Глава 16

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРЯМОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ

1. Большинство физических задач обладают одновременно не одним, а несколькими видами симметрии. Например, в случае молекулы воды мы имеем дифференциальное уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{6}\frac{\partial^2}{\partial X_k^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{30}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}\right)\psi+V\psi=E\psi. \qquad (16.E.1)$$

Здесь M — масса каждого из водородных ядер; $X_1, \ldots, X_6$ — их декартовы координаты; m — масса электрона; $x_1, \ldots, x_{30}$ — декартовы координаты электронов. В силу своей большой массы атом кислорода может считаться покоящимся в центре масс; создаваемая им потенциальная энергия включена в V. Задача, представленная уравнением (16.E.1), имеет несколько видов симметрии: во-первых, можно переставить координаты ядер атомов водорода; во-вторых, можно переставить координаты электронов; в-третьих, вся система может быть повернута. Среди вращений следует рассматривать не только группу чистых вращений, но и полную группу вращений и отражений. При этом возникает вопрос о том, как лучше всего рассматривать совместное влияние свойств симметрии.

2. Три упомянутых выше типа операций обладают тем свойством, что операции одного типа *коммутируют* с операциями других. Ясно, что нет никакой разницы, переставить ли сначала координаты частиц, а затем совершить поворот, или наоборот. Поэтому принимается, что элементы каждой группы операторов коммутируют со всеми элементами других групп операторов, рассматриваемых совместно.

Рассмотрим прежде всего случай, когда уравнение (16.E.1) инвариантно относительно лишь двух групп. Пусть элементами этих двух групп будут E', A_2, A_3, ..., A_n и E'', B_2, B_3, ..., B_m. Тогда уравнение (16.E.1) *инвариантно* не только относительно операторов $\mathsf{P}_{E'}=1$, P_{A_2}, ..., P_{A_n} и $\mathsf{P}_{E''}=1$, P_{B_2}, ..., P_{B_m}, но также *относительно всех nm произведений* $\mathsf{P}_{A_\alpha}\cdot\mathsf{P}_{B_\beta}$ *этих опе-*

раторов (в силу упомянутой выше коммутативности: $\mathbf{P}_{A_\varkappa} \cdot \mathbf{P}_{B_\lambda} = \mathbf{P}_{B_\lambda} \cdot \mathbf{P}_{A_\varkappa}$). Произведения $\mathbf{P}_{A_\varkappa}\mathbf{P}_{B_\lambda}$ образуют группу в соответствии с законом операторного умножения, так как произведение двух элементов группы снова является элементом группы:

$$\mathbf{P}_{A_\varkappa}\mathbf{P}_{B_\lambda} \cdot \mathbf{P}_{A_{\varkappa'}}\mathbf{P}_{B_{\lambda'}} = \mathbf{P}_{A_\varkappa}\mathbf{P}_{A_{\varkappa'}}\mathbf{P}_{B_\lambda}\mathbf{P}_{B_{\lambda'}} = \mathbf{P}_{A_\varkappa A_{\varkappa'}}\mathbf{P}_{B_\lambda B_{\lambda'}}. \quad (16.1)$$

Тождественным элементом группы является тождественный оператор $\mathbf{P}_{E'} \cdot \mathbf{P}_{E''} = \mathbf{1}$. Эта группа называется *прямым произведением* группы $\mathbf{P}_A$ и группы $\mathbf{P}_B$; она является полной группой симметрии уравнения (16.E.1).

В общем случае прямое произведение двух групп E', A_2, ..., A_n и E'', B_2, ..., B_m имеет в качестве элементов *пары* $A_\varkappa B_\lambda$, составленные из двух „сомножителей", т. е. из двух групп, из которых оно построено. Закон группового умножения имеет вид

$$A_\varkappa B_\lambda \cdot A_{\varkappa'} B_{\lambda'} = A_\varkappa A_{\varkappa'} \cdot B_\lambda B_{\lambda'} = A_{\varkappa''} B_{\lambda''}, \quad (16.1a)$$

где $A_{\varkappa''} = A_\varkappa A_{\varkappa'}$ и $B_{\lambda''} = B_\lambda B_{\lambda'}$. Пишут просто $A_\varkappa$ вместо $A_\varkappa \cdot E''$ и B_λ вместо $E' \cdot B_\lambda$. Соотношения (16.1) и (16.1a) показывают, что группа произведений $A_\varkappa \cdot B_\lambda$ изоморфна группе произведений $\mathbf{P}_{A_\varkappa} \cdot \mathbf{P}_{B_\lambda}$; мы пишем $\mathbf{P}_{A_\varkappa}\mathbf{P}_{B_\lambda} = \mathbf{P}_{A_\varkappa B_\lambda}$. Можно также исследовать представления группы $\mathbf{A}_\varkappa \cdot \mathbf{B}_\lambda$ вместо представлений группы $\mathbf{P}_{A_\varkappa}\mathbf{P}_{B_\lambda}$.

