

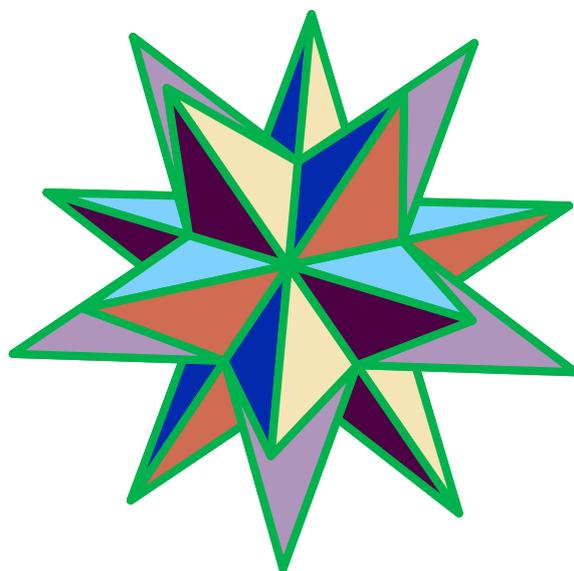
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

Е. А. Кузнецов, Д. А. Шапиро

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Часть II. Представления групп и их применение в физике. Функции Грина

Курс лекций



Новосибирск
2014

Оглавление

1	Симметрии	4
1.1.	Группа симметрии	4
1.2.	Абстрактная группа	6
1.3.	Группа треугольника	7
2	Основные понятия теории групп	10
2.1.	Правые смежные классы. Индекс	10
2.2.	Инвариантная подгруппа. Фактор-группа. Прямое произведение	11
2.3.	Классы сопряженных элементов	13
2.4.	Представления	15
3	Теория характеров	18
3.1.	Свойства характеров	18
3.2.	Снятие вырождения при понижении симметрии	20
4	Колебания молекул	24
4.1.	Кратность вырождения	24
4.2.	Характер исходного представления	26
4.3.	Колебательное представление	27
4.4.	Собственные векторы и собственные значения	29
5	Группы и алгебры Ли	31
5.1.	Гладкое многообразие	31
5.2.	Группа Ли	32
5.3.	Алгебра Ли	36
5.4.	Алгебра Ли группы Ли	36
5.5.	Экспоненциальная формула	37
6	Группы ортогональных и унитарных матриц	39
6.1.	Примеры матричных алгебр Ли	39
6.2.	Гомоморфизм $SU(2) \rightarrow SO(3)$	42
7	Представления группы вращений	46
7.1.	Неприводимые представления $ASO(3)$	46
	Оператор Казимира	46
	Повышающий и понижающий операторы	46
	Лестница состояний	47
	Вычисление матричных элементов	48
7.2.	Базис неприводимого представления	49
7.3.	Примеры неприводимых представлений	50

8	Тензорное представление	53
8.1.	Прямое произведение представлений	53
8.2.	Разложение Клебша — Гордана	55
8.3.	Тензоры	56
8.4.	Построение тензорного представления	59
9	Правила отбора	60
9.1.	Симметризаторы Юнга	60
9.2.	Инвариантные тензоры	63
9.3.	Правила отбора	65
10	Функция Грина	69
10.1.	Полуоднородная задача	69
10.2.	Разложение оператора по проекторам	70
10.3.	Оператор Штурма — Лиувилля	72
10.4.	Дополнительная литература	75
11	Обобщенная функция Грина	76
11.1.	Нулевые моды	76
11.2.	Уравнение Пуассона	78
	Единственность	78
	Фундаментальные решения	79
	Функция Грина для задачи Дирихле	80
12	Функция Грина второго рода	82
12.1.	Формула Грина для оператора Лапласа	82
12.2.	Потенциалы простого и двойного слоя	82
12.3.	Уравнение Гельмгольца	85
13	Нестационарные уравнения	88
13.1.	Параболические операторы	88
	Единственность	89
	Связь функций Грина первого и второго рода	89
	Формула Пуассона	90
13.2.	Гиперболические операторы	92
	Единственность	92
	Связь функций Грина первого и второго рода	93
	Запаздывающая функция Грина	94
14	Резольвента	96
14.1.	Дискретный и непрерывный спектр	96
14.2.	Резольвента дифференциального оператора	98
14.3.	Построение резольвенты	99
	$n=1$	100
	$n=3$	101
A	Свойства представлений	103
	Литература	110
	Предметный указатель	112

Лекция 1

Симметрии

1.1. Группа симметрии

Определение 1.1. Совокупность преобразований, совмещающих объект с самим собой, называется *группой симметрии* объекта.

Если преобразования дискретные и их конечное число, группа называется *конечной*. Количество элементов в конечной группе G называется *порядком группы* и обозначается $|G|$. Объекты могут быть разной природы: геометрические тела, молекулы, дифференциальные уравнения, функции и т.п. Главное, чтобы они не менялись при каких-либо преобразованиях. Преобразования бывают дискретными или непрерывными.

Пример 1.1. Перестановка переводит множество из n неразличимых объектов в себя. Подстановки из n объектов записываются как

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ i_1 & i_2 & \dots & i_n \end{pmatrix},$$

где i_1, i_2, \dots, i_n те же числа $1, 2, \dots, n$, но в другом порядке. Определим произведение подстановок, как их композицию: сначала переставляем объекты первой подстановкой, потом второй, например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Вторая подстановка переставляет первый и второй объекты, а первая меняет местами первый и третий объекты. В произведении получится циклическая перестановка. Все подстановки P_n из n объектов образуют конечную дискретную группу порядка $|P_n| = n!$. Иногда часть множества подстановок тоже составляют группу, например, четные подстановки из n объектов образуют группу A_n размерности $|A_n| = n!/2$, $n \geq 2$. Подмножество группы, которое само является группой называется *подгруппой*.

Пример 1.2. Группа симметрии молекулы состоит из конечного числа геометрических преобразований, под действием которых молекула переходит сама в себя. Все такие преобразования (*элементы симметрии*) оставляют на месте по крайней мере, одну точку, поэтому такие группы называют *точечными*.

Пример точечной группы — группа треугольника — приведен на рис. 1.1 а. В данной группе два элемента симметрии: ось третьего порядка C_3 и ось второго порядка C_2 , перпендикулярная ей. Из-за наличия оси третьего порядка появляется 3 оси второго порядка.

В общем случае в точечной группе могут быть только три вида элементов:

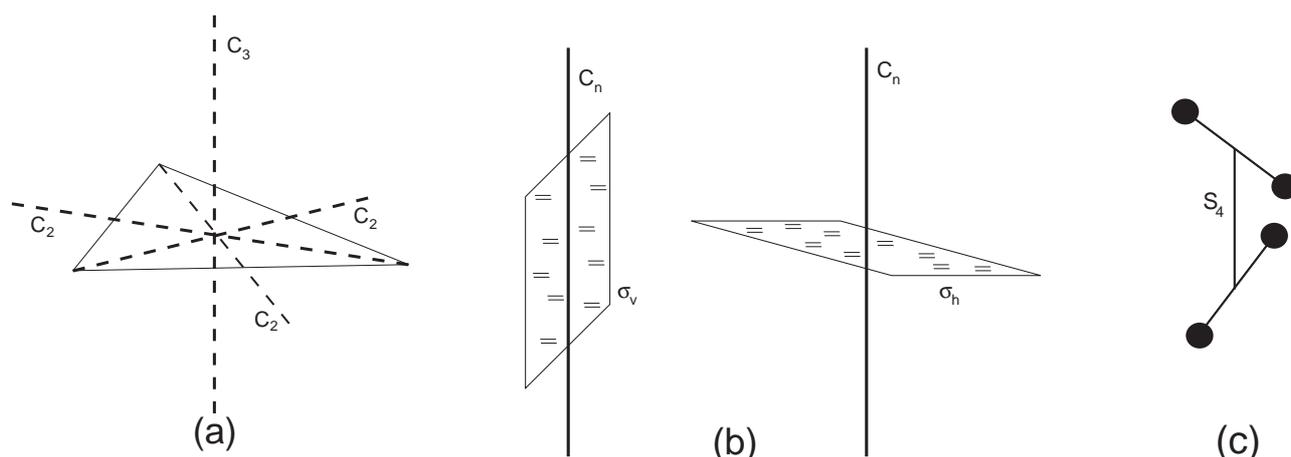


Рис. 1.1. (а) Группа вращений правильного треугольника включает в себя ось третьего порядка C_3 и три оси второго порядка C_2 . (б) Вертикальная зеркальная плоскость σ_v и горизонтальная σ_h . (с) «Молекула», имеющая зеркально-поворотную ось четвертого порядка S_4 .

1. Поворот C_n на угол $2\pi/n$ вокруг оси n -го порядка. Пример оси C_3 мы уже видели на рис. 1.1 а.
2. Отражение в плоскости, проходящей через ось σ_v или перпендикулярной оси σ_h . Индексы v, h означают вертикальную или горизонтальную плоскость, так что ось n -го порядка надо представлять себе вертикальной, рис. 1.1 б.
3. Зеркальный поворот $S_{2n} = \sigma_h C_{2n}$, то есть поворот с отражением в горизонтальной плоскости. Чтобы после поворота на 2π молекула возвратилась в исходное состояние, порядок зеркально-поворотной оси естественно должен быть четным. На рис. 1.1 с изображена «молекула» содержащая две пары одинаковых атомов, расположенных в параллельных плоскостях. Вертикальные плоскости, проходящие через ось и пары атомов, расположены под прямым углом. Поворот на $\pi/2$ и отражение в горизонтальной плоскости σ_h является симметрией. Получается зеркально-поворотная ось порядка $n = 4$.

В группах, описывающих симметрию бесконечных кристаллов (*пространственных*) к поворотам и отражениям добавляются трансляции на постоянную решетки. Пространственные группы дискретные и бесконечные.

Пример 1.3. Обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{dy}{dx} = f\left(\frac{y}{x}\right)$$

инвариантно относительно преобразований растяжения $x \rightarrow \lambda x$, $y \rightarrow \lambda y$, $\lambda > 0$. Такое уравнение, как известно, называется однородным и решается с помощью перехода к новой переменной $z = y/x$. Все растяжения с разными λ образуют группу \mathbf{R}_+ , которая очевидно бесконечная и непрерывная. Действительно, если мы прибавим к параметру λ бесконечно малое приращение, получится растяжение, которое тоже попадает в группу симметрии уравнения. Чтобы задать одно преобразование симметрии, требуется зафиксировать параметр λ . Количество параметров, необходимое для однозначного задания преобразования непрерывной группы симметрии, называется *размерностью* и обозначается \dim . В нашем примере $\dim \mathbf{R}_+ = 1$.

Пример 1.4. Уравнение Шредингера для частицы в центральном поле с оператором Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)$$

инвариантно относительно всех вращений трехмерного пространства. Все вращения составляют непрерывную бесконечную группу, которую обозначают $SO(3)$. Ортогональная матрица с определителем -1 описывает поворот с отражением (зеркальный или *несобственный* поворот). Иногда вместо $SO(3)$ пишут $O^+(3)$, знаком $+$ обозначая положительный определитель. Элементы группы — это ортогональные матрицы 3×3 . Любой поворот можно задать, как поворот на некоторый угол ψ вокруг некоторой оси n . Если вдоль оси вращения выбрать ось z , матрица ортогонального преобразования запишется как

$$\begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Определитель такой матрицы равен $+1$. Ось в свою очередь задается двумя координатами, например, сферическими координатами θ, φ единичного вектора n на единичной сфере. Всего необходимы три координаты, значит $\dim SO(3) = 3$.

1.2. Абстрактная группа

Чтобы не рассматривать каждый пример симметрии отдельно, отвлекаются от наглядных геометрических соображений и вводят общее понятие абстрактной *группы*.

Определение 1.2. Группой G называется множество объектов с бинарной операцией \cdot , которая обладает следующими свойствами

1. $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ ассоциативность;
2. $\exists 1, \forall a \in G : 1 \cdot a = a \cdot 1 = a$ существование единицы;
3. $\forall a \in G, \exists a^{-1} : a^{-1} \cdot a = a \cdot a^{-1} = 1$ существование обратного элемента.

Операция обычно называется умножением и ее знак \cdot не пишут. Коммутативность в определении не предполагается. Если все же все элементы группы перестановочны, группа называется *коммутативной* или *абелевой*. В абелевых группах операцию иногда обозначают знаком $+$.

Можно рассматривать отображения одной группы на другую $\phi : G_1 \rightarrow G_2$. Если такое отображение сохраняет операцию, т.е. $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$, то отображение называется *гомоморфизмом*. Если гомоморфизм к тому же оказался взаимно-однозначным отображением, он называется *изоморфизмом* и обозначается $G_1 \approx G_2$. Изоморфные группы в математике считаются одной и той же группой, т.е. группы изучаются с точностью до изоморфизма. В физике иногда надо учитывать, что две группы различны, хотя и изоморфны. Мы будем в каждом таком случае это специально оговаривать.

Начнем мы с изучения конечных групп. Конечную группу можно задать по крайней мере тремя способами:

1. Таблицей умножения.
2. Как подгруппу некоторой группы подстановок.

3. Порождающими элементами и определяющими соотношениями.

Последний способ применяется и для бесконечных дискретных групп.

Пример 1.5. Циклическая группа C_n порядка n порождается одним элементом C_n , который мы обозначим r . Тогда определяющее соотношение $r^n = 1$, а вся группа записывается как $C_n = \{1, r, r^2, \dots, r^{n-1}\}$. Циклическая группа, иногда называемая группой n -угольной пирамиды, естественно абелева. Чтобы не путать группы с элементами, например осями, мы будем обозначать их жирными буквами.

Пример 1.6. Группа призмы (или правильного многоугольника) D_n имеет кроме оси n -го порядка C_n еще и перпендикулярную ей ось второго порядка C_2 , мы обозначим порождающие элементы r и p , соответственно. Группа неабелева, поэтому кроме очевидных соотношений

$$r^n = 1, \quad p^2 = 1 \quad (1.1)$$

имеется третье определяющее соотношение, которое показывает, как коммутируют порождающие элементы. Если повернуть систему на угол $2\pi/n$, ось второго порядка перейдет в другую ось также второго порядка, значит

$$(pr)^2 = 1. \quad (1.2)$$

Три соотношения (1.1),(1.2) порождают группу многоугольника (или *диэдра*) порядка $|D_n| = 2n$.

1.3. Группа треугольника

Для определенности рассмотрим группу симметрии равностороннего треугольника D_3 , которая порождается поворотом r на $2\pi/3$ вокруг оси третьего порядка, перпендикулярной плоскости треугольника и проходящей через его центр тяжести (мы представим себе треугольник на рис. 1.1(а) изготовленным из однородного материала) и поворотом p на угол π вокруг медианы. Группа задана первым способом, соотношениями $r^3 = p^2 = (pr)^2 = 1$. Проверим, например, последнее. Для этого пронумеруем вершины треугольника и условимся, что r, p вращают против часовой стрелки, причем p вокруг вертикальной оси. Тогда

$$pr \underset{1}{\overset{3}{\Delta}}_2 = p \underset{3}{\overset{2}{\Delta}}_1 = \underset{1}{\overset{2}{\Delta}}_3; \quad pr \underset{1}{\overset{2}{\Delta}}_3 = p \underset{2}{\overset{3}{\Delta}}_1 = \underset{1}{\overset{3}{\Delta}}_2. \quad (1.3)$$

треугольник вернулся в исходное состояние, значит $(pr)^2 = 1$ — тождественное преобразование.

Вместо вращения треугольника мы могли бы перемножать подстановки из трех номеров его вершин. В группе \mathcal{P}_3 как раз 6 элементов, циклические подстановки отвечают r, r^2 , а транспозиции (перестановки пар) соответствуют элементам p, pr, pr^2 :

$$1 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad r \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad p \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Можно убедиться, что определяющие соотношения получатся точно такими же $r^3 = p^2 = (pr)^2 = 1$:

$$pr = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \quad (pr)^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = 1.$$

Таблица 1.1. Таблица умножения D_3 .

	1	r	r ²	p	pr	pr ²
1	1	r	r ²	p	pr	pr ²
r	r	r ²	1	pr ²	p	pr
r ²	r ²	1	r	pr	pr ²	p
p	p	pr	pr ²	1	r	r ²
pr	pr	pr ²	p	r ²	1	r
pr ²	pr ²	p	pr	r	r ²	1

Поскольку вращения треугольника (1.3) свелись к перестановкам номеров его вершин, мы построили изоморфизм групп $P_3 \approx D_3$. Кстати, мы задали группу треугольника еще и вторым способом. Осталось для полноты задать ее третьим способом, в виде таблицы умножения. Договоримся ставить p впереди, т.е. записывать группу в виде

$$D_3 = \{1, r, r^2, p, pr, pr^2\}. \quad (1.4)$$

Элементы, у которых впереди стоит r , выразятся через выписанные если воспользоваться соотношениями (1.1), (1.2), например, $r^2p = pr, pr = pr^2$ и т.п. Получится таблица 1.1. Перед первым столбцом таблицы 6×6 мы написали нулевой столбец с первым сомножителем, а перед первой строкой — нулевую строку со вторым сомножителем. Можно было этого и не делать, потому что нулевой столбец совпадает с первым, а нулевая строка — с первой благодаря свойствам единичного элемента.

В каждой строке (и в каждом столбце) таблицы расположены все элементы группы (1.4), причем каждый встречается по одному разу и порядок расположения в каждой строке получился различным. Разграничивающие линии после третьего столбца и третьей строки проведены, чтобы подчеркнуть разницу между сегментами таблицы. В левом верхнем и правом нижнем сегментах стоят степени r , а в правом верхнем и левом нижнем сегментах — только элементы, содержащие p .

Речь шла о группе симметрии треугольника (или треугольной призмы) в трехмерном пространстве, где разрешаются перевороты, выводящие из плоскости. Равносторонний треугольник в плоскости обладает группой симметрии C_{3v} , в которую включаются повороты вокруг оси третьего порядка и отражения в плоскостях, проходящих через эту ось и медианы. Если обозначить $r = C_3, p = \sigma_v$, то вернувшись к соотношениям (1.3), можно убедиться, что преобразования описываются теми же соотношениями (1.1) и (1.2), поэтому группа изоморфна рассмотренной: $C_{3v} \approx D_3$.

Дополнительная литература

Задачи по элементарной теории групп, можно найти в сборнике [1], содержание которого примерно соответствует настоящим лекциям. Приложения теории групп в физике, в основном, в квантовой механике хорошо изложены, например, в учебниках Ландау и Лифшица [2], Петрашень и Трифонова [3], Мессиа [4]. В качестве введения в предмет можно также рекомендовать книги [5–8], где разобрано много простых примеров. Многие другие приложения теории групп в молекулярной, атомной и ядерной спектроскопии, физике твердого тела, теории поля, элементарных частиц и т.п. можно найти в книгах [9–14].

Введение в математическую теорию групп имеется в любом учебнике по общей алгебре, например, [15]. Строгое последовательное изложение теории групп содержится

в [16], а теории представлений конечных групп — в [17]. По непрерывным группам первоначальные сведения можно почерпнуть из [18], подробности имеются в учебнике [19]. Неприводимые представления групп Ли разобраны в справочнике [20], а доказательства теорем имеются в книгах [21, 22]. Дополнительные ссылки на литературу по отдельным разделам приведены в соответствующих лекциях.

Лекция 2

Основные понятия теории групп

2.1. Правые смежные классы. Индекс

Чтобы разобраться со структурой групп, введем понятие смежных классов. Пусть H — подгруппа, а g — элемент группы G . Обозначим Hg множество, состоящее из произведений элементов подгруппы на g : $Hg = \{h_i g, h_i \in H\}$.

Определение 2.1. *Правыми смежными классами* группы G по подгруппе H называются множества $Hg_k, g_k \in G$.

Вся группа G разбивается на классы $G = Hg_1 + Hg_2 + \dots + Hg_n, n = |G|$, где мы пишем знак “+”, а подразумеваем объединение множеств “ \cup ”. Аналогично, можно было бы разбить группу на левые смежные классы $G = g_1H + g_2H + \dots + g_nH$. Число классов получилось бы тоже самое, но сами классы были бы, вообще говоря, другими.

Теорема (Лагранжа). *Правые смежные классы не пересекаются либо совпадают.*

Пусть нашелся элемент $g \in G$, который лежит сразу в двух смежных классах: $g \in Hg_1, g \in Hg_2$. Тогда по определению правого смежного класса найдутся такие $h_1, h_2 \in H$, что $g = h_1g_1 = h_2g_2$. Отсюда $g_1 = h_1^{-1}h_2g_2$. Тогда для любого $h \in H$: $hg_1 = hh_1^{-1}h_2g_2$, т.е. $Hg_1 \subset Hg_2$. Поскольку группа не знает, как мы пронумеровали ее элементы, точно так же можно показать, что $Hg_2 \subset Hg_1$. Отсюда следует, что классы совпадают $Hg_1 = Hg_2$. Любой элемент группы попадает в какой-нибудь класс, потому что в подгруппе есть единичный элемент. Значит мы разбили всю группу на равные по числу элементов множества.

Рассмотрим теперь только различные правые смежные классы, их количество называется *индексом подгруппы в группе* и обозначается $|G : H|$. Обозначение не случайно похоже на знак деления. Так как число классов целое, из теоремы Лагранжа следует, что индекс подгруппы равен отношению порядков

$$|G : H| = \frac{|G|}{|H|}. \quad (2.1)$$

Другое важное следствие — утверждение, что порядок подгруппы делит порядок группы. Если, например, порядок группы G — простое число, то можно сразу сказать, что подгрупп в ней нет, кроме 1 и самой группы G , которые иногда называют тривиальными подгруппами. Как видно из следующего примера, теорема Лагранжа позволяет найти порядок группы.

Пример 2.1. Рассмотрим группу вращений куба O , рис. 2.1. Элементами симметрии будут оси. Оси четвертого и второго порядка (а), (b) проходят, соответственно, через

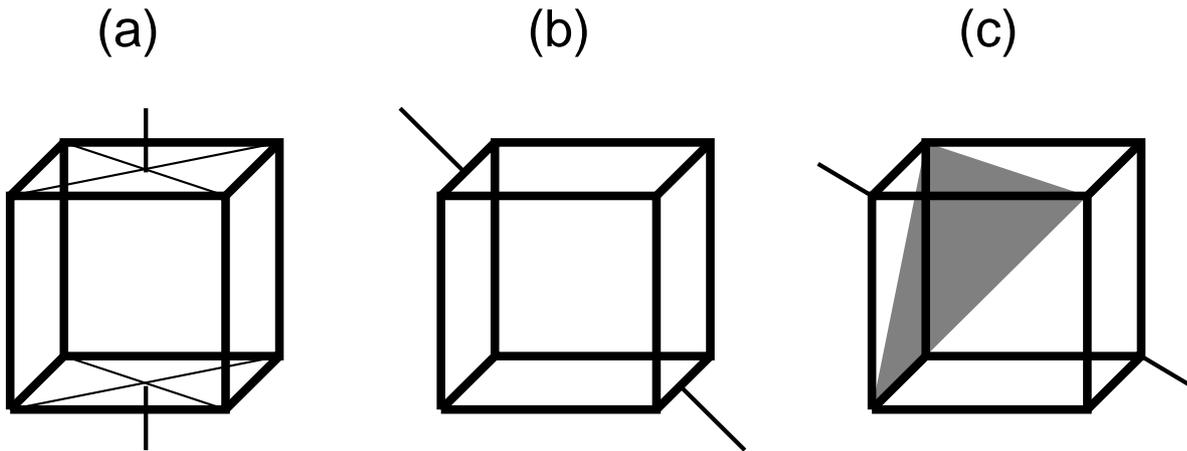


Рис. 2.1. Элементы симметрии группы куба: оси четвертого (а), второго (b) и третьего порядка (с).

середины противоположных граней и ребер. Ось третьего порядка можно увидеть, если соединить между собой три вершины, соседние с какой-нибудь одной вершиной A . Получится равносторонний треугольник, центр которого соединяет с вершиной A ось третьего порядка (с).

Имеется три преобразования, оставляющих данную вершину на месте: единичное преобразование 1 и повороты C_3, C_3^2 на 120° и 240° вокруг оси третьего порядка. Эти преобразования образуют подгруппу H . Группа куба разбивается на левые смежные классы gH . В каждом классе после одного из поворотов вокруг оси третьего порядка вершина A переводится в какую-нибудь другую вершину (либо остается на месте). Значит различных классов 8 по числу вершин, откуда $|O : H| = 8$. Тогда из (2.1) получаем, что всего в группе $3 \cdot 8 = 24$ преобразования, $|O| = 24$.

2.2. Инвариантная подгруппа. Фактор-группа. Прямое произведение

Определение 2.2. Подгруппа H группы G называется *инвариантной*, если преобразования подобия не выводят из нее: $H = gHg^{-1}, \forall g \in G$, и обозначается $H \triangleleft G$.

Из определения видно, что $Hg = gH$, то есть для инвариантной подгруппы правые и левые смежные классы совпадают. Давайте рассматривать смежные классы как элементы нового множества. Определим произведение таких элементов: $Hg_1 \cdot Hg_2 \equiv H \cdot (g_1g_2)$. Тогда снова получится группа F , потому что в ней очевидно есть ассоциативность, существует единичный элемент $H \cdot 1$ и для каждого Hg найдется обратный элемент $(Hg)^{-1} = H \cdot g^{-1}$. Порядок группы F равен индексу $|G : H|$, она называется *фактор-группой* и обозначается $F = G/H$.

Пример 2.2. В группе треугольника D_3 имеется подгруппа $H = C_3 = \{1, r, r^2\}$, состоящая из поворотов вокруг оси третьего порядка. Проверим, инвариантна ли H . Степени r , очевидно, не выводят из подгруппы: $r^k \cdot r^n \cdot r^{2k}$ снова степень r . Из чисто геометрических соображений тоже видно, что последовательность поворотов вокруг оси третьего порядка тоже поворот вокруг той же оси. Если степень r умножить на p справа и слева, снова получится степень r : $pr^n p = prr^{2n} = r^{2n}$. Если представить себе, что треугольник лежит на столе, а его верхняя поверхность закрашена красной краской, то понятно, что

Таблица 2.1. Все конечные группы до порядка 12.

Порядок	Группы
1	C_1
2	C_2
3	C_3
4	$C_4, D_2 \approx C_2 \times C_2$
5	C_5
6	$C_6 \approx C_2 \times C_3, D_3$
7	C_7
8	$C_8, C_2 \times C_4, D_4, C_2 \times C_2 \times C_2, Q$
9	$C_9, C_3 \times C_3$
10	$C_{10} \approx C_2 \times C_5, D_5$
11	C_{11}
12	$C_{12} \approx C_3 \times C_4, C_2 \times C_6 \approx C_2 \times C_2 \times C_3, D_6 \approx C_2 \times D_3, A_4, W$

если перевернуть треугольник красной стороной вниз, вращать на углы, кратные 120° , а потом снова перевернуть красной стороной вверх, результат будет такой же, как после поворота вокруг C_3 на угол кратный 120° .

Правые смежные классы можно найти по таблице умножения 1.1, разбитой на секторы. Три смежных класса совпадают с подгруппой: $H \cdot 1 = H \cdot r = H \cdot r^2 = H$, а три других: $H \cdot p = H \cdot pr = H \cdot pr^2$ совпадают между собой. Естественно обозначить $H = E$, потому что это единичный элемент фактор-группы. Другой ее элемент обозначим $P = Hp$, тогда $P^2 = Hp \cdot Hp = Hr^2 = H = E$. Получилась циклическая группа второго порядка $C_2 = D_3/C_3$. Можно было бы и не проверять определяющее соотношение, потому что других групп порядка 2 нет. Фактор-группа, как и вообще фактор-множество в математике, означает, что мы огрубляем описание, рассматриваем группу «с точностью до» какой-нибудь инвариантной подгруппы. В данном примере нас не интересуют вращения r и получилась фактор-группа, состоящая из двух элементов: «красная поверхность сверху» и «красная поверхность снизу».

Из геометрических соображений можно также увидеть, что подгруппа $C_2 = \{1, p\} \in D_3$ не является инвариантной. Обозначим красным цветом ту вершину, которую оставляют на месте преобразования подгруппы. Если повернуть треугольник вокруг оси третьего порядка, перевернуть, а потом повернуть вокруг оси третьего порядка назад, красная вершина не вернется в исходное состояние.

Определение 2.3. Прямым произведением групп $H = G \times F$ называется множество пар $g_i \times f_k, g_i \in G, f_k \in F$, операция между которыми определена формулой

$$(g_1 \times f_1) \cdot (g_2 \times f_2) \equiv (g_1 \cdot g_2) \times (f_1 \cdot f_2).$$

Из определения видно, что элементы каждой группы G и F перемножаются независимо, а знак « \times » играет роль разделителя. Порядок прямого произведения равен произведению порядков: $|G \times F| = |G| \cdot |F|$.

Несколько примеров групп одинакового порядка, но разной структуры приведены в таблице 2.1. Когда порядок группы равен 4 (а также 6 или 9), имеется две неизоморфные группы. Имеется пять неизоморфных групп порядка 8. Из таблицы также видно, что операции построения фактор-группы и прямого произведения нельзя считать взаимно-обратными. Если найти прямое произведение групп $C_2 \times C_3 = C_6$, а не D_3 .

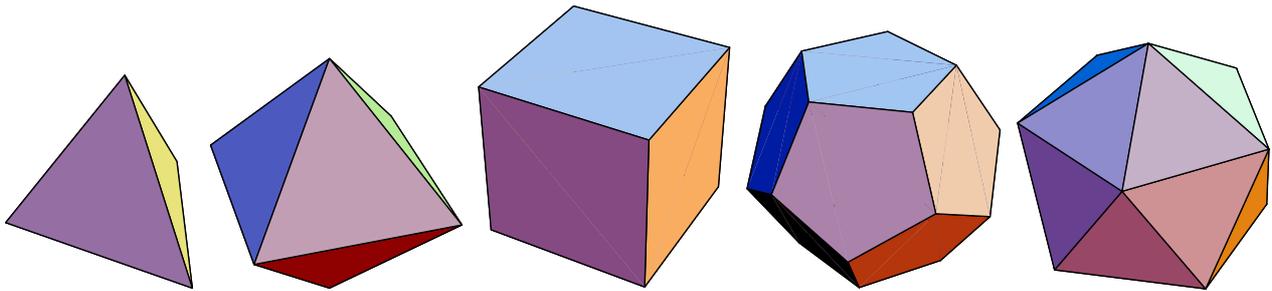


Рис. 2.2. Выпуклые правильные многогранники (платоновы тела): тетраэдр, октаэдр, куб (гексаэдр), додекаэдр и икосаэдр.

В таблице приняты следующие обозначения: Q — группа кватернионов,¹ порождаемая двумя элементами P, Q с соотношениями

$$P^4 = 1, \quad P^2 = Q^2, \quad QPQ = P,$$

W — группа, порождаемая двумя элементами P, Q с соотношениями

$$P^4 = 1, \quad P^2 = Q^3, \quad QPQ = P.$$

Даже из малого фрагмента $n \leq 12$ видно, как резко растет число неизоморфных групп с величиной порядка, когда порядок — составное число. Полной классификации конечных групп пока не существует. Однако более частные задачи классификации решены. Для примера приведем без доказательств две классификационные теоремы: одну сравнительно простую и одну очень сложную.

Пример 2.3. Конечные подгруппы собственных вращений трехмерного пространства исчерпываются списком:

$$C_n, D_n, T, O, Y.$$

В списке имеется две серии C_n, D_n с произвольным n . Остальные три группы — группы симметрии правильных многогранников: T — тетраэдра, O — октаэдра, Y — икосаэдра. Такие группы называются спорадическими, потому что они не входят ни в какие серии. Правильных многогранников всего 5, все они изображены на рис. 2.2. Если соединить центры граней куба получится октаэдр, поэтому куб и октаэдр называются дуальными многогранниками. Икосаэдр дуален додекаэдру, а тетраэдр дуален сам себе. Дуальные многогранники имеют одинаковую симметрию, поэтому в списке только 3 группы многогранников T, O, Y . Элементарное доказательство можно найти, например, в [18] или в Приложении, стр. 108.

Пример 2.4. Группа, которая не содержит инвариантной подгруппы, называется *простой*. Полный список простых конечных групп состоит из 17 серий и 26 спорадических групп. Задача классификации решена коллективными международными усилиями только в 1981 году. Введение в эту тему можно найти в книге [23], но и там нет доказательства теоремы, потому что оно занимает несколько тыс. страниц. Порядок самой большой спорадической простой группы — “чудовища” Фишера примерно равен 10^{54} .

2.3. Классы сопряженных элементов

Здесь мы введем еще одно разбиение группы на классы.

¹Группы Q и W не могут быть реализованы как группы симметрии геометрических тел.

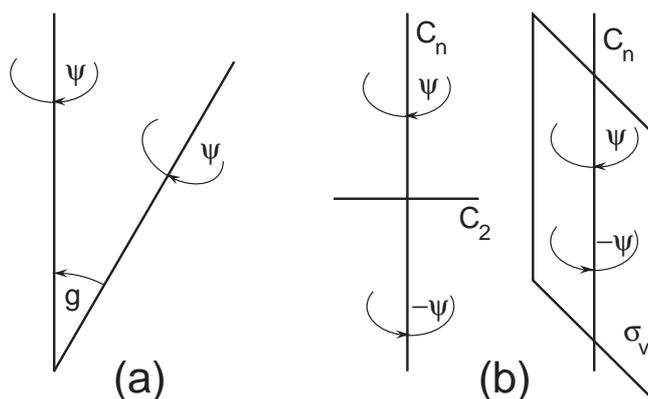


Рис. 2.3. Сопряженные элементы точечной группы: (а) повороты на один и тот же угол относительно разных осей; (б) повороты на угол ψ и $-\psi$ вокруг одной и той же оси.

