Приложение A

Свойства представлений

В качестве приложения приведем доказательства основных свойств представлений, рассмотренных в лекции 2

Теорема A.1. *Всякое представление конечной группы эквивалентно унитарному*

Пусть $D(g),\ \ g \in G$ — комплексное представление размерности n конечной группы G и пусть $g_1 = 1, g_2, \dots, g_N$ — элементы группы G, $N = |G|$. Тогда эрмитова матрица

$$M = E + D^\dagger(g_2)D(g_2) + \cdots + D^\dagger(g_N)D(g_N)$$

— задает положительно определенную квадратичную форму, потому что каждое слагаемое в отдельности задает положительно определенную квадратичную форму[1]:

$$(u, Mu) = \sum_{j=1}^{N}(u, D^\dagger(g_j)D(g_j)u) = \sum_{j=1}^{N}(D(g_j)u, D(g_j)u) > 0.$$

Заметим, что для любого $g \in G$

$$D^\dagger(g)MD(g) = \sum_{i=1}^{N} D^\dagger(g)D^\dagger(g_i)D(g_i)D(g)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} D^\dagger(g_i g)D(g_i g) = \sum_{l=1}^{N} D^\dagger(g_l)D(g_l) = M, \qquad \textbf{(A.1)}$$

где $g_l = g_i g$. В курсе линейной алгебры доказывается, что для любой эрмитовой матрицы M положительно определенной квадратичной формы существует такая невырожденная матрица C, что $M = C^\dagger C$. Действительно, для такой формы имеется базис, в котором форма сводится к сумме квадратов $(u, Mu) = (v, v), v =$

[1] Положительно определенной квадратичную форму называют, когда $(u, Mu) > 0$ для любого вектора $u \neq 0$.

Cu, где C — невырожденная матрица. Тогда $(v,v) = (Cu,Cu) = (u,C^\dagger Cu) = (u,Mu)$ для любого u, откуда $M = C^\dagger C$. Подставляя это выражение для M в тождество **(A.1)**, получаем

$$D^\dagger(g)C^\dagger CD(g) = C^\dagger C,$$

или

$$\left(C^{-1}\right)^\dagger D^\dagger(g)C^\dagger\, CD(g)C^{-1} = \left(CD(g)C^{-1}\right)^\dagger \left(CD(g)C^{-1}\right) = E,$$

поэтому представление $D'(g) = CD(g)C^{-1}$ унитарное.

Теорема А.2. *Представление фактор-группы является представлением самой группы.*

Отображение группы в фактор-группу $G \to G/H$ является гомоморфизмом, потому что сохраняет групповую операцию. Действительно, если в группе $g_1g_2 = g$, то и произведение соответствующих смежных классов $Hg_1Hg_2 = H(g_1g_2) = Hg$. Представление фактор-группы является гомоморфизмом по определению представления. Тогда из цепочки

$$G \to G/H \to D$$

очевидно, что $G \to D$ есть гомоморфизм.

Теорема А.3. *(Первая лемма Шура) Если матрица A связывает два неприводимых представления*

$$D^{(1)}(g)A = AD^{(2)}(g), \tag{A.2}$$

то либо A – нулевая матрица, либо $\dim D^{(1)} = \dim D^{(2)}$ *и* $D^{(1)} \sim D^{(2)}$.

1. Напомним, что $\mathcal{L}$ называется *инвариантным подпространством* относительно матриц $D(g), n = \dim D(g) > \dim \mathcal{L}$, если для любого вектора $w \in \mathcal{L}$ действие всех матриц $D(g)$: не выводит из $\mathcal{L}$, т.е. $\forall g \in G : D(g)w \in \mathcal{L}$. Мы не рассматриваем тривиальных случаев нулевого подпространства и всего пространства, которые всегда инвариантны. Сначала покажем, что если имеется нетривиальное инвариантное подпространство, то $D(g)$ приводимо.

Рассмотрим произвольный вектор $u \in \mathcal{F}^n$, где $\mathcal{F} = \mathbb{R}$ или $\mathbb{C}$, n — размерность. Вектор можно записать как $u = w + u_\perp$, где $w \in \mathcal{L} \subset \mathcal{F}^n$, а $u_\perp$ лежит в ортогональном дополнении. Тогда $D(g)u = D(g)w + D(g)u_\perp$, где $D(g)w$ лежит в $\mathcal{L}$. Таким образом, в этом базисе все матрицы $D(g)$ приводятся к блочно-диагональному виду, а представление приводимо.

