёт возможность разлагать произвольные представления на неприводимые. Действительно, пусть $g \to D_g -$ какое-либо представление группы G. Мы уже показали в §3.1, что, выбрав соответствующим образом базис в пространстве представления, мы можем привести все матрицы D_g к блочно-диагональному виду $\widetilde{D}_g$ и $\chi_g \equiv TrD_g = Tr\widetilde{D}_g$. Блоками в $\widetilde{D}_g$ являются матрицы тех неприводимых представлений группы G, которые содержатся в D_g. Обозначим через p_i число блоков в $\widetilde{D}_g$, отвечающих неприводимому представлению $D_g^{(i)}$ типа i. Тогда

$$D_g = \widetilde{D}_g = \sum_i \oplus\, p_i\, D_g^{(i)}$$

и поэтому

$$\chi_g = \sum_i p_i\, \chi_g^{(i)}, \tag{4.9}$$

где $\chi_g^{(i)}$ есть характер представления $D_g^{(i)}$. Действительно, хотя коэффициенты p_i пока неизвестны, само существование разложения (4.9) следует из того очевидного факта, что след χ_g блочно-диагональной матрицы $\widetilde{D}_g$ равен сумме следов всех входящих в неё блоков. Соотношение (4.9) позволяет найти числа p_i. Умножая (4.9) скалярно в $\mathcal{F}$ на вектор $\chi_g^{(j)}$, получим в силу (4.7)

$$p_j = \left(\chi_g, \chi_g^{(j)}\right)_G. \tag{4.10}$$

Равенство (4.10) является основным рабочим инструментом при разложении представления на неприводимые компоненты. Для его применения надо знать характер раскладываемого представления (он обычно известен) и характеры неприводимых представлений группы G (берутся из таблиц). Отметим, что $\left(\chi_g,\chi_g\right)_G = \sum_i {p_i}^2$ (см. (4.9)). Таким образом, если задано произвольное представление $g \to D_g$, то мы можем вычислить величину $b = \sum_i {p_i}^2$. Если $b = 1$, то ясно, что какое-то p_i=1, а остальные $p_j = 0, j \neq i$, т.е. представление $g \to D_g$ неприводимо.

Таким образом, равенство $\left(\chi_g,\chi_g\right)_G = 1$ является необходимым и достаточным условием неприводимости представления $g \to D_g$.

Задания.

1. Описать возможную структуру представления $g \to D_g$, если

   а) $\left(\chi_g,\chi_g\right)_G = 3$; б) $\left(\chi_g,\chi_g\right)_G = 4$.
2. Доказать, что приводимые представления с равными характерами эквивалентны (использовать следствие к теореме 4.1).

§ 4. 2 О числе неприводимых представлений и их размерностях (теоремы Бернсайда)

4.2.1. Первая Теорема Бернсайда

Используя установленные в § 4.1. свойства характеров неприводимых представлений, докажем следующее утверждение.

Теорема 4.2. *(первая теорема Бернсайда). Сумма квадратов размерностей всех неприводимых не эквивалентных представлений группы G равна порядку группы G.*

Доказательство. Определим оператор $T_h, h \in G$ во введённом в § 3.3 пространстве $\mathcal{F} = \left\{\mathcal{F}_g \middle| \mathcal{F}_g = \left(\mathcal{F}_{g_1},\mathcal{F}_{g_2},\dots,\mathcal{F}_{g_N}\right)\right\}$ равенством

$$T_h\mathcal{F}_g := \left(\mathcal{F}_{h^{-1}g_1},\mathcal{F}_{h^{-1}g_2},\dots,\mathcal{F}_{h^{-1}g_N}\right). \tag{4.11}$$

Согласно этому определению, оператор T_h переставляет координаты вектора $\mathcal{F}_g$, ставя на $i -$ ое место вместо координаты $\mathcal{F}_{g_i}$ координату $\mathcal{F}_{g_s}$, где $g_s = h^{-1}g_i$. Соответствие $h \to T_h -$ представление группы G в пространстве $\mathcal{F}$, ибо для $\forall\, f, h \in G$, очевидно, выполняется равенство

$$T_{fh}\mathcal{F}_g = T_f T_h \mathcal{F}_g.$$

Выберем в пространстве $\mathcal{F}$ базис

$$\mathcal{F}_g^{(s)} = \left(\mathcal{F}_{g_1}^{(s)},\mathcal{F}_{g_2}^{(s)},\dots,\mathcal{F}_{g_N}^{(s)}\right) \quad s = 1,2,\dots,N,$$

где $\mathcal{F}_{g_i}^{(s)}$= 0 при $i \neq s$, $\mathcal{F}_{g_s}^{(s)} = 1$.

Найдём матричные элементы матриц D_h операторов T_h в данном базисе. Для этого вычислим $T_h\mathcal{F}_g^{(s)}$. Согласно (4.11) все координаты вектора $T_h\mathcal{F}_g^{(s)}$(т.е. все элементы $s-$ ого столбца матрицы D_h) будут нулевыми, кроме одной (равной единице) и номер t не нулевой координаты определяется из равенства

$$h^{-1}g_t = g_s.$$

В силу этого для данного t

$$T_h\mathcal{F}_g^{(s)} = \mathcal{F}_g^{(t)}$$

и таким образом элементы $(D_h)_{is}$, $i = 1,2,\dots,N,$ $s-$ого столбца матрицы D_h при $i \neq t$ равны нулю, а $(D_h)_{ts}$=1. При $h \neq e,$ очевидно, $g_t \neq g_s$ и, значит, $t \neq s.$ Поэтому $(D_h)_{ss} \neq (D_h)_{ts}$ при $h \neq e$ и, следовательно, при $h \neq e$ выполняется $(D_h)_{ss} = 0$ и

$$TrD_h = \sum_{s=1}^{N}(D_h)_{ss} = 0 \text{ при } h \neq e.$$

В то же время, поскольку $D_e = E,$ то $TrD_e = dim\,\mathcal{F} = N.$

Таким образом, мы построили представление группы G, в котором характер единичного элемента равен порядку группы, а характеры всех остальных элементов равны нулю. Такое представление называется регулярным. Разложим регулярное представление на неприводимые, используя формулу (4.10). Пусть $n_i = dimD_g^{(i)}$. Имеем

$$p_i = \frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\chi_{g_t}\bar{\chi}_{g_t}^{(i)} = \frac{1}{N}\cdot N\cdot n_i = n_i.$$

Таким образом, каждое неприводимое представление содержится в регулярном такое число раз, которое равно размерности n_i этого неприводимого представления. Так как размерность любого представления равна сумме размерностей всех его неприводимых компонент, то

$$N = \sum_{i=1}^{q} n_i \cdot n_i,$$

где q – число не эквивалентных неприводимых представлений группы $G.\Delta$

Следствие 1.

Вектора

$$\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu} = \left\{\left(D_{g_1}^{(i)}\right)_{\mu\nu}, \left(D_{g_2}^{(i)}\right)_{\mu\nu}, \dots, \left(D_{g_N}^{(i)}\right)_{\mu\nu}\right\},\ \mu,\nu = 1,2 \dots n_i;\ i = 1,2,\dots q$$

(см. § 3.3) образуют базис в пространстве $\mathcal{F}$.

Действительно, по доказанной теореме общее число этих векторов $\sum_{i=1}^{q} n_i^2$ равно порядку группы $N = dim\,\mathcal{F}$. Кроме того, в силу (3.13) они взаимно ортогональны и среди них нет нуль-вектора. Значит, эти вектора линейно не зависимы, а так как их число равно $dim\,\mathcal{F}$, то они образуют базис в $\mathcal{F}$.

Следствие 2.

Имеет место соотношение

$$\sum_{i=1}^{q} n_i\,\chi_g^{(i)} = 0 \text{ при } g \neq e. \tag{4.12}$$

Действительно, т.к. представление $D_g^{(i)}$ содержится в регулярном представлении n_i раз, то левая часть равенства (4.12) есть характер χ_g элемента g в регулярном представлении. А он равен нулю при $g \neq e$.

4.2.2. Вторая Теорема Бернсайда

Установим теперь, сколько неэквивалентных неприводимых представлений имеет конечная группа G.

Теорема 4.3. *(вторая теорема Бернсайда).*

Число не эквивалентных неприводимых представлений группы G равно числу классов сопряженных элементов.

Доказательство. До сих пор нам было безразлично, в каком порядке занумерованы элементы группы G. Сейчас мы выберем этот порядок специальным образом. Разобьём группу G на классы C_s сопряжённых элементов и занумеруем элементы группы, последовательно перечисляя элементы классов C_1, C_2 … и т.д. Таким образом, если k_s есть число элементов класса C_s, то

$$C_1 = \{g_1, \dots, g_{k_1}\},\ C_2 = \{g_{k_1+1}, \dots, g_{k_1+k_2}\},$$

и т.д. Поэтому в векторном пространстве $\mathcal{F}$ для каждого вектора $\tilde{\mathcal{F}}_g = \left(\tilde{\mathcal{F}}_{g_1}, \dots, \tilde{\mathcal{F}}_{g_N}\right)$ первые k_1 координат занумерованы элементами класса C_1, следующие k_2 координат – элементами класса C_2 и т.д.

Пусть $H = \{\mathcal{F}_g | \mathcal{F}_g \in \mathcal{F}, \mathcal{F}_{g_i} = \mathcal{F}_{g_j}$, если $g_i \sim g_j\}$, т.е.

$$\mathcal{F}_g = \{a_1, \dots, a_1,\ a_2, \dots, a_2, \dots,\ a_{q'}, \dots, a_{q'}\},$$

где a_s – произвольные числа, каждое a_s повторяется k_s раз, q' – число классов сопряжённых элементов группы G. Ясно, что H – линейное пространство и его размерность равна q'.

Теперь мы можем непосредственно перейти к доказательству теоремы. Вектора $\chi_g^{(i)} = \left\{\chi_{g_1}^{(i)}, \dots, \chi_{g_N}^{(i)}\right\}$, $i = 1, \dots, q$ – характеры неприводимых представлений $D_g^{(i)}$ группы $G -$ принадлежат подпространству H, так как характеры сопряжённых элементов совпадают ($\chi_{g_s}^{(i)} = \chi_{g_t}^{(i)}$ при $g_s \sim g_t$ (см. § 4.1)). В силу (4.7) вектора $\chi_g^{(i)}$ $i = 1, \dots, q$ – линейно независимы. Покажем, что они образуют базис в q'-мерном пространстве H. Отсюда будет следовать, что их число q (число неэквивалентных неприводимых представлений группы G) равно размерности q' пространства H (т.е. числу классов сопряжённых элементов группы G).

Пусть $\mathcal{F}_g = \{\mathcal{F}_{g_1}, \mathcal{F}_{g_2}, \dots, \mathcal{F}_{g_N}\}$ – произвольный вектор из H. Т.к. $H \subset \mathcal{F}$, то в силу следствия 1 к теореме 4.2 мы можем разложить вектор $\mathcal{F}_g$ по векторам $\left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}$, т.е. $\exists\, d_{\mu\nu}^{(i)} \in \mathbb{C}$ такие, что

$$\mathcal{F}_g = \sum_{i=1}^{q} \sum_{\mu,\nu=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)} \left(D_g^{(i)}\right)_{\mu\nu}.$$

Пусть h любой элемент из G. Рассмотрим вектор

$$\mathcal{F}_{hgh^{-1}} = \left\{\mathcal{F}_{hg_1h^{-1}}, \mathcal{F}_{hg_2h^{-1}}, \dots, \mathcal{F}_{hg_Nh^{-1}}\right\}.$$

Поскольку элементы hg_ih^{-1} и g_i лежат в одном и том же классе сопряжённых элементов и т.к. $\mathcal{F}_g \in H$, то $\mathcal{F}_{hg_ih^{-1}} = \mathcal{F}_{g_i}$ и, значит,

$$\mathcal{F}_g = \mathcal{F}_{hgh^{-1}} = \sum_{i=1}^{q} \sum_{\mu,\nu=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)} \left(D_{hgh^{-1}}^{(i)}\right)_{\mu\nu}$$

Просуммируем это равенство по всем $h \in G$ и поделим результат на $|G|$. Так как $\mathcal{F}_g$ не зависит от h, то мы получим

$$\mathcal{F}_g = \sum_{i=1}^{q} \sum_{\mu,\nu=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)} \frac{1}{|G|} \sum_{h\in G} \left(D_{hgh^{-1}}^{(i)}\right)_{\mu\nu}. \qquad (4.13)$$

Поскольку $D_{hgh^{-1}}^{(i)} = D_h^{(i)} D_g^{(i)} D_{h^{-1}}^{(i)}$ и т.к. $D_{h^{-1}}^{(i)} = \left(D_h^{(i)}\right)^{-1} = \left(\overline{D}_h^{(i)}\right)^T$, то в силу (4.13)

$$\mathcal{F}_g = \sum_{i=1}^{q} \sum_{\mu,\nu=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)} \frac{1}{|G|} \sum_{h\in G} \sum_{s,t=1}^{n_i} \left(D_h^{(i)}\right)_{\mu s} \left(D_g^{(i)}\right)_{st} \left(D_h^{(i)}\right)_{t\nu}^{-1} =$$

$$= \sum_{i=1}^{q} \sum_{\mu,\nu=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)} \sum_{s,t=1}^{n_i} \left(D_g^{(i)}\right)_{st} \frac{1}{|G|} \sum_{h\in G} \left(D_h^{(i)}\right)_{\mu s} \left(\overline{D}_h^{(i)}\right)_{\nu t}$$

Отсюда, используя (3.6), имеем

$$\mathcal{F}_g = \sum_{i=1}^{q}\sum_{\mu,\nu=1}^{n_i}\sum_{s,t=1}^{n_i} d_{\mu\nu}^{(i)}\left(D_g^{(i)}\right)_{st}\delta_{\mu\nu}\delta_{st}n_i^{-1} = \sum_{i=1}^{q}\left(\sum_{\mu=1}^{n_i} n_i^{-1}d_{\mu\mu}^{(i)}\right)\chi_g^{(i)}\ . \quad (4.14)$$

Равенство (4.14) показывает, что произвольный вектор $\mathcal{F}_g$ из H раскладывается по векторам – характерам неприводимых представлений группы G и, следовательно, эти характеры $\chi_g^{(i)}$ $i = 1, \dots, q$ образуют базис в пространстве H и поэтому их число

$$q = dim\, H = q'. \Delta$$

Замечание. После равенства (4.13) доказательство можно завершить и по-другому.

Положим $A = \frac{1}{|G|}\sum_{h\in G} D_{hgh^{-1}}^{(i)}$. Матрица A коммутирует с матрицами $D_f^{(i)}$ при $\forall\, f \in G$, поскольку, полагая $\tilde{h}^{-1} = h^{-1}f$ и используя лемму о сдвиге, мы получим, что

$$AD_f^{(i)} = \frac{1}{|G|}\sum_{h\in G} D_{hgh^{-1}}^{(i)}\, D_f = \frac{1}{|G|}\sum_{\tilde{h}\in G} D_f^{(i)}\, D_{\tilde{h}g\tilde{h}^{-1}}^{(i)} = D_f^{(i)}A.$$

В силу первой Леммы Шура $A = \lambda E$. Взяв след от матриц в обеих частях этого равенства, мы получим

$$\chi_g^{(i)} = \lambda n_i$$

и, следовательно,

$$A = n_i^{-1}\chi_g^{(i)}E.$$

Т.к. E – диагональная матрица, то

$$(A)_{\mu\nu} = n_i^{-1}\,\chi_g^{(i)}\delta_{\mu\nu}$$

Подставляя это выражение в (4.13) и суммируя там по ν, мы получим, что

$$\mathcal{F}_g = \sum_{i=1}^{q}\left(\sum_{\mu=1}^{n_i} d_{\mu\mu}^{(i)}\, n_i^{-1}\right)\chi_g^{(i)},$$

что и завершает доказательство теоремы.

