ВЫСШЕЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

В. А. АРТАМОНОВ, Ю. Л. СЛОВОХОТОВ

ГРУППЫ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ В ФИЗИКЕ, ХИМИИ, КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Рекомендовано
УМО по классическому университетскому образованию
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки ВПО 020900 «Химия, физика и механика материалов»

Москва
ACADEMA
2005

УДК 512.54(075.8)
ББК 22.144я73
А86

Рецензенты:
зав. кафедрой высшей алгебры и теории чисел, д-р физ.-мат. наук, профессор Санкт-Петербургского государственного университета *А. В. Яковлев*;
д-р хим. наук, профессор Санкт-Петербургского государственного университета *Д. В. Корольков*

Артамонов В. А.

А86 Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии: Учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. А. Артамонов, Ю. Л. Словохотов. — М.: Издательский центр «Академия», 2005. — 512 с.

ISBN 5-7695-2137-6

Систематически изложена теория групп, рассмотрены ее физико-химические приложения. Представлены основные групповые конструкции, теория конечно порожденных абелевых и кристаллографических групп, основы теории представлений конечных групп, линейные группы и их алгебры Ли. Кратко рассмотрены квазикристаллы, ренормгруппа, алгебры Хопфа и топологические группы. Обсуждаются соотношения симметрии в механике, молекулярной спектроскопии, физике твердого тела, а также в теории атомов, ядер и элементарных частиц.

Для студентов естественно-научных специальностей высших учебных заведений. Может быть полезен аспирантам и научным работникам.

УДК 512.54(075.8)
ББК 22.144я73

Оригинал-макет данного издания является собственностью Издательского центра «Академия», и его воспроизведение любым способом без согласия правообладателя запрещается

© Артамонов В. А., Словохотов Ю. Л., 2005
© Образовательно-издательский центр «Академия», 2005
ISBN 5-7695-2137-6
© Оформление. Издательский центр «Академия», 2005

ПРЕДИСЛОВИЕ

Проникновение математических методов в научные исследования, по-видимому, является безальтернативным направлением развития естествознания. Ряд фундаментальных физических характеристик материи, таких как координата, масса, импульс, энергия, можно представить в виде непрерывных переменных величин, связанных дифференциальными уравнениями. Этот подход развит в очень многих научных дисциплинах, в том числе за пределами собственно физики («энергия связи», «координата реакции», «денежная масса» и др.). Но столь же фундаментальное и интуитивно общепринятое понятие симметрии физической системы нельзя выразить только через непрерывные переменные: для ее описания требуется алгебра. Как аналитический, так и алгебраический формализм широко распространены в естественных науках и являются взаимно дополняющими.

В этой книге изложены основы математической теории групп, составляющей суть алгебраического описания симметрии и всего круга связанных с ней явлений. Она ориентирована на лиц, нуждающихся в теоретико-групповом аппарате для решения прикладных физических задач и имеющих начальную общую подготовку в объеме двух курсов естественных факультетов университетов. В содержании книги учтен опыт преподавания авторов на факультете наук о материалах МГУ им. М. В. Ломоносова.

Приступая к изучению теории групп, студенту желательно преодолеть изначальное «бытовое» представление о симметричной фигуре или орнаменте. Геометрический орнамент, в обычной ситуации «привязанный» к многочисленным ориентирам в пространстве, т. е. имеющий верх, низ, правую и левую стороны, допускающий нумерацию и т. д., создает подспудное представление о симметрии как о дополнительном усложнении рисунка. Между тем симметрически зависимые части любого отдельного объекта неразличимы, и почти все применения групп в естествознании связаны с радикальным упрощением сложных систем.

Кроме того, наши интуитивные представления о симметрии провоцируют ее буквальное толкование («молекула бензола — это ее шестикратно умноженный фрагмент CH»), отчего, напри-

мер, химику бывает трудно принять нетривиальные результаты теоретико-группового анализа молекулярных колебаний того же бензола. Но помимо знакомых многим читателям поворотов и отражений, к операциям симметрии могут относиться перестановки и сдвиги, переходы между инерциальными системами отсчета, изменения масштаба и перенормировки, инверсия времени, замена частиц античастицами и др. Для того чтобы все эти необычные преобразования делали интересующую нас систему не сложнее, а проще (т. е. понятнее), необходимо узнать, как устроено множество *любых* преобразований симметрии какого-либо объекта, а в самом общем случае — абстрактное математическое множество, элементы которого взаимосвязаны так же, как последовательно выполняемые операции симметрии.

Иными словами, для плодотворного использования симметрии надо знать основные алгебраические соотношения теории групп и представлять, как и зачем они применяются в реальных системах.

Симметрия физической системы основана на идентичности ее определенных составных частей. Во многих случаях эта идентичность соблюдается лишь приближенно в рамках некоторой модели. Однако модельная симметрия сильно упрощает описание, позволяя найти «почти инвариантные» параметры системы алгебраическими методами, не решая сложных дифференциальных уравнений. А наиболее прямой путь к общему алгоритму построения правильных моделей для реальных систем — это усвоение абстрактного теоретико-группового аппарата.

Методам простого решения сложной задачи посвящено большинство современных приложений групп. На использовании симметрии основаны многие физические теории и целые научные дисциплины — такие как атомная физика или физика твердого тела. Знание теории групп помогает воспринять фундаментальные физические представления, которые во многих естественных науках еще нередко вводятся как постулаты. Поэтому даже скромные усилия, затраченные на изучение абстрактных математических конструкций, быстро окупаются.

По использованию групп в естественных науках имеется обширная литература. Однако авторами большинства публикаций являются специалисты в области либо физики (или химии), либо математики. Это часто приводит к несколько асимметричному изложению материала, прикладные аспекты которого бывают представлены не очень равномерно или выборочно. Ситуация осложняется еще и тем, что в разных областях приложения групп — кристаллографии, химии, спектроскопии, ядерной физике, квантовой теории поля и т. д. — нередко используется

собственная терминология и приняты обозначения, не всегда переносимые в смежные дисциплины.

В настоящей книге авторы пытались соединить разные точки зрения на представленный теоретико-групповой формализм и рассмотреть его применения по возможности шире. Мы стремились сделать материал максимально доступным для нематематиков, сохраняя при этом строгость формулировок и выводов. Основная трудность при изложении для такой аудитории — совмещение логики дисциплины с актуальными примерами, взятыми преимущественно из физики и некоторых областей химии.

В первых четырех главах книги рассмотрены основные теоретико-групповые понятия и соотношения, теория конечно порожденных абелевых групп, классификация кристаллографических групп, основы теории представлений конечных групп, включая теорию характеров; приведены некоторые сведения о теории линейных групп и алгебр Ли. С учетом вероятных областей интересов читателей математические соотношения, введенные в этих главах, проиллюстрированы описанием симметрий молекул и кристаллов. Пятая глава посвящена традиционным приложениям теории групп в физике и химии. В шестой главе кратко представлены некоторые современные вопросы и приложения — в том числе квазикристаллы, ренормгруппа и алгебры Хопфа. В последней, седьмой главе приведены без доказательств основные сведения из линейной алгебры, используемые в книге.

Авторы надеются, что эта книга будет полезна студентам, аспирантам и научным работникам естественно-научных специальностей. Не исключено, что представленный материал поможет некоторым читателям понять, какие разделы математики необходимы для приложений, и послужит стимулом для их дальнейшего изучения. Возможно, книга будет также интересна и математикам, желающим узнать о практическом применении хорошо знакомых алгебраических конструкций.

Авторы признательны всем коллегам, способствовавшим созданию данной книги. Мы выражаем особую благодарность И. В. Архангельскому, Э. Б. Винбергу, Я. В. Зубавичусу, Б. В. Локшину, Е. В. Майкову, И. С. Неретину, К. А. Потехину, Ю. Г. Рудому, Ю. П. Соловьеву, Д. А. Тимашеву, И. А. Чубарову за полезное обсуждение и ценные замечания. При подготовке рукописи нам очень помогло внимание и содействие академика РАН Ю. Д. Третьякова.

ГЛАВА 1

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ГРУПП

Сформулированы основные понятия и введены важнейшие конструкции теории групп. Приведен ряд важных примеров конечных групп, групп симметрий фигур, групп преобразований линейных пространств и групп матриц, которые используют для приложений групп в химии и физике. Представлен математический аппарат, применяемый и развиваемый в последующих главах. В компактной и вместе с тем в полной и доступной форме изложены все необходимые математические результаты, приведены полностью их доказательства.

1.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРУППЫ

Начнем изложение материала с определения группы — основного математического объекта, рассматриваемого в этой книге.

О п р е д е л е н и е 1.1. Будем говорить, что на множестве G задана *бинарная операция умножения*, если каждой паре элементов x, $y \in G$ сопоставлен третий элемент $xy \in G$, называемый их *произведением*. Множество G с бинарной операцией умножения xy называется *группой*, если выполняются следующие условия:

1) умножение *ассоциативно*, т. е. $(xy)z = x(yz)$ для всех $x, y, z \in G$;

2) существует такой элемент $1 \in G$, называемый *единицей* G, что $x1 = 1x = x$ для всех $x \in G$;

3) для любого элемента $x \in G$ найдется такой элемент x^{-1}, называемый *обратным* к x, что $xx^{-1} = x^{-1}x = 1$.

Порядком группы G называют число $|G|$ элементов в G. Существуют группы как конечного, так и бесконечного порядка. Элементы x, y из группы G *коммутируют* (являются *перестановочными*), если $xy = yx$. Группа G *коммутативная*, или *абелева*, если любые два ее элемента являются перестановочными.

Прежде чем привести примеры групп, отметим ряд простейших их свойств, непосредственно вытекающих из изложенного выше определения.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.1. Единичный элемент в группе единственный. Обратный элемент x^{-1} для каждого элемента $x \in G$ определен однозначно. Кроме того, если $x \in G$, то $(x^{-1})^{-1} = x$.

Доказательство. Предположим, что в группе имеются два единичных элемента 1, $1'$. Так как элемент 1 единичный, то $11' = 1'$ по условию 2 из определения 1.1. Но элемент $1'$ также единичный и $11' = 1$ по тому же свойству. Следовательно $1 = 1'$.

Предположим теперь, что некоторый элемент $x \in G$ имеет два обратных элемента y, z. Тогда $(yx)z = 1z = z$ условию 3 того же определения. Но в силу условия 1 (свойства ассоциативности) получаем, что $(yx)z = y(xz) = y1 = y$. Отсюда $z = y$.

Отметим, что из свойства ассоциативности умножения в группе следует, что произведение любого числа элементов $x_1 \cdots x_n$ в группе не зависит от расстановки скобок в этом произведении. Это легко проверяется индукцией по числу множителей n. Однако порядок множителей в произведении $x_1 \cdots x_n$ в неабелевой группе существен.

Приведем теперь ряд примеров важных групп, для которых имеются стандартные обозначения. При этом напомним известные факты о свойствах элементов этих групп, необходимые для понимания дальнейшего материала.

Группа $\mathbb{C}^*$. Множество $\mathbb{C}^*$ состоит из всех ненулевых комплексных чисел, а в качестве операции умножения берется обычное произведение комплексных чисел. В этой группе бесконечного порядка единицей является комплексное число 1, а обратным элементом z^{-1} к числу z — обычное обратное комплексное число $1/z$. Напомним, что если число z представлено в алгебраической форме: $z = a + bi$, где a, b — вещественные числа, то $z^{-1} = \dfrac{a - bi}{a^2 + b^2}$. Если же число z представлено в тригонометрической форме: $z = r\exp(i\psi)$, где $r = |z|$, $\psi \in \mathbb{R}$, то $z^{-1} = \dfrac{1}{r}\exp(-i\psi) = \dfrac{\overline{z}}{|z|^2}$, где $\overline{z}$ — комплексно сопряженное число к z. Нетрудно показать, что все аксиомы группы из определения 1.1 выполнены. Кроме того, эта группа абелева.

Группа $\mathbb{R}^*$. Эта группа состоит из всех ненулевых вещественных чисел с операцией умножения. Единицей в этой группе является вещественное число 1, а обратным элементом z^{-1} к числу z — обычное обратное вещественное число $1/z$. Группа $\mathbb{R}^*$ является абелевой.

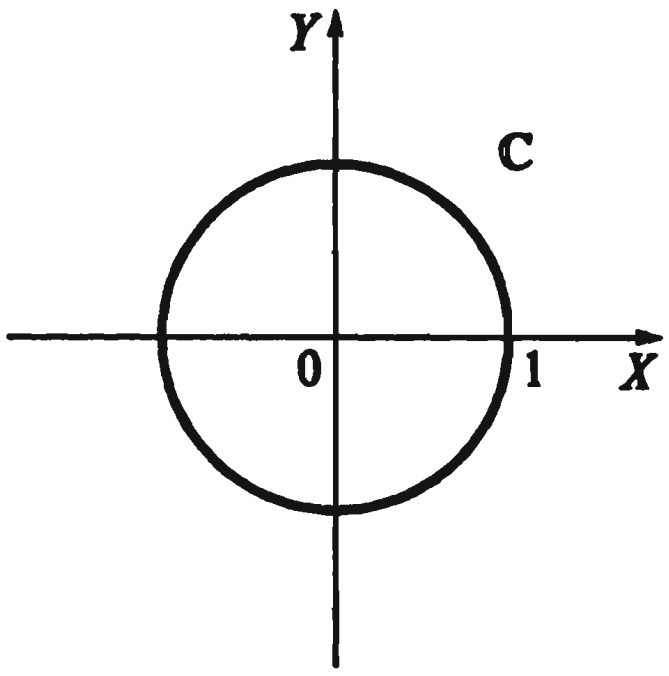


Рис. 1.1. Группа **U**

Группа целых чисел $\mathbb{Z}$. Элементами этой группы являются все целые числа с операцией сложения. Роль «единичного» элемента в этой группе играет 0, а роль обратного к числу z — противоположное число $-z$. Эта группа также является абелевой.

Группа U. Элементами группы **U** являются комплексные числа, модуль которых равен 1. В качестве групповой операции берется обычное произведение комплексных чисел. Каждый элемент $z \in \mathbf{U}$ можно представить в форме:

$$z = \exp(i\phi) \in \mathbf{U}, \quad \phi \in \mathbb{R}. \tag{1.1}$$

Таким образом, если $z_1 = \exp(i\phi)$, и $z_2 = \exp(i\psi)$, где $\phi, \psi \in \mathbb{R}$, то $z_1 z_2 = \exp(i(\phi+\psi)) \in \mathbf{U}$. Единицей в этой группе является вещественное число 1, а обратным элементом — число z^{-1}. Если z из (1.1), то $z^{-1} = \exp(-i\phi) = \bar{z} \in \mathbf{U}$. Все эти числа расположены в комплексной плоскости на окружности радиуса 1 с центром в нуле. Умножение в **U** коммутативно, и поэтому эта группа абелева (рис. 1.1).

Группа $\mathbf{U}_n$. Пусть n — натуральное число. Группа $\mathbf{U}_n$ состоит из комплексных корней степени n из 1 с операцией умножения. Каждый элемент этой конечной группы как комплексное число имеет вид

$$z = \exp(2k\pi i/n), \quad k = 0, \ldots, n-1. \tag{1.2}$$

При этом

$$\exp(2k\pi i/n)\exp(2m\pi i/n) = \exp(2r\pi i/n) \in \mathbf{U}_n,$$

где r равен остатку от деления $k+m$ на n. Единицей в этой группе является число 1. Если $z \in \mathbf{U}_n$ имеет вид (1.2), то

$$z^{-1} = \exp(2(n-k)\pi i/n).$$

На комплексной плоскости все эти корни расположены в вершинах правильного n-угольника, вписанного в окружность радиусом 1 с центром в нуле, причем число 1 является одной из вершин n-угольника. Как и в предыдущих примерах, группа $\mathbf{U}_n$ (рис. 1.2) абелева.

Множества действительных и комплексных чисел, как и любые составленные из них группы, являются подмножествами множества матриц. Квадратные матрицы размера $n \times n$ при условии существования для каждой из них обратной матрицы образуют самую общую из всех рассматриваемых нами групп.

Группы $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$. Элементами группы $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ (либо $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$) являются все невырожденные квадратные комплексные (соответственно вещественные) матрицы размера n. Напомним, что невырожденность матрицы A означает, что ее определитель ($\det A$) отличен от нуля. Групповой операцией в обеих группах является умножение матриц. Это определение корректно, так как если $A, B \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, то $AB \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, поскольку $\det(AB) = \det A \det B \neq 0$. Соответственно если $A, B \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$, то и $AB \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$.

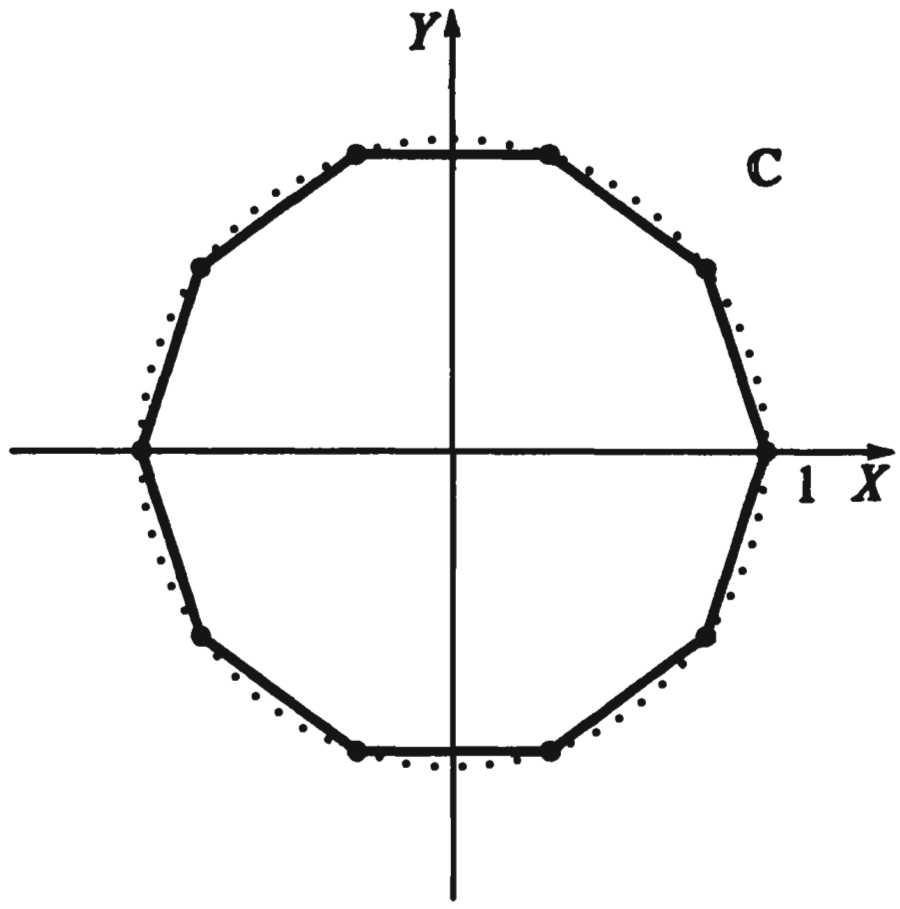


Рис. 1.2. Группа $\mathbf{U}_{10}$

Единицей в обеих группах является единичная матрица размера n:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.3}$$

Обратным элементом к матрице $A \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ (соответственно к $A \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$) является обратная матрица A^{-1}. Она существует, так как $\det A \neq 0$. При этом матрица A^{-1} тоже невырождена, поскольку $\det(A^{-1}) = 1/\det A \neq 0$. Построенные группы матриц $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$ при $n \geqslant 2$ уже неабелевы; например:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим некоторые подмножества групп $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$.

Группы $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})$. Элементами этих групп являются все комплексные (соответственно вещественные) квадратные матрицы размера n с определителем, равным 1. В качестве операции берется умножение матриц. Отметим, что умножение в этих группах определено корректно: если определители двух матриц A, B равны 1, то $\det(AB) = \det A \det B = 1$. Единичным элементом в обеих группах является единичная матрица E (см. (1.3))

Обратным элементом к матрице A из этих групп является обратная матрица A^{-1}, которая также лежит в указанных группах, поскольку $\det(A^{-1}) = 1/\det A = 1$.

Отметим, что обе группы неабелевы при $n \geqslant 2$ (см. приведенный выше пример).

Группы $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$, $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$, $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$. Элементами группы $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ являются все унитарные комплексные матрицы размера n, т. е. такие матрицы A, что транспонированная и комплексно сопряженная матрица ${}^t\bar{A}$ совпадает с обратной матрицей A^{-1}. В силу соотношения (7.3) это эквивалентно тому, что замена столбца переменных

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

на столбец

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = AX = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + \cdots + a_{nn}y_n \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

сохраняет квадратичную форму $|x_1|^2 + \cdots + |x_n|^2$. Другими словами, выполнено равенство $|x_1|^2 + \cdots + |x_n|^2 = |y_1|^2 + \cdots + |y_n|^2$.

В качестве операции берется умножение матриц. Несложная проверка показывает, что произведение унитарных матриц снова унитарно, т. е. операция умножения в $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ определена корректно. Единичным элементом в $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ является единичная матрица (1.3). Кроме того, обратным элементом к унитарной матрице A является обратная матрица A^{-1}, которая также унитарна.

Отметим важное свойство унитарных матриц: определитель каждой унитарной матрицы является комплексным числом, по модулю равным 1.

Элементами группы $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ (либо группы $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$) являются все ортогональные вещественные (соответственно комплексные) матрицы A размера n, т. е. матрицы A с условием ${}^tA = A^{-1}$. В силу (7.2) это эквивалентно тому, что замена столбца переменных (1.4) на столбец (1.5) сохраняет квадратичную форму $x_1^2 + \cdots + x_n^2$. Это означает, что выполнено равенство $x_1^2 + \cdots + x_n^2 = y_1^2 + \cdots + y_n^2$.

В качестве операции снова берется операция умножения матриц. Единичным элементом в $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ и в $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$ является еди-

ничная матрица (1.3), а обратным — обратная матрица. Несложная проверка показывает, что при этих операциях умножения и перехода к обратной матрице снова получаем ортогональные матрицы. Отметим, что определитель ортогональной матрицы равен ± 1.

Матрицами $\mathbb{O}(n, \mathbb{R})$ задают ортогональные преобразования n-мерного пространства, сохраняющие его метрику.

Подчеркнем, что при $n \geqslant 2$ обе группы $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$, $\mathbb{O}(n, \mathbb{R})$ неабелевы. Это показывает следующий пример:

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \neq$$

$$\neq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Группы $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$, $\mathrm{SO}(n, \mathbb{R})$, $\mathrm{SO}(n, \mathbb{C})$. Рассматриваемые группы состоят из комплексных унитарных (соответственно вещественных и комплексных ортогональных) матриц размера n, определитель которых равен 1. В качестве операции берут произведение матриц, в качестве единицы — единичную матрицу (1.3), в качестве обратного элемента — обратную матрицу. Как и в случае групп $\mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$, $\mathrm{SL}(n, \mathbb{R})$, можно показать, что операции умножения и перехода к обратной матрице не выводят за рамки

$$\mathrm{SU}(n, \mathbb{C}),\ \mathrm{SO}(n, \mathbb{R}),\ \mathrm{SO}(n, \mathbb{C}).$$

Кроме того, отметим, что

$$\mathrm{SU}(n, \mathbb{C}) = \mathrm{U}(n, \mathbb{C}) \cap \mathrm{SL}(n, \mathbb{C}),$$
$$\mathrm{SO}(n, \mathbb{R}) = \mathbb{O}(n, \mathbb{R}) \cap \mathrm{SL}(n, \mathbb{R}),$$
$$\mathrm{SO}(n, \mathbb{C}) = \mathbb{O}(n, \mathbb{C}) \cap \mathrm{SL}(n, \mathbb{C}),$$
$$\mathrm{SO}(n, \mathbb{R}) = \mathrm{SO}(n, \mathbb{C}) \cap \mathrm{GL}(n, \mathbb{R}).$$

Можно показать, что группа $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ состоит из всех матриц вида

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}.$$

Произведение таких матриц сводится к сложению углов φ. Поэтому любые два элемента из $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ коммутируют. Это означает, что группа $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ является абелевой. Но можно показать, что группы $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$, $n \geqslant 2$ неабелевы, так же как и группы $\mathrm{SO}(m, \mathbb{R})$, $m \geqslant 3$. Элемент групп $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$, $\mathrm{SO}(n, \mathbb{R})$ называется *собственной* унитарной (ортогональной) матрицей. Этим матрицам отвечают собственные преобразования, т. е. вращения n-мерного эрмитова (соответственно евклидова) пространства.

Группы $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{R})$. Вещественная (комплексная) квадратная матрица A размера $2n$ называется *симплектической*, если ${}^tAJ_0A = J_0$, где

$$J_0 = \begin{pmatrix} 0 & -E_n \\ E_n & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.6}$$

причем E_n — единичная матрица размера n. Непосредственная проверка показывает, что множество $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{R})$ (или множество $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{C})$) всех вещественных (соответственно комплексных) симплектических матриц является группой, если в качестве умножения берут произведение матриц, в качестве единичного элемента — единичную матрицу E_{2n} размера $2n$, а в качестве обратного элемента — обратную матрицу.

Группа $\mathbb{O}(n,m)$. Пусть $E_{n,m}$ — диагональная квадратная матрица размера $n+m$, в которой по главной диагонали сначала расположены n элементов, равных -1, а затем m элементов, равных 1. Группа $\mathbb{O}(n,m)$ состоит из всех таких квадратных вещественных матриц A размера $n+m$, что ${}^tAE_{n,m}A = E_{n,m}$:

$$E_{n,m} = \begin{pmatrix} -E_n & 0 \\ 0 & E_m \end{pmatrix}.$$

(Это условие обобщает свойства вещественных ортогональных матриц.) В качестве умножения в группе $\mathbb{O}(n,m)$ берут произведение матриц. Единичным элементом в ней является единичная матрица, в качестве обратного элемента выступает обратная матрица. Матрицы $\mathbb{O}(n,m)$ преобразуют $n+m$-мерное пространство с неевклидовой метрикой. В частности, группа $\mathbb{O}(1,3)$ с матрицей

$$E_{1,3} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

называется *группой Лоренца*. Ее элементы отвечают преобразованиям четырехмерного пространства-времени в релятивистской механике (преобразованиям Лоренца).

У п р а ж н е н и е 1.1. Доказать, что определитель каждой матрицы из $\mathbb{O}(n,m)$ равен ± 1.

Группы $\mathrm{SO}(n,m)$, $\mathrm{SO}_+(1,3)$. Группа $\mathrm{SO}(n,m)$ содержит все матрицы из $\mathbb{O}(n,m)$, определители которых равны 1. В качестве умножения в этой группе берется произведение матриц. Единичным элементом в $\mathrm{SO}(n,m)$ является единичная матрица, а обрат-

ным элементом — обратная матрица. Группа $\mathrm{SO}(1,3)$ называется *собственной группой Лоренца*, а группа матриц $A \in \mathbb{O}(1,3)$ с элементом $a_{11} \geqslant 1^*$ — *ортохронной группой Лоренца* $\mathbb{O}_+(1,3)$. Элементами *собственной ортохронной группы Лоренца* $\mathrm{SO}_+(1,3)$ являются матрицы $A = (a_{ij})$ из $\mathrm{SO}(1,3)$, у которых дополнительно элемент $a_{11} \geqslant 1$.

Группы $\mathbb{O}(n,F)$, $\mathrm{U}(n,F)$. Рассмотренные группы ортогональных, унитарных, симплектических матриц и группы $\mathbb{O}(n,m)$ можно определить единообразно. Пусть задана F — произвольная квадратная вещественная (комплексная) матрица размера n. Символом $\mathbb{O}(n,F)$ обозначается группа, состоящая из всех таких невырожденных вещественных (комплексных) матриц A, что ${}^tAFA = F$. Операции умножения в этой группе соответствует произведение матриц. Единичным элементом в $\mathbb{O}(n,F)$ является единичная матрица, обратным элементом — обратная матрица. Если в качестве F брать единичную матрицу, то получаются группы $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ и $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$. Если при четном n за F взять матрицу J_0 (1.6), где n заменено на $n/2$, то получим группы $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{R})$ и $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{C})$. Если же в качестве F взять матрицу $E_{n,m}$, то получим группу $\mathbb{O}(n,m)$.

Пусть F — произвольная комплексная матрица. Тогда символом $\mathrm{U}(n,F)$ обозначается группа всех таких невырожденных комплексных матриц A, что ${}^t\bar{A}FA = F$. Снова в качестве умножения в этой группе берут произведение матриц.

У п р а ж н е н и е 1.2. Доказать, что если матрица F невырождена, то определитель каждой вещественной матрицы из $\mathbb{O}(n,F)$ равен ± 1.

Доказать, что если матрица F невырождена, то модуль определителя комплексной матрицы из $\mathrm{U}(n,F)$ равен 1.

Каждая из рассмотренных групп матриц эквивалентна множеству преобразований некоторого пространства. Но группу преобразований пространства можно задать иначе: как множество операторов, отвечающих определенным условиям (тем самым выявляя геометрический смысл преобразований с помощью матриц). Перечислим важнейшие группы операторов.

Группа обратимых линейных операторов $\mathrm{GL}(V)$. Пусть V — вещественное (комплексное) векторное пространство, $\mathrm{GL}(V)$ — множество всех обратимых линейных операторов на V. Обратимость оператора $\mathcal{A}$ означает, что существует обратный оператор $\mathcal{A}^{-1}$, такой что последовательное выполнение $\mathcal{A}$ и $\mathcal{A}^{-1}$ в любом порядке оставляют каждый вектор пространства V без изменения. Напомним: *ядро* $\ker \mathcal{A}$ линейного оператора $\mathcal{A}$ состоит их всех таких векторов $x \in V$, что $\mathcal{A}(x) = 0$. Если пространство V конечномерно, то для оператора $\mathcal{A}$ эквивалентны следующие условия:

---

*Можно доказать, что для любой матрицы $A \in \mathbb{O}(1,3)$ выполняется $a_{11}^2 \geqslant 1$.

1) оператор $\mathcal{A}$ обратим;

2) $\ker \mathcal{A} = 0$;

3) образ оператора $\mathcal{A}$ совпадает со всем пространством V;

4) матрица оператора $\mathcal{A}$ в любом базисе невырождена, т. е. ее определитель отличен от нуля.

Множество $\mathrm{GL}(V)$ является группой относительно операции композиции, т. е. последовательного действия операторов (операторного умножения). Единицей группы $\mathrm{GL}(V)$ является тождественный оператор $\mathcal{E}$, при котором $\mathcal{E}(x) = x$ для всех $x \in V$. Обратным элементом для оператора $\mathcal{A}$ является обратный оператор $\mathcal{A}^{-1}$.

Группы ортогональных (унитарных) линейных операторов евклидова (эрмитова) пространства. Пусть $E(\mathfrak{E})$ — евклидово (соответственно эрмитово) пространство. Обозначим $\mathbb{O}(E)$ (соответственно $\mathrm{U}(\mathfrak{E})$) множество всех ортогональных (унитарных) линейных операторов в $E(\mathfrak{E})$. Тогда $\mathbb{O}(E)$ и $\mathrm{U}(\mathfrak{E})$ являются группами относительно операции произведения (т. е. композиции) операторов. Единичным элементом группы является тождественный оператор $\mathcal{E}$, оставляющий каждый вектор пространства на месте, а обратным элементом — обратный оператор. Если в пространстве E (соответственно, в $\mathfrak{E}$) выбрать ортонормированный базис, то матрица любого оператора из $\mathbb{O}(E)$ ($\mathrm{U}(\mathfrak{E})$) является ортогональной (соответственно унитарной).

Группы собственных ортогональных (унитарных) линейных операторов евклидова (эрмитова) пространства. Пусть задано евклидово (эрмитово) пространство E (соответственно $\mathfrak{E}$). Обозначим $\mathrm{SO}(E)$ (соответственно $\mathrm{SU}(\mathfrak{E})$) множество всех ортогональных (унитарных) линейных операторов с определителем, равным 1, в пространстве E. Оба множества являются группами относительно операции произведения (композиции) операторов. Единичный элемент в каждой из этих групп — тождественный оператор $\mathcal{E}$, а обратный элемент — обратный оператор.

Далее будет показано, что операторам групп $\mathbb{O}(E)$ (соответственно $\mathrm{U}(\mathfrak{E})$) и $\mathrm{SO}(E)$ (соответственно $\mathrm{SU}(\mathfrak{E})$) отвечают элементы из групп матриц с теми же обозначениями. Поэтому все такие операторы сохраняют в своих пространствах скалярное произведение. Если же сохранение скалярного произведения задавать непосредственно как свойство операторов, можно построить разные группы, различными способами устанавливая в соответствие паре векторов пространства V некоторое комплексное число (их «произведение»).

Группы симплектических линейных операторов. Пусть в вещественном (комплексном) пространстве V размерности $2m$ задана невырожденная антисимметричная билинейная функция

(x, y), причем $(x, y) = -(y, x)$ для любых $x, y \in V$. Напомним, что обычное скалярное произведение симметрично. Линейный оператор $\mathcal{A}$ называется *симплектическим*, если $(\mathcal{A}x, \mathcal{A}y) = (x, y)$ для всех $x, y \in V$. Каждый симплектический оператор невырожден. Множество всех симплектических операторов $\mathrm{Sp}(V)$ образует группу относительно операции композиции операторов. Единичным элементом является тождественный оператор, а обратным элементом — обратный оператор.

Чтобы расширить множество операторов, можно также перейти от скалярного произведения (x, y) к произвольной билинейной функции $f(x, y)$ с вещественными коэффициентами в случае ортогональных преобразований или к полуторалинейной функции с комплексными коэффициентами для случая унитарных преобразований. (Определение этих функций дано в гл. 7.)

Группы ортогональных (унитарных) линейных операторов относительно билинейной (полуторалинейной) функции. Предположим, что в вещественном (комплексном) пространстве V задана билинейная функция $f(x, y)$ (см. подразд. 7.4). Рассмотрим множество всех таких невырожденных линейных операторов $\mathcal{A}$, что для всех $x, y \in V$ выполнено равенство $f(\mathcal{A}(x), \mathcal{A}(y)) = f(x, y)$. В качестве умножения берут произведение операторов. Получающуюся группу обозначают $\mathbb{O}(f)$ и называют *группой ортогональных операторов относительно билинейной функции.*

Если в пространстве V выбран базис и F — матрица функции f в этом базисе, а A — матрица оператора $\mathcal{A} \in \mathbb{O}(f)$, то ${}^tAFA = F$. Верно и обратное утверждение.

Предположим теперь, что в комплексном пространстве V задана полуторалинейная функция $f(x, y)$ (см. подразд. 7.4). Требуется составить группу всех таких невырожденных линейных операторов $\mathcal{A}$, что $f(\mathcal{A}(x), \mathcal{A}(y)) = f(x, y)$ для всех $x, y \in V$. В качестве умножения берут произведение операторов. Получающуюся группу обозначают $\mathrm{U}(f)$ и называют *группой унитарных операторов относительно полуторалинейной функции.*

Если в V выбран некоторый базис и F — матрица функции f в этом базисе, а A — матрица оператора $\mathcal{A} \in \mathrm{U}(f)$, то ${}^t\bar{A}FA = F$. Верно и обратное утверждение.

Преобразования из всех рассмотренных подмножеств группы $\mathrm{GL}(V)$ оставляют неизменным хотя бы один (нулевой) вектор пространства V. Можно снять это ограничение.

Группа аффинных преобразований $\mathrm{Aff}(V)$**.** Напомним (см. подразд. 7.9), что *аффинным преобразованием* Φ вещественного или комплексного векторного пространства V называется отображение $\Phi : V \to V$, имеющее вид $\Phi(x) = \phi(x) + b$, $x \in V$, где $\phi \in \mathrm{GL}(V)$ — обратимый линейный оператор в V и b — вектор из V. Тогда

$b = \Phi(0)$ и $\phi(x) = \Phi(x) - \Phi(0)$, т. е. b и ϕ определены по Φ однозначно. В качестве операции в группе $\mathrm{Aff}(V)$ берется операция композиции преобразований. Именно, если $\Psi(x) = \psi(x) + c$, где ψ — обратимый линейный оператор в V и $c \in V$, то

$$(\Phi\Psi)(x) = \Phi(\Psi(x)) = \phi(\Psi(x)) + b = \\ = \phi(\psi(x) + c) + b = (\phi\psi)(x) + \phi(c) + b, \qquad (1.7)$$

для всех $x \in V$.

Таким образом, $\Phi\Psi$ снова является аффинным преобразованием с обратимым линейным оператором $\phi\psi$ и вектором $\phi(c) + b \in V$.

Единичным элементом в группе $\mathrm{Aff}(V)$ является тождественное преобразование в V, т. е. аффинное преобразование $\varepsilon(x) = x$ для всех $x \in V$. Обратным элементом к $\Phi \in \mathrm{Aff}(V)$ является обратное отображение. Оно также является аффинным. Действительно, если $\Phi(x) = \phi(x) + b$, то

$$\Phi^{-1}(x) = \phi^{-1}(x) - \phi^{-1}(b) \qquad (1.8)$$

для всех $x \in V$, где ϕ^{-1} — линейный оператор, обратный к ϕ.

Конкретизируем вид аффинных преобразований введением метрики в пространстве V. Это можно сделать разными способами.

Группы движений евклидова пространства. В любом евклидовом пространстве E со скалярным произведением (x, y) вводят расстояние $d(x, y)$ между векторами x, y как длину

$$\|x - y\| = \sqrt{(x - y, x - y)}$$

вектора $x - y$. *Движением* (*изометрией*) Φ евклидова пространства E называется отображение $\Phi : E \to E$, сохраняющее расстояние между любыми векторами (см. подразд. 7.9). Другими словами, $\|\Phi(x) - \Phi(y)\| = \|x - y\|$ для любых $x, y \in E$.

ТЕОРЕМА 1.1. Преобразование Φ евклидова пространства E является движением тогда и только тогда, когда существуют такие ортогональный линейный оператор $\phi \in \mathbb{O}(E)$ и вектор b, что $\Phi(x) = \phi(x) + b$ для всех $x \in E$ [46, с. 196—198].

Таким образом, каждое движение евклидова пространства E является аффинным преобразованием.

Движение Φ называется *собственным*, если соответствующее ортогональное (соответственно унитарное) преобразование ϕ в теореме 1.1 является собственным, т. е. определитель его матрицы равен 1. Это означает, что $\phi \in \mathrm{SO}(E)$. Движение Φ, не являющееся собственным, называется *несобственным*.

Все движения евклидова пространства E образуют группу $\mathrm{Iso}(E)$, если в качестве операции взять композицию (последовательное выполнение) отображений. Единичным элементом в $\mathrm{Iso}(E)$ является тождественное преобразование $\varepsilon(x) = x$ для всех $x \in E$. Все собственные движения евклидова пространства E образуют группу $\mathrm{SIso}(E)$, относительно той же операции умножения, что и в $\mathrm{Iso}(E)$.

Группа Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$. Рассмотрим вещественное четырехмерное векторное пространство $M(1,3)$ с билинейной симметрической функцией f, отрицательный индекс инерции которой равен 1, а положительный индекс равен 3 (см. теорему 7.5). Это означает, что в некотором базисе $\mathbf{e} = (e_0, e_1, e_2, e_3)$ билинейная функция имеет вид $f(x,y) = -x_0y_0+x_1y_1+x_2y_2+x_3y_3$, где x_i, y_j — координаты векторов x, y в базисе $\mathbf{e}$. Тогда соответствующая квадратичная функция $q(x) = f(x,x)$ имеет вид $q(x) = -x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$. Пространство $M(1,3)$ называют *пространством Минковского*. Группой Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$ называют группу аффинных преобразований Φ в $M(1,3)$ вида $\Phi(x) = \phi(x) + b$, где $\phi \in \mathbb{O}(f)$. Другими словами, нетрансляционные компоненты ϕ таких преобразований лежат в группе Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$.

Введем важные для приложений группы, целиком содержащиеся в группе $\mathrm{Iso}(E)$.

Группа симметрий фигуры. Пусть в евклидовом пространстве E выбрана некоторая фигура (подмножество) M. *Группой симметрий* $\mathrm{Sym}(M)$ фигуры M называют множество всех таких движений пространства E, которые эту фигуру отображают на себя. В качестве операции умножения в $\mathrm{Sym}(M)$ берут операцию композиции (умножения) преобразований. Единичным элементом в $\mathrm{Sym}(M)$ является тождественное преобразование $\varepsilon(x) = x$ для всех $x \in E$, а обратным элементом к $f \in \mathrm{Sym}(M)$ — обратное отображение f^{-1}, которое также является элементом $\mathrm{Sym}(M)$.

Ниже приведен ряд примеров таких групп.

Группа диэдра $\mathbf{D}_n$. Пусть правильный n-угольник M расположен в комплексной плоскости (двумерной вещественной плоскости с заданным ортонормированным базисом (e_1, e_2)), причем его центр находится в нуле (начале координат), вер-

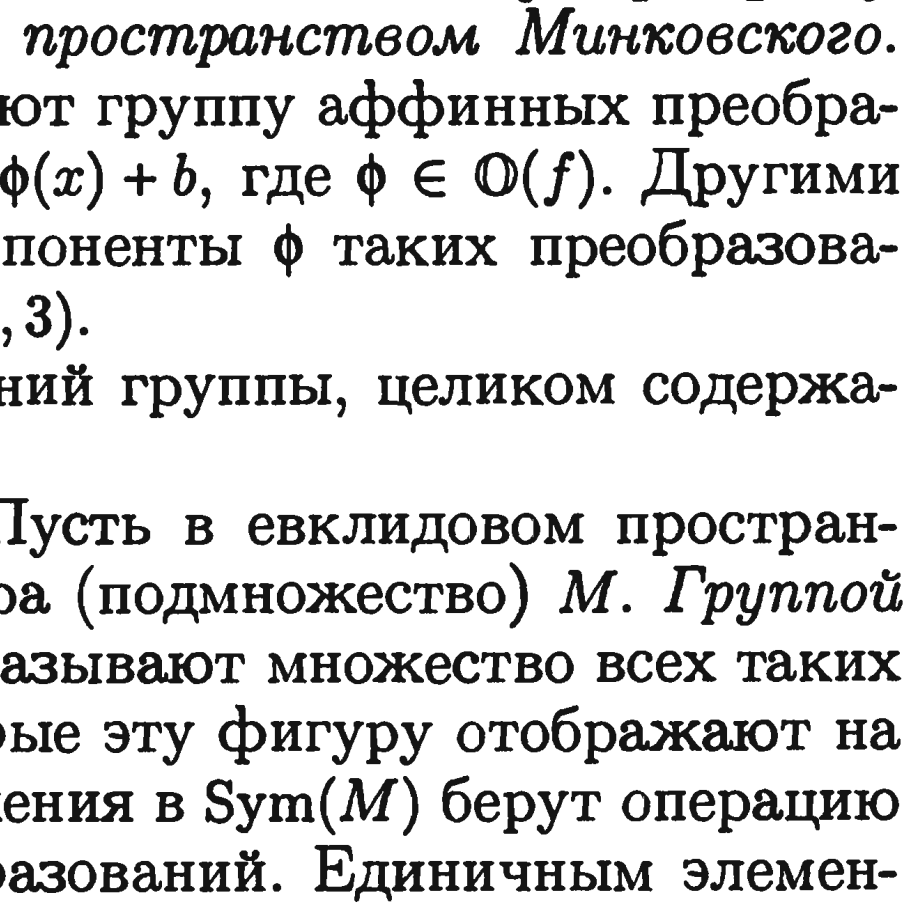


Рис. 1.3. Группа $\mathbf{D}_6$

шины лежат на окружности радиуса 1 и одна из вершин — в точке 1 (в e_1).

Группой диэдра $\mathbf{D}_n$ (рис. 1.3) называют множество $\mathrm{Sym}(M)$ всех симметрий такого «двустороннего» n-угольника M. Укажем явный вид элементов из $\mathbf{D}_n$. Положим

$$a = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{2\pi}{n} & -\sin\dfrac{2\pi}{n} \\ \sin\dfrac{2\pi}{n} & \cos\dfrac{2\pi}{n} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что матрица a является матрицей поворота на угол $2\pi/n$ вокруг начала координат по часовой стрелке, а матрица b — матрицей зеркального отражения относительно оси $0X$. Покажем, что $\mathbf{D}_n$ состоит из элементов:

$$\mathbf{1}, a, a^2, \ldots, a^{n-1}, b, ba, \ldots, ba^{n-1}.$$

В частности, группа $\mathbf{D}_n$ имеет порядок $2n$. Кроме того, $a^n = b^2 = (ba)^2 = \mathbf{1}$.

Действительно, можно заметить, что при любых действиях элементов из $\mathbf{D}_n$ центр n-угольника, расположенный в начале координат, остается на месте. Следовательно, по теореме 1.1 каждый элемент из $\mathbf{D}_n$ является ортогональным оператором, определитель которого равен ± 1. Пусть $\phi \in \mathbf{D}_n$ — ортогональный оператор с определителем, равным 1. Согласно следствию 1 из теоремы 7.17 оператор ϕ является оператором поворота на некоторый угол $2\pi k/n$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$. В этом случае ϕ совпадает с элементом

$$a^k = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{2k\pi}{n} & -\sin\dfrac{2k\pi}{n} \\ \sin\dfrac{2k\pi}{n} & \cos\dfrac{2k\pi}{n} \end{pmatrix} \in \mathbf{D}_n.$$

Пусть оператор ϕ имеет определитель -1. Тогда $b\phi \in \mathbf{D}_n$ — ортогональный оператор с определителем 1, т. е., согласно доказанному выше $b\phi = a^k$ для некоторого $k = 0, 1, \ldots, n-1$. Домножая это равенство слева на b и учитывая, что $b^2 = \mathbf{1}$, получаем, что $\phi = ba^k$.

Поскольку ba является зеркальным отражением относительно некоторой прямой, то $(ba)^2 = \mathbf{1}$.

Группа D_{nh}. Рассмотрим в трехмерном евклидовом пространстве плоскость $\mathbf{\Pi}$, проходящую через начало координат. В этой плоскости возьмем правильный n-угольник M, центр которого находится в начале координат. Группа D_{nh} состоит из всех ортогональных преобразований трехмерного евклидова пространства, сохраняющих M, т. е. из всех трехмерных симметрий M.

Нетрудно заметить, что D_{nh} состоит из элементов группы диэдра $\mathbf{D}_n$ и центральной симметрии j трехмерного пространства, причем $j^2 = \mathbf{1}$.

Вернемся к группам матриц и рассмотрим важное подмножество в $\mathrm{GL}(2, \mathbb{C})$.

Группа ненулевых кватернионов. Под *кватернионом* q понимают комплексную квадратную матрицу размера 2 вида

$$q = \begin{pmatrix} z_1 & z_2 \\ -\bar{z}_2 & \bar{z}_1 \end{pmatrix}, \tag{1.9}$$

где z_1, z_2 — произвольные комплексные числа.

Непосредственная проверка показывает, что сумма и произведение любых двух кватернионов также являются кватернионами. Бесконечное множество всех кватернионов обозначают $\mathbb{H}$. Заметим, что если q — кватернион (1.9), то $\det q = |z_1|^2 + |z_2|^2$. Таким образом, если $q \neq 0$, то существует обратный кватернион

$$q^{-1} = \frac{1}{|z_1|^2 + |z_2|^2} \begin{pmatrix} \bar{z}_1 & -z_2 \\ \bar{z}_2 & z_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{H},$$

поэтому все ненулевые кватернионы образуют по умножению бесконечную группу, которая обозначается $\mathbb{H}^*$.

Группа кватернионов $\mathbf{Q}_8$. В множестве $\mathbb{H}$ всех кватернионов выделяют следующие три матрицы:

$$I = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \; J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \; K = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2, \mathbb{C}). \tag{1.10}$$

Вместе с единичной матрицей они образуют базис пространства кватернионов относительно сложения. Нетрудно проверить, что

$$I^2 = J^2 = K^2 = -E,$$

$$IJ = K, \; JK = I, \; KI = J, \; JI = -K, \; KJ = -I, \; IK = -J.$$

Отсюда вытекает, что восемь матриц $\pm E$, $\pm I$, $\pm J \pm K$ с операцией умножения образуют конечную группу, называемую группой кватернионов $\mathbf{Q}_8$. Единичным элементом в $\mathbf{Q}_8$ является единичная матрица E. Кроме того, $I^{-1} = -I$, $J^{-1} = -J$, $K^{-1} = -K$, $(-E)^{-1} = -E$. Группа $\mathbf{Q}_8$ используется в квантовой механике для описания спиновых волновых функций (матрицы Паули; см. гл. 5).

Опишем более детально весьма важную конечную группу, связанную с большинством из рассмотренных конструкций.

Группа перестановок $\mathbf{S}_n$. Обозначим символом X_n множество, состоящее из n натуральных чисел $\{1, 2, \ldots, n\}$.

Перестановкой (*подстановкой*) *степени* n называют взаимно-однозначное (или *биективное*) отображение X_n в себя. Множество всех перестановок степени n обозначают $\mathbf{S}_n$.

По аналогии с отображениями пространства введем операцию умножения (произведения) перестановок как их композицию (последовательное выполнение). Известно, что произведение отображений ассоциативно. Кроме того, в $\mathbf{S}_n$ имеется единичный элемент — тождественная перестановка $\boldsymbol{\varepsilon}$, которая каждый элемент из X_n оставляет на месте, т. е. $\boldsymbol{\varepsilon}(k) = k$ для любого $k = 1, \ldots, n$. Более того, у каждого взаимно-однозначного отображения $\boldsymbol{\sigma} : X_n \to X_n$ имеется обратное отображение $\boldsymbol{\sigma}^{-1} X_n \to X_n$, обладающее тем свойством, что $\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^{-1} = \boldsymbol{\sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\varepsilon}$. Другими словами, если $\boldsymbol{\sigma}(k) = m$, то $\boldsymbol{\sigma}^{-1}(m) = k$. Таким образом, $\mathbf{S}_n$ является группой.

Введем удобную запись для элементов $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_n$. Предположим что числа из X_n расположены в некотором порядке $\{i_1, \ldots, i_n\}$. Тогда перестановку $\boldsymbol{\sigma}$ можно записать в виде двустрочной матрицы:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} i_1 & \cdots & i_n \\ \boldsymbol{\sigma}(i_1) & \ldots & \boldsymbol{\sigma}(i_n) \end{pmatrix}. \tag{1.11}$$

Если же $\boldsymbol{\tau} \in \mathbf{S}_n$ имеет аналогичную запись:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} j_1 & \cdots & j_n \\ i_1 & \ldots & i_n \end{pmatrix}, \tag{1.12}$$

то в силу определения произведения перестановок получаем

$$\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} j_1 & \cdots & j_n \\ \boldsymbol{\sigma}(i_1) & \ldots & \boldsymbol{\sigma}(i_n) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}(i_1) & \cdots & \boldsymbol{\sigma}(i_n) \\ i_1 & \ldots & i_1 \end{pmatrix}. \tag{1.13}$$

Группа $\mathbf{S}_n$ при $n \geqslant 3$ не является абелевой. Действительно,

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

Инверсией в первой строке (1.11): $i_1, \ldots, i_n$ называют такую пару i_s, i_t, что $s < t$ и $i_s > i_t$. Аналогично определяют инверсию во второй строке матрицы $\boldsymbol{\sigma}$ (1.11). *Знаком* $(-1)^{\sigma}$ перестановки $\boldsymbol{\sigma}$ называют число $(-1)^k$, где k — сумма числа инверсий в первой и второй строках

$$i_1, \ldots, i_n; \quad \boldsymbol{\sigma}(i_1), \ldots, \boldsymbol{\sigma}(i_n) \tag{1.14}$$

перестановки $\boldsymbol{\sigma}$ из (1.11). Перестановка *четная*, если ее знак 1, и *нечетная*, если ее знак -1.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.2. Определение знака перестановки корректно и не зависит от представления (1.11). Знак произведения перестановок равен произведению их знаков.

Доказательство. Докажем корректность определения знака перестановки. Если в выражении (1.11) переставить местами два элемента первой строки, то для сохранения перестановки необходимо переставить местами аналогичные элементы второй строки. При этом по соответствующей теореме из курса алгебры суммарная четность первой и второй строк не изменится.

Для доказательства второго утверждения заметим, что $(-1)^{\sigma} = (-1)^{l+t}$, где l — сумма числа инверсий в перестановке $i_1, \ldots, i_n$; t — сумма числа инверсий в $\sigma(i_1), \ldots, \sigma(i_n)$. Далее, $(-1)^{\tau}$ из (1.12) равно $(-1)^{m+l}$, где m — сумма числа инверсий в перестановке $j_1, \ldots, j_n$; l — сумма числа инверсий в перестановке $i_1, \ldots, i_n$. Согласно (1.13) $(-1)^{\sigma\tau} = (-1)^{m+t}$, где t — сумма числа инверсий в $\sigma(i_1), \ldots, \sigma(i_n)$.

Таким образом, $(-1)^{\sigma}(-1)^{\tau} = (-1)^{l+t}(-1)^{m+l} = (-1)^{m+t} = (-1)^{\sigma\tau}$.

Для дальнейших рассмотрений необходимы дополнительные сведения о строении элементов группы $\mathbf{S}_n$.

Пусть $i_1, \ldots, i_k$ — разные числа из X_n. *Циклом* $(i_1, \ldots, i_k) \in \mathbf{S}_n$ длины k называют такую перестановку σ, что для $m \in X_n$

$$\sigma(m) = \begin{cases} i_{s+1}, & \text{если } m = i_s, s < k; \\ i_1, & \text{если } m = i_k; \\ m,, & \text{если } m \in X_n \setminus \{i_1, \ldots, i_k\}. \end{cases}$$

Два цикла

$$(i_1, \ldots, i_k), \quad (j_1, \ldots, j_s) \in \mathbf{S}_n \tag{1.15}$$

независимы, если все элементы $i_1, \ldots, i_k, j_1, \ldots, j_s$ разные, т. е. множества $\{i_1, \ldots, i_k\}$, $\{j_1, \ldots, j_s\}$ не пересекаются.

Например, цикл $(2, 1, 4) \in \mathbf{S}_5$ может быть представлен в двустрочной форме:

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

Цикл (i) длиной 1 является тождественной перестановкой ε. Кроме того, если циклы (1.15) независимы, то в группе $\mathbf{S}_n$

$$(i_1, \ldots, i_k)(j_1, \ldots, j_s) = (j_1, \ldots, j_s)(i_1, \ldots, i_k). \tag{1.16}$$

Отметим также, что запись $(i_1, \ldots, i_k)$ для цикла неоднозначна. Действительно, если в этой записи циклически переставить

элементы $i_1, \ldots, i_k$, то получится равный цикл $(i_2, \ldots, i_{k-1}, i_k, i_1)$. Например, $(3,1,2) = (1,2,3) = (2,3,1)$.

Упражнение 1.3. Доказать, что обратная перестановка для цикла также является циклом:

$$(i_1, i_2, \ldots, i_{k-1}, i_k)^{-1} = (i_k, i_{k-1}, \ldots, i_2, i_1).$$

ТЕОРЕМА 1.2. Любая перестановка разлагается в произведение независимых циклов.

Доказательство. Пусть $\sigma \in S_n$. Можно считать, что перестановка σ не является тождественной. Возьмем произвольное число k, где $1 \leqslant k \leqslant n$, и предположим, что все числа $k_0 = k, k_1 = \sigma k, k_2 = \sigma^2 k, \ldots, k_l = \sigma^l k$ разные, но $\sigma^{l+1} k = \sigma^s k$, где $0 \leqslant s \leqslant l$.

ЛЕММА 1.1. $s = 0$.

Доказательство. Если $s > 0$, то $\sigma(k_{s-1}) = \sigma^s k = \sigma^{l+1} k = \sigma(k_l)$ и $k_{s-1} \neq k_l$ в силу выбора l. Это противоречит взаимно-однозначности отображения σ на $X = \{1, \ldots, n\}$.

Таким образом, на множестве $\{k_0, k_1, \ldots, k_l\}$ перестановка σ действует как цикл

$$\begin{pmatrix} k_0 k_1 & \ldots & k_{l-1} k_l \\ k_1 k_2 & \ldots & k_l k_0 \end{pmatrix}.$$

Выберем теперь произвольное число j $(1 \leqslant j \leqslant n)$, причем $j \notin \{k_0, k_1, \ldots, k_l\}$. Как и выше, строим множество $\{j_0, j_1, \ldots, j_t\}$, на котором перестановка σ действует как цикл

$$\begin{pmatrix} j_0 j_1 & \ldots & j_{t-1} j_t \\ j_1 j_2 & \ldots & j_t j_0 \end{pmatrix}.$$

ЛЕММА 1.2. Все элементы $k_0, k_1, \ldots, k_l; j_0, j_1, \ldots, j_t$ различные.

Доказательство. Пусть $j_r = k_q$. Тогда $j = j_0 = \sigma^{-r} j_r$ совпадает с одним из чисел $k_0, k_1, \ldots, k_l$, что невозможно.

Продолжая этот процесс, получаем перестановку

$$\tau = \begin{pmatrix} k_0 k_1 & \ldots & k_{l-1} k_l \\ k_1 k_2 & \ldots & k_l k_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_0 j_1 & \ldots & j_{t-1} j_t \\ j_1 j_2 & \ldots & j_t j_0 \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} f_0 f_1 & \ldots & f_0 \\ f_1 f_2 & \ldots & f_0 \end{pmatrix}.$$

Непосредственная проверка показывает, что $\tau = \sigma$.