Для правильности приведенных рассуждений необходимо, чтобы преобразование $D(g)$ не выводило вектор $u_\perp$ из ортогонального дополнения. Это справедливо, в частности, для унитарных матриц, сохраняющих скалярное произведение $(w, u_\perp) = (D(g)w, D(g)u_\perp) = 0$.

Если представление не унитарное, то его матрицы приводятся, вообще говоря, только к блочно-верхнетреугольному виду. В алгебре доказывается, что для конечной группы матриц над полем $\mathbb{R}$ или $\mathbb{C}$ приводятся и к блочно-диагональному виду (теорема Машке).

2. Рассмотрим сначала случай, когда матрица A — прямоугольная $n_1 \times n_2$. Пусть она имеет больше столбцов, чем строк ($n_2 > n_1$), тогда ее столбцы линейно зависимы. Другими словами, имеется n_2-мерный вектор-столбец w, такой, что $Aw = 0$. Линейная оболочка таких векторов w представляет собой ядро $\operatorname{Ker} A$ линейного преобразования A. Умножим (А.2) справа на w:

$$AD^{(2)}(g)w = D^{(1)}Aw = 0,$$

тогда $D^{(2)}(g)w \in \operatorname{Ker} A$, а значит $\mathcal{L} = \operatorname{Ker} A$ — нетривиальное инвариантное подпространство относительно группы матриц $D^{(2)}(g)$. Это противоречит предположению о неприводимости.

Пусть теперь строк у матрицы A больше, чем столбцов ($n_2 < n_1$), тогда ее строки линейно зависимы и существует n_1-мерный вектор-строка v, такой, что $vA = 0$. Отсюда

$$vD^{(1)}(g)A = vAD^{(2)}(g) = 0,$$

т.е. $vD^{(1)}(g) \in \operatorname{Ker} A$, и $\mathcal{L} = \operatorname{Ker} A$ снова оказывается нетривиальным инвариантным подпространством относительно группы матриц $D^{(1)}(g)$.

3. Пусть теперь матрица A квадратная, но вырожденная: $n_1 = n_2, \det A = 0$. Тогда у матрицы A имеется нулевое собственное значение, а подпространство собственных векторов w, отвечающих этому значению: $Aw = 0$ образует ядро $w \in \operatorname{Ker} A$: $D^{(1)}(g)Aw = AD^{(2)}(g)w = 0 \Rightarrow D^{(2)}(g)w \in \operatorname{Ker} A$. Имеется нетривиальное подпространство $\operatorname{Ker} A$, инвариантное относительно $D(g)$. Опять получается противоречие с предположением о неприводимости представлений (А.2). Мы доказали, что матрица A квадратная и невырожденная, а следовательно имеется обратная матрица A^{-1}, представления $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ эквивалентны и их размерности равны, либо $A = 0$.

Теорема А.4. *(Вторая лемма Шура) Матрица, перестановочная со всеми матрицами неприводимого представления, пропорциональна единичной.*

Пусть $AD(g) = D(g)A$ для всех $g \in G$. Пусть w — собственный вектор: $Aw = \lambda w$. Подействуем на вектор w правой и левой частями равенства $AD(g) = D(g)A$:

$$AD(g)w = D(g)Aw = \lambda D(g)w,$$

тогда $D(g)w$ — тоже собственный вектор оператора A, принадлежащий тому же собственному значению λ. Поскольку представление неприводимое, инвариантного подпространства относительно $D(g)$ не должно быть. Линейная оболочка векторов $D(g)w$ совпадает со всем пространством $\mathcal{F}^n$, когда g пробегает всю группу. Любой вектор является собственным с собственным значением λ, откуда $A = \lambda E$, где E — единичная матрица. Такая матрица, пропорциональная единичной, называется в линейной алгебре *скалярной матрицей*.

Теорема А.5. *(Соотношение ортогональности)*

$$\sum_{g\in G}\left[D_{ij}^{(\alpha)}(g)\right]^* D_{kl}^{(\beta)}(g)=\frac{|G|}{n_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ik}\delta_{jl},\quad n_\alpha=\dim D^{(\alpha)}, \tag{A.3}$$

где $D^{(\alpha)}, D^{(\beta)}$ — при $\alpha\neq\beta$ унитарные неэквивалентные неприводимые представления, а $D_{ij}^{(\alpha)}$ — элементы матрицы $D^{(\alpha)}$.