4.2.3. Применение теорем Бернсайда

Приведём пример использования теорем Бернсайда и теории характеров. Пусть $G = D_3$. Найдём неприводимые представления этой группы. Классы сопряжённых элементов C_i группы D_3 известны (см. §1.1 и Задание в §1.4): $C_1 = \{g_1 = C_z(0)\}, C_2 = \left\{g_2 = C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), g_3 = C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right)\right\}, C_3 = \{g_4 = C_{a_1}(\pi), g_5 = C_{a_2}(\pi), g_6 = C_{a_3}(\pi)\}$. В силу 2-ой теоремы Бернсайда у группы D_3 три не эквивалентных неприводимых представления. Обозначим их размерности n_1, n_2, n_3. По первой теореме Бернсайда $\sum_{i=1}^{3} n_i^2 = 6$ и значит $n_1 = n_2 = 1$, $n_3 = 2$ (с точностью до перестановок индексов), т.е. группа D_3 имеет два одномерных неприводимых представления и одно двумерное. Обозначим их соответственно $D_g^{(A_1)}$, $D_g^{(A_2)}$ и $D_g^{(E)}$. Найдём характеры этих представлений. Пусть $D_g^{(A_1)}$ – это тождественное представление: $D_{g_i}^{(A_1)}$=1 $i = 1, 2, \ldots, 6$ (оно есть у каждой группы). В представлении $D_g^{(A_2)}$ пусть $g_2 \to d_1, g_3 \to d_1, g_i \to d_2$ $i = 4, 5, 6$ (элементы g_2, $g_3 \in C_2$, g_4,g_5, $g_6 \in C_3$, а в одномерном представлении элементам одного класса отвечает одна и та же матрица 1×1, т.е. – одно и то же число – характер элемента). Т.к. $g_3 = g_2^2$, то $g_3 \to d_1^2$ и, значит, d_1=+1; т.к. $g_4^2 = e \to 1$, то d_2^2 =1, d_2=±1. Если d_2 = 1, то $D_g^{(A_2)} = D_g^{(A_1)}$, поэтому полагаем d_2= - 1. Таким образом, характеры представления $D_g^{(A_2)}$ найдены. Для нахождения характера представления $D_g^{(E)}$ воспользуемся следствием 2 первой теоремы Бернсайда, согласно которому

$$\chi_g^{(A_1)} + \chi_g^{(A_2)} + 2\,\chi_g^{(E)} = 0 \text{ при } g \neq e.$$

Отсюда при $g = g_2$ получим

$$1+1+2\chi_{g_2}^{(E)} = 0,$$

т.е. $\chi_{g_2}^{(E)}$= -1, а при $g = g_4$

$$1+(-1)+2\chi_{g_4}^{(E)}=0,$$

откуда $\chi_{g_4}^{(E)}$=0. Кроме того, очевидно, $\chi_{g_1}^{(E)}$=2, ибо $g_1 \to E$, где E – единичная матрица 2-го порядка. Таким образом, мы можем построить следующую таблицу характеров группы D_3.

	g_1	g_2, g_3	g_4, g_5, g_6
$\chi_g^{(A_1)}$	1	1	1
$\chi_g^{(A_2)}$	1	1	-1
$\chi_g^{(E)}$	2	-1	0
$\chi_{\boldsymbol{g}}$	11	-1	-1

(о последней строке таблицы скажем чуть ниже).

Приведём теперь пример разложения приводимого представления группы D_3 на неприводимые. Рассмотрим представление $g \to D_g^{(l)}$ [6] группы $O^+(3)$ для элементов $g \in D_3 \subset O^+(3)$. Получим представление группы D_3 с известными характерами $\chi_{\boldsymbol{g}}$. Пусть для определённости $l = 5$.Тогда

$$\chi_{g_1}=11, \chi_{g_2}= \chi_{g_3}=-1, \chi_{g_4}= \chi_{g_5}=\chi_{g_6}=-1.$$

Удобно записать эти характеры в последней строке нашей таблицы. Разложим представление $g \to D_g^{(5)}, g \subset D_3$, на неприводимые, т.е. найдём коэффициенты p_1, p_2, p_3 в равенстве

$$D_g^{(5)} = p_1 D_g^{(A_1)} \oplus\ p_2 D_g^{(A_2)} \oplus\ p_3 D_g^{(E)}.$$

Согласно (4.10) имеем

$$p_1 = \frac{1}{6}(11 - 2 - 3) = 1, p_2 = \frac{1}{6}(11 - 2 + 3) = 2, p_3=\frac{1}{6}(11 \cdot 2 + 2) = 4.$$

Задание. Разложить на неприводимые представления группы D_3 представления группы $O^+(3)$ (рассматриваемые только для $g \in D_3$) весов $l = 4$ и $l = 6$.

[6] Представление $g \to D_g^{(l)}$ $g \in O^+(3)$ – это неприводимое представление группы $O^+(3)$ веса l, $l = 0,1,2, \dots \dots$; в этом представлении характеры поворотов на угол φ около любых осей, проходящих через начало координат, т.е. поворотов из $K(\varphi)$ (см. §1.3), суть числа $\sin(2l + 1)\frac{\varphi}{2} / \sin\frac{\varphi}{2}$ [4].

ГЛАВА V. АЛГЕБРА ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ. ПРОСТЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

«Наука – не пиво, в рот не вольёшь».
Русская пословица

§ 5.1 Базисные функции неприводимых представлений

5.1.1. Определения

Пусть $g \to T_g$ есть представление конечной группы G в линейном пространстве K над полем $F = \mathbb{C}$, χ_g – характер этого представления и для какого-то типа α неприводимого представления $g \to D_g^{(\alpha)}$ группы G [7] выполняется

$$n_\alpha = \left(\chi_g, \chi_g^{(\alpha)}\right)_G \geq 1$$

($\chi_g^{(\alpha)}$ – характер неприводимого представления типа α). Среди всех эквивалентных унитарных матричных представлений типа α фиксируем какое-либо одно $g \to D_g^{(\alpha)}$, $g \in G$, т.е. фиксируем унитарные матрицы $D_g^{(\alpha)}$.

<u>Определение.</u> *Будем говорить, что функция* [8] ψ *из* K *принадлежит i-j-ой строке представления типа* α *и писать* $\psi = \psi_i^{(\alpha)}$, *если найдутся такие функции – партнёры* $\psi_j^{(\alpha)}$ $j = 1, 2, \ldots, i-1, i+1, \ldots, n_\alpha$, *что*

$$T_g \psi = \sum_{j=1}^{n_\alpha} \left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ji} \psi_j^{(\alpha)}, \qquad g \in G \text{ } ^{9}) \tag{5.1}$$

---

[7] ранее мы обозначали неприводимые представления через $D_g^{(i)}$; далее нам удобней обозначать их через $D_g^{(\alpha)}, D_g^{(\beta)}, D_g^{(\gamma)}$ и т. д.

[8] В общем случае элементы пространства K не являются функциями. Но мы не строим здесь общую теорию, а нацелены на приложения, где, как правило, рассматриваемые пространства состоят из функций или из операторов, являющихся операторами умножения на функцию. Поэтому мы будем называть элементы пространства K функциями (желающие могут называть их векторами)

[9] ясно, что без фиксации матриц $D_g^{(\alpha)}$ данное определение не имело бы смысла, ибо числа $\left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ji}$ не были бы определены однозначно.

где $n_\alpha = dim\, D_g^{(\alpha)}$, $\psi_i^{(\alpha)} = \psi$. *Набор функций* $\psi_1^{(\alpha)}, \psi_2^{(\alpha)}, \ldots, \psi_{n_\alpha}^{(\alpha)}$ *называется каноническим базисом представления типа* α.

Свойства функций канонического базиса мы исследуем в § 5.3. А здесь мы получим необходимое и достаточное условие того, что функция ψ принадлежит i-ой строке представления типа α и покажем, как для ψ построить функции - партнёры.

5.1.2. Построение канонического базиса неприводимого представления

Определим в пространстве K операторы $P_{ji}^{(\alpha)}$ равенствами:

$$P_{ji}^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} \left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ji} T_g \quad i, j = 1,2, \ldots, n_\alpha. \tag{5.2}$$

Теорема 5.1. *Функция* ψ *из* K, $\psi \not\equiv \theta$, *принадлежит* i*-ой строке представления* $D_g^{(\alpha)}$, *если и только если*

$$\psi = P_{ii}^{(\alpha)} \psi. \tag{5.3}$$

При этом, если функция $\psi = \psi_i^{(\alpha)}$ *принадлежит* i *-ой строке представления типа* α, *то функции – партнёры* $\psi_j^{(\alpha)}$ *определяются соотношениями*

$$\psi_j^{(\alpha)} = P_{ji}^{(\alpha)} \psi_i^{(\alpha)} \quad j = 1,2, \ldots, n_\alpha\, , j \neq i. \tag{5.4}$$

Замечание. Таким образом Теорема 5.1 не только даёт необходимое и достаточное условие принадлежности функции ψ i-ой строке представления типа α, но даёт также способ построения канонического базиса по одной его функции.

Доказательство. Необходимость. Пусть функция $\psi = \psi_i^{(\alpha)}$ принадлежит i-ой строке представления типа α, т.е. найдутся такие функции $\psi_j^{(\alpha)}$, $j = 1, 2, \ldots, i$-1, i+1,…, n_α, что

$$T_g \psi_i^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^{n_\alpha} \left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ji} \psi_j^{(\alpha)}, \forall g \in G.$$

Умножим обе части этого равенства на $\frac{n_\alpha}{|G|}\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ii}$ и просуммируем по $g \in G$. Тогда, используя соотношения ортогональности, получим

$$\frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G}\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ii} T_g\psi_i^{(\alpha)} \equiv P_{ii}^{(\alpha)}\psi_i^{(\alpha)} =$$
$$= \sum_{j=1}^{n_\alpha}\psi_j^{(\alpha)}\frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G}\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ii}\left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ji} = \sum_{j=1}^{n_\alpha}\delta_{ij}\,\psi_j^{(\alpha)} = \psi_i^{(\alpha)},$$

т.е. равенство (5.3) доказано.

Достаточность. Пусть равенство (5.3) выполнено и $h \in G$. Применим оператор T_h к обеим частям (5.3) , после этого сделаем замену $f = hg$ и, используя тот факт, что в силу унитарности матриц $D_h^{(\alpha)}$ выполняется $\overline{D}_{h^{-1}}^{(\alpha)} = D_h^{(\alpha)^T}$,[10] получим:

$$T_h\psi = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G}\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ii} T_{hg}\psi = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(\overline{D}_{h^{-1}}^{(\alpha)}\overline{D}_f^{(\alpha)}\right)_{ii} T_f\psi =$$
$$= \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(D_h^{(\alpha)^T}\overline{D}_f^{(\alpha)}\right)_{ii} T_f\psi =$$
$$= \sum_{j=1}^{n_\alpha}\left(D_h^{(\alpha)}\right)_{ji}\frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(\overline{D}_f^{(\alpha)}\right)_{ji} T_f\psi = \sum_{j=1}^{n_\alpha}\left(D_h^{(\alpha)}\right)_{ji}\psi_j^{(\alpha)}, \qquad (5.5)$$

где $\psi_j^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(\overline{D}_f^{(\alpha)}\right)_{ji} T_f\psi_i^{(\alpha)} = P_{ji}\psi_i$, $\psi_i^{(\alpha)} = \psi$, и мы учли, что в силу Леммы о сдвиге $\{f | f = hg, \forall g \in G\} = G$. Из (5.5) следует, что функция ψ, удовлетворяющая условию (5.3), принадлежит $i-$ ой строке представления типа α и что функции – партнёры для неё задаются равенствами (5.4). Таким образом Теорема 5.1 доказана полностью.

В силу Теоремы 5.1, если известна функция $\psi_i^{(\alpha)}$, принадлежащая $i-$ ой строке представления типа α, то мы можем построить её функции−партнёры $\psi_j^{(\alpha)}$, $j = 1,2,\dots,i-1,\ i+1,\dots,n_\alpha$ по формуле (5.4). Но как найти исходную функцию $\psi_i^{(\alpha)}$?

Для этого, а также для изучения свойств функций канонического базиса $\psi_s^{(\alpha)}$, $s = 1,2,\dots,n_\alpha$ необходимо исследовать свойства операторов $P_{ji}^{(\alpha)}$. Кроме того, для разбиения пространства представления K на подпространства, в которых представление $g \to T_g$ кратно неприводимому, нам нужны будут операторы

$$P^{(\gamma)} := \sum_{i=1}^{n_\gamma} P_{ii}^{(\gamma)},\ \gamma = \alpha, \beta, \dots .$$

[10] Для любой матрицы D через D^T мы обозначаем транспонированную матрицу.

§ 5.2 Свойства операторов $P_{ji}^{(\alpha)}$ и $P^{(\alpha)}$

5.2.1. Свойства операторов $P_{ji}^{(\alpha)}$

Пусть α и β – типы неприводимых представлений конечной группы G.

Имеет место

Теорема 5.2. *Справедливы равенства*

$$P_{st}^{(\alpha)} P_{ji}^{(\beta)} = P_{si}^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \delta_{tj} \tag{5.6}$$

$$\left(P_{ji}^{(\beta)}\right)^* = P_{ij}^{(\beta)} \tag{5.7}$$

Доказательство. Докажем сначала равенство (5.6). Имеем

$$P_{st}^{(\alpha)} P_{ji}^{(\beta)} = \frac{n_\alpha n_\beta}{|G|^2} \sum_{g,h\in G} \left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{st} \left(\overline{D}_h^{(\beta)}\right)_{ji} T_g T_h.$$

Т. к. $T_g T_h = T_{gh}$, то, полагая $f = gh$, и, заменяя h на $g^{-1}f$ в $\left(\overline{D}_h^{(\beta)}\right)_{ji}$, получим (используя Лемму о сдвиге):

$$P_{st}^{(\alpha)} P_{ji}^{(\beta)} = \frac{n_\alpha n_\beta}{|G|^2} \sum_{g,f\in G} \left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{st} \left(\overline{D}_{g^{-1}f}^{(\beta)}\right)_{ji} T_f =$$

$$= \frac{n_\alpha n_\beta}{|G|^2} \sum_{g,f\in G} \left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{st} \sum_{k=1}^{n_\beta} \left(\overline{D}_{g^{-1}}^{(\beta)}\right)_{jk} \left(\overline{D}_f^{(\beta)}\right)_{ki} T_f =$$

$$= \frac{n_\alpha n_\beta}{|G|} \sum_{k=1}^{n_\beta} \sum_{f\in G} \left(\overline{D}_f^{(\beta)}\right)_{ki} T_f \frac{1}{|G|} \sum_{g\in G} \left(D_g^{(\beta)}\right)_{kj} \left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{st} =$$

$$= \sum_{k=1}^{n_\beta} \frac{n_\beta}{|G|} \sum_{f\in G} \left(\overline{D}_f^{(\beta)}\right)_{ki} T_f \delta_{\beta\alpha} \delta_{ks} \delta_{jt} = P_{si}^{(\beta)} \delta_{\alpha\beta} \delta_{jt} = P_{si}^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \delta_{jt}$$

и (5.6) доказано. Далее, учитывая, что $\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)^* = D_g^T$ и что $T_g^* = T_g^{-1} = T_{g^{-1}}$, получим

$$\left(P_{ji}^{(\beta)}\right)^* = \frac{n_\beta}{|G|}\sum_{g\in G}\left(D_g^{(\beta)}\right)_{ji} T_g^* = \frac{n_\beta}{|G|}\sum_{g\in G}\left(D_g^{(\beta)}\right)_{ji} T_{g^{-1}} =$$

$$= \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(D_{f^{-1}}^{(\beta)}\right)_{ji} T_f = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G}\left(\overline{D}_f^{(\beta)}\right)_{ij} T_f = P_{ij}^{(\beta)}$$

Теорема 5.2 доказана.