Определение 2.4. Элементы $a, b \in G$ называются *сопряженными*, если найдется $g \in G$, такой что

$$a = g \cdot b \cdot g^{-1}. \quad (2.2)$$

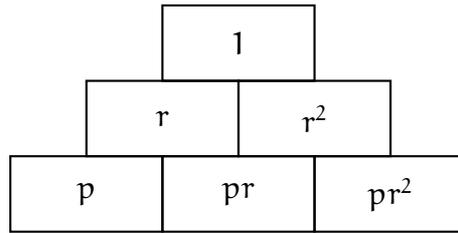
Отношение сопряженности обладает всеми тремя свойствами отношения эквивалентности:

1. $a \sim a$ рефлексивность;
2. $a \sim b, b \sim c \Rightarrow a \sim c$ транзитивность;
3. $a \sim b \Rightarrow b \sim a$ симметричность.

Значит отношение сопряженности разбивает всю группу на классы — *классы сопряженных элементов*. Классы сопряженных элементов, как и правые смежные классы, либо не пересекаются, либо совпадают.

Из определения видно, что регулярный способ поиска классов сопряженных элементов довольно сложен. Надо выбрать b и подставлять в формулу (2.2) все возможные g , пока не переберем всю группу. Однако для точечной группы имеется более простой способ, основанный на наглядных геометрических представлениях. Если посмотреть на формулу (2.2) внимательно, видно, что преобразования $a \sim b$ подобны, когда это одно и то же преобразование, выполненное в двух разных системах координат. Преобразование g^{-1} переводит b в новую систему, а g возвращает в старую. Значит повороты на один и тот же угол вокруг двух разных осей сопряжены, если в группе есть преобразование g , переводящее одну ось в другую, как показано на рис. 2.3 (а). Если речь идет о поворотах на одинаковые углы $\psi, -\psi$, но в разные стороны, то преобразований g может быть всего два: ось второго порядка C_2 , перпендикулярная данной оси C_n , или зеркальная плоскость σ_v , проходящая через ось, рис. 2.3 (б). Ось C_n в этих двух случаях называется *двухсторонней*.

Пример 2.5. В группе D_3 разные степени r сопряжены между собой, поскольку $r = pr^2p, r^2 = prp$. Все элементы, содержащие p , взаимно сопряжены, потому что $pr = rpr^2, pr^2 = r^2pr$. Группа разбивается на три класса сопряженных элементов, как показано в таблице, где каждая строка соответствует одному классу.



Из геометрических соображений тоже видно, что повороты r, r^2 на $\pm 120^\circ$ сопряжены, потому что имеется ось второго порядка $C_2 \perp C_3$. Повороты p, pr, pr^2 на 180° вокруг трех медиан треугольника сопряжены, потому что в группе имеются преобразования r, r^2 , переводящие одну медиану в другую.

2.4. Представления

В приложениях привычнее не пользоваться композициями преобразований, а перемножать матрицы. Чтобы это стало возможным, надо построить отображение элементов группы на матрицы, сохраняющее операцию.

Определение 2.5. Гомоморфизм h группы G в группу линейных преобразований линейного пространства \mathbb{R}^n или \mathbb{C}^n называется *матричным представлением* группы G .

Мы будем говорить просто *представление*, потому что не интересуемся другими (нематричными) реализациями группы. Число n называется *размерностью* представления. Будем обозначать представления $D(g)$, где D — матрица, отвечающая элементу группы g , а размерность обозначим $n = \dim D(g)$.

Представление называется *точным*, если h — изоморфизм. Можно все элементы группы отобразить в число 1, рассматривая его как матрицу 1×1 . Такое представление называется *единичным* и очевидно не является точным.

Примером точного представления конечной группы $G, |G| = n$ может служить *регулярное* представление размерности n , которое мы сейчас опишем. Сначала пронумеруем все элементы группы от 1 до n и представим себе единичную матрицу E размером $n \times n$. Каждая строка таблицы умножения группы, отвечающая элементу k осуществляет подстановку. Так, третья строка таблицы 1.1 отвечает подстановке

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 1 & 2 & 5 & 6 & 4 \end{pmatrix}.$$

Теперь подействуем такой подстановкой на строки матрицы E , получится матрица

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Если эта матрица действует на любую матрицу, стоящую справа от нее, то она циклически переставляет первые три строки и последние три строки. Если выписать все 6 матриц, полученных таким способом, получится представление группы, которое называется *регулярным*.

Два представления $D^{(1)}(g)$, $D^{(2)}(g)$ называются *эквивалентными*, если существует такая матрица V , не зависящая от g , что

$$D^{(1)}(g) = VD^{(2)}(g)V^{-1}.$$

Можно сказать, что эквивалентные представления — это одно и то же представление, записанное в разных базисах. Поэтому мы будем изучать представления с точностью до эквивалентности. Обозначаются эквивалентные представления знаком “ \sim ”.

По двум представлениям можно построить третье суммарной размерности

$$D(g) = D^{(1)}(g) \oplus D^{(2)}(g) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{pmatrix},$$

которое называется *прямой суммой* представлений, $\dim D = \dim D^{(1)} + \dim D^{(2)}$.

Можно поставить и обратную задачу: существует ли такой базис, в котором все матрицы представления приводятся к блочно-диагональному виду:

$$D(g) \sim \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{pmatrix}?$$

Если такой базис выбрать можно, представление называется *приводимым*. Если такого базиса не существует, представление называется *неприводимым*. Задача теории представлений — найти все неприводимые представления данной группы.

Приведем без доказательства 8 свойств представлений. Доказательства приведены в Приложении на стр. 103.

1. Всякое представление конечной группы эквивалентно унитарному (т.е. состоящему из унитарных матриц).
2. Число неэквивалентных неприводимых представлений равно числу классов сопряженных элементов.
3. Сумма квадратов размерностей неприводимых представлений равна порядку группы.
4. Представление фактор-группы является представлением самой группы.
5. Все неприводимые представления абелевой группы одномерны.
6. Матрица, перестановочная со всеми матрицами неприводимого представления, пропорциональна единичной (*скалярная матрица*).
7. Если матрица A связывает два неприводимых представления $D^{(1)}(g)A = AD^{(2)}(g)$, то A — нулевая матрица, либо $D^{(1)} \sim D^{(2)}$ и их размерности совпадают.
8. Соотношение ортогональности неприводимых представлений

$$\sum_{g \in G} [D_{ij}^{(\alpha)}(g)]^* D_{kl}^{(\beta)}(g) = \frac{|G|}{n_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ik} \delta_{jl}, \quad n_\alpha = \dim D^{(\alpha)}. \quad (2.3)$$

Свойства 2,3 позволяют в простейших случаях найти размерности неприводимых представлений. Свойства 4,5 помогают строить представления. Свойства 6,7, известные как леммы Шура, нужны для доказательства свойства 8.

Пример 2.6. Размерности неприводимых представлений группы D_3 находятся с помощью второго и третьего свойств: $6 = 1^2 + 1^2 + 2^2$. Построим двумерное представление. В качестве образа единичного элемента возьмем единичную матрицу $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Элемент r отобразим в матрицу поворота на 120° :

$$r \rightarrow \begin{pmatrix} \cos 2\pi/3 & \sin 2\pi/3 \\ -\sin 2\pi/3 & \cos 2\pi/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

В качестве образа p выберем матрицу, меняющую координаты x, y местами

$$p \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Остальные элементы легко представить, перемножая матрицы порождающих группу элементов. Получилось точное неприводимое двумерное унитарное представление.

Упражнение 2.1. Постройте все матрицы представления и проверьте соотношение ортогональности (2.3).

Лекция 3

Теория характеров

Чтобы классифицировать представления с точностью до эквивалентности, надо ввести инвариант преобразования подобия. Вводят след матрицы представления и называют его *характером*

$$\chi(g) = \text{tr } D(g).$$

3.1. Свойства характеров

Теорема 3.1. *Характеры эквивалентных представлений $D^{(1)}(g) \sim D^{(2)}(g)$ совпадают.*

$$\chi(g) = \text{tr } D^{(1)}(g) = \text{tr } VD^{(2)}(g)V^{-1} = \text{tr } V^{-1}VD^{(2)}(g) = \text{tr } D^{(2)}(g),$$

поскольку матрицы под знаком следа можно циклически переставлять.

Теорема 3.2. *Характер есть функция класса сопряженных элементов.*

Пусть $a, b \in \sigma$ принадлежат одному классу сопряженных элементов. Тогда имеется $g \in G$: $a = gbg^{-1}$:

$$D(a) = D(gbg^{-1}) = D(g)D(b)D(g^{-1}) \Rightarrow \chi(a) = \text{tr } D(g)D(b)D(g^{-1}) = \text{tr } D(b) = \chi(b).$$

Теорема 3.3. *Характеры неприводимых представлений ортогональны.*

Свернем соотношение ортогональности представлений (2.3) по двум парам индексов, то есть умножим на $\delta_{ij}\delta_{kl}$ и просуммируем по повторяющимся индексам. В левой части получатся характеры, а в правой — останется $\delta_{ik}\delta_{ik} = \delta_{kk}$. Это след единичной матрицы, который равен размерности неприводимого представления $\dim D^{(\alpha)} = n_\alpha$:

$$\sum_{g \in G} [\chi^{(\alpha)}(g)]^* \chi^{(\beta)}(g) = |G| \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.1)$$

Теорема 3.4. *Коэффициенты разложения представления в прямую сумму неприводимых*

$$D(g) = \bigoplus_{\alpha} k_{\alpha} D^{(\alpha)}(g) \quad (3.2)$$

находятся по формуле

$$k_{\alpha} = \left\langle [\chi^{(\alpha)}(g)]^* \chi(g) \right\rangle_G. \quad (3.3)$$

Таблица 3.1. Неприводимые характеры группы D_3 .

	$\sigma_1 = \{1\}$	$\sigma_2 = \{r, r^2\}$	$\sigma_3 = \{p, pr, pr^2\}$
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0

Здесь знак \oplus означает прямую сумму, а k_α — целочисленные коэффициенты разложения, показывающие сколько раз неприводимое представление $D^{(\alpha)}(g)$ входит в исходное представление $D(g)$. Угловыми скобками обозначено *усреднение по группе*, т.е. суммирование по группе с последующим делением на ее порядок:

$$\langle \dots \rangle_G = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \dots$$

Для вывода формулы (3.3) возьмем след от левой и правой частей (3.2). Получится разложение характера

$$\chi(g) = \sum_{\alpha} k_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(g),$$

поскольку характер прямой суммы представлений равен обычной сумме характеров. Умножим обе части на $[\chi^{(\beta)}(g)]^*$ и просуммируем по группе. Пользуясь ортогональностью (3.1), получим (3.3).

Пример 3.1. В группе D_3 имеется два одномерных неприводимых представления и одно двумерное, построенное в примере 2.6. Одно из одномерных представлений — единичное. Второе является представлением фактор-группы, найденной в примере 2.2, когда 1 сопоставляется всем степеням r , а -1 — элементам, содержащим p . Если найти характеры всех неприводимых представлений (для краткости говорят *неприводимые характеры*), получится таблица 3.1. По второму свойству достаточно вписать в таблицу след только одного представителя каждого класса сопряженных элементов.

В верхней части таблицы приведены классы сопряженных элементов. Каждая строка таблицы дает значения характера данного неприводимого представления на каждом классе. Самый первый элемент строки всегда равен размерности данного неприводимого представления. Столбцы таблицы ортогональны в обычном смысле, а строки ортогональны, если ввести скалярное произведение с весами, равными порядкам классов. В данном примере веса случайно совпадают с номерами классов. Соотношение ортогональности (3.1) можно переписать с весами, если собрать одинаковые слагаемые и перейти к сумме по классам сопряженных элементов

$$\sum_{\alpha=1}^K p_{\alpha} [\chi^{(\alpha)}(\sigma_{\alpha})]^* \chi^{(\beta)}(\sigma_{\alpha}) = |G| \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.4)$$

где $p_{\alpha} = |\sigma_{\alpha}|$ — число элементов в классе σ_{α} , K — полное число классов сопряженных элементов в группе G .

Замечание 3.1. Можно представить себе характер исходного представления $\chi(\sigma_{\alpha})$ как вектор с компонентами, равными его значениям на классах сопряженных элементов. Вектор исходного представления и векторы неприводимых характеров можно нормировать, разделив компоненты на $\sqrt{|G|}$:

$$\tilde{\chi}^{(\alpha)}(\sigma_{\alpha}) = \chi^{(\alpha)}(\sigma_{\alpha}) / \sqrt{|G|}.$$

Тогда соотношение ортогональности (3.1) приобретет стандартный вид

$$\sum_{\alpha=1}^K p_{\alpha} [\tilde{\chi}^{(\alpha)}(\sigma_{\alpha})]^* \tilde{\chi}^{(\beta)}(\sigma_{\alpha}) = \delta_{\alpha\beta},$$

а формула (3.3) для коэффициентов разложения по неприводимым представлениям означает, что коэффициент k_{α} равен скалярному произведению, проекции вектора исходного представления на соответствующий базисный вектор $\tilde{\chi}^{(\alpha)}$. При вычислении скалярного произведения надо помнить, что каждое слагаемое следует брать с весом, равным порядку класса сопряженных элементов

$$k_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^K p_{\alpha} [\tilde{\chi}^{(\alpha)}(\sigma_{\alpha})]^* \tilde{\chi}(\sigma_{\alpha}).$$

3.2. Снятие вырождения при понижении симметрии

Мы уже упоминали про применение теории групп в молекулярной физике и кристаллографии. В классической механике теория групп также играет важную роль. Имеется теорема Нетер, которая по каждой непрерывной группе симметрии действия позволяет вычислить сохраняющуюся величину — интеграл движения. Например, если действие не зависит от времени, то сохраняется энергия. Но главными применениями теории групп в физике стали результаты, полученные в 20х гг. в квантовой механике и в 60х гг. XX века в теории элементарных частиц.

В квантовой механике говорят, что G — группа симметрии гамильтониана H , если все матрицы какого-нибудь ее представления $D(g)$ коммутируют с гамильтонианом:

$$D(g)H = HD(g).$$

Это означает, что если ψ — собственная функция оператора H с собственным значением E , т.е.

$$H\psi = E\psi,$$

то и $D(g)\psi, \forall g \in G$ — тоже собственная функция с тем же собственным значением E .

Чтобы построить представление $D(g)$, надо сначала определить действие элемента группы на функциях, например, координат $\psi_i(x), i = 1, 2, \dots, n$. Зададим это действие правилом

$$g\psi_i(x) = \psi_i(g^{-1}x) = D_{ij}(g)\psi_j(x). \quad (3.5)$$

Последовательное действие двух преобразований a и b описывается тем же правилом:

$$\begin{aligned} a \cdot b\psi(x) &= a\psi(b^{-1}x) \equiv a\phi(x), \\ a\phi(x) &= \phi(a^{-1}x) = \psi(b^{-1}(a^{-1}x)) = \psi(b^{-1}a^{-1}x) = \psi((ab)^{-1}x). \end{aligned}$$

Таким образом $D(a \cdot b) = D(a) \cdot D(b)$ и представление построено.

Если представление $D(g), n = \dim D$, неприводимо, то по лемме Шура матрица оператора Гамильтона скалярна, т.е. в подпространстве одного неприводимого представления на диагонали стоят одинаковые числа λ . Тогда группе симметрии отвечает n -кратное вырождение. Пусть теперь к гамильтониану добавили возмущение V , имеющее меньшую симметрию $F, F < G$. Тогда, вообще говоря, размерность неприводимых представлений уменьшается и вырождение частично снимается. Отметим, что в рассуждениях мы нигде не пользовались малостью возмущения. Рассмотрим для наглядности пример не из квантовой механики, а из механики сплошных сред — малые колебания упругой мембраны.

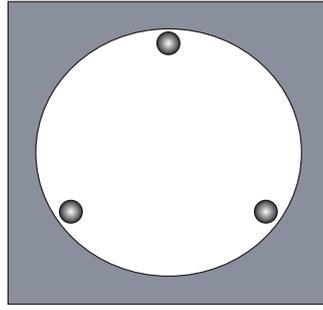


Рис. 3.1. Мембрана с закрепленным краем и тремя грузиками.

Пример 3.2. Рассмотрим круглую мембрану радиуса a с закрепленным краем. Отклонение каждой точки $u(x, y, t)$ от положения равновесия описывается двумерным волновым уравнением. Для монохроматических колебаний с частотой ω в полярных координатах задача сводится к задаче на собственные значения

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = k^2 u, \quad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2},$$

где c — скорость звука. Граничных условий — два: регулярность при $r = 0$ и обращение в нуль отклонения на краю $u(a, \varphi) = 0$. Мы знаем, что такая задача упрощается методом разделения переменных и имеет решение

$$u(r, \varphi) = R(r)e^{im\varphi}.$$

Радиальное уравнение на $R(r)$ решается в функциях Бесселя, но нас сейчас будет интересовать только зависимость от угла, которая при $m \neq 0$ имеет двукратное вырождение. Двум значениям $\pm m$ соответствует одно и то же собственное значение k .

Пусть теперь на мембрану поместили три одинаковых груза, расположенные в вершинах правильного треугольника, как показано на рис. 3.1. Уменьшится ли кратность вырождения?

Система грузов инвариантна относительно всех их перестановок, то есть относительно группы D_3 . Сначала построим двумерное *исходное представление*, которое действует на паре собственных функций с одинаковыми k . Единичный элемент представляем единичной матрицей

$$D(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Чтобы найти представление ρ , подействуем этим преобразованием на пару наших функций согласно правилу (3.5) и найдем матрицу, которая действует точно так же:

$$\rho \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{im(\varphi-2\pi/3)} \\ e^{-im(\varphi-2\pi/3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2\pi im/3} & 0 \\ 0 & e^{2\pi im/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{pmatrix},$$

откуда

$$D(\rho) = \begin{pmatrix} e^{-2\pi im/3} & 0 \\ 0 & e^{2\pi im/3} \end{pmatrix}.$$

Матрица $D(\rho)$ меняет знак φ :

$$\rho \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-im\varphi} \\ e^{im\varphi} \end{pmatrix},$$

тогда

$$D(p) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Осталось вычислить след каждой матрицы и получить характер исходного представления

$$\boxed{2 \mid 2\cos(2\pi m/3) \mid 0}$$

Теперь расположим его под таблицей 3.1 и, скалярно умножив на все строки с учетом весов, найдем коэффициенты разложения исходного представления на неприводимые. Размерности неприводимых представлений дадут ожидаемую степень вырождения:

$$D(g) = k_1 D_1(g) \oplus k_2 D_2(g) \oplus k_3 D_3(g),$$

$$k_1 = k_2 = \frac{1}{3} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi m}{3} \right), \quad k_3 = \frac{1}{3} \left(2 - 2 \cos \frac{2\pi m}{3} \right).$$

Заметим, что косинус в последних формулах равен 1, когда m кратно 3, или $-1/2$, когда m не делится на 3. Значит коэффициенты будут разными:

$$k_1 = k_2 = 1, \quad k_3 = 0, \quad m = 3n;$$

$$k_1 = k_2 = 0, \quad k_3 = 1, \quad m = 3n \pm 1.$$

Выводы: когда m делится на 3, вырождение снимается, и функции преобразуются по разным одномерным неприводимым представлениям. Когда m не делится на 3, функции преобразуются по двумерному неприводимому представлению, значит двукратное вырождение остается.

Физическую причину этого можно понять, если перейти к новым функциям угла φ :

$$\psi_+(\varphi) = \cos m\varphi, \quad \psi_-(\varphi) = \sin m\varphi.$$

Функция ψ_+ имеют нули в местах расположения грузов, когда m кратно 3. Значит на эту моду грузы не влияют, но они увеличивают частоту моды ψ_- , поэтому вырождение снимается именно при $m = 3n$.

Для справки мы приведем таблицы характеров нескольких точечных групп: C_2 , D_2 , D_3 , D_4 , T , O , Y .

Обозначения: В первой строке каждой таблицы перечислены классы сопряженных элементов σ_i . Единичный элемент обозначен буквой E , C_n означает ось n -го порядка. Числа перед символами элементов симметрии указывают число элементов в соответствующих классах, $\varepsilon = e^{2\pi i/3}$. Когда группа представляет собой прямое произведение $G = G_1 \times G_2$, ее таблица характеров — прямое произведение таблиц характеров G_1 и G_2 (см., например, таблицы для C_2 и $D_2 = C_2 \times C_2$). Более подробные таблицы, охватывающие почти все точечные группы, приведены, например, в учебниках Ландау и Лифшица [2], Петрашень и Трифонова [3].

Таблица 3.2. Таблицы неприводимых характеров точечных групп

C_2	E	C_2
$\chi^{(1)}$	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1

D_2	E	C_2	C_2'	C_2''
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1	-1
$\chi^{(3)}$	1	1	-1	-1
$\chi^{(4)}$	1	-1	-1	1

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0

D_4	E	C_4^2	$2C_4$	$2C_2$	$2C_2'$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	1	-1	-1
$\chi^{(3)}$	1	1	-1	1	-1
$\chi^{(4)}$	1	1	-1	-1	1
$\chi^{(5)}$	2	-2	0	0	0

T	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	ε	ε^2
$\chi^{(3)}$	1	1	ε^2	ε
$\chi^{(4)}$	3	-1	0	0

O	E	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_2$	$6C_4$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	1	-1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	2	0	0
$\chi^{(4)}$	3	0	-1	-1	1
$\chi^{(5)}$	3	0	-1	1	-1

Y	E	$15C_2$	$20C_3$	$12C_5$	$12C_5^2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	3	-1	0	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$
$\chi^{(3)}$	3	-1	0	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$
$\chi^{(4)}$	4	0	1	-1	-1
$\chi^{(5)}$	5	1	-1	0	0

Лекция 4

Колебания молекул

Одно из приложений теории групп в физике — снятие вырождения при понижении симметрии — мы уже обсуждали на стр. 20. Теперь мы познакомимся с другим приложением: расчетом кратности вырождения молекулярных колебаний. После теоретического материала по непрерывным группам и алгебрам Ли мы изучим еще два приложения: правила отбора и инвариантные тензоры.

4.1. Кратность вырождения

Энергия малых колебаний n -атомной молекулы выражается через координаты $x_k, k = 1, \dots, 3n$, отсчитанные от положения равновесия $x = 0$, как квадратичная форма

$$E = \sum_{k=1}^{3n} \frac{M_k \dot{x}_k^2}{2} + \sum_{k,j} \frac{V_{kj} x_k x_j}{2}, \quad (4.1)$$

где $k = 1, 2, 3$ обозначают три координаты первого ядра, $k = 4, 5, 6$ — второго и т.д., M_k — масса ядра k ($M_1 = M_2 = M_3, M_4 = M_5 = M_6, \dots$)

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x_k} \right|_{x=0} = 0, \quad V_{kj} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_j} \right|_{x=0},$$

$U(x_1, \dots, x_{3n})$ — потенциальная энергия [24]. Уравнения движения

$$M_k \ddot{x}_k = - \sum_{j=1}^{3n} V_{kj} x_j \quad (4.2)$$

имеют решения в виде нормальных колебаний, когда все координаты меняются с одной и той же частотой $x_k = a_k e^{-i\omega t}$. На амплитуды нормальных колебаний из (4.2) получаются алгебраические уравнения

$$\omega^2 M_k a_k = \sum_{j=1}^{3n} V_{kj} a_j. \quad (4.3)$$

От масс можно избавиться переходом к новым переменным $b_k = \sqrt{M_k} a_k$, тогда (4.3) сведется к задаче на поиск собственных векторов и собственных значений матрицы $B_{kj} = V_{kj} / \sqrt{M_k M_j}$. Значения $\omega_\alpha^2, \alpha = 1, \dots, K \leq 3n$ находятся из характеристического уравнения

$$\det(B_{kj} - \omega^2 \delta_{kj}) = 0.$$

Чем более симметрична молекула, тем меньше количество различных собственных частот $K < 3n$.

Если молекула обладает некоторой точечной группой симметрии G , то и матрица V_{kj} порядка $3n$ не меняется при преобразованиях $g \in G$. Эти преобразования тоже можно записать в виде матриц $D(g)$ порядка $3n$, тогда

$$V = D(g)VD^{-1}(g).$$

Матрицы $D(g)$ образуют *исходное* представление группы симметрии молекулы. Матрицы исходного представления содержат перестановки одинаковых атомов и геометрические преобразования: повороты, отражения и зеркальные повороты. Группа G является подгруппой прямого произведения группы подстановок P_n и группы ортогональных преобразований

$$G < P_n \otimes O(3). \quad (4.4)$$

Представление $D(g)$, вообще говоря, приводимо. Его можно разложить в прямую сумму неприводимых представлений

$$D(g) = \bigoplus_{\alpha} k_{\alpha} D^{(\alpha)}(g), \quad \sum_{\alpha=1}^K k_{\alpha} n_{\alpha} = 3n; \quad n_{\alpha} = \dim D^{(\alpha)}. \quad (4.5)$$

Если перейти к нормальным координатам $Q_k = b_k e^{-i\omega t}$, то энергия (4.1) запишется в виде суммы по нормальным колебаниям:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} (\dot{Q}_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{3n} \dot{Q}_i^2 + \sum_{\alpha=1}^K \omega_{\alpha}^2 \sum_{p=1}^{n_{\alpha}} Q_{\alpha p}^2 \right).$$

Здесь нормальные координаты, относящиеся к одной собственной частоте ω_{α} , мы обозначили вторым индексом p . Суммирование квадратов нормальных координат во внутренней сумме последнего выражения ведется от $p = 1$ до кратности n_{α} вырождения частоты ω_{α} . Кратность вырождения совпадает с размерностью неприводимого представления. Действительно, в подпространстве размерности n_{α} , отвечающем собственной частоте ω_{α} , матрица V_{kj} коммутирует со всеми матрицами неприводимого представления, а значит, согласно лемме Шура, пропорциональна единичной $E_{n_{\alpha}}$.

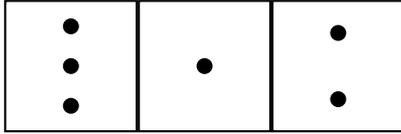
Замечание 4.1. Кратности вырождения, найденные таким способом, относятся к классической задаче о линейном осцилляторе со многими степенями свободы. В квантовой механике кратность вырождения g_N уровня зависит от его энергии и растет с номером N .

Квантовомеханическую кратность вырождения можно найти по классической кратности. Например, если классическая кратность вырождения $n_{\alpha} = 3$, то в квантовой механике энергия трехмерного изотропного осциллятора равна

$$E_{\alpha} = \hbar \omega_{\alpha} \left(N_1 + N_2 + N_3 + \frac{3}{2} \right),$$

где $N_1, N_2, N_3 = 0, 1, \dots$ — колебательные квантовые числа. Энергия зависит только от их суммы $N = N_1 + N_2 + N_3$, значит кратность вырождения равна числу способов, которыми можно разбить число N на три слагаемых. Ответ этой комбинаторной задачи выражается через число сочетаний

$$g_N = C_{N+2}^2 = \frac{(N+2)!}{N! \cdot 2!} = \frac{(N+1)(N+2)}{2}. \quad (4.6)$$



Его можно получить, если представить себе, что ящик разбит на 3 ячейки и мы пытаемся разместить в нем N шаров. Всего возможно $(N+2)!$ перестановок из N шаров и двух перегородок (всего из $N+2$ объектов). На рисунке приведено одно из распределений ($N_1 = 3, N_2 = 1, N_3 =$

$2, N = 6$). Те распределения, которые получаются друг из друга перестановкой шаров, естественно, одинаковые. Если переставить перегородки, то распределение тоже не изменится, поэтому в (4.6) стоит деление на $N!$ и $2!$.

Замечание 4.2. Иногда две частоты из разных представлений совпадают $\omega_\alpha = \omega_\beta, \alpha \neq \beta$. Тогда говорят о *случайном вырождении*. Иногда такое совпадение означает, что система гораздо более симметрична, чем нам показалось первоначально, т.е. группа G содержит не все ее симметрии.

4.2. Характер исходного представления

В дискретной подгруппе группы ортогональных преобразований имеются всего три вида преобразований (элементов симметрии): поворот C_n , отражение в плоскости σ и зеркальный поворот S_{2n} . Найдем значение характера каждого такого преобразования.

Поворот $r(\theta)$ вокруг оси z на угол θ описывается матрицей

$$A(r) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

след которой равен $\chi(r) = 2 \cos \theta + 1$. При повороте молекулы некоторые ядра меняются местами, а вклад в матрицу исходного представления внесут только те, которые находятся на оси вращения. Пусть число атомов на оси N_A , тогда всего получится

$$\chi_i(r) = N_A(2 \cos \theta + 1). \quad (4.7)$$

Здесь индекс i обозначает исходное представление. Если мы рассматриваем не вектор, а псевдовектор, то по отношению к вращению он ведет себя точно так же. Поэтому и характер для псевдовекторного представления поворота будет тем же самым:

$$A_+(r) = A_-(r) = A(r).$$

Индексом $+$ мы обозначили истинный (полярный) вектор, а индексом $-$ — псевдовектор (аксиальный вектор).

Отражение σ описывается просто, если выбрать оси x, y в зеркальной плоскости. Тогда матрица отражения

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

Псевдовектор не меняется при инверсии, так как отражение в плоскости можно представить себе как инверсию I с последующим отражением двух осей. Инверсия в двух измерениях эквивалентна повороту на угол π (6.3), т.е. $\sigma = r(\pi)I$, поэтому матрица $A_-(\sigma)$ отличается знаком от A_+ :

$$A_-(\sigma) = -A_+(\sigma).$$

Вклад каждого из ядер, находящихся в плоскости (пусть их там N_p) равен 1, тогда характер исходного представления

$$\chi_i(\sigma) = N_p. \quad (4.8)$$

Зеркальный поворот $s(\theta)$ для векторного представления описывается матрицей

$$A_+(s) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

потому что это обычный поворот на угол θ вокруг оси z с последующим отражением в плоскости xy . Вклад координат одного ядра в характер равен $\chi_+(s) = 2 \cos \theta - 1$. Всего получится

$$\chi_i(s) = N_s(2 \cos \theta - 1), \quad (4.9)$$

где N_s — число атомов на пересечении зеркально-поворотной оси и зеркальной плоскости. Для псевдовектора $s(\theta) = r(\pi)Ir(\theta) = r(\pi)r(\theta) = r(\pi + \theta)$, но $\cos(\pi + \theta) = -\cos \theta$, $\sin(\pi + \theta) = -\sin \theta$, откуда

$$A_-(s) = -A_+(s).$$

4.3. Колебательное представление

У реальной молекулы есть 6 степеней свободы, собственные частоты для которых равны нулю. Это три трансляции и три вращения молекулы как целого. Их называют *нулевыми модами*. Для молекулы типа ротатора, ядра которой расположены на одной прямой, вращение вокруг этой прямой не считается отдельной степенью свободы, так что нулевых мод всего 5. Чтобы сразу не учитывать нулевые моды, рассмотрим *колебательное* (или осцилляторное) представление. Для этого надо перейти в $3n - 6$ -мерное подпространство, которое является ортогональным дополнением 6-мерного подпространства нулевых мод. Практически выписать такие матрицы не всегда просто, но нам и не нужны сами матрицы. Чтобы найти характер колебательного представления χ_v , надо из характера χ_i исходного представления (4.7), (4.8), (4.9) вычесть суммарный характер нулевых мод χ_0 .

Значение характера нулевых мод находится сразу, если вспомнить, что трансляция — это истинный вектор, а вращение молекулы — псевдовектор. Тогда характеры нулевых мод вектора и псевдовектора на вращении $r(\theta)$ удваиваются, а на отражении и зеркальном повороте взаимно уничтожаются:

$$\begin{aligned} \chi_0(r) &= \text{tr}(A_+(r) + A_-(r)) = 2(2 \cos \theta + 1), \\ \chi_0(\sigma) &= \text{tr}(A_+(\sigma) + A_-(\sigma)) = 0, \\ \chi_0(s) &= \text{tr}(A_+(s) + A_-(s)) = 0. \end{aligned}$$

Вычитая из характера исходного представления характер нулевых мод, получим расчетные формулы для характера осцилляторного представления

$$\begin{aligned} \chi_v(1) &= 3n - 6, & \chi_v(r) &= (N_A - 2)(2 \cos \theta + 1), \\ \chi_v(\sigma) &= N_p, & \chi_v(s) &= N_s(2 \cos \theta - 1). \end{aligned} \quad (4.10)$$

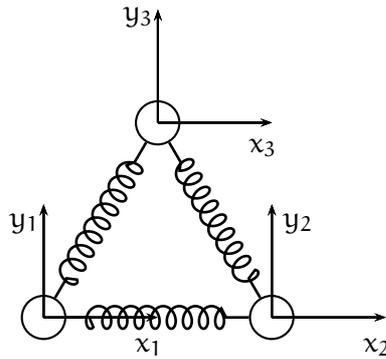


Рис. 4.1. Координаты ядер трехатомной молекулы с симметрией C_{3v} . Оси $z_{1,2,3}$ направлены на читателя из плоскости рисунка и не изображены.

Пример 4.1. Рассмотрим молекулу из трех одинаковых атомов, расположенных в вершинах правильного треугольника, с группой симметрии C_{3v} . Исходное представление 9-мерно, а колебательное — 3-мерное. Для сравнения рассмотрим сначала колебательное представление, пользуясь формулами (4.10). Затем рассмотрим исходное представление, явно выписывая матрицы преобразований. Значения характера в осцилляторном представлении записываем в виде вектора

$$\chi_v = (3 \ 0 \ 1),$$

который надо скалярно умножить на каждую строку таблицы 3.1 и разделить на порядок группы $|G|$. Получится

$$D_v(g) = D_1(g) \oplus D_3(g),$$

где номер неприводимого представления группы треугольника мы обозначили нижним индексом (верхний индекс в круглых скобках ниже означает номер l $(2l + 1)$ -мерного неприводимого представления группы вращений).

