Лекция 8

Тензоры

8.1 Разложение Клебша — Гордана

Прямое произведение представлений

Опишем, как сконструировать новый объект — прямое произведение представлений. Пусть $D(g)$ и $D'(g)$ — два представления группы G размерностей N, N', а $u_k \in \mathbb{R}^N, v_i \in \mathbb{R}^{N'}$ — базисы представлений, тогда

$$D(g)|u_k\rangle = \sum_{l=1}^{N} |u_l\rangle\langle u_l|D(g)|u_k\rangle = \sum_{l=1}^{N} D_{lk}|u_l\rangle,$$
$$D'(g)|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{N'} |v_j\rangle\langle v_j|D'(g)|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{N'} D'_{ji}|v_j\rangle.$$

Определим *прямое произведение базисов* $|u_k\rangle \otimes |v_i\rangle \in \mathbb{R}^{N+N'}$ как множество пар векторов, т.е. будем использовать знак $\otimes$ как разделитель. Тогда на прямом произведении базисов действует *прямое произведение представлений*, определенное как

$$\left(D(g) \otimes D'(g)\right)\left(|u_k\rangle \otimes |v_i\rangle\right) = \sum_{l=1}^{N}\sum_{j=1}^{N'} D_{lk}(g)D'_{ji}(g)\left(|u_l\rangle \otimes |v_j\rangle\right).$$

Прямое произведение представлений свелось к *прямому произведению матриц*.

Определение 8.1. Прямым (тензорным, кронекеровским) произведением двух квадратных матриц называется матрица $NN' \times NN'$, состоящая из попарных произведений элементов

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1N}B \\ \vdots & & \vdots \\ a_{N1}B & \dots & a_{NN}B \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(8.1)}$$

Пример 8.1. Матрицы исходного представления из примера с треугольной молекулой 4.1 согласно (4.4) равны прямым произведениям матрицы, описывающей перестановку трех ядер, и матрицы поворота или отражения:

$$D_i(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$D_i(r) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$D_i(\sigma) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Можно было бы обобщить определение и на прямоугольные матрицы, но нам это не понадобится. Перечислим некоторые основные свойства прямого произведения матриц.

1. $(\lambda A + B) \otimes C = \lambda(A \otimes B) + B \otimes C$ линейность;
2. $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$ ассоциативность;
3. $(A \oplus B) \otimes C = A \otimes C \oplus B \otimes C$ дистрибутивность;
4. $(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) = A_1A_2 \otimes B_1B_2$ (A_1 того же порядка, что и A_2, B_1 того же порядка, что и B_2);
5. $\operatorname{tr}(A \otimes B) = \operatorname{tr} A \cdot \operatorname{tr} B$.

Все свойства следуют напрямую из определения (8.1) и правила умножения матриц. Доказательства этих и других свойств можно найти в учебниках линейной алгебры, например, [27].

Мы покажем, что прямое произведение представлений — представление. Из того, что D, D' представления, следует, что

$$D(g_1)D(g_2) = D(g), \quad D'(g_1)D'(g_2) = D'(g),$$

где $g = g_1g_2, g_1, g_2 \in G$. Тогда из свойства 4 получается

$$(D(g_1) \otimes D'(g_1))(D(g_2) \otimes D'(g_2)) = D(g_1)D(g_2) \otimes D'(g_1)D'(g_2) = D(g) \otimes D'(g).$$

Разложение на неприводимые

Прямое произведение неприводимых представлений, вообще говоря, приводимо. Его можно разложить в прямую сумму неприводимых.

Определение 8.2. *Разложением Клебша — Гордана* называют разложение прямого произведения неприводимых представлений в прямую сумму неприводимых представлений:

$$D^{(\alpha)}(g) \otimes D^{(\beta)}(g) = \bigoplus_{\gamma} k_\gamma D^{(\gamma)}(g), \tag{8.2}$$

где k_γ — целочисленные коэффициенты.

Можно также разложить базис неприводимого представления γ по базисам неприводимых представлений α, β. Коэффициенты такого разложения называются *коэффициентами Клебша — Гордана*.