В дальнейшем для нас будут особенно важны операторы $P_{ii}^{(\alpha)}$. Для них из Теоремы 5.2 следует

Теорема 5.3. *Справедливы равенства:*

$$P_{ii}^{(\alpha)} P_{jj}^{(\beta)} = 0 \text{ при } (\alpha, i) \neq (\beta, j), \tag{5.8}$$

$$\left(P_{ii}^{(\alpha)}\right)^2 = P_{ii}^{(\alpha)}, \tag{5.9}$$

$$\left(P_{ii}^{(\alpha)}\right)^* = P_{ii}^{(\alpha)}. \qquad 5.10)$$

<u>*Следствие.*</u> Пусть $\varphi \in K$ и $P_{ii}^{(\alpha)}\varphi \neq \theta$. Тогда функция $\psi = P_{ii}^{(\alpha)}\varphi$ принадлежит $i-$ой строке представления α. Действительно, в силу (5.9)

$$P_{ii}^{(\alpha)}\psi = \left(P_{ii}^{(\alpha)}\right)^2 \varphi = \psi$$

и в силу Теоремы 5.1 следствие доказано.

5.2.2. Свойства операторов $P^{(\alpha)}$

Как мы уже говорили, наряду с операторами $P_{ii}^{(\alpha)}$ нам понадобятся в дальнейшем операторы

$$P^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{n_\alpha} P_{ii}^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G}\sum_{i=1}^{n_\alpha}\left(\overline{D}_g^{(\alpha)}\right)_{ii} T_g = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G}\bar{\chi}_g^{(\alpha)} T_g \tag{5.11}$$

Мы видим, что в отличие от операторов $P_{ii}^{(\alpha)}$ (и от $P_{ji}^{(\alpha)}$), операторы $P^{(\alpha)}$ не зависят от выбора матриц $D_g^{(\alpha)}$ представления типа α, т.е. от выбора базиса в пространстве представления. Свойства операторов $P^{(\alpha)}$ описываются следующим утверждением.

Теорема 5.4. *Справедливы равенства:*

$$P^{(\alpha)} P^{(\beta)} = 0 \text{ при } \alpha \neq \beta\,, \tag{5.12}$$

$$\left(P^{(\alpha)}\right)^2 = P^{(\alpha)}, \tag{5.13}$$

$$\left(P^{(\alpha)}\right)^* = P^{(\alpha)}, \tag{5.14}$$

$$T_g P^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} T_g\ ,\ \forall\, g \in G \tag{5.15}$$

$$\textstyle\sum_\alpha P^{(\alpha)} = I. \tag{5.16}$$

Доказательство. Соотношения (5.12) – (5.14) элементарно следуют из соотношений (5.8) – (5.10). Проверим справедливость (5.15). Имеем

$$T_g P^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G} \bar{\chi}_f^{(\alpha)}\, T_g T_f = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{f\in G} \bar{\chi}_f^{(\alpha)}\, T_{gfg^{-1}} T_g = \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{h\in G} \bar{\chi}_{g^{-1}hg}^{(\alpha)}\, T_h T_g =$$
$$= \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{h\in G} \bar{\chi}_h^{(\alpha)}\, T_h T_g = P^{(\alpha)} T_g,$$

где мы положили $h = gfg^{-1}$ и использовали равенство характеров сопряжённых элементов $g^{-1}hg$ и h. Равенство (5.15) доказано. Докажем (5.16).
Имеем:

$$\sum_\alpha P^{(\alpha)} = \sum_\alpha \frac{n_\alpha}{|G|}\sum_{g\in G} \bar{\chi}_g^{(\alpha)}\, T_g = \sum_{g\in G} \frac{1}{|G|}\sum_\alpha n_\alpha\, \bar{\chi}_g^{(\alpha)} T_g.$$

Но здесь в силу следствия из первой теоремы Бернсайда при $g \neq e$ выполняется

$$\sum_\alpha n_\alpha\, \bar{\chi}_g^{(\alpha)} = 0,$$

и поэтому

$$\sum_\alpha P^{(\alpha)} = \frac{1}{|G|}\sum_\alpha n_\alpha\, \bar{\chi}_e^{(\alpha)} T_e$$

Учитывая здесь очевидные равенства $\chi_e^{(\alpha)} = n_\alpha$, $T_e = I$, получим

$$\sum_\alpha P^{(\alpha)} = \frac{1}{|G|}\sum_\alpha n_\alpha^2\, I = I.$$

Теорема 5.4 доказана.

5.2.3. Важные замечания

1. Доказательство свойств (5.12) – (5.14) операторов $P^{(\alpha)}$ использует свойства операторов $P_{ii}^{(\alpha)}$, зависящих от матричных элементов $\left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ii}$, т.е. от конкретного выбора одной из эквивалентных форм матриц $D_g^{(\alpha)}$. Однако сами операторы $P^{(\alpha)}$ не зависят от этого выбора, т.к., согласно (5.11), они определяются только характерами $\chi_g^{(\alpha)}$представления типа α, которые одинаковы для всех эквивалентных матриц $D_g^{(\alpha)}$.
2. Оператор A, для которого $A^* = A$ и $A^2 = A$, называется проекционным (проектором). Поэтому соотношения (5.8) – (5.10) и (5.12) – (5.14) означают, что каждое из семейств операторов $P^{(\alpha)}$ и $P_{ii}^{(\alpha)}$, $i = 1,2, \ldots,\ n_\alpha$ является семейством взаимно ортогональных проекторов; α пробегает здесь множество всех различных типов не эквивалентных неприводимых представлений группы G.
3. Рассмотрим случай, когда пространство K представления $g \to T_g$ бесконечномерно. Пусть ω - любой элемент из K. Определим линейное пространство

$$K_\omega = \left\{ \sum_{f \in G} c_f\, T_f \omega |\ c_f - \text{ любые числа}, c_f \in \mathbb{C} \right\}$$

Ясно, что $K_\omega \subset K$ и что K_ω инвариантно для операторов T_g, $g \in G$. Поэтому мы можем рассмотреть представление $g \to T_g$ в K_ω. Поскольку K_ω - конечномерно ($dim\, K_\omega \le |G|$), проводим доказательство теорем 5.1 – 5.4 в этом пространстве и устанавливаем соотношения (5.6) – (5.16) в K_ω. Следовательно, операторные равенства (5.6) – (5.16) верны на любой функции из K_ω и, значит, на функции ω. Так как $\omega -$ произвольная функция из K, то равенства (5.6) – (5.16) будут справедливы не только в K_ω, но и в K.

§ 5.3 Свойства функций канонических базисов и оценка матричных элементов (простое правило отбора)

5.3.1. Свойства канонического базиса

Пусть $g \to T_g -$ представление группы G в конечномерном пространстве K. Всюду далее $\psi_s^{(\alpha)}$, $\varphi_t^{(\alpha)}$,$f_j^{(\beta)}$ – это функции из пространства K. Пусть $\psi_i^{(\alpha)}$ принадлежит $i -$ой строке представления типа α и $\psi_j^{(\alpha)}, j = 1,2, \ldots, i\text{-}1,\ i\text{+}1, \ldots, n_\alpha$

суть функции – партнёры для функции $\psi_i^{(\alpha)}$. Выясним некоторые свойства канонического базиса $\psi_1^{(\alpha)}, \dots, \psi_{n_\alpha}^{(\alpha)}$.

1. Если $\psi_j^{(\alpha)}$ - $j-$ ый партнёр функции $\psi_i^{(\alpha)}$, то функция $\psi_j^{(\alpha)}$ принадлежит $j-$ ой строке представления типа α и её функции – партнёры $\tilde{\psi}_s^{(\alpha)}$ совпадают с функциями $\psi_s^{(\alpha)}, s = 1,2, \dots, n_\alpha$.

Действительно, по Теореме 5.1 $\psi_j^{(\alpha)}$=$P_{ji}^{(\alpha)}\psi_i$. Применим к обеим частям этого равенства оператор $P_{jj}^{(\alpha)}$. Тогда в силу (5.6)

$$P_{jj}^{(\alpha)}\psi_j^{(\alpha)} = P_{jj}^{(\alpha)}P_{ji}^{(\alpha)}\psi_i^{(\alpha)} = \psi_j^{(\alpha)},$$

и, значит, $\psi_j^{(\alpha)}$ принадлежит $j-$ ой строке представления $D_g^{(\alpha)}$. Далее $s-$ ая функция – партнёр $\tilde{\psi}_s^{(\alpha)}$ для $\psi_j^{(\alpha)}$ по Теореме 5.1 равна $P_{sj}^{(\alpha)}\psi_j^{(\alpha)}$. Поэтому, используя (5.6), получим, что

$$\tilde{\psi}_s^{(\alpha)} = P_{sj}^{(\alpha)}\psi_j^{(\alpha)} = P_{sj}^{(\alpha)}P_{ji}^{(\alpha)}\psi_i^{(\alpha)} = P_{si}^{(\alpha)}\psi_i^{(\alpha)} = \psi_s^{(\alpha)}.$$

Свойство 1 доказано. Из этого свойства следует, что канонический базис не зависит от того, с функции какой строки представления $D_g^{(\alpha)}$ мы начали построение, и что

$$T_g\psi_s^{(\alpha)} = \sum_{t=1}^{n_\alpha}\left(D_g^{(\alpha)}\right)_{ts}\psi_t^{(\alpha)} \quad s = 1,2, \dots, n_\alpha.$$

Следовательно, подпространство $\mathcal{L}\left\{\psi_1^{(\alpha)}, \dots, \psi_{n_\alpha}^{(\alpha)}\right\}$ - линейная оболочка функций $\psi_1^{(\alpha)}, \dots, \psi_{n_\alpha}^{(\alpha)}$ – инвариантно для операторов T_g и в нём представление $g \to T_g$ неприводимо и имеет тип α.

2. Пусть функции $\varphi_i^{(\alpha)}$, i =1,…, n_α, и $f_j^{(\beta)}$, j =1,…, n_β, образуют канонические базисы представления $g \to T_g$ типов α и β в пространстве K. При $\alpha = \beta$ будем считать, что $D_g^{(\beta)} = D_g^{(\alpha)}$. Тогда функции $\varphi_i^{(\alpha)}$ и $f_j^{(\beta)}$ ортогональны при $(\alpha, i) \neq (\beta, j)$, а при $(\alpha, i) = (\beta, j)$ скалярное произведение $(\varphi_i^{(\alpha)},\ f_i^{(\beta)})$ не зависит от номера i.

Действительно, в силу Теоремы 5.1 и соотношений (5.6), (5.7)

$$(\varphi_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) = (P_{ii}^{(\alpha)}\varphi_i^{(\alpha)}, P_{jj}^{(\beta)}f_j^{(\beta)}) = (P_{jj}^{(\beta)}P_{ii}^{(\alpha)}\varphi_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) = 0 \text{ при } (\alpha, i) \neq (\beta, j).$$

Далее в силу (5.7), (5.6) и (5.3)

$$(\varphi_i^{(\alpha)}, f_i^{(\alpha)}) = (P_{i1}^{(\alpha)}\varphi_1^{(\alpha)}, P_{i1}^{(\alpha)} f_1^{(\alpha)}) = \left(P_{1i}^{(\alpha)} P_{i1}^{(\alpha)}\varphi_1^{(\alpha)}, f_1^{(\alpha)}\right) = (P_{11}^{(\alpha)}\varphi_1^{(\alpha)}, f_1^{(\alpha)}) = (\varphi_1^{(\alpha)}, f_1^{(\alpha)})\ i = 1,2,\ldots, n_\alpha.$$

Свойство 2 можно выразить одним соотношением:

$$(\varphi_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}(\varphi_1^{(\alpha)}, f_1^{(\beta)}) \quad i = 1,2,\ldots, n_\alpha, j = 1,2,\ldots, n_\beta \qquad (5.17)$$

и описать словами при $(\alpha, i) \neq (\beta, j)$ так:

ортогональны между собой функции $\varphi_i^{(\alpha)}$ и $f_j^{(\beta)}$

a) принадлежащие любым строкам i, j не эквивалентных неприводимых представлений любых типов α и β;
b) принадлежащие различным строкам i, j неприводимых представлений любых типов α, β.

При $(\alpha, i) = (\beta, j)$ свойство 2 обычно используется в ситуации $\varphi_i^{(\alpha)} \equiv f_i^{(\alpha)}$и тогда оно означает, что нормы функций канонического базиса одинаковы.

5.3.2. Оценка матричных элементов

Применим полученные результаты для оценки матричных элементов операторов. Необходимость в подобных оценках возникает в квантовой механике и в физике твёрдого тела, например, при формулировке правил отбора разрешённых и запрещённых переходов (см. Введение). Подробнее мы будем говорить об этом позже, а здесь ограничимся лишь формальной стороной дела.
Пусть $g \to T_g$ –представление группы G в пространстве $K, Q -$ некоторый линейный оператор, действующий из K в K, и коммутирующий с операторами T_g

$$QT_g\psi = T_gQ\psi \text{ для } \forall g \in G \text{ и } \forall \psi \in K, \qquad (5.18)$$

Пусть далее функции $\varphi_i^{(\alpha)}$ и $f_j^{(\beta)}$ - те же, что и в начале этого параграфа и

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = \left(\varphi_i^{(\alpha)}, Qf_j^{(\beta)}\right).$$

Требуется выяснить, при каких i, j, α, β матричный элемент $a_{ij}^{\alpha,\beta}$ равен нулю независимо от любых свойств функций $\varphi_i^{(\alpha)}$, $f_j^{(\beta)}$и оператора Q кроме свойств симметрии.

Ответ на этот вопрос получается очень просто с помощью соотношений (5.17), (5.18). Действительно, рассмотрим функции $u_j^{(\beta)} = Qf_j^{(\beta)}$. В силу (5.18)

$$T_g u_j^{(\beta)} = T_g Q f_j^{(\beta)} = Q T_g f_j^{(\beta)} = Q \sum_{s=1}^{n_\beta} \left(D_g^{(\beta)}\right)_{sj} f_s^{(\beta)} = \sum_{s=1}^{n_\beta} \left(D_g^{(\beta)}\right)_{sj} u_s^{(\beta)}.$$

Следовательно, функция $u_j^{(\beta)}$ преобразуется под действием операторов T_g так же, как $f_j^{(\beta)}$, т.е. принадлежит строке номер j представления типа β группы G. Применяя соотношения (5.17) к паре $\varphi_i^{(\alpha)}$, $u_j^{(\beta)}$, имеем

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = \left(\varphi_i^{(\alpha)}, u_j^{(\beta)}\right) = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}(\varphi_1^{(\alpha)}, Qf_1^{(\beta)}) \qquad (5.19)$$

Следовательно, $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0$, если $\alpha \neq \beta$ то при любых i,j, и если $\alpha = \beta$, то при $i \neq j$. При $\alpha = \beta$ и $i = j$ величина $a_{ij}^{\alpha,\beta}$ не зависит от номера i.

5.3.3. Разрешённые и запрещённые переходы с учетом симметрии

Возвратимся к вопросу о запрещённых и разрешённых переходах, который мы обсуждали во Введении (В5). Теперь мы можем переформулировать условие запрещенности (разрешённости) перехода, используя наши знания по теории представлений. Пусть Z −квантовая система n частиц, $G -$ конечная группа симметрии системы Z, т.е. $gZ = Z$ при $\forall g \in G$. Обозначим через $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ координаты $i -$ ой частицы и положим $r = (r_1, \dots, r_n)$, $R = \{r\}$. В пространстве $\mathcal{L}_2(R)$ рассмотрим представление группы G операторами T_g: $T_g\psi(r) = \psi(g^{-1}r)$ для $\forall\psi(r) \in \mathcal{L}_2(R)$. Пусть $H_0(r)$ −оператор энергии системы Z. Т.к. $G -$ группа симметрии системы Z, то $H_0(gr) = H_0(r)$, собственные подпространства оператора $H_0(r)$ будут инвариантны для операторов T_g, и операторы T_g в этих подпространствах образуют представления группы G (см. § 2.4). Пусть λ и ν - два различных собственных значения оператора $H_0(r)$, U_λ и U_ν - соответствующие собственные подпространства, и представления $g \rightarrow T_g$ в U_λ и U_ν неприводимы и имеют соответственно типы α (в U_λ)и β (в U_ν). Обозначим канонические базисы представлений в $U_\lambda^{(\alpha)} = U_\lambda$ через $\varphi_1^{(\alpha)}, \dots, \varphi_{n_\alpha}^{(\alpha)}$ и в $U_\nu^{(\beta)} = U_\nu$ через $f_1^{(\beta)}, \dots, f_{n_\beta}^{(\beta)}$, где n_α и n_β −размерности представлений типов α и β.