Покажем на примере, как применяется теорема 1.2. Пусть задана перестановка

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 5 & 1 & 6 & 4 & 2 & 7 \end{pmatrix}.$$

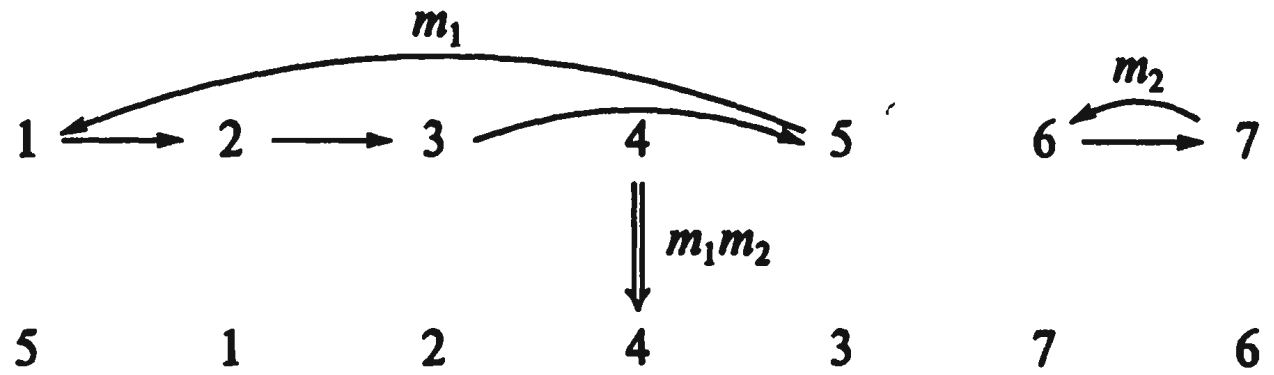


Рис. 1.4. Разложение перестановки на независимые циклы

Применяя алгоритм, изложенный при доказательстве теоремы 1.2, получаем $\sigma = (1,3)(2,5,4,6)$. Отметим, что любые два разложения одной перестановки в произведение независимых циклов отличаются лишь порядком циклов, см. (1.16).

Приведем еще один пример (рис. 1.4), иллюстрирующий разложение перестановки

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 5 & 1 & 2 & 4 & 3 & 7 & 6 \end{pmatrix}$$

на произведение независимых циклов m_1m_2, где $m_1 = (1, 2, 3, 5)$ и $m_2 = (6, 7)$.

Транспозицией называется цикл длины 2.

ТЕОРЕМА 1.3. Каждая перестановка является произведением транспозиций.

Доказательство. Каждая перестановка разлагается в произведение независимых циклов по теореме 1.2. Кроме того, из двухстрочной формы цикла видно, что

$$(i_1, \ldots, i_k) = (i_1, i_2)(i_2, i_3)\cdots(i_{k-1}, i_k).$$

Отсюда вытекает утверждение теоремы.

Отметим, что разложение перестановки в произведение транспозиций неоднозначно; например:

$$(1, 2, 3) = (1, 2)(2, 3) = (2, 3)(1, 3).$$

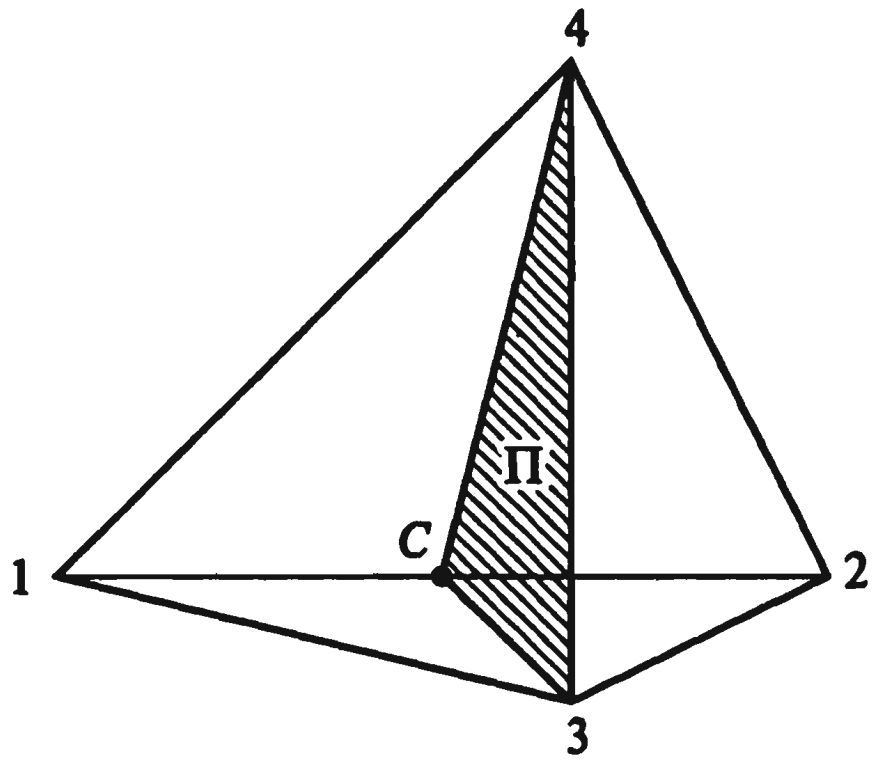


Рис. 1.5. Тетраэдр и одна из его плоскостей симметрии (заштрихована)

СЛЕДСТВИЕ. Если перестановка разложена в произведение s транспозиций, то ее знак равен $(-1)^s$. В частности, знак цикла длины k равен $(-1)^{k-1}$.

Доказательство. Для доказательства следствия нужно воспользоваться теоремой 1.3.

Обозначим символом $\mathbf{A}_n$ множество всех четных перестановок из $\mathbf{S}_n$.

ТЕОРЕМА 1.4. $|\mathbf{S}_n| = n!, \quad |\mathbf{A}_n| = n!/2.$

Доказательство. Рассмотрим отображение $\sigma \mapsto$ $\mapsto \sigma(1,2)$. По предложению 1.2 и следствию к теореме 1.3 знак произведения перестановок $\sigma(1,2)$ равен $(-1)^{\sigma}(-1)^{(1,2)} =$ $= -(-1)^{\sigma}$. Таким образом, если перестановка σ четная, то

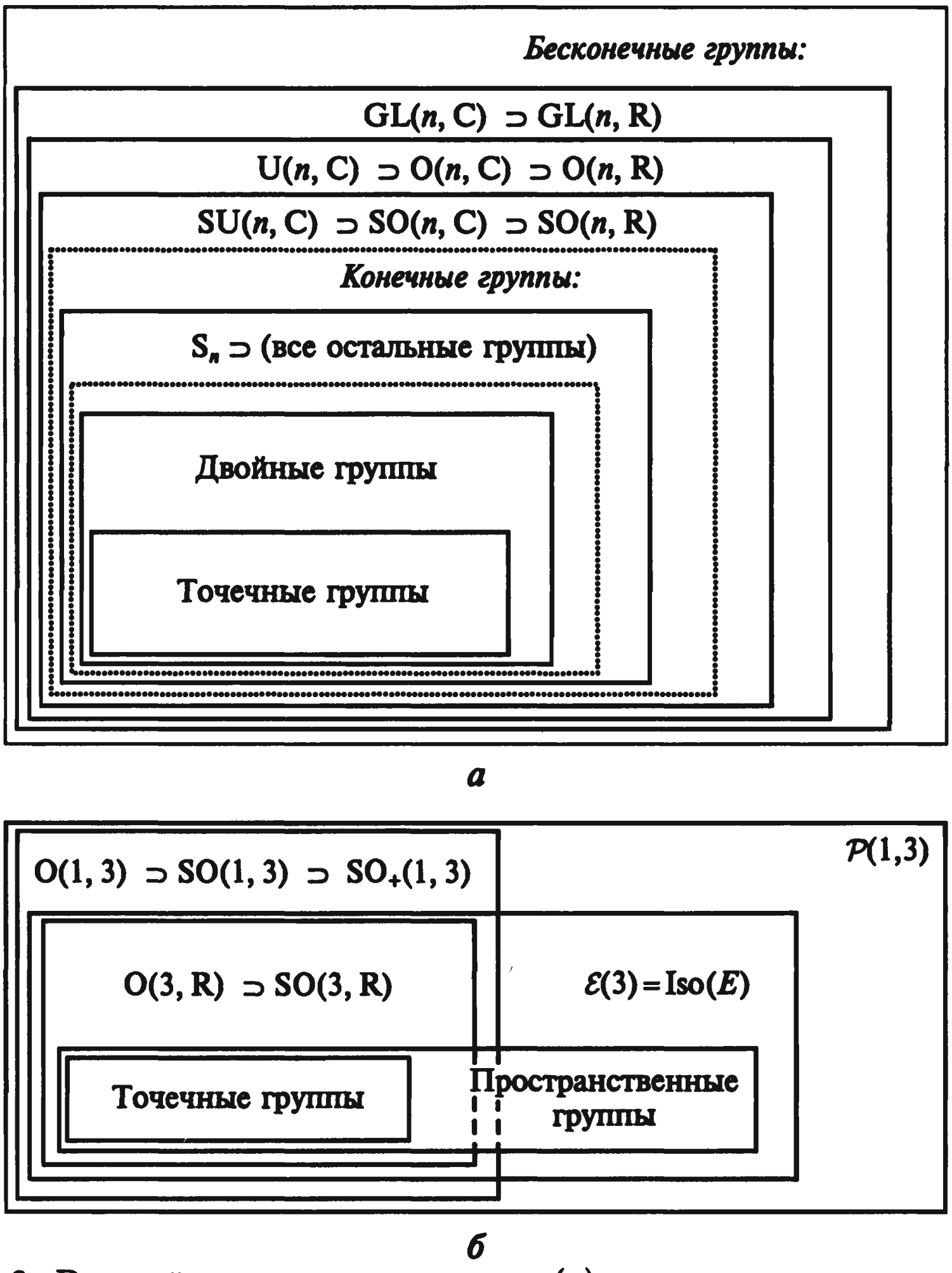


Рис. 1.6. Важнейшие группы матриц ($а$) и группы симметрии пространств M(1, 3) и $E(3)$ ($б$)

перестановка $\sigma(1,2)$ нечетная, и наоборот. Следовательно, отображение $\sigma \mapsto \sigma(1,2)$ переводит $\mathbf{A}_n$ в $\mathbf{S}_n \setminus \mathbf{A}_n$, и наоборот. Поэтому $|\mathbf{A}_n| = |\mathbf{S}_n \setminus \mathbf{A}_n| = |\mathbf{S}_n| - |\mathbf{A}_n|$, и $|\mathbf{A}_n| = |\mathbf{S}_n|/2 = n!/2$.

В этой главе будет доказано, что любую группу G конечного порядка можно представить в виде подмножества в некоторой группе перестановок. Пока рассмотрим важный частный случай.

Группа $\mathrm{Sym}(T)$ симметрий тетраэдра T. Пронумеруем вершины тетраэдра (рис. 1.5) числами $1, 2, 3, 4$. Каждое движение f из $\mathrm{Sym}(T)$ переставляет вершины, т. е. f задает перестановку:

$$\sigma_f = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ f(1) & f(2) & f(3) & f(4) \end{pmatrix} \in \mathbf{S}_4.$$

При этом $\sigma_{fg} = \sigma_f \sigma_g$. Кроме того, каждая перестановка из $\mathbf{S}_4$ имеет вид σ_f. Действительно, любая перестановка по теореме 1.3 является произведением транспозиций. Поэтому достаточно рассмотреть случай, когда перестановка имеет, например, вид $(1, 2)$.

Рассмотрим плоскость Π, содержащую ребро $\{3, 4\}$ и середину C ребра $\{1, 2\}$. Тогда зеркальное отражение относительно плоскости Π меняет местами вершины 1 и 2, а вершины 3 и 4 оставляет неподвижными.

Отметим также, что если перестановка σ_f тождественна, то и преобразование f тождественно. Таким образом, группа $\mathrm{Sym}\, T$ отождествляется с группой перестановок $\mathbf{S}_4$. Группы симметрий геометрических фигур в трехмерном пространстве называются *точечными группами*.

Соотношения между перечисленными нами группами схематично показаны на рис. 1.6. Далее будем рассматривать строение групп и составляющих их подмножеств.

1.2. ПОДГРУППЫ

Определение 1.2. Непустое подмножество H в группе G называют *подгруппой*, если вместе с любыми двумя его элементами a, b оно содержит их произведение ab и с каждым своим элементом c содержит обратный ему c^{-1}.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.3. Если H — подгруппа в группе G и $\mathbf{1}$ — единичный элемент G, то $\mathbf{1} \in H$.

Доказательство. Пусть $c \in H$. Тогда $c^{-1} \in H$, и поэтому $\mathbf{1} = c \cdot c^{-1} \in H$.

Таким образом, каждая подгруппа H является группой относительно операции умножения, заданной во всей группе G.

Отметим ряд примеров подгрупп из предыдущего раздела. В группе $\mathbb{C}^*$ содержатся подгруппы $\mathbb{R}^*$, $\mathbf{U}$, $\mathbf{U}_n$. Группа $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ содержит в качестве подгрупп следующие группы:

$$\mathrm{SL}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{GL}(n,\mathbb{R}),\ \mathrm{U}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{SU}(n,\mathbb{C}),$$
$$\mathrm{U}(n,F),\ \mathbb{O}(n,F),\ \mathbb{O}(n,\mathbb{R}),\ \mathrm{SO}(n,\mathbb{R}).$$

Конечные подгруппы в $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ называют *точечными группами*.

Группа $\mathrm{GL}(2n,\mathbb{C})$ содержит в качестве подгрупп группы

$$\mathrm{Sp}(n,\mathbb{C}),\quad \mathrm{Sp}(n,\mathbb{R}).$$

Группа $\mathbb{O}(2,\mathbb{R})$ содержит в качестве подгруппы группу $\mathbf{D}_n$ для любого n. Группа $\mathrm{GL}(2,\mathbb{C})$ содержит в качестве подгрупп группу ненулевых кватернионов $\mathbb{H}^*$ и группу кватернионов $\mathbf{Q}_8$. Группа $\mathbf{S}_n$ в силу предложения 1.2 содержит подгруппу четных подстановок $\mathbf{A}_n$. Группа Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ содержит подгруппы

$$\mathrm{SO}(1,3),\ \mathbb{O}_+(1,3),\ \mathrm{SO}_+(1,3).$$

Напомним, что $\mathrm{SO}(1,3)$ состоит из всех матриц из $\mathbb{O}(1,3)$, определитель которых равен 1, $\mathbb{O}_+(1,3)$, состоит их всех матриц $a=(a_{ij})\in\mathbb{O}(1,3)$, у которых элемент $a_{11}\geqslant 1$. Наконец, $\mathrm{SO}_+(1,3)=\mathrm{SO}(1,3)\cap\mathbb{O}_+(1,3)$.

Приведем еще одну серию примеров подгрупп в группе линейных преобразований пространства. В группе $\mathrm{Aff}(V)$ аффинных преобразований n-мерного вещественного (комплексного) пространства V имеются две подгруппы. Первая подгруппа состоит из всех преобразований *сдвигов*, т. е. преобразований вида $f(x)=x+v$, где v — фиксированный вектор из V. Вторая подгруппа $\mathrm{GL}(V)$ состоит из всех невырожденных линейных операторов в пространстве V. Связь между группой аффинных преобразований $\mathrm{Aff}(V)$ и группой $\mathrm{GL}(W)$ для $(n+1)$-мерного пространства W, содержащего V в качестве подпространства, будет рассмотрена в предложении 1.10.

Отметим, что группа $\mathrm{Aff}(M(1,3))$ аффинных преобразований пространства Минковского содержит в качестве подгруппы группу Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$.

Аналогично, группа движений $\mathrm{Iso}(E)$ евклидова пространства E содержит следующие подгруппы:

подгруппу собственных движений $\mathrm{SIso}(E)$;
подгруппу сдвигов;
подгруппу ортогональных (унитарных) операторов $\mathbb{O}(E)$;
подгруппу собственных ортогональных операторов $\mathrm{SO}(E)$.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.4. Для непустого подмножества H в группе G эквивалентны следующие условия:

1) H является подгруппой в G;
2) если $x, y \in H$, то $xy^{-1} \in H$.

Доказательство. Предположим, что выполнено первое условие, и $x, y \in H$. В силу определения 1.2 получаем $x, y^{-1} \in H$, откуда $xy^{-1} \in H$, т. е. выполнено второе условие.

Обратно, пусть выполнено второе условие, и $y \in H$, тогда из $y, y \in H$ следует $1 = yy^{-1} \in H$. Далее $1, y \in H$, откуда $y^{-1} = 1y^{-1} \in H$ также по второму условию. Наконец, если $x, y \in H$, то $x, y^{-1} \in H$ по доказанному выше. Отсюда $x(y^{-1})^{-1} = xy \in H$ по предложению 1.1.

Упражнение 1.4. Доказать, что если $\{H_i\}$ — семейство подгрупп группы G, индексированных элементами i из множества I, то пересечение всех подгрупп $\cap_{i \in I} H_i$ является подгруппой группы G.

Упражнение 1.5. Рассмотрим подмножество $\mathbf{V_4}$ в группе $\mathbf{S_4}$, состоящее из перестановок {ε, (1, 2)(3, 4), (1, 3)(2, 4), (1, 4,)(2, 3)}. Здесь каждый неединичный элемент представлен в виде произведения двух независимых циклов длины 2 (транспозиций). Показать, что $\mathbf{V_4}$ является подгруппой в $\mathbf{S_4}$. (Эта подгруппа называется *группой Клейна.*)

1.3. ПОРЯДКИ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ

Рассмотрим важную числовую характеристику — порядок элемента произвольной групп. Пусть a — элемент группы G. Для произвольного целого числа n положим

$$a^n = \begin{cases} 1, & \text{если } n = 0; \\ \underbrace{a \cdots a}_{n}, & \text{если } n > 0; \\ (a^{-n})^{-1}, & \text{если } n < 0. \end{cases}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.5. Пусть a — элемент некоторой группы и $n, m \in \mathbb{Z}$. Тогда $a^{n+m} = a^n a^m, \quad (a^n)^m = a^{nm}$.

Упражнение 1.6. Пусть x, y — элементы произвольной группы G и n — целое число. Доказать, что $(yxy^{-1})^n = yx^n y^{-1}$.

Пусть a — элемент некоторой группы. *Порядком* $|a|$ (или $o(a)$) элемента a называют такое наименьшее натуральное число n, что $a^n = 1$. Если такого числа n нет, то говорят, что порядок a равен бесконечности.

Например, в группе кватернионов $\mathbf{Q_8}$ порядки элементов равны

$$o(E) = 1,\ o(-E) = 2,\ o(\pm I) = o(\pm J) = o(\pm K) = 4.$$

В группе $\mathbf{U}_n$ порядок элемента $\exp(2k\pi i/n)$ равен $n/(n,k)$, где (n,k) — наибольший общий делитель чисел n,k. Отметим также, что в любой группе порядок единичного элемента равен 1, а порядок неединичного элемента больше 1. Несложно показать, что порядки элементов x и x^{-1} совпадают. Кроме того, порядки элементов x и yxy^{-1} также совпадают.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.6. Пусть $|a| = n < \infty$, $m \in \mathbb{Z}$, тогда следующие условия эквивалентны:

1) $n|m$ (n делит m);

2) $a^m = 1$.

Упражнение 1.7. Доказать следующие положения:

1) если $\sigma = \sigma_1 \cdots \sigma_m$ — разложение перестановки $\sigma \in \mathbf{S}_n$ в произведение независимых циклов, то $|\sigma|$ равен наибольшему общему делителю длин $\sigma_1, \ldots, \sigma_m$;

2) два независимых цикла из $\mathbf{S}_n$ перестановочны;

3) каждый неединичный элемент группы Клейна $\mathbf{V}_4$ из упражнения 1.5 имеет порядок 2.

1.4. ЦИКЛИЧЕСКИЕ ГРУППЫ И ИХ ПОДГРУППЫ

С каждым элементом a произвольной группы G можно связать некоторую специальную подгруппу, называемую циклической.

Пусть $a \in G$. Множество $\langle a \rangle$ всех степеней элемента a называют *циклической* подгруппой в группе G, порожденной элементом a. Группу G называют *циклической* с *порождающим* (*образующим*) элементом a, если $\langle a \rangle = G$.

Упражнение 1.8. Доказать следующие положения:

1) группа $\mathbb{Z}$ — циклическая с порождающим элементом 1 (или –1);

2) группа $\mathbf{U}_n$ комплексных корней n-й степени из 1 является циклической группой с порождающим элементом

$$\exp\frac{2\pi i}{n} = \cos\frac{2\pi}{n} + i\sin\frac{2\pi}{n}.$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.7. Пусть a — элемент некоторой группы, тогда $|\langle a \rangle| = |a|$.

Доказательство. Если $a^r = a^m$ при некоторых $r < m$, то $a^{m-r} = 1$, где $m - r > 0$. Таким образом, элемент a имеет конечный порядок $|a| = n < \infty$, причем $n|(m-r)$. В этом случае $\langle a \rangle = \{1, a, a^2, \ldots, a^{n-1}\}$.

Если $|a| = n$ в условии предложения 1.7, то циклическую группу, порожденную элементом a, будем обозначать $\langle a \rangle_n$.

ТЕОРЕМА 1.5. Подгруппа циклической группы является циклической.

Доказательство. Пусть H — подгруппа циклической группы $G = \langle a \rangle$. Если подгруппа H состоит только из единичного элемента 1, то $H = \langle 1 \rangle$, поэтому утверждение очевидно.

Итак, можно считать, что подгруппа H содержит неединичный элемент a^m, $m \neq 0$. Если $m < 0$, то подгруппа H содержит также элемент a^{-m}. Выберем такое наименьшее натуральное число d, что элемент $b = a^d$ принадлежит подгруппе H. Если $a^m \in H$, $m \in \mathbb{Z}$, то, разделив m с остатком на d, получаем $m = sd + q$, $0 \leqslant q < d$. При этом $a^q = a^{m-sd} = a^m(a^d)^{-s} \in H$ по предложению 1.5. Если $q > 0$, это противоречит выбору d. Следовательно, $q = 0$, $m = sd$, и $a^m = (a^d)^s$. Отсюда вытекает, что $H = \langle a^d \rangle$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть $m_1, \ldots, m_n \in Z$ и d — наибольший общий делитель чисел $m_1, \ldots, m_n$, тогда существуют такие целые числа $u_1, \ldots, u_n \in \mathbb{Z}$, что $m_1u_1 + \cdots + m_nu_n = d$.

Доказательство. Пусть $H = \mathbb{Z}m_1 + \cdots + \mathbb{Z}m_n$. Тогда H — подгруппа в группе целых чисел $\mathbb{Z}$ относительно сложения. Следовательно, $H = \langle d \rangle = \mathbb{Z}d$. Остается заметить, что d является наибольшим общим делителем чисел $m_1, \ldots, m_n$.

ТЕОРЕМА 1.6. Пусть $G = \langle a \rangle_n$ и H — подгруппа в G. Тогда существует такое число d, делящее n и притом единственное, что $H = \langle a^d \rangle_{n/d}$.

Доказательство. По теореме 1.5 получаем, что $H = \langle a^k \rangle$ для некоторого $0 \leqslant k < n$. Обозначим $d = \text{НОД}(n, k)$ — наибольший общий делитель чисел n, k. Остается показать, что $H = \langle a^d \rangle$.

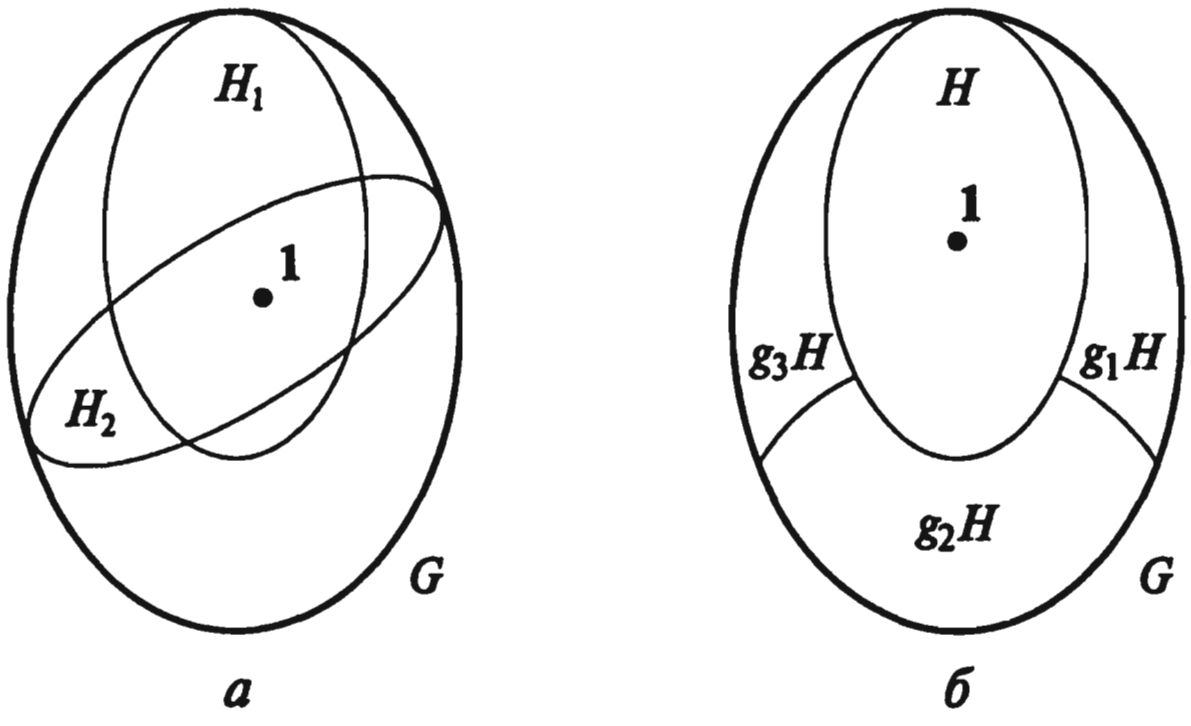
Циклическая группа *примарна*, если ее порядок является степенью простого числа.

Упражнение 1.9. Описать все подгруппы в $\langle a \rangle_{12}$.

1.5. СМЕЖНЫЕ КЛАССЫ И ТЕОРЕМА ЛАГРАНЖА

Характеристики группы не исчерпываются ее порядком и порядками ее элементов. Между группой и подгруппой имеются строгие количественные соотношения. Покажем связь между порядком группы и порядком ее подгруппы.

Пусть H — подгруппа в группе G, и $g \in G$. *Левым смежным классом* gH группы G по подгруппе H называют подмножество $\{gh \mid h \in H\}$ в G, состоящее из всех произведений gh элемента g на



а *б*

Рис. 1.7. Подмножества в группе:

а — подгруппы H_1, H_2 в группе G; *б* — разбиения G на четыре левых смежных класса по подгруппе H (точкой • изображен единичный элемент группы)

все элементы h из подгруппы H. *Правым смежным классом* Hg группы G по подгруппе H называют подмножество $\{hg \mid h \in H\}$ в G, состоящее из всех произведений hg всех элементов h подгруппы H на элемент g.

Приведем схему (рис. 1.7) расположения подгрупп в группе G и схему разбиения группы на левые смежные классы по подгруппе.

Рассмотрим ряд примеров разбиения групп на левые смежные классы по подгруппе.

1. Левые смежные классы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ по $\mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$ — это множества матриц, определители которых имеют одно и то же значение.

2. Левые смежные классы $\mathbb{Z}$ по $n\mathbb{Z}$ — это множества целых чисел с одинаковым остатком по модулю n (т. е. остатком от деления числа на n).

3. Левые смежные классы $\mathbb{C}^*$ по $\mathbf{U}$ — это множества комплексных чисел, имеющих одинаковый модуль, т. е. множества концентрических окружностей a комплексной плоскости (рис. 1.8).

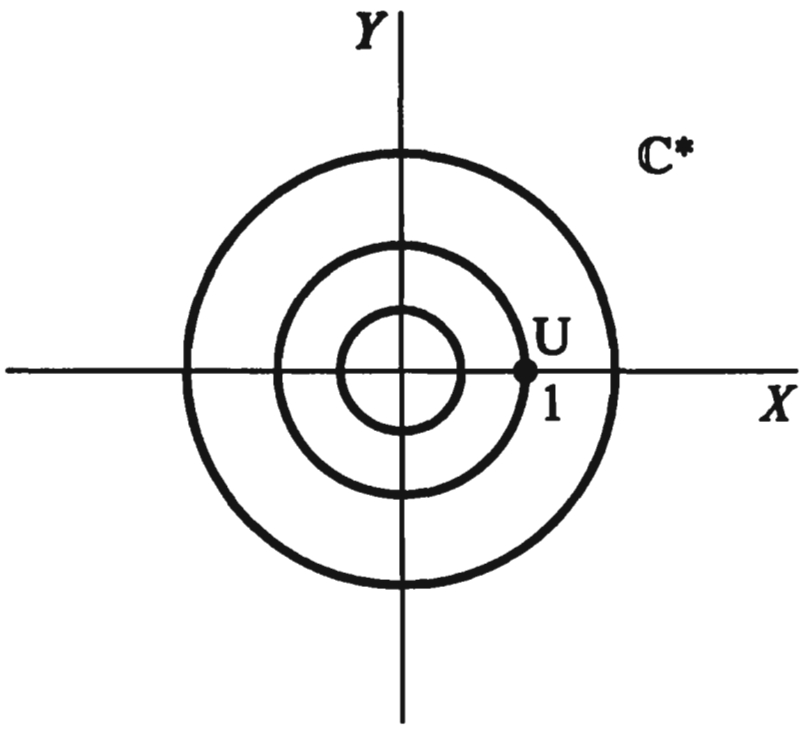


Рис. 1.8. Смежные классы $\mathbb{C}$ по $\mathbf{U}$

4. Все повороты $\langle a \rangle_n$ в группе диэдра $\mathbf{D}_n$ образуют подгруппу, а все зеркальные отражения относительно разных прямых, проходящих через центр правильного n-угольника, образуют смежный класс $b\langle a \rangle_n$ в группе $\mathbf{D}_n$ по подгруппе поворотов $\langle a \rangle_n$.

5. Векторное пространство V можно рассматривать как абелеву группу относительно сложения; если U — подпространство в пространстве V и $x \in V$, то смежный класс $x+U$ — плоскость, проходящая через конец вектора x и имеющая U в качестве направляющего подпространства (рис. 1.9).

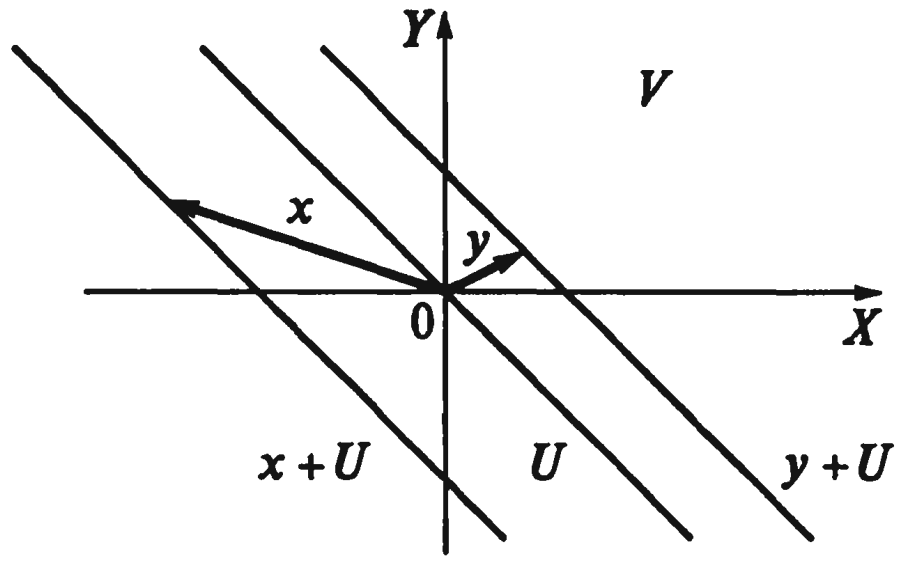


Рис. 1.9. Смежные классы (прямые) двумерного пространства V по подпространству (прямой) U

6. Группа Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ содержит четыре смежных класса:

$$\mathrm{SO}_+(1,3), \quad \mathrm{SO}_+(1,3)s, \quad \mathrm{SO}_+(1,3)t, \quad -\mathrm{SO}_+(1,3)$$

по подгруппе $\mathrm{SO}_+(1,3)$, где

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad t = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.17}$$

При этом класс $\mathrm{SO}_+(1,3)s$ состоит из всех матриц $a = (a_{ij}) \in \in \mathbb{O}(1,3)$, у которых $a_{11} \geqslant 1$ и $\det a = -1$. Класс $\mathrm{SO}_+(1,3)t$ состоит из всех матриц $a = (a_{ij}) \in \mathbb{O}(1,3)$, у которых $a_{11} \leqslant -1$ и $\det a = -1$. Класс $-\mathrm{SO}_+(1,3)$ состоит из всех матриц $a = (a_{ij}) \in \mathbb{O}(1,3)$, у которых $a_{11} \leqslant -1$ и $\det a = 1$, т. е. из всех матриц a, для которых $-a \in \mathrm{SO}_+(1,3)$.

7. Подгруппа $\mathrm{SO}(1,3)$ в группе Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ содержит два смежных класса $\mathrm{SO}_+(1,3)$ и $-\mathrm{SO}_+(1,3)$ по подгруппе $\mathrm{SO}_+(1,3)$.

8. Подгруппа $\mathbb{O}_+(1,3)$ в группе Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ содержит два смежных класса $\mathrm{SO}_+(1,3)$, $\mathrm{SO}_+(1,3)s$ по подгруппе $\mathrm{SO}_+(1,3)$.

В указанных примерах левые и правые смежные классы по выбранным подгруппам совпадают. Однако можно привести примеры групп и подгрупп в них, где это не так.

У п р а ж н е н и е 1.10. Пусть H — подгруппа в группе G и $x, y \in G$. Доказать, что эквивалентны следующие условия:

1) $xH = yH$;

2) $x^{-1}y \in H$.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.8. Пусть H — подгруппа в группе G и $x \in G$. Тогда порядок $|H|$ подгруппы H совпадает с порядком $|xH|$ левого смежного класса xH.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим, что подгруппа H состоит из элементов $\{h_1, \ldots, h_m\}$. Тогда $xH = \{xh_1, \ldots, xh_m\}$

Если положить $xh_i = xh_j$, то, домножая слева на x^{-1}, получаем $h_i = h_j$, что неверно. Поэтому $|xH| = m = |H|$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.9. Пусть H — подгруппа в группе G и $x, y \in G$, причем $y \in xH$. Тогда $xH = yH$.

Доказательство. Ясно, что $yH \subseteq xH$. По условию $y = xh$ для некоторого $h \in H$. Следовательно, для любого $u \in H$ получаем $xu = y(h^{-1}u)$, где $h^{-1}u \in H$. Отсюда $xH \subseteq yH$, т. е. $xH = yH$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть H — подгруппа в группе G. Тогда два левых (правых) смежных класса G по H либо совпадают, либо не пересекаются.

Доказательство. Воспользоваться предложением 1.9.

ТЕОРЕМА 1.7 (теорема Лагранжа). Пусть H — подгруппа в конечной группе G. Тогда $|G| = |H|j$, где j — число левых (правых) смежных классов группы G по подгруппе H.

Доказательство. Разобьем G на левые смежные классы по H. Тогда каждый элемент $x \in G$ лежит в некотором классе, а именно в xH. Остается воспользоваться следствием к предложению 1.9 и предложением 1.8

СЛЕДСТВИЕ 1. Порядок элемента конечной группы делит порядок группы.

СЛЕДСТВИЕ 2. Группа простого порядка (т. е. примарная) является циклической.

1.6. ГОМОМОРФИЗМЫ И ФАКТОР-ГРУППЫ

Большое значение в теории групп имеют операции отображения, которые ставят в соответствие элементам одного множества X элементы другого множества Y по некоторому заданному правилу $f : X \to Y$. Алгебраические соотношения между элементами $x_i \in X$ при отображении могут либо сохраняться, либо изменяться. В этом разделе рассмотрим отображения между группами, согласованные с операциями умножения в этих группах.

Напомним, что отображение множеств $f : X \to Y$ *инъективно*, если из $f(x) = f(x')$ для некоторых $x, x' \in X$ следует, что $x = x'$. Например, отображение $f : \mathbb{Z} \to \mathbb{Z}$, при котором $f(x) = x + 1$, инъективно.

Отображение множеств $f : X \to Y$ *сюръективно*, если для любого $y \in Y$ найдется такой элемент $x \in X$, что $f(x) = y$. Например, отображение f множества всех вещественных чисел $\mathbb{R}$ в множе-

ство всех неотрицательных вещественных чисел, при котором $f(x) = x^2$, является сюръективным.

Наконец, инъективное и сюръективное отображение называется *биективным.*

Отображение групп $f : G \to H$ называется *гомоморфизмом*, если $f(xy) = f(x)f(y)$ для всех $x, y \in G$. Инъективный гомоморфизм называется *мономорфизмом.* Сюръективный гомоморфизм называется *эпиморфизмом.* Биективный гомоморфизм называется *изоморфизмом.* Две группы G, H *изоморфны* (обозначение: $G \simeq H$), если существует изоморфизм $G \dashrightarrow H$. Изоморфизм группы на себя называется *автоморфизмом.* Примеры гомоморфизмов:

1) отображение $A \mapsto \det A$ из $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ в $\mathbb{C}^*$;

2) отображение $\sigma \mapsto (-1)^\sigma$ из $\mathbf{S}_n$ в группу, состоящую из двух чисел $\{\pm 1\}$ относительно умножения;

3) отображение $z \mapsto \dfrac{z}{|z|}$ из группы $\mathbb{C}^*$ в группу $\mathbf{U}$.

Упражнение 1.11. Доказать, что если g — фиксированный элемент группы G, то отображение $x \mapsto gxg^{-1}$ является автоморфизмом группы G.

Упражнение 1.12. Доказать ряд утверждений.

1. Пусть V — векторное пространство. Поставим в соответствие каждому вектору $v \in V$ сдвиг $f_v(x) = x + v$. Доказать, что отображение $v \mapsto f_v$ задает изоморфизм аддитивной абелевой группы векторного пространства V и подгруппы всех сдвигов из $\mathrm{Aff}\, V$.

2. Пусть V — вещественное (комплексное) векторное пространство размерности n. Выберем в V некоторый базис. Тогда каждый линейный оператор A задается в этом базисе своей матрицей A. Доказать, что сопоставление каждому обратимому линейному оператору A его матрицы A в выделенном базисе задает изоморфизм групп $\mathrm{GL}(V) \to \mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$ в вещественном случае и изоморфизм $\mathrm{GL}(V) \to \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ в комплексном случае.

3. Пусть в евклидовом пространстве E размерности n выбран ортонормированным базис. Каждый линейный оператор A задается в этом базисе ортогональной матрицей A. Доказать, что сопоставление $A \mapsto A$ задает изоморфизм групп $\mathbb{O}(V) \to \mathbb{O}(n, \mathbb{R})$. Аналогично получается изоморфизм групп $\mathrm{SO}(V) \to \mathrm{SO}(n, \mathbb{R})$.

4. Пусть в эрмитовом пространстве $\mathfrak{E}$ размерности n выбран ортонормированный базис. Каждый линейный оператор A задается в этом базисе унитарной матрицей A. Доказать, что сопоставление $A \mapsto A$ задает изоморфизм групп $\mathrm{U}(V) \to \mathrm{U}(n, \mathbb{C})$. Это же сопоставление задает изоморфизм групп $\mathrm{SU}(V) \to \mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$.

5. Пусть в симплектическом пространстве V размерности $2n$ выбран базис в соответствии с теоремой 7.8. Доказать, что сопоставление каждому симплектическому оператору $A \in \mathrm{Sp}(V)$ его матрицы A в этом базисе задает изоморфизм $\mathrm{Sp}(V) \simeq \mathrm{Sp}(n, \mathbb{C})$ в комплексном случае и изоморфизм $\mathrm{Sp}(V) \simeq \mathrm{Sp}(n, \mathbb{R})$ в вещественном случае.

6. Пусть в вещественном (комплексном) пространстве V размерности n с билинейной функций f выбран базис. Каждый линейный оператор $\mathcal{A}$ задается в этом базисе матрицей A. Предположим, что F — матрица функции f в этом базисе. Доказать, что сопоставление $\mathcal{A} \mapsto A$ задает изоморфизм групп $\mathbb{O}(f) \to \mathbb{O}(n, F)$.

7. Пусть в комплексном пространстве V размерности n с полуторалинейной функций f выбран базис. Каждый линейный оператор $\mathcal{A}$ задается в этом базисе матрицей A. Предположим, что F — матрица функции f в этом базисе. Доказать, что сопоставление $\mathcal{A} \mapsto A$ задает изоморфизм групп $\mathrm{U}(f) \to \mathrm{U}(n, F)$.

8. Пусть V — комплексное пространство с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. Тогда V можно рассматривать и как вещественное векторное пространство с базисом $\mathbf{e}' = (e_1, \ldots, e_n, ie_1, \ldots, ie_n)$. Каждый линейный оператор $\mathcal{A}$ в комплексном пространстве V является линейным оператором в V как вещественном пространстве удвоенной размерности. Пусть $A_{\mathbb{C}}$ — матрица оператора $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}$ как оператора комплексного пространства V, а $A_{\mathbb{R}}$ — матрица $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}'$ как оператора в вещественном пространстве. Доказать, что

а) если $A_{\mathbb{C}} = A' + iA''$, где A', A'' — вещественные квадратные матрицы размера n, то A_R — вещественная квадратная матрица размера $2n$:

$$A_{\mathbb{R}} = \begin{pmatrix} A' & -A'' \\ A'' & A' \end{pmatrix};$$

б) если $A_{\mathbb{C}} = B_{\mathbb{C}} D_{\mathbb{C}}$, то $A_{\mathbb{R}} = B_{\mathbb{R}} D_{\mathbb{R}}$;

в) если $A_{\mathbb{C}} \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, то $A_{\mathbb{R}} \in \mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})$, причем сопоставление $A_{\mathbb{C}} \to A_{\mathbb{R}}$ является гомоморфизмом групп $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C}) \to \mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$.

Автоморфизм из упражнения 1.11 называют *внутренним*, а также *сопряжением* с помощью элемента g.

Результаты, полученные в упражнении 1.12, устанавливают взаимно-однозначное соответствие между подгруппами группы преобразований линейного пространства и бесконечными группами матриц, перечисленными в подразд. 1.1 . Докажем важную теорему об аналогичных свойствах конечных групп.

ТЕОРЕМА 1.8 (теорема Кэли). Пусть задана группа G конечного порядка n. Тогда G изоморфна подгруппе группы перестановок $\mathbf{S}_n$.

Доказательство. Предположим, что группа G содержит элементы $\{g_1, \ldots, g_n\}$. Возьмем произвольный элемент g из группы G и рассмотрим элементы $\{gg_1, \ldots, gg_n\}$. Если $gg_i = gg_j$, то, домножая это равенство слева на g^{-1}, получаем, что $g_i = g^{-1}gg_i = g^{-1}gg_j = g_j$. Следовательно, множество $\{gg_1, \ldots, gg_n\}$ состоит из всех элементов группы G. Другими словами, если $gg_i = g_{\boldsymbol{\sigma}(i)}$, то отображение $i \mapsto \boldsymbol{\sigma}(i)$ является перестановкой из $\mathbf{S}_n$. Заметим далее, что, если $g, h \in G$ и элементу g сопоставлена перестановка $\boldsymbol{\sigma}$, а эле-

менту h — перестановка τ, то элементу gh сопоставляется перестановка $\sigma\tau \in \mathbf{S}_n$. Действительно, для любого элемента $g_i \in G$ получаем $(gh)g_i = g(hg_i) = gg_{\tau(i)} = g_{\sigma(\tau(i))}$. Это означает, что построенное отображение из G в $\mathbf{S}_n$ является гомоморфизмом.

В частности, образ отображения, т. е. множество всех получающихся перестановок σ, является подгруппой.

Покажем, что наше отображение инъективно. Пусть $g, h \in G$ и обоим этим элементам соответствует одна и та же перестановка. Это означает, что $gg_i = hg_i$ для любого элемента $g_i \in G$. Умножая последнее равенство на g_i^{-1} справа, получаем, что $g = h$. Таким образом, построенный гомоморфизм является на самом деле изоморфизмом группы G и ее образа в $\mathbf{S}_n$.

Отметим еще один интересный пример мономорфизма групп. Пусть V — линейное n-мерное пространство и $W = V \oplus L$, где L — одномерное пространство с базисом, состоящим из одного элемента e. Предположим, что $\Phi \in \mathrm{Aff}(V)$ — аффинное преобразование в V (см. подразд. 7.9), т. е. $\Phi(x) = \phi(x) + b$ для любого вектора $x \in V$, где ϕ — линейный обратимый оператор в V и $b \in V$. Зададим линейный оператор Φ' в W по правилу: $\Phi'(x + \lambda e) = \phi(x) + \lambda(b + e) \in W$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.10. Сопоставление $\Phi \mapsto \Phi'$ является мономорфизмом группы $\mathrm{Aff}(V)$ в группу $\mathrm{GL}(W)$.

Доказательство. Покажем сначала, что Φ' является линейным оператором. Пусть $x, y \in V$ и λ_1, λ_2 — скаляры. Тогда для любых скаляров α, β имеем

$$\Phi'\left[\alpha(x + \lambda_1 e) + \beta(y + \lambda_2 e)\right] = \Phi'\left[(\alpha x + \beta y) + (\alpha\lambda_1 + \beta\lambda_2)e\right] =$$
$$= \phi(\alpha x + \beta y) + (\alpha\lambda_1 + \beta\lambda_2)(b + e) =$$
$$= \alpha\left[\phi(x) + \lambda_1(b + e)\right] + \beta\left[\phi(y) + \lambda_2(b + e)\right] = \alpha\Phi'(x + \lambda_1 e) + \beta\Phi'(y + \lambda_2 e).$$

Покажем теперь, что $(\Phi\Psi)' = \Phi'\Psi'$ и $(\Phi^{-1})' = (\Phi')^{-1}$ для любых $\Phi, \Psi \in \mathrm{Aff}(V)$. Действительно, если Φ, ϕ, b определены так же, как и выше, и $\Psi(x) = \psi(x) + c$, то по (1.7) и (1.8) имеем

$$(\Phi\Psi)(x) = (\phi\psi)(x) + \phi(c) + b, \quad \Phi^{-1}(x) = \phi^{-1}(x) - \phi^{-1}(b).$$

Поэтому

$$\Phi'\Psi'(x + \lambda e) = \Phi'\left[\psi(x) + \lambda(e + c)\right] = \phi\left[\psi(x) + \lambda c\right] + \lambda(e + b) =$$
$$= (\phi\psi)(x) + \lambda(\phi(c) + b + e) = (\Phi\Psi)'(x + \lambda e).$$

Заметим, что если $\Phi\Psi$ — единичный элемент группы $\mathrm{Aff}(V)$, то $\phi\psi$ — тождественный линейный оператор и $\phi(c) +$

$+b = 0$. Поэтому $(\Phi\Psi)' = \varepsilon$ — тождественный линейный оператор. Следовательно, $\Psi' = (\Phi')^{-1} = (\Phi^{-1})'$.

Остается заметить, что если $\Phi' = \Psi'$, то $\phi(x) = \Phi'(x) = \Psi'(x) = \psi(x)$ и $b = (e+b) - e = \Phi'(e) - e = \Psi'(e) - e = (e+c) - e = c$. Отсюда вытекает инъективность соответствия $\Phi \mapsto \Phi'$.

В частном случае (рис. 1.10) мономорфизм $\Phi \mapsto \Phi'$ переводит точки на плоскости V в точки трехмерного евклидова пространства W.

У п р а ж н е н и е 1.13. Предположим, что в пространстве V задано аффинное преобразование $\Phi(x) = \phi(x) + b$, где ϕ — обратимый линейный оператор и $b \in V$. Пусть $(e_1, \ldots, e_n)$ — базис пространства V и A — матрица оператора ϕ:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & & a_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & & a_{nn} \end{pmatrix};$$

$b = b_1 e_1 + \cdots + b_n e_n$. Доказать, что в базисе $(e_1, \ldots, e_n, e)$ пространства W матрица Φ' имеет вид

$$\Phi' = \begin{pmatrix} a_{11} & & a_{1n} & b_1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & & a_{nn} & b_n \\ 0 & & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.18}$$

Введем две важные конструкции теории групп: нормальную подгруппу и фактор-группу.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.11. Пусть задан гомоморфизм групп $f : G \to H$; $1, 1'$ — соответствующие единичные элементы в этих группах. Тогда $f(1) = 1'$ и $f(x^{-1}) = f(x)^{-1}$ для всех $x \in G$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Имеем $f(1) = f(1 \cdot 1) = f(1)f(1)$. Умножая на $f(1)^{-1}$ в группе H, получаем первое утверждение. Далее $1' = f(1) = f(x \cdot x^{-1}) = f(x)f(x^{-1})$. Умножая на $f(x)^{-1}$ слева, получаем второе утверждение.

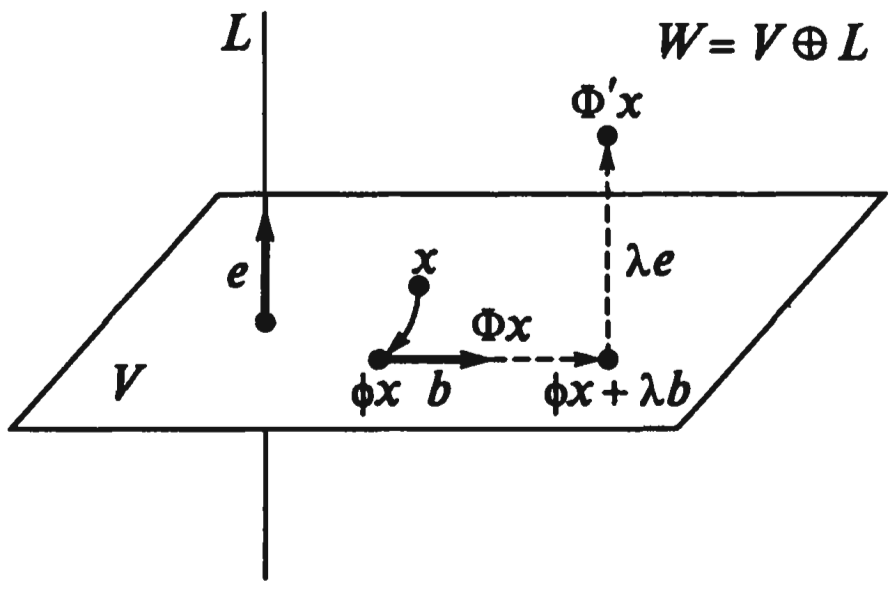


Рис. 1.10. Мономорфизм групп $\mathrm{Aff}(V) \to GL(V \oplus L)$

У п р а ж н е н и е 1.14. Пусть задан гомоморфизм групп $f : G \to H$. Доказать следующие положения:

1) если G_1 — подгруппа в G, то образ $f(G_1)$ является подгруппой в H;

2) если $g : H \to F$ — гомоморфизм групп, то $gf : G \to F$ также является гомоморфизмом групп.

Подгруппу H в группе G называют *нормальной*, если $xHx^{-1} \subseteq H$ для любого $x \in G$. Определению нормальной подгруппы, очевидно, удовлетворяет группа G и ее подмножество, состоящее из одного единичного элемента. Нормальную подгруппу H в группе G обозначают $H \lhd G$. Далее мы увидим, что нормальная подгруппа сохраняет некоторые свойства содержащегося в ней единичного элемента $e \in G$.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.12. Пусть H — подгруппа в группе G. Тогда эквивалентны следующие условия:

1) подгруппа H нормальна в G;

2) $xHx^{-1} = H$ для любого $x \in G$;

3) каждый левый смежный класс группы G по подгруппе H является правым смежным классом;

4) каждый правый смежный класс группы G по подгруппе H является левым смежным классом.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть выполнено первое условие и $x \in G$. Тогда

$$x^{-1}H(x^{-1})^{-1} = x^{-1}Hx \subseteq H,$$

откуда $H \subseteq xHx^{-1}$ и поэтому $xHx^{-1} = H$ в силу первого условия.

Пусть теперь выполнено второе условие. Тогда $xH = xHx^{-1}x = Hx$, т. е. выполнено третье условиие.

Предположим теперь, что выполнено третье условие, и рассмотрим левый смежный класс xH. По условию он является правым смежным классом, содержащим x, т. е. $xH = Hx$ по предложению 1.9. Отсюда вытекает второе условие и, следовательно, первое.

Итак, первые три условия эквивалентны. Аналогично можно показать, что четвертое условие эквивалентно второму.

Пусть $f : G \to H$ — гомоморфизм групп. *Ядром* гомоморфизма $\ker f$ называется множество всех таких $x \in G$, что $f(x) = 1$.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.13. Ядро $\ker f \lhd G$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим, что $x, y \in \ker f$ и $g \in G$. Тогда $f(xy) = f(x)f(y) = 1$, $f(x^{-1}) = f(x)^{-1} = 1$ в силу предложения 1.11. Следовательно, $\ker f$ является подгруп-

пой. Кроме того, $f(gxg^{-1}) = f(g)f(x)f(g)^{-1} = f(g)f(g)^{-1} = 1$, так как $f(x) = 1$. Отсюда следует утверждение.

Доказанное свойство используется в теории представлений групп (гл. 3). Во многих из рассмотренных групп имеются содержательные нормальные подгруппы (отличные от исходной группы и от ее тривиальной подгруппы из одного единичного элемента).

Упражнение 1.15. Доказать следующие положения:
1) $\mathbf{A}_n \triangleleft \mathbf{S}_n$;
2) $\mathrm{SL}(n, \mathbb{C}) \triangleleft \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$;
3) $\mathbf{V}_4 \triangleleft \mathbf{S}_4$ и $\mathbf{S}_3 \not\triangleleft \mathbf{S}_4$; здесь $\mathbf{V}_4$ — группа Клейна из упражнения 1.5;
4) $\mathrm{SO}_+(1,3) \triangleleft \mathbb{O}(1,3)$, $\mathrm{SO}(1,3) \triangleleft \mathbb{O}(1,3)$, $\mathbb{O}_+(1,3) \triangleleft \mathbb{O}(1,3)$.

Упражнение 1.16. Пусть $f : G \to H$ — гомоморфизм групп. Доказать, что f является мономорфизмом в том и только в том случае, когда $\ker f = \mathbf{1} \in H$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.14. Пусть $f : G \to H$ — гомоморфизм групп и $x \in G$. Тогда $f^{-1}(f(x)) = x \ker f$.

Доказательство. Заметим, что в силу упражнения 1.10:

$$y \in f^{-1}(f(x)) \iff f(y) = f(x) \iff f(x^{-1}y) = 1$$
$$\iff x^{-1}y \in \ker f \iff x \ker f = y \ker f.$$

Отсюда следует предлагаемое утверждение.

Следующая теорема была фактически доказана при рассмотрении примера группы симметрий $\mathrm{Sym}(T)$ тетраэдра T.

ТЕОРЕМА 1.9. Пусть $\mathrm{Sym}(T)$ — группа симметрий тетраэдра T. Тогда $\mathrm{Sym}(T) \simeq \mathbf{S}_4$.

Значение нормальной подгруппы следует из того обстоятельства, что в группе G можно выделить подгруппу ее подмножеств, где нормальная подгруппа играет роль единичного элемента. Данный шаг упрощает строение группы G, сохраняя ее алгебраические свойства.

Пусть $N \triangleleft G$. Рассмотрим множество G/N всех смежных классов группы G по подгруппе N. На G/N введем операцию умножения по правилу $(xN)(yN) = xyN$.

ТЕОРЕМА 1.10. G/N является группой относительно введенного умножения.

Доказательство. Проверим сначала корректность умножения. Пусть $xN = zN$, $yN = tN$. Тогда $z = xh_1$, $t = yh_2$, где $h_1, h_2 \in N$. Отсюда $zt = xh_1yh_2 = xy(y^{-1}h_1y)h_2$, причем $y^{-1}h_1yh_2 \in N$, так как N — нормальная подгруппа в G. Таким образом, $zt \in xyN$, откуда $ztN = xyN$ по предложению 1.9.

Проверим выполнение аксиом группы. Ясно, что умножение ассоциативно, единицей является смежный класс $1N = N$, и $(xN)^{-1} = x^{-1}N$.

Построенную группу G/N называют *фактор-группой*.

Рассмотрим отображение $\pi : G \to G/N$, при котором $\pi(x) = xN$. Непосредственная проверка показывает, что π является эпиморфизмом и $\ker \pi = N$, т. е. образом нормальной подгруппы в группе G/N служит единичный элемент. Гомоморфизм π называют *естественным гомоморфизмом* (рис. 1.11).

Следующая теорема утверждает, что отображение одной группы на другую группу (гомоморфизм) снова является группой. Она используется в теории представлений.

ТЕОРЕМА 1.11 (теорема о гомоморфизмах). Пусть задан гомоморфизм групп $f : G \to H$. Тогда $G/\ker f \simeq f(G)$.

Таким образом, группа отображений элементов $g \in G$ в элементы $h \in H$ изоморфна фактор-группе в G по ядру гомоморфизма $G \to H$.