Таким образом, имеется одно простое колебание и одно двукратно вырожденное. У трехатомной молекулы все три нормальных колебания происходят в плоскости молекулы. Простое колебание — аксиально симметричное: все три атома удаляются от центра треугольника с одинаковой скоростью. Двукратно вырождены те колебания, в которых два атома движутся навстречу третьему. Всего таких колебаний три, но только два из них линейно независимы.

Единичному элементу в исходном представлении отвечает матрица

$$D_i(1) = E_9 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Поворот $r(120^\circ)$ описывает матрица, которая циклически переставляет атомы, а в ко-

ординатной системе отдельного атома осуществляет поворот в плоскости $xу$

$$D_i(r) = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Отражение в плоскости σ_v , проходящей через высоту треугольника, опущенную из вершины 3 (рис. 4.1), соответствует матрице, которая оставляет атом 3 на месте, а два других переставляет. У каждого из атомов при этом меняется знак координаты x

$$D_i(\sigma) = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right).$$

Характер исходного представления состоит из следов трех выписанных матриц

$$\chi_i = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

откуда $D_i(g) = 2D_1(g) \oplus D_2(g) \oplus 3D_3(g)$. По сравнению с разложением осцилляторного представления дополнительно появились два одномерных и два двумерных неприводимых представления. Все они отвечают нулевым модам — трансляции и вращению молекулы как целого.

Замечание 4.3. Все приведенные выводы относятся к линейным колебаниям. Анггармонизм нарушает симметрии и приводит к полному или частичному снятию вырождения. Точные симметрии, которые не портят большие отклонения ядер от положения равновесия, бывают в двухатомных и трехатомных молекулах. В двухатомных ядра находятся на одной прямой, а в трехатомных — всегда в одной плоскости.

4.4. Собственные векторы и собственные значения

Задача о нахождении кратности вырождения молекулярных колебаний и задача о снятии вырождения при понижении симметрии сводятся к диагонализации матрицы, которая коммутирует с матрицами представления группы. Иногда удается найти не только кратности вырождения, но и собственные векторы и собственные значения матрицы B порядка r

$$Bb_n = \lambda b_n,$$

перестановочной с матрицами представления $D(g)$ группы G , $\dim D(g) = r$:

$$[D(g), B] = 0.$$

Если в результате разложения (4.5) исходного представления на неприводимые оказалось, что все $k_\alpha = 0$ или 1, представление называется *просто приводимым*. Для таких представлений теорема Вигнера (см. [3]) гарантирует возможность построить проектор на подпространство неприводимого представления $D^{(\alpha)}$:

$$\hat{P}^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} [\chi^{(\alpha)}(g)]^* D(g), \quad (4.11)$$

где $\chi^{(\alpha)}$ характер неприводимого представления α , n_α — его размерность, а $D(g)$ — матрицы исходного r -мерного представления. Когда известен проектор, можно найти и собственные векторы, отвечающие данному собственному значению. Для этого надо подействовать на какие-нибудь базисные векторы проектором (4.11).

Удается также найти собственные значения. Можно искать собственные значения, действуя на собственные векторы оператором B . Другой способ — подействовать на матрицу B матрицами всех элементов группы $D(g)$ и вычислить след. Получится система линейных уравнений

$$\text{tr} (D(g)B) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(g),$$

Уравнений хватает для вычисления всех собственных чисел, если представление $D(g)$ — просто приводимо. При этом секулярное уравнение степени r решать не приходится.

Вывести формулу (4.11) можно с помощью соотношения ортогональности неприводимых представлений (2.3). Для этого перейдем в тот базис, где все матрицы исходного представления $D(g)$ распались в прямую сумму неприводимых представлений:

$$D_{ij}(g) = \bigoplus_{\beta=1}^K D_{ij}^{(\beta)}(g).$$

В этом базисе след не изменится и из формулы (4.11), переставляя прямую и обычную суммы, и пользуясь соотношением ортогональности (2.3) неприводимых представлений, мы найдем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{ij}^{(\alpha)} &= \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} \left[\sum_{k=1}^{n_\alpha} D_{kk}^{(\alpha)}(g) \right]^* \bigoplus_{\beta=1}^K D_{ij}^{(\beta)}(g) = \frac{n_\alpha}{|G|} \bigoplus_{\beta=1}^K \sum_{k=1}^{n_\alpha} \sum_{g \in G} [D_{kk}^{(\alpha)}(g)]^* D_{ij}^{(\beta)}(g) = \\ &= \frac{n_\alpha}{|G|} \bigoplus_{\beta=1}^K \sum_{k=1}^{n_\beta} \frac{|G|}{n_\beta} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ki} \delta_{kj} = \begin{cases} \delta_{ij}, & i, j = 1, \dots, n_\alpha; \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \end{aligned}$$

Значит $\mathcal{P}_{ij}^{(\alpha)}$ — единичная матрица на подпространстве V_α неприводимого представления α и нулевая матрица во всех остальных представлениях. Итак, мы показали, что $\hat{P}^{(\alpha)}$ есть оператор проектирования на подпространство V_α .

Лекция 5

Группы и алгебры Ли

5.1. Гладкое многообразие

Определение 5.1. Многообразие $M \subset \mathbb{R}^n$ — это множество, каждая точка которого имеет открытую окрестность, допускающую взаимно-однозначное и взаимно-непрерывное отображение в открытое подмножество \mathbb{R}^n .

На рис. 5.1 показана точка $a \in M$ и две ее окрестности U, V , которые отображаются в \mathbb{R}^n функциями f, g , соответственно. В образах окрестностей $f(U), g(V)$ серым показан образ пересечения окрестностей. Точка a отображается в точки $x = (x_1, x_2, \dots, x_n), y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$. Если мы захотим перейти от точки x к точке y , можно построить композицию отображений $g \cdot f^{-1}$. Если функция $y(x) = g(f^{-1}(x))$ является гладкой, то M называют *гладким* многообразием.

Другими словами, в окрестности каждой точки многообразия можно локально ввести декартовы координаты (*карту*). Если переход с карты на карту осуществляется гладкой функцией, то и многообразие гладкое. Если любые две точки многообразия M можно соединить кривой, целиком лежащей в многообразии, M называется *связным*. Если всякий замкнутый путь на многообразии M можно непрерывно стянуть в точку, M — *односвязное* многообразие. Замкнутое ограниченное многообразие будем называть *компактным*.

Более подробно топологические и геометрические вопросы, связанные с гладкими многообразиями, изложены в книгах [18, 25]. Последовательное, но вполне элементарное введение в топологию с многочисленными иллюстрациями имеется в книге [26]. Для

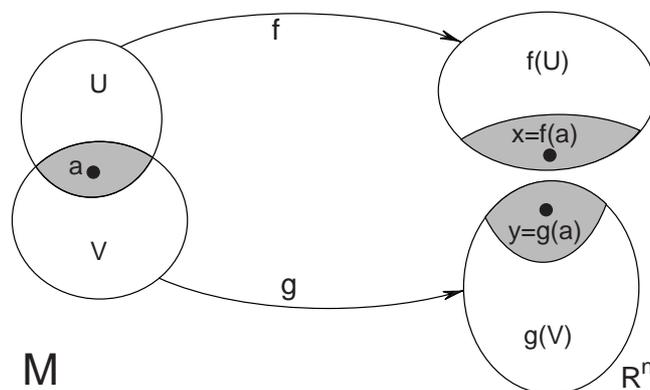


Рис. 5.1. Отображение окрестностей U и V точки a гладкого многообразия M в евклидово пространство \mathbb{R}^n . Функция $y = g(f^{-1}(x))$ должна быть гладкой.

наших целей надо представлять себе, что характерным признаком многообразия служит «равноправие» всех точек.

Пример 5.1. На прямой \mathbb{R} отрезок (сегмент) $a \leq x \leq b$ не является многообразием, поскольку концевые точки a, b неравноправны с внутренними точками. Интервал $a < x < b$ — многообразие, вся числовая ось \mathbb{R} тоже многообразие. Интервал можно, растягивая, непрерывно отобразить на всю числовую ось, поэтому говорят, что интервал и ось *гомеоморфны*. Окружность $S^1 : x^2 + y^2 = 1$ тоже одномерное многообразие на плоскости, но в отличие от предыдущего, компактное. Чтобы отобразить его на интервал, нужно разорвать окружность, удалив одну точку, либо склеить концы интервала, добавив одну точку. Отображение с разрывами или склейками не непрерывное, поэтому S^1 и \mathbb{R} не гомеоморфны.

В качестве двумерных примеров рассмотрим сферу $S^2 : x^2 + y^2 + z^2 = 1$ и тор T^2 . Сфера представляет собой односвязное многообразие. На торе имеются контуры, которые нельзя гладко стянуть в точку, поэтому многообразие не односвязное. Оба примера — связные компактные многообразия, а их объединение $S^2 \cup T^2$ — тоже многообразие, но несвязное.

5.2. Группа Ли

Определение 5.2. *Группа Ли* G — это непрерывная группа, которая одновременно является гладким многообразием. Предполагается также, что групповая операция и нахождение обратного элемента задаются гладкими отображениями $G \times G \rightarrow G$ и $G \rightarrow G$.

Чтобы проверить, является ли данная группа группой Ли, вводят локальные координаты $x = (x_1, x_2, \dots, x_r)$. Процедура введения координат называется *параметризацией* группы, а минимально необходимое число действительных параметров r — *размерностью* группы $r = \dim G$. Начало координат принято выбирать в единице группы. Вместо таблицы умножения непрерывная группа задается функцией $2r$ переменных. Пусть при умножении элементов с координатами x, y получился элемент с координатой z : $g(z) = g(x) \cdot g(y)$. Тогда $z = \varphi(x, y)$ называется *функцией умножения*. Если при проверке оказалось, что функция $\varphi(x, y)$ — гладкая, то G — группа Ли.

Групповое свойство накладывает три ограничения на функцию умножения:

- 1) $\varphi(\varphi(x, y), z) = \varphi(x, \varphi(y, z))$;
- 2) $\varphi(x, 0) = \varphi(0, x) = x$;
- 3) $\forall x \exists y : \varphi(x, y) = \varphi(y, x) = 0$.

В приложениях нас будут интересовать *матричные группы Ли* $G < \mathbf{GL}(n, \mathbb{R})$ или $G < \mathbf{GL}(n, \mathbb{C})$, т.е. подгруппы группы всех невырожденных преобразований n -мерного линейного пространства над полем действительных или комплексных чисел.

Размерность полной группы линейных преобразований $\dim \mathbf{GL}(n, \mathbb{C}) = 2n^2$. Ее подгруппы задаются набором некоторого числа k уравнений связи, поэтому имеют меньшую размерность $r = 2n^2 - k$. В пространстве \mathbb{R}^{2n^2} k уравнений задают r -мерное многообразие. Если условия задаются равенством нулю вещественно-аналитических функций координат, то многообразие получается гладким. В матричной группе $\mathbf{GL}(n, \mathbb{C})$ можно ввести координаты. Вычтем из матриц A, B единичную матрицу E и обозначим $A - E = X, B - E = Y$, а элементы матриц X, Y будем считать координатами матриц A, B .

Найдем координаты произведения и тем самым функцию умножения (которая тоже представляет собой квадратную матрицу)

$$\varphi(X, Y) = (E + X)(E + Y) - E = X + Y + XY.$$

Можно убедиться, что все три свойства выполнены. Проверим, например, первое:

$$\begin{aligned}\varphi(\varphi(X, Y), Z) &= \varphi(X, Y) + Z + \varphi(X, Y)Z = (X + Y + XY) + Z + (X + Y + XY)Z, \\ \varphi(X, \varphi(Y, Z)) &= X + \varphi(Y, Z) + X\varphi(Y, Z) = X + (Y + Z + YZ) + X(Y + Z + YZ).\end{aligned}$$

Пример 5.2. Размерность группы всех линейных преобразований над полем комплексных чисел $\dim \mathbf{GL}(n, \mathbb{C}) = 2n^2$, потому что всего в матрице n^2 комплексных чисел. Символ $\mathbf{SL}(n, \mathbb{C})$, где буква S означает «специальную» группу, состоящую из унимодулярных матриц (матриц с равным единице определителем). Равенство единице определителя — это одно дополнительное комплексное условие или два действительных, поэтому $\dim \mathbf{SL}(n, \mathbb{C}) = 2n^2 - 2$.

$\mathbf{U}(n, \mathbb{C})$ означает группу унитарных матриц, т.е. таких, для которых эрмитовски сопряженная совпадает с обратной $U^{-1} = U^\dagger$. Чтобы найти размерность, пересчитаем дополнительные условия: первая строка должна быть ортогональна $(n - 1)$ строке, вторая — $(n - 2)$ строкам, ..., предпоследняя — одной, последней. Всего получается $n(n - 1)/2$ комплексных условий или $n(n - 1)$ действительных. Имеется также n действительных условий нормировки на единицу каждой строки. Вычитая из $2n^2$ количество условий, найдем $\dim \mathbf{U}(n, \mathbb{C}) = n^2$. В обозначении унитарной группы для краткости иногда не пишут знака поля комплексных чисел, а подразумевают.

$\mathbf{SO}(n, \mathbb{R})$ — группа ортогональных унимодулярных матриц: $g^{-1} = g^T$, $\det g = 1$. Из размерности $\dim \mathbf{GL}(n, \mathbb{R}) = n^2$ надо вычесть $n(n - 1)/2$ (соотношений ортогональности строк или столбцов) и n условий нормировки. Получится $\dim \mathbf{SO}(n, \mathbb{R}) = n^2 - n(n - 1)/2 - n = n(n - 1)/2$. В обозначении группы ортогональных матриц тоже иногда пропускают для краткости знак поля действительных чисел. Группы $\mathbf{SO}(p, n - p, \mathbb{R})$ — это группа преобразований сохраняющих норму $\rho^2 = x_1^2 + \dots + x_p^2 - x_{p+1}^2 - \dots - x_n^2$. В частных случаях $p = 0$ или n такая группа изоморфна $\mathbf{SO}(n, \mathbb{R})$. При других p и фиксированном n группы отличаются, но размерность остается той же самой.

Параметризация группы Ли может быть разной, но число координат остается равным размерности группы.

Пример 5.3. Поворот $g \in \mathbf{SO}(3)$ можно рассматривать как последовательность поворотов на угол α_1 вокруг оси x , на угол α_2 вокруг оси y и на угол α_3 вокруг оси z . Тогда матрица поворота дается произведением трех ортогональных матриц

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \begin{pmatrix} \cos \alpha_3 & -\sin \alpha_3 & 0 \\ \sin \alpha_3 & \cos \alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_2 & 0 & \sin \alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha_2 & 0 & \cos \alpha_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha_1 & -\sin \alpha_1 \\ 0 & \sin \alpha_1 & \cos \alpha_1 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

В соответствии с нашим соглашением $g(0, 0, 0) = E$.

Замечание 5.1. Обратите внимание, что знак синуса во второй матрице (5.1) не такой, как в первой и последней. Чтобы разобраться в знаках, обратимся к рисунку 5.2. Вместо того, чтобы повернуть вектор OA в положительном направлении на угол α , мы поворачиваем на тот же угол координатные оси, но в отрицательном направлении. Опустим из точки A перпендикуляры AP и AD на старые координатные оси, тогда $OP = x$, $OD = y$. Опустим перпендикуляры AC и AB на новые оси, тогда $OB = x'$, $OC = y'$. Опустим также перпендикуляры PQ и PR на новые оси из точки P . Теперь заметим, что углы QOP ,

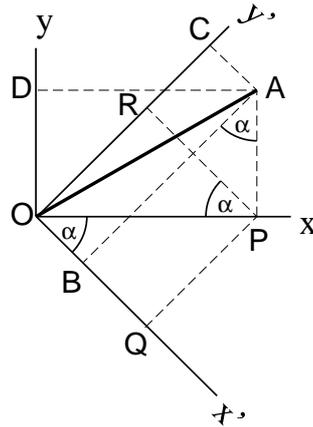


Рис. 5.2. К выводу матрицы вращения вокруг оси z на угол α .

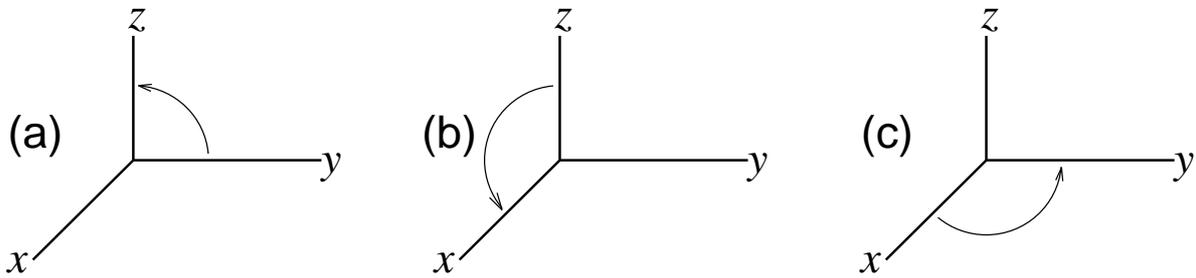


Рис. 5.3. Схема вращения вокруг координатных осей.

OPR и BAQ равны α . Отсюда $x' = OB = OQ - BQ = OP \cos \alpha - AP \sin \alpha = x \cos \alpha - y \sin \alpha$. Аналогично, $y' = OC = OR - RC = OP \sin \alpha + AP \cos \alpha = x \sin \alpha + y \cos \alpha$. Значит в матрице вращения вокруг оси z знак минус стоит перед синусом в первой строке, потому что вращение идет от оси x к оси y , как показано схематически на рисунке 5.3 с. Аналогично знаки расставлены и при вращении вокруг оси x , см. рис. 5.3 а. Только при вращении вокруг оси y (рис. 5.3 б) поворот идет от оси z к оси x , поэтому знаки получаются другими.

Можно поворот рассматривать как вращение на угол ψ вокруг единичного вектора \mathbf{n} , координаты которого на единичной сфере даются углами θ, φ в сферической системе координат. Получилась другая параметризация. Увеличим радиус единичного шара до значения π , тогда можно отсчитывать координату ψ вдоль радиуса и каждая точка внутри шара на рис. 5.4 соответствует элементу группы. Повороты на угол $\pi \leq \psi \leq 2\pi$ можно рассматривать как повороты на угол $0 \leq \psi \leq \pi$ вокруг вектора $-\mathbf{n}$. Однако поворот ровно на угол π вокруг осей \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ — это одно и то же преобразование, поэтому мы должны отождествить все пары диаметрально противоположных точек сферы (говорят, что сфера «кусает сама себя»). Получившееся множество и есть многообразие $SO(3)$, потому что отождествив противоположные точки сферы, мы убрали границу и сделали все точки равноправными. Многообразие получилось связным, но не односвязным, потому что мы не можем стянуть в точку путь, проходящий через концы диаметра шара. Диаметрально противоположные точки останутся противоположными и нам не удастся свести их в одну. То, что нам не удалось нарисовать данное многообразие без самопересечений, означает, что оно не вкладывается в трехмерное пространство. $SO(3)$ вкладывается в четырехмерное евклидово пространство. Такое многообразие называется проективной сферой и обозначается \mathbb{RP}^3 . Многообразия четырех групп Ли сведены в таблице 5.1.

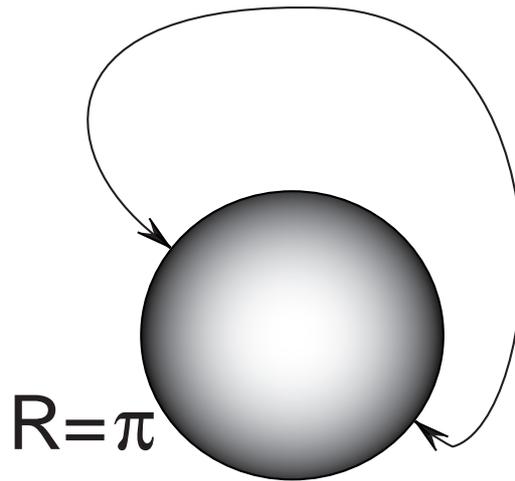


Рис. 5.4. Многообразие $SO(3)$ представляет собой шар радиуса π , диаметрально противоположные точки которого отождествлены.

Таблица 5.1. Многообразия нескольких групп Ли

Группа	Многообразие	Уравнение	Обозн.
$SO(2)$	Окружность	$x_1^2 + x_2^2 = 1$	S^1
$U(1) \times U(1)$	Тор	$z = e^{i\phi_1 + i\phi_2}$	T^2
$SU(2)$	Сфера	$x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$	S^3
$SO(3) \approx SU(2)/C_2$	Проективная сфера	$x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1, x_0 \geq 0$, диаметрально противоположные точки "экватора" $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ отождествлены	$\mathbb{R}P^3$

5.3. Алгебра Ли

Определение 5.3. Алгеброй Ли над полем $F = \mathbb{R}$ или $F = \mathbb{C}$ называется линейное пространство над F , снабженное бинарной операцией (скобкой Ли $[\cdot, \cdot]$) со следующими свойствами:

1. $[\lambda a + b, c] = \lambda[a, c] + [b, c]$ линейность;
2. $[b, a] = -[a, b]$ антисимметричность;
3. $[a, [b, c]] + [c, [a, b]] + [b, [c, a]] = 0$ тождество Якоби.

Приведем три примера:

1. Пространство \mathbb{R}^3 с векторным произведением (обозначим его \mathbb{R}^3_{\times}). Первое и второе свойство очевидны, третье доказывается с помощью правила «БАЦ минус ЦАБ».

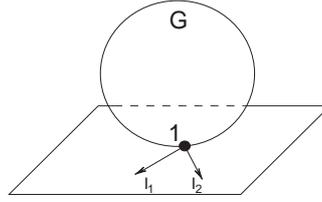


Рис. 5.5. Группа Ли G и касательное пространство в единице. Показано два базисных вектора I_1, I_2 , лежащих в касательном пространстве.

2. Алгебра матриц с коммутатором $[A, B] = AB - BA$. Третье свойство проверяется непосредственно

$$\begin{aligned} [A_1, [A_2, A_3]] &= A_1(\underline{A_2 A_3} - A_3 A_2) - (A_2 A_3 - A_3 A_2)A_1, \\ [A_3, [A_1, A_2]] &= A_3(\underline{A_1 A_2} - A_2 A_1) - (\underline{A_1 A_2} - A_2 A_1)A_3, \\ [A_2, [A_3, A_1]] &= A_2(A_3 A_1 - A_1 A_3) - (A_3 A_1 - A_1 A_3)A_2. \end{aligned}$$

В сумме получится нуль, потому что все слагаемые скомпенсируются. Одна из таких пар подчеркнута.

3. Функции координат q_i и импульсов p_i со скобкой Пуассона

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} \right).$$

образуют бесконечномерную алгебру Ли. Тождество Якоби доказывается в механике [24].

5.4. Алгебра Ли группы Ли

Среди абстрактных алгебр Ли наиболее ценна та алгебра, которая связана с данной группой Ли. Покажем, как она получается. Строим касательное пространство в единице матричной группы G , как показано на рис. 5.5. В качестве базисных касательных векторов выберем частные производные по отдельным координатам в начале координат

$$I_k = \left. \frac{\partial g(x_1, x_2, \dots, x_r)}{\partial x_k} \right|_{x=0}, \quad k = 1, 2, \dots, r, \quad (5.2)$$

а скобкой Ли будет коммутатор. Такие векторы называются *генераторами* группы или инфинитезимальными операторами. Скобка Ли находится как разность функций умножения в прямом и обратном порядке

$$[X, Y] = \lim_{X, Y \rightarrow 0} (\varphi(X, Y) - \varphi(Y, X)) = XY - YX.$$

Коммутатор базисных векторов можно снова разложить по базису

$$[I_i, I_j] = \sum_k c_{ij}^k I_k, \quad (5.3)$$

тогда коэффициенты c_{ij}^k разложения называются *структурными константами* алгебры Ли. Из (5.2) видно, что структурные константы антисимметричны по нижним индексам $c_{ji}^k = -c_{ij}^k$. В частности, в алгебре \mathbb{R}_x^3 структурные константы выражаются

через полностью антисимметричный тензор e_{ijk} : $c_{ij}^k = e_{ijk}$. Здесь e_{ijk} — полностью антисимметричный тензор, $e_{123} = +1$.

Чтобы проверить (5.3) возьмем элемент группы g , лежащий в окрестности единицы, и разложим по базису: $g = 1 + t \sum c_k I_k$, где параметр $t \rightarrow 0$, а более высокими степенями t мы пренебрегаем. Малое преобразование подобия по непрерывности не выводит из окрестности единицы группы, потому что оставляет единицу на месте. Совершим преобразование подобия одного из генераторов

$$\tilde{I}_l = g I_l g^{-1} = (1 + t \sum_k c_k I_k) I_l (1 - t \sum_k c_k I_k)$$

и его результат снова разложим по базису, пренебрегая квадратичными членами (чтобы оставаться в окрестности единицы)

$$\tilde{I}_l = I_l + t \sum_k c_k (I_k I_l - I_l I_k).$$

В частности, если сдвинуться на $t \rightarrow 0$ вдоль генератора I_m : $g = g_m = 1 + t I_m$, то в сумме по k останется только коэффициент с $k = m$, равный единице:

$$\tilde{I}_l^{(m)} = I_l + t [I_m, I_l]. \quad (5.4)$$

С другой стороны, в окрестности единицы мы можем разложить \tilde{I}_l по базисным векторам

$$\tilde{I}_l^{(m)} = I_l + t \sum_n d_{ln}^{(m)} I_n, \quad (5.5)$$

причем коэффициенты разложения d будут зависеть также от m . Приравнивая (5.4) и (5.5), получим (5.3). Отсюда видно, что коммутатор генераторов можно снова линейно выразить через генераторы. Структурные константы определяются коэффициентами d разложения по базису. Будем обозначать алгебру Ли группы Ли, как группу, добавляя впереди букву A . Иногда алгебру обозначают теми же, что и группу, но строчными буквами.

5.5. Экспоненциальная формула

Восстановление группы Ли по алгебре Ли основано на простом соображении: любой элемент группы можно приближенно записать как произведение большого числа элементов, близких к единице. В пределе получается бесконечное произведение, которое подчиняется обыкновенному дифференциальному уравнению. Решение дифференциального уравнения можно продолжить, но максимальная область распространения решения может и не совпасть со всей группой.

Сначала научимся восстанавливать элементы однопараметрической подгруппы группы $g(t) \in H < G$, $g(0) = 1$. Параметр t можно считать координатой и, продифференцировав по нему, найти алгебру. В такой алгебре всего один генератор

$$I = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0}.$$

Оказывается, что групповое свойство подгруппы можно записать как

$$g(s + t) = g(t)g(s). \quad (5.6)$$

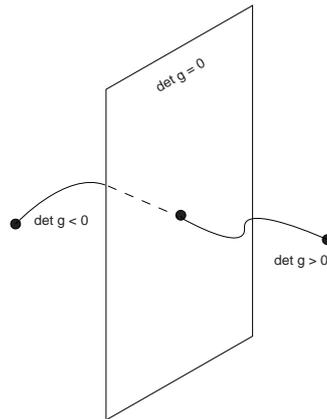


Рис. 5.6. Если соединить непрерывной кривой матрицы с положительным и отрицательным определителем, кривая пересечет поверхность вырожденных матриц.

Продифференцируем (5.6) по параметру t , а затем устремим $t \rightarrow 0$:

$$g'(s) = Ig(s).$$

Решение такой системы обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и начальным условием $g(0) = 1$, как известно, дается экспоненциальной формулой

$$g(s) = \exp Is.$$

В общем случае восстановление группы по ее алгебре невозможно, потому что не каждый элемент группы лежит в однопараметрической подгруппе.

Пример 5.4. В группе $GL(n, \mathbb{R})$ имеются матрицы с отрицательным определителем. Если мы соединим такую матрицу $g, \det g < 0$ с единичной $E, \det E > 0$ непрерывной кривой, то кривая неизбежно пересечет гиперповерхность $\det g = 0$ (рис. 5.6). Но вырожденные матрицы не принадлежат нашей группе. Значит матрицы с отрицательным определителем лежат в группе, но не принадлежат никакой однопараметрической подгруппе.

Сформулируем достаточное условие однозначного восстановления группы по ее алгебре. Доказывать условие мы не будем, а в следующей лекции приведем примеры, когда оно нарушается.

Теорема 5.1. *Всякой алгебре Ли отвечает единственная связная односвязная группа Ли.*

Лекция 6

Группы ортогональных и унитарных матриц

6.1. Примеры матричных алгебр Ли

На прошлой лекции мы рассмотрели некую программу изучения какой-нибудь группы Ли. Сначала надо построить алгебру Ли группы Ли. Алгебра — это линейное пространство, поэтому изучить ее и найти неприводимые представления гораздо проще, чем иметь дело с группой. Затем с помощью экспоненциальной формулы мы сможем восстановить матрицы представления исходной группы Ли. Точнее, мы сможем восстановить только те элементы группы, которые принадлежат *однопараметрической подгруппе*. В данной лекции мы применим эту программу к группам небольшой размерности $O(3, \mathbb{R})$ и $SU(2, \mathbb{C})$.

Пример 6.1. Группа $O(n, \mathbb{R})$ состоит из ортогональных матриц. Из алгебры известен общий вид ортогонального оператора

$$O = \left(\begin{array}{c} \boxed{\begin{matrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \boxed{\begin{matrix} -1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & -1 & \\ & & & \boxed{\begin{matrix} \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{matrix}} \\ & & & \ddots \\ & & & & \boxed{\begin{matrix} \cos \theta_l & \sin \theta_l \\ -\sin \theta_l & \cos \theta_l \end{matrix}} \end{matrix}} \right). \quad (6.1)$$

В некотором базисе ортогональная матрица состоит из единичной размера m_+ , минус единичной размера m_- и l блоков 2×2 , так что $m_+ + m_- + 2l = n$. Единичная матрица описывает координаты, которые не преобразуются. Матрица с -1 на главной диагонали описывает координаты, которые меняют знак (отражения). Блоки 2×2 описывают повороты на угол θ_i в плоскостях.

Покажем, что алгебра $\mathfrak{AO}(n, \mathbb{R})$ состоит из антисимметричных матриц $X^T = -X$.

Для этого найдем экспоненту

$$(\exp Xt)^T = \exp X^T t = \exp(-Xt) = (\exp Xt)^{-1}. \quad (6.2)$$

Размерность пространства антисимметричных матриц равна количеству элементов над нулевой главной диагональю $\dim \mathbf{AO}(n, \mathbb{R}) = n(n-1)/2$ и совпадает с размерностью группы. Для удобства некоторые матричные группы Ли и их алгебры собраны в таблице 6.1 (стр. 40).

Заметим, что определитель экспоненты в формуле (6.2) всегда равен +1, потому что $\det \exp Xt = \exp \operatorname{tr} Xt$. Значит экспоненциальная формула восстанавливает не всю группу $\mathbf{O}(n, \mathbb{R})$, а только подгруппу унимодулярных ортогональных матриц $\mathbf{SO}(n, \mathbb{R}) < \mathbf{O}(n, \mathbb{R})$. Чтобы определитель был равен +1, m_- должно быть четным числом. Тогда второй блок можно представить как совокупность минус единичных матриц 2×2 , а каждую матрицу $-E_2$ записать как поворот на угол π :

$$-E_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \pi & \sin \pi \\ -\sin \pi & \cos \pi \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

В четномерном пространстве инверсия сводится к поворотам на угол π . Мы только отбросили матрицы с определителем -1 (несобственные вращения), поэтому размерность группы останется такой же, как была в предыдущем примере. Группа Ли $\mathbf{O}(n, \mathbb{R})$ не является связной, а условие унимодулярности просто выделяет одну связную компоненту из двух.

Антисимметричные матрицы алгебры $\mathbf{AO}(n, \mathbb{R}) = \mathbf{ASO}(n, \mathbb{R})$ можно записать как линейные комбинации генераторов. Для каждого вращения в плоскости (x_i, x_j) генератор будет содержать нули всюду, кроме двух элементов: $X_{ij} = -X_{ji} = 1$. Блок, состоящий из элементов $X_{ii}, X_{ij}, X_{ji}, X_{jj}$, можно записать через *матрицу Паули*:

$$I_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_2.$$

Такое представление удобно, потому что эти матрицы:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

обладают простыми свойствами:

$$\sigma_i \sigma_j = ie_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij}.$$

Пример 6.2. Группу $\mathbf{SO}(3)$ можно параметризовать как поворот на угол $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ вокруг координатных осей (5.1). Дифференцируя по α_1 , согласно определению (5.2), восстановим первый генератор

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Знак минус у генератора I_2 получился в нижней строке в соответствии с замечанием 5.1. Прямым вычислением находим коммутаторы генераторов

$$I_1 I_2 - I_2 I_1 = I_3, \quad I_2 I_3 - I_3 I_2 = I_1, \quad I_3 I_1 - I_1 I_3 = I_2,$$

Таблица 6.1. Примеры матричных групп Ли.

