§ 3. ПРИМЕРЫ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

А. Группа D_3

Чтобы установить, каков физический смысл представления, мы рассмотрим здесь группу D_3, введенную ранее (гл. 2, § 2, п. Е), и построим для нее матричное представление. Точное представление этой группы получается *сразу же, если записать соответствующие каждой операции* преобразования в обычном трехмерном декартовом пространстве. Выберем базисные векторы $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ так, как показано на рис. 4.1, а вектор $\mathbf{e}_z$ направим перпендику-

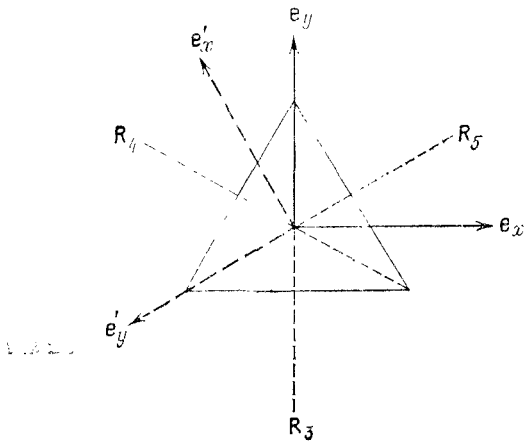

Рис. 4.1.

лярно плоскости рисунка. Тогда отображение элемента группы, например R_1 (оператора поворота на 120° вокруг оси z), примет вид

$$\begin{aligned} T(R_1)\,\mathbf{e}_x &= \mathbf{e}'_x = -\frac{1}{2}\,\mathbf{e}_x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathbf{e}_y, \\ T(R_1)\,\mathbf{e}_y &= \mathbf{e}'_y = -\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathbf{e}_x - \frac{1}{2}\,\mathbf{e}_y, \\ T(R_1)\,\mathbf{e}_z &= \mathbf{e}'_z = \mathbf{e}_z \end{aligned} \tag{4.5}$$

и, следовательно, согласно формуле (4.4), его матрица будет равна

$$T_t(R_1)=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Для других элементов группы аналогичным образом получим

$$T(R_2)=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad T(R_3)=\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T(R_4)=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T(R_5)=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad T(E)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Как нетрудно убедиться, эти матрицы имеют ту же таблицу умножения, что и групповые элементы. Имеем, например, $T(R_1)T(R_4)=T(R_5)$, что согласуется с равенством $R_1R_4=R_5$ (табл. 2.5).

Рассматривая только одномерное пространство вектора e_z, мы можем построить очень простое одномерное представление, которое обозначим через $T^{(2)}$:

$$T^{(2)}(R_1)=1, \quad T^{(2)}(R_2)=1, \quad T^{(2)}(R_3)=-1,$$
$$T^{(2)}(R_4)=-1, \quad T^{(2)}(R_5)=-1, \quad T^{(2)}(E)=1.$$

Отметим, что $\mathsf{T}^{(2)}$ не есть тождественное представление [которое мы будем обозначать через $\mathsf{T}^{(1)}(R)_i=1$], ставящее в соответствие каждому элементу группы $+1$. Заметим также, что числа -1 соответствуют трем элементам, относящимся к одному и тому же классу $\mathscr{C}_3$ группы D_3 (гл. 2, § 7). Это отнюдь не случайность — в § 9 мы увидим, что представления элементов, принадлежащих одному классу, имеют ряд общих свойств.

Поскольку в третьей строке и третьем столбце матриц $\mathsf{T}(\mathsf{R}_i)$ стоят нули, понятно, что матрицы 2×2, построенные из двух первых строк и столбцов, тоже образуют представление группы D_3, которое мы обозначим через $\mathsf{T}^{(3)}$.

Б. Группа $\mathscr{R}_3$

Используя то же пространство, что и в предыдущем примере, можно построить представление непрерывной группы вращений $\mathscr{R}_3$ вокруг оси z. В этом случае индекс a групповых элементов $\mathsf{R}(a)$ является непрерывным параметром в интервале $0\leqslant a\leqslant 2\pi$, а матрица, уже полученная нами ранее (гл. 3, § 8), имеет вид

$$\mathsf{T}(a)=\begin{pmatrix}\cos a & -\sin a & 0\\ \sin a & \cos a & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{4.6}$$

Отсюда сразу следует, что

$$\mathsf{T}(a)\,\mathsf{T}(b)=\mathsf{T}(a+b) \tag{4.7}$$

для любых a и b в согласии с правилом умножения групповых элементов $\mathsf{R}(a)\mathsf{R}(b)=\mathsf{R}(a+b)$.