Доказательство. Пусть $x \in G$. Из предложения 1.14 вытекает, что $f^{-1}(f(x)) = x \ker f$. Зададим отображение $\zeta : f(G) \to G/\ker f$ по правилу $\zeta(f(x)) = f^{-1}(f(x)) = x \ker f$. Проверим, что введенное отображение ζ является гомоморфизмом групп. Действительно, пусть $x, y \in G$. Тогда $xy \in f^{-1}(f(xy))$, т. е.

$$\zeta(f(xy)) = xy(\ker f) = (x \ker f)(y \ker f) = \zeta(f(x))\zeta(f(y)).$$

Следовательно, отображение ζ является гомоморфизмом.

Убедимся, что гомоморфизм ζ является мономорфизмом. Пусть $g, h \in f(G)$ и $\zeta(g) = \zeta(h)$. Из определения ζ следует, что $g = f(x)$, $h = f(y)$ для некоторых $x, y \in G$. Отсюда $x \ker f = y \ker f$, и поэтому $g = f(x) = f(y) = h$.

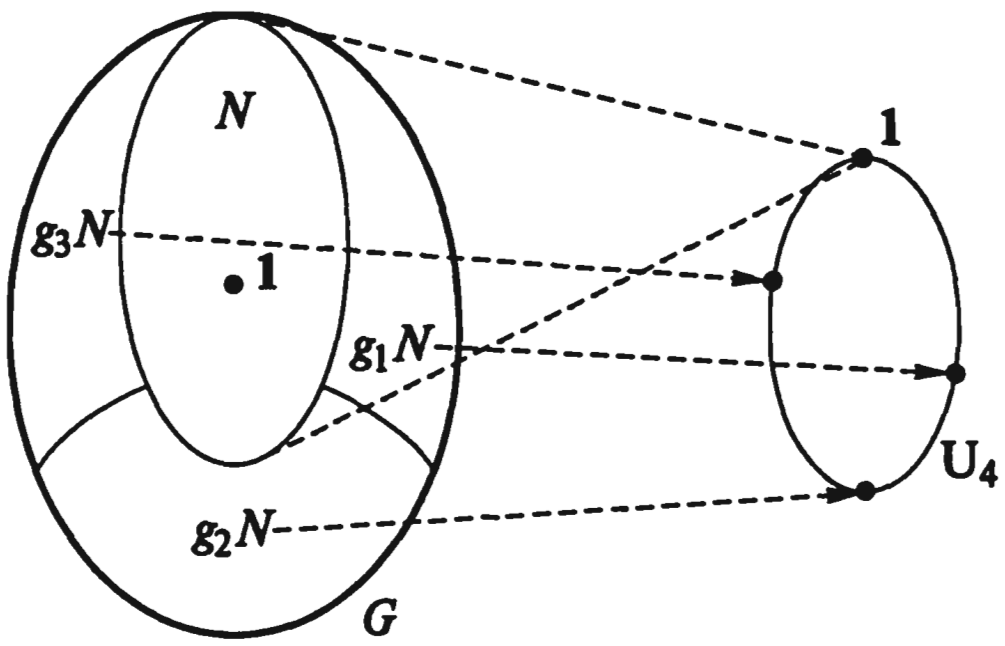


Рис. 1.11. Схема образования фактор-группы $F = G/N$ и построения естественного гомоморфизма $G \to U_4$

Убедимся, что отображение ζ сюръективно. Если $x \in G$, то $x \ker f = \zeta(f(x))$, т. е. смежный класс по модулю ядра f, содержащий x, совпадает с $\zeta(f(x))$. Итак, доказано, что ζ является изоморфизмом.

Упражнение 1.17. Доказать следующие положения:
1) $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})/\mathrm{SL}(n,\mathbb{C}) \simeq \mathbb{C}^*$;
2) $\mathbf{S}_n/\mathbf{A}_n \simeq \{\pm 1\}$;
3) $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z} \simeq \mathbf{U}_n$;
4) $C^*/R^+ \simeq \mathbb{R}^*$;
5) $\mathbb{O}(1,3)/\mathrm{SO}_+(1,3) \simeq \mathbf{V}_4$.

Для любой группы G обозначим $\mathrm{Aut}\, G$ — множество всех автоморфизмов группы G, а $\mathrm{Inaut}\, G$ — множество всех внутренних автоморфизмов в G.

Упражнение 1.18. Доказать, что $\mathrm{Aut}\, G$ является группой, где в качестве умножения взята композиция (произведение) автоморфизмов, в качестве единичного элемента — тождественный автоморфизм, в качестве обратного автоморфизма — обратное отображение. Доказать, что все внутренние автоморфизмы являются нормальной подгруппой в $\mathrm{Aut}\, G$.

ТЕОРЕМА 1.12. Имеется изоморфизм $\mathbf{S}_4/\mathbf{V}_4 \simeq \mathbf{S}_3$.
Доказательство. Рассмотрим многочлены

$$F_1 = X_1X_2 + X_3X_4, \quad F_2 = X_1X_3 + X_2X_4,$$
$$F_3 = X_1X_4 + X_2X_3 \tag{1.19}$$

от четырех переменных X_1, X_2, X_3, X_4. Легко убедиться, что любая перестановка этих переменных сохраняет или переставляет многочлены F_1, F_2, F_3. Таким образом, с помощью (1.19) получаем гомоморфизм группы $\mathbf{S}_4$ в группу $\mathbf{S}_3$. Ядром этого гомоморфизма является подгруппа Клейна $\mathbf{V}_4$, так как перестановки (12)(34), (13)(24) и (14)(23) сохраняют многочлены (1.19). Заметим, что каждая перестановка (транспозиция) любых двух многочленов из F_1, F_2, F_3 лежит в образе гомоморфизма $Im\ \mathbf{S}_4$ (подразд. 7.6). По теореме 1.3 каждая перестановка является произведением транспозиций. Следовательно, $Im\ \mathbf{S}_4$ совпадает с $\mathbf{S}_3$. Остается воспользоваться теоремой 1.11 о гомоморфизмах.

Отметим важный пример нормальной подгруппы в любой группе G. Назовем *центром* группы G множество $Z(G)$ всех таких элементов $z \in G$, что $gz = zg$ для всех $g \in G$.

Упражнение 1.19. Доказать, что центр $Z(G)$ группы G является нормальной подгруппой в G. Группа абелева тогда и только тогда, когда она совпадает со своим центром.

Можно показать, что выполняются следующие положения:
1) $Z(\mathbf{S}_n) = 1$ при $n \geqslant 3$;
2) $Z(\mathbf{Q}_8) = \{\pm E\}$;
3) $Z(\mathbf{D}_{2n}) = \langle a^n \rangle$ и $Z(\mathbf{D}_{2n+1}) = 1$;
4) $Z(\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})) = \{\lambda E \mid \lambda \in \mathbb{C}^*\}$; $Z(\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})) = \{\lambda E \mid \lambda \in \mathbb{R}^*\}$.

1.7. КЛАССЫ СОПРЯЖЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Набор подгрупп группы G не может играть роль «базиса» для ее подмножеств, поскольку все подгруппы пересекаются хотя бы по одному общему (единичному) элементу. Рассмотрим разбиение группы на непересекающиеся подмножества.

Два элемента x, y группы G *сопряжены*, если существует такой элемент $g \in G$, что $x = gyg^{-1}$. *Классом сопряженных элементов* в G называют множество всех взаимно сопряженных элементов из G. Класс сопряженных элементов, содержащий некоторый элемент $x \in G$, обозначают $K(x)$.

Упражнение 1.20. Доказать, что в любой группе G элемент z образует одноэлементный класс $K(z)$ тогда и только тогда, когда элемент z лежит в центре $Z(G)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.15. Два класса сопряженных элементов либо совпадают, либо не пересекаются.

Доказательство. Пусть X, Y — два класса сопряженных элементов в G. Предположим, что $x \in X \cap Y$. Если $z \in X$, то $z = gxg^{-1}$ для некоторого элемента $g \in G$. Если $y \in Y$, то $y = hxh^{-1}$ для некоторого $h \in G$. Отсюда $x = h^{-1}yh$ и

$$z = g(h^{-1}yh)g^{-1} = (gh^{-1})y(gh^{-1})^{-1}.$$

Таким образом, $X \subseteq Y$. Аналогично $Y \subseteq X$, и поэтому $X = Y$.

СЛЕДСТВИЕ. Разные классы сопряженных элементов не пересекаются.

Рассмотрим классы сопряженных элементов в двух важнейших группах: $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ и $\mathbf{S}_n$. Из курса линейной алгебры известно, что две матрицы сопряжены тогда и только тогда, когда они имеют одинаковую жорданову форму (см. гл. 7). Таким образом, вопрос о сопряженности двух матриц сводится к вычислению и сравнению их жордановых форм.

Перейдем к рассмотрению вопроса о сопряженности в $\mathbf{S}_n$. По теореме 1.2 каждая перестановка из $\mathbf{S}_n$ разлагается в произведение независимых циклов.

ТЕОРЕМА 1.13. Две перестановки из $\mathbf{S}_n$ сопряжены в том и только в том случае, когда они имеют одинаковое цикловое строение.

Доказательство. Пусть задан цикл $(i_1, \ldots, i_k) \in \mathbf{S}_n$ и произвольная перестановка $\pi \in \mathbf{S}_n$. Тогда

$$\pi(i_1, \ldots, i_k)\pi^{-1} = (\pi(i_1), \ldots, \pi(i_k)).$$

Поэтому если разложение $\sigma \in \mathbf{S}_n$ в произведение независимых циклов имеет вид

$$\sigma = (k_0, k_1, \ldots, k_l)(j_0, j_1, \ldots, j_t)\cdots,$$

то разложение на независимые циклы для сопряженной перестановки $\pi\sigma\pi^{-1}$ можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned}\pi\sigma\pi^{-1} &= \pi(k_0, k_1, \ldots, k_l)\pi^{-1} \cdot \pi(j_0, j_1, \ldots, j_t)\pi^{-1}\cdots = \\ &= (\pi(k_0), \pi(k_1), \ldots, \pi(k_l))(\pi(j_0), \pi(j_1), \ldots, \pi(j_t))\cdots\end{aligned}$$

Обратно, пусть перестановки σ, τ имеют одинаковое цикловое строение:

$$\begin{aligned}\sigma &= (k_0, k_1, \ldots, k_l)(j_0, j_1, \ldots, j_t)\cdots, \\ \tau &= (k'_0, k'_1, \ldots, k'_l)(j'_0, j'_1, \ldots, j'_t)\cdots.\end{aligned}$$

Как отмечено выше, $\pi\sigma\pi^{-1} = \tau$, где

$$\pi = \begin{pmatrix} k_0 & k_1 & \ldots & k_l & j_0 & j_1 & \ldots & j_t & \ldots \\ k'_0 & k'_1 & \ldots & k'_l & j'_0 & j'_1 & \ldots & j'_t & \ldots \end{pmatrix}.$$

В частности, в группе $\mathbf{S}_3$ имеются три класса сопряженных элементов. Это класс $\{1\}$, состоящий из единичного элемента; класс $\{(1, 2), (2, 3), (1, 3)\}$, состоящий из всех циклов длины 2; класс $\{(1, 2, 3), (1, 3, 2)\}$, состоящий из всех циклов длины 3.

В группе $\mathbf{S}_4$ имеются пять классов: $\{1\}$; $\{(1,2), (1,3), (1,4), (2,3), (2,4), (3,4)\}$; $\{(1,2,3), (1,3,2), (1,2,4), (1,4,2), (1,3,4), (1,4,3), (2,3,4),(2,4,3)\}$; $\{(1,2)(3,4), (1,3)(2,4), (1,4)(2,3)\}$; $\{(1,2,3,4), (1,2,4,3), (1,3,2,4), (1,3,4,3), (1,4,2,3), (1,4,3,2)\}$.

Из теоремы 1.13 следует существование взаимно-однозначного соответствия между классами сопряженных элементов в $\mathbf{S}_n$ и наборами длин $\{k_1, k_2, \ldots, k_m\}$ ее независимых циклов. Поскольку независимые циклы коммутируют, можно считать, что их длины упорядочены, т. е. $k_1 \geqslant k_2 \geqslant \ldots, k_m \geqslant 1$. При этом, разумеется, $k_1 + k_2 + \cdots + k_m = n$ и поэтому, в частности, $m \leqslant n$. Набор невозрастающих натуральных чисел $\{k_1, k_2, \ldots, k_m\}$ с условием $k_1 + k_2 + \cdots + k_m = n$ называется *разбиением* числа n. Среди чисел

$k_1, k_2, \ldots, k_m$ могут встречаться одинаковые. Поэтому разбиение $\{k_1, k_2, \ldots, k_m\}$ часто записывают символом $[t_1^{a_1} \cdots t_d^{a_d}]$, который расшифровывается как

$$\{\underbrace{t_1, \ldots, t_1}_{a_1}, \underbrace{t_1, \ldots, t_1}_{a_2}, \ldots, \underbrace{t_d, \ldots, t_d}_{a_d}, \},$$

$$t_1 > t_2 > \cdots > t_d > 0. \tag{1.20}$$

При этом $a_1 t_1 + \cdots + a_d t_d = n$.

Найдем число элементов в классе, соответствующем разбиению $[t_1^{a_1} \cdots t_d^{a_d}]$. Для этого сначала вспомним, что число разбиений множества $\{1, \ldots, n\}$ на подмножества порядков, указанных в (1.20),

$$\binom{n}{(t_1)^{a_1} \cdots (t_d)^{a_d}} = \frac{n!}{(t_1!)^{a_1} \cdots (t_d!)^{a_d}}.$$

Как отмечалось, два цикла $(i_1, \ldots, i_k)$ и $(i'_1, \ldots, i'_k)$ совпадают в том и только том случае, если один получается из другого циклической перестановкой входящих в него чисел. Таких циклических перестановок в цикле из k элементов имеется в точности k. Таким образом, из множества $\{i_1, \ldots, i_k\}$ получается

$$k!/k = (k-1)!$$

разных циклов длины k. Кроме того, необходимо учесть, что любые перестановки циклов одной длины приводят к элементу из того же класса. Число же циклов длины t_j по определению (1.20) равно a_j. Поэтому имеется $a_j!$ перестановок циклов длины t_j. Отсюда вытекает, что количество элементов в классе, соответствующем разбиению $[t_1^{a_1} \cdots t_d^{a_d}]$, равно отношению

$$\frac{n!/(t_1!)^{a_1} \cdots (t_d!)^{a_d}}{((t_1-1)!)^{a_1} \cdots ((t_d-1)!)^{a_d}\, a_1! \cdots a_d!} = \frac{n!}{t_1^{a_1} a_1! \cdots t_d^{a_d} a_d!}. \tag{1.21}$$

Рассмотрим вопрос о классах сопряженных элементов в группах диэдра $\mathbf{D}_n$, $n \geqslant 3$, и в группе кватернионов $\mathbf{Q}_8$.

Как отмечалось, группа диэдра $\mathbf{D}_n$, $n \geqslant 3$ состоит из подгруппы поворотов $\langle a \rangle_n$ и смежного класса $b\langle a \rangle_n$, состоящего из всех зеркальных отражений относительно некоторых прямых, проходящих через центр. При этом

$$(ba^t)a^k(ba^t)^{-1} = a^k,$$
$$a^k(ba^t)a^{-k} = ba^t, \quad (ba^t)(ba^k)(ba^t)^{-1} = ba^k.$$

Таким образом, при четном $n = 2m$ смежными классами в $\mathbf{D}_n$ будут

$$\{\mathbf{1}\},\ \{a, a^{n-1}\},\ \ldots,\ \{a^{m-1}, a^{m+1}\},\ \{a^m\},$$
$$\{b, ba^2, \ldots, ba^{2m-2}\},\ \{ba, ba^3, \ldots, ba^{2m-1}\}.$$

Заметим, что элементы класса $\{b, ba^2, \ldots, ba^{2m-2}\}$ являются зеркальными отражениями относительно прямых, которые соединяют противоположные вершины n-угольника, а все элементы класса $\{ba, ba^3, \ldots, ba^{2m-1}\}$ — зеркальными отражениями относительно прямых, соединяющих середины противоположных сторон n-угольника.

При нечетном $n = 2m+1$ смежными классами в $\mathbf{D}_n$ являются

$$\{\mathbf{1}\},\ \{a, a^{n-1}\},\ \ldots,\ \{a^m, a^{m+1}\},\quad \{b, ba, ba^2, \ldots, ba^{2m}\}.$$

Аналогично, непосредственные вычисления показывают, что классы сопряженных элементов в группе $\mathbf{Q}_8$:

$$\{E\},\ \{-E\},\ \{I, -I\},\ \{J, J\},\ \{K, -K\}.$$

Приведем доказательства ряда теорем о подобии в группах $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$, $\mathbb{O}(n, \mathbb{R})$.

ТЕОРЕМА 1.14. Пусть $U \in \mathrm{U}(n, \mathbb{C})$. Тогда матрица U сопряжена в $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$ диагональной матрице с диагональными элементами $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, где $|\lambda_j| = 1$ для любого $j = 1, \ldots, n$.

Для доказательства этой теоремы воспользуемся следующей леммой.

ЛЕММА 1.3. Пусть U — унитарный (ортогональный) линейный оператор в эрмитовом (соответственно, евклидовом) пространстве L, и W — инвариантное подпространство. Тогда ортогональное дополнение этого подпространства $W^\perp$ также инвариантно относительно U.

Доказательство. Если U — унитарный линейный оператор в эрмитовом пространстве L, достаточно показать, что U имеет в L собственный ортонормированный базис. Оператор U имеет в L собственный вектор e_1 с собственным значением λ_1, причем можно считать, что $\|e_1\| = 1$. Тогда по лемме 1.3 $\langle e_1 \rangle^\perp$ инвариантно относительно U. По индукции в $\langle e_1 \rangle^\perp$ существуют и остальные векторы $e_2, \ldots, e_n$ искомого базиса.

ТЕОРЕМА 1.15. Пусть $U \in \mathbb{O}(n, \mathbb{R})$. Тогда матрица U сопряжена в $\mathbb{O}(n, \mathbb{R})$ блочно-диагональной матрице с блоками размера не больше 2. Блоки размера 1 имеют вид ± 1. Блоки размера 2 имеют вид

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{1.22}$$

Для доказательства теоремы 1.15 используем следующие леммы.

ЛЕММА 1.4. Пусть U — линейный оператор в вещественном пространстве L. Тогда он имеет одномерное или двумерное инвариантное подпространство.

ЛЕММА 1.5. Пусть Q — ортогональная (2×2)-матрица, не имеющая вещественного собственного значения. Тогда Q имеет вид (1.22).

Доказательство. Пусть U — ортогональный линейный оператор в евклидовом пространстве L, имеющий собственный вектор e_1 с вещественным собственным значением λ_1, причем $|\lambda_1| = 1$. Дальше следует повторить доказательство предыдущей теоремы.

Пусть U имеет двумерное инвариантное подпространство W, в котором нет собственного вектора. Тогда в любом ортонормированном базисе W матрица ограничения $U|_W$ оператора U на W имеет вид (1.22)*. При этом ортогональное дополнение $W^\perp$ инвариантно относительно U. Соображения индукции завершают доказательство.

Упражнение 1.21. Пусть $g \in \mathrm{SO}(1,3)$. Показать, что $g = ub(x)v$, где $u, v \in \mathrm{SO}_+(1,3)$ и

$$b(x) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} x & \operatorname{sh} x & 0 & 0 \\ \operatorname{sh} x & \operatorname{ch} x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где

$$\operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}.$$

Опишем класс сопряженных элементов $K(x)$ элемента x из произвольной группы G в терминах некоторых подгрупп в группе G. Для этого обозначим $C(x)$ *централизатор* элемента x, т. е. множество всех таких $g \in G$, что $gxg^{-1} = x$. Это эквивалентно условию коммутации $gx = xg$. (Напомним, что центром группы G называется множество элементов $g \in G$, перестановочных со всеми ее элементами.)

Упражнение 1.22. Доказать, что централизатор $C(x)$ является подгруппой в G.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.16. Существует взаимно однозначное соответствие между левыми смежными классами группы G по централизатору $C(x)$ и элементами класса

*Ограничением $U|_W$ называется такой оператор на W, что $U|_W(x) = V(x)$ для всех $x \in W$.

сопряженных элементов $K(x)$. В частности, порядок $|K(x)|$ равен числу левых смежных классов G по $C(x)$, т. е. порядок $|K(x)|$ делит порядок $|G|$ группы G.

Доказательство. Заметим, что если $h = gz$, $z \in C(x)$, то $hxh^{-1} = (gz)x(gz)^{-1} = gzxz^{-1}g^{-1} = gxg^{-1}$. Таким образом, левому смежному классу $gC(x)$ можно сопоставить элемент $gxg^{-1} \in K(x)$. Заметим, что если $u, v \in G$ и $uxu^{-1} = vxv^{-1}$, то $(v^{-1}u)x(u^{-1}v) = x$. Следовательно, $v^{-1}u \in C(x)$, поэтому два смежных класса $uC(x)$ и $vC(x)$ совпадают.

Для доказательства остальных утверждений нужно применить теорему Лагранжа 1.7.

Пусть p — простое число. Назовем *p-группой* конечную группу G, порядок которой является степенью числа p.

СЛЕДСТВИЕ. Центр p-группы содержит неединичный элемент.

Доказательство. Разобъем группу G на непересекающиеся классы сопряженных элементов, $G = K(x_1) \cup \cdots \cdots \cup K(x_n)$. Среди этих классов встречается одноэлементный класс $K(\mathbf{1})$, состоящий только из единичного элемента $\mathbf{1}$ (см. упражнение 1.20). Можно считать, что $x_1 = \mathbf{1}$. Тогда $G = K(\mathbf{1}) \cup K(x_2) \cup \cdots \cup K(x_n)$. По предложению 1.16 порядок $|K(x_i)|$ каждого класса $K(x_i)$ является делителем порядка G и потому является степенью числа p. Таким образом, $p^m = |G| = 1 + |K(x_2)| + \cdots + |K(x_n)|$. Поэтому найдется такой класс $K(x_i)$, не содержащий единичного элемента, что его порядок равен 1. Элемент x_i является неединичным центральным элементом (см. упражнение 1.20).

1.8. КОММУТАНТ ГРУППЫ

Коммутаторы непрерывных величин и (или) операторов играют важную роль в современной физике. Хотя в руководствах по классической и квантовой механике взаимосвязи некоммутирующих величин нередко вводятся из физических соображений, они основаны на перестановочных соотношениях между элементами неабелевых групп. Результаты этого раздела будут использованы, в частности, при знакомстве с алгебрами Ли в гл. 4.

Пусть x, y — элементы группы G. *Коммутатором* элементов x, y называется элемент $\{x, y\} = xyx^{-1}y^{-1}$. *Коммутантом* $G' = \{G, G\}$ называется множество всех произведений коммутаторов в G.

Несложно заметить, что из $\{x, y\} = \mathbf{1}$ следует $xy = yx$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.17. $G' \triangleleft G$.

Доказательство. Пусть в G' заданы два элемента

$$g = \{x_1, y_1\} \cdots \{x_k, y_k\}, \quad h = \{z_1, t_1\} \cdots \{z_m, t_m\}.$$

Тогда $gh = \{x_1, y_1\} \cdots \{x_k, y_k\}\{z_1, t_1\} \cdots \{z_m, t_m\} \in G'$. Далее, $g^{-1} = \{x_k, y_k\}^{-1} \cdots \{x_1, y_1\}^{-1}$, причем

$$\{x_i, y_i\}^{-1} = (x_i y_i x_i^{-1} y_i^{-1})^{-1} = y_i x_i y_i^{-1} x_i^{-1} = \{y_i, x_i\} \in G'.$$

Поэтому $g^{-1} = \{y_k, x_k\} \cdots \{y_1, x_1\} \in G'$. Таким образом, G' является подгруппой в G.

Покажем, что подгруппа G' нормальна. Если $g \in G'$, то для любого $z \in G$ получаем

$$zgz^{-1} = (z\{x_1, y_1\}z^{-1}) \cdots (z\{x_k, y_k\}z^{-1}) =$$
$$= \{zx_1z^{-1}, zy_1z^{-1}\} \cdots \{zx_kz^{-1}, zy_kz^{-1}\} \in G'.$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.18. Если $N \triangleleft G$, то эквивалентны следующие условия:

1) группа G/N абелева;

2) $N \supseteq G'$.

Доказательство. Группа G/N абелева в том и только в том случае, если $xNyN = yNxN$ для всех $x, y \in G$. Как уже отмечалось, это эквивалентно тому, что $\mathbf{1} = \{xN, yN\} = \{x, y\}N$, т. е. $\{x, y\} \in N$. А последнее, в свою очередь, эквивалентно $G' \subseteq N$.

ТЕОРЕМА 1.16. $\mathbf{S}_n' = \mathbf{A}_n$.

Доказательство. Пусть $\sigma, \tau \in \mathbf{S}_n$. Тогда $\{\sigma, \tau\} = \sigma\tau\sigma^{-1}\tau^{-1}$ имеет знак 1 по предложению 1.2. Следовательно, $\mathbf{S}_n' \subseteq \mathbf{A}_n$. Обратно, пусть $\sigma \in \mathbf{A}_n$. По теореме 1.3 и следствию из нее перестановка σ является произведением четного числа транспозиций. При этом если индексы i, j, k разные, то

$$(i, j)(k, l) = (i, j, k)(j, k, l), \quad (i, j)(j, k) = (i, j, k).$$

Непосредственные вычисления показывают, что в группе перестановок $\mathbf{S}_n$ $\{(i, j), (j, k)\} = (i, k, j)$, если индексы i, j, k разные. Таким образом, каждый элемент σ из $\mathbf{A}_n$ является произведением коммутаторов, т. е. $\mathbf{A}_n \subseteq \mathbf{S}_n'$.

ТЕОРЕМА 1.17. Коммутант $\mathbf{D}_n' = \langle a^2 \rangle$, и $\mathbf{Q}_8' = \{\pm 1\}$. Если n нечетное, то $\mathbf{D}_n' = \langle a^2 \rangle = \langle a \rangle$.

(проверяется непосредственно).

ТЕОРЕМА 1.18. Если $n \geqslant 2$ и $F = \mathbb{C}$ или $F = \mathbb{R}$, то

$$\mathrm{GL}(n, F)' = \mathrm{SL}(n, F)' = \mathrm{SL}(n, F).$$

Доказательство. Из курса алгебры [2] известно, что каждая квадратная матрица размера n с определителем 1 является произведением элементарных матриц вида $E + \alpha E_{ij}$, где α — число, и E_{ij}, $1 \leqslant i \neq j \leqslant n$ — *матричная единица*, т. е. квадратная матрица размера n, в которой на месте (i, j) стоит 1, а все остальные элементы равны 0. Отметим, что

$$E_{ij} E_{rs} = \delta_{jr} E_{is} \tag{1.23}$$

где δ_{jr} — символ Кронекера (см. подразд. 3.6 и гл. 7). Поэтому если i, j, k — три разных индекса, то коммутатор $\{E + \alpha E_{ik},\ E + E_{kj}\} = E + \alpha E_{ij}$, и при $n \geqslant 3$ теорема доказана.

Пусть $n = 2$. Тогда, например:

$$E + \alpha E_{12} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \alpha/3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

Заметим, что если $f : G \to H$ — гомоморфизм групп, то $f(G') \subseteq H'$. Действительно, если $g \in G'$, то $g = \{x_1, y_1\} \cdots \{x_k, y_k\}$ для некоторых элементов $x_i, y_i \in G$. Отсюда

$$f(g) = \{f(x_1), f(y_1)\} \cdots \{f(x_k), f(y_k)\} \in H'.$$

В частности, справедливо следующее.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.19. Если f — гомоморфизм группы G в абелеву группу A, то $G' \subseteq \ker f$.

Отметим применение предложения 1.19. Пусть V, $\mathbf{e}$, $\mathcal{A}$, $A_{\mathbb{C}}$, $A_{\mathbb{R}}$ из упражнения 1.12, случай 8).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.20. $\det A_{\mathbb{R}} = |\det A_{\mathbb{C}}|^2$.

Доказательство. Предположим, что матрица $A_{\mathbb{C}}$ невырождена. Имеются сюръективные гомоморфизмы групп $\det : \mathrm{GL}(n, \mathbb{C}) \to \mathbb{C}^*$, и $\det : \mathrm{GL}(2n, \mathbb{R}) \to \mathbb{R}^*$, по теореме о гомоморфизмах и теореме 1.18 индуцирующие изоморфизмы групп $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})/\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})' \simeq \mathbb{C}^*$, и $\mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})/\mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})' \simeq R^*$. Гомоморфизм групп $\gamma : \mathrm{GL}(n, \mathbb{C}) \to \mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})$ из упражнения 1.12, случай 8) индуцирует изоморфизм групп

$$\gamma' : \mathbb{C}^* \simeq \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})/\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})' \to \mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})/\mathrm{GL}(2n, \mathbb{R})' \simeq \mathbb{R}^*,$$

для которого коммутативна диаграмма

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{GL}(n,\mathbb{C}) & \xrightarrow{\gamma} & \mathrm{GL}(2n,\mathbb{R}) \\ \det\downarrow & & \downarrow\det \\ \mathbb{C}^* & \xrightarrow[\gamma']{} & \mathbb{R}^* \end{array}$$

т. е. композиции гомоморфизмов, отвечающих на диаграмме двум путям из $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ в $\mathbb{R}^*$, дают одинаковый результат. Для произвольного ненулевого комплексного числа $z \in C^*$ рассмотрим матрицу $A \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, определитель которой равен z. Тогда $\gamma'(z) = \det(\gamma(A))$.

Пусть $z = u + iv$, где $u, v \in \mathbb{R}$. Рассмотрим диагональную матрицу A с диагональными элементами $z, 1, \ldots, 1$. В этом случае

$$\gamma(A) = \begin{pmatrix} u & 0 & \ldots & 0 & 0 & -v & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ v & 0 & \ldots & 0 & 0 & u & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}.$$

Непосредственная проверка показывает, что $\det(\gamma(A)) = u^2 + v^2 = |\det A|^2$.

1.9. ПРЯМЫЕ И ПОЛУПРЯМЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ГРУПП

Некоторые физические величины $A(x_1, ..., x_M)$ задаются переменными, которые можно разделить на два набора:

$$(x_1, ..., x_m), \quad (x_{m+1}, ..., x_M) \tag{1.24}$$

(например, координаты и спины волновой функции) или на несколько таких наборов. Если переменные (1.24) обладают симметрией групп G_1 и G_2 соответственно, желательно уметь определять отсюда симметрию величины $A(x_1, ..., x_M)$. При этом в двух существенно разных случаях переменные $(x_1, ..., x_m)$ и $(x_{m+1}, ..., x_M)$ могут быть или независимыми (т. е. коммутативными), или взаимосвязанными. Эти соображения приводят к рассмотрению прямых и полупрямых произведений групп.

Группа G является (*внутренним*) *прямым произведением* своих подгрупп $G_1, \ldots, G_n$ и обозначаются $G = G_1 \times \cdots \times G_n$, если выполняются условия:

1) каждая подгруппа G_i нормальна в G;

2) каждый элемент $g \in G$ имеет единственное представление в виде произведения $g = g_1 \cdots g_n$, где $g_i \in G_i$.

Если G — группа относительно сложения, то говорят, что G является *прямой суммой* своих подгрупп $G_1, \ldots, G_n$,. В этом случае пишут $G = G_1 \oplus \cdots \oplus G_n$.

Из этого определения непосредственно вытекает, что порядок $|G|$ группы G равен произведению порядков $|G_1| \cdots |G_n|$. Рассмотрим ряд основных свойств прямых произведений групп.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 1.21. Пусть группа G разлагается во внутреннее прямое произведение $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ своих нормальных подгрупп $G_1, \ldots, C_n$. Если $k \neq m$, то $G_k \cap G_m = \mathbf{1}$. Если $g_i \in G_k$, $g_j \in G_m$, и $k \neq m$, то $g_i g_j = g_j g_i$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $h \in G_k \cap G_m$. Тогда элемент $h \in G$ имеет два представления в виде произведений $h = \mathbf{1} \cdots \mathbf{1} \cdot h \cdot \mathbf{1} \cdots \mathbf{1} = \mathbf{1} \cdots \mathbf{1} \cdot h \cdot \mathbf{1} \cdots \mathbf{1}$, где в первом произведении h стоит на месте k, а во втором — на месте m. В силу единственности представления получаем $h = \mathbf{1}$.

Докажем второе утверждение. Пусть $g = \{g_i, g_j\} = g_i g_j g_i^{-1} g_j^{-1}$. Так как подгруппа G_m нормальна в G, то $g_i g_j g_i^{-1} \in G_m$. Отсюда $\{g_i, g_j\} \in G_m$. Аналогично $\{g_i, g_j\} \in G_k$, т. е. $\{g_i, g_j\} \in G_k \cap \cap G_m = \mathbf{1}$. Итак, $\{g_i, g_j\} = \mathbf{1}$, и второе утверждение доказано.

С Л Е Д С Т В И Е. Пусть $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ и

$$g = g_1 \cdots g_n, \quad h = h_1 \cdots h_n \in G,$$

где $g_i, h_i \in G_i$ для всех i.

Тогда

$$gh = (g_1 h_1) \cdots (g_n h_n), \quad g^{-1} = g_1^{-1} \cdots g_n^{-1}.$$

Имеются следующие примеры прямых разложений известных нам групп:

1) $\mathbb{C}^* \simeq \mathbf{U} \times \mathbb{R}_+^*$ (рис. 1.12.);

2) $D_{nh} \simeq \mathbf{D}_n \times \langle j \rangle_2$, где $\langle j \rangle_2$ — циклическая группа порядка 2, порожденная центральной симметрией j;

3) если векторное пространство V разложено в прямую сумму подпространств $V = U \oplus W$, то V как абелева группа векторов $x \in V$ относительно сложения (аддитивная группа пространства V) является прямой суммой подгрупп U и W;

4) $\mathrm{SO}(1,3) \simeq \mathrm{SO}_+(1,3) \times \langle j \rangle_2$ и $\mathbb{O}(1,3) \simeq \mathbb{O}_+(1,3) \times \langle j \rangle_2$, где $\langle j \rangle_2$ — циклическая группа порядка 2, порожденная центральной симметрией j;

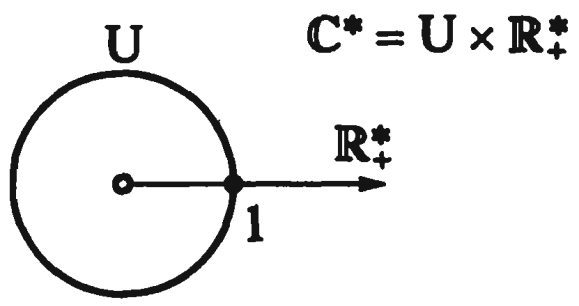


Рис. 1.12. Комплексная плоскость $\mathbb{C}^*$ без нуля как прямое произведение подгруппы $\mathbf{U}$ всех комплексных чисел с модулем 1 и подгруппы $\mathbb{R}_+^*$ всех положительных вещественных чисел

5) $\mathbb{O}(1,3)/\mathrm{SO}_+(1,3) \simeq \langle s\rangle_2 \times \langle t\rangle_2$, где s, t — матрицы из (1.17).

Компоненты $\{G_k\}$ внутреннего прямого произведения были заданы как нормальные подгруппы G. Но если не вводить это условие, а просто составить всевозможные комбинации перестановочных элементов $g_i \in G_k$, получится та же конструкция.

Пусть заданы группы $G_1, \ldots, G_n$. В прямом произведении множеств $G = G_1 \times \cdots \times G_n$, т. е. на множестве всех строк $(g_1, \ldots, g_n)$ где $g_i \in G_i$, введем операцию умножения

$$(g_1, g_2, \ldots, g_n)(h_1, h_2, \ldots, h_n) = (g_1h_1, g_2h_2, \ldots, g_nh_n).$$

Множество $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ с введенным умножением называют *внешним прямым произведением* групп $G_1, \ldots, G_n$.

ТЕОРЕМА 1.19. Внешнее произведение G групп $G_1, \ldots, G_n$ является группой. Группа G разлагается во внутреннее прямое произведение подгрупп $\overline{G}_1 \simeq G_1, \ldots, \overline{G}_n \simeq G_n$. Другими словами, конструкции внутреннего и внешнего прямых произведений дают изоморфные группы.

Доказательство. Нетрудно проверить, что во внешнем произведении $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ умножение ассоциативно. Единичным элементом в G является строка из единиц групп $G_1, \ldots, G_n$. Кроме того, $(g_1, \ldots, g_n)^{-1} = (g_1^{-1}, \ldots, g_n^{-1}) \in G$. Итак, G является группой.

Для каждого $i = 1, \ldots, n$ через $\overline{G}_i$ обозначим множество всех строк вида $(\mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1}, x, \mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1})$, где на i-м месте стоит произвольный элемент $x \in G_i$. Непосредственная проверка показывает, что $\overline{G}_i \lhd G$, причем отображение $x \mapsto (\mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1}, x, \mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1})$ задает изоморфизм G_i и $\overline{G}_i$. Кроме того, каждый элемент из G однозначно представляется в виде произведения

$$(g_1, \ldots, g_n) = (g_1, \mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1})(\mathbf{1}, g_2, \mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1}) \cdots (\mathbf{1}, \ldots, \mathbf{1}, g_n)$$

элементов из $\overline{G}_1, \ldots, \overline{G}_n$, т. е. G действительно является внутренним произведением этих групп.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.22. Группа $\mathbb{Z}$ неразложима в прямую сумму.

Доказательство. Пусть $\mathbb{Z} = A \oplus B$, где A, B — ненулевые подгруппы в $\mathbb{Z}$. Тогда $A \cap B = 0$ по предложению 1.21. Возьмем ненулевые целые числа $m \in A$, $n \in B$. Если одно из них (например, m) отрицательно, то вместо m мы можем взять число $-m$, которое также принадлежит подгруппе A. Таким образом, мы можем считать, что m, n положительны. В этом случае их обычное произведение mn есть сумма m слагаемых, равных n. Следовательно, $mn \in B$. Аналогично, $mn \in A$. Отсюда $0 \neq mn \in A \cap B$, что неверно.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.23. Пусть в прямом произведении $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ групп $G_1, \ldots, G_n$ взят элемент $g = g_1 \cdots g_n$, где $g_i \in G_i$ для всех $i = 1, \ldots, n$. Тогда порядок $|g|$ равен наименьшему общему кратному порядков $(|g_1|, \ldots, |g_n|)$.

Доказательство. Для любого натурального m имеем $g^m = g_1^m \cdots g_n^m$ по следствию к предложению 1.21. Таким образом, $g^m = \mathbf{1} \iff g_1^m = \cdots = g_n^m = \mathbf{1}$. Последнее, согласно предложению 1.6, эквивалентно тому, что m делится на порядок каждого элемента $g_1, \ldots, g_m$. Наименьшее натуральное число с этим свойством равно наименьшему общему кратному порядков $(|g_1|, \ldots, |g_n|)$.

ТЕОРЕМА 1.20. Пусть группа $G = G_1 \times \cdots \times G_n$ конечна. Тогда эквивалентны следующие условия:

группа G циклическая;

каждая группа G_i циклическая и порядки $|G_i|$ групп G_i, $i = 1, \ldots, n$ попарно взаимно просты.

Доказательство. Пусть группа G циклическая и $m_i = |G_i|$. Тогда каждая подгруппа $G_i, i = 1, \ldots, n$ циклическая. Если, например НОД$(m_1, m_2) > 1$, то НОК$(m_1, \ldots, m_n) < < m_1 \cdots m_n$. Поэтому в силу предложения 1.23 в G нет элемента порядка $m_1 \cdots m_n = |G|$.

Обратно, пусть $G_i = \langle a_i \rangle_{m_i}$, причем все числа $m_1, \ldots, m_n$ попарно взаимно просты. Рассмотрим элемент $a = a_1 \cdots a_n \in \in G$. По предложению 1.23 его порядок равен произведению порядков

$$m_1 \cdots m_n = |G_1| \cdots |G_n| = |G|.$$

Следовательно, $G = \langle a \rangle$.

СЛЕДСТВИЕ. Циклическая группа порядка d не разлагается в прямое произведение в том и только в том случае, когда ее порядок является степенью простого числа.

ТЕОРЕМА 1.21. Пусть $N_i \triangleleft G_i$, $i = 1, \ldots, m$. Тогда $(N_1 \times \cdots \times N_m) \triangleleft (G_1 \times \cdots \times G_m)$ и $(G_1 \times \cdots \times G_m)/(N_1 \times \cdots \times N_m) \simeq (G_1/N_1) \times \cdots \times (G_m/N_m)$.

Доказательство теоремы 1.21 предлагаем провести самостоятельно, рассмотрев гомоморфизм групп

$$\pi : G \to (G_1/N_1) \times \cdots \times (G_m/N_m),$$

отображающий элемент $g \in G$ с разложением

$$g = g_1 \cdots g_m \mapsto (g_1 N_1) \cdots (g_m N_m) \in (G_1/N_1) \times \cdots \times (G_m/N_m),$$

и воспользовавшись теоремой о гомоморфизмах 1.11.

ТЕОРЕМА 1.22. Если n нечетно, то фактор-группа группы диэдра $\mathbf{D}_n$ по коммутанту $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$ является циклической группой порядка 2, порожденной смежным классом $b\mathbf{D}'_n \in \mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$, являющимся элементом порядка 2 в фактор-группе $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$. Если n четно, то $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$ — прямое произведение двух циклических групп порядка 2 с порождающими элементами $b\mathbf{D}'_n$, $a\mathbf{D}'_n \in \mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$, имеющими порядок 2 в $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n$. Фактор-группа $\mathbf{Q}_8/\mathbf{Q}'_8$ группы кватернионов $\mathbf{Q}_8$ по ее коммутанту является прямым произведением двух циклических групп порядка 2 с порождающими элементами $I\mathbf{Q}'_8$, $J\mathbf{Q}'_8 \in \mathbf{Q}_8/\mathbf{Q}'_8$ порядка 2.

Отметим, что теорема 1.22 дополняет теорему 1.17. Теорема 1.22 может быть доказана непосредственно.

Рассмотрим теперь полупрямые произведения групп. Предположим, что в группе G заданы две подгруппы H и N, причем подгруппа N нормальна в G, т. е. $N \triangleleft G$, и каждый элемент $g \in G$ однозначно представляется в виде произведения $g = nh$, где $n \in N$, $h \in H$. В этом случае группа G представляется в виде *полупрямого произведения* $G = N \leftthreetimes H$.

Эта конструкция обобщает понятие прямого произведения. Напомним, что в прямом произведении $G = N \times H$ требуется, чтобы обе подгруппы N, H были нормальными. В определении полупрямого произведения требуется нормальность только одной подгруппы N. Таким образом, каждое прямое произведение групп $G = N \times H$ всегда является полупрямым.

Приведем пример полупрямого произведения группы $\mathbf{S}_4$, не являющегося прямым произведением. Группа $\mathbf{S}_3$ — подгруппа в $\mathbf{S}_4$. Каждый элемент из $\mathbf{S}_3$ можно понимать как перестановку чисел (1, 2, 3, 4), которая оставляет на месте число 4. Возьмем в качестве H группу $\mathbf{S}_3$, а в качестве N — группу Клейна $\mathbf{V}_4$, введенную в упражнении 1.5. Как отмечалось ранее, $\mathbf{V}_4 \triangleleft \mathbf{S}_4$

(см. упражнение 1.15). При этом $\mathbf{S}_3 \cap \mathbf{V}_4$ состоит из всех таких перестановок в $\mathbf{V}_4$, которые оставляют элемент 4 на месте. Из определения $\mathbf{V}_4$ видно, что этим свойством обладает только единичный элемент.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.24. $\mathbf{S}_4 = \mathbf{V}_4 \leftthreetimes \mathbf{S}_3$.

Доказательство. Предположим, что $g_1h_1 = g_2h_2$, где $g_i \in \mathbf{V}_4$, $h_i \in \mathbf{S}_3$. Умножая это равенство слева на g_2^{-1} и справа на h_1^{-1}, получаем $g_2^{-1}g_1 = h_2h_1^{-1}$. Следовательно, этот элемент лежит в $\mathbf{V}_4 \cap \mathbf{S}_3 = 1$. Поэтому $g_1 = g_2$, $h_1 = h_2$. Таким образом, число разных произведений gh, где $g \in \mathbf{V}_4$, $h \in \mathbf{S}_3$ равно произведению порядков соответствующих групп $|\mathbf{V}_4||\mathbf{S}_3| = 4 \cdot 6 = |\mathbf{S}_4|$. Следовательно, каждый элемент x из $\mathbf{S}_4$ представляется (и притом единственным образом) в виде произведения $x = gh$, где $g \in \mathbf{V}_4$, $h \in \mathbf{S}_3$.

При последующем изложении материала будем полагать, что полупрямое произведение групп не является прямым и обозначим символом $G \leftthreetimes H$ множество $G \leftthreetimes H \setminus G \times H$.

Упражнение 1.23. Показать справедливость утверждения:

1) при $n \geqslant 2$ группа $\mathbf{S}_n$ имеет полупрямое разложение $\mathbf{S}_n = \mathbf{A}_n \leftthreetimes \langle\sigma\rangle$, где σ — произвольная транспозиция;

2) группа четных подстановок $\mathbf{A}_4$ имеет полупрямое разложение $\mathbf{A}_4 = \mathbf{V}_4 \leftthreetimes \langle\tau\rangle$, где $\mathbf{V}_4$ — группа Клейна, τ — произвольный цикл длины 3;

3) группа аффинных преобразований $\mathrm{Aff}(V)$ в n-мерном комплексном (вещественном) пространстве V является полупрямым произведением $\mathrm{Aff}(V) = V \leftthreetimes \mathrm{GL}(V)$, где V — аддитивная группа пространства V;

4) аналогично, группа движений $\mathrm{Iso}(E)$ евклидова пространства E является полупрямым произведением $\mathrm{Iso}(E) = E \leftthreetimes \mathbb{O}(E)$;

5) группа собственных движений $\mathrm{SIso}(E)$ евклидова пространства E является полупрямым произведением $\mathrm{SIso}(E) = E \leftthreetimes \mathrm{SO}(E)$;

6) группа Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ является полупрямым произведением $\mathbb{O}(1,3) = \mathrm{SO}_+(1,3) \leftthreetimes (\langle s\rangle_2 \times \langle t\rangle_2)$, где s, t см. (1.17);

7) группа Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$ имеет полупрямое разложение $\mathcal{P}(1,3) = M(1,3) \leftthreetimes \mathbb{O}(1,3)$, где $M(1,3)$ — аддитивная группа пространства Минковского, причем каждый вектор $b \in M(1,3)$ отождествляется со сдвигом $x \mapsto x + b$.

Из определения полупрямого произведения $G = N \leftthreetimes H$ вытекает, что $|G| = |N||H|$. Кроме того, справедливо предложение:

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.25. Если $G = N \leftthreetimes H$, то $N \cap H = \mathbf{1}$.

Если $g \in N \cap H$, то элемент g имеет два представления $g = g \times \mathbf{1}_H = \mathbf{1}_N \cdot g$. Отсюда $g = \mathbf{1}$.

Укажем правило умножения элементов полупрямого произведения $G = N \leftthreetimes H$. Если $x = gh$, $y = g'h'$, где $g, g' \in N$, $h, h' \in H$,

то $xy = (gh)(g'h') = \left(g(hg'h^{-1})\right)(hh')$. При этом $g(hg'h^{-1}) \in N$ в силу нормальности подгруппы N, и $hh' \in H$.

Отметим, что если $G = N \leftthreetimes H$, то для любого $h \in H$ отображение $x \mapsto hxh^{-1}$ является автоморфизмом ϕ_h группы N. При этом для $h_1, h_2 \in H$ и $x \in N$ имеем

$$\phi_{h_1h_2}(x) = (h_1h_2)x(h_1h_2)^{-1} = h_1h_2xh_2^{-1}h_1^{-1} =$$
$$= h_1(h_2xh_2^{-1})h_1^{-1} = \phi_{h_1}\phi_{h_2}(x).$$

Таким образом, $\phi_{h_1h_2} = \phi_{h_1}\phi_{h_2}$ для всех $h_1, h_2 \in H$. Это означает, что задан гомоморфизм из H в группу $\operatorname{Aut} N$ автоморфизмов группы N из упражнения 1.18.

Изложенные соображения позволяют перейти к эквивалентной конструкции полупрямого произведения, изначально не предполагающей, чтобы его компоненты были подгруппами в некоторой группе. При этом следует задать и гомоморфизм $H \to \operatorname{Aut} N$, так как полупрямое произведение групп, в отличие от прямого, не определяется однозначно своими компонентами. Пусть заданы группы N, H и гомоморфизм ψ группы H в группу $\operatorname{Aut} N$ всех автоморфизмов ϕ группы N, при котором элемент $h \in H$ отображается в автоморфизм ϕ_h группы N. Рассмотрим множество $G = N \leftthreetimes H$ всех пар (x, h), где $x \in N$, $h \in H$. На этом множестве введем умножение по правилу

$$(x, h)(x', h') = (x\,\phi_h(x'), hh'). \tag{1.25}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1.26. *$G = N \leftthreetimes H$ с умножением (1.25) является группой. Подмножество $\tilde{N}$ всех пар вида $(x, \mathbf{1})$ в G является нормальной подгруппой в G, изоморфной N, а множество всех пар вида $(\mathbf{1}, h)$ является подгруппой $\tilde{H}$ в G, изоморфной H. При этом $(\mathbf{1}, h)(x, \mathbf{1})(\mathbf{1}, h)^{-1} = (\phi_h(x), \mathbf{1})$. Кроме того, группа G является внутренним полупрямым произведением $G = \tilde{N} \leftthreetimes \tilde{H}$.*

Доказательство. Проверим сначала ассоциативность умножения. Если $x_1, x_2, x_3 \in N$ и $h_1, h_2, h_3 \in H$, то

$$\left((x_1, h_1)(x_2, h_2)\right)(x_3, h_3) = (x_1\,\phi_{h_1}(x_2), h_1h_2)(x_3, h_3) =$$
$$= (x_1\,\phi_{h_1}(x_2)\,\phi_{h_1h_2}(x_3), h_1h_2h_3) =$$
$$= (x_1\,\phi_{h_1}(x_2)\,\phi_{h_1}\phi_{h_2}(x_3), h_1h_2h_3) =$$
$$= (x_1, h_1)\left((x_2\,\phi_{h_2}(x_3), h_2h_3)\right) = (x_1, h_1)\left((x_2, h_2)(x_3, h_3)\right).$$

Далее, пара $(\mathbf{1}_N, \mathbf{1}_H)$ является единицей в G. Наконец, $(x, h)^{-1} = (\phi_{h^{-1}}(x)^{-1}, h^{-1})$. Итак, G является группой.

Непосредственная проверка показывает, что отображение $x \mapsto (x, 1)$ — изоморфизм N и $\tilde{N}$, а отображение $h \mapsto$

$\mapsto (1, h)$ — изоморфизм H и $\tilde{H}$. Последние утверждения также проверяются непосредственно.

Это предложение показывает, что, как и в случае прямого произведения, внутреннее и внешнее полупрямые произведения совпадают.

Различие прямого и полупрямого произведений групп G и H наглядно отражается в перестановочных свойствах их элементов. Чтобы $2mn - (m + n) + 1$ разных комбинаций $(g_i h_j)$ некоммутирующих элементов $g_i \in G$, $h_j \in H$ образовали группу, следует задать их перестановочные соотношения. Условием $g_i h_j = h_j g_i$ определяется прямое произведение $G \times H$, а условием $g_i h_j = h_j g_k$ — полупрямое произведение $G \leftthreetimes H$. Нетрудно видеть, что в последнем случае $h_j^{-1} g_i h_j = h_j^{-1} h_j g_k = g_k$, т. е. элементы g_i и g_k оказываются в одном классе группы $G \leftthreetimes H$. На простейшем примере сочетания циклических групп $\langle a \rangle_3$ и $\langle b \rangle_2$ для прямого произведения $(ab = ba, a^2 b = ba^2)$ получим циклическую группу 6-го порядка $\langle a \rangle_3 \times \langle b \rangle_2 \simeq \langle c \rangle_6$. Положив $ab = ba^2$, $a^2 b = ba$, получим полупрямое произведение групп $\langle a \rangle_3 \leftthreetimes \langle b \rangle_2 \simeq \mathbf{D_3}$ (см. подразд. 1.1).

1.10. ГРУППЫ СИММЕТРИЙ МОЛЕКУЛ

Среди многочисленных физико-химических приложений теории групп важную роль играет описание молекулярной симметрии. При фиксированной геометрии молекул их симметрию задают точечные группы в трехмерном евклидовом пространстве.

1.10.1. Точечные группы

Точечные группы «жестких» молекул и молекулярных фрагментов с фиксированной геометрией совпадают с группами симметрий конечных геометрических фигур. Напомним, что их операции симметрии R, т. е. ортогональные преобразования трехмерного евклидова пространства $E(3)$, составляющие подгруппу в $\mathbb{O}(3, \mathbb{R})$ (см. подразд. 1.1), подразделяются на собственные $[\det(R) = 1]$ и несобственные $[\det(R) = -1]$ вращения. В квантовой химии и спектроскопии точечные группы и их операции симметрии обозначают по системе Шенфлиса, а в кристаллографии — по международной системе Германа — Могена. В системе Шенфлиса, которая будет использована в этой главе, несобственное вращение обозначают символом S_n и геометрически представляют операцией зеркального поворота, составленной из поворота

на угол $2\pi/n$ вокруг выбранной оси с отражением в плоскости, проходящей перпендикулярно этой оси через начало координат. (Операция S_n^k — k-кратное повторении этой процедуры). Если выбрать ортонормированный базис $\{x_1, x_2, x_3\}$ так, что x_1 лежит на оси зеркального поворота, то матрицей этого поворота будет

$$S_n^1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\dfrac{2\pi}{n} & -\sin\dfrac{2\pi}{n} \\ 0 & \sin\dfrac{2\pi}{n} & \cos\dfrac{2\pi}{n} \end{pmatrix}.$$

Единичный элемент точечной группы по Шенфлису обозначают e.

Операции симметрии удобно представлять их геометрическими образами: поворотной осью C_n ($C_1 = e$) и зеркально-поворотной осью S_n, а также плоскостью зеркального отражения $\boldsymbol{\sigma} = S_1$ и центром инверсии $i = S_2$. Эти графические символы, в литературе нередко называемые «элементами симметрии», не следует путать с теми групповыми элементами, которые они изображают. Например, ось C_n графически представляет все повороты на угол $2\pi k/n$ вокруг нее, которые в ортонормированном базисе $\{x_1, x_2, x_3\}$ с осью $C_n \| x_1$ задаются матрицей

$$C_n^k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\dfrac{2\pi k}{n} & -\sin\dfrac{2\pi k}{n} \\ 0 & \sin\dfrac{2\pi k}{n} & \cos\dfrac{2\pi k}{n} \end{pmatrix}.$$

Заметим, что поворотная ось C_n является линейной оболочкой направленного по ней вектора x_1.

Композиции («взаимодействие») операций, относящихся к разным элементам симметрии, могут порождать новые элементы. Так, например, повороты на π вокруг координатных поворотных осей второго порядка C_2 связаны с отражениями $\boldsymbol{\sigma}$ в координатных плоскостях и инверсией i в точке начала координат соотношениями

$$C_2^z \boldsymbol{\sigma}_{xy} i = e, \quad C_2^z \boldsymbol{\sigma}_{xz} \boldsymbol{\sigma}_{yz} = e, \quad C_2^x C_2^y C_2^z = e. \tag{1.26}$$

Наличие любых двух операций симметрии, входящих в какое-либо из соотношений (1.26), порождает третью операцию (рис. 1.13).