Обозначим сумму по группе

$$M_{jl}(\alpha,\beta,i,k)=\sum_{g\in G}\left[D_{ij}^{(\alpha)}(g)\right]^* D_{kl}^{(\beta)}(g),$$

где индексы матричных элементов M_{jl} пробегают значения $i,j=1,\dots,n_\alpha,\ k,l=1,\dots,n_\beta$, n_α, n_β — размерности неприводимых представлений номер α,β, а верхние индексы $\alpha,\beta=1,\dots,L_1$ пробегают номера всех неприводимых представлений. В силу унитарности представлений

$$D_{ij}^{\alpha\,*}(g)=D_{ji}^{\alpha}(g^{-1}). \tag{A.4}$$

Для всех допустимых значений α,β,i,k матрица M связывает два неэквивалентных неприводимых представления. Действительно, пользуясь (А.4), получим

$$\sum_{j=1}^{n_\alpha}D_{mj}^{(\alpha)}(g)M_{jl}(\alpha,\beta,i,k)=\sum_{g'\in G}\left[\sum_{j=1}^{n_\alpha}D_{ij}^{(\alpha)}(g')D_{jm}^{(\alpha)}(g^{-1})\right]^* D_{kl}^{(\beta)}(g')$$
$$=\sum_{g'\in G}\left[D_{im}^{(\alpha)}(g'g^{-1})\right]^*\sum_{q=1}^{n_\beta}D_{kq}^{(\beta)}(g'g^{-1})D_{ql}^{(\beta)}(g)=\sum_{q=1}^{n_\beta}M_{mq}(\alpha,\beta,i,k)D_{ql}^{(\beta)}(g),$$

или в матричной форме для любого $g\in G$

$$D^{(\alpha)}(g)M(\alpha,\beta,i,k)=M(\alpha,\beta,i,k)D^{(\beta)}(g).$$

Тогда в силу первой и второй лемм Шура

$$M(\alpha,\beta,i,k)=\delta_{\alpha\beta}E_{n_\alpha}\lambda(i,k). \tag{A.5}$$

Здесь E_{n_α} — единичная матрица порядка n_α ($E_{jl}=\delta_{jl}$), а множитель λ зависит только от чисел i,k. Этот множитель находится, если взять след от левой и правой частей (А.5) при $\alpha=\beta$:

$$n_\alpha\lambda(i,k)=\sum_{j=1}^{n_\alpha}\sum_{g\in G}\left[D_{ij}^{(\alpha)}(g)\right]^* D_{kj}^{(\alpha)}(g)=\sum_{g\in G}\sum_{j=1}^{n_\alpha}D_{kj}^{(\alpha)}(g)D_{ji}^{(\alpha)}(g^{-1})=\sum_{g\in G}D_{ki}(1)=|G|\delta_{ki}.$$

Отсюда и следует соотношение ортогональности (А.3).

Теорема А.6. *Все неприводимые представления абелевой группы одномерны.*

Предположим противное, пусть размерность неприводимого представления абелевой группы G $\dim D(g) = n > 1$. Рассмотрим элемент группы $g \neq 1$. Поскольку матрица $D(g)$ коммутирует со всеми матрицами неприводимого представления, по второй лемме Шура она скалярная, что противоречит предположению о неприводимости.

Теорема А.7. *Число неэквивалентных неприводимых представлений равно количеству классов сопряженных элементов.*

Пусть $R(g)$ — матрицы регулярного представления группы G размерности $N = |G|$. Напомним, что регулярное представление строится по таблице умножения группы $g_k = g_i g_j$:

$$R_{kj}(g_i) = T^k_{ij},$$

где i, j — номера строки и столбца таблицы умножения, а k — номер элемента группы, стоящего на их пересечении (см. стр.16). Построим вспомогательную матрицу

$$M(x) = \sum_{i=1}^{N} x_i R(g_i), \tag{A.6}$$

где g_i — элементы группы G, а x_i — комплексные числа, которые будем рассматривать как координаты некоторого вектора $x = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$.

1. Сначала покажем, что $M(x) = 0$ тогда и только тогда, когда $x = 0$. Если x — нулевой вектор, то $M = 0$ по построению. Пусть теперь $M = 0$, а матрицы регулярного представления получены из единичной матрицы порядка N перестановкой столбцов. Тогда k-я строка матрицы M состоит их координат вектора x, переставленных в другом порядке. Значит из того, что строка нулевая, следует равенство нулю всех координат x_i.

