

§ 8, п. Е. получаем

$$\begin{aligned} T(R_1)f_1 = & \left[ -\frac{1}{2}x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}y \right] \left[ -\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}x - \frac{1}{2}y \right] = -\frac{1}{2}xy + \\ & + \frac{1}{2}\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}(x^2 - y^2) = -\frac{1}{2}f_1 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}f_2, \end{aligned}$$

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  $S_2$  (гл. 2, § 2, пример 10) с элементами  $E$  и  $P_{12}$  (перестановка). Ее характеры приведены в табл. 4.5. Ясно, что  $Q_1$

Таблица 4.5

	$E$	$P_{12}$
$T^{(1)}$	1	1
$T^{(2)}$	1	-1

преобразуется по  $T^{(1)}$ , а  $Q_2$  — по  $T^{(2)}$ . Конечно, в такой простой задаче применять теорию групп необязательно, но в более близком к реальности примере колебаний молекулы аммиака  $\text{NH}_3$  (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-

лений группы  $\mathcal{G}$ . Отсюда мы логически пришли к мысли о классификации функций по их трансформационным свойствам и о разложении произвольной функции на составляющие, каждая из которых преобразуется по определенной строке  $i$  определенного неприводимого представления  $T^{(\alpha)}$ . Теперь мы перенесем такой подход и на классификацию операторов. Такая классификация, совершенно аналогичная классификации функций, имеет прямой физический смысл в квантовой механике, где операторы используются для описания физических наблюдаемых величин. Изучение их трансформационных свойств непосредственно приводит к пониманию правил отбора в процессах перехода (гл. 5, § 4; гл. 1, § 2, п. Д).

Рассмотрим преобразование  $T(G_a)$  в некотором пространстве  $L$ , где  $G_a$  — элемент группы  $\mathcal{G}$ . Пусть  $S$  — произвольный оператор в пространстве  $L$ ; тогда трансформированный оператор  $S'$  по определению равен  $S' = -T(G_a)ST(G_a)^{-1}$  (гл. 3, § 4). Точно так же, как преобразованная функция  $\phi' = T(G_a)\phi$  в общем случае не совпадает с функцией  $\phi$ , трансформированный оператор  $S'$ , вообще говоря, весьма сильно отличается от  $S$ . Мы видели, однако, что функции неприводимого инвариантного пространства преобразуются, не выходя за его рамки [«друг в друга» в смысле формулы (4.37)]. Теперь мы определим аналогичным образом «неприводимый набор операторов»  $S_i^{(\alpha)}$  с помощью соотношения

$$S_i^{(\alpha)\prime} \equiv T(G_a)S_i^{(\alpha)}T(G_a)^{-1} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(G_a)S_j^{(\alpha)}. \quad (4.56)$$

Набор операторов  $S_i^{(\alpha)}$ , которые удовлетворяют соотношению (4.56), называют преобразующимся по неприводимому представлению  $T^{(\alpha)}$ . Ясно, что число операторов в таком наборе равно размерности  $s_\alpha$  представления  $T^{(\alpha)}$ . В частности, скалярный оператор, для которого  $S' = S$ , будет преобразовываться по тождественному представлению. По причинам, совершенно аналогичным рассмотренным в § 17, произведение двух операторов  $S_i^{(\alpha)}S_l^{(\beta)}$  преобразуется по  $ij$ -й строке прямого произведения представлений  $T^{(\alpha \times \beta)}$ .

Чтобы подойти к изучению матричных элементов операторов, рассмотрим результат действия оператора  $S_i^{(\alpha)}$  на функцию  $\Phi_j^{(\beta)}$ , где, как яствует из обозначений, и опе-

ратор, и функция преобразуются по непреводимым представлениям одной и той же группы. Снова по аналогии с § 17 набор  $s_\alpha s_\beta$  функций  $\psi_{ij}$ , определяемых как

$$\psi_{ij} = S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}, \quad (4.57)$$

преобразуется по прямому произведению представлений  $T^{(\alpha \times \beta)}$ , так как

$$\begin{aligned} T(G_a) \psi_{ij} &= T(G_a) S_i^{(\alpha)} T(G_a)^{-1} T(G_a) \varphi_j^{(\beta)} = \\ &= \sum_{k, m} T_{ki}^{(\alpha)}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) S_k^{(\alpha)} \varphi_m^{(\beta)} = \\ &= \sum_{k, m} T_{km, ij}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) \psi_{km}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

По этой причине мы можем с учетом формулы (4.48) разложить каждую функцию  $\psi_{ij}$  на неприводимые компоненты:

$$\psi_{ij} = \sum_{\gamma', t, k'} C^*(\alpha \beta \gamma' t, i j k') \Psi_{k'}^{(\gamma')}{}^t. \quad (4.59)$$