Пусть, далее, на систему Z действует возмущение εQ, т.е. оператор энергии возмущённой системы есть $H_\varepsilon(r) = H_0(r) + \varepsilon Q$. Считаем далее, что $Qf_j^{(\beta)} \in \mathcal{L}_2(R), j = 1,2, \dots, n_\beta$
и полагаем

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = \left(\varphi_i^{(\alpha)}, Qf_j^{(\beta)}\right).$$

В силу (0.15) условие запрещённости перехода "$\lambda \to \nu$" – это равенства

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0 \text{ для любых } i, j.$$

Мы будем – говорить о запрещённости перехода "λ→ν" не для конкретных значений λ и ν, а для любых уровней энергии λ и ν, для которых связанные состояния имеют симметрию соответственно α и β. Поэтому точнее говорить не о переходе "λ→ν" , а о переходе "$\alpha \to \beta$". Таким образом, для запрещённости перехода "$\alpha \to \beta$" равенство $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0$ должно следовать из свойств симметрии функций $\varphi_i^{(\alpha)}$, $f_j^{(\beta)}$, $Qf_j^{(\beta)}$, а не из их конкретного вида. Если соображения симметрии не позволяют утверждать справедливость равенства $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0\ \forall i, j$, то переход "$\alpha \to \beta$" называют разрешённым, хотя для каких-то конкретных состояний $\varphi_i^{(\alpha)}$, $f_j^{(\beta)}$ разрешённый переход может не реализоваться, если случайно окажется что $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0\ \forall i, j$.

5.3.4. Простое правило отбора

Рассмотрим теперь частный случай оператора $Q(r)$, а именно случай, когда оператор $Q(r)$ коммутирует с преобразованием $T_g, g \in G$. Тогда в силу (5.19) можно утверждать, что переход "$\alpha \to \beta$" запрещён при $\beta \neq \alpha$ и разрешён при $\beta = \alpha$. Этот вывод называется простым правилом отбора и сделан для случая, когда выполняется (5.18).

Рассмотренный нами случай оказался очень простым. Однако, если равенство (5.18) не верно, то использованный подход не применим. В то же время, ситуации , когда равенство (5.18) не выполняется , встречаются в приложениях довольно часто. Пусть, например, на квантовую систему с гамильтонианом H и группой симметрии G накладывается внешнее возмущение, не инвариантное относительно преобразований T_g, $g \in G$. В этом случае возникает необходимость оценки матричных элементов $a_{ij}^{\alpha,\beta} = \left(\varphi_i^{(\alpha)}, Qf_j^{(\beta)} \right)$ с оператором Q, не коммутирующим с преобразованиями T_g.Чтобы выяснить, когда $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0$ в этой ситуации, нам необходимо будет ввести новое понятие – произведение представлений – и изучить его свойства. Это будет сделано в главе VI.

§ 5.4 Разложение пространства представления

5.4.1. Стандартный подход

Пусть $g \to T_g$ – произвольное унитарное представление группы G в конечномерном пространстве K, D_g – матрицы операторов T_g в произвольном ортонормированном базисе $\psi_1, \dots, \psi_n$ в K, $\chi_g -$ характеры элементов $g \in G$ в представлении $g \rightarrow D_g$. Вычислим $a = \left(\chi_g, \chi_g\right)_G$. Если $a = 1$, то представление $g \rightarrow T_g$ в K неприводимо. Допустим $a > 1$. По формуле (4.5) находим числа p_α, показывающие, сколько раз неприводимое представление типа α содержится в представлении $g \rightarrow T_g$.

Пусть $\Gamma = \{\alpha | p_\alpha \geq 1\}$. Выбираем произвольное $\alpha \in \Gamma$ и находим в K элемент f_1, для которого

$$f_{11}^{(\alpha)} := P_{11}^{(\alpha)} f_1 \neq \theta.$$ [11]

В силу следствия Теоремы 5.3 функция $f_{11}^{(\alpha)}$ принадлежит первой строке представления типа α.

Применяя операторы $P_{s1}^{(\alpha)}$ (см. (5.4)), мы строим функции – партнёры $f_{1s}^{(\alpha)}$ для $f_{11}^{(\alpha)}$:

$$f_{1s}^{(\alpha)} = P_{s1}^{(\alpha)} f_{11}^{(\alpha)}, s = 1,2, \ldots, n_\alpha.$$ [12]

Обозначим через $R_1^{(\alpha)}$ линейную оболочку функций $f_{1s}^{(\alpha)}$, $s = 1,2, \ldots, n_\alpha$. Очевидно, в пространстве $R_1^{(\alpha)}$ представление $g \rightarrow T_g$ неприводимо и имеет тип α. Пусть $\overline{K}_1 = K \ominus R_1^{(\alpha)}$ – ортогональное дополнение пространства $R_1^{(\alpha)}$ до K. Так как операторы T_g унитарные, то пространство $\overline{K}_1$ инвариантно для T_g. Если $p_\alpha \geq 2$, то мы можем найти в $\overline{K}_1$ такую функцию f_2, что $P_{11}^{(\alpha)} f_2 \neq \theta$. Положим $f_{21}^{(\alpha)} = P_{11}^{(\alpha)} f_2$, $f_{2s}^{(\alpha)} = P_{s1}^{(\alpha)} f_{21}^{(\alpha)}, s = 1,2, \ldots, n_\alpha$ и построим пространство $R_2^{(\alpha)}$ как линейную оболочку функций $f_{2j}^{(\alpha)}, j = 1,2, \ldots, n_\alpha$. Тогда в пространстве $R_2^{(\alpha)}$ представление $g \rightarrow T_g$ неприводимо и имеет тип α. Пусть $\overline{K}_2 = \overline{K}_1 \ominus R_2^{(\alpha)}$. Если $p_\alpha \geq 3$, то мы повторяем проведённые рассуждения в пространстве $\overline{K}_2$ и т.д. до тех пор, пока не построим p_α пространств $R_1^{(\alpha)}, R_2^{(\alpha)}, \ldots, R_{p_\alpha}^{(\alpha)}$. Далее полагаем $K^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{p_\alpha} \oplus R_i^{(\alpha)}, \overline{K}_\alpha = K \ominus K^{(\alpha)}$.

Если $\overline{K}_\alpha \neq \{\emptyset\}$, то $\exists\, \beta \in \Gamma$, $\beta \neq \alpha$, и все рассуждения, проведённые в пространстве K для типа α, мы повторяем в пространстве $\overline{K}_\alpha$ для типа β. В результате будут построены взаимно ортогональные пространства $R_1^{(\beta)}, R_2^{(\beta)}, \ldots, R_{p_\beta}^{(\beta)}$, в

[11] Функция f_1 найдётся, например, среди базисных функций , $\psi_1, \ldots, \psi_n$, ибо иначе выполнялось бы равенство $P_{11}^{(\alpha)} \psi = 0$ при $\forall\, \psi \in K$ и тогда в силу Теоремы 5.1 в пространстве K не было бы функций, принадлежащих первой строке представления типа α, что противоречит условию $\alpha \in \Gamma$.

[12] у функции $f_{ts}^{(\alpha)}$ (пока t=1) индекс t нумерует представления типа α, входящие в D_g: t=1,2,…, p_α; индекс s указывает на строку представления $D_g^{(\alpha)}$, которой принадлежит функция $f_{ts}^{(\alpha)}$

каждом из которых представление $g \to T_g$ неприводимо и имеет тип β. Пусть $K^{(\beta)} = \sum_{i=1}^{p_\beta} \oplus R_i^{(\beta)}$. Далее полагаем $\overline{K}_{\alpha,\beta} = \overline{K}_\alpha \ominus \sum_{j=1}^{p_\beta} R_j^{(\beta)}$. Если $\overline{K}_{\alpha,\beta} \neq \{\emptyset\}$, то $\exists\, \gamma, \gamma \in \Gamma, \gamma \neq \alpha, \beta$, и мы повторяем в пространстве $\overline{K}_{\alpha,\beta}$ для типа γ все рассуждения, проведённые в $\overline{K}_\alpha$ для типа β и т.д.. В итоге мы исчерпаем пространство K, построив для каждого $\alpha' \in \Gamma$ пространства $R_i^{(\alpha')}$, $i = 1,2, \dots, p_{\alpha'}$, в которых представление $g \to T_g$ неприводимо и имеет тип α':

$$K = \sum_{\alpha' \in \Gamma} \oplus K^{(\alpha')} = \sum_{\alpha' \in \Gamma} \sum_{i=1}^{p_{\alpha'}} \oplus R_i^{(\alpha')}. \tag{5.20}$$

Одновременно в каждом из подпространств $R_i^{(\alpha')}$ нами построен канонический базис представления типа α'.

5.4.2. Альтернативный вариант

Для разбиения пространства K на подпространства $K^{(\alpha')}$, $\alpha' \in \Gamma$, можно было действовать по-другому. Для каждого $\alpha' \in \Gamma$ положим

$$K_0^{(\alpha')} = P^{(\alpha')} K = \{P^{(\alpha')} \psi \,|\, \forall\, \psi \in K\}.$$

Пусть $\psi_1, \dots, \psi_n$ – базис в K, тогда $\psi = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \psi_i$, и

$$K_0^{(\alpha')} = \mathcal{L}\{P^{(\alpha')}\psi_1\,, P^{(\alpha')}\psi_2\,, \dots, P^{(\alpha')}\psi_n\,\}.$$

Т. к. $\sum_{\alpha' \in \Gamma} P^{(\alpha')} = I$ в пространстве K, то

$$K = \sum_{\alpha' \in \Gamma} \oplus K_0^{(\alpha')} \tag{5.21}$$

Покажем, что это разложение совпадает с разложением (5.20), т.е. что $K_0^{(\alpha')} = K^{(\alpha')}$. Но предварительно заметим, что при $\forall\, \alpha, \alpha' \in \Gamma$ для любых функций $\omega^{(\alpha')}$ из $K^{(\alpha')}$ и $\omega^{(\alpha)}$ из $K^{(\alpha)}$ выполняется

$$P^{(\alpha')} \omega^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} \omega^{(\alpha')} = \delta_{\alpha\alpha'} \omega^{(\alpha)}. \tag{5.22}$$

Действительно, по построению пространство $K^{(\alpha')}$ состоит из функций, принадлежащих различным строкам представления типа α' и из их линейных комбинаций. Но для любой функции ψ, принадлежащей, например, j – ой строке представления типа α' по Теореме 5.1 выполняется $\psi = P_{jj}^{(\alpha')}\psi$ и поэтому в силу (5.8), (5.9)

$$P^{(\alpha)}\psi = P^{(\alpha)}P_{jj}^{(\alpha')}\psi = \sum_{i=1}^{n_\alpha} P_{ii}^{(\alpha)} P_{jj}^{(\alpha')}\psi = \left(P_{jj}^{(\alpha')}\right)^2 \delta_{\alpha\alpha'}\psi = \delta_{\alpha\alpha'}P_{jj}^{(\alpha')}\psi = \delta_{\alpha\alpha'}\psi.$$

Следовательно, для каждой функции $\omega^{(\alpha')}$ из $K^{(\alpha')}$ выполняется равенство (5.22). Проверка (5.22) для функции $\omega^{(\alpha)}$ проводится аналогично.

Переходим к доказательству равенства $K^{(\alpha')} = K_0^{(\alpha')}$. Пусть $\omega \in K^{(\alpha')}$. В силу (5.22) $\omega = P^{(\alpha')}\omega$ и поэтому $\omega \in K_0^{(\alpha')}$. Значит $K^{(\alpha')} \subseteq K_0^{(\alpha')}$. Рассмотрим теперь произвольную функцию $u \in K_0^{(\alpha')}$ для какого-то фиксированного $\alpha' = \alpha$. По определению пространства $K_0^{(\alpha)}$ найдётся функция $\psi \in K$ такая, что $u = P^{(\alpha)}\psi$. В силу свойств (5.8),(5.10) функция u ортогональна любым функциям v из пространств $K^{(\alpha')}$ при $\alpha' \neq \alpha$, ибо $(u, v) = \left(P^{(\alpha)}\psi, v\right) = \left(P^{(\alpha)}\psi, P^{(\alpha')}v\right)$=$\left(\psi, P^{(\alpha)}P^{(\alpha')}v\right)$=0 при $\alpha' \neq \alpha$. Поэтому и вследствие разложения (5.20) функция u из $K_0^{(\alpha)}$ принадлежит $K^{(\alpha)}$, т.е. $K_0^{(\alpha)} \subseteq K^{(\alpha)}$. Т.к. $\alpha -$ это любое значение α' из Γ, то с учётом доказанного выше $K_0^{(\alpha')} = K^{(\alpha')}$ при $\forall\, \alpha'$.
Для нахождения канонического базиса (при $p_{\alpha'} = 1$) или базисов (при $p_{\alpha'} \geq 2$) представлений типа α' надо действовать так же, как в п. 5.4.1, но не во всём пространстве K , а в подпространстве $K_0^{(\alpha')}$.

ГЛАВА VI. ПРЯМОЕ (ТЕНЗОРНОЕ) ПРОИЗВЕДЕНИЕ МАТРИЦ И ПРЕДСТАВЛЕНИЙ. ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ГРУПП

«То, что не ясно, следует выяснить».
Конфуций, (551-479 г. до н.э.)

§ 6.1 Облегчающий пример

Чтобы понять происхождение тех определений и понятий, о которых пойдёт речь, рассмотрим следующий пример. Пусть H_i – гамильтониан электрона номер i в поле ядра атома гелия. В атомных единицах

$$H_i = -\frac{1}{2}\,\Delta_i - \frac{2}{|r_i|}\,,$$

где

$$r_i = (x_i, y_i, z_i),\ \Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\,.$$

Пусть E_1 и $E_2 -$ какие-то собственные значения операторов H_1 и H_2:

$$H_1 u(r_1) = E_1 u(r_1),\ H_2 v(r_2) = E_2 v(r_2). \qquad (6.1)$$

Обозначим через $W_i = W_i(E_i)$ собственное подпространство оператора H_i, отвечающее собственному значению E_i; пусть $n_i = dim W_i$. Функции из W_i описывают связанные состояния i –ого электрона с энергией E_i в поле ядра атома гелия. Связанные состояния двухчастичной системы с энергией $E = E_1 + E_2$ в пренебрежении членом взаимодействия электронов между собой будут описываться собственными функциями оператора $H = H_1 + H_2$, отвечающими собственному значению $E = E_1 + E_2$, т.е. решениями ψ уравнения

$$H\psi = E\psi. \qquad (6.2)$$

Пусть $W = W(E) -$ собственное подпространство оператора H, отвечающее числу E. Нетрудно проверить, что для любых функций $u(r_1) \in W_1$ и $v(r_2) \in W_2$ функция $\omega = u(r_1)v(r_2) \in W$. Поэтому в W содержатся все линейные комбинации возможных произведений функций из W_1 на функции из W_2, т.е.

$$W \supseteq W_0 = \{\omega(r_1, r_2) | \omega(r_1, r_2) = \textstyle\sum_{i,j} c_{ij}\, u_i(r_1) v_j(r_2),\ c_{ij} \text{ –любые числа}\}^{13};$$

[13] можно доказать, что $W = W_0$, но для нас это не существенно.

где $u_i(r_1),\ i = 1,2,\dots,n_1$ и $v_j(r_2),\ j = 1,2,\dots,n_2$ – произвольные базисы пространств W_1 и W_2.