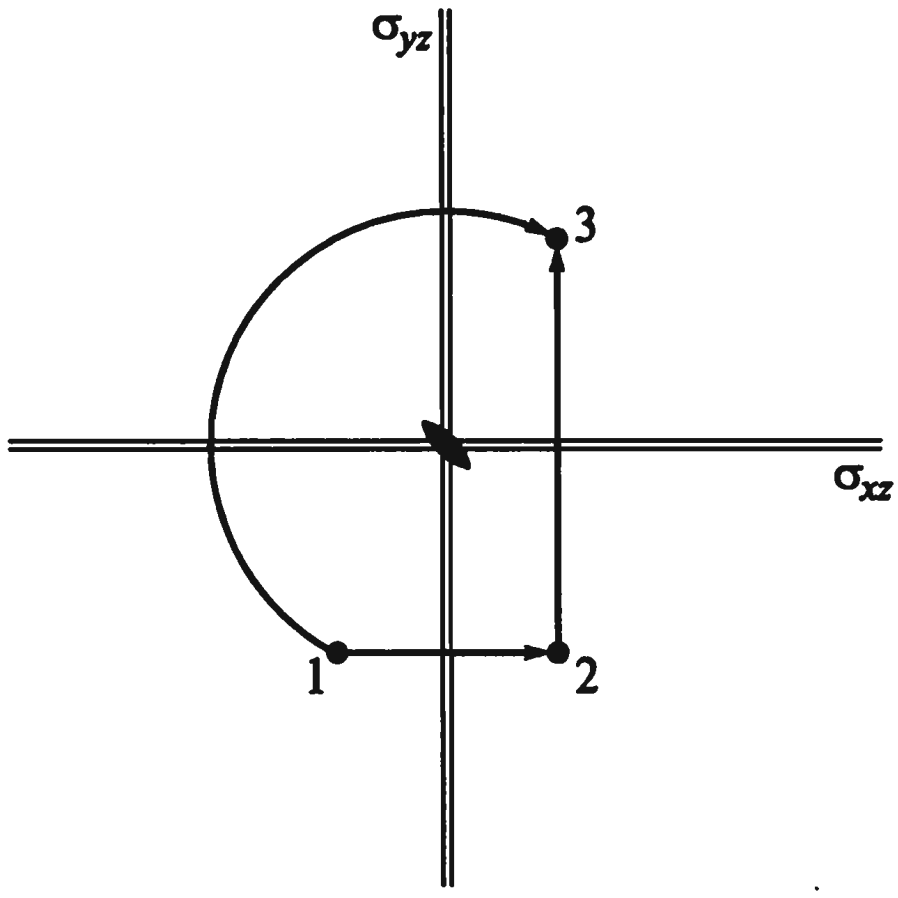
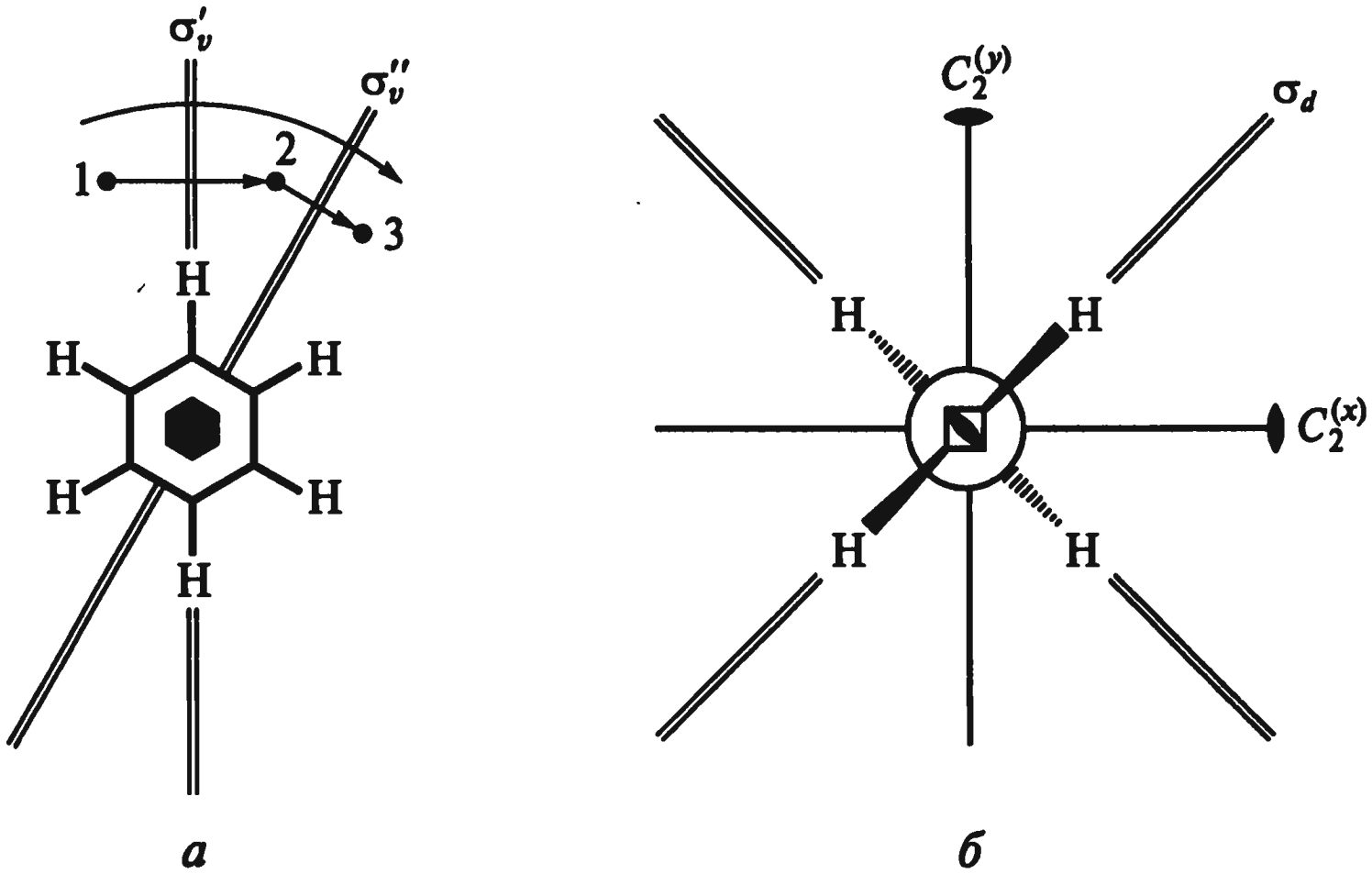


Рис. 1.13. Поворотная ось 2-го порядка как результат композиции отражений в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии ($\sigma_{yz} : 1 \to 2$; $\sigma_{xz} : 2 \to 3$; $\sigma_{xz}\sigma_{yz} = C_2^{(z)} : 1 \to 3$)

Зеркальную плоскость σ, перпендикулярную главной (высшей) оси симметрии C_n или S_n данной группы, в системе Шенфлиса обозначают σ_h и называют горизонтальной, а плоскость, проходящую через такую ось, — вертикальной (σ_v). Одинаковые, но не сопряженные элементы симметрии различают штрихами (например, вертикальные плоскости σ_v' и σ_v'' в молекуле бензола C_6H_6, пересекающиеся под углом $\pi/6$, рис. 1.14, *а*).

Плоскость симметрии, которая переводит две пересекающиеся оси C_2 одну в другую, называют *диагональной* (σ_d). Заметим, что компоненты зеркального поворота, входящего в



а *б*

Рис. 1.14. Операции симметрии молекул:

а — бензола C_6H_6 ($\sigma_v' : 1 \to 2$; $\sigma_v'' : 2 \to 3$; $\sigma_v''\sigma_v' = C_6^1 : 1 \to 3$); *б* — аллена $CH_2{=}C{=}CH_2$ (проекция вдоль фрагмента $C{=}C{=}C$)

Таблица 1.1

Конечные точечные группы (обозначения по Шенфлису)

Группа	Порядок группы	Оси C_n	Оси S_n	Оси C_2	Плоскости σ	Центр симмет-рии	Примеры молекул
Группы низшей категории							
C_2	2			C_2			*гош*-H_2O_2
C_s	2				σ		CH_2=CHCl
C_i	2					i	*мезо*-CHFCl—CHFCl
C_{2h}	4			$C_2^{(z)}$	σ	i	*транс*-CHX=CHX
C_{2v}	4			$C_2^{(z)}$	σ_{xz}, σ_{yz}		H_2O, SF_4, хлорбензол
D_2	4			$C_2^{(x)}, C_2^{(y)}, C_2^{(z)}$			*гош*-C_6H_5—C_6H_5
D_{2h}	8			$C_2^{(x)}, C_2^{(y)}, C_2^{(z)}$	$\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$	i	Этилен, нафталин
Семейства групп средней категории							
C_n	n	C_n ($C_{n\|m}$) ($m\|n$)		$(C_2^{(z)})(n = 2k)$			C_3: CH_3CF_3 и NH_3BF_3 в «промежуточной» конформации

Окончание табл. 1.1

Группа	Порядок группы	Оси C_n	Оси S_n	Оси C_2	Плоскости σ	Центр симметрии	Примеры молекул
S_n	$n = 2k$	$C_{n/2}(C_{n/2m})$ $(n = 2k,\ 2m\|n)$	$S_n(n = 2k)$ $(S_{n/3},\ n = 6p)$	$(C_{n/2}^{n/4} = C_2^{(z)})$ $(n = 4k)$		(i) $(n = 2k)$	Гексаэтилэтан
C_{nh}	$2n$	$C_n(C_{n/m})$ $(m\|n)$	S_n $(S_{n/3},$ $n = 3p)$	$(C_n^{n/2} = C_2^{(z)})$ $(n = 2k)$	σ_h	(i) $(n = 2k)$	C_{3h}: плоская молекула $B(OH)_3$
C_{nv}	$2n$	$C_n(C_{n/m})$ $(m\|n)$		$(C_n^{n/2} = C_2^{(z)})$ $(n = 2k)$	$n\sigma_v$ $(n = 2k+1)$ $(n/2)\sigma_v'$, $(n/2)\sigma_v''$ $(n = 2k)$		C_{3v}: NH_3; NH_3BF_3 в шахматной конформации; C_{5v}: $[C_5Me_5Sn]^+$
D_n	$2n$	$C_n(C_{n/m})$ $(m\|n)$		$(C_n^{n/2} = C_2^{(z)})$ $(n = 2k)$ nC_2 $(n = 2k+1)$ $(n/2)C_2'$, $(n/2)C_2''(n = 2k)$			D_3: $[M(acac)_3]^{q+}$
D_{nh}	$4n$	$C_n(C_{n/m})$ $(m\|n)$	S_n $(S_{n/m})$	$(C_n^{n/2} = C_2^{(z)})$ $(n = 2k)$ nC_2 $(n = 2k+1)$ $(n/2)C_2'$, $(n/2)C_2''(n = 2k)$	σ_h $n\sigma_v(n = 2k+1)$ $(n/2)\sigma_v'$, $(n/2)\sigma_v''$ $(n = 2k)$	(i) $(n = 2k)$	D_{3h}: BF_3, NO_3^-; D_{6h}: C_6H_6
D_{nd}	$4n$	C_n, $(C_{n/m})$ $(m\|n)$	$S_{2n}(S_{2n/3})$ $(n = 3p)$	$(C_n^{n/2} = C_2^{(z)})$ $(n = 2k)$ nC_2	$n\sigma_d$	(i) $(n = 2k+1)$	D_{3d}: этан C_2H_6; D_{8d}: ураноцен $(C_8H_8)_2U$

Группы высшей категории							
T	12	$4C_3$		$3C_2$			Устойчивые молекулы неизвестны
T_d	24	$4C_3$	$3S_4$	$3C_2$	$6\sigma_d$		CH_4, P_4 (белый фосфор), $[SO_4]^{2-}$
T_h	24	$4C_3$	$4S_6$	$3C_2$	$3\sigma_h$	i	$[La(NO_3)_6]^{3-}$
O	24	$3C_4, 4C_3$		$3C_2, 6C_2'$			Устойчивые молекулы неизвестны
O_h	48	$3C_4, 4C_3$	$3S_4, 4S_6$	$3C_2, 6C_2'$	$3\sigma_h, 6\sigma_d$	i	$Cr(CO)_6$; SF_6
I	60	$6C_5, 10C_3$		$15C_2$			Устойчивые молекулы неизвестны
I_h	120	$6C_5, 10C_3$	$6S_{10}, 10S_6$	$15C_2$	$15\sigma_d$	i	$[B_{12}H_{12}]^{2-}$; C_{60}

Примечания. (1) Все группы содержат единичный элемент e.
(2) Имеется тривиальная группа $C_1 = \{e\}$.
(3) Me = CH_3 (метил).

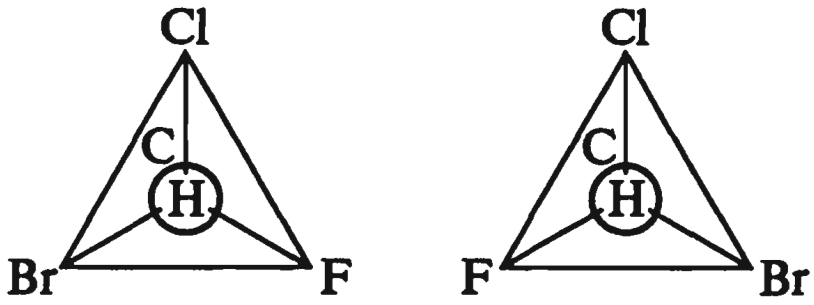
данную точечную группу, по отдельности в общем случае не являются ее операциями симметрии — например, в молекуле аллена $CH_2{=}C{=}CH_2$ по линейному фрагменту $C{=}C{=}C$ проходит зеркально-поворотная ось S_4, однако ни перпендикулярной ей плоскости симметрии (σ_h), ни поворотной оси C_4 в этой молекуле нет (рис. 1.14, *б*).

Точечные группы молекулярной симметрии представлены в табл. 1.1. По порядку n входящих в них осей C_n или S_n эти группы можно условно разбить на три категории: низшую, среднюю и высшую [40].

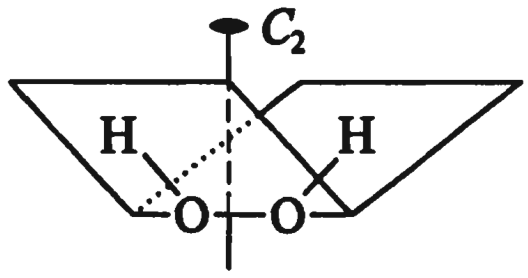
Низшая категория симметрии. Это семь точечных групп C_2, C_s, C_i, C_{2h}, C_{2v}, D_2, D_{2h}, составленных из элементов 2-го порядка (см. подразд. 1.3): C_2, σ и i. Примеры молекул, относящихся к этим группам, показаны на рис. 1.15. Поскольку любая из этих операций служит для себя обратным элементом ($C_2^2 = \sigma^2 = i^2 = e$), данные группы абелевы и каждый класс сопряженных элементов в любой из них состоит из одной операции симметрии. В группах C_{2h}, C_{2v}, D_2, D_{2h} комбинация любого элемента с единичным (g, e) образует нормальную подгруппу, т. е. порядок их факторгрупп $h' = h/2$. Три группы C_2, C_s, C_i порядка 2 изоморфны между собой, но к ним относятся разные молекулы, например плоская молекула хлорэтилена $CH_2{=}CHCl$ (C_s) и неплоская молекула пероксида водорода $HO{-}OH$ (C_2) (см. рис. 1.15).

Группы порядка выше 2 являются прямыми произведениями: $C_{2h} = C_2 \times C_i$, $D_2 = C_2 \times C_2$, $C_{2v} = C_2 \times C_s$ и $D_{2h} = D_2 \times C_s$. Группы C_{2h}, C_{2v} и D_2 порядка 4 изоморфны одна другой и группе Клейна $\mathbf{V}_4$ (см. упражнение 1.5). Самая большая во всей категории группа D_{2h} состоит из восьми классов сопряженных элементов (E, C_2^x, C_2^y, C_2^z, i, σ_{xy}, σ_{xz}, σ_{yz}). Среди молекул в этой категории симметрии наиболее распространены группы C_s, C_{2v}, D_{2h}. Отметим, что молекулы (как и другие объекты), не имеющие элементов симметрии, могут существовать в виде «правой» и «левой» геометрических фигур, не совмещающихся в пространстве. Соединения, построенные из таких молекул, в химии называют *оптическими изомерами* или *стереоизомерами*.

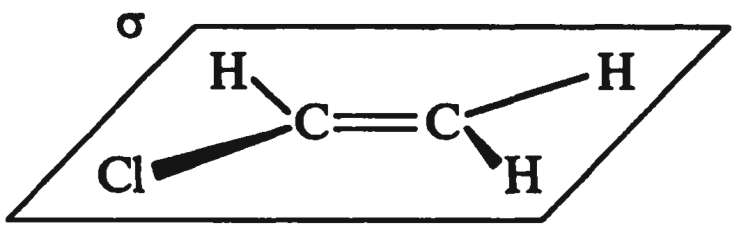
Средняя категория симметрии. Объединяет бесконечное число точечных групп с одной (главной) поворотной либо зеркально-поворотной осью порядка выше 2. Эти группы можно разбить на семь семейств: C_n, S_n, C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nh}, D_{nd} (где n — порядок главной оси группы). Среди элементов наиболее высокого порядка в реальных структурах отметим поворотные оси C_{10} и C_{12} в квазикристаллах, а также зеркально-поворотную ось S_{16} в молекуле ураноцена $(C_8H_8)_2U$. Эта молекула имеет «сэндвичевое» строение с атомом урана между двух связанных с ним



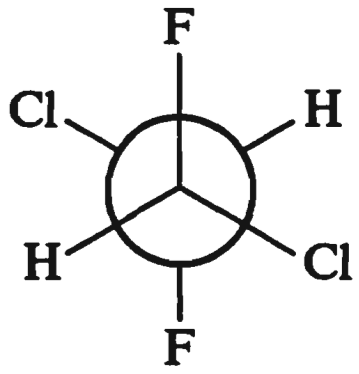
CHFClBr (2 изомера) (C_1)



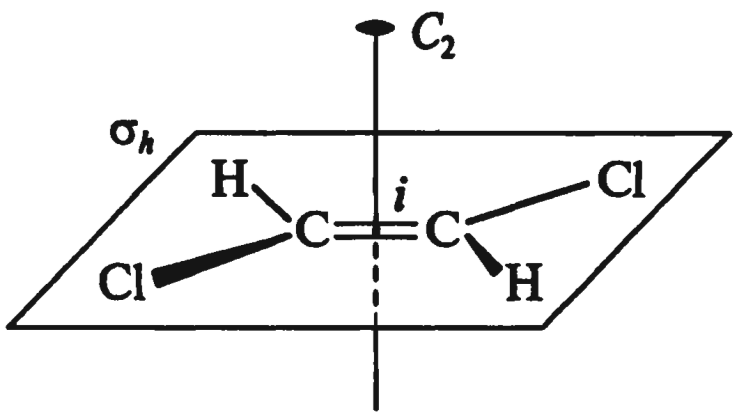
гош-H_2O_2 (C_2)



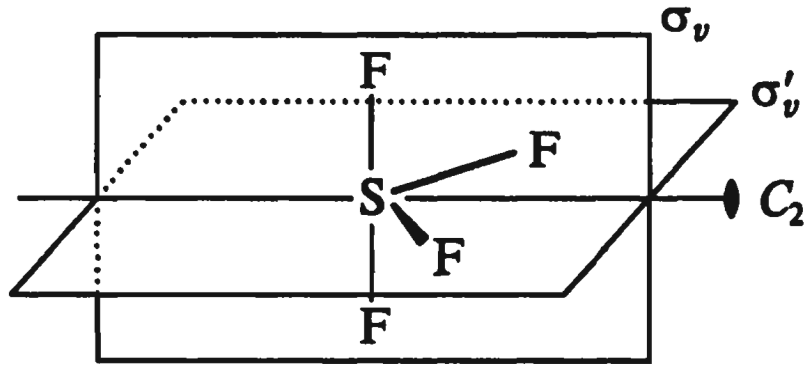
C_2H_3Cl (C_s)



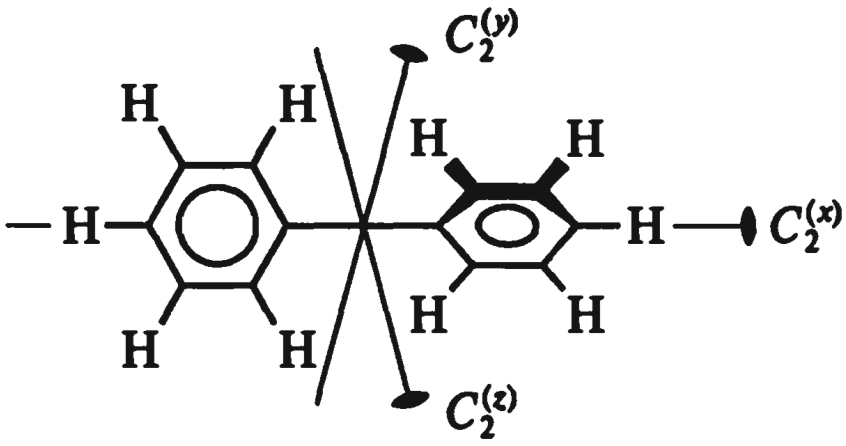
мезо-CHFCl—CHFCl (C_i)

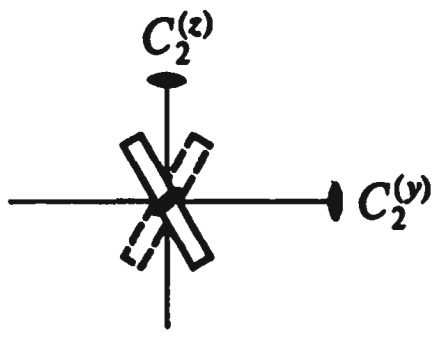


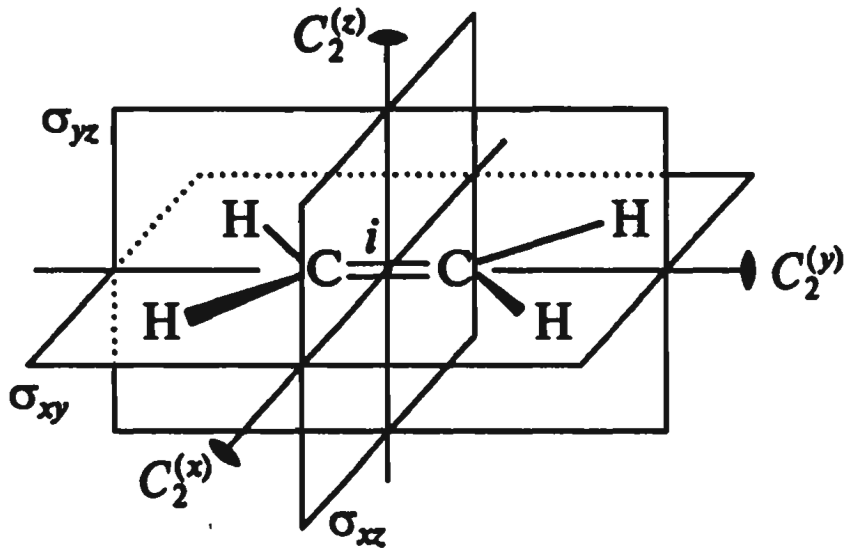
транс-$C_2H_2Cl_2$ (C_{2h})



SF_4 (C_{2v})





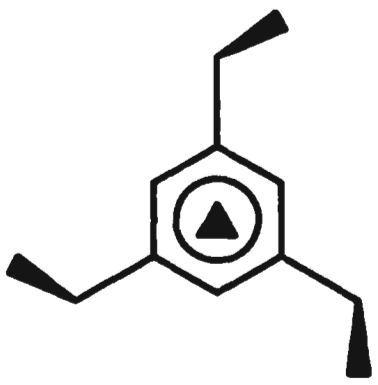


C_2H_4 (D_{2h})

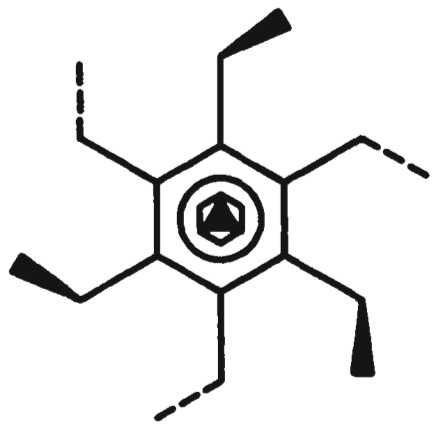
Дифенил C_6H_5—C_6H_5 (2 проекции) (D_2)

Рис. 1.15. Примеры молекул, относящихся к группам низшей категории; элементы симметрии молекул

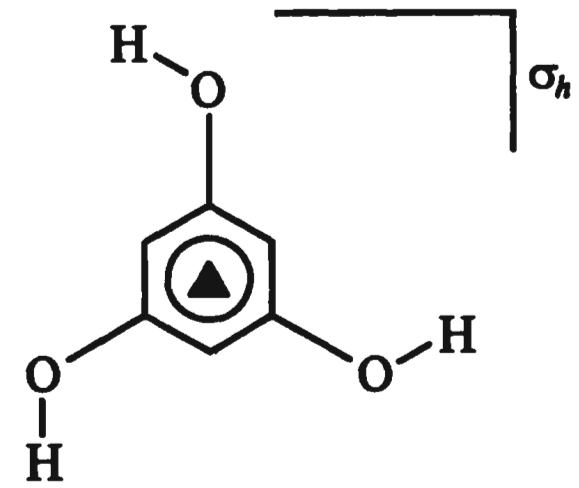
плоских атомных фрагментов (*лигандов*): правильных восьмиугольников C_8 с присоединенными каждой вершине атомами H, развернутых на $\pi/8$ один к другому относительно оси S_{16}. На рис. 1.16, 1.17 показаны молекулы, относящиеся к группам средней категории — в том числе еще один пример сэндвичевого комплекса: ферроцен $(C_5H_5)_2Fe$.



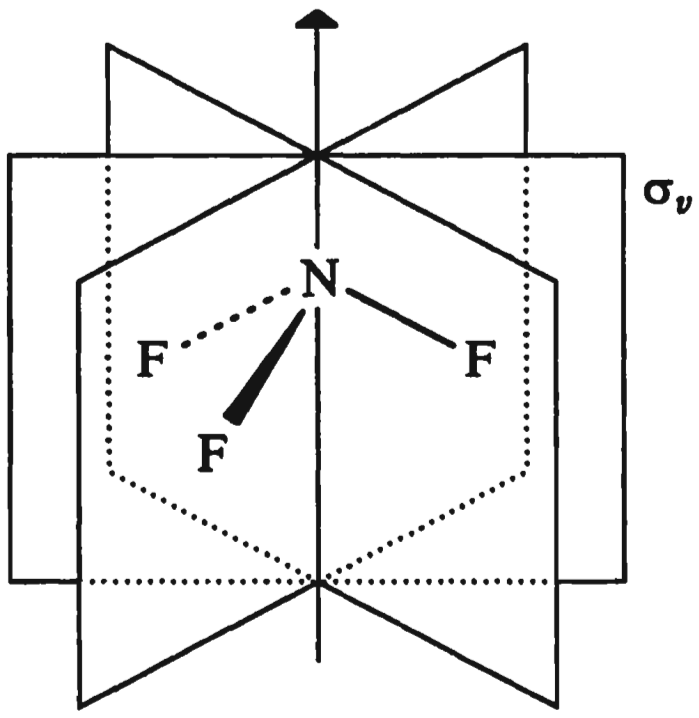
$1,3,5\text{-}C_6H_3(C_2H_5)_3$ (C_3)



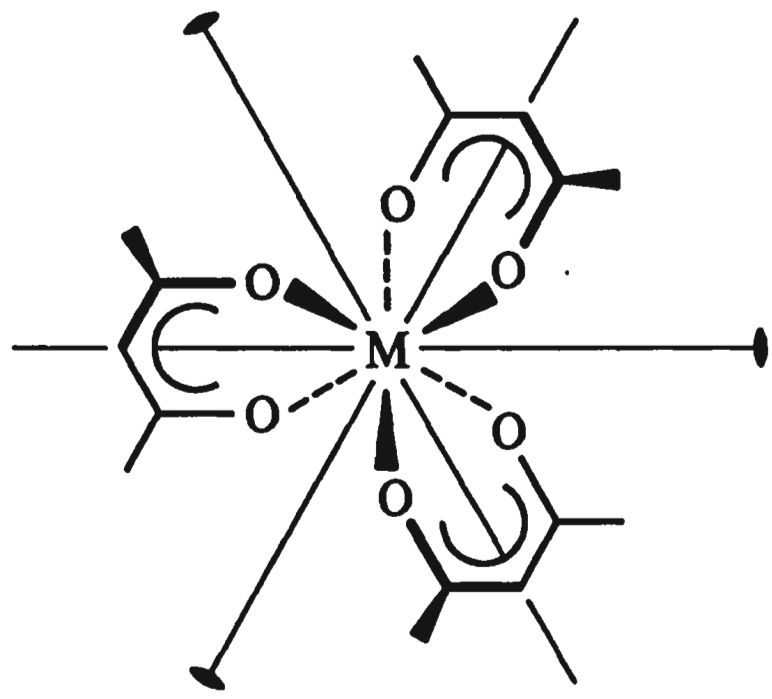
$C_6(C_2H_5)_6$ (S_6)



$1,3,5\text{-}C_6H_3(OH)_3$ (C_{3h})

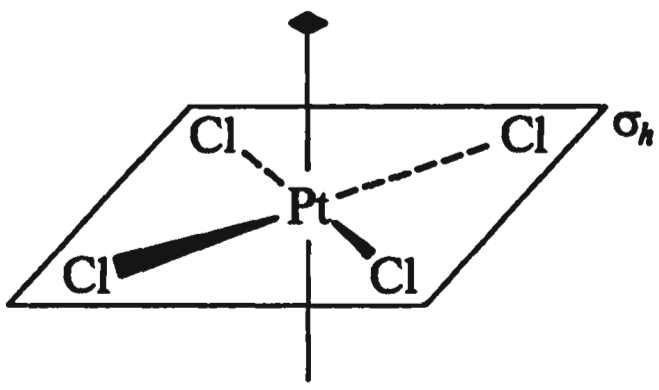


NF_3 (C_{3v})

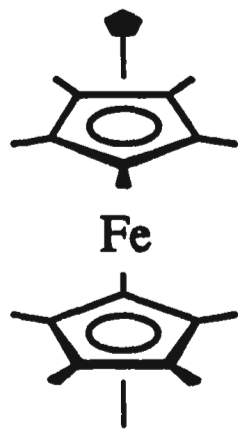


$M(acac)_3$ (D_3)

Рис. 1.16. Некоторые молекулы, относящиеся к средней категории симметрии (acac = O=C(CH_3)CHC(CH_3)C=O)



$PtCl_4^{2-}$ (D_{4h})



$(C_5H_5)_2Fe$ (D_{5d})

Рис. 1.17. Некоторые молекулы, относящиеся к средней категории симметрии: примеры групп D_{nh} и D_{nd} (вверху — перспективный вид, внизу — проекция)

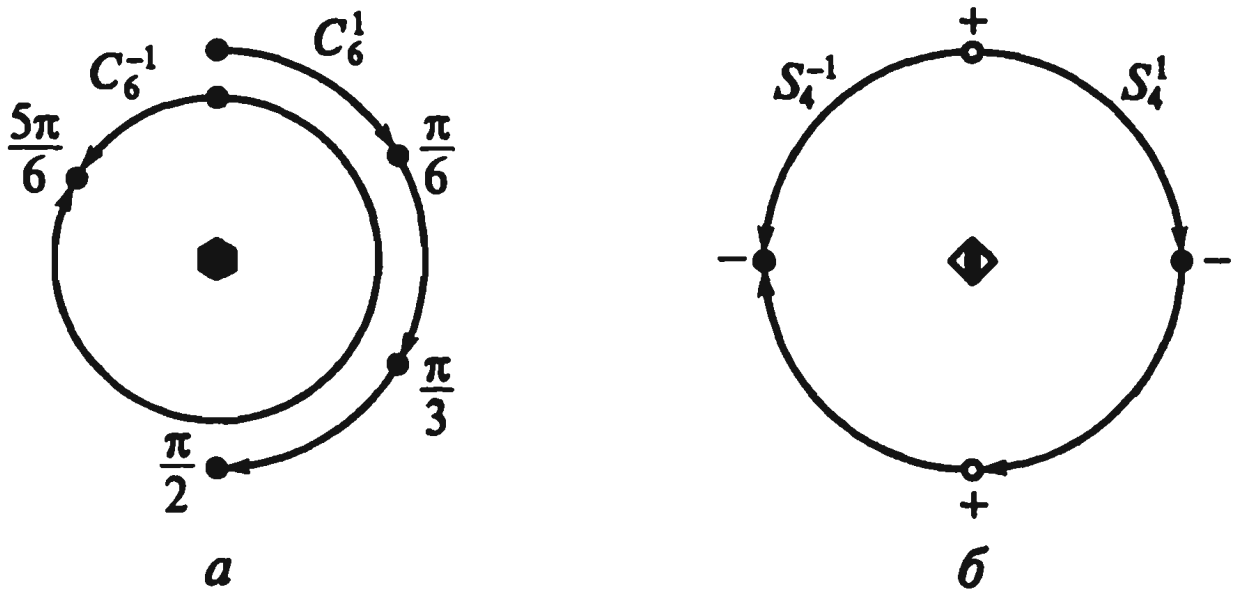


Рис. 1.18. Действие операций:

$а$ — поворота ($C_3^1 = C_6^2$, $C_2 = C_6^3$, $C_6^{-1} = C_6^5$); $б$ — зеркального поворота ($C_2 = S_4^2$, $S_4^{-1} = S_4^3$)

Семейства C_n и S_n состоят из абелевых циклических групп порядка n, в которых каждый элемент образует класс. Группы одинакового порядка из этих двух семейств изоморфны $C_n \simeq S_n$. Элементы C_n^k и C_n^{n-k} взаимно обратны, $C_n{}^k C_n^{n-k} = e$, что справедливо и для несобственных вращений (рис. 1.18). Группа C_n может включать подгруппы C_m, где $m|n$; группы простого порядка (т. е. примарные) не имеют нетривиальных подгрупп (см. теорему 1.5).

В группах несобственных вращений S_n порядок главной зеркально-поворотной оси $n = 2k$ всегда четный, $S_n^2 = C_{n/2}^1$. Оси S_{2k+1}, совпадающие с C_{2k+1}, имеются в группах более высокой симметрии вместе с плоскостью σ_h. Подгруппами S_{2k} являются C_k и C_i (при нечетном k) или C_k и C_2 (при четном k). Любая подгруппа $\langle a\rangle_m$ циклической группы $\langle a\rangle_n$ является нормальной, все факторгруппы $\langle a\rangle_n/\langle a\rangle_m$ — это циклические группы порядка n/m.

Среди устойчивых молекул редки примеры только осевой симметрии. К группе C_3 относятся, например, молекулы CH_3CF_3 и NH_3BF_3 в нестабильной «промежуточной» конформации*, а к группе C_6 — гипотетические конформации гексазамещенных бензолов C_6R_6 с нелинейными присоединенными фрагментами R, вывернутыми из плоскости бензольного кольца на один и тот же торсионный угол.

Молекулы с симметрией S_{2k} — например, гексаэтилэтан $(C_2H_5)_3C{-}C(C_2H_5)_3$ — можно сконструировать из двух одинаковых фрагментов C_k-симметрии при отсутствии осей C_2 или плоскостей σ_v, переводящих одну «половинку» молекулы в другую.

*Напомним, что *конформацией* в химии называют лабильную геометрическую конфигурацию молекулы, которую можно перевести в другие конфигурации поворотом молекулярных фрагментов вокруг химических связей. Примером конформационного перехода может служить внутреннее вращение молекулы этана $H_3C{-}CH_3$ вокруг связи C—C.

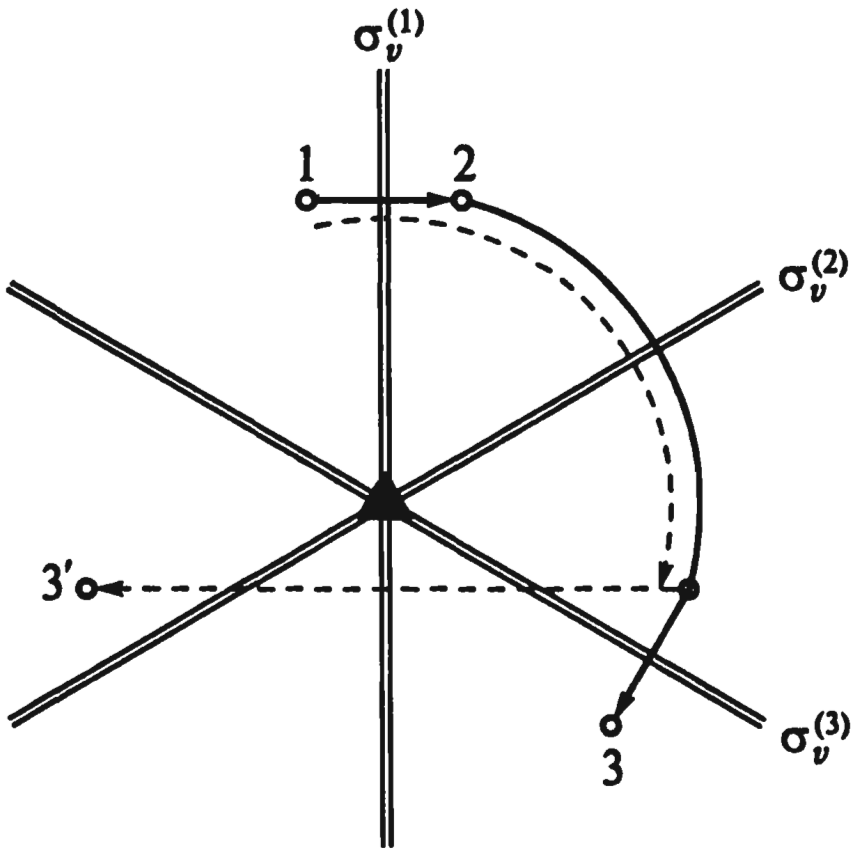


Рис. 1.19. Некоммутативность поворотов и отражений в группе C_{3v} ($C_3^1\sigma_v^{(1)} = \sigma_v^2$: $1 \to 3$; $\sigma_v^{(1)}C_3^1 = \sigma_v^3$: $1 \to 3'$)

Группы семейства C_{nh} являются прямыми произведениями вида $C_n \times C_s$. В них одновременно присутствуют повороты C_n^k и зеркальные повороты $S_n^k = C_n^k\sigma_h$. При четном порядке главной оси имеется центр инверсии. По свойствам прямого произведения это абелевы группы порядка $2n$ с (нормальными) подгруппами C_n, S_n и C_2, C_s, C_i. Соответственно у всех C_{nh} есть две разные фактор-группы: циклическая группа $\langle a\rangle_n$ и группа второго порядка $\langle a\rangle_2$. Среди молекул эту довольно редкую симметрию имеют борная кислота $B(OH)_3$ и триоксибензол 1,3,5-$C_6H_3(OH)_3$ (C_{3h}; цифрами обозначены позиции атомов углерода в бензольном кольце, связанных с OH-группами), а также тетрамеркаптидплатинат-дианион $[Pt(SR)_4]^{2-}$ (C_{4h}), гексаэтилбензол $C_6(C_2H_5)_6$ (C_{6h}) и т. д. в плоских конформациях (см. рис. 1.16).

Нецентросимметричные неабелевы группы семейств C_{nv} и D_n с одинаковым n изоморфны соответствующей группе диэдра (см. подразд. 1.1, 1.7), по-разному вложенной в трехмерное пространство. В группах D_n линиям симметрии правильного плоского n-угольника, проходящим через его центр, отвечают n осей C_2, перпендикулярных главной оси C_n, а в семействе C_{nv} (симметрия правильной n-угольной пирамиды) — n «вертикальных» плоскостей σ_v, пересекающихся по оси C_n под углом π/n к соседним плоскостям. Группы этих семейств также можно представить полупрямыми произведениями $C_{nv} = C_n \leftthreetimes C_s$ и $D_n = C_n \leftthreetimes C_2$ — результатами добавления к оси C_n не коммутирующих с ней элементов симметрии (рис. 1.19).

Отметим, что в отличие от групп низшей категории с $n = 2$ группа C_{nh} уже не изоморфна C_{nv} и D_n. В группах C_{nv} и D_n содержится $n/2 + 3$ класса сопряженных элементов при четном и $(n + 3)/2$ — при нечетном n (см. подразд. 1.7). Среди всех подгрупп C_{nv} и D_n только циклическая C_n является нормальной подгруппой (коммутантом), поэтому их фактор-группа имеет порядок 2.

Группы C_{nv} широко распространены среди малых молекул и молекулярных фрагментов. Менее распространенные группы D_n

отвечают нестабильным «промежуточным» конформациям этана и металлоценов, в которых угол взаимного поворота фрагментов CH_3 (соответственно C_nH_n) отличается от нуля и π/n, а также комплексам металлов с *бидентатными* лигандами, образующими две связи с атомом M — например $M(bipy)_n$, где bipy — фрагмент бипиридила $C_5H_4N—C_5H_4N$. Отметим, что эти комплексы также существуют в «левой» и «правой» молекулярных формах, не переводимых одна в другую поворотами в трехмерном пространстве*.

Неабелевы группы семейства $D_{nh} = D_2 \times C_s = C_{nv} \times C_s$ порядка $4n$ отвечают симметрии правильной прямоугольной призмы. Их можно построить добавлением к группам D_n и C_{nv} плоскости σ_h, перпендикулярной главной оси симметрии. При этом дополнительно к $(n-1)$ поворотам C_n^k возникают $(n-1)$ очевидных зеркальных поворотов $S_n^k = (\sigma_h C_n^1)^k$. Из соотношений (1.15) следует, что в группах D_{nh} по пересечениям вертикальных плоскостей симметрии σ_v с горизонтальной плоскостью σ_h проходят оси C_2. Группы D_{nh} с четным n центросимметричны, а семейства их плоскостей σ_v и осей C_2, перпендикулярных C_n, разбиваются на пары неэквивалентных классов сопряженных элементов. При четном n в группе D_{nh} $(n+6)$ классов, при нечетном — $(n+3)$. Это очень распространенный тип симметрии молекул и ионов: трифторид бора BF_3 (D_{3h}), бензол C_6H_6 (D_{6h}) и его изомер призман C_6H_6 с тригонально-призматическим углеродным каркасом (D_{3h}), тетрахлорплатинат-анион $[PtCl_4]^{2-}$ (D_{4h}) и многие другие.

Группы семейства D_{nd} получаются добавлением к группам D_n или C_{nv}, соответственно, вертикальной плоскости σ_d либо биссекторной оси C_2, проходящей перпендикулярно главной оси между соседними плоскостями. При этом возникает главная зеркально-поворотная ось S_{2n}, четные операции которой отвечают поворотам $C_n^k = S_{2n}^{2k}$. В группах D_{nd} нет горизонтальной плоскости симметрии; n диагональных плоскостей σ_d и n осей C_2, проходящих между ними, пересекаются соответственно по главной оси симметрии C_n и в лежащей на ней неподвижной точке, инвариантной относительно всех операций группы. При нечетном n эти группы центросимметричны. В отличие от D_{nh}, оси C_2 и плоскости σ_v образуют в D_{nd} по одному классу сопряженных элементов при любом n (всего в D_{nd} имеется $n+3$ классов, см. выше). К семейству D_{nd} относятся, в частности, этан C_2H_6 в устойчивой «заторможенной» конформации с поворотом CH_3-фрагментов на $\pi/3$ один относительно другого и металлоцены

*Стереоизомерные молекулы, не имеющие центра и плоскостей симметрии, в химии называют *хиральными*.

$(C_nH_n)_2M$ с аналогичной «шахматной» относительной ориентацией плоских циклических C_nH_n-лигандов.

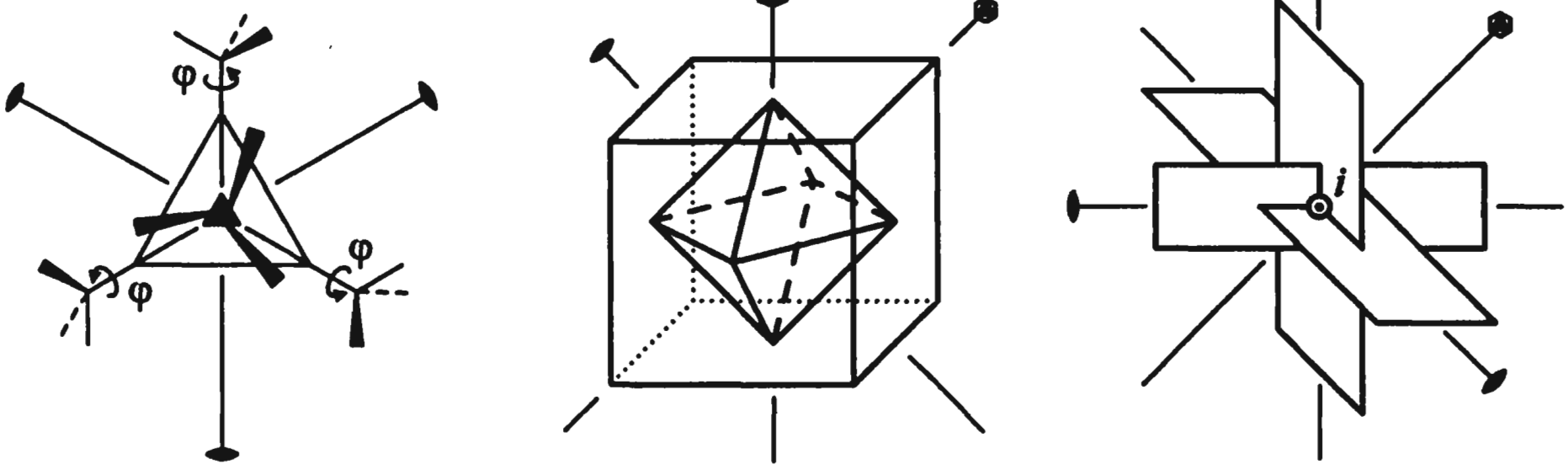
Упражнение 1.24. Определить подгруппы и классы сопряженных элементов в группах D_{4h} и D_{5d}.

Высшая категория симметрии. Образуется семью конечными точечными группами: T, T_h, T_d, O, O_h, I, I_h. В каждой из них имеется более одной оси симметрии порядка 3 и выше, пересекающихся в неподвижной точке пространства (инвариантной относительно всех операций группы). Среди устойчивых молекул примеры групп вращений T, O и I не встречаются, группы T_h и I_h встречаются относительно редко, а T_d и O_h очень распространены.

Группа вращений тетраэдра $T(e, 4C_3^1, 4C_3^2, 3C_2)$ имеет порядок $h = 12$. В этой группе 4 класса, и повороты на $\pi/3$ и $2\pi/3$ вокруг осей C_3 относятся к разным классам. Три поворота C_2 вместе с единичным элементом e образуют в T нормальную подгруппу (коммутант) D_2 порядка 4, ее фактор-группой T/D_2 служит простая циклическая группа $\langle a\rangle_3$. Группа (e, $8C_3$, $6C_2'$, $6C_4$, $3C_4^2 = 3C_2$) вращений октаэдра O вдвое большего порядка $h = 24$ состоит из 5 классов, ее коммутантом является подгруппа T, а фактор-группа O/T имеет порядок 2.

Группа $T_h = T \times C_i$ (e, $4C_3^1$, $4C_3^2$, $3C_2$, i, $4S_6^1$, $4S_6^3$, $3\sigma_h$) порядка $h = 24$ получается добавлением центра инверсии к T, отчего возникают зеркально-поворотные оси S_6 и плоскости, перпендикулярные осям C_2. Разные повороты относительно четырех симметрически эквивалентных осей S_6 (включая $S_6^2 = C_3^1$, $S_6^4 = C_3^2$ и $S_6^3 = S_2 = i$) относятся в ней к разным классам. Это группа симметрии «ежа» из трех одинаковых взаимно перпендикулярных полос, направленных по диагоналям октаэдра, комплекса $[Fe(py)_6]^{2+}$ с перпендикулярной ориентацией плоских пиридиновых лигандов, а также гексанитрат-анионов $[M(NO_3)_6]^{q-}$ с икосаэдрической координацией атома M (La, Th) бидентатными NO_3-лигандами (рис. 1.20).

Группа симметрий тетраэдра T_d ($E, 8C_3$, $6\sigma_d$, $6S_4$, $3S_4^2 = 3C_2$; $h = 24$), изоморфна O (но не изоморфна T_h). Центр симметрии в ней отсутствует, оси S_4 проходят перпендикулярно скрещивающимся противоположным ребрам тетраэдра (см. рис. 1.5). Группа T_d изоморфна группе перестановок $\mathbf{S}_4$; каждая ее операция соответствует определенной перестановке вершин тетраэдра (теорема 1.9); ее подгруппа T изоморфна группе четных перестановок $\mathbf{A}_4$. Симметрию T_d имеют молекула метана CH_4 и ее структурные аналоги ($TiCl_4$ и др.), молекула белого фосфора P_4 и многие ионы (SO_4^{2-} и др.).



а *б* *в* *г*

Рис. 1.20. Примеры групп высшей категории:

а — T: молекула тетраметилтетраэдрана $C_4(CH_3)_4$ и некоторые из ее поворотных осей; *б* — O: поворотные оси октаэдра и куба; *в* — T_h: элементы симметрии; *г* — T_h: гексапиридиновый комплекс металла $[M(py)_6]^{q+}$ ($py = C_5H_5N$)

Группа симметрий октаэдра и куба $O_h = T_d \times C_i = O \times C_i$ (e, $8C_3$, $6C_2'$, $6C_4$, $3C_4^2 = 3C_2$, i, $8S_6$, $6S_4$, $6\sigma_d$, $3S_4^2 = 3\sigma_h$; $h = 48$), может быть построена добавлением инверсии к T_d или O. Она содержит по два разных класса осей C_2 шесть осей, проходящих через середины ребер октаэдра, и три его диагональные оси $C_4^2 = C_2'$) и плоскостей симметрии (шесть «диагональных» плоскостей, проходящих через одну ось C_4, и три «горизонтальные» плоскости $S_4^2 = \sigma_h$, проходящие через две оси C_4 перпендикулярно третьей (см. рис. 1.20). Это одна из самых распространенных точечных групп: в неорганической химии ей отвечают комплексные соединения MX_6 с октаэдрическим лигандным окружением вокруг атома M, октаэдрические кластеры металлов M_6 и многие другие, в органической химии — каркасная молекула кубана C_8H_8.

В группе I (e, $12C_5$, $12C_5^2$, $20C_3$, $15C_2$) вращений икосаэдра и пентагондодекаэдра ($h = 60$) повороты на $\pi/5$ и $2\pi/5$ вокруг осей C_5 относятся к разным классам, тогда как все повороты

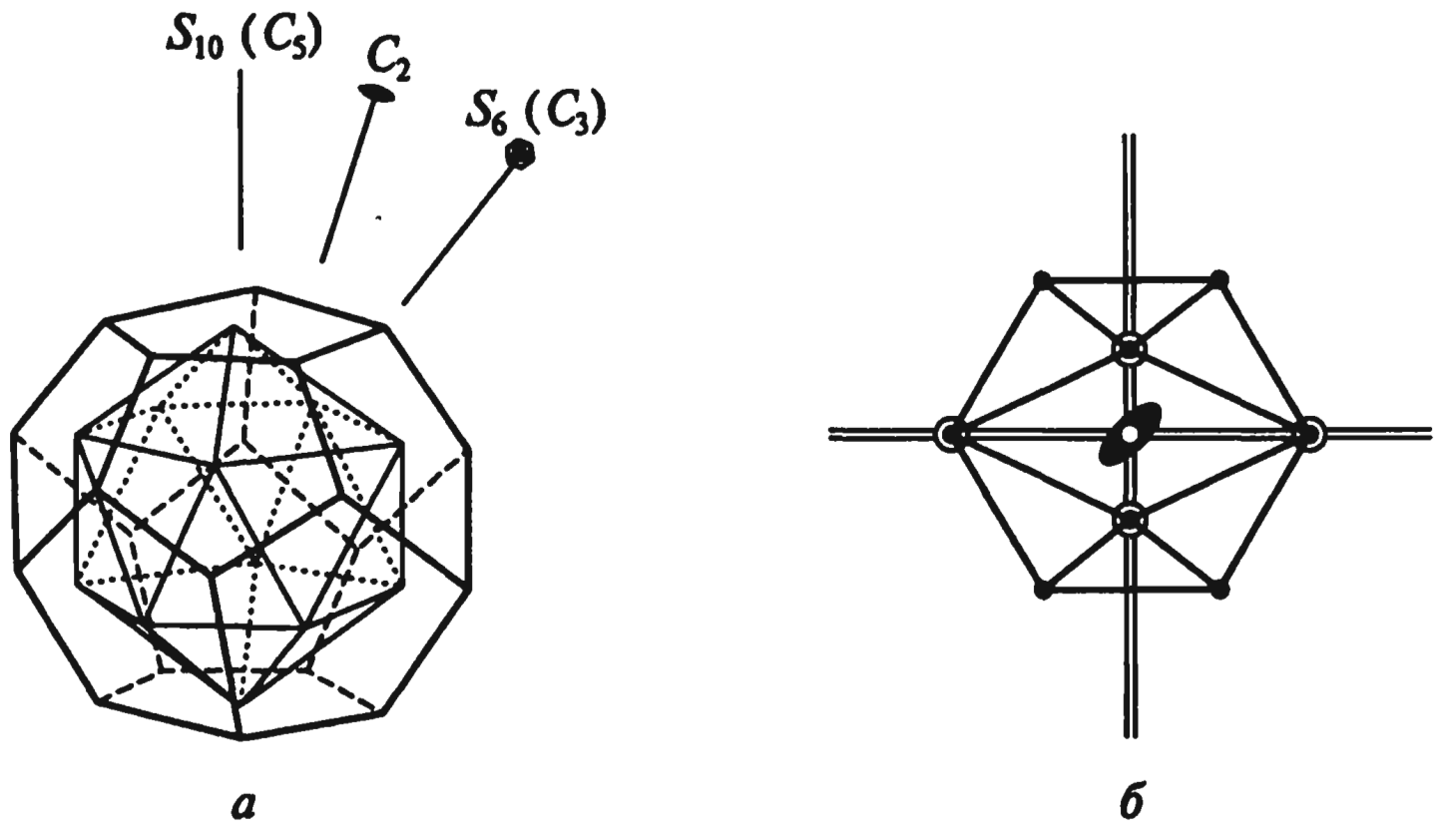


Рис. 1.21. Оси симметрии икосаэдра и пентагондодекаэдра (*а*), проекция икосаэдра вдоль его поворотной оси 2-го порядка (*б*)

вокруг осей C_3, проходящих через центры треугольных граней икосаэдра, и осей C_2, проходящих через середины его противолежащих ребер, образуют по одному классу.

Прямым произведением этой группы с группой инверсии является группа

$$(e,\ 12C_5,\ 12C_5^2,\ 20C_3,\ 15C_2,\ i,\ 12S_{10}^1,\ 12S_{10}^3,\ 20S_6,\ 15\sigma_v)$$

симметрии икосаэдра и пентагондодекаэдра $I_h = I \times C_i$ ($h = 120$) (рис. 1.21). Ей строго соответствуют молекулы додекаэдрана $C_{20}H_{20}$ и бакминстерфуллерена C_{60} (см. подразд. 2.9.2), а также додекагидроборат-анион $B_{12}H_{12}^{2-}$ с икосаэдрическим остовом B_{12}. Приближенную симметрию I_h имеют координационные полиэдры с координационным числом 12, а также икосаэдрические молекулы *о*-, *м*- и *п*-карборанов $C_2B_{10}H_{12}$ (точной симметрии C_{2v}, C_{2v} и D_{5h} соответственно).

У п р а ж н е н и е 1.25. Доказать, что $T_h = I_h \cap O_h$ и построить гипотетическую структуру молекулы додекагидрофуллерена $C_{60}H_{12}$ симметрии T_h.

1.10.2. Двойные группы

Ряд физических свойств P молекул и кристаллов зависит как от пространственных координат атомов $\mathbf{r_i} = (x_i, y_i, z_i)$, так и от других параметров (например, от спинов атомных ядер). В теоретическом описании таких свойств $P(\mathbf{r_1}, ..., \mathbf{r_n}, \alpha_1, ..., \alpha_k)$ параметры $\alpha_1, ..., \alpha_k$ часто рассматриваются как аналоги координат в пространстве с числом измерений выше 3. Физические харак-

теристики, зависящие от подобного расширенного набора переменных, обладают более высокой симметрией, чем симметрия трехмерной точечной группы.

В описании спиновых состояний молекул используются двойные группы $\overline{G}$, получаемые из точечных групп удвоением числа операций симметрии. Это достигается формальным условием $C_n^{2n} = e$ (поворот на 4π) и $C_n^n = E$ (поворот на 2π). Так, удвоение точечной группы D_2 (e, C_2^x, C_2^y, C_2^z) дает группу

$$\overline{D}_2 = (e, C_2^x, C_2^y, C_2^z, E, EC_2^x, EC_2^y, EC_2^z)$$

с соотношениями между элементами

$$C_2^x C_2^y = C_2^z, \quad (C_2^{(i)})^2 = E \quad (i = x, y, z), \quad E^2 = e. \tag{1.27}$$

Умножением (1.27) на $C_2^{(i)}$ слева и справа получим:

$$C_2^x C_2^y C_2^z = E,$$
$$C_2^y C_2^z = C_2^x,\ C_2^z C_2^x = C_2^y,$$
$$C_2^y C_2^x = EC_2^z,\ C_2^x C_2^z = EC_2^y,\ C_2^z C_2^y = EC_2^x.$$

Положив $E = -1$, установим изоморфизм двойной группы $\overline{D}_2$ с группой кватернионов $\mathbf{Q}_8$, в соответствии с которым в ней имеется пять классов сопряженных элементов (e, E и $(C_2^{(i)}, EC_2^{(i)})$, где $i = x, y, z$) и единственная нормальная подгруппа 2-го порядка (e, E); ее фактор-группа изоморфна точечной группе D_2.

Для построения двойных групп $\overline{G}$ средней категории симметрии в исходной группе G достаточно ввести операцию E как поворот на 2π вокруг главной оси C_n и рассмотреть все операции вида Eg_i, $g_i \in G$. В двойных группах $\overline{C}_{nv}$ и $\overline{D}_n$ при $n = 2k + 1$ порядок и число классов удваивается (элементы Eg_i и g_i попадают в разные классы), а при $n = 2k$ удваиваются только классы, не входящие в подгруппу $D_2 \simeq Q_8$. Прочие двойные группы средней категории можно построить, используя изоморфизм и свойства прямого произведения. Так, например, двойная группа вращений тетраэдра $\overline{T}$ имеет порядок 24 и содержит семь классов: e, E, $4C_3^1$, $4C_3^2$, $4EC_3^1$, $4EC_3^2$ и $(3C_2, 3EC_2)$.

Упражнение 1.26. Найти подгруппы и классы сопряженных элементов двойной группы $\overline{O}_h$.