2. Пусть существует K неэквивалентных неприводимых представлений группы G. Как мы показали в лекции 3, каждому из них отвечает характер $\chi^{(\alpha)}(\sigma_a)$, где верхний индекс $\alpha = 1, 2, \ldots, K$ нумерует неприводимые представления, а нижний индекс $a = 1, 2, \ldots, L$ — классы сопряженных элементов. Как следует из (3.4), все векторы характеров ортогональны, если рассматривать скалярное произведение с весом, равным числу элементов p_a в классе σ_a

$$\frac{1}{|G|} \sum_{a=1}^{L} p_a \left[\chi^{(\alpha)}(\sigma_a)\right]^* \chi^{(\beta)}(\sigma_a) = \delta_{\alpha\beta}.$$

Можно было бы перейти к векторам $\tilde{\chi}^{\alpha}(\sigma_a) = \chi^{\alpha}(\sigma_a)\sqrt{p_a/|G|}$, которые были бы ортогональны в обычном смысле. Число векторов линейно независимой системы не может превышать количества компонент, поэтому $K \leqslant L$.

3. Пусть $K < L$, то есть различных представлений меньше, чем классов сопряженных элементов. Тогда таблица неприводимых характеров — прямоугольная матрица, значит ее столбцы линейно зависимы. Существует ненулевой набор коэффициентов λ_a, такой что для всех α

$$\sum_{a=1}^{L} \lambda_a p_a \chi^{\alpha}(\sigma_a) = 0. \tag{A.7}$$

Построим вектор $\tilde{x}$ по следующему правилу. Его компоненты $\tilde{x}_i = \lambda_a$, если $g_i \in \sigma_a$. Рассмотрим вспомогательную матрицу **(A.6)** на векторе $\tilde{x}$

$$M(\tilde{x}) = \sum_{a=1}^{L} \lambda_a \left(\sum_{g \in \sigma_a} R(g) \right). \tag{A.8}$$

Разложим регулярное представление в прямую сумму неприводимых

$$R(g) = \bigoplus_{\alpha=1}^{K} k_\alpha D^{(\alpha)}(g), \tag{A.9}$$

где k_α — кратность, с которой неприводимое представление $D^{(\alpha)}$ входит в разложение. Подставим **(A.9)** в **(A.8)** и поменяем порядок прямого суммирования и суммирования по группе:

$$M(\tilde{x}) = \bigoplus_{\alpha=1}^{K} k_\alpha \sum_{a=1}^{L} \lambda_a M_\alpha^a, \quad M_\alpha^a = \sum_{g \in \sigma_a} D^{(\alpha)}(g). \tag{A.10}$$

Заметим, что матрица M_α^a коммутирует с $D^{(\alpha)}(g)$. Действительно,

$$D^{(\alpha)}(g) M_\alpha^a = \sum_{g' \in \sigma_a} D^{(\alpha)}(gg') = \sum_{g' \in \sigma_a} D^{(\alpha)}(gg'g^{-1}) D^{(\alpha)}(g) = M_\alpha^a D^{(\alpha)}(g),$$

потому что элемент $gg'g^{-1}$ лежит в том же классе сопряженных элементов, что и g'. Тогда по второй лемме Шура M_α^a — скалярная матрица порядка n_α: $M_\alpha^a = c_\alpha^a E$ След матрицы M_α^a равен $c_\alpha^a n_\alpha$, а с другой стороны по построению это $p_a \chi^{(\alpha)}(\sigma_a)$. Отсюда $c_\alpha^a = p_a \chi^{(\alpha)}(\sigma_a)/n_\alpha$.

Вернемся к вспомогательной матрице **(A.10)**:

$$M(\tilde{x}) = \bigoplus_{\alpha=1}^{K} \frac{k_\alpha}{n_\alpha} E_{n_\alpha} \left[\sum_{a=1}^{L} \lambda_a p_a \chi^{(\alpha)}(\sigma_a) \right].$$

Из линейной зависимости столбцов **(A.7)** следует, что квадратная скобка обращается в нуль, тогда и $M(\tilde{x}) = 0$, хотя $\tilde{x} \neq 0$. Мы получили противоречие с пунктом 1. Следовательно предположение пункта 3 ложно и $K \geqslant L$. Но в пункте 2 мы показали, что $K \leqslant L$, поэтому $K = L$. Теорема доказана.

Теорема А.8. *Сумма квадратов размерностей неприводимых представлений равна порядку группы.*

Регулярное представление состоит из единичных матриц порядка N с переставленными строками. След единичной матрицы $\operatorname{tr} R(1) = N$, а след остальных матриц равен нулю, потому что ни одна строка не остается на месте. Поэтому характер $\chi_R = (N, 0, 0, \ldots, 0)$. Следовательно, коэффициенты разложения в прямую сумму неприводимых представлений совпадают с размерностями неприводимых представлений:

$$k_\alpha = \langle \chi_r \chi^{(\alpha)} \rangle_G = n_a.$$

Отсюда

$$R(g) = \bigoplus_{\alpha=1}^{L} n_\alpha D^{(\alpha)}(g).$$

Теперь вычислим характер единичного элемента

$$\operatorname{tr} R(1) = N = \sum_{\alpha=1}^{L} n_\alpha^2.$$

В заключение докажем простейшую классификационную теорему, сформулированную на стр.14. Будем действовать методом, изложенным в [4, 17].