G	Группа Ли	Алгебра Ли	dim G
$GL(n, \mathbb{C})$	Невырожденные матрицы	Все матрицы	$2n^2$
$SL(n, \mathbb{C})$	Унимодулярные матрицы	Бесследовые матрицы	$2n^2 - 2$
$U(n, \mathbb{C})$	Унитарные матрицы	Антиэрмитовы матрицы	n^2
$SU(n, \mathbb{C})$	Унитарные унимодулярные матрицы	Антиэрмитовы бесследовые матрицы	$n^2 - 1$
$O(n, \mathbb{R})$	Ортогональные матрицы	Антисимметричные матрицы	$\frac{n(n-1)}{2}$
$SO(n, \mathbb{R})$	Ортогональные унимодулярные матрицы	Антисимметричные матрицы	$\frac{n(n-1)}{2}$

а значит найдены и структурные константы алгебры Ли:

$$[I_i, I_j] = \epsilon_{ijk} I_k.$$

Кстати, мы доказали, что алгебры вращений и трехмерного пространства с векторным произведением изоморфны:

$$ASO(3) \approx \mathbb{R}_\times^3.$$

Пример 6.3. Группа $U(n, \mathbb{C})$ — это унитарные комплексные матрицы $U^{-1} = U^\dagger$. Алгебра $AU(n, \mathbb{C})$ состоит из антиэрмитовых матриц $X^\dagger = -X$. Покажем это, вычислив экспоненту

$$(\exp Xt)^\dagger = \exp X^\dagger t = \exp(-Xt) = (\exp Xt)^{-1}.$$

На диагонали антиэрмитовой матрицы стоят чисто мнимые числа, а над диагональю — комплексные, значит размерность алгебры равна $n + 2n(n-1)/2 = n^2$. Группа связная, поэтому восстанавливается по алгебре. Если мы захотим перейти к группе унимодулярных матриц $SU(n, \mathbb{C})$, то размерность уменьшится на единицу. Канонический вид унитарной матрицы

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\phi_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{i\phi_n} \end{pmatrix},$$

где фазы ϕ_i — действительны. Поэтому для равенства единице определителя придется добавить одно условие

$$\sum_i \phi_i = 2\pi N, \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

Алгебра $ASU(n, \mathbb{C})$ состоит из антиэрмитовых бесследовых матриц, как следует из формулы

$$\det \exp A = \exp \operatorname{tr} A. \quad (6.6)$$

Поэтому размерность алгебры также $n^2 - 1$.

Для диагональной матрицы A формула очевидно выполняется. Если матрица A приводится к диагональному виду Λ , то есть $A = T\Lambda T^{-1}$, то в каждом слагаемом ряда Тейлора внутренние T и T^{-1} сокращаются, а внешние выносятся

$$\begin{aligned} \det \exp T\Lambda T^{-1} &= \det \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n T\Lambda T^{-1} = \det \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} T\Lambda^n T^{-1} \\ &= \det [T (\exp \Lambda) T^{-1}] = \det \exp \Lambda = \exp \operatorname{tr} \Lambda. \end{aligned}$$

В общем случае, когда матрица A сводится к прямой сумме жордановых клеток, доказательство формулы (6.6) приведено в сборнике задач [1].

Пример 6.4. Группа $SU(2)$, $\dim SU(2) = 3$, параметризуется двумя комплексными числами a, b с одним дополнительным условием

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Перейдем к действительным параметрам $a = x_4 + ix_3$, $b = x_2 + ix_1$, тогда

$$U = \begin{pmatrix} x_4 + ix_3 & x_2 + ix_1 \\ -x_2 + ix_1 & x_4 - ix_3 \end{pmatrix}.$$

Найдем генераторы, дифференцируя по трем независимым координатам x_1, x_2, x_3

$$\begin{aligned} L_1 &= \left. \frac{\partial U}{\partial x_1} \right|_{x_1=x_2=x_3=0} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_1, \\ L_2 &= \left. \frac{\partial U}{\partial x_2} \right|_{x_1=x_2=x_3=0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_2, \\ L_3 &= \left. \frac{\partial U}{\partial x_3} \right|_{x_1=x_2=x_3=0} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\sigma_3. \end{aligned}$$

Мы выразили генераторы через матрицы Паули (6.4) $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$. Теперь можно, пользуясь из свойством, найти коммутатор

$$[L_i, L_j] = -[\sigma_i, \sigma_j] = -2ie_{ijk}\sigma_k = -2e_{ijk}L_k.$$

Отсюда видны два следствия. Во-первых, можно разделить все генераторы \tilde{L}_i на число -2 :

$$I_i = -\frac{L_i}{2} = -\frac{i}{2}\sigma_i \quad (6.7)$$

и убедиться, что получатся в точности те же соотношения, что и в примере 6.2 с алгеброй $ASO(3)$: $[I_i, I_j] = e_{ijk}I_k$. Таким образом, мы доказали изоморфизм алгебр

$$ASU(2) \approx ASO(3). \quad (6.8)$$

Во-вторых, мы можем умножить все генераторы I_i на $-i$, переходя к новым генераторам

$$J_i = -iI_i = -iL_i/2.$$

Тогда для новых генераторов получатся соотношения

$$[J_i, J_k] = ie_{ijk}J_k,$$

известные из квантовой механики как *алгебра угловых моментов*.

6.2. Гомоморфизм $SU(2) \rightarrow SO(3)$

После того, как мы доказали изоморфизм (6.8) алгебр Ли, можно было бы осторожно предположить, что совпадают и группы Ли, указанные в заголовке. Мы построим гомоморфизм унитарной группы в ортогональную и убедимся, что группы не совпадают.

Сначала рассмотрим эрмитову матрицу вида

$$H = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}.$$

Эта матрица получилась как скалярное произведение $H = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, где $\mathbf{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, а $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ — вектор, составленный из матриц Паули. Если теперь преобразовать матрицу H с помощью унитарной матрицы $U \in SU(2)$:

$$H' = U H U^\dagger, \quad H' = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix},$$

мы получим новую матрицу H' с параметрами x', y', z' , но определитель будет тем же самым в силу унитарности U :

$$-\det H = x^2 + y^2 + z^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2 = -\det H'.$$

Даже не выписывая явно преобразования $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$, можно понять, что оно линейное:

$$\mathbf{r}' = R\mathbf{r},$$

а матрица R должна быть ортогональной, чтобы сохранялась норма вектора \mathbf{r} . Мы ввели правило, по которому каждой унитарной матрице $U \in SU(2)$ сопоставляется ортогональная матрица $R \in SO(3)$. Если у нас имеется произведение двух унитарных матриц $U = U_1 U_2$, то

$$H' = U_1 (U_2 H U_2^\dagger) U_1^\dagger,$$

следовательно ортогональное преобразование тоже дается произведением матриц

$$U_1 \rightarrow R_1, U_2 \rightarrow R_2, U \rightarrow R = R_1 R_2.$$

Таким образом, искомый гомоморфизм построен.

Является ли он изоморфизмом? Ответ — нет, потому что в правило входит пара матриц U и U^\dagger . Если сменить знак $U \rightarrow -U$, то у сопряженной матрицы тоже сменится знак $U^\dagger \rightarrow -U^\dagger$, а матрица H' не изменится. Значит двум различным унитарным матрицам $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ отвечает одна ортогональная

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и отображение не получилось взаимно-однозначным.

С алгебраической точки зрения можно написать

$$SO(3) \approx SU(2)/C_2,$$

т.е. ортогональная группа изоморфна фактор-группе унитарной группы по дискретной нормальной подгруппе, состоящей из двух элементов (единичной и минус единичной матрицы 2×2).

С геометрической точки зрения $SU(2)$ это единичная сфера S^3 в пространстве \mathbb{R}^4 , задаваемая уравнением $x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$, рис. 6.1. Чтобы явно построить дифференцируемое отображение многообразия $SU(2)$ на $SO(3)$ ограничимся частным случаем однопараметрической подгруппы. В примере 6.2 мы построили генераторы группы $SO(3)$,

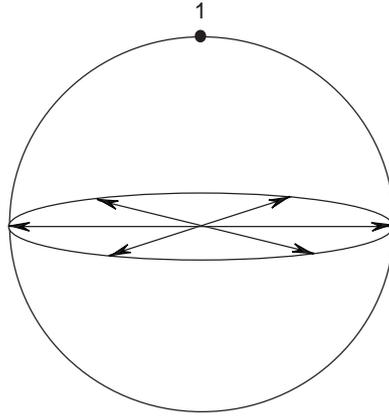


Рис. 6.1. Многообразия групп $SU(2)$ и $SO(3)$: сфера S^3 и проективная сфера $\mathbb{R}P^3$, «северное полушарие» с отождествленными (как условно показано стрелками) диаметрально противоположными точками «экватора».

выберем генератор I_2 . Из примера 6.4 возьмем соответствующий генератор $SU(2)$, который согласно (6.7) равен $-i\sigma_2/2$:

$$I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{ASO}(3), \quad i\sigma_2/2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{ASU}(2).$$

Восстановим по генераторам элементы соответствующих групп:

$$O(\theta) = \exp I_2\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \in \mathbf{SO}(3), \quad (6.9)$$

$$U(\theta) = \exp \left(\frac{I_2}{2}\theta \right) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \in \mathbf{SU}(2). \quad (6.10)$$

Естественно задать отображение правилом $U(\theta) \rightarrow O(\theta)$

Однопараметрическая подгруппа отвечает «меридиану», показанному на рис. 6.1: $\theta = 0$ соответствует единичной матрице E_2 («северному полюсу» рисунка). Сам отсунок следует рассматривать как сечение единичной сферы S^3 в четырехмерном пространстве. Увеличивая θ , мы непрерывно пройдем по «меридиану» через «экватор» $\theta = \pi$ «южному полюсу» $\theta = 2\pi$, $U = -E_2$. Матрица вернется к исходному значению $U = E_2$ только при $\theta = 4\pi$. В группе $\mathbf{SO}(3)$ «северное» и «южное» полушария соответствуют одному и тому же вращению (6.9). Вся сфера отображается на верхнюю полусферу, причем противоположные точки «экватора» считаются тождественными. На рис. 6.1 отождествление противоположных точек условно показано стрелками. Каждый образ $O(\theta)$ в $\mathbf{SO}(3)$ имеет два прообраза $U(\theta)$ и $U(\theta + 2\pi)$ в $\mathbf{SU}(2)$, как видно из (6.9), (6.10). В общем случае, когда у каждой точки образа имеются дискретные прообразы, отображение называют *накрытием*.

Пример 6.5. В одномерном случае примером накрытия является отображение $\mathbb{R} \rightarrow S^1$. Числовую ось можно представить себе как нить, которая наматывается на окружность. Каждой точке окружности отвечает бесконечное число прообразов, поэтому данное отображение — бесконечнолистное накрытие. Двумерным примером бесконечнолистного накрытия служит отображение плоскости \mathbb{R}^2 на тор T^2 . Плоскость делится на одинаковые прямоугольные клетки, противоположные стороны каждого прямоугольника

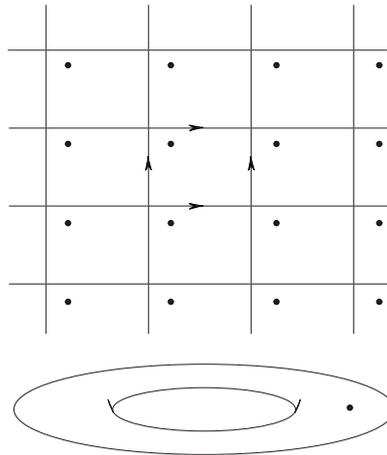


Рис. 6.2. Отображение $\mathbb{R}^2 \rightarrow T^2$: черными кружками показаны прообразы одной точки тора, а стрелками ориентация противоположащих сторон каждого прямоугольника при их склеивании.

склеиваются. Каждой точке тора соответствуют счетное множество дискретных прообразов на плоскости, показанных на рис. 6.2. Пример двулистного накрытия известен из теории функций комплексной переменной. Риманова поверхность функции $w = \sqrt{z}$ представляет собой два экземпляра комплексной плоскости \mathbb{C} , разрезанных, например, вдоль отрицательной действительной полуоси. Верхний берег разреза каждого экземпляра склеивается с нижним берегом разреза другого экземпляра. Если полученную поверхность гладко отобразить на комплексную плоскость, получится двулистное накрытие. Каждый лист соответствует своей ветви квадратного корня $\sqrt{1} = \pm 1$

Таким образом, хотя алгебры Ли групп $SU(2)$ и $SO(3)$ изоморфны, сами группы неизоморфны. Окрестности единицы в этих группах устроены одинаково, а глобальная топология у них разная. По экспоненциальной формуле восстанавливается односвязная группа $SU(2)$, в соответствии с теоремой 5.1. Для группы $SO(3)$, которую тоже можно восстановить по алгебре Ли, группа $SU(2)$ является накрывающим множеством.

Лекция 7

Представления группы вращений

7.1. Неприводимые представления $ASO(3)$

В данной лекции мы построим неприводимые представления алгебры $ASO(3)$, которая изоморфна алгебре угловых моментов

$$[J_i, J_j] = ie_{ijk}J_k. \quad (7.1)$$

Такой выбор генераторов удобнее, чем первоначальные операторы I_i , потому что все $J_i = -iI_i$ получились эрмитовыми. Мы уже знаем одно точное трехмерное неприводимое представление матрицами (6.5), но нам надо проверить, есть ли неприводимые матричные представления других размерностей. Поэтому мы уже не предполагаем, что J_i — матрицы 3×3 , а ищем представления алгебры произвольной размерности. По представлению алгебры Ли можно будет потом по экспоненциальной формуле восстановить представление группы.

Оператор Казимира

Определение 7.1. *Оператором Казимира* называется квадратичная комбинация генераторов, которая коммутирует со всеми генераторами.

Оператор Казимира классифицирует неприводимые представления. Набор его собственных векторов, принадлежащих одному собственному значению, образует базис неприводимого представления. Это следует из леммы Шура.

Пользуясь формулами (7.1) и тождеством $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$, вычислим два коммутатора

$$\begin{aligned} [J_1, J_2^2] &= J_2[J_1, J_2] + [J_1, J_2]J_2 = iJ_2J_3 + iJ_3J_2, \\ [J_1, J_3^2] &= J_3[J_1, J_3] + [J_1, J_3]J_3 = -iJ_2J_3 - iJ_3J_2 \end{aligned}$$

и сразу убедимся, что $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ как раз и является оператором Казимира:

$$[J^2, J_1] = 0.$$

Точно так же можно показать, что с J^2 коммутируют и остальные генераторы.

Повышающий и понижающий операторы

Построим операторы $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$ и найдем их коммутаторы с оператором J_3 :

$$[J_3, J_+] = [J_3, J_1] + i[J_3, J_2] = iJ_2 + J_1 = J_+, \quad (7.2)$$

$$[J_3, J_-] = [J_3, J_1] - i[J_3, J_2] = iJ_2 - J_1 = -J_-. \quad (7.3)$$

Оператор J^2 коммутирует с J_3 , поэтому можно выбрать базис из общих собственных векторов. Обозначим собственные векторы $|\lambda m\rangle$:

$$J^2|\lambda m\rangle = \lambda|\lambda m\rangle, \quad J_3|\lambda m\rangle = m|\lambda m\rangle.$$

Тогда из (7.2)

$$J_3 J_+ |\lambda m\rangle = (J_+ J_3 + J_+) |\lambda m\rangle = (m+1) J_+ |\lambda m\rangle,$$

значит $J_+ |\lambda m\rangle$ — собственный вектор оператора J_3 с собственным значением $(m+1)$. Такой вектор с точностью до постоянного множителя (обозначим его b_m) равен $|\lambda, m+1\rangle$:

$$J_+ |\lambda m\rangle = b_m |\lambda, m+1\rangle. \quad (7.4)$$

Оператор с таким свойством называется *повышающим*. Можно выбрать в качестве определения повышающего оператора его коммутатор (7.2) с J_3 . Оператор J_- с коммутатором, удовлетворяющим правилу (7.3) назовем *понижающим*. Понижающий оператор на единицу уменьшает m :

$$J_- |\lambda m\rangle = a_m |\lambda, m-1\rangle, \quad (7.5)$$

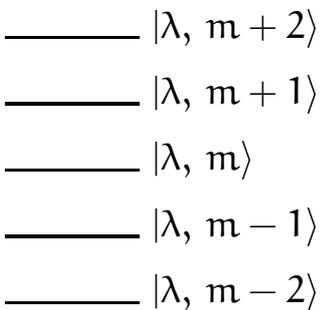
где a_m коэффициент. Сравнивая (7.4) с (7.5) и пользуясь тем, что повышающий и понижающий операторы в нашем случае получают друг из друга эрмитовым сопряжением

$$J_+ = J_-^\dagger,$$

можно вывести связь между коэффициентами

$$a_m = b_{m-1}^*. \quad (7.6)$$

Лестница состояний



Теперь подействуем на вектор $|\lambda m\rangle$ несколько раз повышающим оператором. Согласно (7.4) его номер m будет каждый раз увеличиваться на единицу. Если же действовать понижающим оператором, номер будет уменьшаться. Главный вопрос, будет ли этот процесс продолжаться до бесконечности в ту и другую сторону или оборвется. Если процесс оборвется и с той, и с другой стороны, неприводимое представление получится конечномерным. Оказывается, всегда можно построить унитарное конечномерное представление если группа компактна. Мы сформулируем это утверждение в виде теоремы 7.2. В нашем случае все координаты на группе — углы и изменяются от нуля до π или 2π , но не до бесконечности, так что группа компактна.

Чтобы построить конечномерные представления, сначала вычислим комбинации операторов

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] = J^2 - J_3^2 - J_3, \\ J_+ J_- &= (J_1 + iJ_2)(J_1 - iJ_2) = J_1^2 + J_2^2 - i[J_1, J_2] = J^2 - J_3^2 + J_3. \end{aligned}$$

Отсюда получим, что

$$J_- J_+ |\lambda m\rangle = (\lambda - m^2 - m) |\lambda m\rangle, \quad (7.7)$$

$$J_+ J_- |\lambda m\rangle = (\lambda - m^2 + m) |\lambda m\rangle. \quad (7.8)$$

В нашем случае J^2 — эрмитовский неотрицательно определенный оператор, значит λ — вещественное положительное число. Но и комбинации $J_+ J_-$, $J_- J_+$ тоже эрмитовы и неотрицательно определены, потому что

$$(J_+ J_-)^\dagger = J_-^\dagger J_+^\dagger = J_- J_+, \quad \langle \lambda m | J_+ J_- | \lambda m \rangle = a_m^* a_m = |a_m|^2. \quad (7.9)$$

Поэтому числа $\lambda - m^2 \pm m$ не могут стать отрицательными.

Отсюда следует, что есть крайние векторы, один из которых $|\lambda m_{\max}\rangle$ обращается в нуль повышающим оператором, а другой $|\lambda m_{\min}\rangle$ — понижающим:

$$J_+ |\lambda m_{\max}\rangle = J_- |\lambda m_{\min}\rangle = 0.$$

Из (7.7), (7.8) видно, что такое может случиться, когда

$$\lambda - m_{\max}^2 - m_{\max} = \lambda - m_{\min}^2 + m_{\min} = 0.$$

Обозначим $m_{\max} \equiv j$, тогда $\lambda = j(j+1)$, а для m_{\min} получилось квадратное уравнение. Выберем тот из корней, который не превосходит m_{\max} , откуда $m_{\min} = -j$. Итого имеется $2j+1$ векторов:

$$\dim D^{(j)}(g) = 2j+1.$$

Число ступенек лестницы состояний $2j+1$ должно быть целым, поэтому j может быть только целым или полуцелым.

Чтобы разобраться с вопросом, все ли значения j допустимы, мы восстановим с помощью экспоненциальной формулы элемент группы, вращение вокруг оси 3 на угол θ :

$$e^{iJ_3\theta} = e^{im\theta}.$$

Если m принимает только целые значения, все в порядке, получилась 2π -периодическая функция угла θ . Если же m полуцелое, период функции станет вдвое больше, $e^{2\pi im} = -1$. Отсюда следует, что набор матриц четного порядка, отвечающих полуцелым j , не является представлением группы $SO(3)$. Другая формулировка того же факта дается теоремой

Теорема 7.1. *Неприводимые унитарные представления группы $SO(3)$ всегда имеют нечетную размерность.*

Что касается полуцелых j , они дают неприводимые представления унитарной группы $SU(2)$. В квантовой механике эти представления описывают частицу с полуцелым спином. В предыдущей лекции было построено гладкое отображение $SU(2) \rightarrow SO(3)$, которое оказалось двулистным накрытием. Поэтому в унитарной группе функции угла могут быть и 4π -периодическими. Целым j отвечают представления той и другой групп.

Замечание 7.1. Иногда в литературе представления с полуцелым j называют *двузначными* представлениями группы $SO(3)$. Мы не пользуемся таким термином потому, что согласно нашему исходному определению, представление — это гомоморфизм. Значит каждому элементу группы отвечает одна матрица.

Вычисление матричных элементов

Для краткости вместо $\lambda = j(j+1)$ будем писать в векторах j . Матричные элементы понижающего и повышающего операторов

$$a_m = \langle j \ m - 1 | J_- | j \ m \rangle, \quad b_m = \langle j \ m + 1 | J_+ | j \ m \rangle$$

вычисляются с помощью соотношения (7.6) и формул (7.9), (7.7), (7.8): $|a_m|^2 = j(j+1) - m^2 + m$, $|b_m|^2 = j(j+1) - m^2 - m$. Тогда с точностью до фазы

$$a_m = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}, \quad b_m = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}.$$

Можно преобразовать формулы для матричных элементов, разложив подкоренные выражения на множители

$$a_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \quad b_m = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}.$$

Именно в таком виде эти формулы приведены в справочниках.

7.2. Базис неприводимого представления

Для нахождения базиса построим представление группы вращений на гладких функциях координат. Рассмотрим множество гладких функций $f(x, y, z)$, определенных в \mathbb{R}^3 . Действие элемента группы на функциях мы определили формулой (3.5):

$$gf(\mathbf{r}) = f(g^{-1}\mathbf{r}).$$

Тогда

$$\begin{aligned} g(\alpha_1, 0, 0)f(x, y, z) &= f(x, y \cos \alpha_1 + z \sin \alpha_1, -y \sin \alpha_1 + z \cos \alpha_1); \\ I_1 f(x, y, z) &= \left. \frac{\partial}{\partial \alpha_1} g(\alpha_1, 0, 0)f(x, y, z) \right|_{\alpha_1=0} = \\ &= \left[(-y \sin \alpha_1 + z \cos \alpha_1) \frac{\partial f}{\partial y} + (-y \cos \alpha_1 - z \sin \alpha_1) \frac{\partial f}{\partial z} \right]_{\alpha_1=0} = \left(-y \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x, y, z). \end{aligned}$$

Отсюда, циклически переставляя индексы, найдем все генераторы

$$I_1 = -y \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial y}, \quad I_2 = -x \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial x}, \quad I_3 = -x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x}.$$

Мы видим, что получились компоненты векторного произведения радиус-вектора и вектора градиента

$$\mathbf{I} = -[\mathbf{r} \times \nabla].$$

Реализация генераторов в виде дифференциальных операторов удобна, если мы хотим найти базис неприводимого представления. Задача сведется к поиску собственных функций дифференциального оператора второго порядка — оператора Казимира I^2 (вывод см. в Дополнении 2 конце лекции):

$$I^2 = [\mathbf{r} \times \nabla]^2 = r^2 \Delta - (\mathbf{r} \nabla)^2 = r^2 \Delta_\Omega. \quad (7.10)$$

Получился угловой оператор Лапласа, который только знаком отличается от оператора квадрата углового момента. Его собственные функции (одновременно являющиеся

собственными функциями оператора I_3) хорошо известны — это сферические гармоники $|l m\rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

$$\Delta_{\Omega} Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad I_3 Y_{lm}(\theta, \varphi) = -imY_{lm}(\theta, \varphi).$$

Таким образом, мы нашли базис неприводимого представления алгебры $ASO(3)$. Базис представления группы будет тем же самым, потому что собственные функции экспоненты оператора совпадают с собственными функциями самого оператора. Базис состоит из сферических гармоник с фиксированным l и различными $m = -l, -l+1, \dots, +l$.

7.3. Примеры неприводимых представлений

Представления групп $SO(3)$ и $SU(2)$ восстанавливаются с помощью экспоненциальной формулы. Представление самой низкой размерности, которое у нас получилось, это неприводимое представление с $j = 0$. Это представление естественно не является точным. Величины, которые не преобразуются при поворотах называются скалярами, а представление *скалярным* представлением. Истинный скаляр $V(\mathbf{r})$ не меняется не только при поворотах, но и при отражениях: $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$. Если же знак меняется, то величина — псевдоскалярная.

Представление с $j = 1/2$ называется *спинорным* представлением группы $SU(2)$. Матрицу представления обычно параметризуют тремя углами

$$U(\psi, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} & e^{i\psi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-i\psi} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Представление группы $SO(3)$ с $j = 1$ точное, оно называется *векторным*. В общем случае точное неприводимое представление наименьшей размерности называется *фундаментальным*. Спинорное представление (7.11) это фундаментальное представление группы $SU(2)$, а векторное (5.1) — фундаментальное представление группы $SO(3)$. Векторы \mathbf{p} в трехмерном евклидовом пространстве преобразуются при вращении с помощью операторов J_{\pm} , если от декартовых перейти к круговым компонентам вектора

$$p_{\pm} = p_x \pm ip_y, \quad p_0 = p_z.$$

Круговые компоненты преобразуются при вращении как функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, $m = -1, 0, 1$. Истинный (полярный) вектор меняет знак при инверсии, которая, напомним, входит в полную группу ортогональных преобразований $O(3)$, но не входит в специальную $SO(3)$. Если знак не меняется: $\mathbf{p}(-\mathbf{r}) = \mathbf{p}(\mathbf{r})$, величина \mathbf{p} — псевдовектор.

Неприводимые представления с целым $j = l \geq 2$ называются *тензорными* ранга l , а величины, которые по ним преобразуются называют тензорами. Примеры из физики — два тензора: квадрупольный момент и тензор инерции

$$Q_{ij} = \int \left(\frac{1}{3} r^2 \delta_{ij} - x_i x_j \right) \rho(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r}; \quad I_{ij} = \int (r^2 \delta_{ij} - x_i x_j) \rho(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r},$$

где ρ в первом тензоре — плотность заряда, а во втором — вещества. Квадрупольный момент — бесследовый тензор, поэтому преобразуется как

$$Y_{2m}(\theta, \varphi), \quad m = -2, -1, 0, 1, 2.$$

Тензор инерции имеет ненулевой след, поэтому у него 6 компонент, а не 5. Говорят, что это *приводимый* тензор. Если выделить след I_{ii} , то он преобразуется по скалярному

представлению $l = 0$, а оставшаяся бесследовая часть — по тензорному представлению $l = 2$.

В заключении сформулируем общее утверждение про конечномерные представления.

Теорема 7.2. *Каждое неприводимое унитарное представление компактной группы Ли конечномерно.*

Дополнение 1. Матрицы конечных поворотов

Приведем для справок *матрицы конечных поворотов*, которые иногда называют D-матрицами Вигнера. Конечный поворот \hat{R} можно параметризовать углами Эйлера α, β, γ : 1) поворот на угол α вокруг оси z , 2) поворот на угол β вокруг оси y (линии узлов), 3) поворот на угол γ вокруг оси z' (нового положения оси z). Углы Эйлера можно определять по разному: во втором повороте вместо оси y иногда вращают вокруг оси x . Мы здесь следуем обозначениям [2, §58]. Матрица конечных поворотов (матрица Вигнера) $2j + 1$ -мерного представления определяется как

$$D_{m' m}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m' | \exp(i\hat{J}_3\gamma) \exp(i\hat{J}_2\beta) \exp(i\hat{J}_3\alpha) | j, m \rangle.$$

Элементы такой матрицы суть коэффициенты разложения сферических гармоник преобразованного базиса по исходному базису, так для целых $j = l$

$$Y_{lm}(\hat{R}\mathbf{n}) = \sum_{m'=-l}^l D_{m' m}^l(\hat{R}) Y_{lm'}(\mathbf{n}).$$

Зависимость от углов α, γ очень простая

$$D_{m' m}^j(\alpha, \beta, \gamma) = e^{im'\gamma + im\alpha} d_{m' m}^j(\beta),$$

а матрица d зависит только от угла β и называется приведенной. Приведенная матрица находится явно

$$d_{m' m}^j(\beta) = 2^{-m'} \sqrt{\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}} (1+\mu)^{\frac{m'+m}{2}} (1-\mu)^{\frac{m'-m}{2}} P_{j-m'}^{(m'-m, m'+m)}(\mu),$$

где $\mu = \cos \beta$, а $P_n^{(a,b)}$ — полиномы Якоби, которые даются формулой

$$P_n^{(a,b)}(\mu) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-\mu)^{-a} (1+\mu)^{-b} \frac{d^n}{d\mu^n} (1-\mu)^{a+n} (1+\mu)^{b+n}.$$

Выпишем приведенные матрицы для $j = 1/2, 1, 3/2$

	$m = \frac{1}{2}$	$m = -\frac{1}{2}$
$m' = \frac{1}{2}$	$\cos \frac{\beta}{2}$	$\sin \frac{\beta}{2}$
$m' = -\frac{1}{2}$	$-\sin \frac{\beta}{2}$	$\cos \frac{\beta}{2}$

	$m = 1$	$m = 0$	$m = -1$
$m' = 1$	$\frac{1+\cos \beta}{2}$	$\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\frac{1-\cos \beta}{2}$
$m' = 0$	$-\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\cos \beta$	$\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$
$m' = -1$	$\frac{1-\cos \beta}{2}$	$-\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\frac{1+\cos \beta}{2}$

	$m = \frac{3}{2}$	$m = \frac{1}{2}$	$m = -\frac{1}{2}$	$m = -\frac{3}{2}$
$m' = \frac{3}{2}$	$\cos^3 \frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3} \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3} \cos \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}$	$\sin^3 \frac{\beta}{2}$
$m' = \frac{1}{2}$	$-\sqrt{3} \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2}$	$\frac{\cos \frac{\beta}{2} (-1+3 \cos \beta)}{2}$	$\frac{(1+3 \cos \beta) \sin \frac{\beta}{2}}{2}$	$\sqrt{3} \cos \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}$
$m' = -\frac{1}{2}$	$\sqrt{3} \cos \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}$	$\frac{-(1+3 \cos \beta) \sin \frac{\beta}{2}}{2}$	$\frac{\cos \frac{\beta}{2} (-1+3 \cos \beta)}{2}$	$\sqrt{3} \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2}$
$m' = -\frac{3}{2}$	$-\sin^3 \frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3} \cos \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}$	$-\sqrt{3} \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2}$	$\cos^3 \frac{\beta}{2}$

Вывод выражения для матрицы поворотов с помощью повышающих и понижающих дифференциальных операторов приведен у Любарского [5]. Другой вывод, основанный на теории гармонических однородных полиномов, описан в книге Годунова и Михайловой [27].

Дополнение 2. Вывод формулы (7.10)

Сначала выведем тождество, связывающее инвариантные тензоры второго и третьего ранга

$$e_{ijk}e_{ilm} = C (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}). \quad (7.12)$$

Должен получиться инвариантный тензор 4 ранга, а других комбинаций, кроме указанных нет. Знак между парами дельта-символов должен быть минусом, потому что тензор в левой части меняет знак при любой из перестановок индексов $j \leftrightarrow k, l \leftrightarrow m$. Остается еще общий множитель C , который найдем сворачивая правую и левую часть по парам индексов $j = l, k = m$:

$$e_{ijk}e_{ijk} = C (\delta_{jj}\delta_{kk} - \delta_{jk}\delta_{kj}) = 6C.$$

С другой стороны, у тензора e_{ijk} всего 6 отличных от нуля компонент, три из них равны $e_{ijk} = e_{kij} = e_{jki} = 1$, а три $e_{ikj} = e_{jik} = e_{kji} = -1$. Значит свертка в левой части равна 6, а коэффициент в формуле (7.12) равен $C = 1$.

Теперь с помощью (7.12) вычислим квадрат векторного произведения в формуле (7.10)

$$\begin{aligned} [\mathbf{r} \times \nabla] \cdot [\mathbf{r} \times \nabla] &= e_{ijk}x_j \frac{\partial}{\partial x_k} e_{ilm}x_l \frac{\partial}{\partial x_m} = x_j \frac{\partial}{\partial x_k} - x_j \left(\frac{\partial}{\partial x_k} x_k \right) \frac{\partial}{\partial x_j} = \\ &= x_i x_j \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + x_j \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_k} - 3x_j \frac{\partial}{\partial x_j} = (r^2 \delta_{ij} - x_i x_j) \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} - 2\mathbf{r} \nabla. \end{aligned}$$

Отметим, что в круглой скобке сформировался поперечный проектор. С другой стороны,

$$r^2 \Delta_r = \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r}.$$

Члены с первой производной вошли с разными знаками и взаимно уничтожились, остается только поперечная часть, что и доказывает формулу (7.10).

Лекция 8

Тензорное представление

8.1. 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

$$D(g)|u_k\rangle = \sum_{l=1}^N |u_l\rangle \langle u_l|D(g)|u_k\rangle = \sum_{l=1}^N D_{lk}(g)|u_l\rangle, \quad (8.1)$$

$$D'(g)|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{N'} |v_j\rangle \langle v_j|D'(g)|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{N'} D'_{ji}(g)|v_j\rangle. \quad (8.2)$$

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

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

Формулы (8.1), (8.2) показывают, чему равны элементы матриц представлений D, D' . Действительно, чтобы понять, как действует линейный оператор, надо выписать его матрицу. Элементы этой матрицы всегда можно найти, если подействовать этим оператором на базисные векторы.

Прямое произведение $D_{ik} \otimes D'_{jl}$ удобно записать в виде одной квадратной матрицы. Конкретная запись такой матрицы зависит от того, как мы условимся располагать базисные векторы прямого произведения двух векторных пространств (всевозможные пары базисных векторов этих пространств) в виде одного столбца. Определим *прямое произведение матриц*.

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

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1N}B \\ \vdots & & \vdots \\ a_{N1}B & \dots & a_{NN}B \end{pmatrix}. \quad (8.3)$$

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

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

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

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

Заметим, что именно такая форма записи матриц возникла, потому что мы условились писать координаты атомов в следующем порядке

$$(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3).$$

Если бы мы договорились писать координаты в другом порядке, например,

$$(x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, y_3, z_1, z_2, z_3),$$

получились бы другие (эквивалентные) матрицы.