Построение пространства W_0 из элементов пространств W_1 и W_2 является частным случаем построения тензорного произведения пространств.

Если в пространствах функций, зависящих от r_1 и r_2, были определены скалярные произведения $(u(r_1),\tilde{u}(r_1))_1$ и $(v(r_2),\tilde{v}(r_2))_2$ то в W_0 для любых элементов

$$\omega(r_1,r_2) = \sum_{i,j} c_{ij}\, u_i(r_1)v_j(r_2), \qquad \widetilde{\omega}(r_1,r_2) = \sum_{s,t} \tilde{c}_{st}\, u_s(r_1)v_t(r_2).$$

можно определить скалярное произведение равенством

$$(\omega(r_1,r_2),\widetilde{\omega}(r_1,r_2)) = \sum_{\substack{i,j\\ s,t}} c_{ij}\bar{\tilde{c}}_{st}\,(u_i(r_1),u_s(r_1))_1\big(v_j(r_2),v_t(r_2)\big)_2,$$

Пусть в пространствах W_i заданы операторы $T^{(i)}$, $W_i \xrightarrow{T^{(i)}} W_i$, действующие каждый только на функции от r_i. Тогда в пространстве W_0 мы можем естественным образом определить линейный оператор $T = T^{(1)} \otimes T^{(2)}$ по формуле

$$T\omega = (T^{(1)} \otimes T^{(2)})\omega \coloneqq \sum_{ij} c_{ij}\, T^{(1)}u_i(r_1)T^{(2)}v_j(r_2) \tag{6.3}$$

Определение (6.3) есть частный случай определения тензорного произведения операторов.

Если оператор $T^{(1)}$ в пространстве W_1 имел в базисе $u_i(r_1)$ матрицу $D^{(1)}$, а оператор $T^{(2)}$ в пространстве W_2 имел в базисе $v_j(r_2)$ матрицу $D^{(2)}$, то матричные элементы матрицы D оператора T в базисе $u_i v_j$ пространства W_0 можно получить из равенства:

$$Tu_iv_j = T^{(1)}u_iT^{(2)}v_j = \sum_{s=1}^{n_1}\big(D^{(1)}\big)_{si}\,u_s\sum_{t=1}^{n_2}\big(D^{(2)}\big)_{tj}\,v_t = \sum_{s,t}\big(D^{(1)}\big)_{si}\,\big(D^{(2)}\big)_{tj}u_sv_t$$

Т.к. базис в W_0 занумерован двумя индексами, то номера строк и столбцов матрицы D оператора T в базисе u_iv_j тоже будут нумероваться двумя индексами, а элементы матрицы D – четырьмя индексами: $D_{st,ij} = D^{(1)}_{si}\cdot D^{(2)}_{tj}$. Матрица D, отвечающая оператору T, называется прямым (тензорным) произведением матриц $D^{(1)}$и $D^{(2)}$, отвечающих операторам $T^{(1)}$и $T^{(2)}$. В этом случае пишут:

$$D = D^{(1)} \times D^{(2)}.$$

Наконец, пусть операторы $T^{(1)} = T_g^{(1)}$ и $T^{(2)} = T_g^{(2)}$, $g \in G$, таковы, что соответствие $g \to T_g^{(i)}$ есть представление группы G в пространстве W_i и пусть $T_g = T_g^{(1)} \otimes T_g^{(2)}$. Тогда отображение $g \to T_g$ является представлением группы G в пространстве W_0, ибо для $\forall\, g, f \in G$

$$T_g T_f u_i v_j = (T_g^{(1)} \otimes T_g^{(2)}) \cdot (T_f^{(1)} \otimes T_f^{(2)}) u_i v_j = T_g^{(1)} T_f^{(1)} u_i T_g^{(2)} T_f^{(2)} v_j =$$
$$= T_{gf}^{(1)} u_i T_{gf}^{(2)} v_j = \left(T_{gf}^{(1)} \otimes T_{gf}^{(2)}\right) u_i v_j = T_{gf} u_i v_j.$$

Представление $g \to T_g$ называется тензорным произведением представлений $g \to T_g^{(1)}$и $g \to T_g^{(2)}$, а матрицы D_g операторов T_g будут, согласно сказанному выше, тензорными произведениями матриц $D_g^{(1)}$и $D_g^{(2)}$ операторов $T_g^{(1)}$ в W_1 и $T_g^{(2)}$ в W_2.

§ 6.2 Тензорное произведение и его свойства

6.2.1. Тензорное произведение пространств ,матриц и операторов (определения)

После того, как интересующие нас понятия естественным образом возникли в конкретной физической ситуации, проведём абстрактный подход.

<u>Определение.</u> Пусть R_1 и R_2 - конечномерные линейные пространства над полем F и вектора $\varphi_i \in R_1$, $i = 1, \dots, n_1$ и $f_j \in R_2$, $j = 1, \dots, n_2$ образуют базисы в пространствах R_1 и R_2. Назовём пространство R тензорным (прямым) произведением пространств R_1 и R_2 и будем писать $R = R_1 \otimes R_2$, если R есть линейная оболочка пар $\varphi_i f_j, i = 1, \dots, n_1$,
$j = 1, \dots, n_2$, т.е. если

$$R = \left\{ \omega \middle| \omega = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} c_{ij}\, \varphi_i f_j, \forall\, c_{ij} \in F \right\},$$

где под суммой

$$\omega = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} c_{ij}\, \varphi_i f_j$$ *понимается набор пар $\varphi_i f_j$, в котором каждой паре сопоставлено число $c_{ij} \in F$. Операции сложения векторов ω и ω'*

$$(\omega' = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} d_{ij}\, \varphi_i f_j, d_{ij} \in F\ )$$ *и умножения вектора на скаляр $a \in F$*

определяются естественным образом:

$$\omega + \omega' := \sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2}(c_{ij} + d_{ij})\,\varphi_i f_j, \qquad a\omega := \sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2} ac_{ij}\,\varphi_i f_j.$$

Легко видеть, что R – линейное пространство размерности $n = n_1 n_2$ и что пары $\varphi_i f_j$ образуют в нём базис.

Отметим также, что, если $\varphi = \sum_{i=1}^{n_1} \xi_i\,\varphi_i, f = \sum_{j=1}^{n_2} \eta_j f_j$, то в силу выше сказан – ного пара $\varphi f -$ это набор пар $\varphi_i f_j$ с коэффициентами $c_{ij} = \xi_i \eta_j$, т.е.

$$\varphi f = \sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2} c_{ij}\,\varphi_i f_j.$$

Для пространств R_1 и R_2 возможны разные варианты конкретных реализаций. Например, R_1 может быть пространством линейных операторов, а R_2 – пространством функций, на которые эти операторы действуют. В данном случае произведение φf – это значение оператора φ на функции f и для применения общей теории необходимо, чтобы функции $\varphi_i f_j$ $i = 1, \dots, n_1, j = 1, \dots, n_2$ были линейно независимы. Это требование необходимо и в случае , когда R_1 и R_2 состоят из функций и действие оператора φ на функцию f – это умножение φ на f. Отметим, что если в этом случае φ_i и f_j – функции разных аргументов (как в примере в разделе 6.1), то требование линейной независимости функций $\varphi_i f_j$ выполняется автоматически.

Если в каждом из пространств R_s было определено скалярное произведение $(\cdot,\cdot)_s$, s=1,2, то мы определим в R скалярное произведение элементов

$$\omega = \sum_{i,j} d_{ij}\,\varphi_i f_j \text{ и } \omega' = \sum_{s,t} d'_{st}\,\varphi_s f_t$$

соотношением

$$(\omega, \omega') = \sum_{\substack{i,j\\ s,t}} d_{ij}\overline{d'_{st}}\,(\varphi_i, \varphi_s)_1 \big(f_j, f_t\big)_2. \tag{6.4}$$

Поэтому, если базисы в R_1 и R_2 были ортонормированными, то и базис в $R_1 \otimes R_2$ - ортонормированный.

Задание. Проверить, что равенство (6.4) действительно определяет скалярное произведение в R.

Пусть далее в пространствах R_1, R_2 действуют соответственно линейные операторы A и B.

<u>Определение.</u> Оператор C называется тензорным произведением операторов A *и* B *и обозначается* $C := A \otimes B$, *если* $C\omega = \sum_{ij} d_{ij} A\varphi_i Bf_j$ *для* $\forall\ \omega \in R$.

Здесь, согласно ранее сказанному, $A\varphi_i Bf_j$ – есть просто пара элементов $A\varphi_i \in R_1, Bf_j \in R_2$.

Из курса линейной алгебры известно, что каждому оператору в линейном пространстве отвечает матрица, определяемая действием этого оператора на элементы базиса.

<u>Определение (a).</u> Пусть $\|A\|, \|B\|, \|C\|$ *суть матрицы операторов* A, B, C *и* $C = A \otimes B$. *Матрица* $\|C\|$ *оператора C, являющегося тензорным произведением операторов* A *и* B, *называется тензорным (прямым) произведением матриц* $\|A\|$ *и* $\|B\|$ *и обозначается*

$$\|C\| = \|A\| \times \|B\|.$$

Дадим также определение тензорного произведения матриц, не использующее понятия тензорного произведения операторов.

<u>Определение (b).</u> Пусть $\|A\| = (a_{ik})$, $i, k = 1, \ldots, n_1$, $\|B\| = (b_{jt})$, $j, t = 1, \ldots, n_2$. *Матрицу* $\|C\| = (c_{ij,kt})$ *назовём тензорным (прямым) произведением матриц* $\|A\|$ и $\|B\|$ *и будем писать* $\|C\| = \|A\| \times \|B\|$, *если*

$$c_{ij,kt} = a_{ik} b_{jt}.$$

Покажем, что определения (*a*) и (*b*) эквивалентны. Действительно, согласно (*a*), для нахождения элементов матрицы $\|C\|$ необходимо применить оператор C к базисным элементам $\varphi_k f_t$. Сделав это, получим

$$C\varphi_k f_t = A\varphi_k Bf_t = \sum_i a_{ik}\, \varphi_i \sum_{\mathrm{j}} b_{jt}\, f_j = \sum_{i,j} a_{ik} b_{jt} \varphi_i f_j.$$

Таким образом, матричные элементы матрицы $\|C\|$ суть $c_{ij,kt} = a_{ik} b_{jt}$, т.е. определение (*a*) даёт ту же матрицу $\|C\|$, что и определение (*b*).

Мы видим, что элементы матрицы $\|C\|$ имеют двойную нумерацию строк и столбцов: номер строки (столбца) элемента $c_{ij,kt}$ состоит из записанных последовательно номеров строк (столбцов) тех элементов a_{ik} и b_{jt}, произведением которых является данный элемент.

Матрица $\|C\|$ имеет порядок $n_1 n_2$ и её структура видна из следующего рисунка:

$$\|C\| = \begin{pmatrix} a_{11}\|B\| & a_{12}\|B\| & \cdots & a_{1n_1}\|B\| \\ a_{21}\|B\| & a_{21}\|B\| & \cdots & a_{2n_1}\|B\| \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n_11}\|B\| & a_{n_12}\|B\| & \cdots & a_{n_1n_1}\|B\| \end{pmatrix}$$

Задание. В пространстве $R = R_1 \otimes R_2$ базисные элементы $u_{ij} = \varphi_i f_j$ можно располагать по-разному. Например, $u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1n_2}, u_{21}, u_{22} \dots$ или $u_{11}, u_{21}, u_{31}, \dots,\ u_{n_11},\ u_{12}, u_{22} \dots$ и т. д.. Выясните, какому выбору порядка базисных элементов отвечает приведённый вид матрицы $\|C\|$.

6.2.2. Свойства тензорного произведения матриц

Выясним некоторые свойства тензорного произведения матриц. Далее будем обозначать матрицы так же, как и операторы A , B, C и т.д.

1. След тензорного произведения $C = A \times B$ матриц равен произведению следов сомножителей:

$$TrC = TrA \cdot TrB.$$

Действительно, поскольку $c_{ij,st} = a_{is}\, b_{jt}$ то

$$TrC = \sum_{i,j} c_{ij,ij} = \sum_{i,j} a_{ii}\, b_{jj} = TrA \cdot TrB$$

2. Тензорное произведение $C = A \times B$ диагональных матриц A и B есть диагональная матрица.
Действительно, если $A = (a_{ij}\delta_{ij})$, $B = (b_{st}\delta_{st})$, то $c_{is,jt} = a_{ij}\delta_{ij}b_{st}\delta_{st}$.

3. Матрица C^*, сопряжённая тензорному произведению $C = A \times B$ матриц A и B, равна тензорному произведению матриц A^* и B^*, сопряжённых к A и B: $C^* = A^* \times B^*$ (доказать самостоятельно).

4. Пусть A и B – матрицы порядка m; S и T – матрицы порядка n. Тогда

$$L \equiv (A \times S) \cdot (B \times T) = L^0 \equiv AB \times ST \tag{6.5}$$

Равенство (6.5) связывает тензорное и обычное произведение матриц. Для его доказательства сравним элементы с одинаковыми номерами $l_{ij,kp}$ матрицы L и $l^0_{ij,kp}$ матрицы L^0. Пусть $A = (a_{ii'}), B = (\,b_{i'k}), S = (s_{jj'}), T = (\,t_{j'p})$. Имеем:

$$l_{ij,kp} = \sum_{i',j'} a_{ii'} s_{jj'}\, b_{i'k}\, t_{j'p}\,,\ l^0_{ij,kp} = \sum_{i'} a_{ii'}\, b_{i'k} \sum_{j'} s_{jj'}\, t_{j'p}\,.$$

Очевидно, $l_{ij,kp} = l^0_{ij,kp}$.

5. Пусть матрицы A_1 и A_2 обратимы. Тогда тензорное произведение C матриц A_1 и A_2 обратимо и

$$C^{-1} = A_1^{-1} \times A_2^{-1}.$$

Действительно, в силу (6.5) с $A = A_1, S = A_2, B = A_1^{-1}, T = A_2^{-1}$ имеем

$$(A_1 \times A_2) \cdot (A_1^{-1} \times A_2^{-1}) = (A_1 A_1^{-1}) \times (A_2 A_2^{-1}) = E,$$

т.е. матрица $A_1^{-1} \times A_2^{-1}$ является обратной к $A_1 \times A_2$.

6. Пусть матрицы A_1 и A_2 унитарны. Тогда тензорное произведение C=$A_1 \times A_2$ матриц A_1 и A_2 также есть унитарная матрица.

Утверждение следует из свойств 3) и 5), ибо

$$C^* = A_1^* \times A_2^* = A_1^{-1} \times A_2^{-1} = (A_1 \times A_2)^{-1} = C^{-1}.$$

§ 6.3 Тензорное произведение представлений

6.3.1. Свойства тензорного произведения представлений

Пусть в линейных пространствах R_1 и R_2 заданы представления группы $G: g \to T'_g$ в R_1 и $g \to T''_g$ в R_2. Матрицы оператора T'_g в базисе $\varphi_1, \dots, \varphi_{n_1}$ пространства R_1 и оператора T''_g в базисе $f_1, \dots, f_{n_2}$ пространства R_2 обозначим соответственно D'_g и D''_g. В тензорном произведении $R = R_1 \otimes R_2$ пространств R_1 и R_2 определим тензорное произведение T_g=$T'_g \otimes T''_g$ операторов T'_g, T''_g (см. § 6.2). Тогда матрица D_g оператора T_g в базисе $\varphi_i f_j$ пространства R будет тензорным произведением матриц D'_g и D''_g.