3. Чтобы найти представление прямого произведения двух групп, рассмотрим прямое произведение матриц $\mathbf{a}(A_\varkappa)$ и $\mathbf{b}(B_\lambda)$, которые соответствуют в некоторых представлениях отдельных сомножителей элементам $A_\varkappa$ и B_λ соответственно, и сопоставим его элементу $A_\varkappa B_\lambda$. Матрицы $\mathbf{a}(A_\varkappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda) = \mathbf{d}(A_\varkappa B_\lambda)$ действительно образуют представление прямого произведения, так как, согласно соотношению (2.7),

$$\mathbf{a}(A_\varkappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{a}(A_{\varkappa'}) \times \mathbf{b}(B_{\lambda'}) = \mathbf{a}(A_\varkappa) \cdot \mathbf{a}(A_{\varkappa'}) \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{b}(B_{\lambda'}) = \\ = \mathbf{a}(A_\varkappa A_{\varkappa'}) \times \mathbf{b}(B_\lambda B_{\lambda'}). \quad (16.2)$$

Иначе говоря, произведение матриц $\mathbf{a}(A_\varkappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$ и $\mathbf{a}(A_{\varkappa'}) \times \mathbf{b}(B_{\lambda'})$, соответствующих элементам $A_\varkappa B_\lambda$ и $A_{\varkappa'} B_{\lambda'}$, является матрицей, которая соответствует элементам $A_\varkappa B_\lambda A_{\varkappa'} B_{\lambda'} = A_\varkappa A_{\varkappa'} B_\lambda B_{\lambda'}$.

Элементами матрицы $\mathbf{d}(A_\varkappa B_\lambda) = \mathbf{a}(A_\varkappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$ являются

$$d(A_\varkappa B_\lambda)_{\rho'\sigma';\rho\sigma} = a(A_\varkappa)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma}. \quad (16.2a)$$

Если $\mathbf{a}(A_\varkappa)$ и $\mathbf{b}(B_\lambda)$ неприводимы, то тем же свойством обладают и $\mathbf{d}(A_\varkappa B_\lambda)$. Если матрица $(M_{\rho'\sigma';\rho\sigma})$ коммутирует со всеми матрицами $\mathbf{d}(A_\varkappa B_\lambda)$, то можно написать

$$\sum_{\rho\sigma} M_{\rho'\sigma';\rho\sigma}\, a(A_\varkappa)_{\rho\rho''} b(B_\lambda)_{\sigma\sigma''} = \sum_{\rho\sigma} a(A_\varkappa)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma} M_{\rho\sigma;\rho''\sigma''} \quad (16.3)$$

при всех $\varkappa$ и λ. В частности, если положить сначала $A=E'$, а затем $B=E''$, то $\mathbf{a}(E')$ или $\mathbf{b}(E'')$ является единичной матрицей, и (16.3) принимает вид

$$\sum_{\sigma} M_{\rho'\sigma';\,\rho''\sigma} b\,(B_\lambda)_{\sigma\sigma''} = \sum_{\sigma} b\,(B_\lambda)_{\sigma'\sigma} M_{\rho'\sigma;\,\rho''\sigma''} \tag{16.3а}$$

или

$$\sum_{\rho} M_{\rho'\sigma';\,\rho\sigma''} a\,(A_\varkappa)_{\rho\rho''} = \sum_{\rho} a\,(A_\varkappa)_{\rho'\rho} M_{\rho\sigma';\,\rho''\sigma''}. \tag{16.3б}$$

Субматрицы, входящие в

$$\begin{pmatrix} M_{\rho'1;\,\rho''1} & M_{\rho'1;\,\rho''2} & \dots \\ M_{\rho'2;\,\rho''1} & M_{\rho'2;\,\rho''2} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}, \tag{16.E.2}$$

коммутируют со всеми $\mathbf{b}(B_\lambda)$ при всех ρ' и ρ''. Аналогичным образом из (16.3б) следует, что субматрицы в

$$\begin{pmatrix} M_{1\sigma';\,1\sigma''} & M_{1\sigma';\,2\sigma''} & \dots \\ M_{2\sigma';\,1\sigma''} & M_{2\sigma';\,2\sigma''} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix} \tag{16.E.3}$$