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

- 1) $(\lambda A + B) \otimes C = \lambda(A \otimes C) + B \otimes C$ 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) $(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) = A_1 A_2 \otimes B_1 B_2$
(A_1 того же порядка, что и A_2 , B_1 того же порядка, что и B_2);
- 5) $\text{tr}(A \otimes B) = \text{tr} A \cdot \text{tr} B$.

Все свойства следуют напрямую из определения (8.3) и правила умножения матриц. Доказательства этих и других свойств можно найти в учебниках линейной алгебры, например, [28].

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

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

8.2. Разложение Клебша — Гордана

Прямое произведение неприводимых представлений, вообще говоря, приводимо. Его можно разложить в прямую сумму неприводимых. Каждый из сомножителей прямого произведения можно разложить в прямую сумму неприводимых, а затем воспользоваться свойством дистрибутивности \otimes . Значит задача сводится к разложению прямого произведения неприводимых представлений в прямую сумму неприводимых представлений.

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

$$D^{(\alpha)}(g) \otimes D^{(\beta)}(g) = \bigoplus_{\gamma} k_{\gamma} D^{(\gamma)}(g), \quad (8.4)$$

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 $SO(3)$. 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:

$$\chi^{(l)}(\alpha) = \sum_{m=-l}^l e^{im\alpha} = \frac{\sin\left((l + \frac{1}{2})\alpha\right)}{\sin\frac{1}{2}\alpha}. \quad (8.5)$$

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

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

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

Действительно, переписав произведение синусов через разность косинусов

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

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 $SO(3)$

$$D^{(l_1)} \otimes D^{(l_2)} = \bigoplus_{j=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} D^{(j)}, \quad (8.6)$$

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

$$k_l = \langle [X^{(l)}]^* \chi^{(l_1)} \chi^{(l_2)} \rangle_G = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{m=-l}^l e^{im\alpha} (\cos(l_1 - l_2)\alpha - \cos(l_1 + l_2 + 1)\alpha) d\alpha.$$

Запишем косинусы как суммы экспонент

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

и воспользуемся соотношением ортогональности

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{mm'}.$$

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 $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$. При этом второй косинус не вносит вклада, а первый вносит при $m = \pm(l_1 - l_2)$. Получится $k_l = 1$, так что формула (8.6) доказана. В прямую сумму входят только представления с $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, причем входят по одному разу. Мы доказали правило сложения только для целых моментов. Аналогичное правило существует и для полуцелых. Формула (8.6) справедлива и при полуцелых l , но мера интегрирования в группе $SU(2)$ 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 [19]. Неприводимые представления многих групп Ли можно найти в справочнике [20] вместе с мерами, а доказательства соответствующих теорем имеются в книгах [21, 22].

8.3. Тензоры

Общее разложение Клебша—Гордана определено для произведения представлений любых, в том числе различных, размерностей. Представляет особый интерес частный случай одинаковых размерностей. Если имеется несколько сомножителей прямого произведения одной размерности, получается *тензорное представление*. Базисом такого представления служат тензоры. Начнем с общего определения тензора относительно группы $G < GL(n, \mathbb{C})$ над полем \mathbb{C} . В случае евклидова пространства \mathbb{R} определение тензора упрощается, поскольку не надо делать различия между ковариантными и контравариантными компонентами.

Три определения тензора

Рассмотрим пространство \mathbb{C}^n , элементы которого $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{C}^n$ являются векторами. Рассмотрим также сопряженное (или дуальное) пространство $\tilde{\mathbb{C}}^n$, элементы

которого $\tilde{y} = (\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_n) \in \tilde{\mathbb{C}}^n$ назовем *ковекторами*. Иногда ковекторы называют 1-формами или функционалами. Их главное свойство — принимать на векторе значение из поля, в нашем случае комплексное число

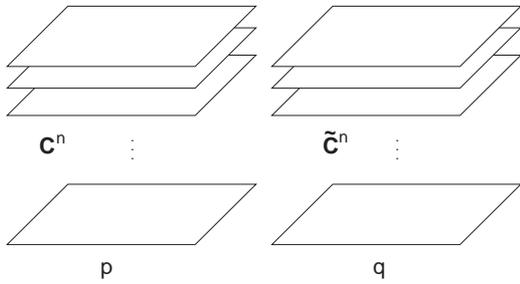
$$\tilde{y}(\mathbf{x}) = \langle \tilde{y} | \mathbf{x} \rangle = \tilde{y}_1^* x_1 + \dots + \tilde{y}_n^* x_n. \quad (8.7)$$

Можно представлять себе векторы в виде векторов-столбцов, а ковекторы в виде векторов-строк. Тогда значение ковектора на векторе — это матричное произведение строки на столбец. Как видно из формулы (8.7) получилась выражение, линейное как по первому, так и по второму аргументу

$$\begin{aligned} \langle \tilde{y}_1 + \tilde{y}_2 | \mathbf{x} \rangle &= \langle \tilde{y}_1 | \mathbf{x} \rangle + \langle \tilde{y}_2 | \mathbf{x} \rangle, & \langle \lambda \tilde{y} | \mathbf{x} \rangle &= \lambda \langle \tilde{y} | \mathbf{x} \rangle; \\ \langle \tilde{y} | \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 \rangle &= \langle \tilde{y} | \mathbf{x}_1 \rangle + \langle \tilde{y} | \mathbf{x}_2 \rangle, & \langle \tilde{y} | \lambda \mathbf{x} \rangle &= \lambda^* \langle \tilde{y} | \mathbf{x} \rangle. \end{aligned}$$

Поэтому оно называется билинейной формой. Индексы мы пишем снизу, потому что место справа снизу занято номером компоненты вектора.

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



$$\mathbb{C}(p, q) = \left(\mathbb{C}_1^n \otimes \dots \otimes \mathbb{C}_p^n \right) \otimes \left(\tilde{\mathbb{C}}_1^n \otimes \dots \otimes \tilde{\mathbb{C}}_q^n \right)$$

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

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

$$T(p, q) = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p, \tilde{\mathbf{y}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{y}}_q) \in \mathbb{C}(p, q) \quad (8.8)$$

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}^β 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

$$\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_p}^{\beta_1 \dots \beta_q} \equiv \left(e_{\alpha_1} \otimes \dots \otimes e_{\alpha_p} \right) \otimes \left(\tilde{e}^{\beta_1} \otimes \dots \otimes \tilde{e}^{\beta_q} \right).$$

Тогда тензор можно разложить по базису

$$T(p, q) = T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p} \Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_p}^{\beta_1 \dots \beta_q}, \quad (8.9)$$

где по повторяющимся сверху и снизу индексам подразумевается суммирование $\alpha_j, \beta_j = 1, 2, \dots, n$. Числа, входящие в таблицу $T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p}$, 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

$$e_\alpha = U_\alpha^\gamma e'_\gamma, \quad \tilde{e}^\beta = V_\delta^\beta \tilde{e}'^\delta.$$

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

$$\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_p}^{\beta_1 \dots \beta_q} = U_{\alpha_1}^{\gamma_1} \dots U_{\alpha_p}^{\gamma_p} V_{\delta_1}^{\beta_1} \dots V_{\delta_q}^{\beta_q} \Psi_{\gamma_1 \dots \gamma_p}^{\delta_1 \dots \delta_q}. \quad (8.10)$$

Тогда, пользуясь (8.9), (8.10), можно записать компоненты тензора в двух базисах

$$T(p, q) = T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p} \Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_p}^{\beta_1 \dots \beta_q} = T_{\delta_1 \dots \delta_q}^{\gamma_1 \dots \gamma_p} \Psi_{\gamma_1 \dots \gamma_p}^{\delta_1 \dots \delta_q},$$

где

$$T_{\delta_1 \dots \delta_q}^{\gamma_1 \dots \gamma_p} = T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p} U_{\alpha_1}^{\gamma_1} \dots U_{\alpha_p}^{\gamma_p} V_{\delta_1}^{\beta_1} \dots V_{\delta_q}^{\beta_q}. \quad (8.11)$$

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 (8.11), 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

$$\xi = \left(\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_p, x_1, \dots, x_q \right) \in \mathbb{C}(q, p).$$

Теперь найдем значение тензора (8.8) из первого определения на векторе ξ из дополнительного пространства. Обозначим это значение

$$T(\xi) = \langle \tilde{y}_1 | x_1 \rangle \dots \langle \tilde{y}_p | x_{p+q} \rangle. \quad (8.12)$$

Получилась полилинейная форма. 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 (8.12).

Все три определения 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, что разрешается 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

$$P_i = \chi_{ij}^{(1)} E_j + \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l,$$

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 $\chi_{ij}^{(1)} E_i E_j$ на двух векторах, а $\chi^{(3)}$ принимает значение $\chi_{ijkl}^{(3)} E_i E_j E_k E_l$ 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: $\text{rank } \hat{L} = (1, 1)$.

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 $\text{SO}(3)$ 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:

$$\text{rank rot} = (1, 1).$$

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

$$\text{rank div} = (0, 1), \quad \text{rank grad} = (1, 0).$$

8.4. Построение тензорного представления

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

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

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

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

Тензорное представление, вообще говоря, приводимо. Его можно разложить по неприводимым, действуя аналогично тому, как мы это делали в общем разложении Клебша — Гордана. В подгруппах $G < \text{SO}(3)$ можно разлагать в два этапа: сначала по неприводимым представлениям группы $\text{SO}(3)$. Полученные представления становятся в точечной группе приводимыми и следующим шагом будет их разложение по неприводимым представлениям группы G .

Пример 8.5. Пусть $n = 3, p = 2, G = \mathbf{D}_3 < \text{SO}(3)$.

1°. Согласно формуле (8.6)

$$D^{(1)}(g) \otimes D^{(1)}(g) = D^{(0)}(g) \oplus D^{(1)}(g) \oplus D^{(2)}(g). \quad (8.13)$$

2°. Характер группы вращений (8.5) 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, $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

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

Упражнение 8.1. Пользуясь таблицей 3.2, найдите разложение тензора второго ранга относительно группы тетраэдра T .

Лекция 9

Правила отбора

9.1. Симметризаторы Юнга

Ограничимся тензорами над евклидовым пространством \mathbb{R}^n , в которых будем все индексы писать снизу. Полностью *симметричным* называется тензор T_{i_1, i_2, \dots, i_p} , который не меняется при перестановке любой пары индексов. Полностью *антисимметричным* называется тензор, который меняет знак при перестановке любой пары индексов. Тензор ранга 2 можно разбить на симметричную и антисимметричную части

$$T_{ij} = S_{ij} + A_{ij}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}), \quad A_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} - T_{ji}). \quad (9.1)$$

Для тензоров более высокого ранга кроме двух указанных могут быть и другие типы симметрии. Построим операторы, которые превращают тензоры в симметричные — *симметризаторы Юнга*. Для этого сначала определим действие подстановки на тензоре.

Определение 9.1. Действия подстановки $\sigma \in P_p$ на тензоре $T \in \mathbb{R}(p)$ определим как соответствующую перестановку индексов

$$\sigma T_{i_1 \dots i_p} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & p \\ j_1 & j_2 & \dots & j_p \end{pmatrix} T_{i_1 \dots i_p} = T_{i_{j_1} \dots i_{j_p}}$$

Подстановка просто переставляет индексы, а значит коммутирует с элементом группы $g \in G$, который действует в отдельном экземпляре \mathbb{R}^n .

Самые общие *симметризаторы* — это симметризатор и антисимметризатор

$$\hat{S} = \frac{1}{p!} \sum_{\sigma \in P_p} \sigma, \quad \hat{A} = \frac{1}{p!} \sum_{\sigma \in P_p} \det \sigma \sigma, \quad (9.2)$$

где $\det \sigma$ — четность подстановки, т.е. $\det \sigma = +1$, когда подстановка σ четная, и -1 , когда подстановка нечетная.

Иногда симметризация тензора помогает найти неприводимое представление. Это утверждение не строгое и зависит от размерности пространства, конкретной группы и ранга тензора. Строго можно лишь утверждать, что симметризованные тензоры образуют *инвариантное подпространство* при действии преобразований группы. Это следствие коммутативности перестановок индексов тензора и его преобразований $g \in G$. Значит представление группы после симметризации базиса всегда приводится к блочно-диагональному виду. Однако сами блоки могут оказаться как неприводимыми, так и приводимыми.

В случае полностью симметричного тензора $\hat{S}T$ полилинейная форма, о которой говорилось в третьем определении тензора, становится просто однородным полиномом степени p от n переменных

$$\mathcal{P}(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\substack{m_1, m_2, \dots, m_n \\ m_1 + m_2 + \dots + m_n = p}} C_{m_1, m_2, \dots, m_n} x_1^{m_1} x_2^{m_2} \dots x_n^{m_n}. \quad (9.3)$$

Размерность пространства однородных полиномов равна размерности пространства симметричных тензоров \mathcal{S} . Эту размерность можно подсчитать с помощью комбинаторики, так же, как мы нашли квантовую кратность вырождения (4.6). Надо узнать число способов, которым можно распределить p шаров по n ячейкам

$$\dim \mathcal{S}_p^{(n)} = C_{p+n-1}^p = \frac{(p+n-1)!}{p!(n-1)!}. \quad (9.4)$$

У антисимметричного тензора $\hat{A}T$ ненулевые компоненты только те, у которых все индексы различны, а таких возможностей всего C_n^p , $p \leq n$. Размерность пространства \mathcal{A} антисимметричных тензоров

$$\dim \mathcal{A}_p^{(n)} = C_n^p = \frac{n!}{p!(n-p)!}.$$

Заметим, что

$$\frac{n!}{p!(n-p)!} + \frac{(p+n-1)!}{p!(n-1)!} \leq n^2, \quad p \geq 2,$$

причем равенство достигается при $p = 2$. Значит при $p > 2$ симметричная и антисимметричная части не исчерпывают всех компонент тензора.

Пример 9.1. Разбить на неприводимые части тензор второго ранга в пространстве \mathbb{R}^3 . Имеется в виду «обычный» тензор, компоненты которого преобразуются при вращении. По определению его следует называть тензором относительно группы $SO(3)$.

Антисимметричная часть (9.1) сворачивается с e_{ijk} в вектор $b_i = e_{ijk} A_{jk}$, содержит 3 компоненты и преобразуется по неприводимому векторному представлению $l = 1$. Судя по разложению Клебша — Гордана (8.13), симметричная часть S_{ij} , содержащая 6 различных компонент, приводима и должна разлагаться в прямую сумму скалярного и тензорного представлений $l = 0, 2$. След тензора S_{kk} очевидно преобразуется по скалярному представлению, а бесследовая часть

$$Q_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{kk}$$

по неприводимому тензорному представлению $l = 2$.

Пример 9.2. Рассмотрим тензоры ранга $p = 3$ в пространстве \mathbb{R}^3 . Согласно (9.4), пространство симметричных тензоров имеет размерность 10. Антисимметричный тензор всего один (это e_{ijk}), а всего у общего тензора имеется 27 компонент. Какую симметрию имеют другие части T_{ijk} ?

Вспомним, что группа подстановок из 3 объектов изоморфна группе треугольника $P_3 \approx D_3$. Каждому неприводимому представлению группы P_3 отвечает отдельный

симметризатор

$$\begin{aligned}\hat{S} &= \frac{1}{6} \left(\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \right), \\ \hat{A} &= \frac{1}{6} \left(\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \right), \\ \hat{B} &= \frac{1}{3} \left(2 \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \right).\end{aligned}$$

Третий симметризатор \hat{B} получается из двумерного неприводимого представления группы треугольника и представляет собой проектор на подпространство этого неприводимого представления. В случае матричного представления проектор на подпространство неприводимого представления $\mathcal{P}^{(\alpha)}$ определяется формулой (4.11). При расчете симметризаторов Юнга вместо матриц представления $D(g)$ в формуле (4.11) записываются подстановки. Сумма проекторов на все неприводимые представления равна единичному оператору, поэтому все компоненты тензора попадают в какое-нибудь из подпространств. Вернувшись к тензору второго ранга (9.1), заметим, что в полном согласии с теорией его разбиение на симметричную и антисимметричную части происходит в соответствии с таблицей характеров группы S_2 , у которой всего два одномерных неприводимых представления: четное и нечетное. $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$

Итак, остальные 16 компонент тензора третьего ранга входят в тензор $V_{ijk} = \hat{B}T$, который, как легко проверить, удовлетворяет соотношению симметрии, напоминающему тождество Якоби

$$V_{ijk} + V_{kij} + V_{jki} = 0.$$

Тождество дает как раз 11 условий:

$$\begin{aligned}V_{123} + V_{312} + V_{231} &= V_{213} + V_{321} + V_{132} = 0 \\ V_{112} + V_{211} + V_{121} &= V_{221} + V_{122} + V_{212} = 0 \\ V_{113} + V_{311} + V_{131} &= V_{331} + V_{133} + V_{313} = 0 \\ V_{223} + V_{322} + V_{232} &= V_{332} + V_{233} + V_{323} = 0 \\ V_{111} &= V_{222} = V_{333} = 0.\end{aligned}$$

Таким образом, симметризаторы Юнга можно строить с помощью таблицы неприводимых характеров группы подстановок из p объектов, где p — ранг тензора. Группа P_p всегда имеет единичное представление, которому соответствует симметризатор \hat{S} в формуле (9.2). Антисимметризатор получается из одномерного неприводимого представления фактор-группы P_p/A_p , где A_p — нормальная подгруппа четных подстановок из p объектов.

Иногда симметризованный тензор сразу становится неприводимым, как антисимметричная часть тензора второго ранга в примере 9.1. Иногда представление надо дальше разлагать на неприводимые, как в случае с симметричной частью тензора второго ранга. Чтобы разлагать симметричную часть на неприводимые представления группы вращений бывает удобно использовать изоморфизм пространства симметричных тензоров и пространства однородных полиномов. Например, для рассмотренного в примере 9.1 тензора $p = 2, n = 3$ можно утверждать, что симметричная часть преобразуется как квадратичная форма

$$S(x, y, z) = a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz.$$

Всего имеется 6 различных коэффициентов, но чтобы разбить на неприводимые представления, следует выделить скалярную часть $S_0(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$, которая не преобразуется при вращении. Оставшаяся бесследовая часть содержит 5 компонент и преобразуется по неприводимому представлению с $l = 2$.

Замечание 9.1. Тензорное представление — это прямое произведение представлений $D(g)$, взятых такое количество раз, каков ранг p у тензора. Поэтому характер тензорного представления равен $\chi_i(g) = \chi^p(g)$, где $\chi(g)$ — характер представления $D(g)$. Если тензор обладает некоторой симметрией по перестановкам индексов, то характер тензорного представления вычисляется по более сложной формуле, которая выводится с помощью процедуры симметризации базиса, описанной в [2, §94]. Для тензора второго ранга вывод приведен в Дополнении. Приведем готовые формулы для тензоров 2-го и 3-го ранга:

$$\begin{aligned}\chi_s(g) &= \frac{1}{2} [\chi^2(g) + \chi(g^2)], & \chi_a(g) &= \frac{1}{2} [\chi^2(g) - \chi(g^2)]; \\ \chi_s(g) &= \frac{1}{6} [\chi^3(g) + 3\chi(g)\chi(g^2) + 2\chi(g^3)], & \chi_a(g) &= \frac{1}{6} [\chi^3(g) - 3\chi(g)\chi(g^2) + 2\chi(g^3)], \\ \chi_b(g) &= \frac{2}{3} [\chi^3(g) - \chi(g^3)].\end{aligned}$$

9.2. Инвариантные тензоры

Определение 9.2. Тензор называется *инвариантным* относительно группы G , если его компоненты не меняются под действием преобразований группы.

Чтобы удобнее записать действие элемента группы на тензор, выстроим его компоненты в один столбец длины n^p . Тогда условие инвариантности запишется как

$$\mathcal{D}(g)\mathbb{T} = \mathbb{T}, \quad \mathbb{T} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (9.5)$$

Исходное представление \mathcal{D} можно разложить на неприводимые представления $D^{(\alpha)}$ группы G (среди которых могут быть и одинаковые)

$$\mathcal{D}(g) = \bigoplus_{\alpha=1}^k D^{(\alpha)}(g).$$

Разложение можно найти с помощью усреднения по группе характера тензорного представления $\chi(g) = [\chi^{(1)}(g)]^p$, где $\chi^{(1)}(g)$ — характер векторного представления. Тогда (9.5) запишется в правильном базисе как

$$\mathcal{D}(g)\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \boxed{D^{(1)}(g)} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \boxed{D^{(k)}(g)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

Просуммируем теперь (9.6) по группе. В матрицах неприводимого представления в силу ортогональности на всех местах суммарной матрицы будет нуль, кроме подпространства единичного представления, где получится порядок группы $|G|$. Значит в таком базисе все компоненты тензора обращаются в нуль, кроме отвечающих единичному представлению. Сформулируем правило подсчета количества независимых компонент инвариантного тензора.

Теорема 9.1. У инвариантного тензора столько независимых компонент, сколько раз входит единичное представление в разложение тензорного представления на неприводимые.

Группу мы для простоты считали дискретной, но и для непрерывных групп можно вывести аналогичное утверждение, интегрируя по группе.

Пример 9.3. Сколько независимых компонент у инвариантного тензора, если $p = 2$, $n = 3$, $G = \text{SO}(3)$?

Из разложения Клебша — Гордана (8.13) видно, что скалярное представление $D^{(0)}$ входит один раз, значит у инвариантного тензора второго ранга в трехмерном пространстве всего одна независимая компонента. Это известный факт, потому что инвариантный тензор всегда записывается через символ Кронекера $T_{ij} = T\delta_{ij}$. По существу это не тензор, а скаляр. Диагональная матрица с равными элементами так и называется *скалярной*.

Пример 9.4. То же самое, но для $G = D_3$. Характер 9-мерного тензорного представления $D^{(1)} \otimes D^{(1)}$ дается квадратами значения характера $D^{(1)}$, которые в свою очередь находятся по формуле (8.5):

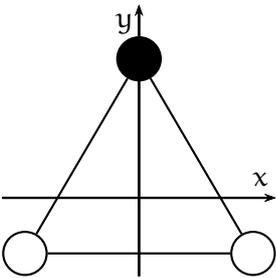
$$\chi_i = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

С помощью таблицы характеров группы треугольника найдем, $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{matrix}$

$$D^{(1)} \otimes D^{(1)} = 2D_1 \oplus D_2 \oplus 3D_3.$$

Отсюда видно, что единичное представление вошло дважды, а следовательно тензор имеет 2 независимые компоненты.

В классической механике известно, что когда мы вычисляем тензор инерции невесомого треугольника с расстоянием от центра до каждой вершины R , у которого в верхней вершине расположена масса m_1 , а при основании массы m , получится



$$\begin{aligned} I_{zz} &= (m_1 + 2m)R^2, \\ I_{xx} &= m_1R^2 + 2m \left(\frac{R}{2}\right)^2 = (2m_1 + m)\frac{R^2}{2}, \\ I_{yy} &= 2m \left(R\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = 3m\frac{R^2}{2}. \end{aligned}$$

Если имеется симметрия правильного треугольника, то $m_1 = m$, и волчок становится симметричным: $I_{xx} = I_{yy} \neq I_{zz}$. У тензора, приведенного к главным осям, остается только две различные компоненты.

Чем ниже симметрия, тем больше независимых компонент у инвариантного тензора, как видно из таблицы 9.1, если двигаться вдоль строки слева направо. Для групп $\text{SO}(3)$, $\text{SO}(2)$ приведем также разложения по инвариантным тензорам при $p \leq 3$

$$\begin{aligned} P_i &= 0, \quad Q_{ij} = A\delta_{ij}, \quad R_{ijk} = B e_{ijk}; \\ P_i &= A n_i, \quad Q_{ij} = A\delta_{ij} + B n_i n_j + C e_{ijk} n_k, \\ R_{ijk} &= A_1 \delta_{ij} n_k + A_2 \delta_{ik} n_j + A_3 \delta_{jk} n_i \\ &+ B_1 e_{ijl} n_l n_k + B_2 e_{kil} n_j n_l + B_3 e_{kjl} n_i n_l + C n_i n_j n_k, \end{aligned} \tag{9.7}$$

Таблица 9.1. Количество линейно независимых компонент инвариантных тензоров ранга $p = 1, 2, 3, 4$ при $n = 3$.

Ранг p	SO(3)	T	D ₃	SO(2)
1	0	0	0	1
2	1	1	2	3
3	1	2	4	7
4	3	7	15	19

где n_i — единичный вектор вдоль оси вращения в группе SO(2), буквы A, B, C обозначают произвольные независимые константы.

Для тензора, инвариантного относительно группы SO(2) < SO(3), можно было рассуждать и иначе. Инвариантный тензор, для примера второго ранга, определен на таких сферических функциях, которые не преобразуются при вращении вокруг оси z, т.е. имеют угловую зависимость $e^{im\varphi}$ с $m = 0$. Тензор второго ранга преобразуется как произведение двух векторов, значит задача сводится к вопросу, сколькими способами мы можем получить зависимость с $m = 0$, возводя в квадрат характер неприводимого векторного представления SO(3)

$$\left(\chi^{(1)}(\varphi)\right)^2 = \left(e^{-i\varphi} + 1 + e^{i\varphi}\right)^2.$$

В данном случае имеется три таких слагаемых, поэтому число независимых компонент 3.

Упражнение 9.1. Объясните, почему в выражении (9.7) тензора третьего ранга R_{ijk} , инвариантного относительно группы SO(2), нет слагаемого, пропорционального e_{ijk} .

Упражнение 9.2. В таблице 9.1 в колонке D₃ содержится “опечатка”. Найдите ее.

9.3. Правила отбора

В квантовой механике приходится вычислять многочисленные матричные элементы операторов. Чтобы сократить работу, хочется заранее знать, какие из них равны нулю. Такие переходы называют запрещенными, а закономерность, по которой их находят, называется *правилом отбора*. Если известна группа симметрии системы, то такие правила можно найти с помощью теоретико-групповых соображений. Для этого надо знать, как преобразуются оператор, начальное и конечное состояние.

Пример 9.5. Если начальное состояния атома вырождено по проекции M углового момента J, тогда волновая функция представляет собой столбец из $2J + 1$ компонент. Если конечное состояние имеет момент J', а нас интересует правило отбора для дипольного момента (3 компоненты), то всего имеется $\nu(J, J') = 3(2J + 1)(2J' + 1)$ матричных элементов для каждого набора J, J'. Если бы не симметрия относительно вращений, надо было бы вычислять $\nu(J, J')$ интегралов для каждой пары J, J'. К счастью, квантовая механика [2] дает правило отбора $J' = J, J \pm 1$, которое резко уменьшает объем вычислений.

Ниже мы выведем общее правило отбора для системы с симметрией относительно преобразований произвольной группы. Квантовомеханические правила отбора для

группы вращений тоже будут получаться из общего правила. Пусть оператор \hat{O} преобразуется по представлению D_o группы G , а начальное и конечное состояния — по представлениям D_i, D_f . Тогда матричный элемент

$$O_{fi} = \langle f | \hat{O} | i \rangle$$

можно представить себе в виде столбца, который преобразуется по прямому произведению представлений

$$\mathcal{D} = D_f^* \otimes D_o \otimes D_i. \quad (9.8)$$

Здесь $*$ означает сопряженное представление, которое получается комплексным сопряжением. Представление \mathcal{D} можно разложить на неприводимые представления $D^{(\alpha)}$ группы G :

$$\mathcal{D} = \bigoplus_{\alpha=1}^K D^{(\alpha)}. \quad (9.9)$$

В прямой сумме могут встретиться и одинаковые представления, поэтому мы не пишем коэффициенты k_α . Такое разложение можно найти, перемножая характеры представлений D_f^*, D_o, D_i .

Перейдем в подпространство какого-либо неприводимого представления и усредним по группе. Для простоты группу считаем конечной. Столбец матричного элемента не должен зависеть от элемента группы, тогда

$$O_{fi} = \frac{1}{|G|} \left(\sum_{g \in G} D^{(\alpha)}(g) \right) O_{fi}.$$

Сумма обращается в нуль в силу ортогональности неприводимого представления $D^{(\alpha)}$ единичному представлению. Исключение составляет случай, когда $D^{(\alpha)}$ само является единичным представлением. Тогда сумма, деленная на порядок группы, даст единицу. Теперь мы можем формулировать общее правило отбора относительно произвольной группы.

Теорема 9.2. *Матричный элемент O_{fi} равен нулю, если в разложении (9.9) представления (9.8) не входит единичное представление.*

Пример 9.6. Найти правило отбора оператора дипольного момента в группе $SU(2)$ на переходе $J - J'$.

Дипольный момент $\mu = e r$ преобразуется по векторному представлению $D^{(1)}$. Волновые функции начального и конечного состояний

$$\langle f' | = \langle f | D^{(J')}, \quad | i' \rangle \sim D^{(J)} | i \rangle,$$

Отсюда

$$\mathcal{D} = [D^{(J')}]^* \otimes D^{(1)} \otimes D^{(J)} = [D^{(J')}]^* \otimes (D^{(J-1)} \oplus D^{(J)} \oplus D^{(J+1)}), \quad (9.10)$$

Если $J \geq 1$. Видим, что единичное представление войдет в разложение, если $J' = J - 1, J' = J$ либо $J' = J + 1$. Получилось правило отбора

$$J' = J, J \pm 1.$$

Случаи $J < 1$ рассмотрим отдельно, их всего два. При $J = 1/2$ скобка в формуле (9.10) согласно правилу (8.6) равна

$$D^{(1/2)} \otimes D^{(1)} = D^{(1/2)} \oplus D^{(3/2)},$$

значит $J' = 1/2, 3/2$. При $J = 0$ та же скобка равна $D^{(1)}$, откуда $J' = 1$.

Таблица 9.2. Правила отбора для векторного оператора в системе с группой симметрии D_3 . Номер строки означает номер начального представления, а столбца — номер конечного.

$i \setminus f$	D_1	D_2	D_3
D_1	○	★	★
D_2	★	○	★
D_3	★	★	★

Пример 9.7. То же самое, но в группе треугольника D_3 .

Характер представления $D^{(1)}$ равен

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

откуда найдем разложения прямого произведения этого представления на каждое неприводимое представление группы треугольника $D_i = D_1, D_2, D_3$

$$\begin{aligned} D_1 \otimes D^{(1)} &= D_2 \oplus D_3, \\ D_2 \otimes D^{(1)} &= D_1 \oplus D_3, \\ D_3 \otimes D^{(1)} &= D_1 \oplus D_2 \oplus D_3. \end{aligned}$$

Переход разрешен, если представление D_f^* , по которому преобразуется конечное состояние, входит в прямую сумму правой части. Запишем правило отбора в виде таблицы 9.2, в которой звездочкой обозначим, что переход разрешен, а кружочком — запрещенные переходы. Полученное правило отбора можно сформулировать одной фразой: переход запрещен между двумя одинаковыми одномерными неприводимыми представлениями.

Дополнение: Симметризация базиса

Сначала сократим формулы (8.1), (8.2) для действия матриц представления на векторах базиса, пропуская лишние буквы u, v

$$\begin{aligned} D(g)|k\rangle &= \sum_{l=1}^N |l\rangle \langle l|D(g)|k\rangle = \sum_{l=1}^N D_{lk}|l\rangle, \\ D(g)|i\rangle &= \sum_{j=1}^{N'} |j\rangle \langle j|D(g)|i\rangle = \sum_{j=1}^{N'} D_{ji}|j\rangle, \\ [D(g) \otimes D(g)] (|k\rangle \otimes |i\rangle) &= \sum_{l,j} |l\rangle \otimes |j\rangle D_{lk}(g)D_{ji}(g). \end{aligned} \quad (9.11)$$

Если тензорное произведение симметризовано, то и базис должен быть симметризован. Переставляя индексы $k \leftrightarrow i$ в формуле (9.11) для действия тензорного представления на симметричный базис найдем

$$[D(g) \otimes D(g)] \frac{1}{2} (|k\rangle \otimes |i\rangle + |i\rangle \otimes |k\rangle) = \sum_{l,j} |l\rangle \otimes |j\rangle \frac{1}{2} [D_{lk}(g)D_{ji}(g) + D_{li}(g)D_{jk}(g)]. \quad (9.12)$$

Теперь из (9.12) можно вычислить след, характер симметричного представления

$$\begin{aligned}\chi_s(g) = \text{tr } D_s(g) &= \frac{1}{2} [D_{lk}(g)D_{ji}(g) + D_{li}(g)D_{jk}(g)]_{j=i, l=k} = \\ &= \frac{1}{2} [D_{kk}(g)D_{ii}(g) + D_{ki}(g)D_{ik}(g)].\end{aligned}\quad (9.13)$$

Первое слагаемое в формуле (9.13) представляет собой квадрат следа $\chi(g)$ матрицы $D(g)$, а второе — след квадрата матрицы $D_{ki}(g)D_{ik}(g) = \text{tr } D^2(g) = \text{tr } D(g^2)$. Отсюда получается формула для характера симметричного тензорного представления

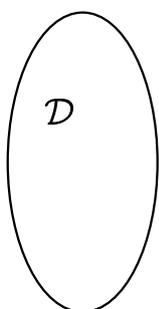
$$\chi_s(g) = \frac{1}{2} [\chi^2(g) + \chi(g^2)].$$

Остальные формулы симметризации, приведенные в конце раздела 9.1., предлагается вывести самостоятельно.