1.10.3. Группы Лонге-Хиггинса

В ряде процессов, прежде всего в ходе химической реакции, геометрия молекул изменяется, и точечные группы симметрии

для них неприменимы (структурная нежесткость). Однако во многих нежестких молекулах (например, при конформационных переходах в этане) сохраняется порядок соединения атомов, т. е. молекулярный граф, также отвечающий определенной группе. «Предельной» симметрией молекулы, содержащей n_1 атомов элемента 1, n_2 атомов элемента 2, ..., n_k атомов k-го элемента, в условиях, когда она уже не имеет определенной геометрии, однако еще остается устойчивым атомным агрегатом (например, при фрагментации в масс-спектрах), является перестановочно-инверсионная симметрия, описываемая *группами Лонге-Хиггинса*:

$$\mathbf{S}_{n_1} \times \mathbf{S}_{n_2} \times \cdots \times \mathbf{S}_{n_k} \times \langle j \rangle_2.$$

Эта группа отражает инвариантность измеримых параметров нежесткой молекулы относительно перестановок ее химически идентичных ядер k типов (множитель $\mathbf{S}_{n_1} \times \mathbf{S}_{n_2} \times \cdots \times \mathbf{S}_{n_k}$) и инверсии пространственных координат (множитель $\langle j \rangle_2 \simeq C_i \simeq \mathbf{S}_2$).

Группы Лонге-Хиггинса применяют в спектроскопии нежестких молекул, например при описании симметрии ровибронных уровней (см. гл. 5). Их легко вывести, используя свойства группы $\mathbf{S}_n$ и прямого произведения. Так, например, полная группа перестановок и инверсий химически идентичных ядер для молекулы этилена C_2H_4 $\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_4 \times \langle j \rangle_2$ состоит из $2 \times 24 \times 2$ элементов (точечная группа этой молекулы D_{2h} — всего из восьми элементов), содержит $5 \times 2 \times 2$ классов и подгруппы $\mathbf{S}_4$, $\mathbf{A}_4$ (коммутант), $\mathbf{S}_3$, $\mathbf{A}_3$, $\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_2 \simeq D_2$, $\langle a \rangle_4 \simeq C_4$, $\langle a \rangle_3 \simeq C_3$, $\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_2 \times \langle j \rangle_2 \simeq D_{2h}$, $\langle j \rangle_2 \simeq C_i$. Ее абелева фактор-группа порядка 8 изоморфна точечной группе молекулы D_{2h}.

У п р а ж н е н и е 1.27. Определить классы сопряженных элементов и подгруппы группы Лонге-Хиггинса структурно нежесткой молекулы пентахлорида фосфора PCl_5.

Контрольные вопросы

1. Пусть λ — фиксированное вещественное число. Будет ли группой относительно умножения множество всех ненулевых вещественных матриц вида

$$\begin{pmatrix} x & y \\ \lambda y & x \end{pmatrix},$$

где x, y — произвольные вещественные числа?

2. Перемножить перестановки

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

и разложить результат в произведение независимых циклов. Найти порядок этого произведения.

3. Будет ли подгруппой в группе $\mathbf{S_4}$ множество, состоящее из четырех перестановок $\{\varepsilon, (12)(34), (13)(24), (14)(23)\}$?

4. Найти порядок матриц

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

в группе $\mathrm{GL}(1, \mathbb{C})$

5. Найти порядок перестановки

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 5 & 7 & 1 & 2 & 9 & 4 & 8 & 6 & 3 \end{pmatrix}.$$

6. Найти смежные классы $\mathbf{S_4}$ по подгруппе $\mathbf{V_4}$.

7. Доказать, что $\mathbb{R}/\mathbb{Z} \simeq \mathbf{U}$.

8. Доказать, что коммутант группы верхнетреугольных комплексных матриц размера 2 состоит из всех матриц вида

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

9. В четырехмерном евклидовом пространстве задан полиэдр с декартовыми координатами вершин $(\pm a, 0, 0, 0,)$, $(0, \pm a, 0, 0)$, $(0, 0, \pm a, 0)$, $(0, 0, 0, \pm a)$. Определить точечную группу этого полиэдра и найти ее трехмерные подгруппы.

ГЛАВА 2

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ГРУППЫ

Описаны конечно порожденные абелевы группы, используемые при исследовании строения кристаллографических групп на плоскости и в трехмерном пространстве. Рассмотрены пространственные группы кристаллов и родственные им конструкции.

2.1. КОНЕЧНО ПОРОЖДЕННЫЕ АБЕЛЕВЫ ГРУППЫ

Многие группы бесконечного порядка, используемые в кристаллографии и ее физико-химических приложениях, выводятся из конечного набора элементов (*конечно порождены*). Рассмотрим строение конечно порожденных абелевых групп. Предположим, что в изучаемых абелевых группах основная операция является сложением, т. е. абелевы группы имеют аддитивную запись. Элемент a абелевой группы в целочисленной степени $m \in \mathbb{Z}$ будем обозначать ma:

$$ma = \begin{cases} a + a + \ldots + a, & m > 0 \\ \underbrace{-a - a - \ldots - a}_{m \text{ раз}}, & m < 0. \end{cases}$$

О п р е д е л е н и е 2.1. Элементы $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ являются *базисом* абелевой группы A, если выполняются следующие условия:

1) элементы из $\mathbf{e}$ *независимы*, т. е. из того, что $m_1e_1 + \cdots + m_ne_n = 0$, где $m_1, \ldots, m_n \in \mathbb{Z}$, следует, что $m_1 = \cdots = m_n = 0$;

2) элементы из $\mathbf{e}$ *порождают* группу A, т. е. каждый элемент $x \in A$ можно представить в виде $x = m_1e_1 + \cdots + m_ne_n$.

Другими словами, каждый элемент $x \in A$ имеет, и притом единственное, представление в виде

$$x = m_1e_1 + \cdots + m_ne_n, \quad m_i \in \mathbb{Z}. \tag{2.1}$$

Группа A *свободная*, если она обладает базисом. *Рангом* свободной абелевой группы A называют число элементов в базисе A.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 2.1. Для абелевой группы A следующие условия эквивалентны:

1) группа A обладает базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$;
2) группа A изоморфна группе

$$\underbrace{\mathbb{Z} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}}_{n}. \tag{2.2}$$

Доказательство. Если $\mathbf{e}$ — базис в группе A, то зададим гомоморфизм ψ из группы A в группу (2.2) по правилу: если $x \in A$ имеет представление (2.1), то $\psi(x) = (m_1, \ldots, m_n)$. Нетрудно проверить, что ψ является изоморфизмом групп. Таким образом, из условия 1) следует условие 2).

Обратно, пусть выполнено условие 2). Тогда группа (2.2) обладает базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$, где

$$e_i = (0, \ldots, \overset{i}{1}, 0, \ldots, 0), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Таким образом, элементы свободной абелевой группы можно понимать как векторы с целочисленными координатами. Свободную абелеву группу образуют, например, все векторы $(n_1 e_1, n_2 e_2)$, где $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ (рис. 2.1).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.2. Число векторов в базисе свободной абелевой группы определено однозначно. Другими словами, ранг свободной абелевой группы определен однозначно.

Доказательство. Пусть $(e_1, \ldots, e_n)$ и $(f_1, \ldots, f_m)$ — два базиса в A. Предположим, что $m > n$. Тогда каждый базисный вектор f_j имеет представление

$$f_j = \sum_{i=1}^{n} a_{ji} e_i, \quad a_{ji} \in \mathbb{Z}.$$

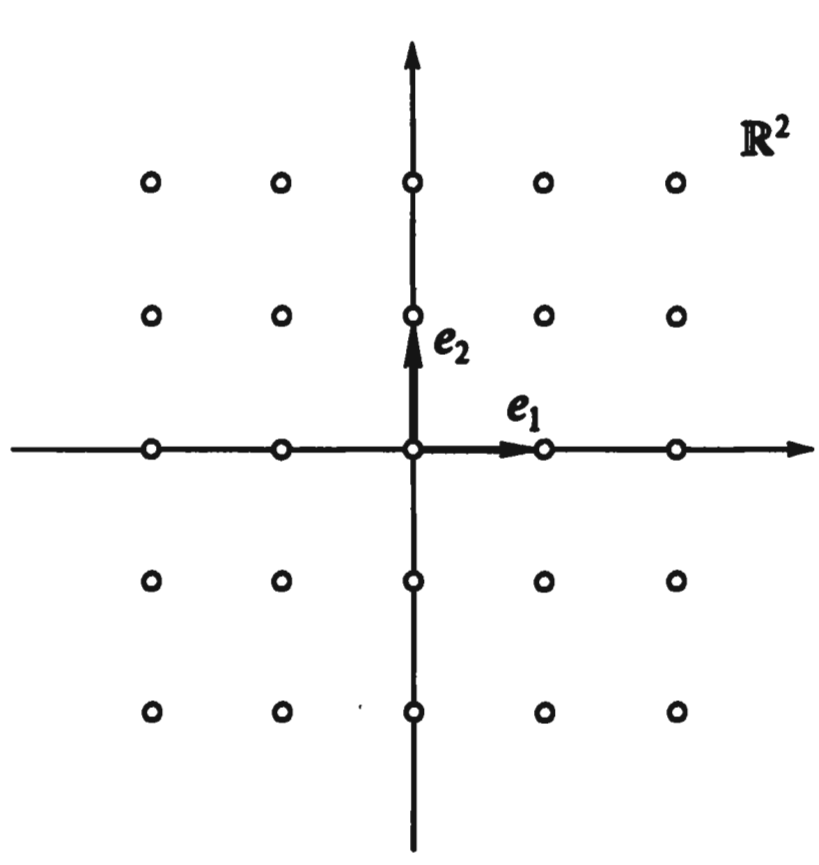


Рис. 2.1. Пример свободной абелевой группы с базисом $\mathbf{e} = (e_1, e_2)$ в $\mathbb{R}^2$. Каждая точка задает положение вектора $(n_1 e_1, n_2 e_2)$ из этой группы

Строки матрицы $(a_{ji}) \in \mathrm{Mat}(m \times n, \mathbb{Z})$ линейно зависимы над полем рациональных чисел $\mathbb{Q}$ (см. гл. 7). Следовательно, они линейно зависимы над $\mathbb{Z} \subseteq \mathbb{Q}$. Поэтому найдется такой ненулевой набор целых чисел $b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{Z}$, что

$$(b_1, \ldots, b_m) \begin{pmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} = 0.$$

Отсюда $b_1 f_1 + \cdots + b_m f_m = 0$, что противоречит независимости $f_1, \ldots, f_m$.

Упражнение 2.1. Доказать утверждение. Пусть A — свободная абелева группа с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. Предположим, что $c_1, \ldots, c_n$ — элементы произвольной абелевой группы C. Тогда существует (и притом единственный) такой гомоморфизм $\psi : A \to C$, что $\psi(e_i) = c_i$, $1 \leqslant i \leqslant n$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть A — свободная абелева группа с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. Тогда число разных гомоморфизмов из A в циклическую группу порядка 2 равно 2^n. В частности, ранг A, равный сумме образов $\sum \phi(e_i)$ при «единичном» гомоморфизме ϕ: $A \to \mathbb{R}^*$, где $\phi(e_i) \equiv 1$, определен однозначно (см. предложение 2.2).

ТЕОРЕМА 2.1. Пусть A — свободная абелева группа ранга n. Если B — ненулевая бесконечная подгруппа в A, то она свободная и ее ранг не превышает n.

Доказательство. Будем вести доказательство индукцией по n. Если $n = 1$, то $A \simeq \mathbb{Z}$. Тогда группа A циклическая и, следовательно, по теореме 1.5 группа $B = \langle b \rangle$ циклическая, причем $b \neq 0$. Тогда элемент b является базисом B, т. е. подгруппа B свободная.

Пусть для $n-1$ теорема доказана, и $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ — базис в группе A. Обозначим через H совокупность всех целочисленных линейных комбинаций базисных элементов $e_1, \ldots, e_{n-1}$. Тогда H является свободной абелевой группой с базисом $(e_1, \ldots, e_{n-1})$. По индукции $B \cap H$ — свободная абелева группа с базисом $(f_1, \ldots, f_m)$, где $m \leqslant n-1$. Следовательно, если $B \subseteq H$, то теорема доказана.

Пусть $B \not\subseteq H$. Выберем такое наименьшее натуральное число d, что элемент $f = c_1 e_1 + \cdots + c_{n-1} e_{n-1} + d e_n \in B$. Покажем, что элементы $f_1, \ldots, f_m, f$ составляют базис B. Действительно, если $b = u_1 e_1 + \cdots + u_n e_n \in B$, $u_i \in \mathbb{Z}$, то $u_n = rd$ для некоторого $r \in \mathbb{Z}$. В самом деле, пусть $u_n = rd + l$, где $0 \leqslant l < d$. Тогда $b - rf = u'_1 e_1 + \cdots + u'_{n-1} e_{n-1} + l e_n \in B$, что про-

тиворечит выбору d, если $l \neq 0$. Итак, $u_n = rd$ и $b - rf \in B \cap H$. Поэтому $b - rf = a_1 f_1 + \cdots + a_m f_m, \quad a_i \in \mathbb{Z}$. Таким образом, $b = rf + a_1 f_1 + \cdots + a_m f_m$, где $r, a_i \in \mathbb{Z}$. Следовательно, элементы

$$f, f_1, \ldots, f_m \tag{2.3}$$

порождают B.

Покажем, что элементы (2.3) независимы. Пусть

$$rf + a_1 f_1 + \cdots + a_m f_m = 0, \quad r, a_i \in \mathbb{Z}. \tag{2.4}$$

Ввиду линейной независимости базисных векторов $e_1, \ldots, e_n$, задающих элемент f, коэффициент при e_n в левой части (2.4) $rd = 0$, откуда $r = 0$, ибо $d \neq 0$. Таким образом, из (2.4) получаем, что $a_1 f_1 + \cdots + a_m f_m = 0$, откуда $a_1 = \cdots = a_m = 0$, ибо элементы $f_1, \ldots, f_m$ независимы. Итак, элементы (2.3) образуют базис подгруппы B и их число равно $m+1 \leqslant n-1+1 = n$.

О п р е д е л е н и е 2.2. Целочисленные элементарные преобразования строк (столбцов) целочисленной матрицы состоят из двух типов преобразований:

1) умножение слева (справа) на элементарные матрицы $E + aE_{ij}, a \in \mathbb{Z}$;

2) умножение строки (столбца) на –1.

У п р а ж н е н и е 2.2. **Показать, что целочисленными элементарными преобразованиями строк (столбцов) можно переставить любые две строки (столбца).**

Т Е О Р Е М А 2.2. Пусть $A \in \mathrm{Mat}(n \times m, \mathbb{Z})$. Целочисленными элементарными преобразованиями строк и столбцов можно привести A к диагональному виду $\mathrm{diag}(d_1, d_2, \ldots)$, где $d_i \geqslant 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Можно считать, что $A = (a_{ij}) \neq 0$. Пусть $\delta(A)$ — минимум модулей ненулевых элементов матрицы A. Предположим, что целочисленная матрица A целочисленными элементарными преобразованиями строк и столбцов уже приведена к такому виду, что $\delta(A)$ далее уменьшить нельзя. Переставляя строки и столбцы и умножая, если необходимо, на –1, ее можно привести к $\delta(A) = a_{11}$.

Л Е М М А 2.1. a_{11} делит a_{1j}, a_{i1} при всех i, j.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим, например, a_{11} не делит a_{21}. Тогда $a_{21} = qa_{11} + r$, где $0 < r < a_{11}$. Вычитая из второй строки первую, умноженную на q, получаем на месте a_{21} элемент $a'_{21} = r$, что противоречит выбору $\delta(A) = a_{11}$.

Совершая элементарные преобразования строк и столбцов, по лемме 2.1 можно добиться, чтобы $a_{1j} = a_{i1} = 0$ для

всех $i, j > 1$. Доказательство теоремы завершается индукцией по размеру матрицы.

Разные элементы свободной абелевой группы A взаимосвязаны операциями сдвигов, или операциями *трансляционной симметрии*, в пространстве с базисом $(e_1, ..., e_n)$. Покажем, что это справедливо для элементов любой подгруппы в A.

ТЕОРЕМА 2.3 (теорема о согласованном базисе). Пусть B — ненулевая подгруппа в свободной абелевой группе A ранга n. Тогда в A существует такой базис $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ и такие натуральные числа $d_1, d_2, \ldots d_k$, где $k \leqslant n$, что элементы $d_1 e_1, \ldots, d_k e_k$ составляют базис B.

Доказательство. Выберем в группе A базис $f_1 \ldots, f_n$, и в группе B — систему порождающих элементов $g_1, \ldots, g_k, k \leqslant n$ (см. теорему 2.1). Тогда

$$g_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} f_j, \quad a_{ij} \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, \ldots, k.$$

Рассмотрим $A = (a_{ij}) \in \mathrm{Mat}(k \times n, \mathbb{Z})$ — целочисленную матрицу. Целочисленные элементарные преобразования строк A соответствуют элементарным преобразованиям базиса $g_1, \ldots, g_k$, а целочисленные элементарные преобразования столбцов A соответствуют элементарным преобразованиям базиса $f_1 \ldots, f_n$. По теореме 2.2, изменяя оба базиса, можно получить $g_1 = d_1 f_1, \ldots, g_k = d_k f_k$.

Таким образом, теорема о согласованном базисе позволяет найти репер подрешетки $A_1 \subset A(\Gamma)$, являющейся подгруппой в A

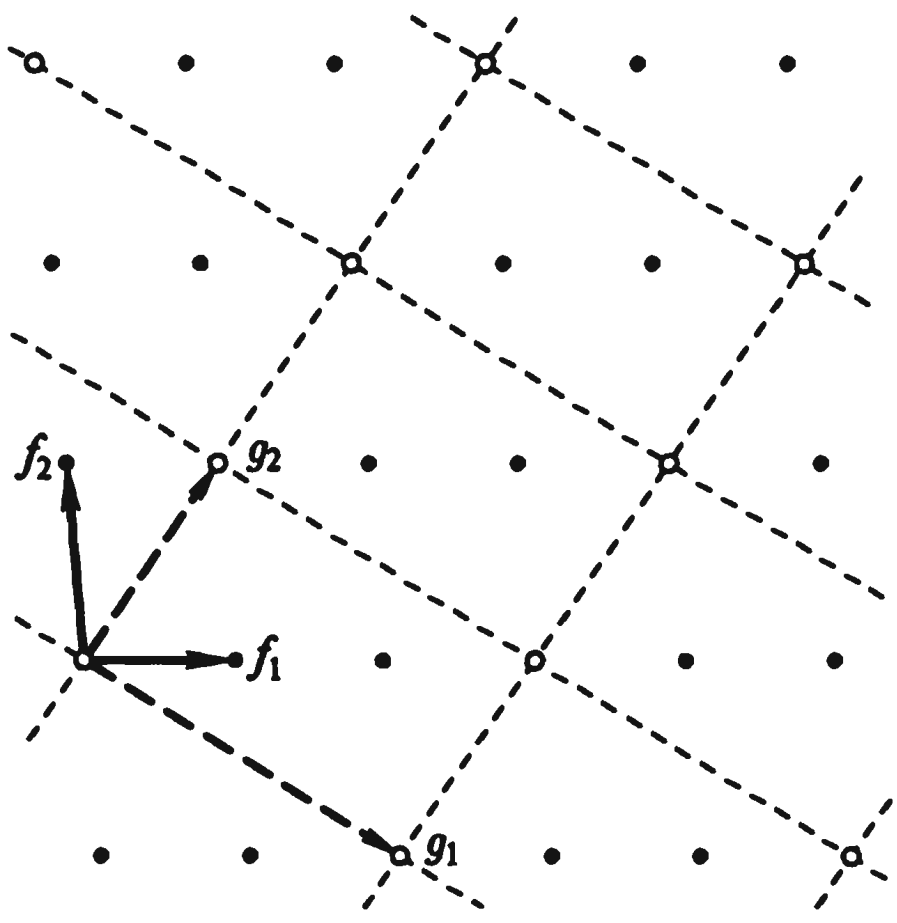


Рис. 2.2. Базисы решетки $A(\Gamma)$ и ее подрешетки $A_1 \subset A(\Gamma)$

относительно сдвигов (рис. 2.2). Однако в кристаллических соединениях (например, NaCl, алмаз и др.) положения атомов связаны не только сдвигами, но и такими операциями симметрии, как повороты и отражения. Чтобы описать такие системы, следует расширить совокупность рассматриваемых нами групп.



Рис. 2.3. Подгруппа $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$ в $\mathbb{R}$

О п р е д е л е н и е 2.3. Абелева группа A *конечно порождена,* если существуют такие элементы $a_1, \ldots, a_n \in A$, что каждый элемент $x \in A$ можно представить в виде $x = c_1a_1 + \cdots + c_na_n$, $c_i \in \mathbb{Z}$.

Например, в группе $\mathbb{R}^1$ конечно порождена подгруппа $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$, состоящая из всех чисел вида $m+n\sqrt{2}$, где $m, n \in \mathbb{Z}$. Эта подгруппа всюду плотна в $\mathbb{R}^1$, т. е. в каждом непустом интервале на прямой содержится хотя бы одна точка из $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$ (рис. 2.3). (Утверждение вытекает из того, что $\sqrt{2}$ можно сколь угодно точно приблизить рациональным числом. Так, например, в любой окрестности нуля найдутся числа вида $-m + [m/\sqrt{2}]\sqrt{2}$, где $m \in \mathbb{Z}$ и $[m/\sqrt{2}]$ — целая часть числа $m/\sqrt{2}$.)

Можно показать, что группа $\mathbb{Q}$ всех рациональных чисел относительно сложения не является конечно порожденной.

Установим соотношение свободной и конечно порожденной абелевых групп.

Т Е О Р Е М А 2.4. Конечно порожденная абелева группа является прямой суммой свободной абелевой группы и некоторого конечного числа примарных циклических групп.

(Напомним, что примарной называется циклическая группа, порядок которой является степенью простого числа, см. подразд. 14.)

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть A — конечно порожденная группа и $a_1, \ldots, a_n \in A$ — ее порождающие элементы из определения 2.1. Рассмотрим свободную абелеву группу F ранга n — например, группу вида (2.2). Выберем в F базис $e_1, \ldots, e_n$ и зададим гомоморфизм $\xi : F \to A$, при котором

$$\xi\left(\sum_{i=1}^{n} x_ie_i\right) = \sum_{i=1}^{n} x_ia_i.$$

Нетрудно видеть, что ξ является эпиморфизмом. Пусть $B = \ker\xi$. По теореме 2.3 можно считать, что $d_1e_1, \ldots, d_ke_k$ составляют базис B, где $d_1, \ldots, d_k$ — натуральные числа, $k \leqslant n$. Зададим в F k нормальных подгрупп ранга $\leqslant 1$:

$$N_i = \begin{cases} \mathbb{Z}d_i e_i, & \text{если } 1 \leqslant i \leqslant k; \\ 0, & \text{если } k < i \leqslant n. \end{cases}$$

По теореме 1.11 о гомоморфизмах и по теореме 1.21 получаем

$$A \simeq F/B \simeq (\mathbb{Z}e_1/N_1) \oplus \cdots \oplus (\mathbb{Z}e_n/N_n). \tag{2.5}$$

Если $1 \leqslant i \leqslant k$, то

$$\mathbb{Z}e_i/N_i = \mathbb{Z}e_i/\mathbb{Z}d_i e_i \simeq \mathbb{Z}/\mathbb{Z}d_i. \tag{2.6}$$

По теореме 1.20 группа (2.6) разлагается в прямую сумму примарных циклических групп.

Если $k < i \leqslant n$, то $N_i = 0$, и поэтому $\mathbb{Z}e_i/N_i \simeq \mathbb{Z}$. Итак, из (2.5) получаем, что $A \simeq (\oplus_i C_i) \oplus H$, где C_i — примарные циклические группы, и

$$H = \underbrace{\mathbb{Z} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}}_{n-k}.$$

По предложению 2.1 группа H свободна.

Приблизим описание конечно порожденных абелевых групп к симметрии кристаллов

О п р е д е л е н и е 2.4. Группа G *не имеет кручения*, если в ней нет нетривиальных, т. е. отличных от единичного, элементов конечного порядка.

С Л Е Д С Т В И Е. Конечно порожденная абелева группа без кручения свободна.

На рис. 2.1 — 2.3 были представлены примеры бесконечных абелевых групп без кручения. Однако ими не исчерпывается вся совокупность бесконечных абелевых групп. Так, вершины правильного шестиугольника на плоскости, переводящиеся одна в другую поворотами на $k\pi/3$ ($k \in \mathbb{Z}^1$) вокруг центра фигуры, образуют циклическую группу 6-го порядка. Эта группа по теореме 1.20 разлагается в прямую сумму примарных циклических групп 2-го и 3-го порядков. Поэтому группа симметрий гексагональной сетки на плоскости конечно порождена, но не свободна. Конечно порожденные абелевы группы общего вида (т. е. с кручениями) особенно важны для приложений, так как они описывают симметрию кристаллических тел.

В кристаллографической и физической литературе решетку кристалла обычно изображают системой точек, т. е. фрагментом дискретного бесконечного множества. Дадим этому формальное обоснование.

Определение 2.5. Подгруппа H аддитивной группы вещественного n-мерного векторного пространства $\mathbb{R}^n$ *дискретна*, если существует такая окрестность U нуля 0, что $U \cap H = 0$.

ТЕОРЕМА 2.5. Дискретная подгруппа в $\mathbb{R}^n$ свободна.

Доказательство. По следствию из определения 2.4 достаточно показать, что подгруппа H конечно порождена, так как она не имеет кручений. Выберем в H максимальную линейно независимую систему векторов $f_1, \ldots, f_k$, $k \leqslant n$. Положим

$$\Gamma = \left\{ \sum_{i=1}^{k} \alpha_i f_i \mid 0 \leqslant \alpha_i \leqslant 1 \right\}.$$

Тогда Γ является компактом, т. е. замкнутым ограниченным множеством, и, следовательно, $\Gamma \cap H$ конечно. Остается заметить, что H порождается элементами из $\Gamma \cap H$ и элементами $f_1, \ldots, f_k$.

Определение 2.6. Дискретная подгруппа H в $\mathbb{R}^n$ называется *решеткой*, если ранг H как свободной абелевой группы равен n.

Отметим, что это определение относится только к операциям группы и не включает никаких материальных объектов, связанных этими операциями (например, молекул и атомов в кристалле). Такое тривиальное замечание все же полезно, поскольку в некоторых простейших кристаллических структурах (например, α-Fe) позиции всех атомов можно совместить с узлами трехмерной решетки. В общем случае это не так, хотя на рисунках кристаллических структур часто изображают и их решетки для выявления элементов симметрии.

ТЕОРЕМА 2.6. Пусть G — дискретная подгруппа в $\mathbb{R}^n$ с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_k)$. Тогда векторы из $\mathbf{e}$ независимы в $\mathbb{R}^n$.

Доказательство. Пусть, например, $e_1 = \lambda_2 e_2 + \cdots + \lambda_k e_k$, где $\lambda_i \in \mathbb{R}$. Положим

$$S = \left\{ \alpha_2 e_2 + \cdots + \alpha_k e_k \mid 0 \leqslant \alpha_j \leqslant 1, \quad j = 2, \ldots, k \right\}.$$

Тогда S является компактом, и, следовательно, как и в предыдущей теореме, $S \cap G$ конечно.

Для любого натурального числа d получаем

$$de_1 = [d\lambda_2]e_2 + \cdots + [d\lambda_k]e_k + (\beta_2 e_2 + \cdots + \beta_k e_k),$$

где $[d\lambda_i]$ — целая часть числа λ_i и $\beta_2 e_2 + \cdots + \beta_k e_k \in S \cap G$.

Поэтому найдутся такие натуральные числа $d_1 > d_2$, что $d_1e_1 - d_2e_1$ лежит в подгруппе, порожденной $e_2, \ldots, e_k$, т. е. $(d_1 - d_2)e_1 = m_2e_2 + \cdots + m_ke_k$, где $m_j \in \mathbb{Z}$. Это противоречит определению базиса в G.

Упражнение 2.3. Пусть G — подгруппа в $\mathbb{R}$, порожденная $1, \sqrt{2}$. Будет ли она плотной в $\mathbb{R}$?

Говорят, что последовательность векторов x_n евклидова пространства E *сходится* к вектору $x \in E$, если $\lim_{n\to\infty} \|x_n - x\| = 0$, где $\|x\|$ — длина вектора $x \in E$. Напомним, что подмножество X в евклидовом пространстве E называют *замкнутым*, если из сходимости любой последовательности векторов $x_n \in X$, $n = 1, 2, \ldots$, к вектору $x \in E$ следует, что $x \in X$. Примером замкнутого подмножества являются дискретные подгруппы в $\mathbb{R}^n$. Теорема 2.7, приводимая без доказательства, обобщает теоремы 2.5 и 2.6.

ТЕОРЕМА 2.7. Пусть G — замкнутая подгруппа в аддитивной группе векторов n-мерного евклидова пространства E. Тогда существует такое прямое разложение E в сумму подпространств $E = V \oplus U$, что $G = V \oplus F$, где V — аддитивная группа векторов в V и F — дискретная подгруппа в U.

Данная теорема позволяет описывать такие объекты в евклидовом пространстве, которые обладают трансляционной симметрией не по всем его координатам — например, бордюры на плоскости.

2.2. РЕШЕТКИ В ЕВКЛИДОВЫХ ПРОСТРАНСТВАХ

Исследуем подгруппы аддитивной группы векторов n-мерного евклидова пространства E. В результате получим основные свойства решеток, используемые в кристаллографии.

Определение 2.7. Дискретная подгруппа A в аддитивной группе евклидова пространства E называется *решеткой* в E, если ее ранг равен размерности пространства E. В силу теорем 2.5 и 2.6 в свободной абелевой группе A существует базис, являющийся одновременно базисом пространства E.

Если L — решетка в E, то *дуальной* (*взаимной*) *решеткой* [41, гл. I, § 5] называют множество L^* всех таких векторов $x \in E$, что скалярное произведение $(x, z) \in \mathbb{Z}$ для всех $z \in L$. *Обратной решеткой* называют множество всех таких $x \in E$, что $(x, z) \in 2\pi\mathbb{Z}$ для всех $z \in L$.

Ясно, что элемент x лежит в обратной решетке в том и только в том случае, если $x/2\pi \in L^*$.

ТЕОРЕМА 2.8. Если L — решетка в E, то L^* действительно является решеткой (т. е. соответствует определению 2.7).

Доказательство. Если $x, y \in L^*$, то для любого $z \in L$ имеем

$$(x+y, z) = (x, z) + (y, z) \in \mathbb{Z}, \quad (-x, z) = -(x, z) \in \mathbb{Z}.$$

Поэтому L^* является подгруппой аддитивной группы E.

Согласно теоремам 2.5 и 2.6, в свободной абелевой группе L существует базис $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$, являющийся базисом пространства E. По предложению 7.3 в пространстве E имеется дуальный базис $\mathbf{e}' = (e'_1, \ldots, e'_n)$, обладающий тем свойством, что $(e'_i, e_j) = \delta_{ij}$ (символ Кронекера) для всех $i, j = 1, \ldots, n$. В частности, каждый вектор $e'_1, \ldots, e'_n$ лежит в L^*.

Пусть $x = x_1 e'_1 + \cdots + x_n e'_n \in L^*$. Тогда для любого j имеем $(x, e_j) = x_j \in \mathbb{Z}$. Отсюда следует, что L^* является свободной абелевой группой с базисом $e'_1, \ldots, e'_n$.

СЛЕДСТВИЕ. Если L — решетка в E, то $L^{**} = L$.

Фундаментальной областью решетки L с заданным в ней базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ называется параллелограмм

$$P = \left\{ x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i \mid 0 \leqslant x_i < 1 \right\}.$$

Разумеется, это определение зависит от выбора базиса $\mathbf{e}$. *Объемом* параллелограмма P называют число $V(P) = \sqrt{\det G(\mathbf{e})}$, где $G(\mathbf{e})$ — матрица Грама базиса $\mathbf{e}$:

$$G(\mathbf{e}) = G(e_1, \ldots, e_n) = \begin{pmatrix} (e_1, e_1) & (e_1, e_n) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ (e_n, e_1) & (e_n, e_n) \end{pmatrix}.$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.3. Объем $V = V(P)$ не зависит от выбора базиса.

Доказательство. Пусть $\mathbf{e}' = \mathbf{e}C$ — другой базис в свободной абелевой группе E и C — матрица перехода. Тогда матрица C имеет целые коэффициенты, и потому ее определитель — целое число. Но $\mathbf{e} = \mathbf{e}'C^{-1}$, причем C^{-1} также целочисленная матрица, поэтому и ее определитель — целое число. Поскольку $CC^{-1} = E$, то $(\det C)(\det C^{-1}) = 1$. Отсюда вытекает, что $\det C = \det C^{-1} = \pm 1$.

По (7.2) имеем $G(\mathbf{e}') = {}^tCG(\mathbf{e})C$, и поэтому

$$V(P') = \sqrt{\det G(\mathbf{e}')} = \sqrt{\det C \det G(\mathbf{e}) \det C^{-1}} =$$
$$= \sqrt{\det G(\mathbf{e})} = V(P).$$

Таким образом, можно говорить об *объеме фундаментальной области* V, не привязывая ее к какому-либо базису.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.4. Пусть L — решетка с объемом фундаментальной области V и L^* — дуальная решетка с объемом фундаментальной области V^*. Тогда $V \cdot V^* = 1$.

Доказательство. Пусть $\mathbf{e}$ — произвольный базис решетки L и $\mathbf{e}^*$ — дуальный базис, являющийся по теореме 2.8 базисом дуальной решетки L^*. В силу предложения 7.3 получаем $G(\mathbf{e}^*) = G(\mathbf{e})^{-1}$. Отсюда вытекает доказываемое утверждение.

Предположим, что в евклидовом пространстве E заданы решетка M и подпространство U.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.5. Решетка M как абелева группа разлагается в прямую сумму $M = (M \cap U) \oplus M'$, где M' — свободная абелева подгруппа в M.

Доказательство. Заметим, что $M \cap U$ является подгруппой в M. Предположим, что $x \in M$ и $y = kx \in U$ для некоторого целого ненулевого числа k. Тогда $x = y/k \in U \cap M$. По теореме 2.3 о согласованном базисе в свободной абелевой группе M существует такой базис $e_1, \ldots, e_n$, что $e_1, \ldots, e_d$, $d \leqslant n$ составляют базис $U \cap M$. Поэтому M яв-

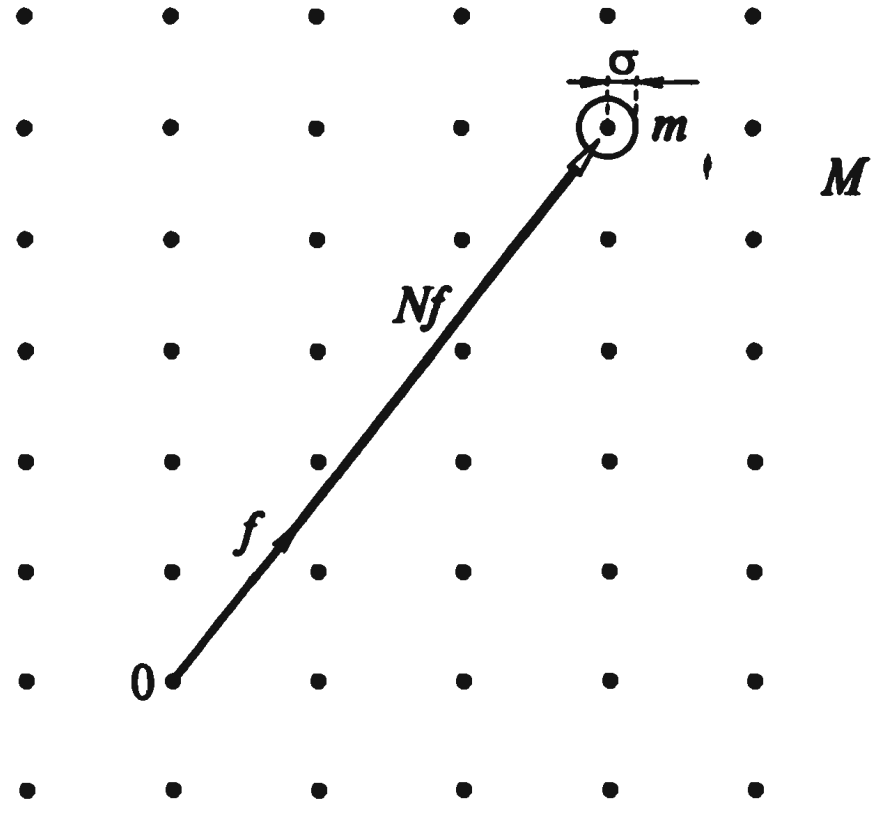


Рис. 2.4. Произвольный вектор евклидова пространства $f \in \mathbf{E}$, «растянутый» к вектору решетки $m \in M$ (N — целое число)

ляется прямой суммой $U \cap M$ и свободной абелевой группы, порождаемой $e_{d+1}, \ldots, e_n$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.6. Пусть M — решетка в евклидовом пространстве E и $f \in E$. Для любого $\sigma > 0$ и любого $D > 0$ найдется такое натуральное число $N > D$ и элемент $m \in M$, что $\|Nf - m\| < \varepsilon$ и $\|m\| > N\|f\| - \sigma$. (Таким образом, «растягивая» произвольный вектор евклидова пространства E в целое число раз, можно неограниченно приблизить его к одному из векторов решетки, заданной в этом пространстве, рис. 2.4.)

Доказательство. Обозначим $[\alpha]$ и $\{\alpha\}$, соответственно целую и дробную части любого вещественного числа α, т. е. $\alpha = [\alpha] + \{\alpha\}$ (см. теорему 2.6).

Пусть $e_1, \ldots, e_n$ — произвольный базис решетки M. Положим

$$P = \left\{ \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i \mid \alpha_i \in \mathbb{R},\ 0 \leqslant \alpha_i \leqslant 1 \right\}.$$

Нетрудно видеть, что P является компактом. Пусть $f = \sum_{i=1}^{n} \beta_i e_i$, где $\beta_i \in \mathbb{R}$. Тогда $f = g + h$, где

$$g = \sum_{i=1}^{n} [\beta_i] e_i \in M, \quad h = \sum_{i=1}^{n} \{\beta_i\} e_i \in P.$$

Рассмотрим в P последовательность элементов $h(t) = \sum_{i=1}^{n} \{t\beta_i\} e_i$, где t — натуральные числа. Так как P — компакт, то из этой последовательности можно выбрать сходящуюся подпоследовательность $h(t_1), h(t_2), \ldots$, где $t_1 < t_2 < \ldots$. В частности, найдутся такие числа $t' < t''$, что $\|h(t'') - h(t')\| < \sigma$, причем $N = t'' - t' > D$. Положим

$$m = \sum_{i=1}^{n} [t''\beta_i] e_i - \sum_{i=1}^{n} [t'\beta_i] e_i \in M.$$

Тогда $Nf - m = (t'' - t')f - m = h(t'') - h(t')$. Остается заметить, что

$$\|m\| = \|Nf + (m - Nf)\| \geqslant |\,\|Nf\| - \|m - Nf\|\,| \geqslant N\|f\| - \sigma.$$

Отсюда вытекает доказываемое утверждение.

Доказанное предложение допускает следующее обобщение.

ТЕОРЕМА 2.9 (теорема Давенпорта). Предположим, что задано число $\sigma > 0$ и векторы $c_1, \ldots, c_{n-1} \in E$. Тогда найдется такое число $N_0 = N_0(M, \sigma, c_1, \ldots, c_{n-1})$, что для любого

вещественного числа $N \geqslant N_0$ найдется такой базис $e_1, \ldots, e_n$ решетки M, что $\|Nc_i - e_i\| < N^\sigma$ [41, гл. I, теорема II].

Упражнение 2.4. Пусть задана решетка L в евклидовом пространстве E. Показать, что если K — компакт в E, то $K \cap L$ конечно. В частности, в L существует элемент с минимальной ненулевой длиной.

Приведем без доказательства формулировку известной теоремы. Напомним, что подмножество K аффинного пространства V называется *выпуклым*, если из того, что две точки $x, y \in K$, следует, что весь отрезок $[x, y] = \{\lambda x + \mu y \mid \lambda + \mu = 1,\ \lambda, \mu \geqslant 0\}$ принадлежит K.

ТЕОРЕМА 2.10 (теорема Минковского). Пусть в n-мерном евклидовом пространстве E задана решетка L с объемом фундаментальной области V. Предположим, что в E задан выпуклый компакт K, обладающий тем свойством, что если $x \in K$, то также $-x \in K$. Если объем компакта $V(K) \geqslant 2^n V$, то в K содержится ненулевой элемент из L [120, с. 601].

2.3. ГРУППА ДВИЖЕНИЙ

Исследуем строение группы движений евклидова пространства и сформулируем теорему Шенфлиса — Бибербаха, лежащую в основе классификации кристаллографических групп. Напомним (см. гл. 1), что преобразование Φ евклидова пространства E называют *движением*, или *изометрией*, если Φ сохраняет расстояние между любыми двумя точками пространства, т. е. если $\|\Phi(x) - \Phi(y)\| = \|x - y\|$ для всех $x, y \in E$. Примерами движений являются *сдвиги* $\Phi(x) = x + b$ на фиксированный вектор $b \in E$ (трансляции) и ортогональные преобразования (операции симметрии геометрических фигур и т. д.). Множество $\mathrm{Iso}(E)$ всех движений евклидова пространства E образует группу относительно операции композиции отображений (группу Евклида).

В гл. 1 отмечалось, что справедлива следующая теорема

ТЕОРЕМА 2.11. Преобразование Φ евклидова пространства E является движением тогда и только тогда, когда существуют такой ортогональный линейный оператор ϕ и такой вектор b, что $\Phi(x) = \phi(x) + b$ для всех $x \in E$. При этом $b = \Phi(0)$ и $\phi(x) = \Phi(x) - \Phi(0)$ определены по Φ однозначно [46, с. 196 — 198].

Линейный ортогональный оператор ϕ из теоремы 2.11 называют *дифференциалом* движения Φ и обозначают $\phi = d\Phi$. Таким образом, $\Phi(x) = d\Phi + \Phi(0)$.

ТЕОРЕМА 2.12. Пусть Φ — движение евклидова пространства E. Тогда $E = L \oplus L^{\perp}$, где $L = \ker(d\Phi - \mathcal{E})$ и $\mathcal{E}$ — тождественный оператор на E. При этом $L^{\perp}$ инвариантно относительно $d\Phi$. Кроме того, существуют такой элемент $b \in L$ и такая точка $O \in L^{\perp}$, что $\Phi(x + O) = (d\Phi)(x) + b + O$ для всех $x \in E$ [46, с. 198].

Эта теорема означает, что дифференциал $d\Phi$ движения Φ действует тождественно на подпространстве L. Перенесем начало координат в точку O. Если $x = x_1 + x_2 \in E$, где $x_1 \in L$, $x_2 \in L^{\perp}$, то $\Phi(x) = (d\Phi)(x_1 + x_2) + b = x_1 + (d\Phi)(x_2) + b$, причем $(d\Phi)(x_2) \in L^{\perp}$. Другими словами, получено *винтовое движение* вокруг подпространства L. Особенно наглядно это видно при $n = 3$. В этом случае (см. подразд. 7.7.2, следствие 3), если $d\Phi$ не тождественно, то $\dim L = 1$, $\dim L^{\perp} = 2$, причем $d\Phi$ в плоскости $L^{\perp}$ действует как поворот на некоторый угол. Тогда операция Φ задает винтовое движение в пространстве $E = L \oplus L^{\perp}$ вокруг оси L (рис. 2.5).

Вычислим ряд важных элементов группы $\mathrm{Iso}(E)$. Пусть $\Phi, \Psi \in \mathrm{Iso}(E)$. Тогда

$$\Phi\Psi(x) = (d\Phi)(d\Psi)(x) + (d\Phi)\,[\Psi(0)] + \Phi(0). \tag{2.7}$$

Таким образом, $d(\Phi\Psi) = (d\Phi)(d\Psi)$, т. е. $d : \mathrm{Iso}(E) \to \mathbb{O}(E)$ является гомоморфизмом групп. В частности, из свойств гомоморфизма вытекает, что $d(\Phi^{-1}) = (d\Phi)^{-1}$. Кроме того, $\Phi\Psi(0) = (d\Phi)\,[\Psi(0)] + \Phi(0)$. Несложная проверка показывает, что $\Phi^{-1}(0) = -(d\Phi)^{-1}\,[\Phi(0)]$.

Вычислим в группе $\mathrm{Iso}(E)$ сопряженный элемент $\Phi\Psi\Phi^{-1}$ и коммутатор $\{\Phi, \Psi\} = \Phi\Psi\Phi^{-1}\Psi^{-1}$. Из предыдущих рассуждений следует, что

$$d\left(\Phi\Psi\Phi^{-1}\right) = (d\Phi)(d\Psi)(d\Phi)^{-1};$$

$$\Phi\Psi\Phi^{-1}(0) = -(d\Phi)(d\Psi)(d\Phi)^{-1}\,(\Phi(0)) + (d\Phi)\,(\Psi(0)) + \Phi(0); \tag{2.8}$$

$$d\{\Phi, \Psi\} = \{d\Phi, d\Psi\};$$

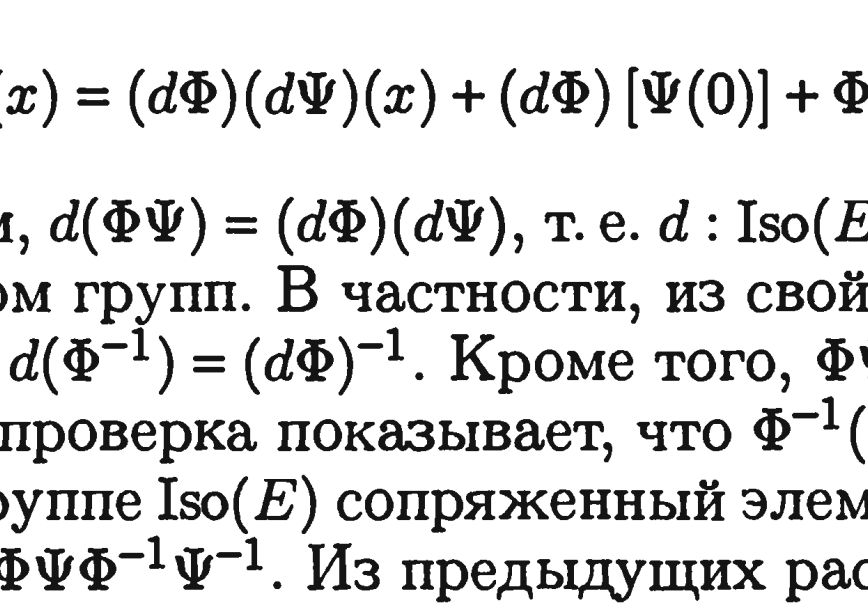


Рис. 2.5. Винтовое движение Φ как композиция поворота $d\Phi$ и сдвига b

$$\{\Phi,\Psi\}(0) = -\{d\Phi, d\Psi\}(\Psi(0)) - (d\Phi)(d\Psi)(d\Phi)^{-1}(\Phi(0)) + \\ +(d\Phi)(\Psi(0)) + \Phi(0). \tag{2.9}$$

Из теоремы 2.11 вытекает следствие.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть O — неподвижная точка движения Φ, т. е. $\Phi(O) = O$. Если мы перенесем начало координат в точку O, то Φ превращается в ортогональный линейный оператор $d\Phi$ на E.

Доказательство. По предыдущей теореме для любого $x \in E$ получаем $\Phi(x) = (d\Phi)(x) + \Phi(0)$. Так как точка O неподвижна, то $\Phi(O) = (d\Phi)(O) + \Phi(0) = O$. Отсюда

$$\Phi(x+O) = (d\Phi)(x+O) + \Phi(0) = (d\Phi)(x) + (d\Phi)(O) + \Phi(0) = \\ = (d\Phi)(x) + \Phi(O) = (d\Phi)(x) + O.$$

Определим строение группы $\mathrm{Iso}(E)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.7. Пусть N — подмножество всех сдвигов из $\mathrm{Iso}(E)$. Тогда N образует нормальную подгруппу в $\mathrm{Iso}(E)$, причем $\mathrm{Iso}(E)/N \simeq \mathbb{O}(E)$, где $\mathbb{O}(E)$ — группа всех ортогональных преобразований в E. Кроме того, $N \simeq E$, где E — аддитивная группа всех векторов $x \in E$.

Доказательство. Сопоставление каждому движению Φ его дифференциала $d\Phi$ задает гомоморфизм групп $\mathrm{d}\colon \mathrm{Iso}(E) \to \mathbb{O}(E)$, причем $\ker d = N$. Поэтому $N \lhd \mathrm{Iso}(E)$ и $\mathrm{Iso}(E)/N \simeq \mathbb{O}(E)$. Сопоставляя с $\Psi \in N$ вектор $\Psi(0)$, получаем изоморфизм $N \simeq E$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть Γ — подгруппа в $\mathrm{Iso}(E)$, и $N(\Gamma) = N \cap \Gamma$ — множество всех сдвигов из подгруппы Γ. Тогда $N(\Gamma) \lhd \Gamma$, причем фактор-группа $\Gamma/N(\Gamma)$ изоморфна подгруппе $d(\Gamma)$ в группе $O(E)$, состоящей из всех $d\Phi$, где $\Phi \in \Gamma$, а подгруппа $N(\Gamma)$ изоморфна аддитивной подгруппе $A(\Gamma)$ в E, состоящей из всех векторов $\Phi(0) \in E$, где $\Phi \in N(\Gamma)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.8. Пусть Γ, $A(\Gamma)$ из предыдущего следствия. Если $\Phi \in \Gamma$ и $r \in A(\Gamma)$, то $(d\Phi)(r) \in A(\Gamma)$. Таким образом, все ортогональные преобразования $d\Phi \in d(\Gamma)$ переводят множество векторов $A(\Gamma)$ в себя.

Доказательство. Если $\Phi, \Psi \in \Gamma$, причем $d\Psi = \mathcal{E}$ (тождественный оператор), то $d(\Phi\Psi\Phi^{-1}) = \mathcal{E}$ по (2.8) и $\Psi(0) = r \in A(\Gamma)$. Поэтому в силу (2.8)

$$(\Phi\Psi\Phi^{-1})(0) = -\Phi(0) + (d\Phi)(\Psi(0)) + \Phi(0) = (d\Phi)(\Psi(0)).$$

Отсюда $(d\Phi)(\Psi(0)) = (d\Phi)(r) \in A(\Gamma)$.

Установим связь преобразований $\Phi \in E$ с преобразованиями симметрии геометрических фигур, рассмотренных в гл. 1.

Предположим, что задан правильный многогранник M в евклидовом пространстве E. Рассмотрим произвольное аффинное преобразование Φ пространства E, переводящее M в себя. Если A — произвольная вершина M, то $\Phi(A)$ снова является вершиной в M. Предположим, что $A_1, \ldots, A_m$ — все вершины M, соединенные с A ребром. Тогда $\Phi(A_1), \ldots, \Phi(A_m)$ — все вершины M, соединенные с $\Phi(A)$ ребром. Так как многогранник M правильный, то совпадают матрицы Грама

$$G(A_1 - A, \ldots, A_m - A) = G[\Phi(A_1) - \Phi(A), \ldots, \Phi(A_m) - \Phi(A)].$$

Так как размерность M равна размерности пространства E, то из теоремы 7.15 следует, что Φ является движением. Таким образом, при изучении групп симметрий правильных многогранников нужно на самом деле предполагать, что эта группа состоит из изометрий, т. е. движений евклидова пространства.

Введем теперь основное для данной главы понятие кристаллического множества.

О п р е д е л е н и е 2.8. Подмножество K евклидова пространства E называется *кристаллическим*, если группа его симметрий $\operatorname{Sym} K$ (см. стр. 17) обладает следующими свойствами:

1) для любой точки $A \in E$ существует такое число $d(A) > 0$, что если $\|\Phi(A) - A\| < d(A)$ для некоторого элемента $\Phi \in \operatorname{Sym} K$, то $\Phi(A) = A$;

2) для любых точек $A \in K$ и $B \in E$ найдется преобразование $\Psi \in \operatorname{Sym} K$, для которого $\|\Psi(A) - B\| < D$, где $D > 0$ — фиксированное конечное число

Первое условие задает *дискретность*, а второе условие — *однородность* кристаллического множества K с заданной на нем группой преобразований симметрии $\operatorname{Sym} K \in \operatorname{Iso}(E)$ [27] (рис. 2.6). Впоследствии Б. Н. Делоне показал, что существование группы $\operatorname{Sym} K$, перемещающей две произвольные точки $x, y \in K$ внутрь шара конечного радиуса D, можно вывести непосредственно из дискретности и однородности множества K, дополнительно постулировав изоморфизм локального окружения всех точек $x_i \in K$ в шаре конечного радиуса nD, где n — небольшое целое число [28]. Первое и второе условия в этом случае называют *условиями Делоне*.

Основными примерами кристаллических множеств являются кристаллические структуры веществ, а также решетки в пространстве E. Наша цель состоит в описании строения группы симметрий $\operatorname{Sym} K$ кристаллического множества K, что позволяет получить полную информацию о его строении.

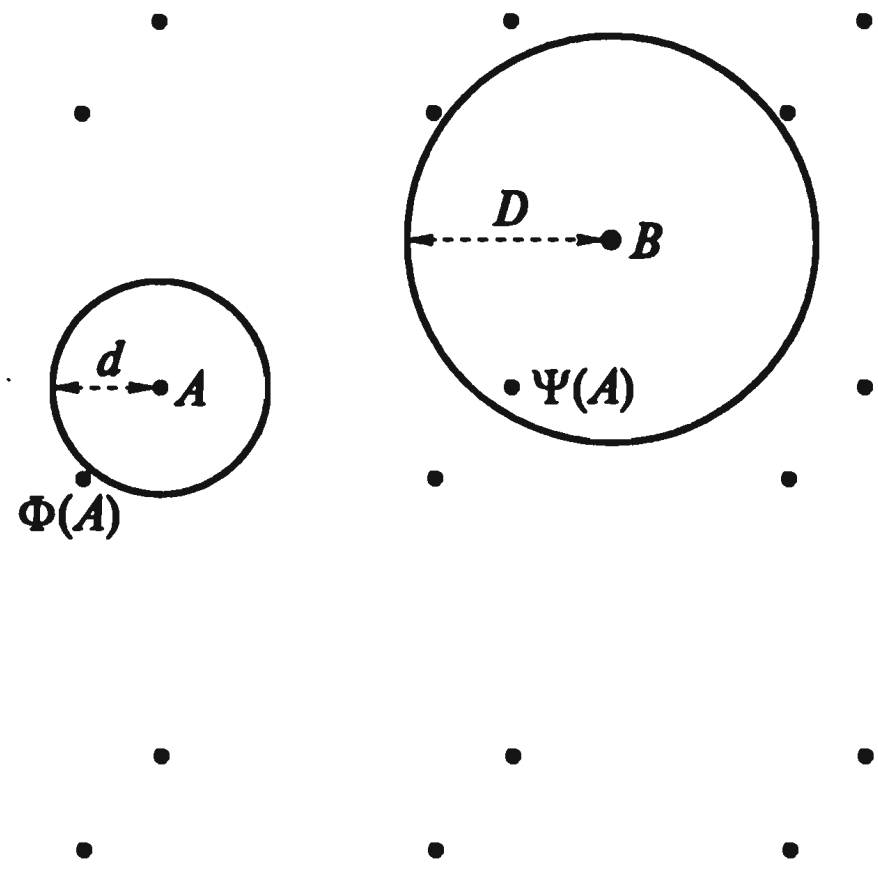


Рис. 2.6. «Шар дискретности» d и «шар однородности» D кристаллического множества K по Делоне

ТЕОРЕМА 2.13 (теорема Шенфлиса—Бибербаха). Пусть $\Gamma = \mathrm{Sym}\, K$ — группа симметрий кристаллического множества $K \subset E$ и $N = N(\Gamma)$ — все сдвиги из группы $\mathrm{Sym}\, K$. Тогда фактор-группа $\Delta = \mathrm{Sym}\, K/N = d(\mathrm{Sym}\, K)$ конечна, а аддитивная подгруппа евклидова пространства $A(\Gamma)$ (см. следствие из предложения 2.7) является решеткой в E [27, гл. 2; 18, гл. 3].

Доказательство этой теоремы приводится в гл. 6.

Используя теорему 2.13, дадим следующее определение.

Определение 2.9. Подгруппа Γ в группе движений $\mathrm{Iso}(E)$ евклидова пространства E называется *кристаллографической* или *пространственной* группой, если выполняются следующие условия:

1) ее аддитивная подгруппа $A(\Gamma) \subset \Gamma$ является решеткой в E;

2) $d(\Gamma)$ является конечной подгруппой в $\mathbb{O}(E)$.

Конечная группа $d(\Gamma) \in \Gamma$ является *точечной* группой, введенной в гл. 1. Кристаллографическая группа Γ *симморфная*, если Γ является полупрямым произведением $\Gamma = N(\Gamma) \lambda\, d(\Gamma)$.

Таким образом, по теореме Шенфлиса—Бибербаха группа симметрий $\mathrm{Sym}\, K$ любого кристаллического множества $K \subset E$ является кристаллографической. Группа симметрий бесконечного кристаллического множества в трехмерном пространстве называется *пространственной* группой.

СЛЕДСТВИЕ. Для кристаллографической группы Γ найдется такая матрица $C \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$, что $C(d\Gamma)C^{-1} \subset \subset \mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$. В частности, если $A \in d(\Gamma)$, то $\mathrm{tr}\, A \in \mathbb{Z}$.

Действительно, выберем в решетке $A(\Gamma)$ базис, являющийся базисом E в силу теоремы 2.6. В этом базисе по предложению 2.8

матрица каждого оператора из $d(\Gamma)$ задается целочисленной матрицей, поскольку решетка $A(\Gamma)$ под действием этих операторов переходит в себя.