Покажем, что отображение $g \to T_g$ ($g \to D_g$) есть представление группы G в R. Мы сделаем это двумя (эквивалентными) способами – на языке операторов и на языке матриц. Итак, пусть $g', g'' \in G, \omega = \sum_{i,j} c_{ij}\, \varphi_i f_j \in R.$ Имеем

$$T_{g'} T_{g''} \omega = (T'_{g'} \otimes T''_{g'}) \cdot (T'_{g''} \otimes T''_{g''}) \omega = \sum_{i,j} c_{ij}\, T'_{g'} T'_{g''} \varphi_i T''_{g'} T''_{g''} f_j =$$

$$= \sum_{i,j} c_{ij}\, T'_{g'g''} \varphi_i T''_{g'g''} f_j = (T'_{g'g''} \otimes T''_{g'g''}) \omega = T_{g'g''} \omega,$$

что и требовалось показать.

На языке матриц, используя (6.5), получаем

$$D_{g'}\, D_{g''} = \left(D'_{g'} \times D''_{g'}\right) \cdot \left(D'_{g''} \times D''_{g''}\right) = (D'_{g'} \cdot D'_{g''}) \times (D''_{g'} \cdot D''_{g''}) =$$
$$= D'_{g'g''} \times D''_{g'g''} = D_{g'g''}.$$

Таким образом, тензорное произведение операторов (матриц), реализующих представление группы G, также является представлением G. Это представление называется тензорным произведением представлений.

В силу свойства 1 (см. 6.2.2), характеры элементов тензорного произведения представлений равны произведениям характеров сомножителей, т.е. если $D_g = D'_g \times D''_g$ то $\chi_g = \chi'_g \chi''_g$, где $\chi_g = TrD_g$, $\chi'_g = TrD'_g$, $\chi''_g = TrD''_g$. Тензорное произведение D_g представлений $D'_g \times D''_g$ в общем случае приводимо, даже если представления – сомножители являются неприводимыми, поскольку необходимое и достаточное условие неприводимости представления $D_g -$ равенство $\left(\chi_g, \chi_g\right)_G = 1 -$ вообще говоря, не следует из равенств $\left(\chi'_g, \chi'_g\right)_G = 1$, $\left(\chi''_g, \chi''_g\right)_G = 1$.

Задание. Доказать, что если хотя бы одно из представлений D'_g, D''_g – одномерно, то представление D_g неприводимо.

6.3.2. Разложение тензорного произведения неприводимых представлений

Пусть $g \to D_g^{(\alpha)}$, $g \to D_g^{(\beta)}$ – произвольные неприводимые представления группы G соответственно в пространствах R_1 и R_2 и $D_g = D_g^{(\alpha)} \times D_g^{(\beta)}$. Тогда мы можем разложить представление $g \to D_g$ в пространстве $R = R_1 \otimes R_2$ на неприводимые.
Имеем

$$D_g = D_g^{(\alpha)} \times D_g^{(\beta)} = \sum_{\gamma} \oplus\, \text{c}_{\alpha\beta,\gamma}\, D_g^{(\gamma)}, \tag{6.6}$$

где

$$\text{c}_{\alpha\beta,\gamma} = \left(\chi_g, \chi_g^{(\gamma)}\right)_G = \left(\chi_g^{(\alpha)} \chi_g^{(\beta)}, \chi_g^{(\gamma)}\right)_G = \frac{1}{|G|} \sum\nolimits_{g \in G} \chi_g^{(\alpha)} \chi_g^{(\beta)}\, \bar{\chi}_g^{(\gamma)}.$$

.

Коэффициенты $\text{c}_{\alpha\beta,\gamma}$ показывают, сколько раз представление типа γ содержится в тензорном произведении представлений типов α и β. Разложение (6.6) называется разложением Клебша – Гордана.

Для того, чтобы разложить пространство представления $R = R_1 \otimes R_2$ на инвариантные подпространства, соответствующие разложению (6.6), необходимо построить в R новый базис $\left\{W_{tq}^{(\gamma)}\right\}$. Здесь γ указывает на тип неприводимого представления, q — на номер строки неприводимого представления типа γ, которому принадлежит вектор $W_{tq}^{(\gamma)}$; индекс t нумерует пространства представлений типа γ, $1 \leq t \leq c_{\alpha\beta,\gamma}$.

Пусть $\varphi_i^{(\alpha)}, i = 1, \dots, n_\alpha$ и $f_j^{(\beta)}, j = 1, \dots, n_\beta$ — базисы в пространствах R_1 и R_2. Тогда векторы $\varphi_i^{(\alpha)} f_j^{(\beta)}$, $i = 1, \dots, n_\alpha, j = 1, \dots, n_\beta$ образуют базис в пространстве $R = R_1 \otimes R_2$, где действует представление $g \to D_g$. Связь между новым базисом $W_{tq}^{(\gamma)}$ и базисом $\varphi_i^{(\alpha)} f_j^{(\beta)}$ пространства R даётся равенством

$$W_{tq}^{(\gamma)} = \sum_{ij} (\alpha, i; \beta, j | \gamma, t, q)\, \varphi_i^{(\alpha)} f_j^{(\beta)}. \tag{6.7}$$

Числа $(\alpha, i; \beta, j | \gamma, t, q)$ называются коэффициентами Клебша – Гордана (коэффициенты Вигнера). Существуют таблицы этих коэффициентов для интересных в приложении групп G и их представлений. Если эти коэффициенты неизвестны, то их можно найти, используя методику, описанную нами в § 5.4.

В заключение приведём без доказательства вид равенства (6.6) в случае группы $O^+(3)$. Неприводимые представления группы $O^+(3)$ нумеруются целыми неотрицательными числами $l = 0,1,2, \dots$; их размерности равны $(2\,l + 1)$. Полагая в (6.6) $\alpha = l_1, \beta = l_2$ имеем

$$D_g = D_g^{(l_1)} \times D_g^{(l_2)} = \sum_{|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2} \oplus D_g^{(l)},$$

т.е. $c_{l_1 l_2, l}=1$ при $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$; $c_{l_1 l_2, l} = 0$ при $l \notin [|l_1 - l_2|, l_1 + l_2]$.

Задание. Найти коэффициенты $c_{\alpha\beta,\gamma}$ в разложении (6.6) для всех неприводимых представлений $D_g^{(\alpha)}, D_g^{(\beta)}$ группы D_3 (см. 4.2.4).

§ 6.4 Прямое произведение групп и его представления

6.4.1. Облегчающий пример

До сих пор мы обсуждали представления группы симметрии G квантовой системы, не связывая свойства представлений со структурой группы G. Однако в тех случаях, когда группа G является прямым произведением каких - либо групп, такая связь существует и может быть использована для построения представлений группы G и их характеристики. В настоящем параграфе мы определим, что такое прямое произведение групп и изучим его представления. Но начнём, как обычно, с физических примеров. Во многих задачах квантовые системы и их гамильтонианы инвариантны относительно преобразований не одной, а двух и более групп. Так, гамильтониан многоэлектронного атома в атомных единицах (см. В4)

$$H = -\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\Delta_i - N_0\sum_{i=1}^{n}|r_i|^{-1} + \sum_{i<j;i,j=1}^{n}\left|r_i - r_j\right|^{-1}$$

инвариантен и относительно вращений g' группы $O(3)$ и относительно перестановок g''тождественных частиц группы S_n. Поэтому группа симметрии G в этом случае будет содержать элементы $g'g''$ для любых $g' \in O(3)$, $g'' \in S_n$. Чтобы получить математический аппарат для описания этой и аналогичных ситуаций, введём понятие прямого произведения групп.

6.4.2. Определение прямого произведения групп

Пусть G' и G'' $-$ две произвольные группы с элементами g', g'', где $g' \in G'$, $g'' \in G''$. Построим множество G, элементами которого являются произвольные пары $g'g''$, где $g' \in G'$, $g'' \in G''$и потребуем выполнения двух условий

a) порядок записи элементов в паре не существенен, т.е. $g'g'' = g''g'$,
b) равенство

$$g'g'' = g_0'g_0'' \text{ при } g', g_0' \in G',\ g'', g_0'' \in G'' \tag{6.8}$$

возможно только при $g' = g_0'$, $g'' = g_0''$.

Определим во множестве G операцию умножения пар естественным образом: под произведением пар $g'g''$ и $g_0'g_0''$ мы будем понимать пару $f'f''$, где $f' = g'g_0'$, $f'' = g''g_0''$. Легко видеть, что множество пар $G=\{g'g''|g' \in G', g'' \in G''\}$ – группа.

<u>Определение.</u> Множество пар $G=\{g'g''|g' \in G',\ g'' \in G''\}$ со введенной выше групповой операцией при выполнении условий a),b) назовём прямым произведением групп G' и G'' и будем писать

$$G = G' \otimes G''$$

Очевидно $|G| = |G'| \cdot |G''|$.

В приложениях группы G' и G'' часто являются подгруппами некоторой группы $\hat{G}$ (обычно $\hat{G}$ $-$ группа линейных обратимых операторов в линейном пространстве K). В таком случае пара $g'g''$ $-$ это просто произведение элементов группы $\hat{G}$, $G=\{g|g = g'g'', g' \in G', g'' \in G''\}$ – подмножество из $\hat{G}$. Однако, чтобы множество G было прямым произведением групп G' и G'' должны выполняться два дополнительных условия:

$$(A)\ \ g'g'' = g''g' \text{ при } \forall\ g' \in G', \forall g'' \in G'',$$

ибо иначе будет нарушено, входящее в определение прямого произведения групп, требование a) о том, что порядок записи элементов в паре не существенен;

$$(B)\ \ G' \cap G''=\{e\},$$

ибо иначе не будет выполняться условие b), т.е. равенство (6.8) будет верно при некоторых $\{g', g''\} \neq \{g'_0, g''_0\}$.
Действительно, если $G' \cap G'' \ni f \neq e$, то мы можем записать

$$e'f'' = f'e'', \tag{6.9}$$

где e', e'' – это элемент e, взятый соответственно из G'и G'', а f', f'' это элемент f, взятый из G'и G''. Ясно, что равенство (6.9) – это (6.8), если там положить $g' = e', g'' = f''$, g'_0=f', $g''_0 = e''$, а (6.8) не может выполняться в силу b), т.е. условие (B)является необходимым для справедливости b). В то же время при условии (B), требование b) выполняется. Покажем это. Пусть для каких-то $g', g'_0 \in G'$ и $g'', g''_0 \in G''$ имеет место равенство (6.8). Тогда

$$(g'_0)^{-1}g' = g''_0(g'')^{-1}$$

И, значит, элемент $(g'_0)^{-1}g'$ из G' принадлежит и G''. В силу (B) $(g'_0)^{-1}g'$= e, т.е. $g' = g'_0$. Аналогично получаем, что $g'' = g''_0$. Таким образом условие (B) обеспечивает выполнение требования b).
Примеры разобранной выше ситуации:

1. $G' = O^{+}(3)$, G''=W=$\{ e ,i\}$- группа инверсий, $O(3) = G' \times G''$;
2. $G' = O(3), G''$=S_n, $G = O(3) \times S_n$.

6.4.3. Прямое произведение представлений перемножаемых групп

Пусть $g' \to T'_{g'}$ есть представление группы G' в пространстве R_1 и $g'' \to T''_{g''}$ представление группы G'' в пространстве R_2. Тогда в тензорном произведении $R = R_1 \otimes R_2$ пространств R_1 и R_2 для каждого элемента $g = g'g''$прямого произведения $G = G' \otimes G''$ групп G'и G''мы можем определить оператор T_g на любом векторе $\omega = \sum_{i,j} c_{ij}\, \varphi_i f_j$ из R равенством

$$T_g \sum_{i,j} c_{ij}\, \varphi_i f_j \coloneqq \sum_{i,j} c_{ij}\, T'_{g'} \varphi_i T''_{g''} f_j,$$

где φ_i, $i = 1, \dots, n_1$ и f_j, $j = 1, \dots, n_2$ – базисы в пространствах R_1 и R_2. Покажем, что отображение $g \to T_g$ есть представление группы G в пространстве R. Мы сделаем это, используя матричное представление операторов $T'_{g'}, T''_{g''}$ и T_g.

Пусть $D'_{g'}$ и $D''_{g''}$ – матрицы операторов $T'_{g'}$ и $T''_{g''}$ в базисах φ_i и f_j соответственно в R_1 и R_2. Тогда (см. § 6.3) матрица D_g оператора $T_g = T'_{g'} \otimes T''_{g''}$ в пространстве R будет прямым произведением матриц $D'_{g'}$ и $D''_{g''}$. Покажем, что отображение $g \to D_g \equiv D'_{g'} \times D''_{g''}$ есть представление группы G. Пусть $g = g'g'', g_0 = g'_0 g''_0$. Имеем: $gg_0 \to D_{gg_0}$, где

$$D_{gg_0} = D_{g'g''g'_0g''_0} = D_{g'g'_0g''g''_0}\ .$$

Далее, $D'_{g'g'_0} = D'_{g'}D'_{g'_0}$, $D''_{g''g''_0} = D''_{g''}D''_{g''_0}$ и мы получаем в силу (6.5)

$$D_{gg_0} = \left(D'_{g'} \cdot D'_{g'_0}\right) \times \left(D''_{g''} \cdot D''_{g''_0}\right) = \left(D'_{g'} \times D''_{g''}\right) \cdot \left(D'_{g'_0} \times D''_{g''_0}\right) = D_g \cdot D_{g_0}.$$

Таким образом, отображение $g \to D_g$ $(g \to T_g)$ действительно является представлением, т.е. прямое произведение представлений групп G'и G'' есть представление прямого произведения этих групп.

6.4.4. Связь неприводимых представлений прямого произведения групп с неприводимыми представлениями групп-сомножителей

Исследуем свойства представлений группы $G = G' \otimes G''$, начиная с представления $D_g = D'_{g'} \times D''_{g''}$, где $g = g'g''$, и $g' \to D'_{g'}$ и $g'' \to D''_{g''}$ суть представления групп G'и G''. Согласно § 6.2

$$\chi_g = \chi'_{g'}\chi''_{g''},$$

где $\chi_g = TrD_g, \chi'_{g'} = TrD'_{g'},\ \chi''_{g''} = TrD''_{g''}$.

Мы видим, что свойства тензорного произведения представлений групп G'и G'' похожи на свойства тензорного произведения представлений одной и той же группы. Однако имеется принципиальное различие: тензорное произведение неприводимых представлений групп G' и G'' неприводимо (сравните с §6.3). Действительно, пусть представления $g' \to D'_{g'}$ и $g'' \to D''_{g''}$ неприводимы. Имеем

$$\frac{1}{|G'|}\sum_{g' \in G'} \left|\chi'_{g'}\right|^2 = 1, \qquad \frac{1}{|G''|}\sum_{g'' \in G''} \left|\chi''_{g''}\right|^2 = 1$$

и, следовательно,

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g \in G} \left|\chi_g\right|^2 = \frac{1}{|G'||G''|}\ \sum_{g' \in G'} \left|\chi'_{g'}\right|^2\ \sum_{g'' \in G''} \left|\chi''_{g''}\right|^2 = 1,$$

т.е. представление $g \to D_g$ неприводимо[14]. Более того, справедливо следующее утверждение.

Теорема 6.1 *Любое неприводимое представление группы $G = G' \otimes G''$ может быть получено как тензорное произведение некоторых неприводимых представлений групп G'и G''.*

Пусть $D_{g'}^{(\alpha')}$, $D_{g'}^{(\beta')}$, $D_{g''}^{(\alpha'')}$, $D_{g''}^{(\beta'')}$ – матрицы каких-либо неприводимых представлений соответственно групп G' и G'', $D_g = D_{g'}^{(\alpha')} \times D_{g''}^{(\alpha'')}$, $D_g^0 = D_{g'}^{(\beta')} \times D_{g''}^{(\beta'')}$. Покажем сначала, что $D_g \nsim D_g^0$, если $D_{g'}^{(\alpha')} \nsim D_{g'}^{(\beta')}$ или $D_{g''}^{(\alpha'')} \nsim D_{g''}^{(\beta'')}$. Пусть

$$\chi_g = TrD_g,\ \chi_g^0 = TrD_g^0\ ,\ \chi_{g'}^{(\gamma')} = TrD_{g'}^{(\gamma')},\ \chi_{g''}^{(\gamma'')} = TrD_{g''}^{(\gamma'')},$$

где $\gamma' = \alpha',\ \beta'$; $\gamma''=\alpha'',\ \beta''$. Имеем

$$\left(\chi_g, \chi_g^0\right)_G = \left(\chi_{g'}^{(\alpha')} \cdot \chi_{g''}^{(\alpha'')}, \chi_{g'}^{(\beta')} \cdot \chi_{g''}^{(\beta'')}\right)_G =$$

$$= \left(\chi_{g'}^{(\alpha')}, \chi_{g'}^{(\beta')}\right)_{G'} \left(\chi_{g''}^{(\alpha'')}, \chi_{g''}^{(\beta'')}\right)_{G''} = \delta_{\alpha'\beta'}\delta_{\alpha''\beta''}.$$

Следовательно, при $(\alpha',\ \alpha'') \neq (\beta',\ \beta'')$ представления $g \to D_g$ и $g \to D_g^0$ не эквивалентны.