коммутируют со всеми $\mathbf{a}(A_\varkappa)$ при всех σ' и σ''. Следовательно, субматрицы как в (16.E.2), так и в (16.E.3), являются постоянными матрицами. Отсюда следуют соотношения

$$M_{\rho'\sigma';\,\rho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\rho'1;\,\rho''1}, \tag{16.4а}$$

$$M_{\rho'\sigma';\,\rho''\sigma''} = \delta_{\rho'\rho''} M_{1\sigma';\,1\sigma''}, \tag{16.4б}$$

из которых получаем, что

$$M_{\rho'\sigma';\,\rho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\rho'1;\,\rho''1} = \delta_{\sigma'\sigma''}\delta_{\rho'\rho''} M_{11;\,11}. \tag{16.4}$$

Таким образом, сама матрица $\mathbf{M}$ должна быть постоянной матрицей; поэтому $\mathbf{d}(A_\varkappa B_\lambda)$ неприводимо.

4. У нас есть теперь метод, с помощью которого можно получить неприводимые представления группы, являющейся прямым произведением двух групп, предполагая, что неприводимые представления „сомножителей“ известны. При этом остается еще открытым вопрос о том, все ли неприводимые представления прямого произведения могут быть получены таким способом.

Пусть размерности неприводимых представлений группы A обозначены через $g_1, g_2, g_3, \dots$, а представлений группы B — через $h_1, h_2, h_3, \dots$. Если скомбинировать каждое представление

первой группы с каждым представлением второй, получим неприводимые представления прямого произведения с размерностями g_1h_1, g_1h_2, ..., g_2h_1, g_2h_2, ... Если принять, что, в силу обсуждавшейся в гл. 9 (стр. 102) теоремы, сумма квадратов размерностей всех неприводимых представлений группы равна ее порядку, то

$$g_1^2+g_2^2+\ldots=n \quad \text{и} \quad h_1^2+h_2^2+\ldots=m,$$

где n и m — соответственно порядки групп A и B. Следовательно, сумма квадратов размерностей представлений прямого произведения, полученных выше, равна порядку nm прямого произведения групп:

$$(g_1h_1)^2+(g_1h_2)^2+\ldots+(g_2h_1)^2+(g_2h_2)^2+\ldots= \\ =g_1^2m+g_2^2m+\ldots=nm.$$

Отсюда следует, что этот метод действительно дает все неприводимые представления[1]).

Эти соображения могут быть также представлены иным способом, применимым и к непрерывным группам. Все $g_1^2+g_2^2+g_3^2+\ldots$ коэффициентов первого представления, рассматриваемых как функции[2]) A, образуют полную систему функций для функций от A. Аналогичным образом, $h_1^2+h_2^2+h_3^2+\ldots$ коэффициентов представлений, рассматриваемых как функции от B, образуют полную систему функций от B. Поэтому все произведения этих двух систем функций образуют полную систему функций двух переменных.

5. Собственные значения дифференциального уравнения (16.E.1) могут быть разделены на качественно различные классы; каждому собственному значению принадлежит какое-либо представление полной группы симметрии уравнения (16.E.1) [группы операторов, оставляющих (16.E.1) инвариантным]. Лучше всего характеризовать неприводимое представление этой группы (прямого произведения трех упомянутых групп), пользуясь тремя символами, указывающими на три неприводимых представления, из которых построено рассматриваемое представление. Так, можно сказать, что собственное значение уравнения (16.E.1) принадлежит симметричному представлению перестановки ядер H, антисимметричному представлению перестановки десяти электронов и семимерному представлению группы вращений. Это утверждение подразумевает, что собственное значение принадлежит представлению прямого произведения этих трех групп, получающемуся из указанных представлений „сомножителей“.

---

[1]) Два „прямых произведения“, существенно различных по своей природе, обсуждаются здесь одновременно: прямое произведение двух групп и прямое произведение двух матриц. Элементами прямого произведения групп являются $A_\varkappa B_\lambda$. Представление $\mathbf{a}(A_\varkappa)\times\mathbf{b}(B_\lambda)$, являющееся прямым произведением $\mathbf{a}(A_\varkappa)$ и $\mathbf{b}(B_\lambda)$, соответствует элементу $A_\varkappa B_\lambda$.

[2]) Функция от A означает соответствие числа $J(A_\varkappa)$ каждому элементу группы $A_\varkappa$.

Собственные функции такого собственного значения, соответствующие строкам прямого произведения трех представлений, имеют три индекса, указывающих на то, каким строкам представлений трех составляющих групп они принадлежат. Две собственные функции, отличающиеся одним или более из этих трех индексов, ортогональны друг другу; это остается справедливым, даже если к ним применяется произвольный симметричный оператор. Ортогональность функций можно вывести, во-первых, из того обстоятельства, что они принадлежат различным строкам представления прямого произведения, и, во-вторых, — если различаются, скажем, их вторые индексы — из того, что они принадлежат различным строкам представления второй группы.