Лекция 10

Функция Грина

10.1. Полуоднородная задача



$$S = \partial\mathcal{D}$$

Рассмотрим компактную область $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ евклидова пространства и два линейных оператора, один из которых \hat{L} — дифференциальный оператор порядка N — определен в области \mathcal{D} , а другой \hat{B} — порядка $(N - 1)$ — действует на ее границе $S = \partial\mathcal{D}$. В математической физике наиболее распространен случай $N = 2$. Общая постановка *неоднородной задачи* для дифференциального оператора записывается в виде уравнения в частных производных и граничных условий. Неоднородную задачу можно разбить на две, которые называются *полуоднородными*:

$$\hat{L}u|_{x \in \mathcal{D}} = f, \quad \hat{B}u|_{x \in S} = g, \quad (10.0)$$

$$\hat{L}u|_{x \in \mathcal{D}} = f, \quad \hat{B}u|_{x \in S} = 0, \quad (10.1)$$

$$\hat{L}u|_{x \in \mathcal{D}} = 0, \quad \hat{B}u|_{x \in S} = g. \quad (10.2)$$

В силу линейности если $u_1(x)$ — решение задачи (10.1), а $u_2(x)$ — решение задачи (10.2), то их сумма $u(x) = u_1(x) + u_2(x)$ будет решением неоднородной задачи (10.0). Сначала мы будем исследовать полуоднородную задачу (10.1), а в лекции 12 вернемся к решению второй полуоднородной задачи (10.2).

Функции, удовлетворяющие однородному граничному условию, образуют линейное пространство, потому что если две функции удовлетворяют однородному условию, то и их линейная комбинация удовлетворяет тому же условию. Пространство превращается в гильбертово, если ограничиться разумными функциями и задать скалярное произведение. Напомним, что *гильбертово пространство* — это полное счетномерное нормированное линейное пространство, где норма вектора определяется *скалярным произведением*. Элементы (векторы) такого пространства — функции, удовлетворяющие однородному граничному условию. Скалярное произведение двух функций $v(x), u(x)$ определим как интеграл по области \mathcal{D} :

$$(v, u) = \int_{\mathcal{D}} v^*(x)u(x) dx \equiv \langle v|u \rangle.$$

Несложно проверить, что скалярное произведение удовлетворяет трем необходимым свойствам:

$$1. (v, \lambda u_1 + u_2) = \lambda(v, u_1) + (v, u_2) \quad \text{линейность;}$$

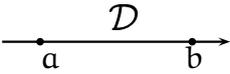
2. $(u, v) = (v, u)^*$ эрмитовость;
3. $(u, u) \geq 0$, причем $(u, u) = \|u\|^2 = 0 \Rightarrow u \equiv 0$ неотрицательность нормы.

Скалярное произведение мы будем обозначать круглыми скобками, как принято в функциональном анализе, либо треугольными скобками, как принято в квантовой механике (обозначения Дирака). Через скалярное произведение можно определить и сопряженный оператор

$$(v, \hat{L}u) = (\hat{L}^\dagger v, u), \quad (10.3)$$

т.е. оператор переходит в сопряженный при перебрасывании на другую обкладку скалярного произведения.

Для иллюстрации общих определений будем использовать оператор Штурма — Лиувилля



$$\hat{L} = p(x) \frac{d^2}{dx^2} + q(x) \frac{d}{dx} + r(x), \quad (10.4)$$

который определим на функциях $u(x)$, равных нулю на концах отрезка $a \leq x \leq b$: $u(a) = u(b) = 0$. Значит для такого оператора $n = 1$, $N = 2$, область \mathcal{D} — отрезок $[a, b]$, а граница \mathcal{S} состоит из двух точек. Функции $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$ считаем действительными.

Пример 10.1. Найдем сопряженный оператор \hat{L}^\dagger для оператора Штурма — Лиувилля. По определению сопряженного оператора (10.3), выпишем интеграл для скалярного произведения и проинтегрируем по частям

$$\begin{aligned} (v, \hat{L}u) &= \int_a^b v^*(x) \hat{L}u(x) dx = \left[v^*(x) p(x) u'(x) - (v^*(x) p(x))' u(x) + q(x) v^*(x) u(x) \right]_a^b \\ &\quad + \int_a^b u(x) \left(\frac{d^2}{dx^2} (p(x) v^*(x)) - \frac{d}{dx} (q(x) v^*(x)) + r(x) v^*(x) \right) dx. \end{aligned} \quad (10.5)$$

В силу нулевых граничных условий для функций $u(x)$, $v(x)$ внеинтегральный член (10.5) исчезает, получается

$$\hat{L}^\dagger = p(x) \frac{d^2}{dx^2} + (2p'(x) - q(x)) \frac{d}{dx} + r(x) - q'(x) + p''(x).$$

Здесь функции $p(x)$, $q(x)$ предполагаются гладкими.

10.2. Разложение оператора по проекторам

Самосопряженным будем называть оператор, совпадающий с сопряженным $\hat{L} = \hat{L}^\dagger$, если у них одинаковые области определения. Запишем спектральную задачу для самосопряженного оператора \hat{L}

$$\hat{L}u_m(x) = \lambda_m u_m(x), \quad (10.6)$$

где u_m — собственные функции, а λ_m — собственные значения. Скалярно умножим (10.6) на u_m , получится

$$(u_m, \hat{L}u_m) = \lambda_m (u_m, u_m).$$

В обеих частях стоят действительные матричные элементы:

$$(u_m, u_m) = \|u\|^2 \geq 0, \quad (u_m, \hat{L}u_m) = (\hat{L}u_m, u_m) = (u_m, \hat{L}u_m)^*,$$

значит собственные значения тоже действительны. Теперь скалярно умножим уравнение (10.6) на $u_l(x)$, затем поменяем местами индексы $l \leftrightarrow m$, выполним комплексное сопряжение, а затем вычтем друг из друга:

$$(u_l, \hat{L}u_m) - (u_m, \hat{L}u_l)^* = (u_l, \lambda_m u_m) - (u_m, \lambda_l u_l)^* = (\lambda_m - \lambda_l)(u_l, u_m)$$

В левой части получится нуль, откуда

$$(\lambda_m - \lambda_l)(u_l, u_m) = 0.$$

Отсюда следует, что либо собственные значения совпадают, либо собственные функции ортогональны друг другу. Собственные функции, принадлежащие одному собственному значению, тоже можно выбрать ортогональными.

Если собственные функции выбрать еще и нормированными, то соотношение ортогональности запишется особенно просто

$$(u_m, u_l) = \delta_{ml}.$$

Соотношение полноты базиса будет иметь вид

$$\sum_m u_m(x) u_m^*(x') = \delta(x - x').$$

Естественно, не у всякого оператора имеется полная система функций. Даже в конечномерном пространстве удастся диагонализировать не всякую матрицу. Чтобы диагонализация удалась, достаточно симметричности для действительной матрицы или эрмитовости для комплексной матрицы. Аналогичные теоремы имеются и для операторов в гильбертовом пространстве. В частности, для самосопряженного оператора Штурма — Лиувилля достаточно положительной определенности оператора и неограниченного возрастания собственных чисел с номером $\lambda_m \rightarrow \infty, m \rightarrow \infty$.

Перейдем к бра- и кет- обозначениям [29], считая, что $u_m(x) = \langle x|m \rangle$, тогда задача на собственные значения запишется в инвариантном виде

$$\hat{L}|m\rangle = \lambda_m|m\rangle,$$

а ее запись (10.6) в координатном представлении получится умножением слева на базисный вектор $\langle x|$. Соотношения ортогональности и полноты выглядят как

$$\langle m|l\rangle = \delta_{ml}, \quad \sum_m |m\rangle\langle m| = I.$$

Соотношение полноты записано как разложение единичного оператора I . Отдельные слагаемые — это проекторы $\hat{P}_m = |m\rangle\langle m|$ на одномерные подпространства, отвечающие заданному базисному вектору с номером m .

Аналогично можно записать разложения по проекторам прямого и обратного оператора

$$\hat{L} = \sum_m \lambda_m |m\rangle\langle m|, \quad \hat{L}^{-1} = \sum_m \frac{1}{\lambda_m} |m\rangle\langle m|, \quad \lambda_m \neq 0. \quad (10.7)$$

Согласно теореме Рисса действие операторов на функции $u(x), v(x)$ в гильбертовом пространстве можно записать в виде интегралов

$$(\hat{L}u)(x) = \int_{\mathcal{D}} K(x, x')u(x') dx', \quad (\hat{L}^{-1}v)(x) = \int_{\mathcal{D}} G(x, x')v(x') dx',$$

где $x = (x_1, \dots, x_m), x' = (x'_1, \dots, x'_m) \in \mathcal{D}$, $K(x, x') = \langle x | \hat{L} | x' \rangle$, $G(x, x') = \langle x | \hat{L}^{-1} | x' \rangle$ — интегральные ядра прямого и обратного операторов, соответственно. Интегральное ядро обратного оператора $G(x, x')$ задачи (10.1) называется *функцией Грина первого рода*.

Перечислим простейшие свойства функции Грина.

1. Решение неоднородной задачи (10.1) выражается *интегралом Дюамеля*

$$u(x) = \int_{\mathcal{D}} G(x, x')f(x') dx'. \quad (10.8)$$

Это свойство прямо следует из определения интегрального ядра обратного оператора.

2. Если \hat{L} — самосопряженный оператор, то функция Грина удовлетворяет *принципу взаимности*:

$$G(x, x') = G^*(x', x).$$

Принцип взаимности следует из разложения (10.7) обратного оператора по проекторам, если учесть, что все собственные значения самосопряженного оператора — действительные.

3. Функция Грина удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\hat{L}G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (10.9)$$

с граничным условием $\hat{B}G(x, x')|_{x \in S} = 0$. Уравнение получается, если подействовать прямым оператором \hat{L} на разложение обратного (10.7) и умножить полученное равенство слева на $\langle x |$, а справа на $|x' \rangle$, учитывая соотношение ортогональности $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$. Дифференциальные уравнения обычно решать проще, чем суммировать бесконечные ряды, поэтому на практике это свойство и используется для нахождения функции Грина.

Назовем *фундаментальным решением* функцию $G(x, x')$, которая удовлетворяет уравнению (10.9), но не обязана удовлетворять граничным условиям.

Замечание 10.1. Мы предположили, что у оператора нет собственных функций, отвечающих нулевому собственному значению. Такие функции будем называть *нулевыми модами*. Как известно, для операторов имеется *альтернатива Фредгольма*. Если нет нулевых мод, то неоднородное уравнение разрешимо при любой правой части и имеет единственное решение. Второй случай альтернативы Фредгольма — это когда имеются нулевые моды, но выполнено некоторое условие разрешимости. Во втором случае имеется бесконечное множество решений. Мы рассмотрим его на следующей лекции.

10.3. Оператор Штурма — Лиувилля

Рассмотрим однородную задачу (10.1) для оператора Штурма — Лиувилля (10.4) на отрезке $a \leq x \leq b$. Пусть $u(a) = u(b) = 0$. Прежде, чем решать уравнение для функции Грина

$$\hat{L}G = \left[p(x) \frac{d^2}{dx^2} + q(x) \frac{d}{dx} + r(x) \right] G(x, x') = \delta(x - x'),$$

локально проинтегрируем его, т.е. найдем интеграл по x от $x' - \epsilon$ до $x' + \epsilon$, а затем устремим $\epsilon \rightarrow 0$. В правой части получится единица, а в левой последнее слагаемое в пределе обратится в нуль. Предпоследнее слагаемое даст скачок функции Грина $q(x')$ $[G(x, x')]_{x' - 0}^{x' + 0}$ и тоже обратится в нуль, если функция Грина непрерывна. Останется первое слагаемое

$$p(x') \left[\frac{dG(x, x')}{dx} \right]_{x' - 0}^{x' + 0} = 1.$$

Отсюда получается, что функция Грина терпит скачок производной, равный $1/p(x')$.

Вместо функции Грина ищем сначала *фундаментальное решение* $g(x, x')$, от которого потребуем такого же скачка, но не будем требовать выполнения граничного условия. Пусть $u_1(x), u_2(x)$ — два линейно - независимых решения однородного уравнения $\hat{L}u = 0$, тогда фундаментальное решение можно искать в виде

$$g(x, x') = \begin{cases} C_1 u_1(x), & x < x'; \\ C_2 u_2(x), & x > x'. \end{cases}$$

Коэффициенты C_1, C_2 найдем из непрерывности функции и скачка производной в точке $x = x'$. Получится система двух линейных уравнений

$$\begin{cases} C_1 u_1(x') - C_2 u_2(x') = 0, \\ -C_1 u_1'(x') + C_2 u_2'(x') = \frac{1}{p(x')}. \end{cases}$$

Ее определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} u_1(x') & -u_2(x') \\ -u_1'(x') & u_2'(x') \end{vmatrix} = W(x')$$

совпадает с определителем Вронского в точке $x = x'$, который отличен от нуля, если выбраны линейно - независимые решения. Тогда из системы можно найти неизвестные коэффициенты

$$C_1 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} 0 & -u_2(x') \\ \frac{1}{p(x')} & u_2'(x') \end{vmatrix} = \frac{u_2(x')}{p(x')W(x')},$$

$$C_2 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} u_1(x') & 0 \\ -u_1'(x') & \frac{1}{p(x')} \end{vmatrix} = \frac{u_1(x')}{p(x')W(x')}.$$

Фундаментальное решение найдено:

$$g(x, x') = \begin{cases} \frac{u_1(x)u_2(x')}{p(x')W(x')}, & x < x', \\ \frac{u_1(x')u_2(x)}{p(x')W(x')}, & x > x'. \end{cases} \quad (10.10)$$

Решение можно записать в одну строчку, если вести новые обозначения $x_{<} = \min(x, x')$, $x_{>} = \max(x, x')$:

$$g(x, x') = \frac{u_1(x_{<})u_2(x_{>})}{p(x')W(x')}.$$

Если $q = 0$, то вронскиан не зависит от координаты. Если к тому же $p = 1$, формула еще немного упрощается. Фундаментальное решение становится зависящим только от переменных $x_{>}, x_{<}$, а значит симметричным по перестановке координат $x \leftrightarrow x'$. Так и должно быть, потому что в этом случае оператор — самосопряженный. Формула

выводится аналогично и в случае обыкновенного дифференциального уравнения более высокого порядка n . В этом случае локальное интегрирование позволяет найти скачок $(n-1)$ -й производной, а производные более низкого порядка непрерывны в точке $x = x'$. Фундаментальное решение неоднозначно, потому что пару независимых решений можно выбирать по-разному.

Вернемся к функции Грина. Чтобы ее найти из фундаментального решения, надо добавить линейную комбинацию независимых решений, а два коэффициента этой комбинации найти из граничных условий. Функция Грина находится единственным образом, когда $\lambda_m \neq 0$. Если с самого начала выбрать $u_1(x)$, удовлетворяющее граничному условию при $x = a$ ($u_1(a) = 0$), а $u_2(x)$, которое удовлетворяет второму условию при $x = b$ ($u_2(b) = 0$), то формула (10.10) сразу даст функцию Грина

$$G(x, x') = g(x, x'), \quad G(a, x') = G(b, x') = 0, \quad a < x' < b.$$

Замечание 10.2. Бывает так, что однородные граничные условия $\hat{B}_{1,2}u|_{x=a,b} = 0$ не удастся разделить на левое и правое. Тогда вместо формулы (10.10) надо использовать более общую:

$$G(x, x') = \frac{Z(x, x')}{\Delta}, \quad \Delta = \begin{vmatrix} \hat{B}_1 u_1 & \hat{B}_1 u_2 \\ \hat{B}_2 u_1 & \hat{B}_2 u_2 \end{vmatrix} \neq 0,$$

$$Z(x, x') = \begin{vmatrix} g(x, x') & u_1(x) & u_2(x) \\ \hat{B}_1 g(x, x') & \hat{B}_1 u_1(x) & \hat{B}_1 u_2(x) \\ \hat{B}_2 g(x, x') & \hat{B}_2 u_1(x) & \hat{B}_2 u_2(x) \end{vmatrix}. \quad (10.11)$$

Если разложить определитель Z по первой строке, мы увидим, что он равен линейной комбинации фундаментального решения g и двух линейно-независимых решений однородного уравнения u_1, u_2 . Причем минор при g равен Δ , поэтому при фундаментальном решении стоит единичный коэффициент. Чтобы показать, что получилась функция Грина, осталось проверить выполнение граничных условий. Подействуем на определитель Z операторами $\hat{B}_{1,2}$. В первом случае у получившегося определителя совпадут первая и вторая строки, а во втором — первая и третья. Значит функция G удовлетворяет и граничным условиям.

Пример 10.2.

$$\frac{d^2}{dx^2} G(x, x') = \delta(x - x'), \quad G|_{x=0} + G|_{x=1} - \frac{dG}{dx} \Big|_{x=1} = 0, \quad \frac{dG}{dx} \Big|_{x=0} + \frac{dG}{dx} \Big|_{x=1} = 0.$$

Два решения однородного уравнения — константа и линейная функция $u_1(x) = 1, u_2(x) = x$. Вронскиан $W = 1$, фундаментальное решение дается формулой (10.10)

$$g(x, x') = \begin{cases} x', & x < x', \\ x, & x > x'. \end{cases}$$

Оператор \hat{B}_1 здесь сумма значений функции минус производная в единице, а \hat{B}_2 — сумма значений производных в граничных точках $x = 0, 1$. Осталось выполнить граничные условия. Найдем определители (10.11):

$$Z = \begin{vmatrix} x > & 1 & x \\ x' & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{vmatrix} = 4x > - 2(x + x'), \quad \Delta = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 4.$$

Отсюда получится функция Грина

$$G(x, x') = \frac{|x - x'|}{2}. \quad (10.12)$$

Действительно, эта функция непрерывна, имеет, где надо, единичный скачок производной и удовлетворяет граничным условиям.

10.4. Дополнительная литература

Последовательное изложение теорем функционального анализа можно найти в учебниках [30–32]. Теория функций Грина изложена в книгах [6, 33, 34], в учебнике [35] рассмотрен также случай несамосопряженных операторов. Теоремы единственности многих краевых задач можно найти в [36]. Функция Грина конкретных уравнений Шредингера приведены в книгах по физике, см., например, [4, 37, 38].

Лекция 11

Обобщенная функция Грина

11.1. Нулевые моды

Рассмотрим вторую часть альтернативы Фредгольма (стр. 72), когда у оператора имеются нулевые моды. Пусть первые k собственных функций принадлежат нулевому собственному значению: $\lambda_m = 0, m = 1, \dots, k$. Можно записать вместо (10.7) *условно обратный* оператор

$$\hat{L}_0^{-1} = \sum'_m \frac{1}{\lambda_m} |m\rangle \langle m| \equiv \sum_{m=k+1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_m} |m\rangle \langle m|. \quad (11.1)$$

Здесь штрих возле знака суммы означает, что суммирование идет только по ненулевым модам. Получилась сумма по проекторам в ортогональное дополнение к k -мерному подпространству нулевых мод. Условно обратный оператор всегда определен, а при $k = 0$ он переходит в обычный обратный оператор. Соответствующее интегральное ядро

$$G_0(x, x') = \langle x | \hat{L}_0^{-1} | x' \rangle = \sum'_m \frac{u_m(x) u_m^*(x')}{\lambda_m}$$

называется *обобщенной* (или модифицированной) функцией Грина. Более удачным представляется термин «обобщенная функция Грина», потому что в случае отсутствия нулевых мод она переходит в обычную функцию Грина. Перечислим основные свойства G_0 .

1. Обобщенная функция Грина ортогональна нулевым модам. Если умножить уравнение (11.1) слева на $\langle l|$, то в силу ортогональности мы получим

$$\langle l | \hat{L}_0^{-1} = \sum'_m \frac{\langle l | m \rangle \langle m |}{\lambda_m} = 0, \quad l = 1, \dots, k. \quad (11.2)$$

2. Обобщенная функция Грина подчиняется уравнению

$$\hat{L} G_0(x, x') = \delta(x - x') - \sum_{m=1}^k u_m(x) u_m^*(x'), \quad (11.3)$$

где $u_m(x)$ — нормированные нулевые моды. Подействуем на уравнение (11.1) оператором \hat{L} , получится

$$\sum'_m |m\rangle \langle m| = \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m| - \sum_{m=1}^k |m\rangle \langle m|.$$

Первая сумма в правой части в силу полноты равна единичному оператору. Переходя к координатам x, x' , получим уравнение (11.3).

3. Решение уравнения (11.3) определено неоднозначно, к нему можно добавить линейную комбинацию нулевых мод $\sum_{m=1}^k C_m u_m(x)$. Однако, неопределенность исчезает и все константы C_m находятся однозначно, если потребовать выполнения к условий ортогональности (11.2):

$$\int_{\mathcal{D}} u_m(x) G_0(x, x') dx = 0, \quad m = 1, \dots, k. \quad (11.4)$$

Если оператор не самосопряженный, то надо требовать ортогональности нулевым модам сопряженного оператора.

Пример 11.1. На единичном отрезке найти функцию Грина оператора

$$\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$$

на пространстве функций с равной нулю производной на концах единичного отрезка

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=1} = 0.$$

Однородное уравнение $u'' = 0$ имеет общее решение $u(x) = C_1 + C_2 x$, но из граничного условия получаем $C_2 = 0$, значит $k = 1$ и имеется всего одна нулевая мода. Из условия нормировки найдем $C_1 = 1$, тогда уравнение (11.3) на обобщенную функцию Грина получается вида

$$\frac{d^2 G_0}{dx^2} = \delta(x - x') - 1.$$

Решение можно составить из частного решения неоднородного уравнения $u_1(x) = -x^2/2$ и общего решения однородного уравнения:

$$G_0(x, x') = \begin{cases} -\frac{x^2}{2} + A_1 x + B_1, & x < x', \\ -\frac{x^2}{2} + A_2 x + B_2, & x > x'. \end{cases}$$

Из граничных условий находим два коэффициента $A_1 = 0, A_2 = 1$. Из непрерывности в точке $x = x'$ получаем соотношение $B_1 = B_2 + x'$. Однако условие единичного скачка первой производной не добавляет уравнения, а приводит к тождеству $1 = 1$. Нам не хватило ровно одного условия, потому что мы пока не использовали требование ортогональности (11.4):

$$-\int_0^1 \frac{x^2}{2} dx + \int_0^{x'} B_1 dx + \int_{x'}^1 (B_2 + x) dx = 0.$$

Вычисляя все три определенных интеграла, находим $B_2 = -x'^2/2 - 1/3$, откуда

$$G_0(x, x') = \begin{cases} -\frac{x^2 + x'^2}{2} + x' - \frac{1}{3}, & x < x', \\ -\frac{x^2 + x'^2}{2} + x - \frac{1}{3}, & x > x'. \end{cases}$$

Ответ можно переписать и в одну строчку: $G_0 = -(x_{<}^2 + x_{>}^2)/2 - 1/3 + x_{>}$.

11.2. Уравнение Пуассона

Уравнение Пуассона

$$\Delta u = f(x)$$

обычно решают при двух граничных условиях. Условия вида

$$u|_S = 0$$

называются *задачей Дирихле*, а

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_S = 0$$

— *задачей Неймана*. Здесь $\partial/\partial n$ обозначает производную по внутренней нормали к поверхности S . Конечно, в теории уравнений в частных производных рассматриваются и более сложные задачи, в которых задана линейная комбинация функции и ее нормальной производной, производная взята под углом к нормали (задача о наклонной производной), нормальная производная на одной части поверхности и функция на другой ее части и т.п. Но мы здесь ограничимся только простейшими постановками Дирихле и Неймана, на примере которых можно понять, как строится функция Грина. Начнем мы, как договорились, с уравнения Пуассона с однородным граничным условием, а в следующей лекции перейдем к уравнению Лапласа с неоднородным условием.

Единственность

Прежде, чем строить функцию Грина, надо убедиться, что у задачи нет нулевых мод. Иначе нам следует построить обобщенную функцию Грина.

Теорема 11.1. Принцип максимума. *Гармоническая в \mathcal{D} функция, непрерывная вплоть до границы, может достигать максимума только на границе S .*

Предположим противное:

$$M = \max_{x \in \mathcal{D}} u(x) = u(x_0) > \max_{x \in S} u(x) = m.$$

Введем вспомогательную функцию

$$w(x) = u(x) + \frac{M - m}{2d^2} (x - x_0)^2,$$

где d — диаметр области \mathcal{D}

$$d = \text{diam } \mathcal{D} \equiv \max_{x, x' \in \mathcal{D}} \|x - x'\|.$$

Максимум функции w в области равен по крайней мере $M = w(x_0)$. Значение функции w на границе S не превосходит

$$w|_S \leq u|_S + \frac{M - m}{2d^2} d^2 = \frac{M + m}{2} < M,$$

значит ее точка максимума тоже лежит внутри области \mathcal{D} . Пусть этот максимум достигается в точке $x_1 \in \mathcal{D}$, тогда все вторые производные в этой точке неположительны

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x_i^2} \leq 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

значит и их сумма, Δw , тоже равна нулю или отрицательна. С другой стороны,

$$\Delta w = \Delta u + \frac{(M-m)n}{d^2} = \frac{(M-m)n}{d^2} > 0.$$

Полученное противоречие и доказывает требуемое утверждение.

Следствие 1 — принцип минимума. *Гармоническая функция $u(x)$ может достигать своего минимума только на границе.* Для доказательства достаточно применить принцип максимума к гармонической функции $-u$.

Следствие 2 — единственность решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона.
Задача

$$\Delta u = 0, \quad u|_S = 0$$

имеет только нулевое решение $u \equiv 0$. Действительно, если гармоническая функция равна нулю на границе, она вследствие принципов максимума и минимума не может отличаться от нуля и в области.

Фундаментальные решения

Конкретный вид фундаментального решения уравнения Пуассона зависит от размерности пространства. Для $n = 1$ мы уже строили его в примере 10.2: $g(x, x') = \max(x, x')$. Можно было выбрать в качестве фундаментального решения и $g(x, x') = |x - x'|/2$, добавление гладких решений однородного уравнения не меняет характера особенности при $x = x'$.

При $n = 2$ следует решить уравнение

$$\Delta_2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

где Δ_2 — двумерный оператор Лапласа. Чтобы определить тип особенности, локально проинтегрируем это уравнение по кругу радиуса $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0$ вокруг точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Интеграл дельта-функции равен единице, а интеграл оператора Лапласа по площади круга согласно теореме Гаусса сводится к интегралу по окружности радиальной проекции градиента, а последний в силу симметрии равен производной по радиусу, умноженной на длину окружности

$$\iint \Delta_2 g \, dS = \oint \nabla_r g \, ds = 2\pi\rho \frac{dg}{d\rho} = 1.$$

Получается дифференциальное уравнение, решение которого имеет логарифмическую особенность, подобно потенциалу заряженной нити в электростатике

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{2\pi}. \quad (11.5)$$

При $n = 3$ надо решить трехмерное уравнение Пуассона с точечным источником:

$$\Delta g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

где Δ — трехмерный оператор Лапласа. Интегрируем его по шару радиуса $\rho \rightarrow 0$ и преобразуем интеграл по объему к интегралу по поверхности от градиента

$$\iiint \Delta g \, dV = \iint \nabla g \, dS = 4\pi\rho^2 \frac{\partial g}{\partial \rho} = 1.$$

Решение полученного дифференциального уравнения дает фундаментальное решение

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (11.6)$$

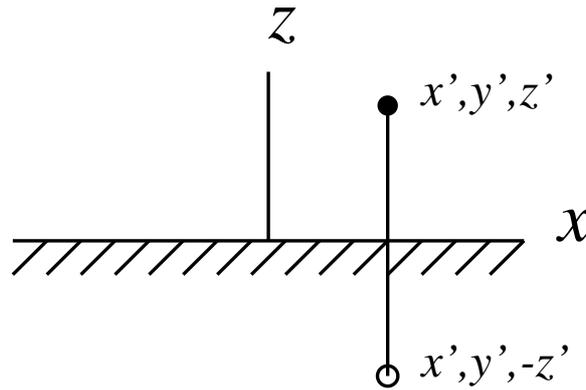


Рис. 11.1. Изображение точечного “заряда”, отраженного в плоскости $z = 0$ к примеру 11.2.

которое естественно совпадает с потенциалом точечного заряда в электростатике. При $n > 2$ фундаментальное решение получается убывающим на бесконечности.

Упражнение 11.1. Найдите фундаментальное решение уравнения Пуассона в пространстве произвольной размерности $n > 2$. Ответ:

$$-\frac{\Gamma\left(\frac{n}{2} - 1\right)}{4\pi^{n/2}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{n-2}}.$$

Функция Грина для задачи Дирихле

Чтобы построить функцию Грина задачи Дирихле к уравнению Пуассона, надо к фундаментальному решению добавить какие-нибудь решения уравнения Лапласа, чтобы удовлетворить граничным условиям. Ясно, что получить явные формулы дается только в специальных симметричных случаях. Когда форма области — шар или полупространство, то помогает метод изображений. В двумерном случае бывает полезен метод конформных преобразований. Оба метода проиллюстрируем примерами.

Пример 11.2. Построить функцию Грина трехмерного уравнения Пуассона для полупространства $z > 0$, которая обращается в нуль на бесконечности и на границе $z = 0$.

Функция Грина строится методом изображений. Надо к фундаментальному решению (11.6) добавить потенциал “заряда-изображения” противоположного знака, расположенного на равном расстоянии под плоскостью $z = 0$, как показано на рис. 11.1. Получится

$$G(x, y, z; x', y', z') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z+z')^2}}.$$

Особенность второго слагаемого лежит вне области \mathcal{D} , второе слагаемое гармонично в верхнем полупространстве, граничные условия выполнены. Значит искомая функция Грина построена.

Пример 11.3. Построить функцию Грина двумерного уравнения Пуассона внутри круга \mathcal{D} единичного радиуса, которая обращается в нуль на единичной окружности \mathcal{S} .

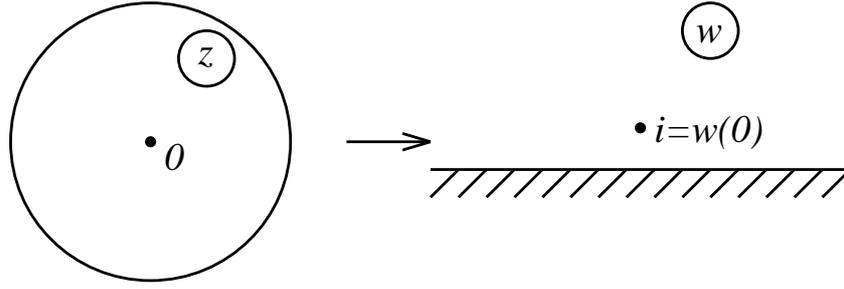


Рис. 11.2. Конформное преобразование (11.7) отображает единичный круг из комплексной плоскости z в верхнюю полуплоскость комплексной плоскости w .

Построим конформное преобразование

$$w(z) = i \frac{1+z}{1-z}. \tag{11.7}$$

Единичная окружность переходит в действительную ось, потому что

$$w|_S = i \frac{1 + e^{i\varphi}}{1 - e^{i\varphi}} = -\operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2}.$$

Начало координат переходит в точку $w(0) = i$. Значит единичный круг отобразится в верхнюю полуплоскость, как показано на рис. 11.2.

Функцию Грина в верхней полуплоскости, которая обращается в нуль на действительной оси, легко построить методом изображений, как это делалось в предыдущем примере. Только вместо трехмерного фундаментального решение надо взять двумерное (11.5):

$$G(w, w') = \frac{1}{2\pi} [\ln |w - w'| - \ln |w - w'^*|].$$

Теперь перейдем к переменной z

$$G(z, z') = \frac{1}{2\pi} \left(\ln \left| \frac{z - z'}{1 - z'} \right| - \ln \left| \frac{z - \frac{1}{z'^*}}{1 - \frac{1}{z'^*}} \right| \right). \tag{11.8}$$

Получилась искомая функция, которая обращается в нуль на единичной окружности $z = e^{i\varphi}$. В этом можно убедиться, вводя полярные координаты $z = re^{i\varphi}$, $z' = \rho e^{i\psi}$. Тогда из (11.8) найдем

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{1}{4\pi} \left(\ln \frac{r^2 - 2r\rho \cos(\varphi - \psi) + \rho^2}{1 - 2\rho \cos \psi + \rho^2} - \ln \frac{r^2 - 2r \cos(\varphi - \psi)/\rho + 1/\rho^2}{1 - 2 \cos \psi/\rho + 1/\rho^2} \right). \tag{11.9}$$

При $r = 1$ логарифмы в квадратной скобке взаимно уничтожаются. Тот же ответ можно получить и методом изображений. Как видно из формулы (11.8), нить-изображение противоположного знака надо поместить в точку инверсии.

Метод основан на инвариантности двумерного уравнения Лапласа относительно конформных преобразований $w(z)$:

$$\Delta_z = \frac{\partial^2}{\partial z \partial z^*}, \quad \frac{\partial}{\partial z} = w' \frac{\partial}{\partial w} \Rightarrow \Delta_z = |w'|^2 \frac{\partial^2}{\partial w \partial w^*} = |w'|^2 \Delta_w.$$

Отсюда, если $\Delta_z u = 0$, то и $\Delta_w u = 0$. Подробности метода конформных преобразований изложены в монографии [39].

Лекция 12

Функция Грина второго рода

12.1. Формула Грина для оператора Лапласа

Мы разбили общую неоднородную задачу (10.0) на две полуоднородные задачи (10.1) и (10.2), а потом записали решение первой полуоднородной задачи (10.1) в виде объемного интеграла (10.8). Аналогично, решение второй полуоднородной задачи (10.2) можно записать в виде поверхностного интеграла

$$u(x) = \int_S G_S(x, x') g(x') dx', \quad (12.1)$$

где функция $G_S(x, x')$, определенная при $x \in \mathcal{D}$, $x' \in S$, называется *функцией Грина второго рода*.