Пусть группы G'и G'' имели соответственно q' и q'' неприводимых не эквивалентных представлений: $g' \to D_{g'}^{(\alpha_i{}')}$, $i = 1, \dots, q'$, $g'' \to D_{g''}^{(\alpha_j{}'')}$, $j = 1, \dots, q''$. Тогда , согласно уже доказанному, группа $G = G' \otimes G''$ будет иметь по крайней мере $q = q'q''$ неприводимых не эквивалентных представлений $D_{g'}^{(\alpha_i{}')} \times D_{g''}^{(\alpha_j{}'')}$ размерностей $|\alpha_i{}'||\alpha_j{}''|$, $i = 1, \dots, q'$, $j = 1, \dots, q''$; здесь $|\alpha_i{}'| = dim\, D_{g'}^{(\alpha_i{}')}$ $|\alpha_j{}''| = \dim D_{g''}^{(\alpha_j{}'')}$. Сосчитаем $\displaystyle\sum_{i=1}^{q'}\sum_{j=1}^{q''} |\alpha_i{}'|^2 |\alpha_j{}''|^2$.

В силу первой теоремы Бернсайда для групп G', G''

$$\sum_{i=1}^{q'}\sum_{j=1}^{q''} |\alpha_i{}'|^2 |\alpha_j{}''|^2 = \sum_{i=1}^{q'} |\alpha_i{}'|^2 \sum_{j=1}^{q''} |\alpha_j{}''|^2 = |G'||G''| = |G|.$$

Так как сумма квадратов размерностей построенных неприводимых не эквивалентных представлений группы G равна порядку группы, то, в силу первой теоремы Бернсайда, построенные представления исчерпывают множество всех не

[14] Неприводимость представления $g \to D_g$ можно доказать и не используя теорию характеров. Это важно в случае, когда хотя бы одна из групп G', G'' - бесконечна.

эквивалентных неприводимых представлений группы G и, следовательно, любое неприводимое представление группы G есть тензорное произведение каких-то неприводимых представлений групп G'и G''.

Задание. Пусть $C'_1, \dots, C'_{q'}$ и $C''_1, \dots, C''_{q''}$ суть классы сопряжённых элементов соответственно групп G'и G''. Доказать, что все классы сопряжённых элементов группы G имеют вид $C'_i C''_j, i = 1, \dots, q'; \ j = 1, \dots, q''$ и «передоказать» на этой основе теорему 6.1.

ГЛАВА VII. РАЗРЕШЁННЫЕ И ЗАПРЕЩЁННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

«Мы мух не ноздрёй ловим».
Н.С. Хрущев(1894-1971гг.)

§ 7.1 Обобщённое правило отбора

7.1.1. Постановка задачи

Мы возвращаемся к вопросу о разрешённых и запрещённых переходах. Вывод, к которому мы пришли в § 5.3 заключается в следующем: переход с любого энергетического уровня со связанными состояниями симметрии типа α на любой уровень со связанными состояниями симметрии типа β (переход "$\alpha \to \beta$") под действием возмущающего оператора εQ будет запрещён (в первом порядке теории возмущений), если для любых канонических базисов $\varphi_i^{(\alpha)}$ $i = 1,2,\dots,n_\alpha$ и $f_j^{(\beta)}$ $j = 1,2,\dots,n_\beta$ представлений типов α и β конечной группы симметрии G рассматриваемой квантовой системы Z выполняется равенство

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} := \left(\varphi_i^{(\alpha)}, Q f_j^{(\beta)}\right) = 0 \;\; i = 1,2,\dots,n_\alpha,\; j = 1,2,\dots,n_\beta. \qquad (7.1)$$

В §5.3 было установлено, что, если оператор Q коммутирует с операторами представления T_g, то переход "$\alpha \to \beta$" запрещён при $\beta \neq \alpha$ и разрешён при $\beta = \alpha$ (простое правило отбора). Здесь мы рассмотрим общий случай, не предполагая, что $T_g Q = Q T_g$. Поскольку для нас главными являются свойства симметрии, то естественно в первую очередь выяснить поведение функции $Q f_j^{(\beta)}$ при преобразованиях T_g.

7.1.2. Предварительные результаты-1

Положим $\Phi_j(r) = Q(r) f_j^{(\beta)}(r)$. Так как $\Phi_j(r) \in \mathcal{L}_2(R)$, то

$$T_g \Phi_j(r) = \Phi_j(g^{-1}r) = Q(g^{-1}r) f_j^{(\beta)}(g^{-1}r).$$

Пусть

$$W = \left\{ \omega(r) | \omega(r) = \sum_{t=1}^{n_\beta} \sum_{h\in G} c_t(h)\, Q(h^{-1}r) f_t^{(\beta)}(h^{-1}r), \forall c_t(h) \in \mathbb{C} \right\}.$$

Покажем, что пространство W инвариантно для операторов T_g и что отображение $g \to T_g$, $g \in G$, есть представление группы G в W. Имеем:

$$T_g\omega(r) = \omega(g^{-1}r) = \sum_{t=1}^{n_\beta}\sum_{h\in G} c_t(h)\, Q(h^{-1}g^{-1}r)\, f_t^{(\beta)}(h^{-1}g^{-1}r) =$$

$$= \sum_{t=1}^{n_\beta}\sum_{\tilde{h}\in G} d_t(\tilde{h})\, Q(\tilde{h}^{-1}r) f_t^{(\beta)}(\tilde{h}^{-1}r) \in W,$$

где $d_t(\tilde{h}) = c_t(g^{-1}\tilde{h}), \tilde{h} = gh$.
Следовательно, пространство W инвариантно для операторов T_g. Далее, для любых $g, g_0 \in G$ очевидно

$$T_g T_{g_0}\,\omega(r) = T_g\omega(g_0^{-1}r) = \omega(g_0^{-1}g^{-1}r) = \omega((gg_0)^{-1}r) = T_{gg_0}\,\omega(r).$$

Таким образом, мы доказали, что $T_g\omega(r) \in W$ при $\forall\omega(r) \in W$ и $g \in G$, и что соответствие $g \to T_g$ есть представление группы G в пространстве W.

Выберем в пространстве W базис; пусть D_g – матрицы операторов T_g в этом базисе и $\chi_g = TrD_g$. Разложим представление $g \to T_g$ в W на неприводимые и пусть A – множество типов σ всех неприводимых представлений группы G, на которые разлагается представление $g \to T_g$ в пространстве W. Очевидно

$$A = \left\{\sigma \mid \left(\chi_g, \chi_g^{(\sigma)}\right)_G \geq 1\right\},$$

где $\chi_g^{(\sigma)}$ –характер представления типа σ группы G. В силу (5.16)

$$\sum_{\sigma\in A} P^{(\sigma)} = I \text{ на } W,$$

и так как $\Phi_j(r) \in W$, то $\Phi_j(r) = \sum_{\sigma\in A} P^{(\sigma)}\, \Phi_j(r)$. Подставляя это выражение в (7.1) и учитывая, что $\varphi_i^{(\alpha)} = P_{ii}^{(\alpha)}\varphi_i^{(\alpha)}$, получим условие запрещенности перехода “ $\alpha \to \beta$ ” в виде

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = \sum_{\sigma\in A}\left(P_{ii}^{(\alpha)}\varphi_i^{(\alpha)}, P^{(\sigma)}(Qf_j^{(\beta)})\right) = \sum_{\sigma\in A}\left(P_{ii}^{(\alpha)}\varphi_i^{(\alpha)}, \sum_{s=1}^{n_\sigma} P_{ss}^{(\sigma)}\,(Qf_j^{(\beta)})\right) = 0 \;\forall\; i,j. \quad (7.2)$$

В силу Теоремы 5.3 из (7.2) следует, что $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0$ при $\forall\varphi_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}$, если $\sigma \neq \alpha$ ни для какого $\sigma \in A$, т.е. если $\alpha \notin A$. А это условие означает, что

$$\left(\chi_g, \chi_g^{(\alpha)}\right)_G = 0. \quad (7.3)$$

7.1.3. Предварительные результаты-2

Чтобы воспользоваться условием (7.3) запрета перехода "$\alpha \to \beta$" надо найти χ_g – характер представления $g \to T_g$ в пространстве W. Пусть

$$R' = \left\{ v(r) \mid v(r) = \sum_{h \in G} c'(h) Q(h^{-1}r), \forall\, c'(h) \in \mathbb{C} \right\},$$

$$R'' = \left\{ f(r) \mid f(r) = \sum_{s=1}^{n_\beta} c_s'' f_s^{(\beta)}(r), \forall c_s'' \in \mathbb{C} \right\}.$$

Очевидно, (проверить самостоятельно), что

$$W = R' \otimes R''.$$

Определим в пространствах R'и R'' операторы T_g' и T_g'' равенствами

$$T_g' v(r) = v(g^{-1}r) \ \ \forall v \in R', \ \ T_g'' f(r) = f(g^{-1}r) \ \ \forall f \in R''.$$

Тогда, очевидно, оператор T_g в пространстве W можно записать как тензорное произведение операторов T_g' и T_g''

$$T_g = T_g' \otimes T_g''$$

Пространства R'и R'' инвариантны соответственно для операторов T_g' и T_g'' и отображения $g \to T_g'$ и $g \to T_g''$ суть представления группы G в этих пространствах. Для операторов T_g' в R' это показывается так же, как для оператора T_g в пространстве W; для операторов T_g'' в пространстве R'' утверждение очевидно, ибо R'' – линейная оболочка функций канонического базиса $f_1^{(\beta)}, \dots, f_{n_\beta}^{(\beta)}$. Выберем в пространстве R' произвольный базис $v_1, \dots, v_m$, в R'' примем за базис функции $f_1^{(\beta)}, \dots, f_{n_\beta}^{(\beta)}$ и обозначим через D_g' и D_g'' матрицы операторов T_g' и T_g'' соответственно в пространствах R'и R'' в выбранных базисах. Пусть $D_g = \|T_g\|$ – матрица оператора T_g в пространстве $W = R' \times R''$ в базисе $v_i f_j^{(\beta)}$, $i = 1,2, \dots, m; j = 1,2, \dots, n_\beta$. Тогда $D_g = D_g' \times D_g''$ и, следовательно,

$$\chi_g = \chi_g' \cdot \chi_g'' \tag{7.4}$$

Здесь χ_g'' – характер представления $g \to T_g''$ $(g \to D_g'')$ в пространстве R'' – известен и равен $\chi_g^{(\beta)}$, ибо представление $g \to T_g''$ в R'' неприводимо и, по условию, имеет тип β. Значит, для нахождения характера χ_g нам остаётся найти только χ_g' – характер представления D_g'.

7.1.4. Окончательные выводы и формулировки

Обозначим через Γ множество всех типов γ неприводимых представлений группы G операторами T'_g в пространстве R', для которых $P^{(\gamma)}Q(r) \neq 0$, т.е.

$$\Gamma = \left\{\gamma | P^{(\gamma)}Q(r) \neq 0\right\}$$

и докажем, что

$$D'_g = \sum_{\gamma\in\Gamma} \oplus\, p_\gamma D_g^{(\gamma)}, \tag{7.5}$$

т.е. что в разложение представления D'_g на неприводимые входят те и только те представления $D_g^{(\gamma)}$, для которых $\gamma \in \Gamma$; здесь число $p_\gamma \geq 1$ показывает, сколько раз представление $D_g^{(\gamma)}$ входит в D'_g.

Прежде, чем установить равенство (7.5) заметим, что из (7.5) мы сразу получаем нужный нам характер χ'_g:

$$\chi'_g = \textstyle\sum_{\gamma\in\Gamma} p_\gamma \chi_g^{(\gamma)}. \tag{7.6}$$

Переходим к проверке соотношения (7.5). Пусть для некоторого фиксированного $\gamma = \gamma_0$ представление $D_g^{(\gamma_0)}$ входит в D'_g. Тогда в пространстве R' существует канонический базис представления типа γ_0. А для любой функции v_0 этого базиса

$$P^{(\gamma_0)}v_0 = v_0 \neq 0. \tag{7.7}$$

Но тогда $P^{(\gamma_0)}Q(r) \not\equiv 0$, ибо если $P^{(\gamma_0)}Q(r) \equiv 0$, то

$$T'_g P^{(\gamma_0)}Q(r) = P^{(\gamma_0)}T'_g Q(r) = P^{(\gamma_0)}Q(g^{-1}r) = 0 \quad \text{при } \forall\, g \in G$$

и поэтому $P^{(\gamma_0)}v \equiv 0$ при $\forall v \in R'$, что противоречит (7.7). Значит $P^{(\gamma_0)}Q(r) \not\equiv 0$ и, следовательно, $\gamma_0 \in \Gamma$. Пусть теперь $\gamma \in \Gamma$. Тогда $P^{(\gamma)}Q(r) \not\equiv 0$, т.е. $\exists t$ такое, что $P_{tt}^{(\gamma)}Q(r) \not\equiv 0$. Но функция $P_{tt}^{(\gamma)}Q(r)$ принадлежит $t-$ой строке представления типа γ и $P_{tt}^{(\gamma)}Q \in R'$. Поэтому $D'_g \supset D_g^{(\gamma)}$. Таким образом, мы установили что $D'_g \supset D_g^{(\gamma)}$если и только если $\gamma \in \Gamma$, и тем самым равенство (7.5) и следующее из него равенство (7.6) доказаны.

В силу (7.4) и (7.6)

$$\chi_g = \sum_{\gamma\in\Gamma} p_\gamma \chi_g^{(\gamma)} \cdot \chi_g^{(\beta)}$$

Подставляя найденное значение χ_g в (7.2) получим

$$\sum_{\gamma\in\Gamma} p_\gamma \left(\chi_g^{(\gamma)}\chi_g^{(\beta)}, \chi_g^{(\alpha)}\right)_G = 0. \tag{7.8}$$

Так как все слагаемые в (7.8) неотрицательны, а $p_\gamma \geq 1$, то выполнение (7.8) эквивалентно выполнению равенств

$$\left(\chi_g^{(\gamma)}\chi_g^{(\beta)}, \chi_g^{(\alpha)}\right)_G = 0 \text{ при } \forall\, \gamma \in \Gamma. \tag{7.9}$$

Это и есть условие запрещённости перехода "$\alpha \to \beta$" (обобщённое правило отбора). Оно означает, что тензорное произведение представлений $D_g^{(\gamma)} \times D_g^{(\beta)}$ не должно содержать представления типа α ни при каких $\gamma \in \Gamma$.
Равенство (7.9) можно переписать в виде

$$\left(\chi_g^{(\gamma)}\chi_g^{(\beta)}\bar{\chi}_g^{(\alpha)}, \chi_g^{(0)}\right)_G = 0, \tag{7.10}$$

где $\bar{\chi}_g^{(\alpha)}$ – характер представления $g \to \overline{D}_g^{(\alpha)}$, $\chi_g^{(0)}$ –характер тождественного представления $g \to D_g^{(0)}$, т.е. $\chi_g^{(0)} = 1$ для $\forall g \in G$. Величина $\chi_g^{(\gamma)}\chi_g^{(\beta)}\bar{\chi}_g^{(\alpha)}$есть характер тензорного произведения представлений $D_g^{(\gamma)} \times D_g^{(\beta)} \times \overline{D}_g^{(\alpha)}$. Поэтому мы можем переформулировать условие (7.10) следующим образом:

Для того, чтобы матричные элементы $a_{ij}^{\alpha,\beta}$ (см. (7.1)) равнялись нулю, достаточно, чтобы тензорное произведение представлений $D_g^{(\gamma)} \times D_g^{(\beta)} \times \overline{D}_g^{(\alpha)}$не содержало тождественного представления $D_g^{(0)}$ ни при каком $\gamma \in \Gamma$.

