

Продолжая выкладки, мы получим матрицу

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

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 $\psi(r)$ на любую скалярную функцию $f(r)$, где $r=|r|$, 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 $\psi(r)$ 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 подпространство L_1 пространства L , обладающее следующим свойством если r_i — произвольный вектор подпространства L_1 , то преобразованный вектор $r'_i = Tr_i$ тоже принадлежит подпространству L_1 . Такое подпространство называется «инвариантным» по отношению к оператору T . В общем случае, если в пространстве L задан набор операторов $T(G_a)$, образующих представление группы G , то может существовать подпространство L_1 , инвариантное отно-

сительно всех преобразований $T(G_a)$, когда G_a пробегает группу \mathcal{G} . В этом случае подпространство L_1 называется инвариантным по отношению к преобразованиям, индуцированным группой \mathcal{G} ; в таком смысле обычно и понимается термин «инвариантное подпространство».

В примере, рассмотренном в § 3, п. А, из вида матриц понятно, что инвариантными являются как подпространство векторов e_x и e_y , так и его ортогональное дополнение (гл. 3, § 1) — одномерное пространство, задаваемое вектором e_z . Шестимерное функциональное пространство в примере § 3, п. В само по себе является подпространством пространства всех непрерывных функций, имеющего бесконечное число измерений.

В данном параграфе мы хотим показать, что можно построить инвариантное подпространство, исходя из единственного вектора в исходном пространстве. Пусть r — произвольный вектор в L . Определим набор из g векторов r_a соотношением

$$r_a = T(G_a)r, \quad (4.10)$$

где G_a пробегает g элементов группы \mathcal{G} . Отсюда сразу следует, что набор векторов r_a заключен в инвариантном подпространстве пространства L , поскольку для любого b

$$T(G_b)r_a = T(G_b)T(G_a)r = T(G_bG_a)r = T(G_c)r = r_c, \quad (4.11)$$

где групповой элемент G_c задается соотношением $G_c = G_bG_a$.

Если все векторы r_a линейно-независимы, то они образуют базис g -мерного представления группы, поскольку формула (4.11) есть частный случай общей формулы (4.2) для представлений. В таком случае матрица $T(G_b)$ будет задаваться равенством $T_{ii}(G_b)=1$, если групповые элементы, обозначенные индексами b , i и j , удовлетворяют соотношению $G_bG_i=G_j$. Все прочие матричные элементы должны равняться нулю.

В общем случае векторы r_a не являются линейно-независимыми, но всегда можно выбрать $s \leq g$ линейно-независимых базисных векторов в виде линейных комбинаций векторов r_a . В большинстве случаев независимые базисные векторы удобно ортонормировать по Шмидту. Чтобы проиллюстрировать процедуру такого построения, вернемся к примеру § 3, п. В. Мы будем строить неза-

висимое пространство, исходя из единственной функции $\psi_1(r) = x^2$ в группе D_3 :

$$T(E)\psi_1 = \psi_1,$$

$$T(R_1)\psi_1 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_2)\psi_1 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_3)\psi_1 = \psi_1,$$

$$T(R_4)\psi_1 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_5)\psi_1 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy.$$

Из вида полученных функций явствует, что они не являются линейно-независимыми, что построенное пространство трехмерно и что три функции x^2 , y^2 и xy образуют его базис, хотя и не ортонормированный. Матричное представление в этом базисе можно найти, пользуясь формулой (4.2); имеем

$$T(R_1) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$T(R_2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{ и т. д.}$$

Процедура ортонормирования базиса по Шмидту (гл. 3, § 1) требует гораздо больше вычислений. Прежде всего напишем $\varphi_1 = Ax^2$, где A находим из условия нормировки φ_1 с использованием скалярного произведения (3.13):

$$\iiint_V \varphi_1^* \varphi_1 dV = 1,$$

откуда

$$\varphi_1 = \left(\frac{21}{4\pi} \right)^{1/2} x^2.$$

Затем положим $\varphi_2 = B(y^2 - C\varphi_1)$ и найдем C и B из условий ортогональности $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$ и нормировки $(\varphi_1, \varphi_2) = 1$. Получаем

$$\varphi_2 = \left(\frac{21}{220\pi} \right)^{1/2} (8y^2 - 3x^2).$$

Нетрудно убедиться, что произведение xy , будучи нечетной функцией как переменной x , так и переменной y , ортогонально и функции φ_1 , и функции φ_2 . Из условия нормировки находим

$$\varphi_3 = \left(\frac{14}{\pi} \right)^{1/2} xy.$$

§ 5. НЕПРИВОДИМОСТЬ

Как видно из примеров § 4, исходя из все более сложного функционального пространства, можно получать матричные представления все возрастающего размера. Казалось бы, изучение возможных представлений даже в простейших группах типа D_8 является делом устрашающей сложности. Однако нас спасает следующее замечательное свойство групповых представлений: все представления конечной группы можно «построить» из конечного числа некоторых определенных неприводимых представлений. Группа D_8 , например, имеет только три определенных неприводимых представления: два одномерных и одно двумерное. Здесь нам приходится вводить некоторые новые понятия; мы строго определим их чуть позже, а пока для иллюстрации обратимся к примеру, рассмотренному в § 3, п. А. Размерность представления в этом примере равна трем. Из вида матриц вытекает, однако, что построенные из первых двух строк и столбцов матрицы 2×2 образуют двумерное представление, тогда как диагональные матричные элементы, расположенные на пересечении третьей строки с третьим столбцом, образуют представление размерности единица. Это становится возможным, поскольку равны нулю элементы, расположенные на пересечении первых двух строк с третьим столбцом и первых двух столбцов с третьей строкой. Если говорить о векторном пространстве, то это означает, что векторы, соответствующие первым двум строкам и первому столбцу, лежат в подпространстве, перпендикулярном к вектору, соответствующему третьему столбцу.