Рассмотрим теперь обратную задачу. Пусть задана кристаллографическая группа Г. Подгруппа $A(\Gamma)$ в E является решеткой и потому кристаллическим множеством. Группа Г является подгруппой в группе симметрий решетки $A(\Gamma)$. При этом конечная (точечная) группа $d(\Gamma)$ ортогональных операторов в E по предложению 2.8 переводит решетку $A(\Gamma)$ в себя.

Конечную подгруппу G в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$ называют *точечной группой Браве*, если G совпадает с группой всех ортогональных преобразований n-мерного евклидова пространства E, переводящих некоторую решетку в себя. Можно показать, что каждая конечная подгруппа в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$ содержится в некоторой минимальной точечной группе Браве. Заметим, что в кристаллографии группой Браве называют пространственную группу решетки Браве, а точечную группу этой решетки называют *голоэдрической*.

Определение 2.10. *Сингонией* называют множество всех конечных подгрупп в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$, имеющих одну и ту же минимальную группу Браве.

В заключение этого раздела приведем без доказательства следующую теорему.

ТЕОРЕМА 2.14 (теорема Жордана). Существует такая функция $\tau(n)$, что для любой конечной подгруппы G в $\mathrm{SL}(n,\mathbb{Z})$ порядок G не превосходит $\tau(n)$.

Отметим, что в [18, с. 190] приведены число максимальных конечных подгрупп в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$, число групп Браве и число кристаллографических групп для $n = 2, 3, 4$.

2.4. ДВУМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

В подразд. 2.3 было показано, что для описания строения кристаллографической группы Г необходимо знать строение конечной подгруппы Δ в группе ортогональных преобразований пространства. Поэтому в ближайших разделах мы дадим описание конечных подгрупп в группе ортогональных преобразований и из них выберем соответствующие кристаллографическим группам, т. е. являющиеся точечными группами симметрии решеток.

Проанализируем двумерный случай и рассмотрим сначала строение конечных подгрупп Δ в группе $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$.

ТЕОРЕМА 2.15. Любая конечная подгруппа Δ в $SO(2,\mathbb{R})$ является циклической группой.

Доказательство. Группа $SO(2,\mathbb{R})$ состоит из всех вращений двумерного евклидова пространства. В любом ортонормированном базисе этого пространства матрица оператора вращения на угол α имеет вид

$$g = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

Произведение матриц вида (2.10) сводится к сложению углов α. Поэтому группа $SO(2,\mathbb{R})$ абелева. Если Δ — конечная подгруппа в $SO(2,\mathbb{R})$, то возьмем в Δ матрицу g из (2.10) с наименьшим углом $0 < \alpha < 2\pi$. Легко проверяется, что Δ — циклическая группа, порождаемая указанным элементом g.

Можно привести и более полное доказательство этой теоремы. Для этого рассмотрим отображение $\Upsilon : \mathbb{R} \to SO(2,\mathbb{R})$, при котором

$$\Upsilon(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}.$$

Легко проверить, что Υ является сюръективным гомоморфизмом групп, и $\ker\Upsilon$ совпадает с подгруппой $2\pi\mathbb{Z}$, состоящей из всех вещественных чисел вида $2\pi m$, где $m \in \mathbb{Z}$. По теореме о гомоморфизмах 1.11 существует изоморфизм групп

$$SO(2,\mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}.$$

ТЕОРЕМА 2.16. Конечная подгруппа Δ в $SO(2,\mathbb{R})$, соответствующая кристаллографической группе Γ, является циклической группой порядка 1, 2, 3, 4, 6.

Доказательство. Если имеется конечная подгруппа Δ в $SO(2,\mathbb{R})$, то ее полный прообраз $\Upsilon^{-1}(\Delta)$ является дискретной подгруппой в аддитивной группе $\mathbb{R}$. Согласно теоремам 2.5 и 2.6, $\Upsilon^{-1}(\Delta)$ является циклической группой, порождаемой элементом α. Тогда Δ порождается соответствующей матрицей g из (2.10).

Выберем, следуя теореме 2.15, группы, соответствующие кристаллографическим группам Γ. Если $g \in \Delta$ имеет вид (2.10), то $\operatorname{tr} g = 2\cos\alpha \in \mathbb{Z}$ по следствию из определения 2.9. Таким образом, $2\cos\alpha = 0, \pm1, \pm2$, откуда $\alpha = 0, \pm\frac{\pi}{3}, \pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{2\pi}{3}, \pi$.

ТЕОРЕМА 2.17. Пусть Δ — конечная подгруппа в $\mathbb{O}(2,\mathbb{R})$. Тогда Δ является подгруппой в одной из следующих групп:

1) циклическая группа вращений порядка n;

2) группа диэдра $\mathbf{D}_n$.

Если группа Δ является фактор-группой $\Gamma/A(\Gamma)$ кристаллографической группы Γ, то в обоих случаях $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

Доказательство. Пусть Δ — конечная подгруппа в $\mathbb{O}(2,\mathbb{R})$, не лежащая в $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$. Тогда Δ содержит зеркальное отражение b относительно некоторой оси, причем $b^2 = \mathbf{1}$. Если $x \in \Delta \setminus \mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$, то $bx \in \mathrm{SO}(2,\mathbb{R}) \cap \Delta$, причем bx — снова зеркальное отражение относительно некоторой оси, т. е. $(bx)^2 = \mathbf{1}$. Напомним, что символом $\mathbf{1}$ мы обозначили групповую единицу (см. гл. 1).

Рассмотрим группу $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})\cap\Delta$. По теореме 2.15 конечная группа $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})\cap\Delta$ является циклической: $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})\cap\Delta = \langle a\rangle_n$. При этом группа $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R}) \cap \Delta$ является подгруппой индекса 2 в Δ. Отсюда

$$\Delta = \{\mathbf{1}, a, \ldots, a^{n-1}, b, ba, \ldots, ba^{n-1}\},$$

т. е. $\Delta = \mathbf{D}_n$ — группа диэдра.

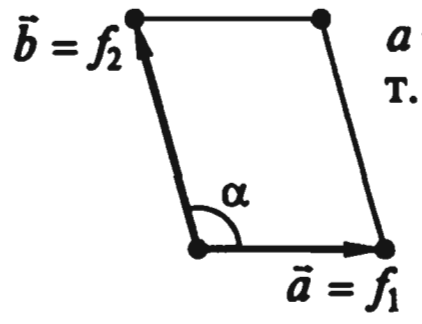
Здесь под $\mathbf{D}_1$ мы понимаем циклическую группу $\langle b\rangle$ порядка 2, порожденную отражением b относительно одной оси. Под $\mathbf{D}_2 \simeq \mathbf{V}_4$ понимаем группу Клейна порядка 4, состоящую из отражений относительно двух осей, центральной симметрии и тождественного преобразования.

Рассмотрим теперь строение кристаллографических групп Γ. По предложению 2.8 группа $\Delta = d(\Gamma)$ действует как группа преобразований решетки $A(\Gamma)$, называемой *решеткой Браве*.

ТЕОРЕМА 2.18. Для решетки Браве $A(\Gamma)$ с базисом f_1, f_2 возможны пять вариантов (рис. 2.7).

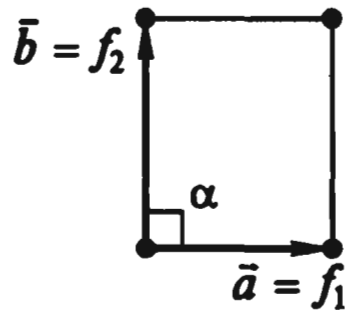
• Длины f_1, f_2 разные, f_1, f_2 не перпендикулярны. В этом случае f_1, f_2 порождают параллелограмм. Тогда Δ — подгруппа циклической группы порядка 2 (группы Браве), порождаемой центральной симметрией (поворотом на угол π). Это *примитивная*, т. е. нецентрированная решетка *косоугольной* сингонии (рис. 2.7, *а*).

• Длины f_1, f_2 разные, и f_1, f_2 перпендикулярны. В этом случае f_1, f_2 порождают прямоугольник. Тогда Δ — подгруппа группы диэдра $\mathbf{D}_2$ порядка 4 (группы Браве), порождаемой зеркальным отражением относительно прямой, проходящей через f_1, и поворотом на π: примитивная решетка *ортогональной* сингонии (рис. 2.7, *б*).



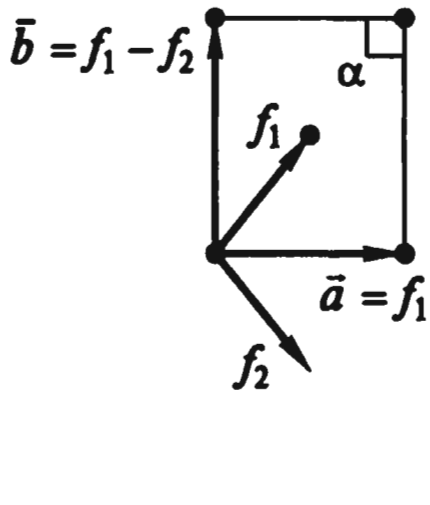
$a \neq b$, $\alpha \neq \pi/2$,
т. е. $(f_1, f_2) < ab$

а



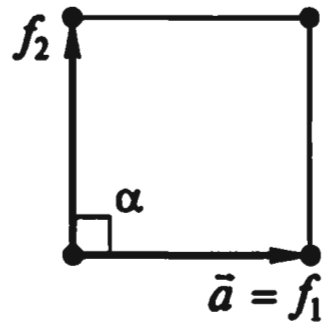
$a \neq b$, $\alpha = \pi/2$,
т. е. $(f_1, f_2) = ab$

б



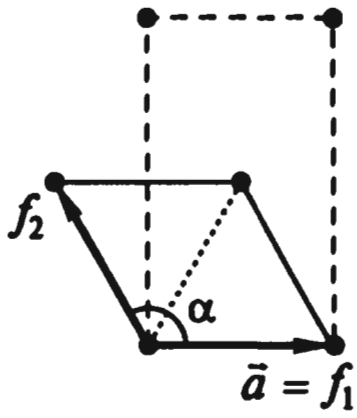
$|f_1| = |f_2|$,
$\alpha = \pi/2$, т. е.
$(f_1 - f_2, f_1 + f_2) = ab$

в



$|f_1| = |f_2| = a$, $\alpha = \pi/2$,
т. е. $(f_1, f_2) = a^2$

г



д

Рис. 2.7. Решетки Браве на плоскости и их базисные векторы:
а — косоугольная *p*; *б* — ортогональная *p*; *в* — ортогональная *c*; *г* — квадратная *p*; *д* — гексагональная *p*

• Длины f_1, f_2 одинаковы, и f_1, f_2 не перпендикулярны. Кроме того, длина $f_1 - f_2$ отлична от длины f_2. В этом случае f_1, f_2 порождают ромб. Тогда Δ является подгруппой группы диэдра $\mathbf{D}_2$ (группы Браве), порождаемой двумя зеркальными отражениями относительно прямых, параллельных диагоналям ромба. Выбирая по теореме о согласованном базисе (теорема 2.3) новые базисные векторы $\vec{a} = f_1 + f_2$ и $\vec{b} = f_1 - f_2$, получим *центрированную ортогональную* решетку (рис. 2.7, *в*).

• Длины f_1, f_2 одинаковы, f_1, f_2 перпендикулярны. В этом случае f_1, f_2 порождают квадрат. Тогда Δ — подгруппа группы диэдра $\mathbf{D}_4$ (группы Браве), а решетка называется *примитивной квадратной* (рис. 2.7, *г*).

• Длины f_1, f_2 одинаковы, f_1, f_2 не перпендикулярны. Кроме того, длина $f_1 - f_2$ равна длине f_2. В этом случае f_1, f_2 порождают ромб. Тогда Δ — подгруппа группы диэдра $\mathbf{D}_6$ (группы Браве), порождаемой двумя зеркальными отражениями относительно прямых, параллельных диагоналям ромба, и поворотом на угол $\pi/3$ (*примитивная гексагональная* решетка) (рис. 2.7, *д*).

2.5. ТРЕХМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

В трехмерном случае, как и выше, рассмотрим строение конечных подгрупп в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, затем в $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$ и, наконец, возможные решетки и их точечные группы симметрий.

Пусть S — трехмерная сфера единичного радиуса в трехмерном пространстве с центром в точке нуль. Предположим, что Δ — конечная подгруппа в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Тогда каждый неединичный элемент из Δ является вращением относительно некоторой оси в перпендикулярной ей плоскости на угол из следствия 1 подразд. 7.7.2. Пересечение этой оси с S состоит из двух точек. Обозначим X множество всех таких точек на S для всех неединичных элементов из Δ.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.9. Пусть $x \in X$ и $g \in \Delta$. Тогда $g(x) \in X$.

Доказательство. Пусть l — неподвижная ось для $h \in \Delta \setminus 1$, и $x \in l \cap S$. Тогда $ghg^{-1}(g(l)) = gh(l) = g(l)$, т. е. $g(l)$ — неподвижная ось для $ghg^{-1} \in \Delta \setminus \mathbf{1}$, причем $g(x) \in g(l) \cap S$.

Определение 2.11. Пусть задана точка $a \in S$. Множество X_i всех точек $g(a) \in S$, получаемых из одной точки a применением всех элементов $g \in \Delta$, называют *орбитой* группы Δ. Число точек m_i этого множества называется *порядком* орбиты. Очевидно, что X разбивается на непересекающиеся орбиты $X = X_1 \cup \ldots \cup X_k$, где k — число различных орбит группы Δ.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.10. Пусть $x \in X_i$ и Δ_x — *локальная группа*, или стабилизатор точки x, т. е. множество всех таких $g \in \Delta$, что $gx = x$. Локальные группы Δ_i всех точек в i-й орбите изоморфны. Орбита X_i отвечает разбиению Δ на m_i левых смежных классов $\Delta_i \cup g_2\Delta_i \cup \ldots \cup g_{m_i}\Delta_i$, поэтому

$$|\Delta| = m_i|\Delta_i|.$$

Сопоставим каждой точке $x \in X_i$ неединичный элемент ее локальной группы $h \in \Delta_i \setminus \mathbf{1}$, оставляющий x на месте. Общее число разных пар (x, h) в орбите X_i равно $m_i(|\Delta_i| - 1)$. Поскольку каждому неединичному элементу $g \in \Delta \setminus \mathbf{1}$ соответствуют две неподвижные точки на S, число разных пар (x, g) во всем множестве X:

$$2(|\Delta| - 1) = m_1(|\Delta_1| - 1) + \ldots + m_k(|\Delta_k| - 1).$$

Разделим на $|\Delta|$, в результате получим

$$2 - \frac{2}{|\Delta|} = (1 - \frac{1}{|\Delta_1|}) + \cdots + (1 - \frac{1}{|\Delta_k|}). \qquad (2.11)$$

Так как $|\Delta_i| \geqslant 2$ для всех i, то $1-\frac{1}{|\Delta_i|} \geqslant \frac{1}{2}$. Поэтому из (2.11) получаем $2(1-\frac{1}{|\Delta|}) \geqslant \frac{k}{2}$, т. е. $k \leqslant 4-\frac{4}{|\Delta|} < 4$. Случай $k=1$ невозможен, поскольку

$$2(1-\frac{1}{|\Delta|}) > 1 > 1-\frac{1}{|\Delta_1|}.$$

Следовательно, $k = 2, 3$.

Пусть $k = 2$ и

$$2(1-\frac{1}{|\Delta|}) = 2-\frac{1}{|\Delta_1|}-\frac{1}{|\Delta_2|}$$

или

$$\frac{2}{|\Delta|} = \frac{1}{|\Delta_1|}+\frac{1}{|\Delta_2|}$$

При этом $|\Delta_1|, |\Delta_2| \leqslant |\Delta|$. Отсюда $|\Delta_1| = |\Delta_2| = |\Delta|$. Значит, X состоит всего из двух эквивалентных точек, соответствующих одной оси, и Δ — циклическая группа вращений вокруг этой оси.

Пусть $k = 3$. Тогда, согласно (2.11)

$$1+\frac{2}{|\Delta|} = \frac{1}{|\Delta_1|}+\frac{1}{|\Delta_2|}+\frac{1}{|\Delta_3|}. \tag{2.12}$$

Не уменьшая общности, можно считать, что $2 \leqslant |\Delta_1| \leqslant |\Delta_2| \leqslant |\Delta_3|$. Если $|\Delta_1| \geqslant 3$, то в равенстве (2.12) правая часть не больше 1, а левая больше. Следовательно, $|\Delta_1| = 2$ и

$$\frac{1}{2}+\frac{2}{|\Delta|} = \frac{1}{|\Delta_2|}+\frac{1}{|\Delta_3|}.$$

Непосредственный перебор показывает, что возможны лишь следующие случаи:

1) $|\Delta_2| = 2$, $|\Delta_3| = |\Delta|/2$;
2) $|\Delta_2| = 3$, $|\Delta_3| = 3$, $|\Delta| = 12$;
3) $|\Delta_2| = 3$, $|\Delta_3| = 4$, $|\Delta| = 24$;
4) $|\Delta_2| = 3$, $|\Delta_3| = 5$, $|\Delta| = 60$.

Отсюда вытекает первое утверждение следующей теоремы.

ТЕОРЕМА 2.19. Пусть Δ — конечная подгруппа в $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Тогда Δ — одна из следующих групп:

1) циклическая группа порядка n;
2) группа диэдра $\mathbf{D}_n$;
3) группа вращений тетраэдра $T \simeq \mathbf{A}_4$;

4) группа вращений октаэдра $O \simeq \mathbf{S}_4$;
5) группа вращений икосаэдра $I \simeq \mathbf{A}_5$.

Группы T и O, состоящие из преобразований симметрии куба, очевидно, являются кристаллографическими. Группа I, содержащая вращения на $2\pi k/5$ ($k \in \mathbb{Z}$), некристаллографическая. Группы $\langle a \rangle_n$ и $\mathbf{D}_n$ соответствуют кристаллографической группе Г тогда и только тогда, когда $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

Доказательство. Необходимо проверить последнее утверждение. Пользуясь следствием из теоремы 2.13, выберем из групп Δ только те, которые соответствуют кристаллографической группе Г. Для этого нам потребуется лемма.

ЛЕММА 2.2. Пусть $g \in \mathbb{O}(3, \mathbb{R})$, причем $hgh^{-1} \in \mathrm{GL}(3, \mathbb{Z})$. Тогда существует такая матрица $u \in \mathrm{SO}(3, R)$, что

$$ugu^{-1} = \begin{pmatrix} \det g & 0 & \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \qquad (2.13)$$

где $\alpha = 0, \pm\pi/3, \pm\pi/2, \pm 2\pi/3, \pi$.

Доказательство. Из курса алгебры известно, что матрица ортогонального оператора в некотором ортонормированном базисе имеет вид (2.13). Поэтому

$$\det g + 2\cos\alpha = \mathrm{tr}(ugu^{-1}) = \mathrm{tr}\, g = \mathrm{tr}(hgh^{-1}) \in \mathbb{Z}.$$

Так как $\det g = \pm 1$, то $2\cos\alpha \in \mathbb{Z}$. Отсюда вытекает требуемое утверждение.

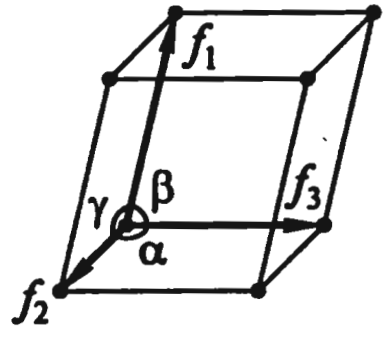
Для завершения рассмотрения опишем конечные группы ортогональных преобразований трехмерного пространства, состоящие не только из вращения. В соответствии с кристаллографической символикой обозначим в этом разделе $\bar{1}$ центральную симметрию в трехмерном пространстве, т. е. $\bar{1}x = -x$ для всех векторов x.

Упражнение 2.5. Доказать, что $\bar{1}^2 = 1$ и $\bar{1} \in \mathbb{O}(3, \mathbb{R}) \setminus \mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Более того, $\mathbb{O}(3, \mathbb{R}) = \mathrm{SO}(3, \mathbb{R}) \times \langle \bar{1} \rangle_2$.

Предположим, что Δ — конечная подгруппа в $\mathbb{O}(3, \mathbb{R})$, не лежащая в $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Тогда $A = \Delta \cap \mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ является подгруппой индекса 2 в Δ.

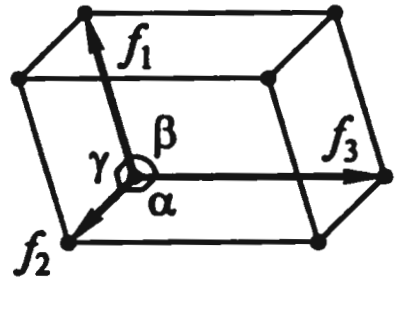
ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.11. Если $\bar{1} \in \Delta$, то $\Delta = A \times \langle \bar{1} \rangle_2$.

Предположим, что $\bar{1} \notin \Delta$ и $\Delta \setminus A = \bar{1}M$, где M — подмножество в $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$.



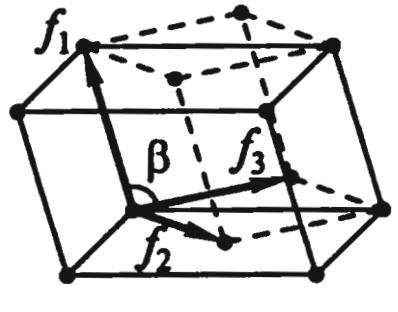
$\vec{a} = f_1,$
$\vec{b} = f_2,$
$\vec{c} = f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$

I



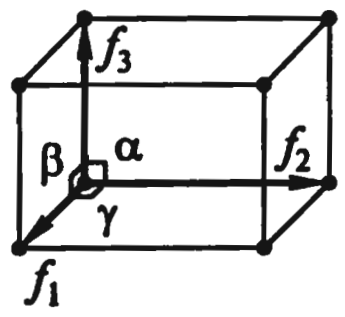
$\vec{a} = f_1,$
$\vec{b} = f_2,$
$\vec{c} = f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha = \gamma = \pi/2, \beta \neq \pi/2$

II*а*



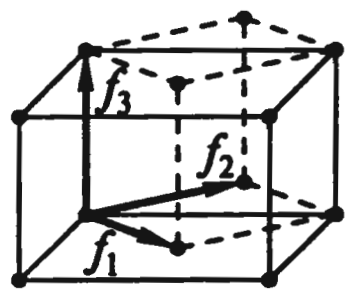
$\vec{a} = f_1,$
$\vec{b} = f_2 - f_3,$
$\vec{c} = f_2 + f_3,$
$|f_2| = |f_3|,$
$\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$

II*б*



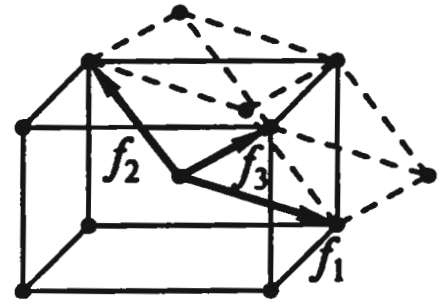
$\vec{a} = f_1,$
$\vec{b} = f_2,$
$\vec{c} = f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

III*а*



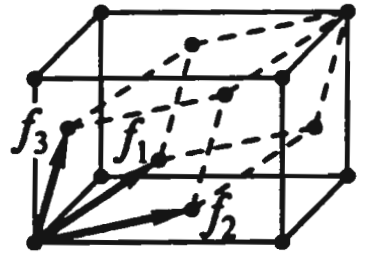
$\vec{a} = f_1 - f_2,$
$\vec{b} = f_1 + f_2,$
$\vec{c} = f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

III*б*



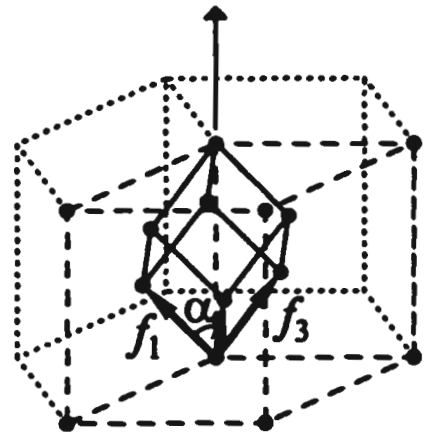
$\vec{a} = f_1 + f_2,$
$\vec{b} = f_1 + f_3,$
$\vec{c} = f_2 + f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

III*в*



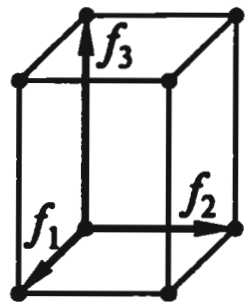
$\vec{a} = -f_1 + f_2 + f_3,$
$\vec{b} = f_1 + f_2 - f_3,$
$\vec{c} = f_1 - f_2 + f_3,$
$a \neq b \neq c,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

III*г*



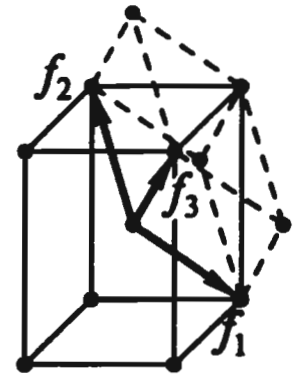
$\vec{a} = f_1,$
$|f_1| = |f_2| = |f_3|,$
$\alpha \neq \pi/2$

IV



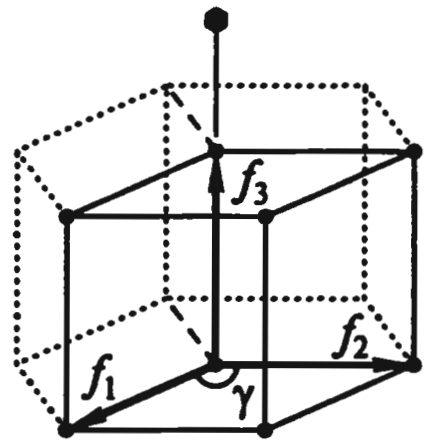
$\bar{a} = f_1,\ \bar{c} = f_3,$
$|f_1| = |f_2|,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

V*a*



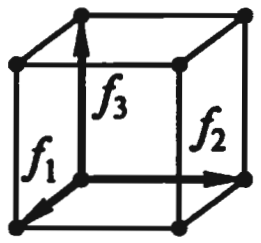
$\bar{a} = f_1 + f_2,$
$\bar{c} = f_2 + f_3,$
$|f_1 + f_2| = |f_1 + f_3|,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

V*б*



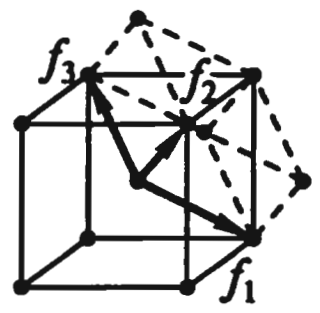
$\bar{a} = f_1,\ \bar{c} = f_3,$
$|f_1| = |f_2|,\ |f_1 + f_2| = |f_1 - f_2|,$
$\alpha = \beta = \pi/2,\ \gamma = 2\pi/3$

VI



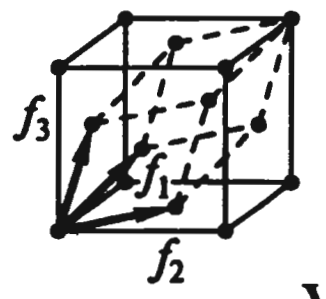
$\bar{a} = f_1,$
$|f_1| = |f_2| = |f_3|,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

VII*a*



$\bar{a} = |f_1 + f_2|,$
$|f_1| = |f_2| = |f_3|,$
$|f_1 + f_2| = |f_1 + f_3| = |f_2 + f_3|,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

VII*б*



$\bar{a} = -f_1 + f_2 + f_3,$
$|f_1| = |f_2| = |f_3|,$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

VII*в*

Рис. 2.8. Трехмерные решетки Браве:
I — триклинная P; II*a* — моноклинная P; II*б* — моноклинная A (базоцентрированная); III*a* — орторомбическая P (примитивная); III*б* — орторомбическая C; III*в* — орторомбическая I (объемноцентрированная); III*г* — орторомбическая F (гранецентрированная); IV — ромбоэдрическая P («гексагональная R»); V*a* — тетрагональная P; V*б* — тетрагональная I; VI — гексагональная P; VII*a* — кубическая P; VII*б* — кубическая I; VII*в* — кубическая F

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.12. $AM = MA = M$, $M^2 = A^2 = A$. В частности, $G = A \cup M$ является подгруппой в $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, причем A — подгруппа индекса 2 в G.

Группу $\Delta = A \cup \bar{1}M = A \cup \bar{1}(G \setminus A)$ из предложения 2.12 обозначим GA. Нетрудно видеть, что отображение $\Psi : G \to \Delta$, задаваемое по правилу

$$\Psi(g) = \begin{cases} g, & \text{если } g \in A; \\ \bar{1}g, & \text{если } g \in G \setminus A, \end{cases}$$

является изоморфизмом групп G и Δ.

В силу теоремы 2.19 и предложения 2.12 справедлива следующая теорема.

ТЕОРЕМА 2.20. Пусть Δ — конечная подгруппа в $\mathbb{O}(3, \mathbb{R})$, не лежащая в $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Тогда Δ — одна из следующих групп:

1) $\langle a \rangle_n \times \langle \bar{1} \rangle_2$ (C_{nh} при $n = 2k$, S_{2n} при $n = 2k+1$);
2) $\mathbf{D}_n \times \langle \bar{1} \rangle_2$ (D_{nh} при $n = 2k$, D_{nd} при $n = 2k+1$);
3) $T \times \langle \bar{1} \rangle_2$ (T_h);
4) $O \times \langle \bar{1} \rangle_2$ (O_h);
5) $I \times \langle \bar{1} \rangle_2$ (I_h);
6) $\langle a \rangle_{2n} \langle a^2 \rangle_n$ (C_{nh} при $n = 2k+1$, S_n при $n = 2k$);
7) $\mathbf{D}_n \langle a \rangle_n$ (C_{nv});
8) $\mathbf{D}_{2n} \mathbf{D}_n$ (D_{nh} при $n = 2k+1$, D_{nd} при $n = 2k$);
9) OT (T_d).

(В скобках приведены символы этих групп по Шенфлису.)

Среди перечисленных точечных групп кристаллографической симметрии соответствуют:

1) $\langle a \rangle_n \times \langle \bar{1} \rangle_2$ при $n = 1, 2, 3$;
2) $\mathbf{D}_n \times \langle \bar{1} \rangle_2$ при $n = 2, 3, 4, 6$;
3) $T \times \langle \bar{1} \rangle_2$;
4) $O \times \langle \bar{1} \rangle_2$;
5) $\langle a \rangle_{2n} \langle a^2 \rangle_n$ при $n = 1, 2, 3$;
6) $\mathbf{D}_n \langle a \rangle_n$ при $n = 2, 3, 4, 6$;
7) $\mathbf{D}_{2n} \mathbf{D}_n$ при $n = 2, 3$;
8) OT.

Сведем все результаты в таблицу. Для сокращения обозначений будем использовать символику Шенфлиса. Из теорем 2.19 и 2.20 вытекает еще одна теорема [95, с. 134].

ТЕОРЕМА 2.21. Имеются 32 кристаллографические группы, разбиваемые на семь сингоний (табл. 2.1) [95, с. 134].

Таблица 2.1

Сингонии и кристаллографические группы (обозначения Шенфлиса)

Сингония	Кристаллографические группы
Триклинная	C_1, C_i
Моноклинная	C_2, C_s, C_{2h}
Орторомбическая	D_2, C_{2v}, D_{2h}
Тригональная	C_3, D_3, C_{3v}, S_6, D_{3d}
Тетрагональная	C_4, S_4, D_4, C_{4v}, D_{2d}, C_{4h}, D_{4h}
Гексагональная	C_6, C_{3h}, D_6, C_{6v}, D_{3h}, C_{6h}, D_{6h}
Кубическая	T, O, T_d, T_h, O_h

Заметим, что из-за указанной выше неоднозначности в обозначениях групп, содержащих несобственные вращения, индексы в шенфлисовских символах некоторых из них расходятся с порядком главной поворотной оси в сингонии (например, группа D_{2d} с осью S_4 относится к тетрагональной сингонии, а группы C_{3h} и D_{3h}, содержащие ось S_6, — к гексагональной). Кристаллографические символы Германа — Могена, рассмотренные в подразд. 2.7, всегда согласуются с обозначениями сингоний.

Возможные трехмерные решетки Браве, возникающие на репере f_1, f_2, f_3, показаны на рис. 2.8 и обсуждаются в подразд. 2.6.

2.6. РЕШЕТКИ БРАВЕ И ИХ ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЯЧЕЙКИ

Сингонии и решетки Браве повсеместно используют в кристаллографии, физике твердого тела и ряде родственных дисциплин. Пять плоских решеток Браве — это примитивные решетки четырех двумерных сингоний, а также центрированная решетка ортогональной сингонии (см. рис. 2.7). Элементарная ячейка плоской решетки Браве — параллелограмм, задаваемый двумя векторами трансляций $\vec{a}, \vec{b}$ и углом α между ними*.

Единственной нетривиальной «точечной» операцией симметрии косоугольной решетки является инверсия координат $(x/a, y/b)$ в любом узле, а также, ввиду сочетания трансляций с инверсией, в серединах сторон и в центре элементарной ячейки.

*Далее в этой главе векторы решетки будем обозначать символами со стрелкой, как это принято в физической кристаллографии.

Инверсию двумерных координат (x, y) обычно изображают как действие поворотной оси 2-го порядка, перпендикулярной плоскости решетки. В остальных плоских решетках Браве есть операции отражения относительно линий, лежащих в плоскости, а в квадратной и гексагональной решетках имеются соответственно поворотные оси 4-го и 6-го порядков. Отметим, что плоской решетки с тригональной симметрией (C_{3v}) нет ввиду обязательной C_2-симметрии узлов, но тригональные плоские кристаллографические группы присутствуют в гексагональной решетке в качестве подгрупп.

Элементарной ячейкой бесконечной трехмерной решетки является параллелепипед, задаваемый тремя трансляциями a, b, c и углами α, β, γ между их векторами. В каждом узле решетки, а также в центре ее объема, в центрах граней и на серединах ребер находятся центры симметрии. Добавление к тройке базисных векторов семи сингоний, выбранных в виде

$$\vec{e}_1 = (2,0,0), \quad \vec{e}_2 = (0,2,0), \quad \vec{e}_3 = (0,0,2),$$

центрирующих трансляций

$$\vec{u}_1 = (0,1,1), \quad \vec{u}_2 = (1,0,1), \quad \vec{u}_3 = (1,1,0), \quad \vec{w} = (1,1,1),$$

дает 14 *трехмерных решеток Браве*. Они включают по одной примитивной решетке в каждой сингонии и центрированные решетки трех типов, в которых все базисные векторы имеют целочисленные координаты: (e_i, e_j, u_j) — *базоцентрированная* A, B или C; (u_1, u_2, u_3) — *гранецентрированная* F; (e_i, e_j, w), (u_i, u_j, w) — *объемноцентрированная* I (индексы (i, j, k) равны $1, 2, 3$). В частности, можно непосредственно убедиться, что $\vec{u}_3 = \vec{e}_1 + \vec{u}_1 - \vec{u}_2$, т. е. две непараллельные центрированные грани ячейки, порождают центрирование третьей грани.

Все 14 трехмерных решеток Браве изображены на рис. 2.8. Другие типы центрирования в семи трехмерных сингониях не порождают новых решеток. Так, центрирование косоугольного основания в моноклинной, тригональной и гексагональной ячейках не дает новых решеток, поскольку все центрированные двумерные сетки в трехмерных решетках могут быть только ортогональными (см. подразд. 2.4). Центрирование любых боковых граней или объема ячейки в тригональной либо гексагональной сингонии, размноженное операциями симметрии, дает примитивную ячейку с половинными параметрами; базоцентрированная кубическая ячейка превращается операциями симметрии в гранецентрированную, гранецентрированная тетрагональная — в тетрагональную объемноцентрированную с параметром $a' = a/\sqrt{2}$ и т. д.

В отличие от двумерного случая в трехмерном пространстве у тригональной сингонии есть собственная примитивная ромбоэдрическая решетка Браве, не совпадающая с примитивной гексагональной решеткой (содержащая несобственные вращения S_6 вместо собственных вращений C_6). Однако из-за одинаковой метрики эти две решетки с разными группами Браве иногда объединяют в гексагональную сингонию, преобразуя примитивную тригональную ячейку в гексагональную дважды центрированную ячейку втрое большего объема (*гексагональную* R) (см. рис. 2.8, IV).

У п р а ж н е н и е 2.6. Показать, что в тетрагональной сингонии базо- и гранецентрированная ячейки преобразуются к другим ячейкам.

Локальную симметрию решетки удобно представлять *областью Дирихле*: множеством точек пространства, находящихся ближе к данному узлу решетки, чем ко всем остальным ее узлам. Область Дирихле плоской решетки ограничена перпендикулярами к серединам отрезков, проведенных от данного узла решетки к ее соседним узлам. В косоугольной решетке это центросимметричный шестиугольник (рис. 2.9). Непрерывными деформациями решетки, сохраняющими ее трансляции, эту область Дирихле симметрии C_{2h} можно преобразовать в две разные фигуры более высокой симметрии D_{2h}. Стягивание в точки двух противоположных ребер исходного шестиугольника дает прямоугольник (примитивная прямоугольная решетка), а выравнивание двух пар смежных ребер — шестиугольник с двумя взаимно перпендикулярными плоскостями симметрии (центрированная прямоугольная решетка с дополнительным узлом $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$). Дальнейшими деформациями прямоугольную область Дирихле переводят в квадратную (квадратная решетка), а шестиугольную — в правильный шестиугольник (гексагональная решетка) (рис. 2.10).

В трехмерном случае область Дирихле ограничивают перпендикулярные плоскости, проведенные через середины отрезков, соединяющих узел решетки с соседними узлами. Области Дирихле трехмерных решеток, называемые также

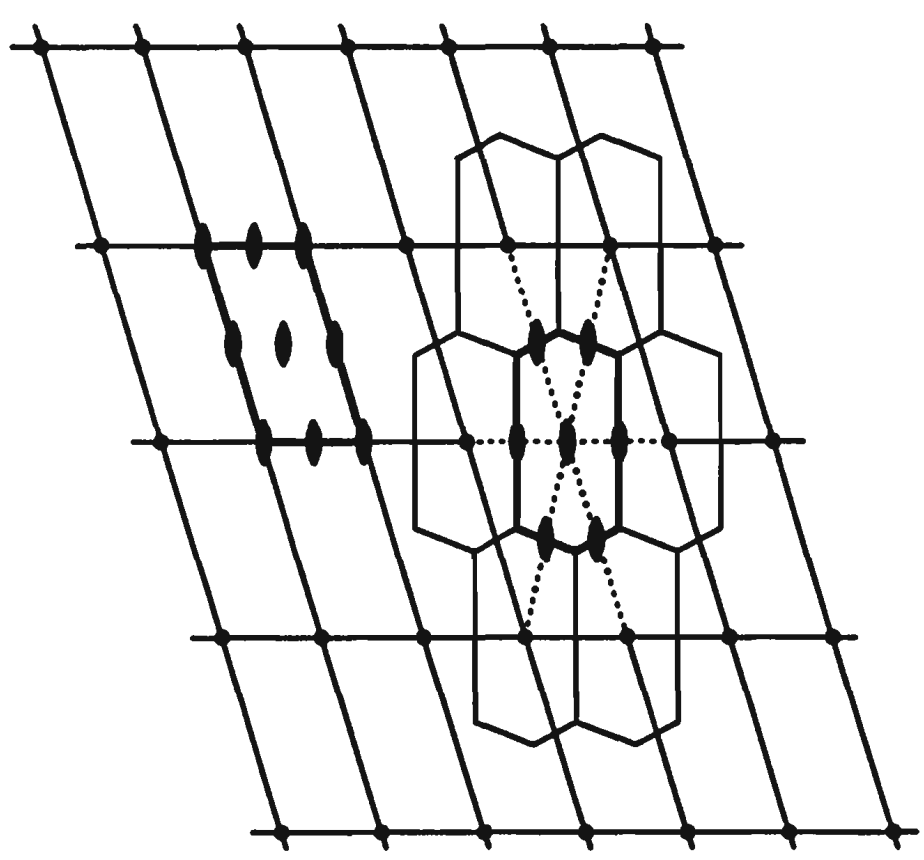


Рис. 2.9. Параллелограмм повторяемости и область Дирихле косоугольной решетки

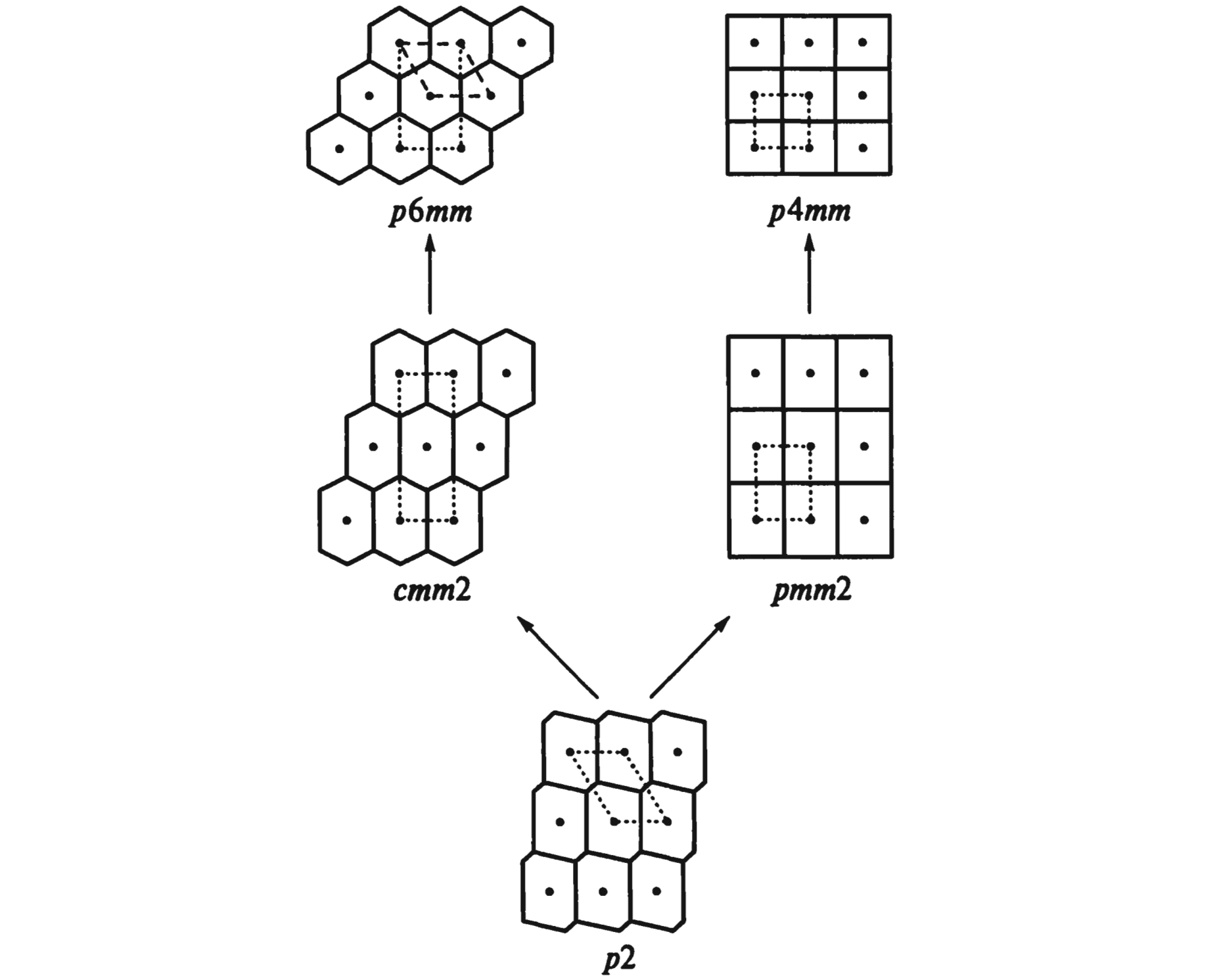


Рис. 2.10. Схема вывода пяти плоских решеток Браве деформациями примитивной косоугольной решетки

стереоэдрами (параллелоэдрами), *полиэдрами Вороного* или (в физике твердого тела) *ячейками Вигнера — Зейца*, по определению заполняют трехмерное пространство. Существует лишь пять метрически неэквивалентных параллелоэдров (*параллелоэдров Федорова*): это *федоровский кубооктаэдр*, или усеченный октаэдр (14-гранник с 8 шестиугольными и 6 четырехугольными

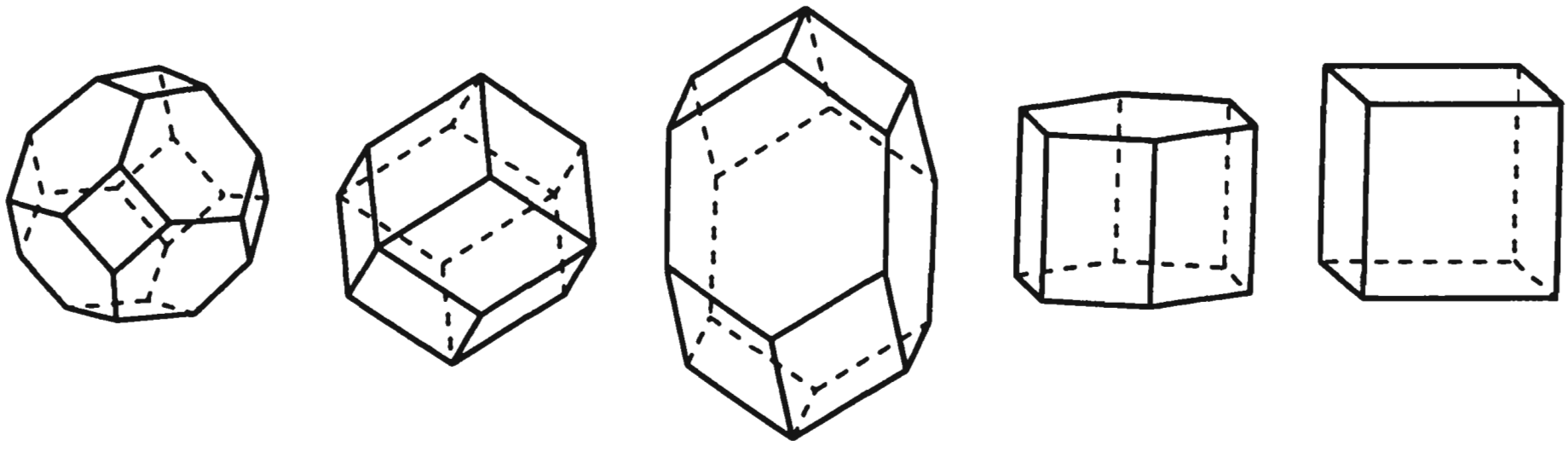


Рис. 2.11. Пять метрически неэквивалентных параллелоэдров Федорова

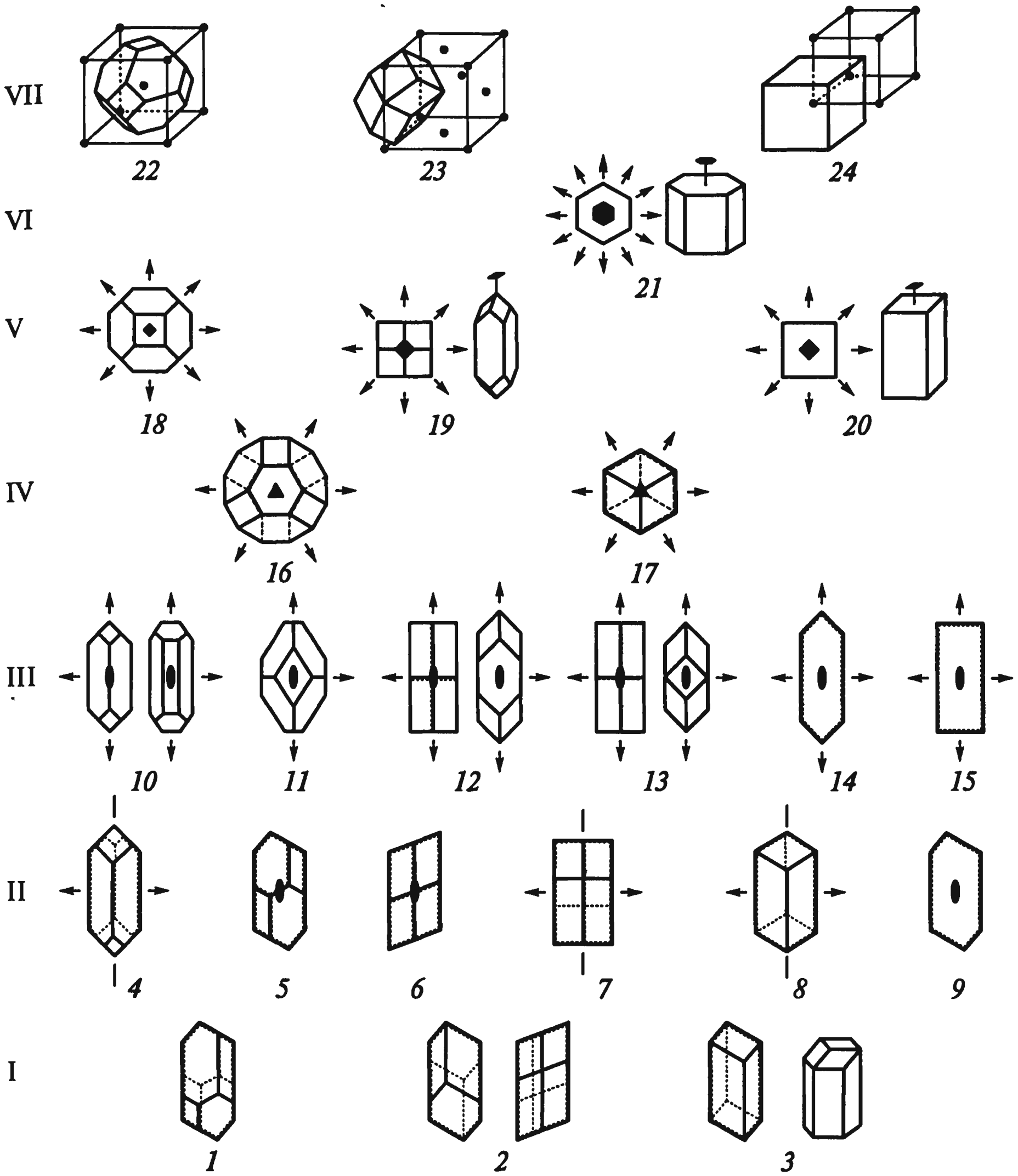


Рис. 2.12. Полиэдры Вороного, отвечающие трехмерным решеткам Бравe (24 сорта, по сингониям) в проекциях вдоль кристаллографических направлений (см. [11, 27]). Указаны центрировка решетки (P, C, I, F) и число граней (шестиугольных + четырехугольных).

I — триклинная сингония: *1* — $P(8+6)$, *2* — $P(4+8)$, две проекции, *3* — $P(0+12)$, проекция и вид; II — моноклинная сингония, проекции: *4* — $C(8+6)$, *5* — $C(8+6)$, *6* — $C(4+8)$, *7* — $C(4+8)$, *8* — $C(0+12)$, *9* — $P(2+6)$; III — орторомбическая сингония: *10* — $F(8+6)$, две проекции, *11* — $I(8+6)$, *12* — $I(4+8)$, две проекции, *13* — $I(0+12)$, две проекции, *14* — $C(2+6)$, *15* — $P(0+6)$; IV — тригональная сингония: *16* — $P(8+6)$, *17* — $P(0+6)$; V — тетрагональная сингония: *18* — $I(8+6)$, *19* — $I(4+8)$ (вытянутый ромбододекаэдр), проекция и вид, *20* — $P(0+6)$ (тетрагональная призма), проекция и вид; VI — гексагональная сингония (гексагональная призма), *21* — $P(2+6)$, проекция и вид; VII — кубическая сингония, вид и элементарная ячейка решетки: *22* — федоровский кубооктаэдр $I(8+6)$, *23* — ромбододекаэдр $F(0+12)$, *24* — куб $P(0+6)$

гранями)*, ромбододекаэдр (12 четырехугольных граней), вытянутый ромбододекаэдр (12-гранник с 8 четырехугольными и 4 шестиугольными гранями, получаемый растяжением ромбододекаэдра вдоль телесной диагонали), шестиугольная призма (восьмигранник с двумя шестиугольными и 6 четырехугольными гранями) и прямоугольный параллелепипед (6 четырехугольных граней) (рис. 2.11). Все эти полиэдры (в общем случае неравносторонние), как и все их грани, центросимметричны и переводятся один в другой непрерывными деформациями решетки. В семи сингониях реализуются 24 вида полиэдров Вороного, обладающих разной точечной симметрией (рис. 2.12).

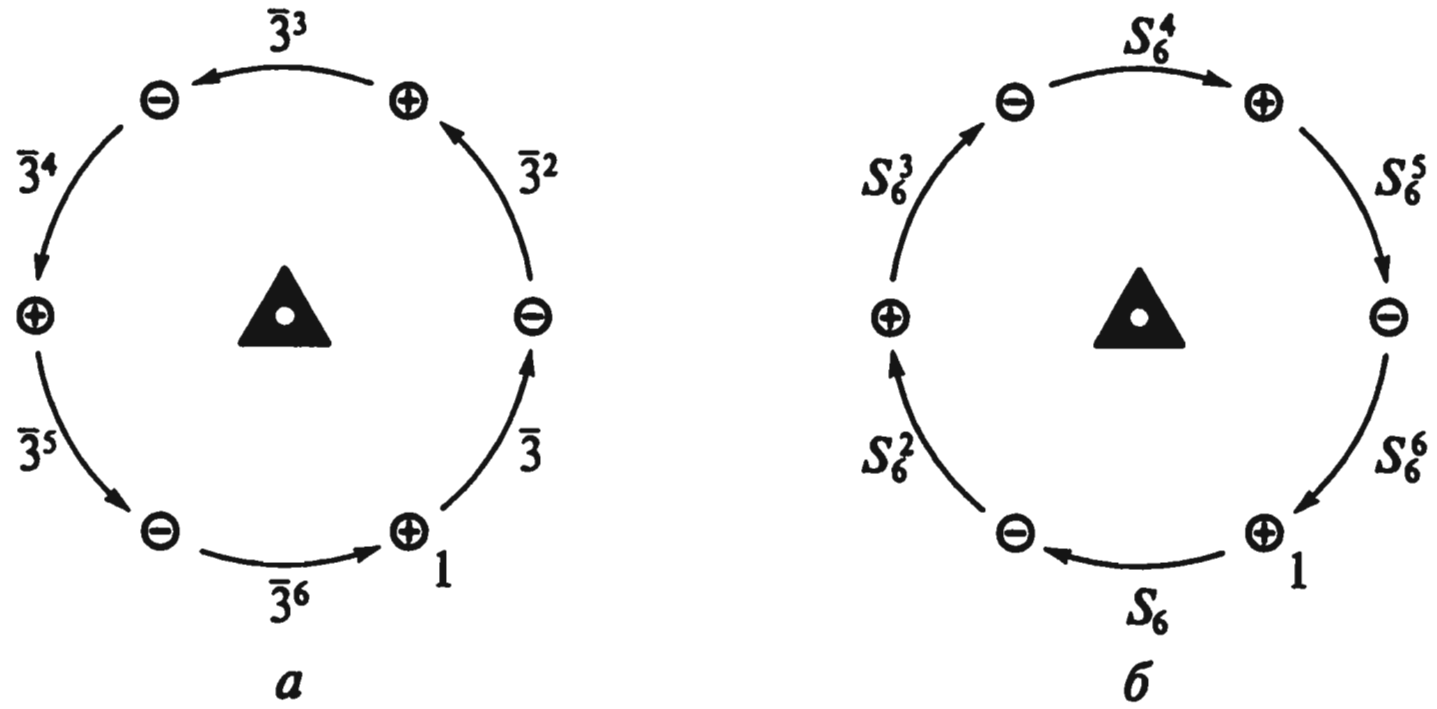
2.7. МЕЖДУНАРОДНАЯ СИСТЕМА ОБОЗНАЧЕНИЙ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

Для обозначения точечных и пространственных групп в кристаллографии используют в основном не систему Шенфлиса, а международную систему Германа — Могена, в которой символ группы составлен из порождающих ее элементов симметрии. Поворотную ось обозначают цифрой N (порядок оси), а k-кратный поворот, как и в системе Шенфлиса — показателем степени N^k ($3^1 = C_3^1$, $4^2 = C_4^2 = 2$ и т. д.). Единичный элемент группы по международной системе обозначают 1. Для несобственного вращения R с $\det(R) = -1$ в международной системе используют геометрический образ, отличающийся от зеркального поворота в системе Шенфлиса: *поворот с инверсией*. Инверсионная ось $\bar{N}$ отвечает тем же операциям симметрии, что и соответствующая ей зеркально-поворотная ось S_n, но выполняемым в другой последовательности (рис. 2.13): $\bar{3}^1 = S_6^{-1} = S_6^5$, $\bar{3}^2 = S_6^4$ и т. д.

Инверсионную ось обозначают цифрой (порядком оси) с чертой сверху, графически — сочетанием символов поворотных осей при четном порядке инверсионной оси ($\bar{4}$, $\bar{6}$) или оси с центром инверсии при нечетном порядке ($\bar{3}$, $\bar{5}$). Следует помнить, что компоненты поворотов с инверсией, как и зеркальных поворотов, по отдельности не обязаны быть элементами той же группы.

