*Таблица 4.4*

| $D_3$ | E | $R_1$ | $R_2$ |
|---|---|---|---|
| $T^{(1)}$ | 1 | 1 | 1 |
| $T^{(2)}$ | 1 | 1 | 1 |
| $T^{(3)}$ | 2 | —1 | —1 |

что для $C_3$ представление

$$T^{(1)} \equiv T^{(2)} \equiv \tau^{(1)},$$

тогда как двумерное представление сводится к

$$T^{(3)} = \tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}.$$

## § 19. ПРОЕКЦИОННЫЕ ОПЕРАТОРЫ

В обычном трехмерном пространстве мы хорошо знакомы с геометрическим понятием проекции вектора на плоскость $xy$: проекция трехмерного вектора $\mathbf{r}(x, y, z)$ есть просто вектор $(x, y, 0)$, лежащий в плоскости $xy$. Это понятие проекции на некоторое подпространство можно распространить и на случай пространств более высокой размерности, а также на функциональные пространства.

Рассмотрим векторное пространство $L$, инвариантное по отношению к преобразованиям $T(G_a)$, индуцированным элементами $G_a$ группы $\mathcal{G}$. В общем случае пространство $L$ не является неприводимым, и, следовательно, его можно разложить на неприводимые подпространства по методу, изложенному в § 5 и 11. Пусть $e_i^{(\alpha)t}$ — набор базисных векторов в $L$, причем при фиксированных $\alpha$ и $t$ индекс $i$ пробегает $s_\alpha$ строк неприводимого представления $T^{(\alpha)}$, а индекс $t$ служит для случая, когда в $L$ имеется более одного подпространства, преобразующихся по одному и тому же представлению $T^{(\alpha)}$ (или по эквивалентным представлениям). Тогда по определению

$$T(G_a)\, e_i^{(\alpha)t} = \sum_j T_{jt}(G_a)\, e_j^{(\alpha)t}.$$

Зададим подпространство $L_{\alpha i}$ в $L$ набором базисных векторов $\mathbf{e}_i^{(\alpha)t}$ с фиксированными $\alpha$ и $i$. Определим также $L_\alpha = \sum_{i=1}^{s_\alpha} L_{\alpha i}$.

В принятых обозначениях мы можем теперь показать, что оператор

$$\mathsf{P}_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_\alpha \mathsf{T}_{ii}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_a) \tag{4.50}$$

есть оператор, проектирующий из $L$ в $L_{\alpha i}$. Для этого напишем

$$\mathsf{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{e}_j^{(\beta)t} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_{a,\,k} T_{ii}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,T_{kj}^{(\beta)}(\mathsf{G}_a)\,\mathbf{e}_k^{(\beta)\,t} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\mathbf{e}_j^{(\beta)t}$$

с учетом формулы (4.23). Следовательно, $\mathsf{P}_i^{(\alpha)}$ есть искомый проекционный оператор, поскольку в результате его действия на произвольный вектор $\mathbf{r} = \sum_{\beta,\,t,\,j} c(\beta, t, j)\mathbf{e}_j^{(\beta)t}$ в пространстве $L$ получим

$$\mathsf{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{r} = \sum_t c(\alpha, t, i)\,\mathbf{e}_i^{(\alpha)\,t}.$$

Это означает, что оператор $\mathsf{P}_j^{(\beta)}$ обращает в нуль все компоненты вектора, лежащие вне пространства $L_{\alpha i}$, и оставляет неизменными компоненты, принадлежащие пространству $L_{\alpha i}$.

На практике могут возникать трудности при построении оператора $\mathsf{P}_i^{(\alpha)}$, задаваемого формулой (4.50), поскольку в нее входят диагональные матричные элементы оператора $\mathsf{T}^{(\alpha)}$ для всех групповых элементов $\mathsf{G}_a$. Гораздо проще построить оператор, проектирующий из $L$ в большее подпространство $L_\alpha$, ибо вследствие равенства $L_\alpha = \sum_i L_{\alpha i}$ этот оператор имеет вид

$$\mathsf{P}^{(\alpha)} = \sum_i \mathsf{P}_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \sum_i T_{ii}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_a) = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_a) \tag{4.51}$$

и, следовательно, требуется лишь знание характеров группы $\chi^{(\alpha)}$. (Пользуясь формулой (4.36), легко показать,

что $\sum_{\alpha} \mathsf{P}^{(\alpha)}=1$, как и должно быть вследствие равенства $\sum_{\alpha} L_{\alpha}=L$.)