Таким образом, для нахождения разрешённых и запрещённых переходов необходимо:

I. Найти множество $\Gamma=\{\gamma | P^{(\gamma)}Q(r) \not\equiv 0\}$ всех типов γ неприводимых представлений группы G, для которых $P^{(\gamma)}Q(r) \not\equiv 0$.

II. Для каждого $\gamma \in \Gamma$ проверить справедливость соотношения (7.10). Если (7.10) верно для любых $\gamma \in \Gamma$, то матричные элементы $a_{ij}^{\alpha,\beta} = 0$, т.е. переход "$\alpha \to \beta$" запрещён для любых уровней μ, ν, для которых $U_\mu = U_\mu^{(\alpha)}, U_\nu = U_\nu^{(\beta)}$(см. п.7.1). Если хотя бы для одного $\gamma \in \Gamma$ равенство (7.10) не выполняется, то переход "$\alpha \to \beta$" разрешён.

§ 7.2 Правила отбора: примеры

7.2.1. Группа D_3 и её представления

Применим результаты § 7.1 к нахождению разрешённых и запрещённых переходов для состояний с симметрией группы D_3.[15]

Напомним, что $D_3 -$ группа вращательной симметрии правильного треугольника (см. 1.1.3). Для описания этой группы рассмотрим произвольный правильный треугольник $\Delta A_1A_2A_3$ и выберем ортогональную систему координат x, y, z так, что плоскость x, y содержит $\Delta A_1A_2A_3$, и начало координат – точка O – совпадает с точкой пересечения биссектрисс углов треугольника, а вершина A_1 лежит на отрицательной части оси x (см. рис.1 в 1.1.3). Элементами группы D_3 являются вращения $C_z(0)$, $C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right)$, $C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right)$ на углы 0, $\frac{2\pi}{3}$, $\frac{4\pi}{3}$ около оси z и вращения $C_{\alpha_i}(\pi)$ на угол π около осей a_i, лежащих в плоскости xOy, проходящих через вершины A_i и начало координат и получающихся одна из другой в результате поворотов на угол $\frac{2\pi}{3}$ около оси z, i=1,2,3. Для определённости считаем, что ось a_1направлена по оси x.

Положим

$$g_1 = e = C_z(0), g_2 = C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), g_3 = C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right), g_4 = C_{\alpha_1}(\pi), g_5 = C_{\alpha_2}(\pi), g_6 = C_{\alpha_3}(\pi).$$

Группа D_3 состоит из трёх классов сопряжённых элементов: $C_1 = \{e\}$, $C_2 = \{g_2, g_3\}$, $C_3 = \{g_4, g_5, g_6\}$.

Задание. Покажите, что $g_2 \sim g_3, g_4 \sim g_5 \sim g_6$.

Элементы классов C_2 и C_3 не могут быть сопряжены между собой, так как при $C_2 \sim C_3$ группа D_3 имела бы два класса сопряжённых элементов и по теоремам Бернсайда - два неприводимых не эквивалентных представления, суммы квадратов размерностей l_j которых $l_1^2 + l_2^2 = 6$ (порядок группы), что невозможно. Поэтому $C_3 \nsim C_2$ и, значит, у группы D_3 существует всего три не эквивалентных неприводимых представления, размерности которых $l_1 = l_2 = 1, l_3 = 2$ (числа 1, 1, 2 являются единственным – с точностью до перестановки чисел – целочисленным решением уравнения $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 6$, вытекающего из теорем Бернсайда).[16]

Обозначим типы одномерных неприводимых представлений группы D_3 через A_1, A_2, тип двумерного представления через E и найдём характеры $\chi_g^{(\nu)}$этих представлений. Так как у каждой группы существует тождественное представ-

[15] Мы изучали группу D_3 и её свойства в разных местах курса . Для удобства читателя здесь собраны полученные ранее результаты вместе с их выводами.

[16] Разумеется, классы C_2 *и* C_3 не могут быть объединены в один класс и потому что их элементы лежат в разных классах сопряжённых элементов группы $O^+(3) \supset D_3$.

ление ($g_i \to 1, i = 1, \dots, 6$), то одно из представлений $D_g^{(A_i)}$,$i = 1{,}2$ – тождественное. Пусть это $D_g^{(A_1)}$. Тогда $\chi_{g_t}^{(A_1)}$=1, t =1,…,6.

Далее, т.к. элементы g_2, g_3 принадлежат к одному классу сопряжённых элементов, то $D_{g_2}^{(A_2)}$= $D_{g_3}^{(A_2)} = d$, где $d -$ некоторая константа; поскольку $g_2^2 = g_3$, то $d^2 = d$ и, значит, $d = 1$, т.е. $\chi_{g_i}^{(A_2)}$=1, $i = 2{,}3$. Наконец, пусть d_1=$D_{g_i}^{(A_2)}$, i =4,5,6. Так как g_4^2=e, то d_1^2=1. Если d_1=1, то представление $D_g^{(A_2)}$совпадает с $D_g^{(A_1)}$. Значит, $d_1 = -1$ и $\chi_{g_i}^{(A_1)} = -1$, i =4,5,6.

Таким образом, мы нашли характеры неприводимых представлений типов A_1, A_2. Характеры представления $D_g^{(E)}$ мы найдём из условий ортогональности $\left(\chi_g^{((A_i)}, \chi_g^{(E)}\right)_{D_3} = 0$, $i = 1{,}2$, учитывая, что характер единичного элемента $\chi_{g_1}^{(E)} = \dim D_{g_1}^{(E)} = 2$. Имеем

$$2 + \chi_{g_2}^{(E)} \cdot 2 + \chi_{g_4}^{(E)} \cdot 3 = 0, \qquad 2 + \chi_{g_2}^{(E)} \cdot 2 - \chi_{g_4}^{(E)} \cdot 3 = 0$$

Отсюда следует, что $\chi_{g_4}^{(E)} = 0$, $\chi_{g_2}^{(E)} = -1$.[17] Сведём полученные результаты в таблицу.

Таблица характеров представлений группы D_3

элементы $D_3 \Rightarrow$ тип представления⇓	$C_1 : g_1$	$C_2 : g_2, g_3$	$C_3 : g_4, g_5, g_6$	$\psi(r)$
$D_g^{(A_1)}$	1	1	1	
$D_g^{(A_2)}$	1	1	-1	
$D_g^{(E)}$	2	-1	0	

где в последнем столбце каждой строки удобно записывать функции, которые принадлежат данному представлению.

7.2.2. Правила отбора для группы *D*₃, когда возмущение есть оператор электрического дипольного момента

Мы будем рассматривать правила отбора для электрического дипольного излучения, т.е. для ситуации, когда квантовые переходы определяются матричными элементами

[17] Вместо условия ортогональности характеров мы могли использовать следствие 2 из теоремы 4.2

$$a_{ij}^{\alpha,\beta} = \left(\mathrm{a}_{ij}^{\alpha,\beta}(x), \mathrm{a}_{ij}^{\alpha,\beta}(y), \mathrm{a}_{ij}^{\alpha,\beta}(z)\right) = \int \varphi_i^{(\alpha)} Q \bar{f}_j^{(\beta)} dr,$$

где $\varphi_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}$ − функции канонических базисов представлений типов α и β группы D_3, $Q = r = (x, y, z)$ − радиус-вектор. Для оценки величин $a_{ij}^{\alpha,\beta}$ применим методику § 7.1. Чтобы сделать это, введем цилиндрические координаты ρ, φ, z и функции $h_1(r) \coloneqq x = \rho \cos\psi$, $h_2(r) \coloneqq y = \rho \sin\psi$, $h_3(r) \coloneqq z$ и найдём, для каких γ, $\gamma = A_1, A_2, E$,

$$P^{(\gamma)} h_i(r) \equiv \frac{|\gamma|}{6} \sum_{s=1}^{6} \bar{\chi}_{g_s}^{(\gamma)} T'_{g_s} h_i(r) \not\equiv 0,$$

где $T'_{g_s} h_i(r) = h_i(g_s^{-1} r)$.

Отметим, что

$$g_i^{-1} = g_i,\ i = 4{,}5{,}6;\ g_2^{-1} = g_3,\ g_3^{-1} = g_2,\ g_1^{-1} = g_1.$$

Пусть $r_i' = (x_i', y_i', z_i') = g_i^{-1} r$. Ясно, что $z_i' = z_i$, $i = 1{,}2{,}3$; $z_i' = -z_i$, $i = 4{,}5{,}6$, и что $|g_i \rho| = |\rho|$, $1 \le i \le 6$. Поэтому, чтобы описать вектор $r_i' = (\rho \cos\psi_i', \rho \sin\psi_i', z_i')$, нам достаточно найти полярный угол ψ_i' точки $M'(x_i', y_i')$ в плоскости x, y как функцию от полярного угла ψ точки $M_0(x, y)$: $\psi_i' = g_i^{-1} \psi$. Имеем

$$\psi_1' = \psi,\ \psi_2' = \psi - \tfrac{2\pi}{3}, \psi_3' = \psi - \tfrac{4\pi}{3}$$

$$\psi_4' = -\psi,\ \psi_5' = \tfrac{2\pi}{3} - \psi, \psi_3' = \tfrac{4\pi}{3} - \psi.$$

Следовательно,

$$P^{(A_1)} h_1(r) = \tfrac{\rho}{6}\left(2\cos\psi + 2\cos\left(\psi - \tfrac{2\pi}{3}\right) + 2\cos\left(\psi - \tfrac{4\pi}{3}\right)\right) = 0,$$

$$P^{(A_2)} h_1(r) =$$
$$= \tfrac{\rho}{6}\left(2\cos\psi + \cos\left(\psi - \tfrac{2\pi}{3}\right) + \cos\left(\psi - \tfrac{4\pi}{3}\right) - \cos\psi - \cos\left(\tfrac{2\pi}{3} - \psi\right) - \cos\left(\tfrac{4\pi}{3} - \psi\right)\right) = 0$$

$$P^{(E)} h_1(r) = \tfrac{\rho}{3}\left(2\cos\psi - \cos\left(\psi - \tfrac{2\pi}{3}\right) - \cos\left(\psi - \tfrac{4\pi}{3}\right)\right) = \rho\cos\psi = x.$$

Аналогично получаем, что

$$P^{(A_1)} h_2 = P^{(A_2)} h_2 = 0 \text{ и } P^{(E)} h_2 = h_2(r) = \rho \sin\psi = y.$$

Таким образом, функции $h_1(r) = x$ и $h_2(r)$=y принадлежат представлению типа $E.$ Далее,

$$P^{(A_1)}h_3(r) = \frac{1}{6}(3z - 3z) = 0, P^{(A_2)}h_3(r) = \frac{1}{6} \cdot 6z = z, P^{(E)}h_3(r) = 0.$$

Таким образом, функция $h_3(r) = z$ принадлежит представлению типа A_2.

Заметим, что в силу (5.14) $P^{(E)} = I - P^{(A_1)} - P^{(A_2)}$. Это соотношение можно использовать для проверки полученных результатов или для вычисления $P^{(E)}h_j$ по уже найденным $P^{(A_i)}h_j(r)$.

Итак, мы установили, что $x, y \in D_g^{(E)}$, $z \in D_g^{(A_2)}$, т.е. что $\Gamma = \{E,\ A_2\}$. Выясним теперь, для каких α, β тензорное произведение D_g= $\overline{D}_g^{(\alpha)} \times D_g^{(\gamma)} \times\ D_g^{(\beta)}$ при $\gamma =\ E,\ A_2$ не содержит тождественного представления, т.е. для каких α, β и γ = $E,\ A_2$ характер χ_g= = $\bar{\chi}_g^{(\alpha)} \chi_g^{(\gamma)}\ \chi_g^{(\beta)}$ представления D_g ортогонален к характеру $\chi_g^{(0)}$тождественного представления (см.(7.10)). Элементарные вычисления показывают, что

$$\left(\chi_g, \chi_g^{(0)}\right)_{D_3} = 0 \tag{7.11}$$

1. при $\gamma = E$ и $\alpha, \beta =\ A_1\ , A_2$;
2. при $\gamma = A_2$ и $\ \alpha = \beta = A_1\ , A_2$;
3. при $\gamma = A_2$ и $\ \alpha \neq \beta$, если $\alpha =\ E$ или $\beta =\ E$.

В остальных случаях

$$\left(\chi_g, \chi_g^{(0)}\right)_{D_3} \geq 1. \tag{7.12}$$

Таким образом, для первой и второй компоненты электрического дипольного излучения (принадлежащих представлению $D_g^{(E)}$) запрещены переходы $A_i \leftrightarrow A_j\ i, j = 1{,}2;$ для третьей компоненты (принадлежащей представлению $D_g^{(A_2)}$) запрещены переходы $E \leftrightarrow A_i,\ A_i \leftrightarrow A_i\ i = 1{,}2.$ Поэтому запрещённые переходы для оператора Q (т.е. переходы, запрещённые для всех компонент) – это переходы $A_1 \leftrightarrow A_1,\ A_2 \leftrightarrow A_2$.

Задание. Найти запрещённые переходы для электрического дипольного излучения в случае группы C_{3v}. Эта группа состоит из 6 элементов: единичного, вращений $C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right), C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right)$ около оси z, и отражений $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ относительно плоскостей, проходящих через ось z и, соответственно, через оси a_1, a_2, a_3. Группа C_{3v} изоморфна группе D_3 и, следовательно, таблица характеров её неприводимых представлений будет та же, что для D_3, если положить

$$g_1 = e,\ g_2 = C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right),\ g_3 = C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right), g_4 = \sigma_1\ , g_5 = \sigma_2,\ g_6 = \sigma_3.$$

Список литературы

1. Эльсгольц Л.Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. – М.: Наука, Физматгиз, 1969. – с. 426.
2. Жислин Г.М. Основы линейной алгебры: Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2014. – с. 136.
3. Рисс Ф., Секефальви-Надь Б. Лекции по функциональному анализу. – М.: Мир, 1979. – с. 592.
4. Вигнер Е. Теория групп и её приложения к квантовомеханической теории атомных спектров. – М.: ИЛ, 1961. – с. 444.
5. Хамермеш М. Теория групп и её применение к физическим проблемам. – М.: Мир, 1966. – с. 588.
6. Петрашень М.И., Трифонов Е.Д. Применение теории групп в квантовой механике. – М.: Наука, Физматгиз, 1967. – с. 308.
7. Киреев П.С. Введение в теорию групп и её применение в физике твёрдого тела. – М.: Высшая школа, 1979. – с. 207.
8. Нокс Р., Голд А. Симметрия в твёрдом теле. – М.: Наука, Физматгиз, 1970. – с. 424.
9. Буренин А.В. Симметрия квантовой внутримолекулярной динамики. – 3-е изд. - Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2012. – с. 416.

Оглавление

Григорий Моисеевич **Жислин**

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ КОНЕЧНЫХ ГРУПП
С ПРИМЕНЕНИЯМИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ**

Учебно-методическое пособие

Компьютерная верстка – Э.М. Шер

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

Подписано в печать . Формат 60×84 1/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. . Уч.-изд. л.
Заказ № . Тираж 100 экз.

Отпечатано в типографии Нижегородского госуниверситета
им. Н.И. Лобачевского.
603600, г. Нижний Новгород, ул. Большая Покровская, 37.