Инверсионная ось нечетного порядка k соответствует зеркально-поворотной оси порядка $2k$, и наоборот ($\bar{3} = S_6$, $\bar{6} = S_3$, $\bar{5} = S_{10}$ и т. д.). Инверсионные оси порядка $4k$ соответствуют зер-

*Истинный кубооктаэдр симметрии O_h, в котором грани куба пересекаются в серединах ребер октаэдра (а следовательно, вместо восьми шестиугольных граней имеется восемь треугольных), не заполняет трехмерного пространства. Далее в этой книге используется преимущественно федоровский кубооктаэдр, т. е. октаэдр со срезанными вершинами (см. рис. 2.12, *22*).



а *б*

Рис. 2.13. Преобразования точки 1 операциями:

а — инверсионной оси $\bar{3}$; *б* — зеркально-поворотной оси S_6

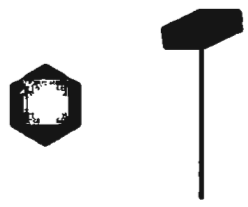
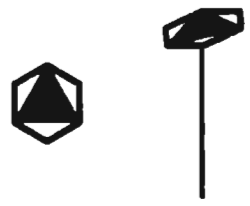
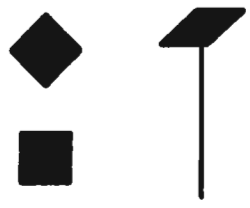
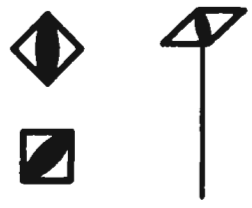
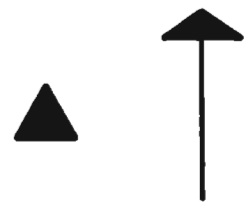
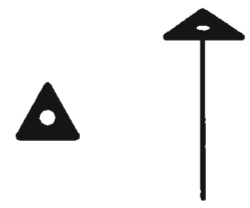
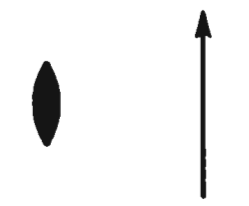
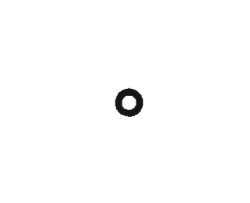
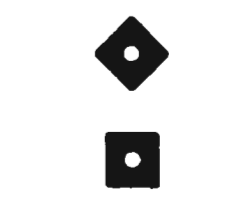
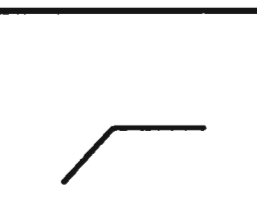
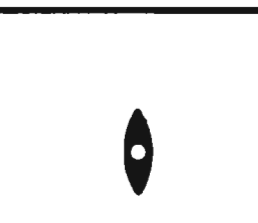
кально-поворотным осям того же порядка ($\bar{4}^1 = S_4^3$, $\bar{8}^1 = S_8^5$, $\bar{8}^2 = S_8^2 = C_4^1$ и т. д.). Центр инверсии по Герману — Могену обозначают $\bar{1}$, плоскость симметрии — отдельным символом m. Элементы симметрии 32 кристаллографических точечных групп приведены в табл. 2.2.

Символы групп низшей и средней категорий в международной системе начинаются с главного элемента: поворотной либо инверсионной оси наиболее высокого порядка. В группах низшей категории старшим элементом является плоскость $m = \bar{2}$. Группы, не содержащие других элементов симметрии, кроме главной оси или плоскости, обозначают единственным символом: $C_i = \bar{1}$, $C_s = m$, $C_2 = 2$, $C_5 = 5$, $S_6 = \bar{3}$ и т. д. При наличии других элементов симметрии их записывают вслед за символом главного элемента: $C_{2v} = mm2$, $D_{2h} = mmm$, $D_3 = 32$, $C_{3v} = 3m$ и т. д.

В обозначение точечной группы может входить не более четырех элементов симметрии, задающих групповые операции. Плоскость зеркального отражения, перпендикулярную главной оси, записывают вслед за ней символом $/m$ ($C_{4h} = 4/m$, $D_{6h} = 6/mmm$ и т. д.). Затем приводятся символы вертикальных плоскостей и (или) горизонтальных осей; одинаковые операции из двух различных классов указывают раздельно ($C_{3v} = 3m$, но $C_{4v} = 4mm$ и т. д.). Группы C_{nh} нечетного порядка $n = 2k+1$, содержащие вместе с поворотной осью n-го порядка горизонтальную плоскость m и инверсионную ось порядка $2n$ в качестве самостоятельных элементов симметрии, обозначают одиночным символом инверсионной оси: $C_{3h} = \bar{6}$, $C_{5h} = \overline{10}$ и т. д. При наличии в некоторых группах как вертикальных плоскостей m, так и осей 2, перпендикулярных главной оси, указывают оба символа: $D_{2d} = \bar{4}2m$, $D_{3h} = \bar{6}m2$ (но $D_{3d} = \bar{3}m$).

Для семи точечных групп высшей категории используются специальные обозначения:

Обозначения элементов симметрии 32 кристаллографических точечных групп

Символ (2 проекции)	Обозначение		Символ (2 проекции)	Обозначение	
	по Герману — Могену	по Шенфлису		по Герману — Могену	по Шенфлису
	6	C_6		$\bar{6}$ ($\equiv 3/m$)	S_3
	4	C_4		$\bar{4}$	S_4
	3	C_3		$\bar{3}$	S_6
	2	C_2		$\bar{1}$	i
	m	σ		$6/m$	
	m	σ		$4/m$	
	m	σ		$2/m$	

семейство тетраэдра: группы $T = 23$, $T_h = m\bar{3}$, $T_d = \bar{4}3m$;
семейство октаэдра: группы $O = 432$, $O_h = m\bar{3}m$;
семейство икосаэдра: группы $I = 532$, $I_h = m\bar{5}m$.

В кристаллографии и физике твердого тела точечные группы обычно обозначают по Герману — Могену, в химии и молекулярной спектроскопии — по Шенфлису. Пространственные группы в кристаллографии чаще всего обозначают по международной системе.

2.8. СТЕРЕОГРАФИЧЕСКАЯ ПРОЕКЦИЯ

Пространственное расположение групповых элементов симметрии изображают с помощью стереографической проекции. При ее построении *неподвижную точку* группы, остающуюся на месте при всех операциях симметрии, совмещают с центром (0, 0, 0) трехмерной сферы радиуса 1 и проекции элементов симметрии из центра сферы на ее верхнюю половину соединяют отрезками прямой с нижним полюсом (0, 0, –1). Точки пересечения отрезков с плоскостью $z = 0$ образуют стереографическую проекцию элементов группы на большой круг экваториального сечения сферы (рис. 2.14). Перпендикулярной или наклонной оси симметрии на этой проекции соответствует точка ее пересечения с верхней полусферой (обозначенная графическим символом оси), экваториальным осям и вертикальным плоскостям m — диаметры, горизонтальной плоскости — круг проекции, наклонным плоскостям — дуги (в этом случае изображаемые двойной линией). Декартовы координаты (ξ, χ) точки стереографической проекции на плоскости связаны с пространственными координатами ее прообраза (x, y, z) соотношениями

$$x = \frac{2\xi}{1+\xi^2+\chi^2}, \quad y = \frac{2\chi}{1+\xi^2+\chi^2}, \quad z = \frac{1-(\xi^2+\chi^2)}{1+\xi^2+\chi^2}. \qquad (2.14)$$

Таким образом, стереографическая проекция является нелинейным преобразованием трехмерного пространства в двумерное, не сохраняющим расстояния между двумя точками (но сохраняющим угол между прямыми или плоскостями, опреде-

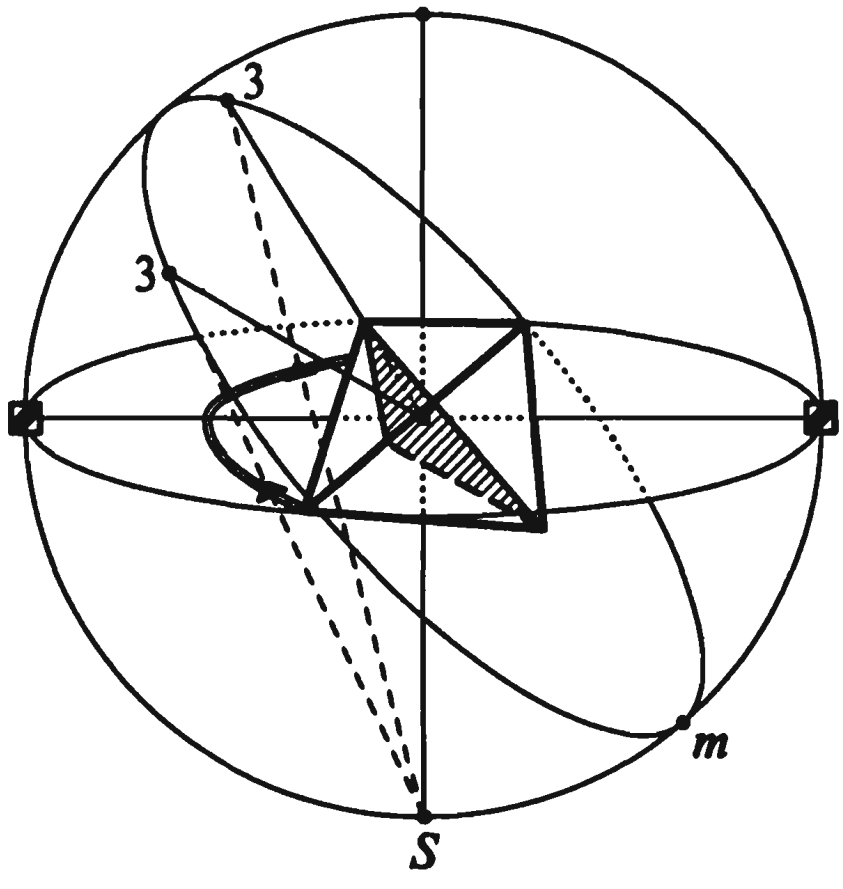
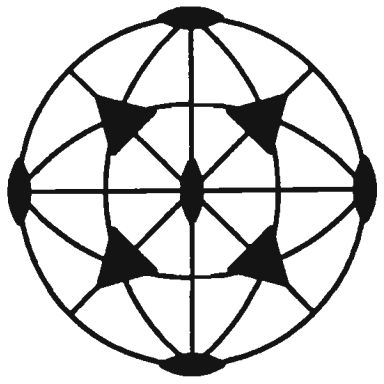
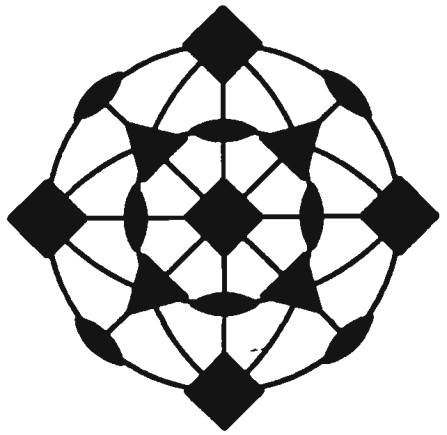


Рис. 2.14. Стереографическая проекция осей и плоскости симметрии тетраэдра на экваториальное сечение сферы

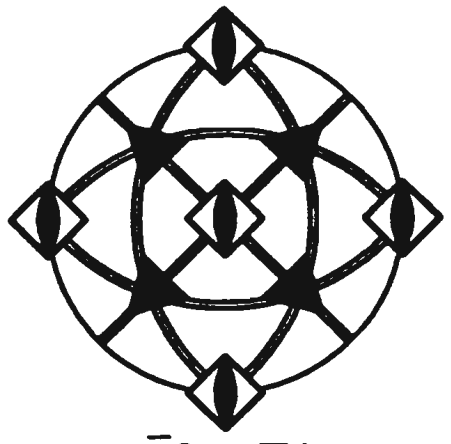
VII



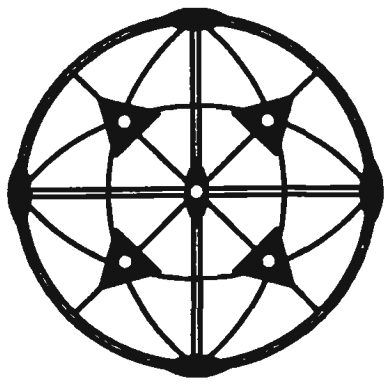
23(T)



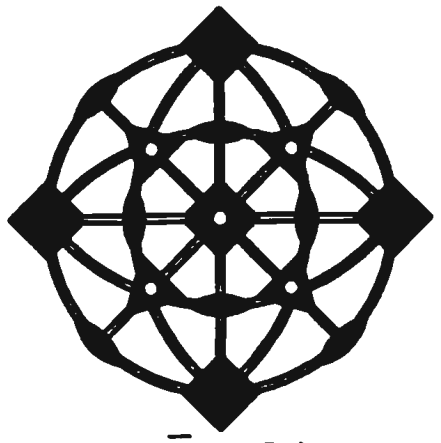
432(O)



$\bar{4}3m$(T_d)

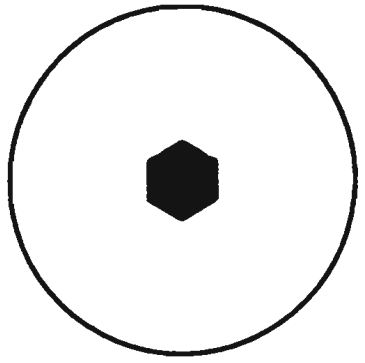


$m\bar{3}$(I_h)

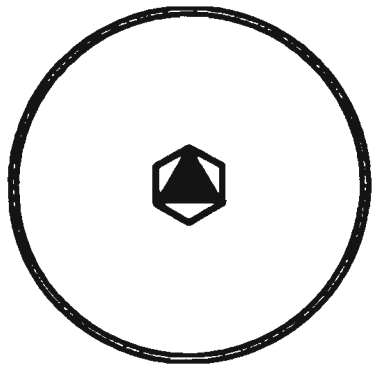


$m\bar{3}m$(O_h)

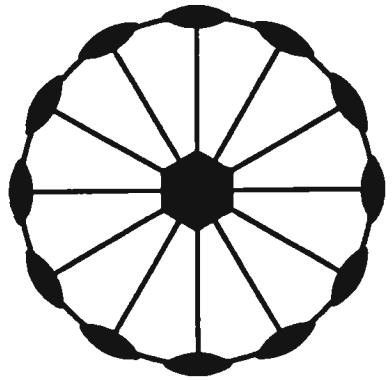
VI



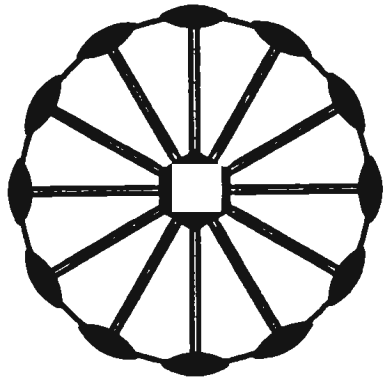
6(C_6)



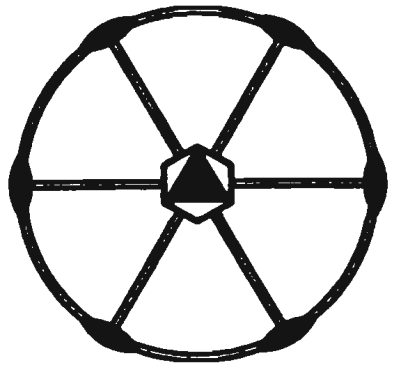
$\bar{6}$(C_{3h})



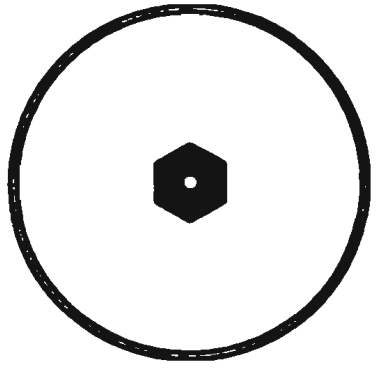
622(D_6)



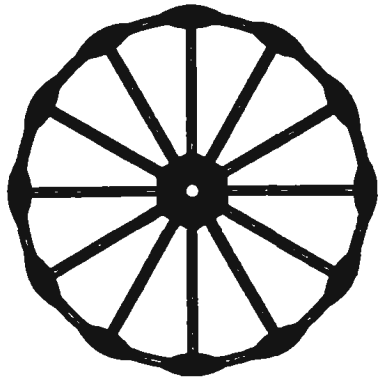
6mm(C_{6v})



$\bar{6}m2$(D_{3h})

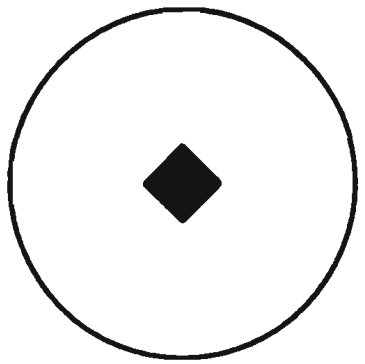


6/m(C_{6h})

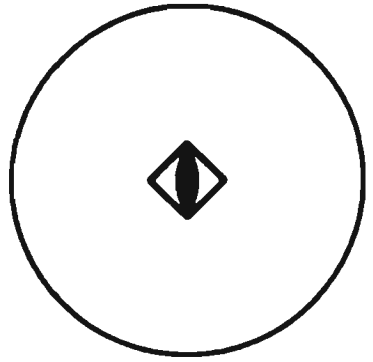


6/mmm(D_{6h})

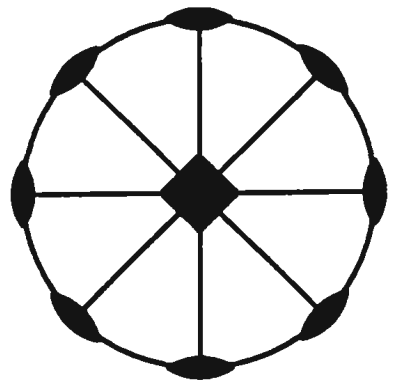
V



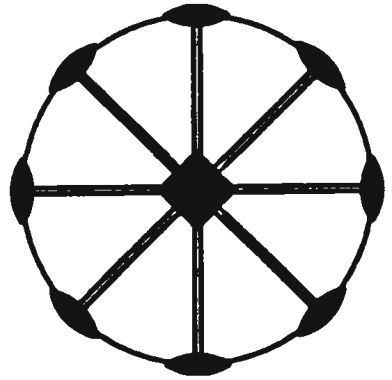
4(C_4)



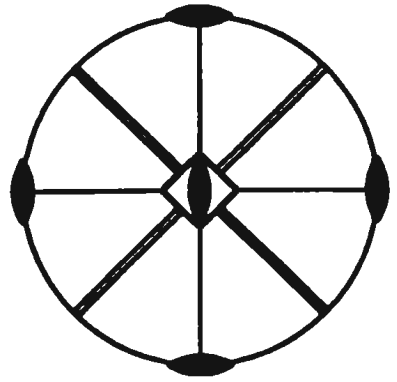
$\bar{4}$(S_4)



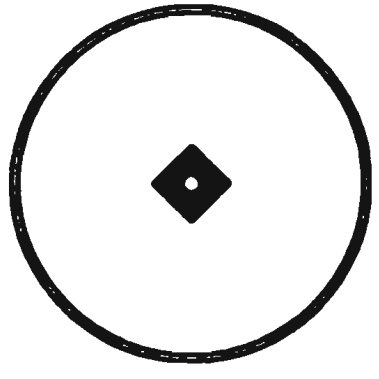
422(D_4)



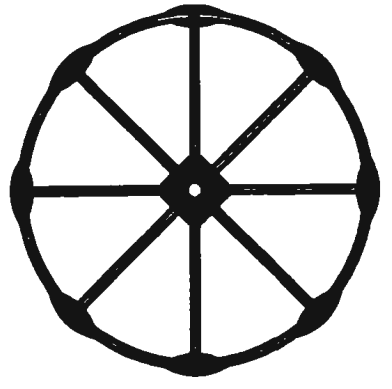
4mm(C_{4v})



$\bar{4}2m$(D_{2d})

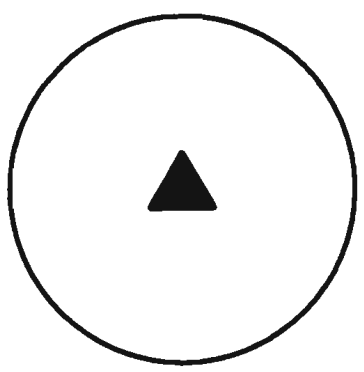


4/m(C_{4h})

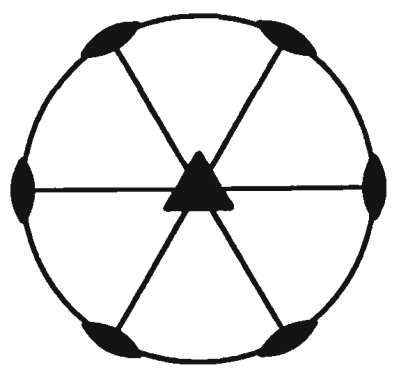


4/mmm(D_{4h})

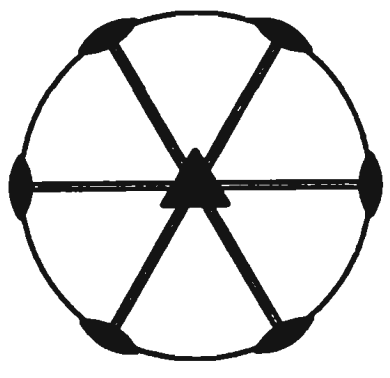
IV



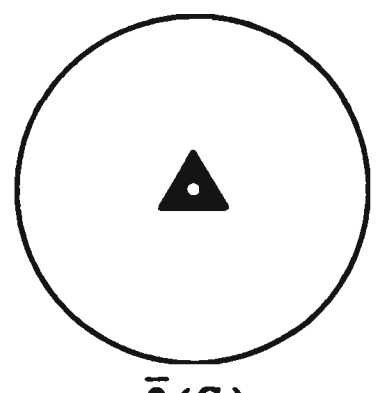
3(C_3)



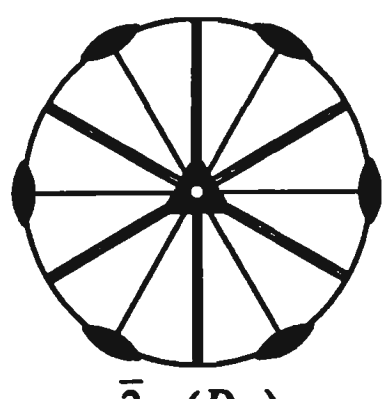
32(D_3)



3m(C_{3v})

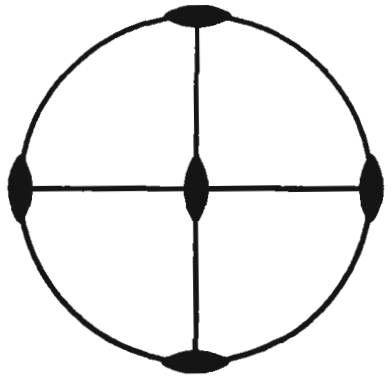


$\bar{3}$(S_6)

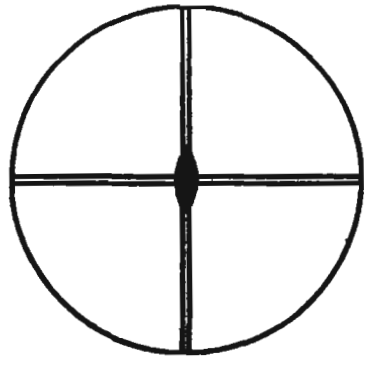


$\bar{3}m$(D_{3d})

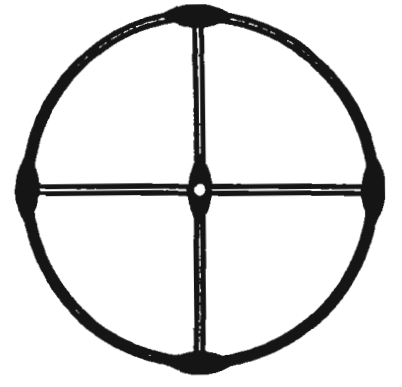
III



222 (D_2)

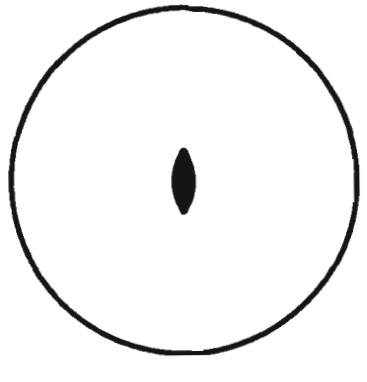


$mm2$ (C_{2v})

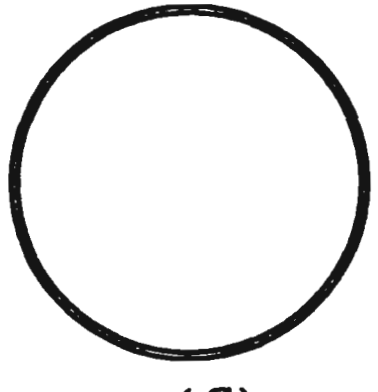


<u>mmm</u> (D_{2h})

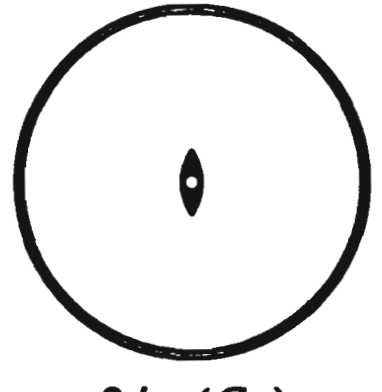
II



2 (C_2)

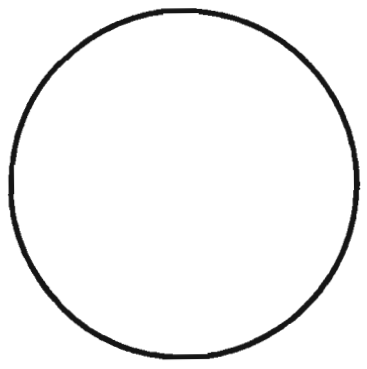


m (C_s)

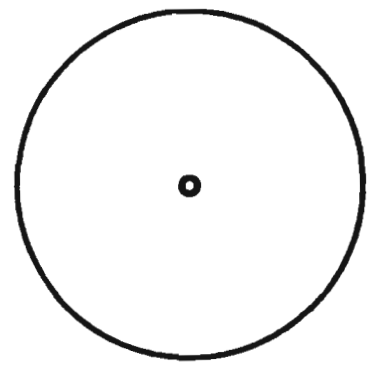


<u>$2/m$</u> (C_{2h})

I



<u>1</u> (C_1)



<u>$\bar{1}$</u> (C_i)

1 *2* *3* *4* *5* *6* *7*

Рис. 2.15. Стереографические проекции элементов симметрии 32 кристаллографических точечных групп (см. теоремы 2.19, 2.20):
I — VII — соответственно триклинная, моноклинная, орторомбическая, тригональная, тетрагональная, гексагональная и кубическая сингония; *1* — *5* — нецентросимметричные группы, *6*, *7* — центросимметричные группы. Обозначения даны по Герману — Могену; в скобках приведены обозначения по Шенфлису; подчеркнуты классы Лауэ (см. подразд. 2.14)

ляемый как угол между касательными к дугам в точке их пересечения). С помощью стереографической проекции изображают точечные группы (рис. 2.15) и отвечающие им кристаллографические многогранники.

Нередко на стереографической проекции отмечают так называемую *правильную систему точек* данной группы, переводимых одна в другую ее операциями симметрии, — орбиту группы. Количество точек общего вида, не лежащих на элементах симметрии, в правильной системе точек равно порядку группы.

2.9. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КЛАССЫ И ПРОСТЫЕ ФОРМЫ

Точечную симметрию кристаллической решетки наглядно изображает полиэдр. Разные полиэдры, относящиеся к одной кристаллографической группе, образуют *кристаллический класс*. Все семь сингоний, охватывающие 32 кристаллических класса, аналогично точечным группам подразделяют на низшие (триклинную, моноклинную, орторомбическую), средние (тригональную, тетрагональную, гексагональную) и высшую (кубическую). (Напомним, что группы семейства икосаэдра с поворотными осями 5-го порядка не имеют трехмерных кристаллографических классов.) Все точечные группы, входящие в сингонию, являются подгруппами в точечной группе ее решетки Браве. Группы низших и средних сингоний, не содержащие горизонтальных плоскостей, описывают симметрию двумерных решеток. Учитывая, что оси 2, лежащие в плоскости решетки, эквивалентны перпендикулярным к ней плоскостям симметрии m, а ось 2, перпендикулярная решетке, эквивалентна в ней центру инверсии $\bar{1}$, для двумерных решеток получим 10 возможных кристаллографических групп (и, соответственно, кристаллических классов): 1, $2(=\bar{1})$, m, 3, 4, 6, $mm2(=222)$, $3m(=32)$, $4mm(=422)$, $6mm(=622)$.

2.9.1. Простые формы и их комбинации

Действие всех операций симметрии, входящих в определенную точечную кристаллографическую группу, на плоскость в трехмерном пространстве порождает собственный полиэдр ее кристаллического класса, или *простую форму*: совокупность симметрически эквивалентных плоскостей, которые могут пересекаться. Полиэдр простой формы может быть как открытым (мо-

ноэдр, пинакоид, кристаллографический диэдр, пирамида, призма), так и замкнутым, т. е. выпуклым многогранником (тетраэдр, ромбоэдр, бипирамида, скаленоэдр, трапецоэдр, а также 15 простых форм кубической сингонии). Все грани замкнутой простой формы, называемой *изоэдром*, представляют равные многоугольники; в любую простую форму можно вписать сферу.

При разных расположениях исходной плоскости относительно элементов симметрии группы в каждом кристаллическом классе возникает несколько простых форм. Число граней в простой форме равно кратности правильной системы точек в ее кристаллическом классе.

В некоторых классах имеется несколько простых форм одной и той же кратности (например, пирамида и призма, порождаемые группой C_n при различной ориентации исходной плоскости относительно поворотной оси). В частности, моноэдр, состоящий из единственной плоскости, является простой формой в 10 кристаллических классах, в каждом из которых его плоскость переводится в себя элементами симметрии: эти классы совпадают с 10 точечными группами плоской решетки.

Распределение 47 геометрически различных полиэдров, отвечающих простым формам, по кристаллическим классам показано в табл. 2.3 и 2.4; простые формы низших сингоний изображены на рис. 2.16.

Кристаллические классы, относящиеся в данной сингонии к точечной группе наиболее высокого порядка, называют *голоэдрическими*, т. е. «полногранными». Подгруппам голоэдрического класса отвечают *гемиэдрические* и *тетартоэдрические* простые формы, содержащие соответственно $h/2$ и $h/4$ граней (где h — порядок голоэдрической группы). Гемиэдрические простые формы средних сингоний можно построить, удалив половину граней в голоэдрической форме и продолжив оставшиеся грани до их взаимного пересечения. При разных вариантах такого построения голоэдрическая бипирамида порядка h преобразуется в *бипирамиду*, *скаленоэдр* и *трапецоэдр*, имеющие $h/2$ граней (рис. 2.17). (Трапецоэдры, не имеющие плоскостей симметрии, *энантиоморфны*: они существуют в виде «правого» и «левого» стереоизомерных полиэдров, связанных плоскостью симметрии, но не переводимых один в другой никакими смещениями в трехмерном пространстве, см. подразд. 1.10.) Тем же способом из гемиэдрических полиэдров можно построить тетартоэдрические.

Простые формы кубической сингонии (рис. 2.18) строят на основе тетраэдра, октаэдра и куба добавлением вершин-«шапок» над гранями и нетреугольных граней.

Таблица 2.3

Простые формы в кристаллических классах низших и средних сингоний

Сингония	Класс	Порядок группы	Простая форма												
			Моноэдр	Пинакоид	Диэдр	Пирамида	Двойная пирамида	Призма	Двойная призма	Бипирамида	Двойная бипирамида	Скаленоэдр	Трапецоэдр	Тетраэдр	Гексаэдр
			Число граней												
			1	2	2	$h/(2k)$	$h/2$	$h/(2k)$	h/k	h/k	h	h/k	$h/2$	4	6
Триклинная	1	1	+												
	$\bar{1}$	2		+											
Моноклинная	2	2	+	+	+										
	m	2	+	+	+										
	$2/m$	4		++				+							
Орторомбическая	222	4		+				+						+	
	$mm2$	4	+	+	+	+		+							
	mmm	8		+				+		+					
Тетрагональная	4	4	+			+		+							
	$\bar{4}$	8		+				+						+	
	$4/m$	8		+				+		+					

Тетрагональная	422	8		+				+	+	+			+		
	$4mm$	8	+			+	+	+	+						
	$\bar{4}2m$	16		+				++	+	+		+		+	
	$4/mmm$	16		+				+	+	+	+				
Тригональная	3	3	+			+		+							
	$\bar{3}$	6		+				+							+
	32	6		+				++	+	+			+		+
	$3m$	6	+			++	+	++	+						
	$\bar{3}m$	12		+				++	+	+		+			+
Гексагональная	6	6	+			+		+							
	$\bar{6}$	12		+						+					
	$6/m$	12		+				+		+					
	622	12		+				+	+	+			+		
	$6mm$	12	+			+	+	+	+						
	$\bar{6}m2$	24		+				++	+	++	+				
	$6/mmm$	24		+				+	+	+	+				

Примечание. ++ — два разных полиэдра в классе; h — максимальный порядок группы в классе; $k = 1$ или 2.

Таблица 2.4

Простые формы в кристаллических классах кубической сингонии

Простая форма	Число граней	Кристаллический класс				
		23	$m\bar{3}$	432	$\bar{4}3m$	$m\bar{3}m$
		Порядок группы				
		12	24	24	24	48
Тетраэдр	4	+			+	
Гексаэдр (куб)	6	+	+	+	+	+
Октаэдр	8		+	+		+
Ромбододекаэдр	12	+	+	+	+	+
Пентагондодекаэдр	12	+	+			
Тригонтритетраэдр	12	+			+	
Тетрагонтритетраэдр	12	+			+	
Пентагонтритетраэдр	12	+				
Гексатетраэдр	24				+	
Тригонтриоктаэдр	24		+	+		+
Тетрагонтриоктаэдр	24		+	+		+
Пентагонтриоктаэдр	24			+		
Тетрагексаэдр	24			+	+	+
Дидодекаэдр	24		+			
Гексоктаэдр	48					+

Числа граней и ребер в них задает *теорема Эйлера* для выпуклых многогранников:

$$В + Г = Р + 2,$$

где В — число вершин; Р — число ребер; Г — число граней. Интересно, что одной из простых кубических форм является пентагондодекаэдр симметрии $m\bar{3}$, т. е. $T_h = O_h \cap I_h$, с 24 гранями в форме равнобедренных пятиугольников (рис. 2.18, *и*).

К кубическим простым формам также относят пентагонтритетраэдр (рис. 2.18, *г*) и пентагонтриоктаэдр (рис. 2.18, *о*), принадлежащие к точечным группам вращений 23 (T) и 432 (O) соответственно (см. гл. 1). Правильной системе точек кратности 48 (общей позиции) группы $m\bar{3}m$ (O_h) отвечает гексоктаэдр с 48 неравносторонними треугольными гранями. Он порождается плоскостью, не совпадающей ни с одним элементом симметрии группы $m\bar{3}m$ (рис. 2.18, *п*). Поскольку среди кубических простых форм есть три пары топологически подобных полиэдров,

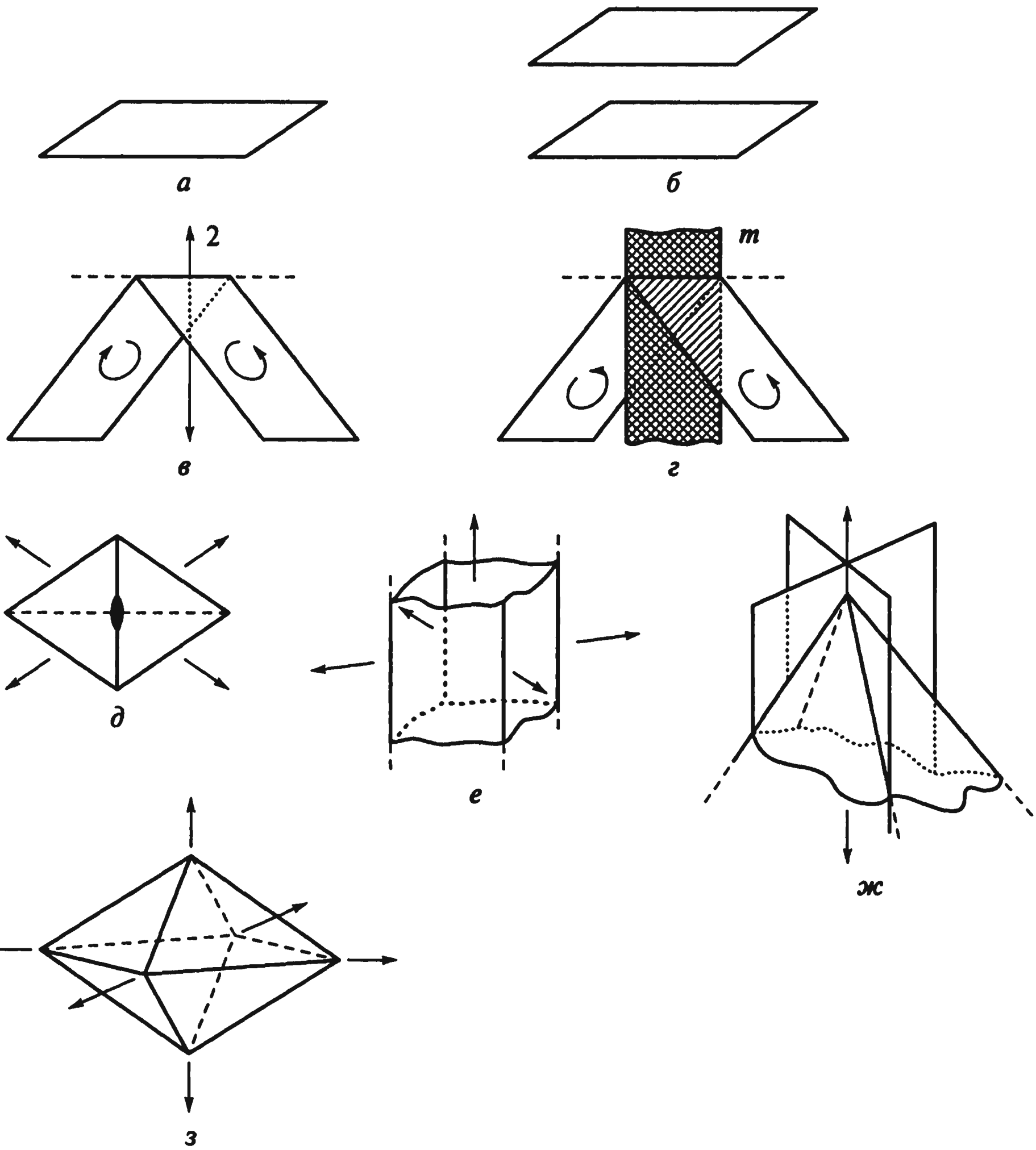


Рис. 2.16. Простые формы низших сингоний:
а — моноэдр; *б* — пинакоид; *в*, *г* — кристаллографические диэдры; *д* — *з* — соответственно ромбические тетраэдр, призма, пирамида и бипирамида

переводимых одна в другую непрерывными деформациями (*в* и *з*, *д* и *ж*, *к* и *н* на рис. 2.18), независимы лишь 12 из них.

2.9.2. Индексы Миллера

Ориентацию произвольной системы параллельных плоскостей в кристалле относительно ребер его элементарной ячейки задают *индексы Миллера* (hkl) — тройка чисел, равных кратностям разбиения каждого ребра отрезками, отсекаемыми от него соседними плоскостями. Так, плоскость X, проходящая через вершину a элементарной ячейки и отсекающая от ее ребер b и c отрез-

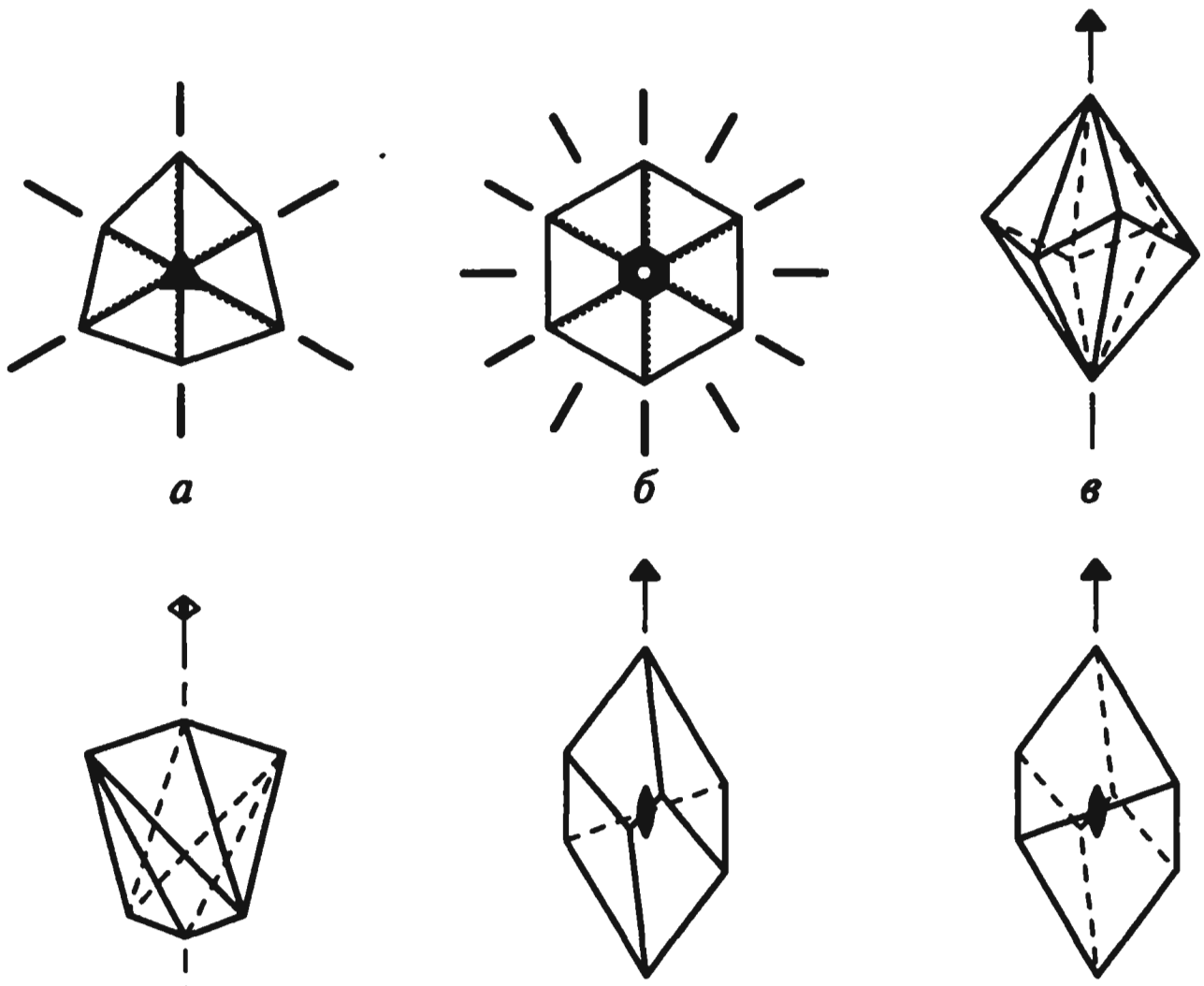


Рис. 2.17. Некоторые простые формы средних сингоний и их симметрия:

а — голоэдрическая дитригональная бипирамида $\bar{6}\bar{m}2$ (D_{3h}); *б* — гексагональная бипирамида (в проекции вдоль главных осей) $6/mmm$ (D_{6h}); *в* — дитригональный скаленоэдр $\bar{3}m$ (D_{3d}); *г* — тетрагональный скаленоэдр $\bar{4}2m$ (D_{2d}); *д, е* — соответственно «правый» и «левый» тригональный трапецоэдр 32 (D_3)

ки b_X и c_X соответственно, имеет индексы $h = a/a = 1$, $k = b/b_X$, $l = c/c_X$. Все кристаллографические плоскости, проходящие через узлы решетки, имеют целочисленные миллеровские индексы (рис. 2.19); плоскости (hkl) и (nh, nk, nl) (где n — целое число), параллельны. Отрицательные значения индексов Миллера обычно изображают чертой над соответствующей цифрой либо символом $(-h, -k, -l) \equiv (\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$.

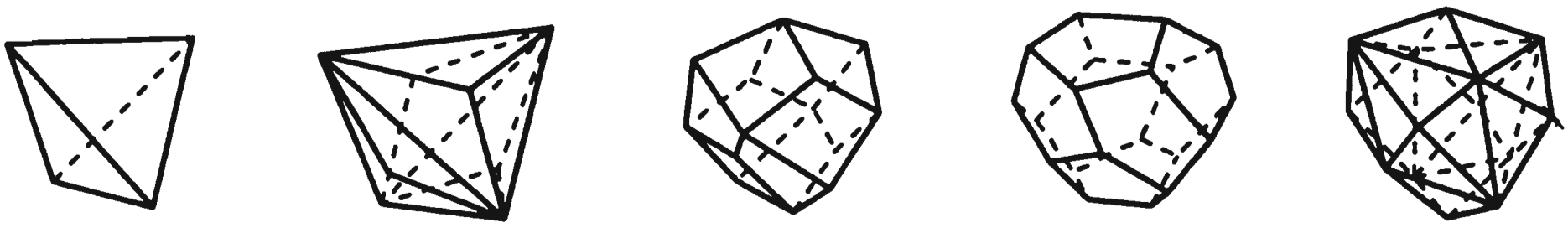
Индексы Миллера граней в голоэдрических простых формах все не равны нулю и связаны операциями симметрии группы, например:

$$C_4^1(hkl) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = (\bar{k}hl),$$

$$\sigma_{xz}(hkl) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = (h\bar{k}l).$$

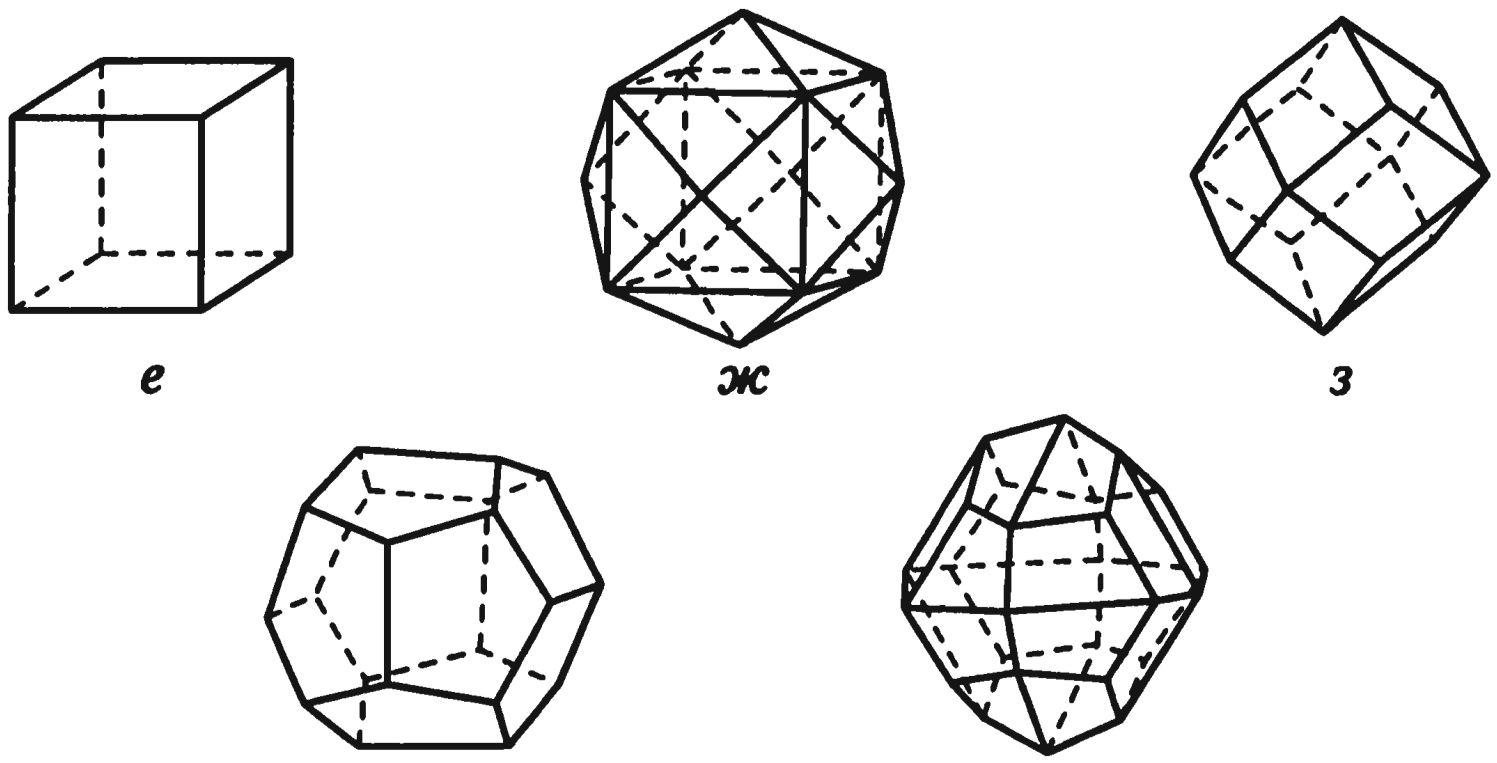
Грани простых форм, отвечающих подгруппам кристаллического класса (т. е. частным положениям точек на оси симметрии в правильной системе), могут иметь нулевые или равные индек-

Семейство тетраэдра



а *б* *в* *г* *д*

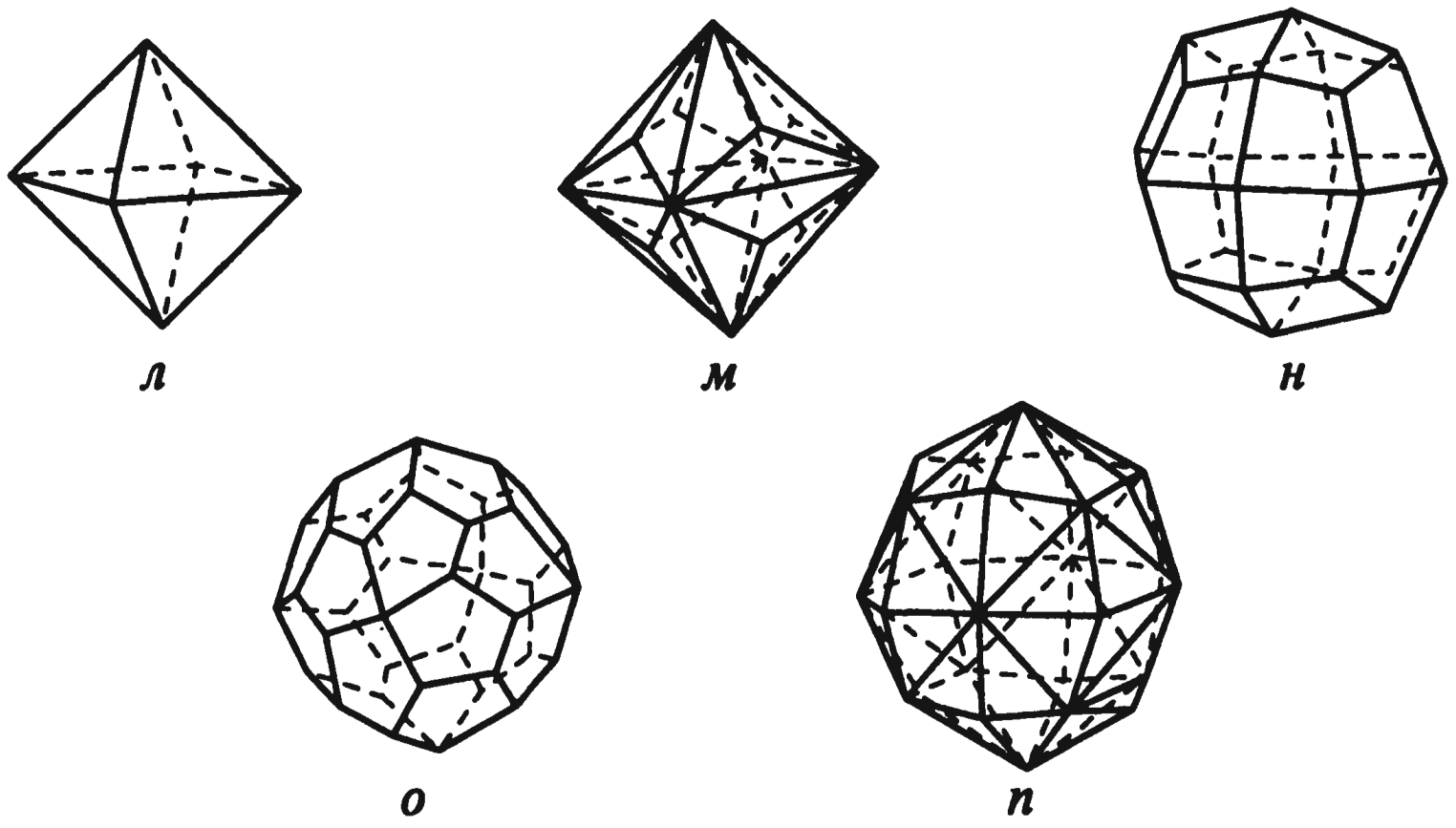
Семейство гексаэдра



е *ж* *з*

и *к*

Семейство октаэдра



л *м* *н*

о *п*

Рис. 2.18. Простые формы кубической сингонии (в скобках указано число вершин + число граней):

а — тетраэдр T_d (4+4); *б* — тригонтритетраэдр T_d (8+12); *в* — тетрагонтритетраэдр T_d (14+12); *г* — пентагонтритетраэдр T (20+12); *д* — гексатетраэдр T_d (14+24); *е* — гексаэдр (куб) O_h (8+6); *ж* — тетрагексаэдр O_h (14+24); *з* — ромбододекаэдр O_h (14+12); *и* — пентагондодекаэдр T_h (20+12); *к* — дидодекаэдр T_h (26+24); *л* — октаэдр O_h (6+8); *м* — тригонтриоктаэдр O_h(14+24); *н* — тетрагонтриоктаэдр O_h (26 + 24); *о* — пентагонтриоктаэдр O (38 + 24); *п* — гексоктаэдр O_h (26+48)

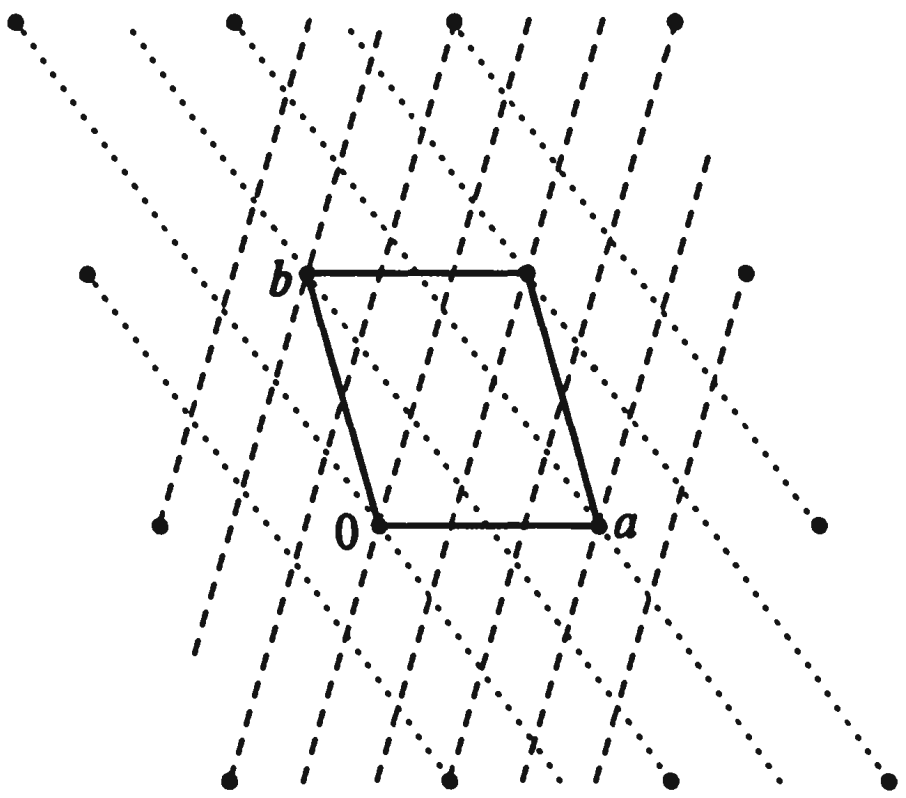
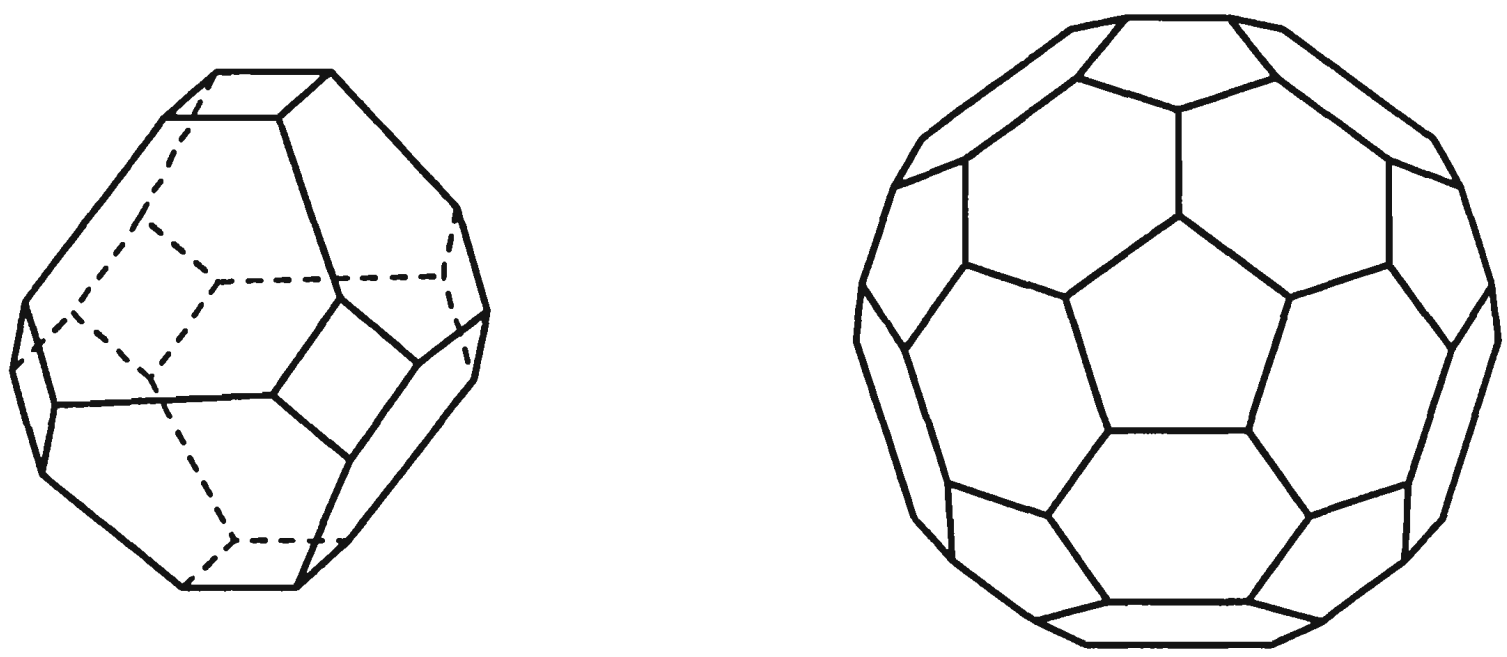


Рис. 2.19. Системы кристаллографических линий в двумерной решетке. Пунктирные линии (2,1), штриховые линии $(\bar{3}, 2)$

сы Миллера (например, $h = k$ в гемиэдрических классах средних сингоний или $l = 0$ в призмах этих сингоний).