В. Функциональные пространства

Два первых примера представлений построены в обычном физическом трехмерном пространстве, и поэтому на данной стадии нелегко понять, каким образом для

групп типа D_3 и $\mathcal{R}_2$ могут быть построены представления размерности, большей 3. Чтобы показать, как это может быть достигнуто, мы построим представления в функциональном пространстве, рассмотрев преобразования функций при повороте системы координат согласно формуле (3.37). Это будет иметь очень важное значение для приложений теории групп в квантовой механике.

Пусть мы имеем пространство L функций $\psi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r}$ — некоторые координаты, инвариантных относительно группы преобразований координат G_a в том смысле, что если $\psi(\mathbf{r})$ принадлежит пространству L, то ему принадлежит и $\psi(G_a^{-1}\mathbf{r})$ для всех элементов G_a этой группы. Тогда мы можем определить представление T в функциональном пространстве L как преобразования

$$\mathsf{T}(G_a)\,\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) \tag{4.8}$$

типа преобразования, рассмотренного в гл. 3, § 7. Снова нетрудно убедиться, что это представление удовлетворяет условию (4.1), ибо, определив $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}\mathbf{r})$, имеем

$$\mathsf{T}(G_a)\,\mathsf{T}(G_b)\,\psi(\mathbf{r}) = \mathsf{T}(G_a)\,\psi(G_b^{-1}\mathbf{r}) = \mathsf{T}(G_a)\,\psi'(\mathbf{r}) = \\ = \psi'(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi((G_aG_b)^{-1}\mathbf{r}) = \mathsf{T}(G_aG_b)\,\psi(\mathbf{r}).$$

В данном доказательстве очень важно введение новой функции $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}\mathbf{r})$, поскольку в общем случае $\mathsf{T}(G_a)\psi(G_b^{-1}\mathbf{r}) \neq \psi(G_a^{-1}G_b^{-1}\mathbf{r})$.

Матричное представление в функциональном пространстве может быть получено, если распространить общее выражение (4.2) на пространство функций, выбрав базис $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$\mathsf{T}(G_a)\,\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi_i'(\mathbf{r}) = \sum_j T_{ji}(G_a)\,\psi_j(\mathbf{r}). \tag{4.9}$$

Здесь функции $\psi_i(\mathbf{r})$ служат примером абстрактных базисных векторов $\mathbf{e}_i$.

В качестве иллюстрации рассмотрим шестимерное пространство L квадратичных функций, введенных в гл. 3, § 2, п. Г. Оно, очевидно, инвариантно относительно любого вращения и, в частности, относительно операций группы D_3. Например, $\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)\psi_1 = {}^1/_4\psi_1 - ({}^3/_4)^{1/2}\psi_6 + {}^3/_4\psi_2$.

Продолжая выкладки, мы получим матрицу

$$\mathsf{T}(\mathsf{R}_1) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Тем же путем могут быть получены остальные пять матриц, и они будут иметь ту же таблицу умножения, что и элементы группы.

Отметим, что при умножении функций $\psi(\mathbf{r})$ на любую скалярную функцию $f(r)$, где $r=|\mathbf{r}|$, представление остается неизменным и, если функция $f(r)$ достаточно быстро уменьшается при больших r, объем V, в котором определено скалярное произведение, можно расширить до бесконечности. В этом случае функция $\psi(\mathbf{r})$ может представлять собой волновую функцию частицы, движущейся в сферически-симметричном потенциале вокруг начала координат, как электрон в атоме водорода.

§ 4. ПОСТРОЕНИЕ ИНВАРИАНТНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ

Если в пространстве L определен некий оператор T то может случиться так, что существует подпространсто: L_i пространства L, обладающее следующим свойством если $\mathbf{r}_i$ — произвольный вектор подпространства L_i, то преобразованный вектор $\mathbf{r}_i'=\mathsf{T}\mathbf{r}_i$ тоже принадлежит подпространству L_i. Такое подпространство называется «инвариантным» по отношению к оператору T. В общем случае, если в пространстве L задан набор операторов $\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)$, образующих представление группы $\mathcal{G}$, то может существовать подпространство L_i, инвариантное отно-