Выведем разложение Клебша — Гордана в группе $\mathrm{SO}(3)$. Мы можем вычислить характер неприводимого представления. Это проще всего сделать, рассмотрев поворот вокруг оси 3 на угол α, потому что в этой системе координат матрица диагональна

$$D^{(l)}(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{il\alpha} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(l-1)\alpha} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-il\alpha} \end{pmatrix}.$$

Отсюда характер равен сумме экспонент $e^{im\alpha}$, т.е. сумме геометрической прогрессии:

$$\chi^{(l)}(\alpha) = \sum_{m=-l}^{l} e^{im\alpha} = \frac{\sin\left((l+\frac{1}{2})\alpha\right)}{\sin\frac{1}{2}\alpha}. \tag{8.3}$$

Теперь, когда характер найден, вспомним, что он не зависит от выбора базиса.

Соотношение ортогональности в непрерывной группе в качестве усреднения вместо суммирования содержит интегрирование

$$\left\langle \chi^{(l_1)}\chi^{(l_2)} \right\rangle_G = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \chi^{(l_1)}(\alpha)\chi^{(l_2)}(\alpha)(1-\cos\alpha)\,d\alpha = \delta_{l_1\,l_2}.$$

Действительно, переписав произведение синусов через разность косинусов

$$\left\langle \chi^{(l_1)}\chi^{(l_2)} \right\rangle_G = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} \left(\cos(l_1-l_2)\alpha - \cos(l_1+l_2+1)\alpha\right)\,d\alpha,$$

мы увидим, что интеграл от второго косинуса всегда равен нулю, а от первого обращается в нуль при разных числах $l_1 \neq l_2$. При равных $l_1 = l_2$ интеграл равен 2π, откуда получается δ- символ Кронекера.

Из ортогональности характеров можно вывести разложение Клебша — Гордана для группы $\mathrm{SO}(3)$

$$D^{(l_1)} \otimes D^{(l_2)} = \bigoplus_{j=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} D^{(j)}, \tag{8.4}$$

которое в квантовой механике называется правилом сложения моментов. Действительно, усредняя по группе, найдем

$$k_l = \left\langle [\chi^{(l)}]^* \chi^{(l_1)} \chi^{(l_2)} \right\rangle_G = \frac{1}{2\pi} \int\limits_0^{2\pi} \sum_{m=-l}^{l} e^{im\alpha} \left(\cos(l_1 - l_2)\alpha - \cos(l_1 + l_2 + 1)\alpha \right) \, d\alpha.$$

Запишем косинусы как суммы экспонент

$$\cos k\alpha = \frac{1}{2} \left(e^{ik\alpha} + e^{-ik\alpha} \right), \quad k = l_1 - l_2, \ l_1 + l_2 + 1$$

и воспользуемся соотношением ортогональности

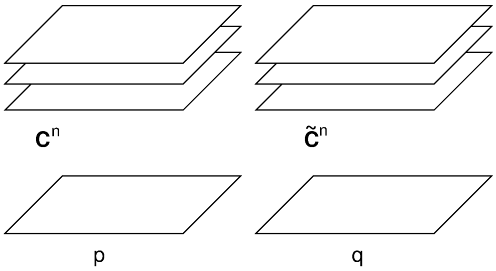
$$\int\limits_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \, d\varphi = 2\pi \delta_{m m'}.$$

Если $l < |l_1 - l_2|$, то в сумме не найдется ни одного слагаемого, который может свернуться с экспонентой из разложения какого-нибудь из двух косинусов и дать ненулевой вклад в интеграл. Если $l > l_1 + l_2$, то такие слагаемые найдутся при $m = \pm(l_1 - l_2), \pm(l_1 + l_2 + 1)$, но первый и второй косинусы входят с разными знаками, поэтому все вклады взаимно уничтожатся. Единственный случай, когда коэффициент k_l отличен от нуля, это $|l_1 - l_2| \leqslant l \leqslant l_1 + l_2$. При этом второй косинус не вносит вклада, а первый вносит при $m = \pm(l_1 - l_2)$. Получится $k_l = 1$, так что формула (8.4) доказана. В прямую сумму входят только представления с $|l_1 - l_2| \leqslant l \leqslant l_1 + l_2$, причем входят по одному разу. Мы доказали правило сложения только для целых моментов. Аналогичное правило существует и для полуцелых. Формула (8.4) справедлива и при полуцелых l, но мера интегрирования в группе $\mathrm{SU}(2)$ будет другой. Чтобы вывести эту формулу для полуцелых l, интегрировать придется до 4π.