Иногда применяется обобщенный проекционный оператор (или оператор переноса)

$$\mathsf{P}_{ij}^{(\alpha)}=\frac{s_\alpha}{g}\sum_a T_{ij}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_a). \tag{4.52}$$

Строго говоря, он не является проекционным оператором, но тем не менее обладает свойством

$$\mathsf{P}_{ij}^{(\alpha)}\mathbf{e}_k^{(\beta)t}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{jk}\mathbf{e}_i^{(\beta)t}, \tag{4.53}$$

т. е. вначале проектирует в подпространство $L_{\alpha j}$, а затем преобразует в $L_{\alpha i}$. На этом основании можно показать, что для всякого $\mathbf{r}$ при фиксированных $\alpha$ и $j$ набор векторов $\mathbf{r}^{(\alpha)j}=\mathsf{P}_{ij}^{(\alpha)}\mathbf{r}$, где $i=1, 2, \ldots, s_\alpha$, является базисом неприводимого представления $\mathsf{T}_\alpha$:

$$\begin{aligned}\mathsf{T}(\mathsf{G}_b)\,\mathbf{r}_i^{(\alpha)j}&=\frac{s_\alpha}{g}\sum_a T_{ij}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_b)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)\,\mathbf{r}=\\&=\frac{s_\alpha}{g}\sum_c T_{ij}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_b^{-1}\mathsf{G}_c)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_c)\,\mathbf{r}=\\&\qquad\qquad\text{(здесь } \mathsf{G}_c=\mathsf{G}_b\mathsf{G}_a)\\&=\frac{s_\alpha}{g}\sum_h T_{ik}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_b^{-1})\sum_c T_{kj}^{(\alpha)*}(\mathsf{G}_c)\,\mathsf{T}(\mathsf{G}_c)\,\mathbf{r}=\\&=\sum_h T_{ki}^{(\alpha)}(\mathsf{G}_b)\,\mathbf{r}_k^{(\alpha)j}.\end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что построенные нами операторы подчиняются обычному правилу умножения проекционных операторов:

$$\mathsf{P}_j^{(\alpha)}\mathsf{P}_k^{(\beta)}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{jk}\mathsf{P}_j^{(\alpha)}, \tag{4.54}$$

тогда как для обобщенных операторов выполняется соотношение

$$\mathsf{P}_{ij}^{(\alpha)}\mathsf{P}_{kl}^{(\beta)}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{jk}\mathsf{P}_{il}^{(\alpha)}. \tag{4.55}$$

Рассмотрение общих свойств проекционных операторов мы завершаем двумя предостережениями. Во-первых, неверно, что набор векторов $\mathsf{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{r}$ для данного $\mathbf{r}$ и фиксированного $\alpha$ образует базис представления $\mathsf{T}^{(\alpha)}$,— для этого требуется обобщенный оператор $\mathsf{P}_{ij}^{(\alpha)}$. Во-вторых, из того, что вектор $\mathbf{r}$ нормирован, не следует, что нормирована и проекция $\mathsf{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{r}$; назначение численного множителя $s_\alpha/g$ в формуле (4.50) другое — он обеспечивает неизменность тех составляющих вектора $\mathbf{r}$, которые не уничтожаются при проектировании.

В качестве конкретного примера проектирования рассмотрим функцию $\psi_1(\mathbf{r})=x^2$, использованную в § 4, и разложим ее на компоненты, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы $D_3$. Пользуясь таблицей характеров для трех неприводимых представлений $\mathsf{T}^{(1)}$, $\mathsf{T}^{(2)}$ и $\mathsf{T}^{(3)}$ (табл. 4.2) вместе с формулой (4.51) и имеющимися в § 4 выражениями для $\mathsf{T}(\mathsf{R}_a)\psi_1$, получаем

$$\mathsf{P}^{(1)}x^2=\frac{1}{6}[1+\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)+\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)+\mathsf{T}(\mathsf{R}_3)+\mathsf{T}(\mathsf{R}_4)+\mathsf{T}(\mathsf{R}_5)]\,x^2=$$
$$=\frac{1}{6}\left(x^2+\frac{1}{2}x^2+\frac{3}{2}y^2+x^2+\frac{1}{2}x^2+\frac{3}{2}y^2\right)=\frac{1}{2}(x^2+y^2),$$

$$\mathsf{P}^{(2)}x^2=\frac{1}{6}[1+\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)+\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)-\mathsf{T}(\mathsf{R}_3)-\mathsf{T}(\mathsf{R}_4)-\mathsf{T}(\mathsf{R}_5)]\,x^2=$$
$$=\frac{1}{6}\left(x^2+\frac{1}{2}x^2+\frac{3}{2}y^2-x^2-\frac{1}{2}x^2-\frac{3}{2}y^2\right)=0,$$

$$\mathsf{P}^{(3)}x^2=\frac{2}{6}[2x^2-\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)\,x^2-\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)\,x^2]=$$
$$=\frac{1}{3}\left(2x^2-\frac{1}{2}x^2-\frac{3}{2}y^2\right)=\frac{1}{2}(x^2-y^2).$$

Таким образом, мы можем написать $x^2={}^1/_2(x^2+y^2)+{}^1/_2(x^2-y^2)$, где первое слагаемое преобразуется по тождественному представлению $\mathsf{T}^{(1)}$, а второе — по представлению $\mathsf{T}^{(3)}$.