Рассмотрим теперь матричные элементы (гл. 3, § 3) неприводимого оператора  $S_i^{(\alpha)}$  между базисными функциями  $\varphi_k^{(\beta)}$  и  $\varphi_k^{(\gamma)}$ . Используя формулу (4.38), имеем

$$\begin{aligned} (\varphi_k^{(\gamma)}, S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}) &= (\varphi_k^{(\gamma)}, \psi_{ij}) = \\ &= \sum_{\gamma', t, k'} C^*(\alpha \beta \gamma' t, i j k') (\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_{k'}^{(\gamma')}{}^t) = \\ &= \sum_t C^*(\alpha \beta \gamma t, i j k) (\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma)}{}^t). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Во-первых, это означает, что если неприводимое представление  $T^{(\gamma)}$  не содержится в разложении произведения  $T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)}$ , то матричный элемент оператора  $S_i^{(\alpha)}$  равен нулю. Комбинации  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , при которых матричные элементы равны нулю, находят по формуле (4.45) с использованием известных таблиц характеров. Во-вторых, отсюда следует, что все матричные элементы с фиксированными  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\lambda$  и варьируемыми  $i$ ,  $j$ ,  $k$  на деле определяются значительно меньшим числом констант. Заметим, например, что, согласно формуле (4.38), скалярное произведение  $(\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma)}{}^t)$  не зависит от  $k$ ; кроме того, оно не зависит от  $i$  и  $j$ .

Поскольку коэффициенты Клебша — Гордана известны из теории групп, выражение (4.60) содержит для каж-

дого члена в сумме по индексу  $t$  только одну константу. В частности, для «легко приводимых» групп имеется лишь одна константа. Такие константы называют «приведенными матричными элементами» и обозначают символом

$$\langle \varphi^{(\nu)} || S^{(\alpha)} || \varphi^{(\beta)} \rangle_t = (\varphi_k^{(\nu)}, \Psi_k^{(\nu) t}), \quad (4.61)$$

где индексы  $i, j, k$  в обозначении оператора и функций опущены, поскольку константа от них не зависит. В этих обозначениях равенство (4.60) превращается в соотношение

$$(\varphi_k^{(\nu)}, S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}) = \sum_t C^*(\alpha\beta\nu t, ijk) \langle \varphi^{(\nu)} || S^{(\alpha)} || \varphi^{(\beta)} \rangle_t, \quad (4.62)$$

называемое теоремой Вигнера — Эккарта и показывающее, что  $i, j$  и  $k$  полностью определяются коэффициентами Клебша — Гордана.

С физической точки зрения диагональные матричные элементы некоего оператора — это средние значения соответствующих наблюдаемых величин, а недиагональные матричные элементы равны вероятностям перехода из одного состояния в другое (гл. 5, § 1). Поэтому значение полученных в данном параграфе результатов чрезвычайно велико, ибо в сложных физических системах оператор  $S$  и функции  $\varphi$  могут сами по себе быть весьма громоздкими, но уже на основании одной только симметрии из соотношения (4.62) мы можем заключить, какие именно матричные элементы обратятся в нуль, и предсказать, как соотносятся между собой другие матричные элементы.

Если  $S$  — инвариантный оператор, то представление  $\alpha$  является тождественным и коэффициенты  $C$  в формуле (4.46) тривиальны, а именно  $\lambda = \beta, j = k$ , индекс  $t$  не нужен и  $C(\alpha\beta\nu, ijk) = \delta_{\beta\nu}\delta_{jk}$ . При этом равенство (4.62) переходит в соотношение

$$(\varphi_k^{(\nu)}, S \varphi_j^{(\beta)}) = \langle \varphi^{(\beta)} || S || \varphi^{(\beta)} \rangle \delta_{\beta\nu} \delta_{jk}, \quad (4.63)$$

что означает просто такой вид инвариантного оператора, когда все матричные элементы, соответствующие переходу от одного неприводимого представления к другому, равны нулю, а блоки, соответствующие одному представлению, диагональны, причем диагональные матричные элементы равны между собой. Другими словами, внутри одного представления оператор с точностью до постоянного мно-

жителя равен единичному, а между двумя представлениями обращается в нуль. Фактически это утверждение есть просто лемма Шура, сформулированная для данного специального случая.

