Вернувшись к характерам группы, получим

$$\sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)*} \chi_q^{(\alpha)} = \frac{g}{c_p} \delta_{pq}, \tag{4.36}$$

т. е. соотношение ортогональности для столбцов таблицы характеров.

§ 15. ПОСТРОЕНИЕ ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРОВ

Мы находили элементы таблицы характеров группы D_3 (табл. 4.2), суммируя диагональные элементы построенных ранее матриц представления. Это не самый простой способ построения таблицы характеров. Но таблицы характеров для всех групп, которые могут понадобиться, уже давно вычислены (они приведены в приложении 1). Тем не менее было бы интересно увидеть, как из априорных соображений можно построить таблицу характеров для большинства обычных конечных групп. Это выполняется удивительно просто. Уже найденных нами свойств характеров неприводимых представлений во многих случаях достаточно, чтобы однозначно определить характеры. Выпишем эти свойства.

1. Число неприводимых представлений = числу классов.

2. Размерность s_α неприводимых представлений должна удовлетворять равенству $\sum_{\alpha} s_\alpha^2 = g$, которое во многих случаях дает для s_α единственное решение. Далее, поскольку характер для единичного элемента E равен размерности представления, числа в первом столбце таблицы характеров — это просто целые числа s_α.

3. Для каждой группы существует одномерное тождественное представление, для которого $\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)=1$ и, следовательно, $\chi(\mathsf{G}_a)=1$. Этим определяется одна из строк таблицы; обычно это первая строка.

4. Строки взаимно ортогональны с весами c_p и нормированы к g, т. е.

$$\sum_{p} c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g\delta_{\alpha\beta} \text{— это формула (4.25).}$$

В частности, если β — тождественное представление, то для всех представлений α, не совпадающих с тождественным,

$$\sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} = 0.$$

5. Столбцы таблицы взаимно ортогональны и нормированы к g/c_p:

$$\sum_\alpha \chi_p^{(\alpha)} \chi_q^{(\alpha)*} = \frac{g}{c_p} \delta_{pq} \text{— это формула (4.36).}$$

В частности, если в качестве класса $\mathscr{C}_q$ выбран единичный элемент E, для всех остальных столбцов имеем

$$\sum_\alpha s_\alpha \chi_p^{(\alpha)} = 0.$$

Таким путем можно построить таблицу характеров для некоторых простейших групп. Все, что при этом следует знать о группе,— это ее порядок g, число классов и число элементов в каждом классе. Для более сложных групп такой информации оказывается уже недостаточно. В этом случае для вывода дополнительных соотношений между характерами требуется обратиться к групповой таблице умножения (т. 2, приложение 3.3) или же, если группа содержит нормальную подгруппу, ее представления могут быть выведены из представлений нормальной подгруппы (т. 2, гл. 20, § 3). Подчеркнем, однако, что в большинстве физических приложений теории групп необходимо лишь просто взглянуть на таблицу характеров группы.

§ 16. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В этом и последующих параграфах мы будем в основном рассматривать свойства базисных векторов пространства, в котором задано неприводимое представление. Эти базисные векторы можно рассматривать абстрактно (как, например, в § 2), обозначая их через $\mathbf{e}_i^{(\alpha)}$, где $i = 1, 2, \ldots s_\alpha$, или, в более конкретном случае, они могут быть функциями $\psi_i^{(\alpha)}(\mathbf{r})$ в некотором векторном пространстве функций (§ 3, п. B). Поскольку в квантовохимических приложениях мы в основном будем иметь дело с функциями, для обозначения базисных векторов представления $\mathsf{T}^{(\alpha)}$ в этом и последующих параграфах преимущественно