Теорема А.9. *Дискретные подгруппы собственной группы вращений исчерпываются списком* $\mathbf{C_n}, \mathbf{D_n}, \mathbf{T}, \mathbf{O}, \mathbf{Y}$.

Элементы точечной группы G, описывающей симметрию молекулы, — это оси n-го порядка. Если ограничиться подгруппами $\mathrm{SO}(3)$, то зеркальных плоскостей и зеркально-поворотных осей не будет. Все оси c_n пересекаются в одной точке. Опишем вокруг этой точки единичную сферу, ось c_n пересекает эту сферу в двух точках, которые мы назовем *полюсами* P.

Обозначим H подгруппу, состоящую из вращений на углы, кратные $2\pi/n$, вокруг оси c_n. Разложим группу на правые смежные классы относительно этой подгруппы. Количество классов по теореме Лагранжа (стр.10) равно $m = N/n = |G : H|$, где $N = |G|$:

$$G = Hg_1 + Hg_2 + \ldots Hg_m.$$

Элемент $g \in G$ оставляет полюс P на месте, либо переводит в другой полюс того же порядка. Каждый правый смежный класс переводит P в один и тот же полюс P_i, причем разные классы — в разные полюсы. Все полюсы, получаемые из данного такими преобразованиями, назовем *звездой эквивалентных полюсов*.

Обозначим (P, g) пару из полюса и преобразования, оставляющего полюс на месте. Исключая из рассмотрения единичное преобразование, посчитаем число возможных пар (P, g). С одной стороны, полное число таких пар есть $2(N-1)$, потому что всего в группе $N - 1$ преобразований, отличных от единичного, каждое

Таблица А.1: Целочисленные решения уравнения для случая трех звезд

n_3	n_2	n_1	N	Группа
2	2	N/2	четное	$\mathbf{D_{n_1}}$
2	3	3	12	T
2	3	4	24	O
2	3	5	60	Y

из них — поворот вокруг оси, а каждая ось задает два полюса. С другой стороны, для каждой звезды это число равно $m_k(n_k-1)$, где значок k нумерует разные звезды, m_k — число эквивалентных полюсов в k-й звезде, n_k — кратность этих полюсов. Отсюда

$$2(N-1) = \sum_k m_k(n_k-1)$$

или, подставляя $m_k = N/n_k$ и сокращая обе части на N, найдем

$$2 - \frac{2}{N} = \sum_k \left(1 - \frac{1}{n_k}\right). \qquad \textbf{(A.11)}$$

Остается решить **(A.11)** в целых числах. Правая часть уравнения может содержать только два или три слагаемых, потому что $N, n_k \geqslant 2$. Поэтому бывают группы только с двумя и тремя звездами.

Случай **

$$\frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}.$$

Единственное решение $n_1 = n_2 = N$. Получилась группа с двумя звездами, в каждой из которых по одному полюсу кратности N. Это группа C_N.

Случай ***

$$1 + \frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3}.$$

Одно из чисел n_i должно быть равно 2. Если бы все они были $n_i \geqslant 3$, то правая часть была бы меньше или равна единице. Пусть $n_3 = 2$, тогда

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}.$$

Пусть $n_1 \geqslant n_2 \geqslant n_3$. Тогда $n_2 \leqslant 3$, поскольку если бы оба числа n_1, n_2 были больше или равны 4, уравнение не имело бы решений. Остается перебрать два случая: $n_2 = 2, 3$. Таких возможностей всего четыре, все они приведены в таблице А

В последнем столбце таблицы указаны группы. В первой строке — группа диэдра порядка $n_1 = N/2$. В этом случае две звезды состоят из полюсов кратности 2 и одна звезда — из полюсов кратности $N/2$. Полюсы кратности $N/2$ отвечают двухсторонним осям второго порядка, а кратности 2 — перпендикулярным им осям второго порядка. Во второй строке таблицы имеется две звезды по 4 полюса кратности 3 в каждой. Одна из этих звезд отвечает вершинам правильного тетраэдра, а другая — диаметрально противоположным точкам на единичной сфере (точки пересечения сферы с продолжениями высот тетраэдра). Имеется также шесть полюсов кратности 2. Это проекции из центра на сферу середин ребер тетраэдра. Аналогично можно разобраться с третьей и четвертой строками таблицы.