Для иллюстрации понятия неприводимого набора операторов рассмотрим операторы  $\partial/\partial x$ ,  $\partial/\partial y$  и  $\partial/\partial z$  в векторном пространстве непрерывных функций  $\Phi(\mathbf{r})$  (гл. 3, § 8, п. Г). В данном случае функцию  $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(x, y, z)$  проще рассматривать как функцию координат вектора  $\mathbf{r}$ . По формуле (3.38) вращения  $R$  преобразуют функцию  $\Phi$  в

$$\Phi'(x, y, z) = T(R)\Phi(x, y, z) = \Phi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}), \quad (4.64)$$

где  $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$  — координаты вектора  $\mathbf{r} = R^{-1}\mathbf{r}$ . Соответствующие трансформированные операторы, очевидно, равны  $\partial/\partial\bar{x}$ ,  $\partial/\partial\bar{y}$ ,  $\partial/\partial\bar{z}$ , ибо

$$\frac{\partial}{\partial\bar{x}} T(R)\Phi(x, y, z) = \frac{\partial}{\partial x} \Phi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}),$$

тогда как, определив  $\tilde{\Phi}(x, y, z) = (\partial/\partial x)\Phi(x, y, z)$ , получим

$$T(R)\frac{\partial}{\partial x}\Phi(x, y, z) = T(R)\tilde{\Phi}(x, y, z) = \tilde{\Phi}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = \frac{\partial}{\partial\bar{x}}\Phi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}),$$

так что  $(\partial/\partial\bar{x})T(R) = T(R)(\partial/\partial x)$  и, следовательно,  $\partial/\partial\bar{x} = T(R)(\partial/\partial x)T^{-1}(R)$ . Оператор  $\partial/\partial\bar{x}$  можно выразить через исходные операторы по обычному цепному правилу для частных производных

$$\frac{\partial}{\partial\bar{q}} = \sum_{q=x, y, z} \frac{\partial q'}{\partial\bar{q}} \frac{\partial}{\partial q'},$$

откуда следует, что три оператора образуют набор, инвариантный относительно вращений. Коэффициенты этого преобразования просто связаны с матрицей преобразования базисных векторов  $e_q$ , поскольку из выражения

$$Re_q = \sum_{q'} R_{q'q} e_{q'}$$

следует равенство

$$q' = e_{q'} \cdot r = e_{q'} \cdot R\bar{r} = \sum_q \bar{q} e_{q'} \cdot Re_q = \sum_q \bar{q} R_{q'q},$$

так что  $\partial q'/\partial\bar{q} = R_{q'q}$  и, следовательно,

$$T(R) \frac{\partial}{\partial q} T^{-1}(R) = \sum_{q'} R_{q'q} \frac{\partial}{\partial q'},$$

откуда видно, что три данных оператора преобразуются совершенно аналогично базисным векторам  $e_x$ ,  $e_y$  и  $e_z$ .

В группе всевозможных вращений  $\mathcal{R}$ , данный набор операторов, естественно, неприводим, но если мы будем рассматривать только группу  $D_3$ , то, как было показано в § 11, для набора векторов  $e_q$  набор операторов уже не является неприводимым и разобьется на оператор  $\partial/\partial z$ , преобразующийся по  $T^{(2)}$ , и неприводимый набор из двух операторов  $\partial/\partial x$  и  $\partial/\partial y$ , преобразующихся по  $T^{(3)}$  (в обозначениях табл. 4.2).

В качестве еще одного примера неприводимого набора операторов рассмотрим умножение на функцию (гл. 3, § 8, п. В). В частности, функции  $x$  и  $y$  образуют неприводимый набор, преобразующийся по представлению  $T^{(3)}$  группы  $D_3$ , поскольку трансформированные операторы — это просто координаты  $x$  и  $y$ , даваемые формулой (3.39). То обстоятельство, что в эту формулу входят комплексно-сопряженные величины, в данном случае несущественно, поскольку матрица действительная.

## § 21. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРЯМОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ ГРУПП

Понятие прямого произведения групп  $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$  было введено в гл. 2, § 5, а в § 8 той же главы было показано, что классы в такой группе нумеруются парой классов — одним из  $\mathcal{G}$ , другим из  $\mathcal{H}$ . Теперь, если заданы два неприводимых матричных представления  $T^{(\alpha)}(G_a)$  группы  $\mathcal{G}$  и  $U^{(\beta)}(H_b)$  группы  $\mathcal{H}$ , легко показать, что матрицы прямого произведения, определяемые как

$$T^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b) = T^{(\alpha)}(G_a) \otimes U^{(\beta)}(H_b), \quad (4.65)$$

образуют неприводимое представление группы  $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$ .

Доказательство того, что  $T^{(\alpha \times \beta)}$  является представлением, почти идентично выводу формулы (4.42). Неприводимость представления  $T^{(\alpha \times \beta)}$  следует из его характера, который, как и в формуле (4.43), оказывается равным произведению характеров представлений  $T^{(\alpha)}$  и  $U^{(\beta)}$ :

$$\chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b) = \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(H_b). \quad (4.66)$$

Отсюда, суммируя по групповым элементам и используя для  $\mathcal{G}$  и  $\mathcal{H}$  формулу (4.29), получаем

$$\sum_{ab} |\chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b)|^2 = \sum_a |\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 \sum_b |\chi^{(\beta)}(H_b)|^2 = gh.$$