Если оператор $\mathbf{P}_A = \mathbf{P}_A \mathbf{P}_{E''}$ первой группы применяется к функции, принадлежащей $\rho\sigma$-й строке представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$ прямого произведения двух групп, то получаемая при этом функция может быть разложена по функциям, принадлежащим строкам 1σ, 2σ, 3σ, ... представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$. В самом деле, коэффициенты остаются такими же, как если бы второй группы вообще не было:

$$\mathbf{P}_A \mathbf{P}_{E''} \psi_{\rho\sigma} = \sum_{\rho'\sigma'} a(A)_{\rho'\rho}\, b(E'')_{\sigma'\sigma}\, \psi_{\rho'\sigma'} =$$

$$= \sum_{\rho'\sigma'} a(A)_{\rho'\rho}\, \delta_{\sigma'\sigma} \psi_{\rho'\sigma'} = \sum_{\rho'} a(A)_{\rho'\rho}\, \psi_{\rho'\sigma}. \qquad (16.5)$$

Функция, принадлежащая к $\rho\sigma$-й строке представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$, принадлежит тем самым ρ-й строке $\mathbf{a}(A)$ и σ-й строке $\mathbf{b}(B)$; такая функция обладает всеми свойствами этих двух классов функций.

6. При построении „правильных линейных комбинаций“, используемых в *теории возмущений*, линейные комбинации должны быть образованы внутри каждого семейства функций, причем семейством является набор функций, принадлежащих одной строке $\sigma\rho$ представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$ прямого произведения рассматриваемых групп симметрии. Для этого мы начинаем с составления линейных комбинаций f_1, f_2, ..., которые принадлежат ρ-й строке $\mathbf{a}(A)$; тогда каждая функция $\psi_{\rho\sigma}$, принадлежащая $\rho\sigma$-й строке $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$, должна быть линейной комбинацией функций f_1, f_2, ... Предположим, что $\psi_{\rho\sigma}$ включает также функции f'_1, f'_2, ..., не принадлежащие представлению $\mathbf{a}(A)$ или его ρ-й строке, так что

$$\psi_{\rho\sigma} = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \ldots + c'_1 f'_1 + c'_2 f'_2 + \ldots. \qquad (16.6)$$

Тогда с необходимостью получаем $c'_1 f'_1 + c'_2 f'_2 + c'_3 f'_3 + \ldots = 0$. Действительно, если перенести $c_1 f_1 + c_2 f_2 + \ldots$ в (16.6) в левую часть, то вся левая часть принадлежит ρ-й строке $\mathbf{a}(A)$; тогда левая часть ортогональна всем членам правой, так что обе части должны быть равны нулю.

7. Воспользуемся теоремами относительно представлений прямого произведения для нахождения неприводимых представлений трехмерной группы вращений и отражений. Группа вращений и отражений есть группа вещественных ортогональных трехмерных матриц с определителями ± 1. Она является прямым произведением группы чистых вращений и группы, изоморфной группе отражений, которая состоит из тождественного элемента E и инверсии I:

$$E=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}; \qquad I=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что всякая вещественная ортогональная матрица может быть получена из чистого вращения путем умножения на E или I; ее определитель либо уже равен $+1$, и в этом случае мы уже имеем дело с чистым вращением, либо, если определитель равен -1, она получается из чистого вращения путем умножения на I. Ясно также, что E и I коммутируют со всеми матрицами группы чистых вращений (и вообще со всеми матрицами).

Группа отражений имеет два неприводимых представления: тождественное представление (известное также как положительное) и отрицательное представление, в котором матрица (1) соответствует тождественному элементу, а матрица (-1) — инверсии I. Следовательно, два представления группы вращений и отражений могут быть получены из каждого представления $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ группы чистых вращений, комбинируя $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ с положительным и отрицательным представлениями группы отражений.

Трехмерная группа вращений и отражений имеет два (однозначных) неприводимых представления каждой нечетной размерности 1, 3, 5, ... Они могут быть обозначены символами $l=0_+$, 0_-, 1_+, 1_-, 2_+, ... Как представление l_+, так и представление l_- имеют размерность $2l+1$; в каждом из них одни и те же матрицы соответствуют чистым вращениям, так же как и в $(2l+1)$-мерных представлениях группы чистых вращений. В представлении l_+ та же самая матрица $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$, которая соответствует R, отвечает теперь вращению и отражению IR; с другой стороны, в представлении l_- матрица $-\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ соответствует IR.