Пользуясь ассоциативностью, можно разложить в прямую сумму произведение любого конечного количества представлений. В непрерывной группе определенные сложности могут возникнуть с поиском меры интегрирования по группе. Общее определение инвариантной меры интегрирования см. в монографии [18]. Неприводимые представления многих групп Ли можно найти в справочнике [19] вместе с мерами, а доказательства соответствующих теорем имеются в книгах [20, 21].

8.2 Три определения тензора

Рассмотрим пространство $\mathbb{C}^n$, элементы которого $\mathrm{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{C}^n$ являются векторами. Рассмотрим также сопряженное пространство $\tilde{\mathbb{C}}^n$, элементы которого $\tilde{\mathrm{y}} = (\tilde{y}_1, \ldots, \tilde{y}_n) \in \tilde{\mathbb{C}}^n$ назовем *ковекторами*. В скалярном произведении $\langle \tilde{\mathrm{y}} \,|\, \mathrm{x} \rangle$ условимся всегда писать ковекторы слева. Можно представить себе ковекторы в виде строк, а векторы в виде столбцов.



Построим пространство, состоящее из p экземпляров $\mathbb{C}^n$ и q экземпляров $\tilde{\mathbb{C}}^n$:

$$\mathbb{C}(p,q) = \left(\underset{1}{\mathbb{C}^n} \otimes \cdots \otimes \underset{p}{\mathbb{C}^n}\right) \otimes \left(\underset{1}{\tilde{\mathbb{C}}^n} \otimes \cdots \otimes \underset{q}{\tilde{\mathbb{C}}^n}\right)$$

размерности $\dim \mathbb{C}(p,q) = n^{p+q}$. Размерность здесь мы считаем по количеству комплексных параметров, а символом внизу обозначаем номер экземпляра пространства. Каждый элемент (вектор) составного пространства $\mathbb{C}(p,q)$ состоит из p векторов и q ковекторов

$$T(p,q) = (\underset{1}{\mathbf{x}}, \ldots, \underset{p}{\mathbf{x}}, \underset{1}{\tilde{\mathbf{y}}}, \ldots, \underset{q}{\tilde{\mathbf{y}}}) \in \mathbb{C}(p,q) \tag{8.5}$$

и имеет всего $p+q$ компонент, каждая из которых представляет собой n-мерный комплексный вектор.

Определение 8.3. Вектор $T(p,q) \in \mathbb{C}(p,q)$ называется *тензором* ранга $p+q$, p раз *контравариантным* и q раз *ковариантным*.

Можно ввести в пространстве $\mathbb{C}(p,q)$ базис. Для этого сначала введем базис e_α в пространстве $\mathbb{C}^n$ и базис $\tilde{e}^\beta$ в дуальном (или сопряженном, или дополнительном) пространстве $\tilde{\mathbb{C}}^n$. Базис составного пространства $\mathbb{C}(p,q)$ дается прямым произведением базисов, входящих в него пространств. Для краткости записи обозначим его одной буквой

$$\Psi^{\beta_1\ldots\beta_q}_{\alpha_1\ldots\alpha_p} \equiv \left(e_{\alpha_1} \otimes \cdots \otimes e_{\alpha_p}\right) \otimes \left(\tilde{e}^{\beta_1} \otimes \cdots \otimes \tilde{e}^{\beta_q}\right).$$

Тогда тензор можно разложить по базису

$$T(p,q) = T^{\alpha_1\ldots\alpha_p}_{\beta_1\ldots\beta_q} \Psi^{\beta_1\ldots\beta_q}_{\alpha_1\ldots\alpha_p}, \tag{8.6}$$

где по повторяющимся сверху и снизу индексам подразумевается суммирование $\alpha_j, \beta_j = 1, 2, \ldots, n$. Числа, входящие в таблицу $T^{\alpha_1\ldots\alpha_p}_{\beta_1\ldots\beta_q}$, называется *компонентами* (координатами) тензора.