Далее мы можем использовать проекционный оператор (4.50), чтобы проектировать не просто на какую-то строку двумерного представления $\mathsf{T}^{(3)}$, а на нужную нам строку. Для этого потребуются уже не характеры, а матричные

элементы представления (табл. 4.1). Получаем

$$\mathsf{P}_1^{(3)} x^2 = \frac{2}{6}\left[x^2 - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)x^2 - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)x^2 - \mathsf{T}(\mathsf{R}_3)x^2 + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_4)x^2 + \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_5)x^2\right] =$$
$$= \frac{1}{3}\left(x^2 - \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{4}y^2 - x^2 + \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2\right) = 0,$$
$$\mathsf{P}_2^{(3)} x^2 = \frac{2}{6}\left[x^2 - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)x^2 - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)x^2 + \mathsf{T}(\mathsf{R}_3)x^2 - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_4)x^2 - \frac{1}{2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_5)x^2\right] =$$
$$= \frac{1}{3}\left(x^2 - \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{4}y^2 + x^2 - \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{4}y^2\right) =$$
$$= \frac{1}{2}(x^2 - y^2).$$

Таким образом, функция $x^2$ не содержит составляющих, преобразующихся аналогично первой строке представления $\mathsf{T}^{(3)}$.

И наконец, в этом примере мы можем построить пару функций, преобразующихся по представлению $\mathsf{T}^{(3)}$. Для этого следует использовать оператор (4.52). Мы уже нашли, что

$$\mathsf{P}_{22}^{(3)} x^2 \equiv \mathsf{P}_2^{(3)} x^2 = \frac{1}{2}(x^2 - y^2),$$

и теперь вычислим

$$\mathsf{P}_{12}^{(3)} x^2 = \frac{2}{6}\sum_a \mathsf{T}_{12}^{(3)}(\mathsf{R}_a)\,\mathsf{T}(\mathsf{R}_a)\,x^2 =$$
$$= \frac{1}{3}\left[-\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)x^2 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_2)x^2 - \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_4)x^2 + \right.$$
$$\left. + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}\mathsf{T}(\mathsf{R}_5)x^2\right] = \frac{1}{3}\left(\frac{3}{2}xy + \frac{3}{2}xy\right) = xy.$$

Итак, две функции $f_1 = xy$ и $f_2 = {}^1/_2(x^2 - y^2)$ преобразуются по матричному представлению $\mathsf{T}^{(3)}$, полученному в § 8. Чтобы убедиться в этом, вычислим $\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)f_1$. В соответствии с табл. 4.1 результат должен быть равен $\mathsf{T}(\mathsf{R}_1)f_1 = -{}^1/_2 f_1 + ({}^3/_4)^{1/2} f_2$. На основании изложенного в гл. 3,

§ 8, п. Е. получаем

$$\mathsf{T}(\mathsf{R}_1) f_1 = \left[-\frac{1}{2}x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} y\right]\left[-\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} x - \frac{1}{2}y\right] = -\frac{1}{2}xy + \\ + \frac{1}{2}\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}(x^2 - y^2) = -\frac{1}{2} f_1 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} f_2,$$

чем и доказывается сказанное выше.

С физической точки зрения одной из важных областей применения проекционных операторов является нахождение так называемых симметрических координат системы. Так, пример из гл. 1, § 2, п. В значительно упрощается после введения симметризованных координат $Q_1 = x_1 + x_2$ и $Q_2 = x_1 - x_2$. Соответствующей группой является группа $\mathcal{S}_2$ (гл. 2, § 2, пример 10) с элементами $\mathsf{E}$ и $\mathsf{P}_{12}$ (перестановка). Ее характеры приведены в табл. 4.5. Ясно, что $Q_1$

*Таблица 4.5*

| | $\mathsf{E}$ | $\mathsf{P}_{12}$ |
|---|---|---|
| $\mathsf{T}^{(1)}$ | 1 | 1 |
| $\mathsf{T}^{(2)}$ | 1 | −1 |

преобразуется по $\mathsf{T}^{(1)}$, а $Q_2$ — по $\mathsf{T}^{(2)}$. Конечно, в такой простой задаче применять теорию групп необязательно, но в более близком к реальности примере колебаний молекулы аммиака $NH_3$ (гл. 6, § 5), где имеется двенадцать координат, учет симметрии ведет к весьма желательному упрощению.

## § 20. НЕПРИВОДИМЫЕ НАБОРЫ ОПЕРАТОРОВ И ТЕОРЕМА ВИГНЕРА — ЭККАРТА

Важнейшее значение в данной главе имело понятие векторного пространства, одновременно инвариантного и неприводимого по отношению к преобразованиям, индуцированным группой $\mathcal{G}$. В частности, мы увидели, что такие пространства имеют строго определенные трансформационные свойства и размерности и что они должны соответствовать какому-либо из неприводимых представ-