Для трехмерного оператора Лапласа можно вывести *формулу Грина*, которая связывает объемные и поверхностные интегралы. С помощью формулы Грина мы научимся выражать функцию Грина второго рода через функцию Грина первого рода. Рассмотрим две функции $u(x), v(x)$, определенные в $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^3$, и найдем разность скалярных произведений

$$\begin{aligned} (v, \Delta u) - (u, \Delta v) &= \iiint_{\mathcal{D}} (v \Delta u - u \Delta v) dV = \iiint_{\mathcal{D}} \operatorname{div} (v \nabla u - u \nabla v) dV = \\ &= \iint_S (v \nabla u - u \nabla v) dS = - \iint_S \left(v \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial v}{\partial n} \right) dS. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Знак в самом последнем равенстве сменился, потому что символом $\partial/\partial n$ мы обозначаем производную по внутренней нормали, а вектор dS направлен по внешней нормали.

12.2. Потенциалы простого и двойного слоя

Сформулируем полуоднородные задачи для уравнения Лапласа: задачу Дирихле

$$\Delta \phi = 0, \quad \phi|_S = g(x)$$

и задачу Неймана

$$\Delta \phi = 0, \quad \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_S = h(x).$$

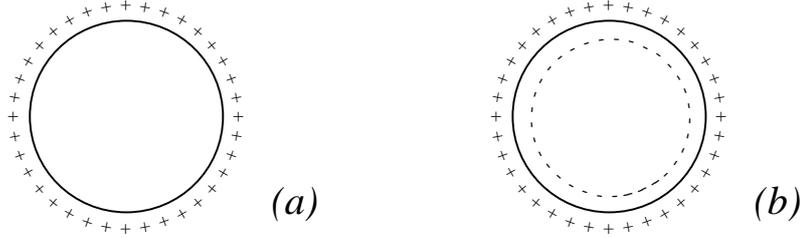


Рис. 12.1. Потенциалы простого (а) и двойного (б) слоя.

В задаче Неймана имеется нулевая мода $\phi = \text{const}$, поэтому для разрешимости надо потребовать, чтобы она была ортогональной функции $h(x)$. В трехмерном случае получается условие

$$\iint_S h(x) dS = 0.$$

Теперь воспользуемся формулой Грина (12.2), подставив вместо $v(x)$ функцию Грина $G(x, x')$ первого рода для уравнения Пуассона $\Delta G = \delta(x - x')$, а вместо $u(x)$ — решение уравнения Лапласа $\Delta \phi = 0$. Получим

$$(G, \Delta \phi) - (\Delta G, \phi) = - \iiint_D \delta(x - x') \phi(x) dx = -\phi(x') = - \iint_S \left(G(x, x') \frac{\partial \phi}{\partial n} - \phi \frac{\partial G}{\partial n} \right) dx.$$

Когда второе слагаемое обращается в нуль на S , то есть $\partial G / \partial n = 0$, мы можем подставить $h(x)$ в первое слагаемое и получить решение задачи Неймана. Если же исчезает первое слагаемое, то есть функция Грина первого рода обращается в нуль $G = 0, x \in S$, то во второе слагаемое можно подставить вместо ϕ функцию $g(x)$ и получится решение задачи Дирихле.

Остается сменить названия переменных $x \leftrightarrow x'$ и воспользоваться симметричностью функции Грина $G(x, x') = G(x', x)$, которая зависит только от разности векторов $G(x, x') = G(|x - x'|)$. Найдем

$$\phi(x) = \iint_S \left(G(x, x') \frac{\partial \phi(x')}{\partial n'} - \phi(x') \frac{\partial G(x, x')}{\partial n'} \right) dx', \quad (12.3)$$

где дифференцирование по n' означает дифференцирование по внутренней нормали в пространстве переменной x' . Сравним полученный интеграл по поверхности с определением (12.1) функции Грина второго рода.

Первое слагаемое в формуле (12.3) дает решение задачи Неймана.

$$G_S(x, x') = G(x, x')|_{x' \in S}, \quad \frac{\partial G}{\partial n} \Big|_{x \in S} = 0.$$

Итак, чтобы найти функцию Грина для неоднородной задачи Неймана к уравнению Лапласа, надо сначала решить однородную задачу Неймана, то есть построить функцию Грина первого рода уравнения Пуассона, нормальная производная которой обращается в нуль на поверхности, а затем ограничить эту функцию на поверхность.

Второе слагаемое в формуле (12.3) дает решение задачи Дирихле.

$$G_S(x, x') = - \frac{\partial G(x, x')}{\partial n'} \Big|_{x' \in S}, \quad G|_{x \in S} = 0.$$

Таким образом, чтобы найти функцию Грина второго рода для задачи Дирихле к уравнению Лапласа, надо сначала найти функцию первого рода для однородной задачи

Дирихле $G|_S = 0$ к уравнению Пуассона, продифференцировать ее вдоль нормали по второй переменной, а затем зафиксировать положение второй переменной x' на границе S .

Решение полной неоднородной задачи (10.0) для уравнения Пуассона

$$\Delta u = f, \quad \hat{B}u|_{x \in S} = g$$

записывается в виде суммы объемного и поверхностного интегралов:

$$u(x) = \iiint_{\mathcal{D}} G(x, x') f(x') dx' + \iint_S G_S(x, x') g(x') dx'.$$

Объемный интеграл называется потенциалом *объемного заряда*, второй поверхностный интеграл называется по разному в зависимости от задачи.

Решение задачи Неймана называется потенциалом *простого слоя*, как показано на рис. 12.1 (а). Из электростатики известно, что если на диэлектрике поместить поверхностный заряд, он задаст нормальное электрическое поле, то есть проекцию градиента потенциала на внутреннюю нормаль. Решение задачи Дирихле называется потенциалом *двойного слоя*, рис. 12.1 (б). Если на двух близких замкнутых поверхностях сосредоточены заряды одинаковой величины и противоположного знака, то граничное условие в электростатике — это скачок потенциала при переходе через двойной слой. Функция Грина задачи Дирихле определится разностью двух функций Грина для задачи Неймана

$$G(x, x' - \epsilon/2) - G(x, x' + \epsilon/2) = -\epsilon \frac{\partial}{\partial n'} G(x, x'),$$

где $\epsilon \rightarrow 0$ расстояние между слоями зарядов.

Пример 12.1. Найдем функцию Грина двумерной задачи Дирихле для уравнения Лапласа в верхней полуплоскости

$$\Delta u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad u(x, 0) = g(x).$$

Сначала найдем функцию Грина первого рода, действуя, как в примере 11.2, но пользуясь двумерным фундаментальным решением (11.5). Нить — изображение поместим в нижней полуплоскости на равном расстоянии, подобно тому, как мы делали с зарядом-изображением в трехмерном случае (рис. 11.1). Получим функцию Грина первого рода

$$G(x, y, x', y') = \frac{1}{2\pi} \left(\ln \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2} - \ln \sqrt{(x - x')^2 + (y + y')^2} \right),$$

которая обращается в нуль на оси x . Значит функция Грина второго рода для задачи Дирихле получится после дифференцирования по y' при $y' = 0$:

$$\begin{aligned} G_S(x, y, x') &= - \left. \frac{\partial G}{\partial y'} \right|_{y'=0} = \\ &= - \frac{1}{4\pi} \left[- \frac{2(y - y')}{(x - x')^2 + (y - y')^2} - \frac{2(y + y')}{(x - x')^2 + (y + y')^2} \right]_{y'=0} = \frac{1}{\pi} \frac{y}{(x - x')^2 + y^2}. \end{aligned}$$

Тогда

$$u(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y}{(x - x')^2 + y^2} g(x') \frac{dx'}{\pi}.$$

Пример 12.2. Решить задачу Неймана для области из предыдущего примера, т.е. найти решение уравнения Лапласа в верхней полуплоскости, производная которого принимает на оси x заданное значение $h(x)$.

Функция Грина первого рода отличается от предыдущего примера тем, что нить — изображение надо взять того же знака

$$G = \frac{1}{2\pi} \left(\ln \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2} + \ln \sqrt{(x-x')^2 + (y+y')^2} \right),$$

чтобы удовлетворить граничному условию

$$\frac{\partial G}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{2(y-y')}{(x-x')^2 + (y-y')^2} + \frac{2(y+y')}{(x-x')^2 + (y+y')^2} \right]_{y=0} = 0.$$

Функция Грина второго рода строится ограничением на ось x , то есть подстановкой $y' = 0$

$$G_s = G|_{y'=0} = \frac{1}{2\pi} \ln [(x-x')^2 + y^2].$$

Решение задачи Неймана

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \ln [(x-x')^2 + y^2] h(x') \frac{dx'}{2\pi}$$

существует, если выполнено условие разрешимости

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx = 0.$$

Решение определено с точностью до константы.

Упражнение 12.1. Найдите функцию Грина второго рода для задачи Дирихле в единичном круге. Воспользуйтесь функцией Грина первого рода в полярных координатах (11.9).

Пример 12.3. Адамара. Чтобы ответить на вопрос, почему мы решаем задачи Дирихле и Неймана для уравнения Лапласа, а не ставим задачу Коши, приведем пример, который принадлежит Адамару. Попытаемся решить двумерную задачу Коши, точнее целую последовательность задач при $m = 1, 2, \dots$, в верхней полуплоскости

$$\Delta u = 0, \quad u(x, 0) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0} = v_m(x) = \frac{\sin mx}{m}.$$

Переменные разделяются в декартовых координатах

$$u(x, y) = X(x)Y(y), \quad \frac{X''}{X} = -\frac{Y''}{Y} = -k^2 \Rightarrow X = \sin kx, \quad Y = \operatorname{sh} ky.$$

Решение уже удовлетворяет первому граничному условию, а если выбрать коэффициент $c_m = 1/m^2$ и $k = m$, то получим решение задачи $u(x, y) = \sin mx \operatorname{sh} my / m^2$.

При $m \rightarrow \infty$ функция $v_m(x)$ может быть сделана сколь угодно малой, а решение получилось неограниченным. Значит задача поставлена некорректно. Корректная постановка задачи по Адамару включает в себя в дополнение к существованию и единственности решения еще и требование устойчивости решения относительно малых изменений граничных условий. В данном примере сколь угодно малые изменения нулевых граничных условий приводят к катастрофическому изменению решения задачи Коши.

12.3. Уравнение Гельмгольца

Мы уже построили обратный оператор к лапласиану. Но чтобы закончить краткий обзор основных эллиптических операторов, надо рассмотреть еще один важный случай — оператор Гельмгольца

$$\hat{L} = \Delta + k^2.$$

Если перед k^2 стоит знак минус, такой оператор тоже называют оператором Гельмгольца. Уравнение Гельмгольца возникает в задачах электродинамики и оптики, когда мы ищем решение волнового уравнения в виде монохроматической волны. Такое же уравнение возникает в квантовой механике, если нас интересует стационарное состояние уравнения Шредингера для частицы во внешнем поле.

Можно построить две функции Грина первого рода для трехмерной задачи, каждая из которых обращается в нуль на бесконечности. При $k = \text{const}$ обе явно выписываются

$$G^\pm = -\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (12.4)$$

Они обе удовлетворяют уравнению и граничному условию, имеют правильную особенность при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. В этом можно убедиться локальным интегрированием, аналогично тому, как мы искали особенность (11.6) фундаментального решения уравнения Пуассона. Причем и ответ получится тот же самый, потому что член с k^2 при локальном интегрировании обращается в нуль. Функция Грина G^+ называется *расходящейся*, а G^- — *сходящейся* волной. На практике та или иная функция выбирается в зависимости от постановки исходной физической задачи. Функция Грина с постоянным k иногда может быть полезной и для уравнения с переменными коэффициентами. Продемонстрируем на примере, как она позволяет свести дифференциальное уравнение к интегральному.

Пример 12.4. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\left(\Delta + k_0^2 - \frac{2mU}{\hbar^2} \right) \psi = 0,$$

где $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$. Если потенциал U мал по сравнению с полной энергией E , можно строить теорию возмущений для задачи рассеяния, считая невозмущенное решение плоской волной $\psi_0 = \exp ik_0 \mathbf{r}$:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_0 \mathbf{r}} + \psi_1(\mathbf{r}).$$

В задаче рассеяния при больших r решение состоит из плоской падающей волны и расходящейся сферической рассеянной волны. Сходящейся волны нет, поэтому неопределенность снимается и мы пользуемся функцией Грина G^+ . Найдем интегральное уравнение для поправки первого порядка ψ_1 :

$$\psi_1 = \psi(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r}) = \int G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

которое называется главным интегральным уравнением теории рассеяния.

Интегральное уравнение решить во всяком случае не легче, чем дифференциальное, однако для интегральных уравнений обычно удобнее строить разложение по малому параметру. С точки зрения теории интегральных уравнений это уравнение Фредгольма второго рода. Такие уравнения можно решать с помощью итераций и получать разложения в ряд, который в математике называется рядом Неймана, а в физике борновским:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = & \psi_0(\mathbf{r}) + \int G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \\ & + \int G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \int G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}'') \psi_0(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' + \dots \end{aligned}$$

Отдельные члены борновского



ряда можно изобразить графически. Интеграл по r' в первой строчке формулы — первое борновское приближение — описывает однократное взаимодействие частицы с полем U . Следующий интеграл по r', r'' , записанный во второй строчке формулы, обозначается вто-

рой диаграммой, которая показывает, что частица дважды взаимодействовала с полем, один раз в точке r' , а второй раз в точке r'' и т.д.

Область применимости борновского приближения (область сходимости ряда) можно найти из условия малости первого члена разложения по сравнению с нулевым. Оценка интеграла получается, если учесть, что интегрирование по поперечным координатам по отношению к вектору k_0 проводится до радиуса взаимодействия R , а по продольной координате — до $1/k_0$ из-за осцилляций ψ_0 :

$$\frac{2mU}{\hbar^2} \frac{1}{k_0} R^2 \frac{1}{R} \ll 1,$$

где U — характерная величина потенциала взаимодействия. Если учесть, что при $E \gg U$ $k_0 = mv/\hbar$, где v скорость частицы, то условие применимости сводится к неравенству

$$T = \frac{R}{v} \ll \tau = \frac{\hbar}{U}.$$

Время T пролета через яму должно быть меньше характерного времени τ , за которое меняется состояние. При малых скоростях, продольный интеграл обрезается не на $1/k_0$, а на расстоянии R , тогда условие меняется

$$U \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}.$$

Потенциальная энергия должна быть мала по сравнению с энергией локализации.

Упражнение 12.2. Пользуясь преобразованием Фурье, выведите формулу (12.4).

Лекция 13

Нестационарные уравнения

Как мы убедились, для эллиптических уравнений краевая задача ставится на замкнутой поверхности — границе \mathcal{S} компактной области \mathcal{D} или на бесконечности. Для параболических и гиперболических уравнений имеется еще и начальное условие при $t = 0$. Для уравнения теплопроводности требуется одно начальное условие, для волнового уравнения — два. Пусть теперь $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ — начальная гиперповерхность $t = 0$, где заданы начальные условия. Решение надо искать в области $\Omega = \mathcal{D} \times \mathbb{R}_+$, то есть при $t > 0$. Надо найти то решение, которое одновременно удовлетворяет и начальным, и граничным условиям. Такая постановка называется *смешанной краевой задачей*. В любом случае во всем $(n + 1)$ -мерном пространстве-времени условия ставятся на незамкнутой поверхности — на части границы области Ω : на начальной гиперповерхности и на «боковой» поверхности $\mathcal{D} \cup (\partial\mathcal{D} \times \mathbb{R}_+)$. В основном мы будем рассматривать частный случай, когда начальное условие поставлено во всем пространстве $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$, а граничные условия заменяются требованием убывания решения на бесконечности. Для гиперболических уравнений ставится и задача Коши только с начальными условиями в компактной области, но решение такой задачи не удастся продолжить на произвольные времена.

13.1. Параболические операторы

В качестве главного примера параболического уравнения мы будем рассматривать неоднородное уравнение теплопроводности

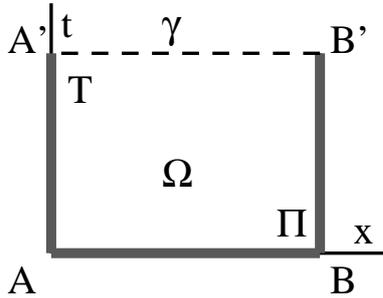
$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f(x, t).$$

Прежде, чем строить функцию Грина, надо убедиться в отсутствии нулевых мод у однородного уравнения теплопроводности с нулевыми начальными и граничными условиями. Для этого сформулируем соответствующий принцип максимума для смешанной краевой задачи. Ограничимся для простоты случаем одной пространственной переменной

$$u_t = u_{xx}, \tag{13.1}$$

когда нулевые начальные условия заданы на отрезке $\mathcal{D} = [a, b]$, а граничные условия при $x = a$ и $x = b$. Пусть требуется построить решение при $0 \leq t \leq T$, тогда область Ω будет прямоугольником.

Единственность



На плоскости (x, t) рассмотрим объединение начального отрезка $AB: t = 0, x \in [a, b] = \mathcal{D}$ и краевых отрезков $x = a, t \in [0, T]; x = b, t \in [0, T]$. Обозначим это объединение Π (по форме эта часть границы напоминает перевернутую букву Π). Обозначим буквой γ пунктирный отрезок $A'B': t = T, x \in [a, b]$. Вместе они составляют замкнутую кривую — границу области $\Omega: \Pi \cup \gamma = \partial\Omega$.

Теорема 13.1. *Принцип максимума для уравнения теплопроводности. Функция $u(x, t)$, удовлетворяющая уравнению теплопроводности (13.1), может достигать своего максимума только на Π .*

Предположим противное, пусть

$$M = \max_{\gamma \cup \Omega} u(x, t) = u(x_0, t_0) > m = \max_{\Pi} u(x, t).$$

Введем вспомогательную функцию

$$W(x, t) = u(x, t) + \frac{M - m}{2(b - a)^2} (x - x_0)^2$$

и оценим ее на Π :

$$W(x, t)|_{(x,t) \in \Pi} \leq m + \frac{M - m}{2} = \frac{M + m}{2}.$$

В оставшейся части границы и в самой области $\Omega \cup \gamma$ функция принимает значения, которые превышают максимум на границе, например, $W(x_0, t_0) = M$, значит ее максимум достигается где-то в объединении $\Omega \cup \gamma$. Пусть это происходит в точке (x_1, t_1) . Рассмотрим два случая

1. $(x_1, t_1) \in \Omega$. Тогда в точке максимума $W_t = 0$, а $W_{xx} \leq 0$, откуда $W_t - W_{xx} \geq 0$. С другой стороны, $W_t - W_{xx} = -(M - m)/(b - a)^2 < 0$. Мы пришли к противоречию.
2. $(x_1, t_1) \in \gamma$. $W_t \geq 0$, тогда тем более $W_t - W_{xx} \geq 0$. Снова приходим к противоречию.

Теперь, аналогично случаю эллиптических операторов, заменяя $u \rightarrow -u$, выводим принцип минимума. Из этих принципов следует, что решение однородного уравнения с нулевыми начальными и граничными условиями (на Π) тождественно равно нулю.

Замечание 13.1. Доказательство обобщается на случай нескольких пространственных переменных, если $(b - a)$ во вспомогательной функции заменить на диаметр d области \mathcal{D} . Гиперповерхность Π , на которой ставятся условия становится объединением начальной гиперповерхности и «боковых» границ области $\Omega: \Pi = \mathcal{D} \cup \partial\mathcal{D} \times \mathbb{R}_+$. Получается n -мерный цилиндр, к которому добавлено «дно».

Связь функций Грина первого и второго рода

Неоднородную краевую задачу для уравнения теплопроводности можно разбить на две полуоднородные. Для простоты будем рассматривать произвольные $x \in \mathbb{R}^n$, то

есть искать решение в области $\Omega = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+$, а начальное условие ставить в $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$. Тогда полная неоднородная задача

$$u_t = \Delta u + f(x, t), \quad u(x, 0) = g(x)$$

разбивается на две

$$v_t = \Delta v + f(x, t), \quad v(x, 0) = 0, \quad (13.2)$$

$$w_t = \Delta w, \quad w(x, 0) = g(x). \quad (13.3)$$

Сумма их решений $u = v + w$ есть решение исходной неоднородной задачи. Функция Грина первого рода, которая дает решение задачи (13.2), удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$G_t - \Delta G = \delta(x - x')\delta(t - t'), \quad G|_{t=0} = 0. \quad (13.4)$$

Решение задачи (13.2) дается интегралом по области Ω

$$v(x, t) = \int_{\Omega} G(x, t, x', t')f(x', t') dx' dt', \quad (13.5)$$

где интегрирование по всем переменным ведется в бесконечных пределах. Решение второй полуоднородной задачи (13.3) — задачи Коши для однородного уравнения теплопроводности — дается интегралом по начальной гиперповерхности $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$

$$w(x, t) = \int_{\mathcal{D}} G_S(x, x', t)g(x') dx'. \quad (13.6)$$

Можно вывести связь функций Грина первого и второго рода. Для этого перенесем начальное условие задачи (13.3) в правую часть

$$w_t = \Delta w + g(x)\delta(t), \quad w = 0, t < 0.$$

Тогда вторую полуоднородную задачу можно свести к первой, если приравнять ее решение, полученное по формуле (13.5), к интегралу (13.6):

$$w(x, t) = \int_{\Omega} G(x, t, x', t')g(x')\delta(t') dx' dt' = \int_{\mathcal{D}} G_S(x, x', t)g(x') dx'.$$

Мы получаем функцию Грина второго рода

$$G_S(x, x', t) = G(x, t, x', 0).$$

Функция G_S получается из функции Грина первого рода приравниванием к нулю переменной t' .

Формула Пуассона

Коэффициенты уравнения (13.4) не зависят от x, t , поэтому решение может зависеть только от разностей $x - x', t - t'$. Уравнение можно немного упростить, ограничившись сначала случаем $x' = t' = 0$. Получится

$$\frac{\partial G}{\partial t} - \Delta G = \delta(x)\delta(t).$$

По той же причине, т.е. благодаря постоянным коэффициентам (а значит и трансляционной инвариантности), уравнение упрощается с помощью преобразования Фурье

$$G_{k\omega} = \int G(x, t) e^{-i(kx - \omega t)} dx dt, \quad G(x, t) = \int G_{k\omega} e^{i(kx - \omega t)} \frac{dk}{(2\pi)^n} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (13.7)$$

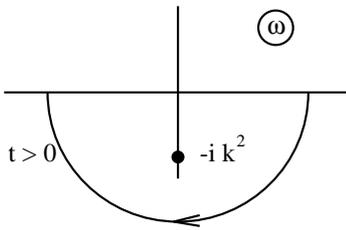
Здесь $x = (x_1, \dots, x_n)$ и $k = (k_1, \dots, k_n)$ — n -мерные векторы, а $kx = k_1x_1 + \dots + k_nx_n$ — скалярное произведение. Преобразование Фурье переводит дифференциальные операторы в умножение

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \quad \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow ik,$$

и тем самым диагонализует уравнение, т.е. превращает в алгебраическое, которое решается сразу

$$(-i\omega + k^2)G_{k\omega} = 1 \Rightarrow G_{k\omega} = \frac{1}{-i\omega + k^2}.$$

Обратное преобразование по ω даст функцию Грина в k -представлении



$$G_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega + k^2} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (13.8)$$

Интеграл по действительной оси в ω -плоскости можно превратить в контурный. Напомним, что *правило замыкания контура* определяется знаком действительной части показателя экспоненты. Надо подставить в обратное преобразование Фурье (13.8) $\omega = Re^{i\alpha}$ и определить в каком секторе изменения аргумента α интеграл по полуокружности исчезает при увеличении $R \rightarrow \infty$. При $t < 0$ контур замыкается в верхней полуплоскости, где подынтегральная функция не имеет полюсов. Поэтому интеграл по замкнутому контуру равен нулю. При $t > 0$ контур замыкается в нижней полуплоскости, поэтому интеграл равен вычету в полюсе $\omega = -ik^2$, взятому с противоположным знаком из-за отрицательного направления обхода. С помощью ступенчатой функции $\Theta(t)$ ответ можно записать в виде одной формулы:

$$G_k(t) = e^{-k^2 t} \Theta(t), \quad \Theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ 1, & t > 0. \end{cases}$$

Остается выполнить обратное преобразование по k

$$G(x, t) = \Theta(t) \int e^{ikx - k^2 t} \frac{dk}{(2\pi)^n}.$$

Конкретное значение интеграла зависит от размерности n . В декартовых координатах переменные разделяются и интеграл распадается в произведение n одинаковых однократных интегралов, которые легко берутся. Получается

$$G(x, t) = \frac{\Theta(t)}{(2\pi)^n} \left(\frac{\pi}{t}\right)^{n/2} e^{-x^2/4t}.$$

При $n = 1$ функция переходит в известное автомодельное решение уравнения теплопроводности с точечным начальным условием.

Остается восстановить штрихованные координаты заменой $x \rightarrow x - x', t \rightarrow t - t'$ и выписать ответы

$$G(x, t, x', t') = \frac{\Theta(t - t')}{[4\pi(t - t')]^{n/2}} \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4(t - t')}\right],$$

$$G_S(x, x', t) = \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4t}\right].$$

Во второй формуле можно не писать Θ -функцию, потому что заранее известно, что задача Коши ставится только для $t > 0$. Полученная функция Грина второго рода описывает расплывание начального условия в виде n -мерной δ -функции. Дисперсия распределения растет со временем линейно $\sigma^2(t) = 2t$, а нормировка сохраняется. Решение задачи Коши в виде интеграла

$$w(x, t) = \int \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4t}\right] g(x') \frac{dx'}{(4\pi t)^{n/2}}$$

называется *формулой Пуассона*.

13.2. Гиперболические операторы

Для примера рассмотрим неоднородное волновое уравнение, считая, что $c = 1$:

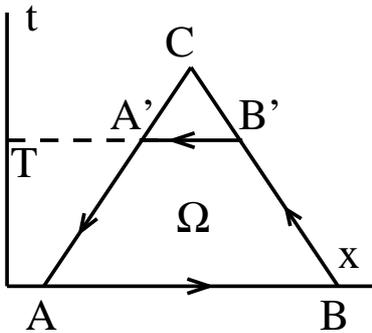
$$\square u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u = f(x, t).$$

Найдем, в какой области Ω решение задачи Коши (без краевых условий) единственно в случае одной пространственной переменной, а функцию Грина вычислим в случае трех пространственных переменных.

Единственность

Как и для параболического уравнения, начальные условия поставим на отрезке $AB : a \leq x \leq b$, а решение будем искать на конечных временах $0 < t < T$. Однородное волновое уравнение

$$\square v \equiv \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0.$$



Умножим уравнение на v_t , прибавим и отнимем $v_t v_x$. Если заметить, что получился интеграл от компоненты ротора, и воспользоваться теоремой Стокса, получим контурный интеграл второго рода

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} - \frac{\partial}{\partial x} (v_t v_x) \right) dx dt = \oint \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} dx + v_t v_x dt,$$

который должен обращаться в нуль. В качестве области Ω выберем трапецию, ребра которой — отрезки характеристик $x \pm t = \text{const}$, проходящих через концы A, B начального отрезка, нижнее основание — сам начальный отрезок AB , верхнее основание — отрезок $A'B'$, который получился при пересечении прямой $t = T$ и характеристик. Чтобы найти контурный интеграл, надо

спроектировать вектор $(v_t^2/2 + v_x^2/2, v_t v_x)$ на периметр, т.е. на вектор $ds = (dx, dt)$. На основаниях трапеции вектор $ds = (dx, 0)$ и интегрировать надо только первое слагаемое. Вдоль ребер трапеции $dx = \pm dt$ и интеграл второго рода по ds сводится к интегралу первого рода по dt . Учитывая направление интегрирования, указанное стрелками, получим

$$-\int_{A'}^{B'} \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} dx + \int_A^B \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} dx - \int_B^{B'} \left(\frac{v_t^2 + v_x^2}{2} - v_t v_x \right) dt + \int_{A'}^A \left(\frac{v_t^2 + v_x^2}{2} + v_t v_x \right) dt = 0.$$

Назовем *энергией* и обозначим буквой E интеграл

$$E = \int_A^B \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} dx, \quad E' = \int_{A'}^{B'} \frac{v_t^2 + v_x^2}{2} dx.$$

Тогда получится

$$E = E' + \int_0^T \frac{(v_t - v_x)^2}{2} dt + \int_0^T \frac{(v_t + v_x)^2}{2} dt.$$

Поскольку интегралы неотрицательно определены, получается неравенство $E \geq E'$. Значит, если $E = 0$, то и $E' = 0$. Мы показали, что уравнение с нулевым начальным условием имеет нулевое решение в трапеции Ω . Верхнее основание можно двигать вверх вплоть до C , точки пересечения характеристик. Значит решение неоднородной задачи единственно в характеристическом треугольнике ABC . Если начальное условие поставлено на всей оси, решение единственно в полуплоскости $t > 0$.

Связь функций Грина первого и второго рода

Вторая полуоднородная задача для волнового уравнения, задача Коши, содержит два начальных условия

$$\square u = 0, \quad u(\mathbf{r}, 0) = g(\mathbf{r}), \quad u_t(\mathbf{r}, 0) = h(\mathbf{r}). \quad (13.9)$$

Поэтому и функция Грина второго рода получается двухкомпонентная. Решение дается суммой двух интегралов по начальной поверхности $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$:

$$u(\mathbf{r}, t) = \int \left(G_S^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) g(\mathbf{r}') + G_S^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}') \right) d\mathbf{r}'. \quad (13.10)$$

Выведем формулу Грина для волнового уравнения, которая поможет нам установить связь между функциями Грина первого и второго рода. Возьмем решение u задачи (13.9) и функцию Грина первого рода, которая является решением задачи

$$\square G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad G|_{t=0} = 0, \quad G_t|_{t=0} = 0, \quad (13.11)$$

и найдем разность скалярных произведений

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}', t') &= (u, \square G) - (G, \square u) = \\ &= \int d\mathbf{r} dt [(u G_{tt} - G u_{tt}) - (u \Delta G - G \Delta u)] = \\ &= \int d\mathbf{r} dt \left[\frac{\partial}{\partial t} (u G_t - G u_t) - \nabla (u \nabla G - G \nabla u) \right] = \\ &= \int d\mathbf{r} \int dt \frac{\partial}{\partial t} (u G_t - G u_t) - \int dt \int d\mathbf{r} \operatorname{div} (u \nabla G - G \nabla u). \end{aligned}$$

Второй интеграл по объему от дивергенции преобразуется в поток через бесконечно удаленную поверхность

$$\oint (u \nabla G - G \nabla u) dS,$$

поэтому равен нулю. Первый интеграл по времени берется, но дает нуль на верхнем пределе $t \rightarrow \infty$, где $G, G_t \rightarrow 0$. Остается значение на нижнем пределе со знаком «минус»:

$$u(\mathbf{r}', t') = - \int dr (u G_t - G u_t)_{t=0}.$$

Сравнивая с общим выражением (13.9), найдем компоненты функции Грина второго рода

$$G_S^{(1)} = - \left. \frac{\partial G}{\partial t'} \right|_{t'=0}, \quad G_S^{(2)} = G|_{t'=0}. \quad (13.12)$$

Осталось найти функцию Грина первого рода, убывающую на бесконечности, которая является решением первой полуднородной задачи (13.11).

Запаздывающая функция Грина

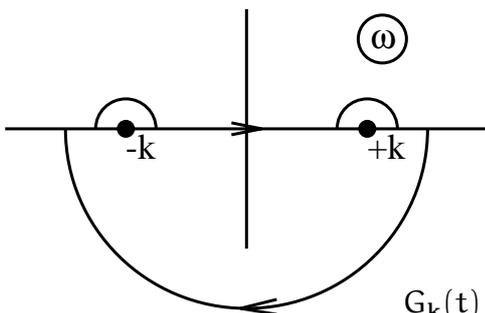
Ограничимся случаем $n = 3$ пространственных переменных, когда $\mathcal{D} = \mathbb{R}^3$ и положим $\mathbf{r}' = 0, t' = 0$. Для поиска убывающего на бесконечности решения можно выполнить преобразование Фурье (13.7) и получить

$$G_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{1}{-\omega^2 + k^2}.$$

Обратное преобразование Фурье по ω выражается интегралом

$$G_{\mathbf{k}}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i\omega t)}{k^2 - \omega^2} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

В отличие от уравнения теплопроводности, имеется трудность: полюсы подынтегрального выражения попали на контур интегрирования. Это означает, что интеграл расходится. Чтобы получить конечное выражение, надо сдвинуть контур с полюсов хотя бы в из окрестностях. Выбор контура называется *правилом обхода полюсов*. Каждый из полюсов в нашем случае можно обойти сверху или снизу, значит всего возможны четыре правила и нет никакого способа выбрать между ними, кроме физических соображений. Мы уже сталкивались с подобным примером, когда искали фундаментальное решение уравнения Гельмгольца. Без физических соображений нельзя было выбрать одну из двух функций G^+ или G^- .



В данном случае подходящим физическим соображением является принцип причинности. Нам надо найти такую функцию, которая обращается в нуль при $t < 0$. При $t < 0$ контур замыкается сверху. Чтобы получился нуль, надо и полюса обходить сверху. При $t > 0$ контур замыкается снизу, тогда интеграл равен сумме вычетов

$$G_{\mathbf{k}}(t) = -2\pi i \frac{\Theta(t)}{2\pi} \left(-\frac{e^{-ikt}}{2k} + \frac{e^{ikt}}{2k} \right).$$

Осталось выполнить обратное преобразование по k . Если перейти в сферическую систему координат с осью z вдоль вектора \mathbf{r} , то интегралы по полярному и азимутальному углам сразу возьмутся, а интегралы по k сложатся в один интеграл в бесконечных пределах

$$G(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Theta(t)}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{ikt} - e^{-ikt}) e^{ikr} dk = -\frac{\Theta(t)}{4\pi r} (\delta(r+t) - \delta(r-t)).$$

Первую из получившихся δ -функций можно не писать, потому что она никогда не работает. При $t < 0$, когда ее аргумент мог бы обратиться в нуль, вклад первого слагаемого все равно нулевой из-за Θ -функции.