Переход к новому базису под действием преобразования $g \in G < GL(n,\mathbb{C})$ описывается в каждом экземпляре некоторой матрицей $n \times n$. Обозначим эти матрицы в пространстве $\mathbb{C}^n$ через U , а сопряженном пространстве $\tilde{\mathbb{C}}^n$ — V. Тогда

$$e_\alpha = U^\gamma_\alpha e'_\gamma, \quad \tilde{e}^\beta = V^\beta_\delta \tilde{e'}^\delta.$$

Преобразование g в составном пространстве $\mathbb{C}(p,q)$ описывается произведением матриц

$$\Psi^{\beta_1\ldots\beta_q}_{\alpha_1\ldots\alpha_p} = U^{\gamma_1}_{\alpha_1} \cdots U^{\gamma_p}_{\alpha_p} V^{\beta_1}_{\delta_1} \cdots V^{\beta_q}_{\delta_q} {\Psi'}^{\delta_1\ldots\delta_q}_{\gamma_1\ldots\gamma_p}. \tag{8.7}$$

Тогда, пользуясь **(8.6)**, **(8.7)**, можно записать компоненты тензора в двух базисах

$$T(p,q) = T^{\alpha_1\ldots\alpha_p}_{\beta_1\ldots\beta_q}\Psi^{\beta_1\ldots\beta_q}_{\alpha_1\ldots\alpha_p} = T'^{\gamma_1\ldots\gamma_p}_{\delta_1\ldots\delta_q}\Psi'^{\delta_1\ldots\delta_q}_{\gamma_1\ldots\gamma_p},$$

где

$$T'^{\gamma_1\ldots\gamma_p}_{\delta_1\ldots\delta_q} = T^{\alpha_1\ldots\alpha_p}_{\beta_1\ldots\beta_q}U^{\gamma_1}_{\alpha_1}\cdots U^{\gamma_p}_{\alpha_p}V^{\beta_1}_{\delta_1}\cdots V^{\beta_q}_{\delta_q}. \qquad \mathbf{(8.8)}$$

Последнее соотношение можно считать вторым определением тензора.

Определение 8.4. Таблица чисел называется тензором относительно группы G, если при преобразованиях $g \in G$ ее элементы преобразуются по формуле **(8.8)**, как произведение p компонент вектора и q компонент ковектора.

Введем *дополнительное* пространство $\mathbb{C}(q,p)$, которое состоит из q экземпляров $\mathbb{C}^n$ и p экземпляров $\tilde{\mathbb{C}}^n$. Обозначим за ξ вектор из сопряженного пространства

$$\xi = (\underset{1}{\mathbf{x}},\ldots,\underset{q}{\mathbf{x}},\underset{1}{\tilde{\mathbf{y}}},\ldots,\underset{p}{\tilde{\mathbf{y}}}) \in \mathbb{C}(q,p).$$

Теперь тензор **(8.5)** из первого определения можно умножить скалярно на ξ. Обозначим это произведение

$$T(\xi) = \langle\underset{1}{\tilde{\mathbf{y}}}\,|\,\underset{1}{\mathbf{x}}\rangle\ldots\langle\underset{p+q}{\tilde{\mathbf{y}}}\,|\,\underset{p+q}{\mathbf{x}}\rangle. \qquad \mathbf{(8.9)}$$

Получилась полилинейная форма, т.е. функция, линейная по каждому из аргументов. Значение тензора на векторе из дополнительного пространства тоже можно считать его определением. Для этого рассмотрим T как функционал, который принимает численное значение на векторе ξ из дополнительного пространства.

Определение 8.5. Тензором называется функционал, который на векторе из дополнительного пространства принимает значение, равное полилинейной форме **(8.9)**.

Все три определения почти эквивалентны, но в задачах бывает удобнее пользоваться каким-нибудь одним определением тензора: как вектора, составленного из векторов, как таблицы чисел, которые преобразуются с помощью матриц, или как функционала. В определении 8.4, которое обычно и используется в физике, ничего не сказано о структуре линейного пространства. Эта малая неэквивалентность устраняется дополнительным соглашением о том, что тензоры можно умножать на число, а тензоры одинакового ранга можно складывать.

Пример 8.2. Скаляр в евклидовом пространстве $\mathbb{R}^3$ — это тензор нулевого ранга, вектор — тензор ранга единица. Вектор поляризации среды записывается как

$$P_i = \chi^{(1)}_{ij}E_j + \chi^{(3)}_{ijkl}E_jE_kE_l,$$

где E_i вектор электрического поля, $\chi^{(1)}, \chi^{(3)}$ — линейная и нелинейная восприимчивость. Если обе части умножить скалярно на E_i, получится скаляр, значит $\chi^{(1)}$ принимает числовое значение $\chi^{(1)}_{ij} E_i E_j$ на двух векторах, а $\chi^{(3)}$ принимает значение $\chi^{(3)}_{ijkl} E_i E_j E_k E_l$ на четырех векторах. Причем значения линейны по каждой компоненте каждого вектора. Значит линейная восприимчивость — тензор ранга 2, а нелинейная — тензор ранга 4. Раз речь идет о евклидовом пространстве, можно не делать различий между ковариантными и контравариантными компонентами, а все индексы писать снизу.

Пример 8.3. Линейный оператор $\hat{L}$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}^2$ принимает значение билинейной формы — матричного элемента $\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle$ — на паре функций $\psi \in \mathcal{L}^2$ и φ из сопряженного пространства. Стало быть, оператор $\hat{L}$ — тензор ранга 2, 1 раз ковариантный и 1 раз контравариантный. Эти числа записывают в одной скобке: $\operatorname{rang} \hat{L} = (1,1)$.

Пример 8.4. Рассмотрим пространство дифференцируемых функций трех переменных $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$. Дифференциальные операторы векторного анализа: ротор, градиент и дивергенция преобразуются при вращениях из $\mathrm{SO}(\mathbf{3})$ с помощью матриц вращения, значит являются тензорами. Ротор принимает векторное значение на векторе, поэтому это тензор ранга 2, один раз ковариантный и один раз контравариантный:

$$\operatorname{rang} \operatorname{rot} = (1,1).$$

Дивергенция принимает скалярное значение на векторе, а градиент — векторное значение на скаляре, поэтому

$$\operatorname{rang} \operatorname{div} = (0,1), \quad \operatorname{rang} \operatorname{grad} = (1,0).$$

8.3 Тензорное представление

Пусть в каждом экземпляре $\mathbb{C}^n$ действует группа $G < GL(n, \mathbb{C})$. Тогда в $\mathbb{C}(p,q)$ действует тензорное произведение представлений

$$\mathcal{D}(g) = (D(g) \otimes \cdots \otimes D(g)) \otimes (\tilde{D}(g) \otimes \cdots \otimes \tilde{D}(g)),$$

где $D(g)$ — представление группы G в пространстве $\mathbb{C}^n$, которое входят в прямое произведение p раз, а $\tilde{D}$ матрицы представления в сопряженном пространстве, которые входят q раз.

Определение 8.6. Гомоморфизм $g \to \mathcal{D}(g)$ называется *тензорным представлением* группы G.

Тензорное представление, вообще говоря, приводимо. Его можно разложить по неприводимым, действуя аналогично тому, как мы это делали в разложении

Клебша — Гордана. В подгруппах $G < \mathbf{SO(3)}$ можно разлагать в два этапа: сначала по неприводимым представлениям группы $\mathbf{SO(3)}$. Полученные представления становятся в точечной группе приводимыми и следующим шагом будет их разложение по неприводимым представлениям группы G.

Пример 8.5. Пусть $n = 3, p = 2, G = \mathbf{D_3} < \mathbf{SO(3)}$. 1°. Согласно формуле (8.4)

$$D^{(1)}(g) \otimes D^{(1)}(g) = D^{(0)}(g) \oplus D^{(1)}(g) \oplus D^{(2)}(g). \tag{8.10}$$

2°. Характер группы вращений (8.3) следует выписать для элементов группы $\mathbf{D_3}$:

$$\chi^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

откуда найдем, скалярно умножая на каждую строку таблицы 3.1, $\boxed{\begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{matrix}}$

$$D^{(0)} = D_1, \quad D^{(1)} = D_2 \oplus D_3, \quad D^{(2)} = D_1 \oplus 2D_3.$$

Упражнение 8.1. Пользуясь таблицей 3.2, найдите разложение тензора второго ранга относительно группы тетраэдра $\mathbf{T}$.