Осталось восстановить в ответе штрихованные переменные

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{\Theta(t-t')}{4\pi R} \delta(R - (t-t')), \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'.$$

Функция, полученная с таким правилом обхода полюсов, называется *запаздывающей* функцией Грина. Именно запаздывающая функция используется в классической электродинамике. Решение неоднородного волнового уравнения выражается в виде 4-кратного интеграла, который благодаря δ -функции сводится к 3-кратному

$$u(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\Theta(t-t')\delta(R - (t-t'))}{R} f(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt' = \frac{1}{4\pi} \int f(\mathbf{r}', t-R) \frac{d\mathbf{r}'}{R}$$

и называется *запаздывающим потенциалом*. В ответ вошло значение правой части не в момент времени t , а в более ранний момент $t - R/c$. Запаздывание происходит на время, необходимое сигналу, чтобы дойти из точки \mathbf{r} в точку \mathbf{r}' .

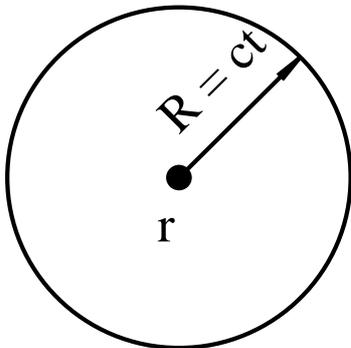
В частности, если $f(\mathbf{r}, t) = 4\pi\delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}(t))$, т.е. для точечного заряда, который движется по траектории $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}(t)$, интеграл берется и получается

$$u(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{R - \dot{\boldsymbol{\rho}}R},$$

который называется *потенциалом Лиенара — Вихерта*.

Пользуясь формулами (13.12), можно найти и компоненты функции Грина второго рода

$$G_S^{(1)} = \frac{1}{4\pi R} \frac{\partial}{\partial t} \delta(R - t), \quad G_S^{(2)} = \frac{1}{4\pi R} \delta(R - t).$$



Решение второй полуоднородной задачи выражается интегралом (13.10), который называется *формулой Кирхгофа*. Главное свойство этой формулы состоит в том, что решение в момент времени t выражается только через начальные условия на сфере радиуса $R = ct$, описанной вокруг точки наблюдения \mathbf{r} . Это свойство называется *принципом Гюйгенса — Френеля* и справедливо только в случае трех пространственных переменных.

Упражнение 13.1. Найдите функции Грина одномерного и двумерного волновых уравнений (формулы Даламбера и Пуассона, соответственно) и убедитесь, что для них принцип Гюйгенса — Френеля не выполняется.

Лекция 14

Резольвента

Ниже мы введем понятия дискретного и непрерывного спектра и спектрального разложения оператора. Затем мы покажем, как можно использовать технику построения функций Грина для решения простейших спектральных задач.

14.1. Дискретный и непрерывный спектр

В конечномерном линейном пространстве и количество собственных значений и собственных векторов конечно.

Пример 14.1. В пространстве \mathbb{C}^N задача на собственные значения для эрмитовой матрицы \hat{A} $\hat{A}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, где $\psi_n \in \mathbb{C}^N$ — вектор-столбец, а $\lambda_n \in \mathbb{R}$ — число, имеет N решений. Все они являются корнями характеристического уравнения $\det(\hat{A} - \lambda E) = 0$ степени N . Некоторые из собственных значений могут совпадать, тогда каждый корень надо считать столько раз, какова его кратность.

В бесконечномерном гильбертовом пространстве имеется уже счетное число собственных значений и собственных функций.

Пример 14.2. Пусть дифференциальный оператор

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$$

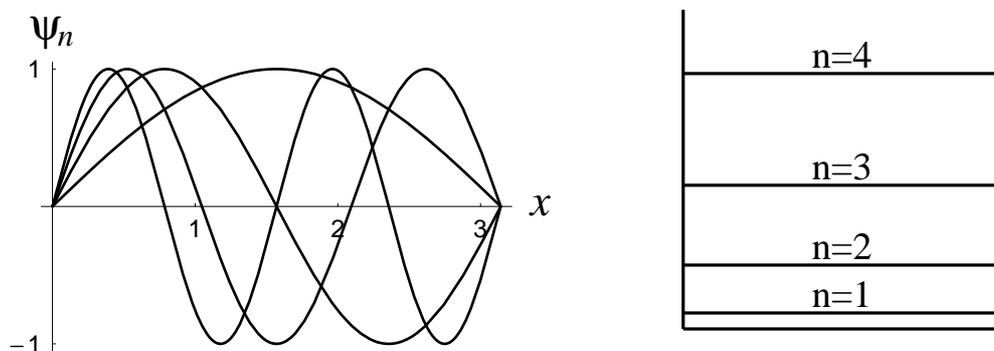


Рис. 14.1. Собственные функции ψ_n оператора \hat{A} из примера 14.2, удовлетворяющие нулевым граничным условиям на концах отрезка $[0, \pi]$: $n = 1, 2, 3, 4$. Номер моды равен количеству нулей на $[0, \pi]$. Справа показаны собственные значения — уровни энергии в прямоугольной яме с бесконечными стенками.

действует на пространстве функций, которые обращаются в нуль на концах отрезка $[0, l]$: $\psi(0) = \psi(l) = 0$. Нормированные собственные функции и собственные значения тогда равны

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \pi n \frac{x}{l}, \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{l^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Несколько функций показаны на рисунке 14.1. Такой спектр называют *дискретным* (или точечным) и обозначается σ_p .

Если область определения оператора некомпактна, то наряду с функциями дискретного спектра, появляются функции непрерывного спектра.

Пример 14.3. Попробуем найти собственные функции оператора

$$\hat{A} = -i \frac{d}{dx},$$

принадлежащие $L^2(-\infty, \infty)$. Это значит, что функции должны достаточно быстро убывать на бесконечности, чтобы интеграл от квадрата модуля функции сходился. Можно проверить, что $\psi_k = e^{ikx}$ удовлетворяет уравнению для собственных функций с собственным значением $k \in \mathbb{R}$. Однако такая функция не лежит в L^2 , интеграл от квадрата ее модуля расходится.

Среди функций пространства L^2 решений нашей спектральной задачи нет, но решения имеются среди функций, близких к ψ_k . Если умножить на весовую функцию $w(k) \in L^2$ и проинтегрировать:

$$\Psi(x) = \int_{\sigma_c} w(k) \psi_k(x) dk,$$

где $\sigma_c = \mathbb{R}$, то интеграл уже лежит в нужном пространстве $\Psi \in L^2$.

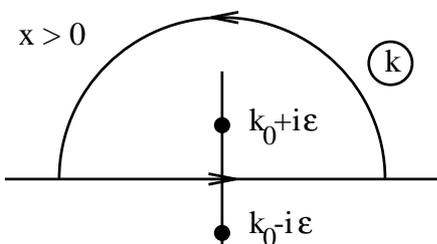
Если выбрать весовую функцию (волновой пакет ширины $\Delta k = \epsilon$), локализованную вблизи некоторого $k = k_0$, то функция Ψ близка к функции ψ_k в сколь угодно большой области пространства $\Delta x \sim 1/\epsilon \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$, но уже интегрируема вместе с квадратом. Такие собственные значения мы назовем *непрерывным спектром*, а множество таких значений будем обозначать σ_c . В данном примере $\sigma_c = \mathbb{R}$. Сами функции будем называть собственными функциями непрерывного спектра. Выберем, например,

$$w(k) = \frac{\epsilon/\pi}{(k - k_0)^2 + \epsilon^2}.$$

При малых положительных ϵ весовая функция переходит в $w(k) \rightarrow \delta(k - k_0)$. Пакет при $\epsilon \neq 0$ становится интегрируемым вместе с квадратом:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon/\pi}{(k - k_0)^2 + \epsilon^2} e^{ikx} dk = e^{ik_0 x - \epsilon|x|} \in L^2.$$

Интеграл вычисляется с помощью вычетов, причем правило замыкания контура зависит от знака x , поэтому в ответ входит $|x|$.



В некоторых книгах предлагается представлять себе непрерывный спектр оператора, как предел дискретного спектра из примера 14.2, когда размер ящика неограниченно возрастает $l \rightarrow \infty$. Расстояние между соседними собственными значениями $\lambda_{n+1} - \lambda_n =$

$\pi^2(2n+1)/l^2$ при фиксированном n стремится к нулю и говорят, что собственные числа сливаются в непрерывный спектр. Такое вычисление надо делать аккуратно и следить за порядком предельных переходов.

Поскольку функции непрерывного спектра не лежат в L^2 , их нормируют иначе

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \delta(k - k'),$$

это называется нормировкой на δ -функцию.

Вместе с функциями дискретного спектра функции непрерывного спектра эрмитова оператора образуют полную систему. Интегральное ядро можно разложить по этой системе.

$$\langle x | \hat{A} | x' \rangle = A(x, x') = \sum_n \lambda_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') + \sum_j \int_{\sigma_c} \lambda \psi_\lambda^{(j)}(x) \psi_\lambda^{(j)*}(x') d\lambda, \quad (14.1)$$

где первая сумма дает известное нам разложение оператора по проекторам на базисные векторы дискретного спектра σ_p , а вторая представляет собой интеграл по непрерывному спектру σ_c . Сумма по j учитывает вырождение. Если собственному числу λ принадлежит несколько функций $\psi_\lambda^{(j)}(x)$, то надо просуммировать по всем j . В первой сумме вырождение учитывается автоматически: если есть несколько слагаемых с одинаковыми λ_n , то все они входят в разложение. Формула (14.1) называется *спектральным разложением* оператора.

14.2. Резольвента дифференциального оператора

Определение 14.1. *Резольвентой* называется интегральное ядро оператора

$$\hat{R}_z = (z - \hat{A})^{-1}, \quad R_z(x, x') = \langle x | \hat{R}_z | x' \rangle,$$

где z — комплексный параметр.

Перечислим простейшие свойства резольвенты.

1. Резольвента есть функция Грина для задачи

$$(z - \hat{A}) u(x) = f(x).$$

Задача разрешима, если z не принадлежит спектру оператора \hat{A} . Такие значения $z \notin \sigma(\hat{A})$ называются *резольвентным множеством* оператора.

2. Собственные функции резольвенты те же самые, что и у оператора \hat{A} . Это свойство получается простым вычислением:

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi = \lambda\psi &\Rightarrow (z - \hat{A})\psi = (z - \lambda)\psi \Rightarrow \\ \hat{R}_z(z - \hat{A})\psi = \psi &= (z - \lambda)\hat{R}_z\psi \Rightarrow \hat{R}_z\psi = \frac{\psi}{z - \lambda}. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что если λ собственные значения оператора \hat{A} , то собственные значения оператора \hat{R} равны $1/(z - \lambda)$.

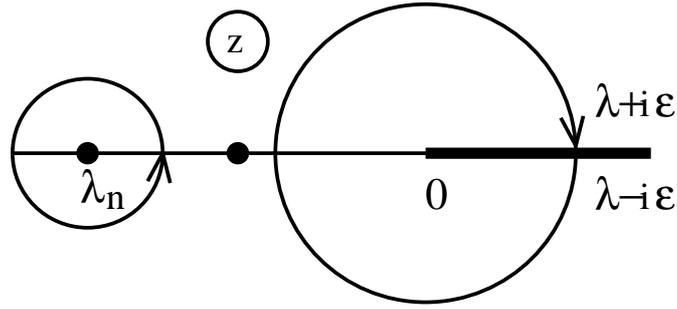


Рис. 14.2. Контур, по которому обходится полюс при вычислении вычета, и контур, по которому обходится разрез при расчете скачка ($\epsilon \rightarrow +0$).

3. Спектральное разложение (14.1) резольвенты имеет вид

$$R_z(x, x') = \sum_{\sigma_p} \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{z - \lambda_n} + \int_{\sigma_c} \frac{d\lambda}{z - \lambda} \sum_j \psi_\lambda^{(j)}(x)\psi_\lambda^{(j)*}(x'). \quad (14.2)$$

Данное свойство следует из предыдущего.

Из разложения (14.2) видно, что у резольвенты есть два типа особенностей: *полюсы* отдельных слагаемых суммы и *разрезы* в подынтегральном выражении. Полюсы отвечают дискретному спектру, а разрезы — непрерывному. Выведем формулы для вычета в полюсе и скачка резольвенты на разрезе.

Вычет в полюсе $z = \lambda_n$ вычисляется интегрированием (14.2) по z вдоль окружности малого радиуса, такого, чтобы внутрь попал только один полюс, и делением на $2\pi i$:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint R_z dz = \text{Res}_{z=\lambda_n} R_z(x, x') = \sum_j \psi_n^{(j)}(x)\psi_n^{(j)*}(x'), \quad (14.3)$$

где суммирование ведется до кратности вырождения λ_n , то есть по всем функциям, принадлежащим данному собственному значению.

Чтобы найти скачок на разрезе, сначала вычислим скачок подынтегральной функции, т.е. разность ее значений на нижнем и верхнем берегах разреза

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left(\frac{1}{\zeta - i\epsilon} - \frac{1}{\zeta + i\epsilon} \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{2i\epsilon}{\zeta^2 + \epsilon^2} = 2\pi i \delta(\zeta).$$

Интеграл от дельта-функции берется, откуда при $\zeta = z - \lambda$ мы найдем скачок интеграла из формулы (14.2).

$$\frac{1}{2\pi i} (R|_{z=\lambda-i0} - R|_{z=\lambda+i0}) = \sum_j \psi_\lambda^{(j)}(x)\psi_\lambda^{(j)*}(x'). \quad (14.4)$$

Обе формулы (14.3) и (14.4) получились похожими. Можно представлять себе скачок на разрезе как предел суммы вычетов. При неограниченном увеличении размера ящика полюсы сливаются в разрез. У эрмитова оператора все полюсы и разрезы расположены на вещественной оси.

Мы убедились, что в аналитических свойствах резольвенты содержится полная информация как о спектре (положение полюсов и разрезов), так и о собственных функциях дискретного и непрерывного спектра (вычеты в полюсах и скачки на разрезах). К сожалению, явно найти резольвенту удастся только в небольшом количестве специальных симметричных случаев. Два из них мы рассмотрим в следующем разделе.

14.3. Построение резольвенты

Разберем два примера.

$n=1$

Пусть оператор одномерный

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2},$$

а $x \in \hat{\mathbb{R}}$. Тогда по первому свойству резольвента удовлетворяет уравнению

$$\left(z + \frac{d^2}{dx^2}\right) R_z(x, x') = \delta(x - x').$$

Пользуясь трансляционной инвариантностью, положим $x' = 0$, и будем искать решение вида

$$R_z(x) = \begin{cases} B_1 e^{i\sqrt{z}x} + B_2 e^{-i\sqrt{z}x}, & x < 0; \\ C_1 e^{i\sqrt{z}x} + C_2 e^{-i\sqrt{z}x}, & x > 0. \end{cases}$$

Выберем арифметическую ветвь квадратного корня, на которой $\sqrt{1} = +1$.

Условия непрерывности функции и скачка производной дают пару уравнений на коэффициенты

$$B_1 + B_2 = C_1 + C_2, \quad (C_1 - C_2)i\sqrt{z} - (B_1 - B_2)i\sqrt{z} = 1.$$

Два других условия получим из граничных условий на бесконечности. Обозначим $z = k^2 + i\epsilon$, $\sqrt{z} = k + i\delta$, мы видим, что по определению арифметической ветви квадратного корня $\epsilon > 0 \Rightarrow \delta > 0$. Поэтому, чтобы функция $R_z(x)$ убывала при $x \rightarrow \pm\infty$, надо выбрать $B_1 = C_2 = 0$. Отсюда находим

$$C_1 = B_2 = \frac{1}{2i\sqrt{z}},$$

тогда искомая резольвента равна

$$R_z(x, x') = \frac{1}{2i\sqrt{z}} \exp(i\sqrt{z}|x - x'|). \quad (14.5)$$

Резольвента получилась аналитической функцией в плоскости z , разрезанной вдоль действительной положительной полуоси \mathbb{R}_+ . Таким образом, у исходного оператора непрерывный спектр расположен на множестве $\sigma_c = \mathbb{R}_+$. Скачок резольвенты при переходе с нижнего берега разреза на верхний в точке $z = k^2$ можно найти, представив $z = k^2 e^{i\alpha}$ и меняя аргумент α от 2π до 0 , т.е. двигаясь вдоль окружности рис. 14.2 радиуса $R = k^2$ по часовой стрелке. Если $\alpha = 2\pi$, то $\sqrt{z} = -k$, а если $\alpha = 0$, то $\sqrt{z} = +k$, откуда

$$R_{k^2-i0} - R_{k^2+i0} = -\frac{e^{-ik|x-x'|}}{2ik} - \frac{e^{ik|x-x'|}}{2ik} = -\frac{\cos k(x-x')}{ik} = \frac{i}{k}(\cos kx \cos kx' + \sin kx \sin kx').$$

Теперь разделим на $2\pi i$ и найдем две нормированные собственные функции

$$\psi_{k^2}^{(1)} = \frac{\cos kx}{\sqrt{2\pi k}}, \quad \psi_{k^2}^{(2)} = \frac{\sin kx}{\sqrt{2\pi k}}.$$

Собственное значение $\lambda = k^2$ непрерывного спектра оказалось двукратно вырожденным, как и следовало ожидать.

Упражнение 14.1. Убедитесь, что получившиеся собственные функции непрерывного спектра нормированы на δ -функцию. Проверьте полноту системы собственных функций.

n=3

Пусть оператор трехмерный

$$\hat{A} = -\Delta,$$

но нас интересует только изотропное решение (s -волна). Уравнение для резольвенты следует из первого свойства

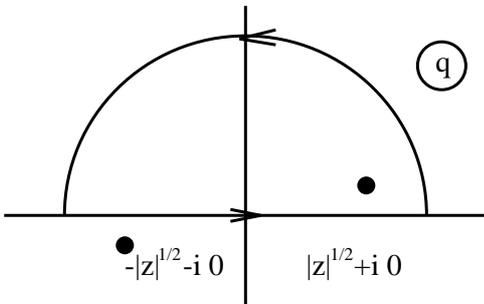
$$(z + \Delta)R_z = \delta(\mathbf{r}),$$

где мы уже положили $\mathbf{r}' = 0$. Преобразование Фурье позволяет сразу найти решение в q -представлении (мы обозначили волновой вектор буквой q)

$$R_{z,q} = \frac{1}{z - q^2}.$$

Выполняя обратное преобразование, мы можем сразу вычислить интегралы по углам и перейти к бесконечным пределам, как при вычислении запаздывающей функции Грина волнового уравнения,

$$R_z(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{iqr}}{z - q^2} \frac{dq}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{ir} \frac{q dq}{z - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iqr} dq}{z - q^2}.$$



Чтобы полюсы подынтегрального выражения $q_{1,2} = \pm\sqrt{z}$ не попали на контур интегрирования, нам надо считать, что z имеет малую положительную мнимую часть $z = |z| + i0$. Тогда правило замыкания контура определяется положительностью r , а резольвента получается в точности, как функция Грина G^+ уравнения Гельмгольца в виде расходящейся волны (12.4):

$$R_z(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{i\sqrt{z}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Если выбрать z положительным вещественным и прибавить малую отрицательную мнимую часть $z = |z| - i0$, то правый полюс окажется в нижней полуплоскости и не внесет вклада в интеграл, а вычет в левом полюсе даст сходящуюся волну G^- . Когда $z = |z|$ положительное вещественное число, оба полюса в q -плоскости лежат на контуре интегрирования и резольвента не определена. Значит разрез в z -плоскости надо провести по положительной действительной оси. Как и в предыдущем примере, резольвентное множество — комплексная плоскость, с разрезом вдоль \mathbb{R}_+ , а непрерывный спектр совпадает с разрезом $\sigma_c = \mathbb{R}_+$.

Чтобы найти изотропную часть, остается проинтегрировать по углам и разделить на 4π

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle R_z \rangle_o = \int R_z(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{d\omega}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta e^{i\sqrt{z}\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}}}{\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}}.$$

Получившийся интеграл вычисляется заменами $t = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta = \xi^2$:

$$g = \frac{1}{2} \int_{(r-r')^2}^{(r+r')^2} \frac{e^{i\sqrt{z}t}}{\sqrt{t}} \frac{dt}{2rr'} = \frac{1}{2rr'} \int_{|r-r'|}^{r+r'} e^{i\sqrt{z}\xi} d\xi$$

и равен

$$g = \frac{1}{rr'\sqrt{z}} \begin{cases} e^{i\sqrt{z}r} \sin \sqrt{z}r', & r < r'; \\ e^{i\sqrt{z}r'} \sin \sqrt{z}r, & r > r'. \end{cases}$$

Теперь можно найти скачок на разрезе при переходе с нижнего берега $z = k^2 - i\varepsilon$ на верхний $z = k^2 + i\varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow +0$):

$$g|_{k^2-i0} - g|_{k^2+i0} = \frac{e^{i\sqrt{z}r} \sin \sqrt{z}r'}{rr'\sqrt{z}} \Bigg|_{k^2+i0}^{k^2-i0} = 2i \frac{\sin kr \sin kr'}{krr'},$$

откуда можно найти нормированную собственную функцию

$$\psi_{k^2}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi k}} \frac{\sin kr}{r}.$$

Как и следовало ожидать, собственные функции непрерывного спектра выражаются через функции Бесселя с полуцелым индексом, простейшая из которых $J_{1/2}$ и получилась при $l = 0$.

Упражнение 14.2. Проверьте ортогональность собственных функций.

Приложение А

Свойства представлений

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

Теорема А.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

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

— задает положительно определенную квадратичную форму, потому что каждое слагаемое в отдельности задает положительно определенную квадратичную форму²:

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

Заметим, что для любого $g \in G$

$$\begin{aligned} D^\dagger(g)MD(g) &= \sum_{i=1}^N D^\dagger(g)D^\dagger(g_i)D(g_i)D(g) \\ &= \sum_{i=1}^N D^\dagger(g_i g)D(g_i g) = \sum_{i=1}^N D^\dagger(g_i)D(g_i) = M, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

где $g_i = g_i g$. 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 $(u, Mu) = (v, v)$, $v = Cu$, 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

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

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

²Положительно определенной квадратичную форму называют, когда $(u, Mu) > 0$ для любого вектора $u \neq 0$.

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

Отображение группы в фактор-группу $G \rightarrow G/H$ 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

$$G \rightarrow G/H \rightarrow D$$

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

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

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

то либо А – 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 А — 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 $\text{Ker } A$ линейного преобразования А. Умножим (А.2) справа на w :

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

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

Пусть теперь строк у матрицы А 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. $\nu D^{(1)}(g) \in \text{Ker } A$, и $\mathcal{L} = \text{Ker } A$ снова оказывается нетривиальным инвариантным подпространством относительно группы матриц $D^{(1)}(g)$.

3. \square 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 $w \in \text{Ker } A$: $D^{(1)}(g)Aw = AD^{(2)}(g)w = 0 \Rightarrow D^{(2)}(g)w \in \text{Ker } A$. Имеется нетривиальное подпространство $\text{Ker } A$, 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)

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

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

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

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

$$D_{ij}^{\alpha*}(g) = D_{ji}^\alpha(g^{-1}). \quad (\text{А.4})$$

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

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

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

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

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 (A.5) при $\alpha = \beta$:

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

Отсюда и следует соотношение ортогональности (A.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 $g_k = g_i g_j$:

$$R_{kj}(g_i) = T_{ij}^k,$$

где i, j — номера строки и столбца таблицы умножения, а k — номер элемента группы, стоящего на их пересечении (см. стр.15). Построим вспомогательную матрицу

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

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

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 $\alpha = 1, 2, \dots, K$ нумерует неприводимые представления, а нижний индекс $a = 1, 2, \dots, L$ — 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

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

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 $K \leq L$.

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_α , такой что для всех α

$$\sum_{\alpha=1}^L \lambda_\alpha p_\alpha \chi^\alpha(\sigma_a) = 0. \quad (\text{A.7})$$

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

$$M(\tilde{\chi}) = \sum_{\alpha=1}^L \lambda_\alpha \left(\sum_{g \in \sigma_\alpha} R(g) \right). \quad (\text{A.8})$$

Разложим регулярное представление в прямую сумму неприводимых

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

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:

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

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):

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

Из линейной зависимости столбцов (A.7) следует, что квадратная скобка обращается в нуль, тогда и $M(\tilde{\chi}) = 0$, хотя $\tilde{\chi} \neq 0$. Мы получили противоречие с пунктом 1. Следовательно предположение пункта 3 ложно и $K \geq L$. Но в пункте 2 мы показали, что $K \leq L$, 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 $\text{tr} R(1) = N$, а след остальных матриц

равен нулю, потому что ни одна строка не остается на месте. Поэтому характер $\chi_R = (N, 0, 0, \dots, 0)$. Следовательно, коэффициенты разложения в прямую сумму неприводимых представлений совпадают с размерностями неприводимых представлений:

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

Отсюда

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

Теперь вычислим характер единичного элемента

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

В заключение докажем простейшую классификационную теорему, сформулированную на стр.13. Будем действовать методом, изложенным в [3, 18].

Теорема А.9. *Дискретные подгруппы собственной группы вращений исчерпываются списком C_n, D_n, T, O, Y .*

Элементы точечной группы G , описывающей симметрию молекулы, — это оси n -го порядка. Если ограничиться подгруппами $SO(3)$, 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 $N = |G|$:

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

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 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

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

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

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

Остается решить (А.11) в целых числах. Правая часть уравнения может содержать только два или три слагаемых, потому что $N, n_k \geq 2$. 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 $n_i \geq 3$, 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 $n_1 \geq n_2 \geq n_3$. Тогда $n_2 \leq 3$, 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.1.

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.

Литература

- [1] И. В. Колоколов, Е. А. Кузнецов, А. И. Мильштейн, Е. В. Подивилов, А. И. Черных, Д. А. Шапиро, Е. Г. Шапиро, *Задачи по математическим методам физики*, Эдиториал URSS, Москва, 2000, [Изд.4, испр. М.: Эдиториал URSS, 2009].
- [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, Изд. 4е*, Наука, Москва, 1989.
- [3] М. И. Петрашень, Е. А. Трифонов, *Применения теории групп в квантовой механике*, Наука, Москва, 1967, [Изд. второе.- М. УРСС, 1999, 278 с.].
- [4] А. Мессиа, *Квантовая механика, в 2 т.*, Наука, Москва, 1979.
- [5] Г. Я. Любарский, *Теория групп и ее применение к физике*, ГИФМЛ, Москва, 1958.
- [6] Дж. Мэтьюз, Д. Уокер, *Математические методы в физике*, Атомиздат, Москва, 1972.
- [7] Дж. Эллиот, П. Добер, *Симметрия в физике, в 2-х т.*, Мир, Москва, 1983.
- [8] С. Банавантам, Т. Венкатарайуду, *Теория групп и ее приложения к физическим проблемам*, Editorial URSS, Москва, 2006.
- [9] Е. Вигнер, *Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров*, ИЛ, Москва, 1961.
- [10] В. Хейне, *Теория групп в квантовой механике*, Изд. иностранной литературы, Москва, 1963.
- [11] М. Хамермеш, *Теория групп и ее применение к физическим проблемам*, Мир, Москва, 1966.
- [12] Ю. Б. Румер, А. И. Фет, *Теория унитарной симметрии*, Наука, Москва, 1970.
- [13] Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Наука, Москва, 1986.
- [14] А. В. Буренин, *Симметрия квантовой внутримолекулярной динамики*, ИПФ РАН, Нижний Новгород, 2006.
- [15] Б. Л. ван дер Варден, *Алгебра*, Наука, Москва, 1976.
- [16] М. Холл, *Теория групп*, ИЛ, Москва, 1962.
- [17] Ч. Кэртис, И. Райнер, *Теория представлений конечных групп и ассоциативных алгебр*, Наука, Москва, 1969.

- [18] В. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко, *Современная геометрия*, Наука, Москва, 1979.
- [19] Р. Рихтмайер, *Принципы современной математической физики. Т.2*, Мир, Москва, 1984.
- [20] Д. П. Желобенко, А. И. Штерн, *Представления групп Ли*, Наука, Москва, 1983.
- [21] А. Барут, Р. Рончка, *Теория представлений групп и ее приложения. В 2-х томах.*, Мир, Москва, 1980.
- [22] А. А. Кириллов, *Элементы теории представлений*, Наука, Москва, 1978.
- [23] Д. Горенштейн, *Конечные простые группы*, Мир, Москва, 1986.
- [24] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика, Изд. 4е*, Наука, Москва, 1988.
- [25] Б. Шутц, *Геометрические методы математической физики*, Платон, Волгоград, 1995.
- [26] В. Г. Болтянский, В. А. Ефремович, *Наглядная топология*, Наука, Москва, 1982.
- [27] С. К. Годунов, Т. Ю. Михайлова, *Представления группы вращений и сферические функции*, Научная книга, Новосибирск, 1998.
- [28] П. Ланкастер, *Теория матриц*, Наука, Москва, 1982.
- [29] П. Дирак, *Принципы квантовой механики*, Наука, Москва, 1979.
- [30] А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин, *Элементы теории функций и функционального анализа*, Наука, Москва, 1972.
- [31] Л. В. Канторович, Г. П. Акилов, *Функциональный анализ*, Мир, Москва, 1984.
- [32] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики, в 4-х тт.*, Мир, Москва, 1977.
- [33] Ф. М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики, в 2 т.*, ИЛ, Москва, 1958.
- [34] С. Г. Михлин, *Курс математической физики*, Наука, Москва, 1968.
- [35] С. Л. Соболев, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва, 1966.
- [36] С. К. Годунов, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва, 1971.
- [37] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяния, реакции, распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва, 1971.
- [38] З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике. Т.1.*, Мир, Москва, 1974.
- [39] М. А. Лаврентьев, В. В. Шабат, *Методы теории функций комплексного переменного*, Наука, Москва, 1987.

Предметный указатель

- алгебра
 - Ли, 36
 - группы Ли, 36
 - угловых моментов, 42
- альтернатива Фредгольма, 72
- билинейная форма, 57
- генераторы, 37
- гильбертово пространство, 69
- гомоморфизм, 6
- группа
 - абелева, 6
 - абстрактная, 6
 - диздра, 7
 - конечная, 4
 - Ли, 32
 - простая, 13
 - пространственная, 5
 - точечная, 4
 - треугольника, 7
 - циклическая, 7
- группа Ли, 40
 - $O(3)$, 40
 - $O(n)$, 39
 - $SO(3)$, 33, 44
 - $SU(2)$, 42, 44
 - $U(n)$, 41
 - матричная, 32
- группы
 - порядок, 4
 - размерность, 5
- задача
 - Дирихле, 78
 - Коши, 88
 - Неймана, 78
 - неоднородная, 69
 - полуоднородная, 69
 - смешанная краевая, 88
- зеркальная плоскость, 5
- изоморфизм, 6
- инвариантное подпространство, 60, 104
- интеграл Дюамеля, 72
- Клебша — Гордана
 - коэффициенты, 55
 - разложение, 55
- классы
 - смежные, 10
 - сопряженных элементов, 14
- ковектор, 57
- матрица
 - конечных поворотов, 51
 - скалярная, 16, 64, 105
- матрицы Паули, 40
- многообразии, 31
 - компактное, 31
 - односвязное, 31
 - связное, 31
- накрытие, 44
- нормировка на δ -функцию, 98
- нулевые моды, 27
- оператор
 - Гельмгольца, 85
 - Казимира, 46
 - повышающий, 47
 - сопряженный, 70
 - условно обратный, 76
 - Штурма — Лиувилля, 70
- ось
 - двухсторонняя, 14
 - зеркально-поворотная, 5
 - порядка n , 5
- параметризация группы, 32
- подгруппа, 4
 - инвариантная, 11
 - однопараметрическая, 39
- потенциал
 - двойного слоя, 84
 - запаздывающий, 95

- Лиенара — Вихерта, 95
- объемного заряда, 84
- простого слоя, 84
- правило
 - замыкания контура, 91
 - обхода полюсов, 94
 - отбора, 65
- представление, 15
 - векторное, 50
 - единичное, 15
 - исходное, 25
 - колебательное, 27
 - неприводимое, 16
 - приводимое, 16
 - просто приводимое, 30
 - регулярное, 15, 106
 - скалярное, 50
 - спинорное, 50
 - тензорное, 50, 59
 - точное, 15
 - фундаментальное, 50
- принцип
 - Гюйгенса — Френеля, 95
 - причинности, 94
- прямая сумма представлений, 16
- прямое произведение
 - базисов, 53
 - матриц, 53
 - представлений, 53
- размерность представления, 15
- резольвента, 98
- резольвентное множество, 98
- резольвенты
 - полюс, 99
 - разрез, 99
- симметрии
 - группа, 4
 - элементы, 4
- скалярное произведение, 69
- скобка Ли, 36
- спектр
 - дискретный, 97
 - непрерывный, 97
- спектральное разложение, 98
- структурные константы, 37
- тензор
 - антисимметричный, 60
 - инвариантный, 63
 - ковариантный, 57
 - контравариантный, 57
 - симметричный, 60
- углы Эйлера, 51
- усреднение по группе, 19
- фактор-группа, 11
- формула
 - Грина, 82
 - Кирхгофа, 95
 - Пуассона, 92
- фундаментальное решение, 72, 73
- функция Грина, 71
 - второго рода, 82
 - запаздывающая, 95
 - модифицированная, 76
 - обобщенная, 76
 - первого рода, 71
- функция умножения, 32
- характер представления, 18
- эквивалентные представления, 15
- Юнга
 - антисимметризатор, 60
 - симметризатор, 60