Огранку реальных кристаллов иногда удается описать комбинацией двух или нескольких простых форм одного кристаллического класса. В такой комбинации грани одного полиэдра отсекают «лишние» части другого.

На рис. 2.20 приведены примеры комбинированных полиэдров: федоровский кубооктаэдр, или усеченный октаэдр (в котором кубические грани отсекают одинаковые части ребер), усеченный икосаэдр (структура молекулы фуллерена C_{60}), симметричный (истинный) кубооктаэдр (кубические грани рассека-



а *б*

в *г*

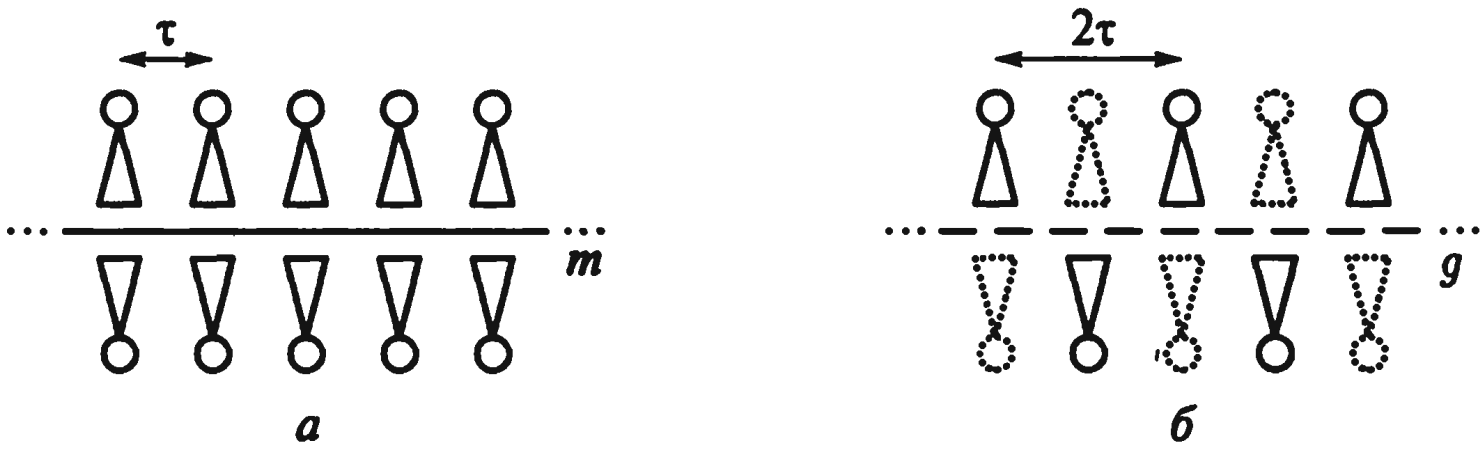
Рис. 2.20. Комбинации простых форм:

а — усеченный октаэдр (октаэдр + куб, O_h); *б* — усеченный икосаэдр (икосаэдр + пентагондодекаэдр, I_h); *в* — кубооктаэдр (O_h); *г* — антикубооктаэдр (D_{3h})

ют ребра октаэдра пополам) и его «двойник»: антикубооктаэдр, содержащий одну ось 3 вместо четырех осей $\bar{3}$ и не имеющий центра симметрии. Последний полиэдр получают комбинацией трех простых форм в группе $\bar{6}m2$ (D_{3h}): двух гемиэдрических бипирамид и пары горизонтальных плоскостей (001) (пинакоида). Сочетаниями простых форм можно описывать геометрические формы кристаллов, а также лигандные полиэдры и кластеры.

2.10. ПЛОСКИЕ ГРУППЫ G_2^2

Группы симметрий в n-мерном кристаллическом пространстве, включающие трансляции в m измерениях, в кристаллографии обозначают G_m^n. Трансляционной симметрией в них порождается m-мерное инвариантное подпространство, переводимое в себя всеми симметрическими операциями группы. Группы симметрий дважды периодических структур на плоскости (*двумерных кристаллов*), обозначаемые G_2^2, состоят из пяти плоских групп Браве и всех их возможных подгрупп. Символы плоских групп по международной системе начинаются с типа решетки, обозначаемого строчной буквой p (примитивная) либо c (центрированная). Далее в символе группы указывают поворотную ось (2, 3, 4 или 6) и неэквивалентные элементы симметрии, лежащие



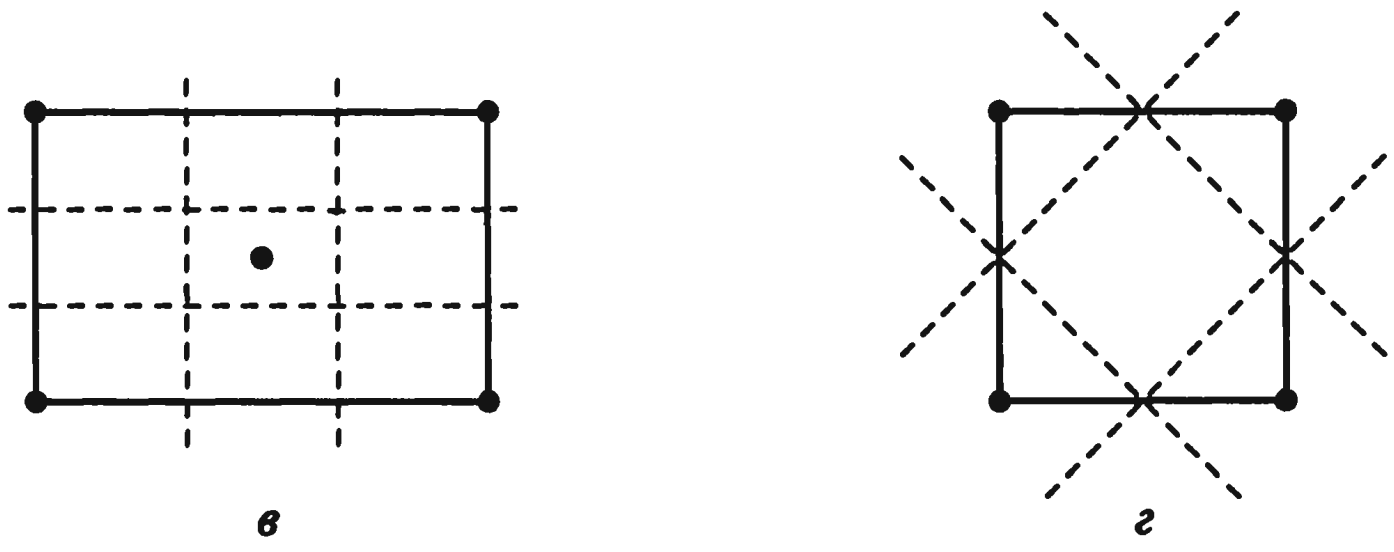
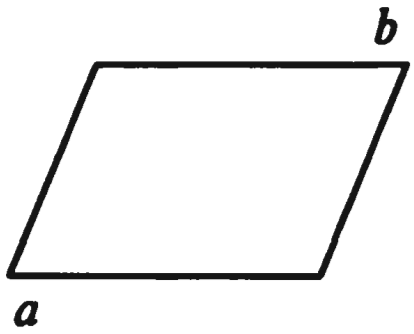
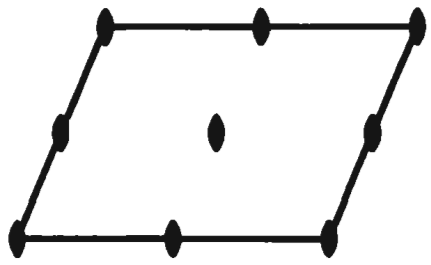


Рис. 2.21. Отражение m ($а$) в группе симметрий бесконечного бордюра (трансляция τ) и скользящее отражение g ($б$) в ее подгруппе (трансляции 2τ). Линии скользящего отражения в центрированной ортогональной ($в$) и примитивной тетрагональной ($г$) плоских решетках



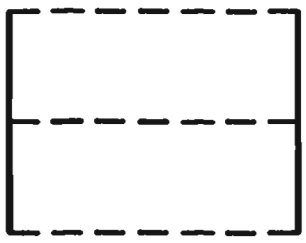
p1



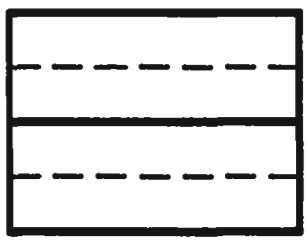
p2



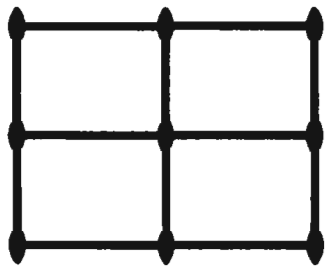
pm



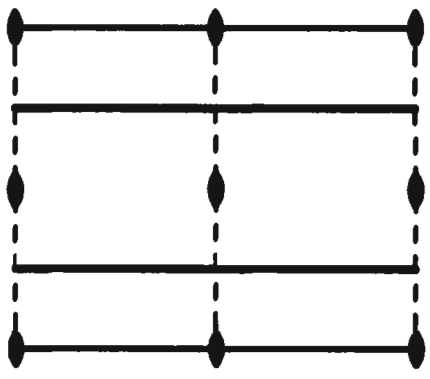
pg



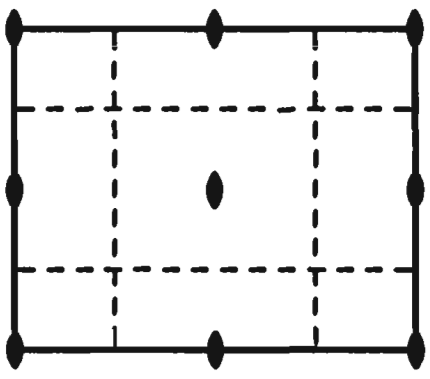
cm



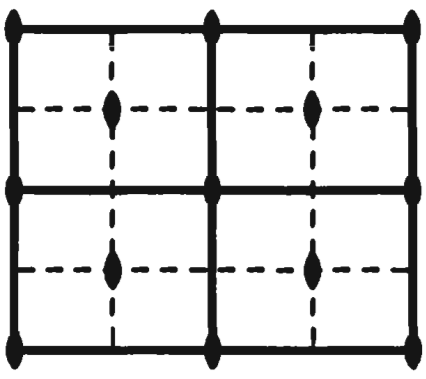
p2mm



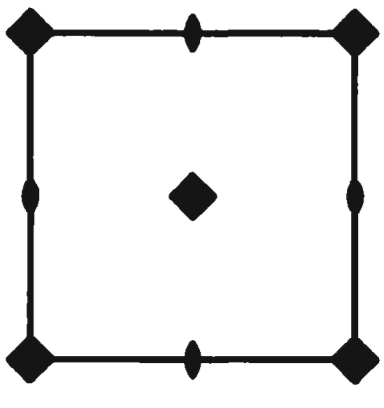
p2mg



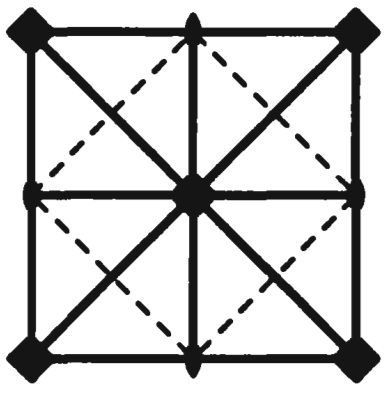
p2gg



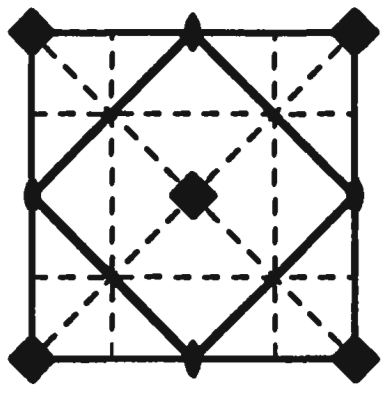
c2mm



p4



p4mm

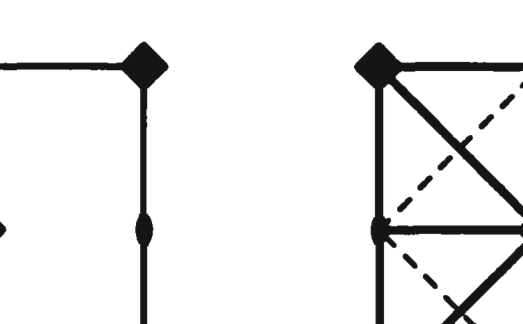


p4gm

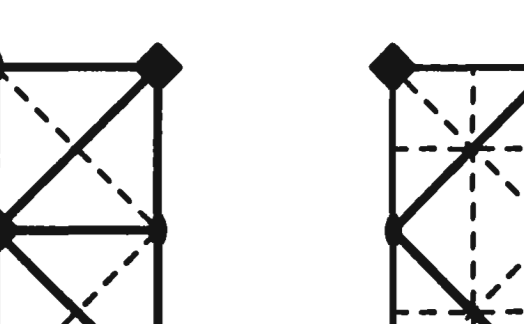
p3

p3m1

p31m



p6



p6mm

Рис. 2.22. Плоские группы G_2^2 (подчеркнуты симморфные)

в плоскости (если такие имеются). Аналогом порядка группы для конечно порожденных групп с бесконечным числом элементов служит кратность системы эквивалентных позиций общего вида, или орбиты точечной подгруппы, т. е. число эквивалентных точек в элементарной ячейке, не лежащих на ее элементах симметрии.

По аналогии с точечными группами операции симметрии плоских групп часто изображают геометрическими символами — элементами симметрии. Композиция зеркального отражения m и переноса (*трансляции*) на вектор, лежащий в плоскости m, порождает элемент симметрии, не встречавшийся в точечных группах: скользящее отражение g (рис. 2.21). Операции g переводят друг в друга узлы прямоугольной центрированной ячейки, а также узлы в примитивных ячейках тригональной, квадратной и гексагональной сингоний.

Элементы симметрии всех 17 плоских групп показаны на рис. 2.22. Их можно вывести геометрически, размещая элементы симметрии точечной группы в элементарной ячейке ее решетки Браве и учитывая композиции операций. Сочетание 10 точечных групп, отвечающих «плоским» кристаллическим классам (см. выше), с пятью двумерными решетками Браве непосредственно дает 13 симморфных групп (их символы на рис. 2.22 подчеркнуты). Оставшиеся четыре группы получают заменой отражений m на скольжения g в группах pm, $p2mm$ (2 варианта замены) и $p4mm$.

Более универсальный алгоритм вывода, применимый к пространству любой размерности, состоит в переборе всех подгрупп в группах, отвечающих наивысшей симметрии в каждой решетке Браве. Например, в группе $p6mm$ с 12-кратной системой эквивалентных позиций имеется три подгруппы $p6$, $p31m$ и $p3m1$, с разными 6-кратными системами; в каждой из них есть подгруппа $p3$ кратности 3. Отметим, что в группах $p31m$ и $p3m1$ линии симметрии m, по-разному расположенные относительно трансляций решетки, порождают несовпадающие системы эквивалентных позиций. Плоские группы задают симметрию проекций трехмерных кристаллических структур и используются в описании атомного строения поверхностей.

2.11. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ G_3^3

В 1890—1892 гг. Е. С. Федоров и А. Шенфлис независимо вывели 219 пространственных групп; в отечественной литературе их часто называют *федоровскими* группами. Сочетание элемен-

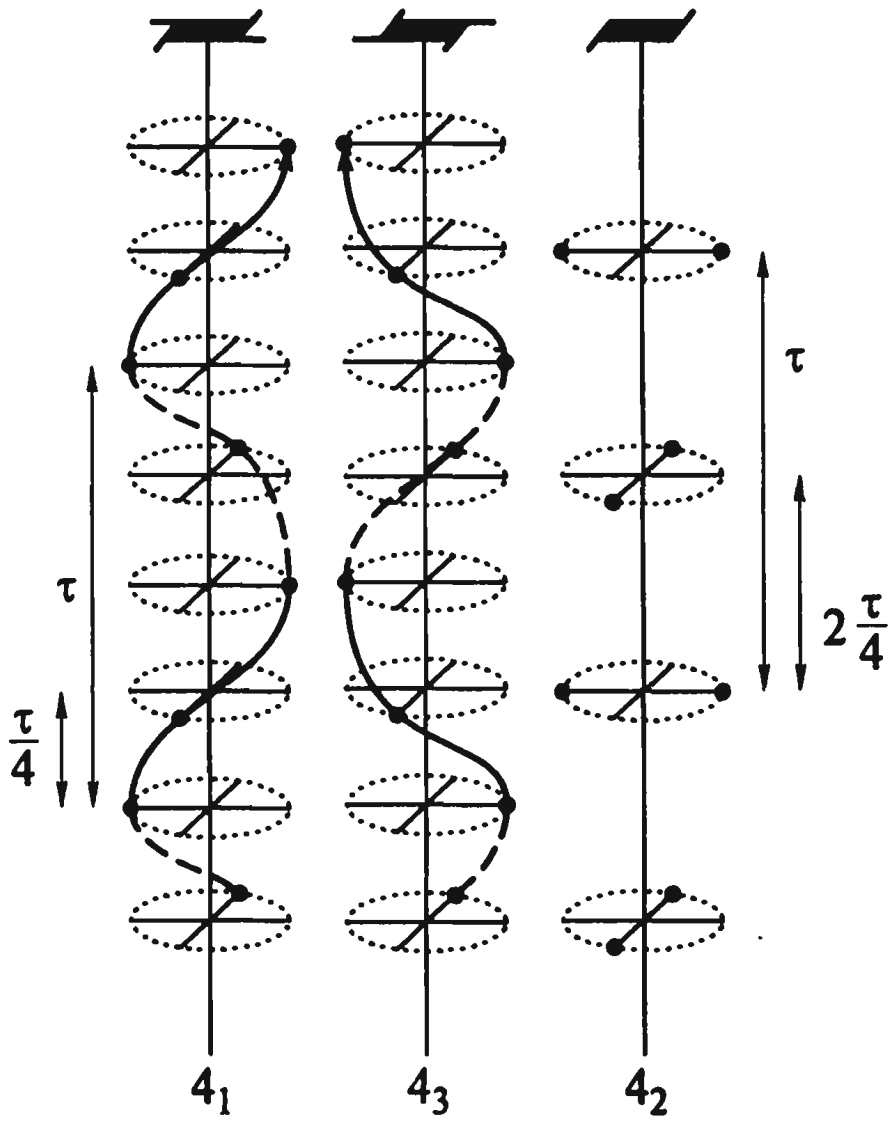


Рис. 2.23. Винтовые оси и их трансляции

тов точечных кристаллографических групп с трансляциями порождает новые, *открытые* операции: скользящие отражения (см. рис. 2.21) и винтовые повороты (рис. 2.23) — из сочетания трансляций с несобственными и собственными вращениями соответственно. Как и в случае несобственных вращений в точечных группах, компоненты открытых операций по отдельности могут не присутствовать в данной группе. Это справедливо для несимморфных групп, которые не являются полупрямыми произведениями нормальной подгруппы трансляций и конечной точечной группы ортогональных преобразований.

Плоскость скользящего отражения включает сдвиг на половину или четверть трансляции вдоль определенного лежащего в ней вектора. В трехмерном случае такую плоскость обозначают a, b или c, соответственно направлению сдвига на половину трансляции $\vec{\tau}_i/2$, либо n при одновременном сдвиге по двум трансляциям $(1/2)(\vec{\tau}_i + \vec{\tau}_j)$.

В тетрагональных и кубических группах могут присутствовать «алмазные» плоскости скольжения d (diamond)* с перемещениями $(1/4)(a \pm b)$, $(1/4)(a \pm c)$ или $(1/4)(a \pm b \pm c)$ вдоль диагональных плоскостей ячейки. В последние годы Международным союзом кристаллографов принято специальное обозначение для *двойной* плоскости скользящего отражения e, включающей половинные трансляции в двух взаимно перпендикулярных направлениях (эти плоскости существуют в некоторых центросимметричных решетках).

Винтовые оси N_q (N, q — целые числа; $q|N$) отвечают повороту относительно оси на угол $2\pi/N$ с переносом вдоль нее на q/N часть трансляции $\vec{\tau}_i$. Так, ось 2_1, проходящая по координатной оси O_z, переводит точку (x, y, z) в точку $(-x, -y, z + \tau/2)$, а аналогично расположенная ось 3_1 переводит (x, y, z) в точку

$$(x/2 - y\sqrt{3}/2,\ x/2 + y\sqrt{3}/2,\ z + \tau/3).$$

*Такие плоскости характерны, в частности, для кубической решетки алмаза (пространственная группа $Fd\bar{3}m$).

Повороты вокруг винтовых осей N_q с $q \neq N/2$ пространственно *асимметричны (хиральны)*(см. подразд. 1.10) : при $q < N/2$ они отвечают правому винту, а при $q > N/2$ — левому. Поэтому одинаковые геометрические фигуры с осями симметрии N_q и N_{N-q} (3_1 и 3_2, 4_1 и 4_3, 6_1 и 6_5, 6_2 и 6_4) энантиоморфны, т. е. переводятся одна в другую отражением в плоскости m и не совмещаются поворотами в трехмерном пространстве. Винтовые оси 2_1, 4_2 и 6_3 не обладают свойством хиральности. Из-за наличия асимметричных винтовых осей 11 пространственных групп образуют энантиоморфные пары ($P3_1$ и $P3_2$, $P6_122$ и $P6_522$ и т. д.), компоненты которых нельзя перевести друг в друга переносами и поворотами в трехмерном пространстве. Это увеличивает общее число кристаллографически различимых пространственных групп до 230. Символы открытых операций симметрии в группах G_3^3 показаны на рис. 2.24.

У п р а ж н е н и е 2.7. Сопоставить эквивалентные позиции, порождаемые винтовыми осями: 6_3, 4_2 и 2_1; 6_4 и 3_2.

Символы всех пространственных групп представлены в табл. 2.5. В обозначениях по системе Германа—Могена первая заглавная буква отвечает типу решетки Браве, второй символ обозначает высшую координатную ось симметрии, третий и четвертый символы — соответственно координатный и диагональный элементы симметрии, проходящие через эту ось (если они есть в группе).

Так, например, группа $P4_2mc$ относится к кристаллическому классу $4mm$ примитивной тетрагональной решетки и содержит: главную ось 4_2, проходящую по направлению Oz; две зеркальные плоскости m, совпадающие с симметрически эквивалентными координатными плоскостями xOz, yOz; две биссектральные плоскости скользящего отражения c со сдвигом на половину периода c, проходящие через ось 4_2 между координатными плоскостями m.

Кроме того, аналогично плоской квадратной группе $p4mm$, в группе $P4_2mc$ имеются вертикальные оси 2 на серединах ребер a, b и четыре вертикальные плоскости d, возникшие из комбинации диагональных плоскостей n, которыми связаны узлы ячейки, с трансляцией на $c/2$.

В кубических группах третьим символом указывается ось 3 или $\bar{3}$, проходящая по телесной диагонали ячейки. В так называемом полном обозначении группы приводят символы осей и перпендикулярных им плоскостей симметрии, если такие элементы имеются (например, группа $Pnma$ в полном виде записывается как $P2_1/n\ 2_1/m\ 2_1/a$).

Таблица 2.5

Пространственные группы G_3^3

Сингония и решетка Браве	Кристаллический класс	Пространственная группа*
Триклинная (P)	1	$\underline{P1}\,(C_1^1)$
	$\bar{1}$	$\underline{P\bar{1}}\,(C_1^2)$
Моноклинная (P, C)	$2\,(C_2)$	$\underline{P2}\,(C_2^1)$, $P2_1\,(C_2^2)$, $\underline{C2}\,(C_2^3)$
	$m\,(C_s)$	$\underline{Pm}\,(C_s^1)$, $Pc\,(C_s^2)$, $\underline{Cm}\,(C_s^3)$, $Cc\,(C_s^4)$
	$2/m\,(C_{2h})$	$\underline{P2/m}\,(C_{2h}^1)$, $P2/m\,(C_{2h}^2)$, $\underline{C2/m}\,(C_{2h}^3)$, $P2/c\,(C_{2h}^4)$, $P2_1/c\,(C_{2h}^5)$, $C2/c\,(C_{2h}^6)$
Орторомбическая (P, C, I, F)	$222\,(D_2)$	$\underline{P222}\,(D_2^1)$, $P222_1\,(D_2^2)$, $P2_12_12\,(D_2^3)$, $P2_12_12_1\,(D_2^4)$, $C222_1\,(D_2^5)$, $\underline{C222}\,(D_2^6)$, $\underline{F222}\,(D_2^7)$, $\underline{I222}\,(D_2^8)$, $I2_12_12_1\,(D_2^9)$
	$mm2\,(C_{2v})$	$\underline{Pmm2}\,(C_{2v}^1)$, $Pmc2_1\,(C_{2v}^2)$, $Pcc2\,(C_{2v}^3)Pma2_1\,(C_{2v}^4)$, $Pca2_1\,(C_{2v}^5)$, $Pnc2_1\,(C_{2v}^6)$, $Pmn2_1\,(C_{2v}^7)$, $Pba2\,(C_{2v}^8)$, $Pna2_1\,(C_{2v}^9)$, $Pnn2\,(C_{2v}^{10})$, $Pnn2\,(C_{2v}^{10})$, $\underline{Cmm2}\,(C_{2v}^{11})$, $Cmc2_1\,(C_{2v}^{12})$, $Ccc2\,(C_{2v}^{13})$, $\underline{Amm2}\,(C_{2v}^{14})$, $Aem2\,(C_{2v}^{15})$, $Ama2\,(C_{2v}^{16})$, $Aea2\,(C_{2v}^{17})$, $\underline{Fmm2}\,(C_{2v}^{18})$, $Fdd2\,(C_{2v}^{19})$, $\underline{Imm2}\,(C_{2v}^{20})$, $Iba2\,(C_{2v}^{21})$, $Ima2\,(C_{2v}^{22})$
	$mmm\,(D_{2h})$	$\underline{Pmmm}\,(D_{2h}^1)$, $Pnnn\,(D_{2h}^2)$, $Pccm\,(D_{2h}^3)$, $Pban\,(D_{2h}^4)$, $Pmma\,(D_{2h}^5)$, $Pnna\,(D_{2h}^6)$, $Pmna\,(D_{2h}^7)$, $Pcca\,(D_{2h}^8)$, $Pbam\,(D_{2h}^9)$, $Pccn\,(D_{2h}^{10})$, $Pbcm\,(D_{2h}^{11})$, $Pnnm\,(D_{2h}^{12})$, $Pmmn\,(D_{2h}^{13})$, $Pbcn\,(D_{2h}^{14})$, $Pbca\,(D_{2h}^{15})$, $Pnma\,(D_{2h}^{16})$, $Cmcm\,(D_{2h}^{17})$, $Cmce\,(D_{2h}^{18})$, $\underline{Cmmm}\,(D_{2h}^{19})$, $Cccm\,(D_{2h}^{20})$, $Cmme\,(D_{2h}^{21})$, $Ccce\,(D_{2h}^{22})$, $\underline{Fmmm}\,(D_{2h}^{23})$, $Fddd\,(D_{2h}^{24})$, $\underline{Immm}\,(D_{2h}^{25})$, $Ibam\,(D_{2h}^{26})$, $Ibca\,(D_{2h}^{27})$, $Imma\,(D_{2h}^{28})$

Тетрагональная (P, I)	$4\,(C_4)$	$\underline{P4}\,(C_4^1)$, $P4_1\,(C_4^2)$, $P4_2\,(C_4^3)$, $P4_3\,(C_3^4)$, $\underline{I4}\,(C_4^5)$, $I4_1\,(C_4^6)$
	$\bar{4}\,(S_4)$	$\underline{P\bar{4}}\,(S_4^1)$, $\underline{I\bar{4}}\,(S_4^2)$
	$4/m\,(C_{4h})$	$\underline{P4/m}\,(C_{4h}^1)$, $P4_2/m\,(C_{4h}^2)$, $P4/n\,(C_{4h}^3)$, $P4_2/n\,(C_{4h}^4)$, $\underline{I4/m}\,(C_{4h}^5)$, $I4_1/a\,(C_{4h}^6)$
	$422\,(D_4)$	$\underline{P422}\,(D_4^1)$, $P42_12\,(D_4^2)$, $P4_122\,(D_4^3)$, $P4_12_12\,(D_4^4)$, $P4_222\,(D_4^5)$, $P4_22_12\,(D_4^6)$, $P4_322\,(D_4^7)$, $P4_32_12\,(D_4^8)$, $\underline{I422}\,(D_4^9)$, $I4_122\,(D_4^{10})$
	$4mm\,(C_{4v})$	$\underline{P4mm}\,(C_{4v}^1)$, $P4bm\,(C_{4v}^2)$, $P4_2cm\,(C_{4v}^3)$, $P4_2mn\,(C_{4v}^4)$, $P4cc\,(C_{4v}^5)$, $P4nc\,(C_{4v}^6)$, $P4_2mc\,(C_{4v}^7)$, $P4_2bc\,(C_{4v}^8)$, $\underline{I4mm}\,(C_{4v}^9)$, $I4cm\,(C_{4v}^{10})$, $I4_1md\,(C_{4v}^{11})$, $I4_1cd\,(C_{4v}^{12})$
	$\bar{4}2m\,(D_{2d})$	$\underline{P\bar{4}2m}\,(D_{2d}^1)$, $P\bar{4}2c\,(D_{2d}^2)$, $P\bar{4}2_1m\,(D_{2d}^3)$, $P\bar{4}2_1c\,(D_{2d}^4)$, $\underline{P\bar{4}m2}\,(D_{2d}^5)$, $P\bar{4}c2\,(D_{2d}^6)$, $P\bar{4}b2\,(D_{2d}^7)$, $P\bar{4}n2\,(D_{2d}^8)$, $\underline{I\bar{4}m2}\,(D_{2d}^9)$, $I\bar{4}c2\,(D_{2d}^{10})$, $\underline{I\bar{4}2m}\,(D_{2d}^{11})$, $I\bar{4}2d\,(D_{2d}^{12})$
	$4/mmm(D_{4h})$	$\underline{P4/mmm}\,(D_{4h}^1)$, $P4/mcc\,(D_{4h}^2)$, $P4/nbm\,(D_{4h}^3)$, $P4/nnc\,(D_{4h}^4)$, $P4/mbm\,(D_{4h}^5)$, $P4/mnc\,(D_{4h}^6)$, $P4/nmm\,(D_{4h}^7)$, $P4/ncc\,(D_{4h}^8)$, $P4_2/mmc\,(D_{4h}^9)$, $P4_2/mcm\,(D_{4h}^{10})$, $P4_2/nbc\,(D_{4h}^{11})$, $P4_2/nnm\,(D_{4h}^{12})$, $P4_2/mbc\,(D_{4h}^{13})$, $P4_2/mnm\,(D_{4h}^{14})$, $P4_2/nmc\,(D_{4h}^{15})$, $P4_2/ncm\,(D_{4h}^{16})$, $\underline{I4/mmm}\,(D_{4h}^{17})$, $I4/mcm\,(D_{4h}^{18})$, $I4_1/amd\,(D_{4h}^{19})$, $I4_1/acd\,(D_{4h}^{20})$
Тригональная (P, R)	$3\,(C_3)$	$\underline{P3}\,(C_3^1)$, $P3_1\,(C_3^2)$, $P3_2\,(C_3^3)$, $\underline{R3}\,(C_3^4)$
	$\bar{3}\,(S_6)$	$\underline{P\bar{3}}\,(C_{3i}^1)$, $\underline{R\bar{3}}\,(C_{3i}^2)$
	$32\,(D_3)$	$\underline{P312}\,(D_3^1)$, $\underline{P321}\,(D_3^2)$, $P3_112\,(D_3^3)$, $P3_121\,(D_3^4)$, $P3_212\,(D_3^5)$, $P3_221\,(D_3^6)$, $\underline{R32}\,(D_3^7)$
	$3m\,(C_{3v})$	$\underline{P3m1}\,(C_{3v}^1)$, $P31m(C_{3v}^2)$, $P\bar{3}c1\,(C_{3v}^3)$, $P31c\,(C_{3v}^4)$, $\underline{R3m}\,(C_{3v}^5)$, $R3c\,(C_{3v}^6)$
	$\bar{3}m(D_{3d})$	$\underline{P\bar{3}1m}\,(D_{3d}^1)$, $P\bar{3}1c\,(D_{3d}^2)$, $\underline{P\bar{3}m1}\,(D_{3d}^3)$, $P\bar{3}c1\,(D_{3d}^4)$, $\underline{R\bar{3}m}\,(D_{3d}^5)$, $R\bar{3}c\,(D_{3d}^6)$
Гексагональная (P)	$6\,(C_6)$	$\underline{P6}\,(C_6^1)$, $P6_1\,(C_6^2)$, $P6_5\,(C_6^3)$, $P6_2\,(C_6^4)$, $P6_4\,(C_6^5)$, $P6_3\,(C_6^6)$

Окончание табл. 2.5

Сингония и решетка Браве	Кристаллический класс	Пространственная группа*
	$\bar{6}\,(C_{3h})$	$\underline{P\bar{6}}\,(C_{3h}^1)$
	$6/m\,(C_{6h})$	$\underline{P6/m}\,(C_{6h}^1)$, $P6_3/m\,(C_{6h}^2)$
	$622\,(D_6)$	$\underline{P622}\,(D_6^1)$, $P6_122\,(D_6^2)$, $P6_522\,(D_6^3)$, $P6_222\,(D_6^4)$, $P6_422\,(D_6^5)$, $P6_322\,(D_6^6)$
	$6mm\,(C_{6v})$	$\underline{P6mm}\,(C_{6v}^1)$, $P6cc\,(C_{6v}^2)$, $P6_3cm\,(C_{6v}^3)$, $P6_3mc\,(C_{6v}^4)$
	$\bar{6}m2\,(D_{3h})$	$\underline{P\bar{6}m2}\,(D_{3h}^1)$, $P\bar{6}c2\,(D_{3h}^2)$, $\underline{P\bar{6}2m}\,(D_{3h}^3)$, $P\bar{6}2c\,(D_{3h}^4)$
	$6/mmm\,(D_{6h})$	$\underline{P6/mmm}\,(D_{6h}^1)$, $P6/mcc\,(D_{6h}^2)$, $P6_3/mcm\,(D_{6h}^3)$, $P6_3/mmc\,(D_{6h}^4)$
Кубическая	$23\,(T)$	$\underline{P23}\,(T^1)$, $\underline{F23}\,(T^2)$, $\underline{I23}\,(T^3)$, $P2_13\,(T^4)$, $I2_13\,(T^5)$
(P, I, F)	$m\bar{3}(T_h)$	$\underline{Pm\bar{3}}\,(T_h^1)$, $Pn\bar{3}\,(T_h^2)$, $\underline{Fm\bar{3}}\,(T_h^3)$, $Fd\bar{3}\,(T_h^4)$, $\underline{Im\bar{3}}\,(T_h^5)$, $Pa\bar{3}\,(T_h^6)$, $Ia\bar{3}\,(T_h^7)$
	$432\,(O)$	$\underline{P432}\,(O^1)$, $P4_232\,(O^2)$, $\underline{F432}\,(O^3)$, $F4_132\,(O^4)$, $\underline{I432}\,(O^5)$, $P4_332\,(O^6)$, $P4_132\,(O^7)$, $I4_132\,(O^8)$
	$\bar{4}3m\,(T_d)$	$\underline{P\bar{4}3m}\,(T_d^1)$, $\underline{F\bar{4}3m}\,(T_d^2)$, $\underline{I\bar{4}3m}\,(T_d^3)$, $P\bar{4}3n\,(T_d^4)$, $F\bar{4}3c\,(T_d^5)$, $I\bar{4}3d\,(T_d^6)$
	$m\bar{3}m\,(O_h)$	$\underline{Pm\bar{3}m}\,(O_h^1)$, $Pn\bar{3}n\,(O_h^2)$, $Pm\bar{3}n\,(O_h^3)$, $Pn\bar{3}m\,(O_h^4)$, $\underline{Fm\bar{3}m}\,(O_h^5)$, $Fm\bar{3}c\,(O_h^6)$, $Fd3m\,(O_h^7)$, $Fd3c\,(O_h^8)$, $\underline{Im\bar{3}m}\,(O_h^9)$, $Ia\bar{3}d\,(O_h^{10})$

*В скобках даны обозначения по Шенфлису; подчеркнуты симморфные группы.

В системе Шенфлиса, менее удобной для описания трансляционной симметрии, пространственной группе соответствует точечная группа ее кристаллического класса с верхним индексом, обозначающим (однажды установленный) порядковый номер данной группы в классе (например, $P2_1/c = C_{2h}^5$, $Pnma = D_{2h}^{16}$, $Im\bar{3}m = O_h^9$). В число пространственных групп входят 17 плоских групп, не имеющих горизонтальных элементов симметрии.

Для геометрического вывода пространственных (федоровских) групп проводят перебор сочетаний трансляций в решетке Браве с операциями всех кристаллографических групп из ее сингонии и определение всех возможных подгрупп на основе полученных элементов симметрии. Можно показать, что из всех 230 пространственных групп лишь 73 отвечают симметриям трехмерных решеток (симморфные пространственные группы).

Типичные сочетания «открытых» и «закрытых» элементов симметрии в пространственных группах показаны на рис. 2.25, 2.26. Так, например, при действии трансляции $\vec{\tau}$ на элементы симметрии второго порядка (центр $\bar{1}$; ось 2 или плоскость m, перпендикулярные направлению $\vec{\tau}$) эти элементы переносятся на $(n/2)\vec{\tau}$, где n — целое число (рис. 2.25, *а*, *б*). Трансляциями осей 3, 4 и 6 порядков на период ячейки порождаются новые оси, связывающие полученные элементы симметрии; при этом в слу-

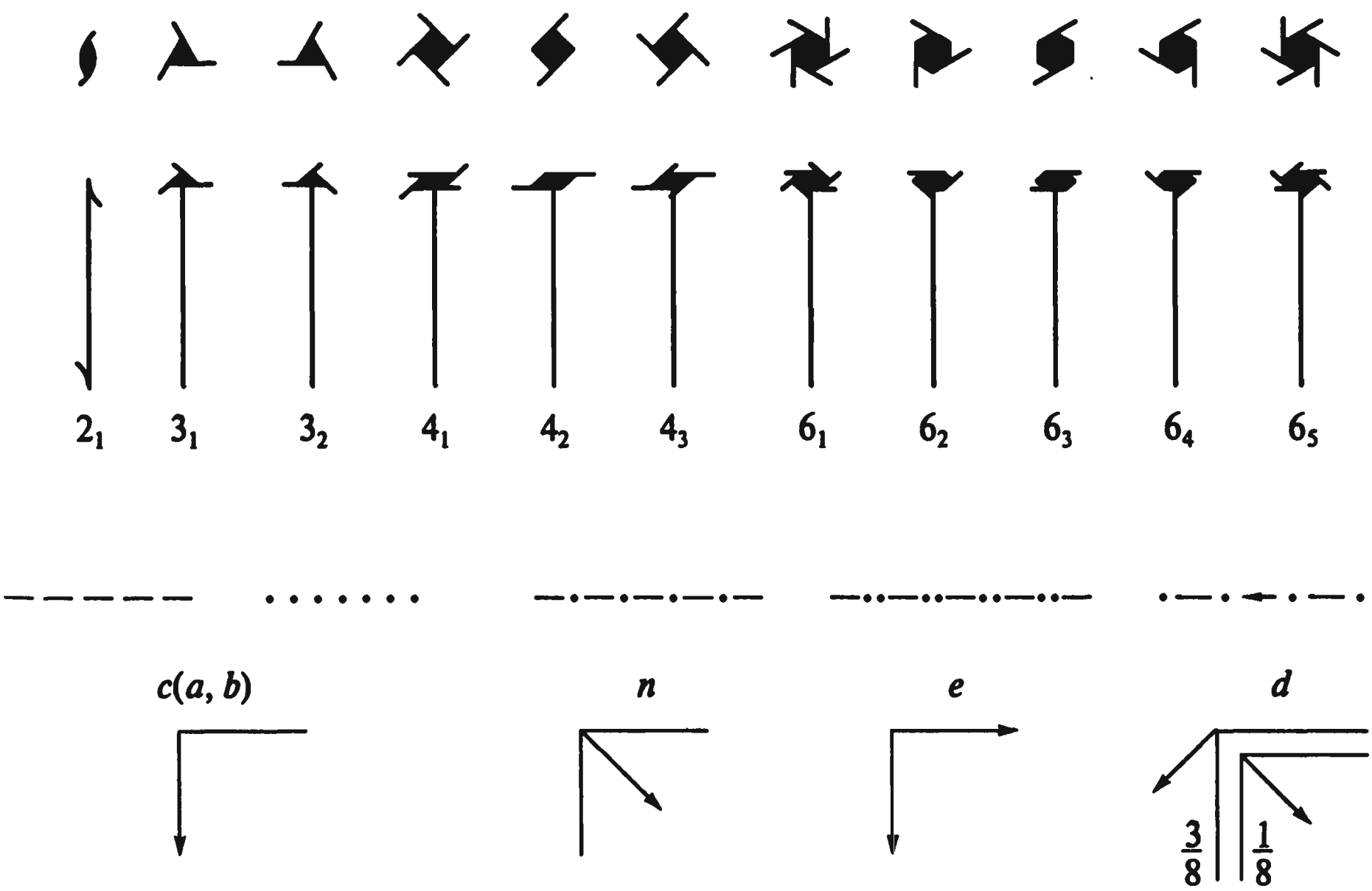
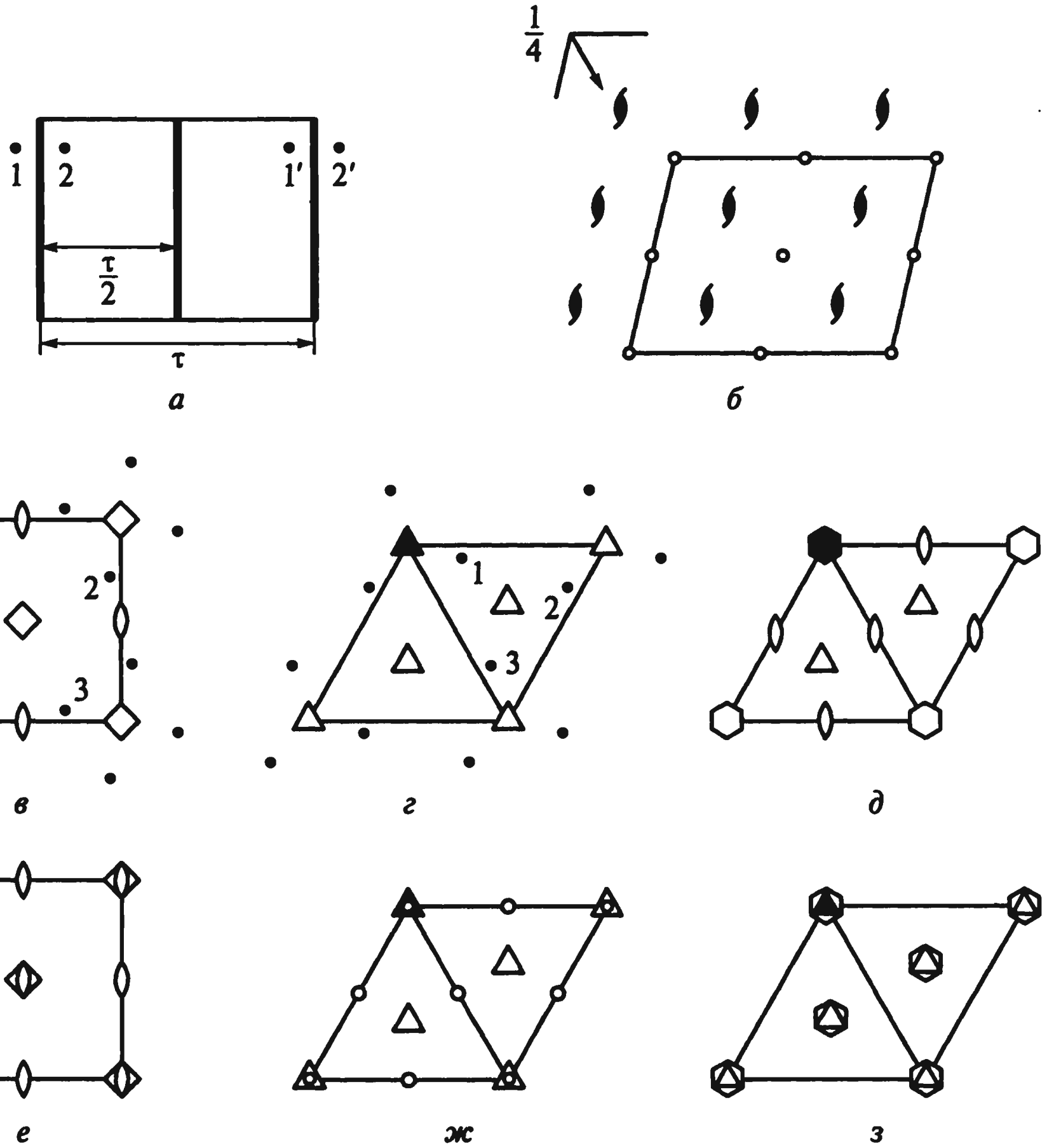


Рис. 2.24. Обозначения открытых элементов симметрии по международной системе в разных проекциях



а *б* *в* *г* *д* *е* *ж* *з*

Рис. 2.25. Примеры взаимодействия закрытых элементов симметрии с трансляциями [40]:
а — Pm; *б* — $P2_1/n$; *в* — $P4$; *г* — $P3$; *д* — $P6$; *е* — $P\bar{4}$; *ж* — $P\bar{3}$; *з* — $P\bar{6}$ (показаны системы эквивалентных точек; «порождающий» элемент зачернен)

чае осей 4 и 6 на половинах трансляций $\vec{\tau}_i/2$ появляются оси 2 (рис. 2.25, *в* — *д*).

Похожее разделение операций, отвечающих элементу симметрии, происходит и при переносе инверсионных осей (рис. 2.25, *е*, *ж*), а также при взаимодействии открытых элементов симметрии с трансляциями в перпендикулярном направлении (рис. 2.26, *а* — *г*). Пересечение элементов симметрии 2-го порядка под углом $2\pi/N$ в зависимости от их вида дает поворотную либо винтовую ось порядка N, при наличии в группе перпендикулярного переноса сдвинутые в сторону от линии пересечения; скрещивающиеся поворотные оси порождают винтовую ось и т. д.

Подробные сведения о 230 пространственных группах вместе с графическим изображением их элементов симметрии содер-

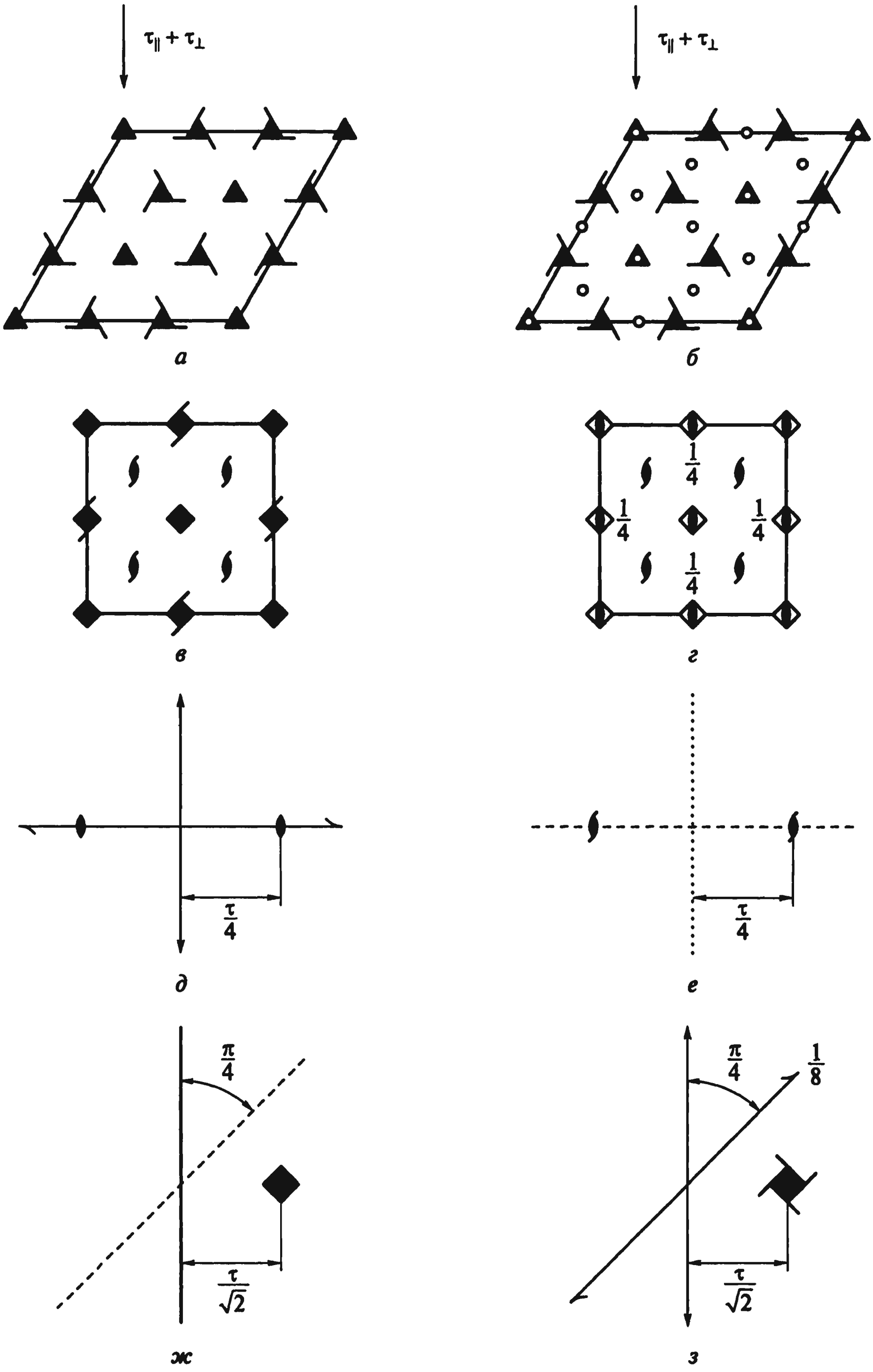


Рис. 2.26. Примеры взаимодействий винтовых осей с трансляциями ($R3$ ($а$), $R\bar{3}$ ($б$), $I4$ ($в$), $I\bar{4}$ ($г$)) и разных сочетаний элементов симметрии 2-го порядка ($д-з$) [40]

жатся в справочных таблицах Международного союза кристаллографов [118]. Графический вывод пространственных групп изложен в руководствах по геометрической кристаллографии (см., например, [36]).

Упражнение 2.8. Вывести все элементы симметрии групп $I\bar{4}m2$ и $I\bar{4}2m$.

Хотя все 32 точечные кристаллографические группы являются фактор-группами пространственных групп по нормальным подгруппам трансляций, обратное построение полупрямых произведений $T \leftthreetimes K$ трехмерной группы трансляций T с 32 кристаллографическими группами K дает лишь 73 симморфные пространственные группы (подчеркнуты в табл. 2.3). Остальные 146 *несимморфных* групп являются подгруппами симморфных. Аналогично несимморфным плоским группам их получают, заменяя в симморфных группах плоскости симметрии и поворотные оси соответствующими им открытыми элементами: плоскостями скользящего отражения и винтовыми осями. Как и в двумерном случае, среди пространственных групп имеются пары с геометрически различными сочетаниями трансляций и одинаковых элементов симметрии (например, $P31m$ и $P3m1$, $P4_2mc$ и $P4_2cm$, и др.).

2.12. ДРУГИЕ ГРУППЫ G_m^n

Точечной симметрии в одномерном пространстве отвечают две группы G_0^1: 1 (отсутствие симметрий) и $\bar{1}$ (инверсия в начале координат: $\bar{1}x = -x$). Выше были рассмотрены двумерные (G_0^2) и трехмерные (G_0^3) точечные группы, а также плоские группы G_2^2 и пространственные группы G_3^3. Кратко перечислим остальные группы с $n \leqslant 3$.

Группы G_1^1. Это подгруппы одномерной решетки с трансляцией τ, именно, две группы: $\tau 1$ и $\tau\bar{1}$.

Группы G_1^2. Добавлением к G_1^1 зеркального отражения m и скользящего отражения g выводят семь групп симметрий бордюров (рис. 2.27). Первую позицию в символе группы занимает центр симметрии, вторую — отражение от линии, перпендикулярной трансляции, третью — отражение от линии, расположенной вдоль трансляции. Инверсию в точке на плоскости, как и в плоских группах, изображают перпендикулярной осью 2. Элементарной ячейкой группы на плоскости служит бесконечная полоса шириной τ, содержащая все элементы симметрии. Все семь бордюрных групп кристаллографические, это подгруппы плоских групп G_2^2.

Цилиндрические группы G_1^3. Эти группы можно вывести из групп G_0^3 низшей и средней категорий (см. п. 1.10) добавлением трансляций τ вдоль оси Oz. Их элементарными ячейками являются бесконечные слои толщиной τ, перпендикулярные направлению z. Группы подразделяются на круговые (симморфные), содержащие только трансляции одномерной решетки, и спиральные (их подгруппы), в которых имеются винтовые повороты вокруг оси z и(или) плоскости скользящего отражения вдоль нее. Главная винтовая ось N_1 в спиральной группе может иметь произвольный порядок (например: 7_1); ось N_{N-1} при этом отвечает энантиоморфной спирали (7_6).

В отличие от пространственных групп G_3^3 цилиндрические группы могут содержать любые рациональные винтовые повороты N_p на угол $2\pi p/N$ вокруг оси с однократной трансляцией на τ/N. Числу p в них соответствует количество оборотов спирали внутри элементарной ячейки (рис. 2.28); q кратный винтовой поворот N_1^q с целым $q > 1$ вокруг единственной оси N-го порядка при этом эквивалентен N_q с трансляцией $q\tau/N$.

Увеличение порядка N винтовой оси дает в пределе группу бесконечного порядка ∞_s, отвечающую симметрии круговой спирали с шагом s. Иррациональные винтовые повороты, не имеющие периода повторяемости вдоль оси цилиндра, пред-

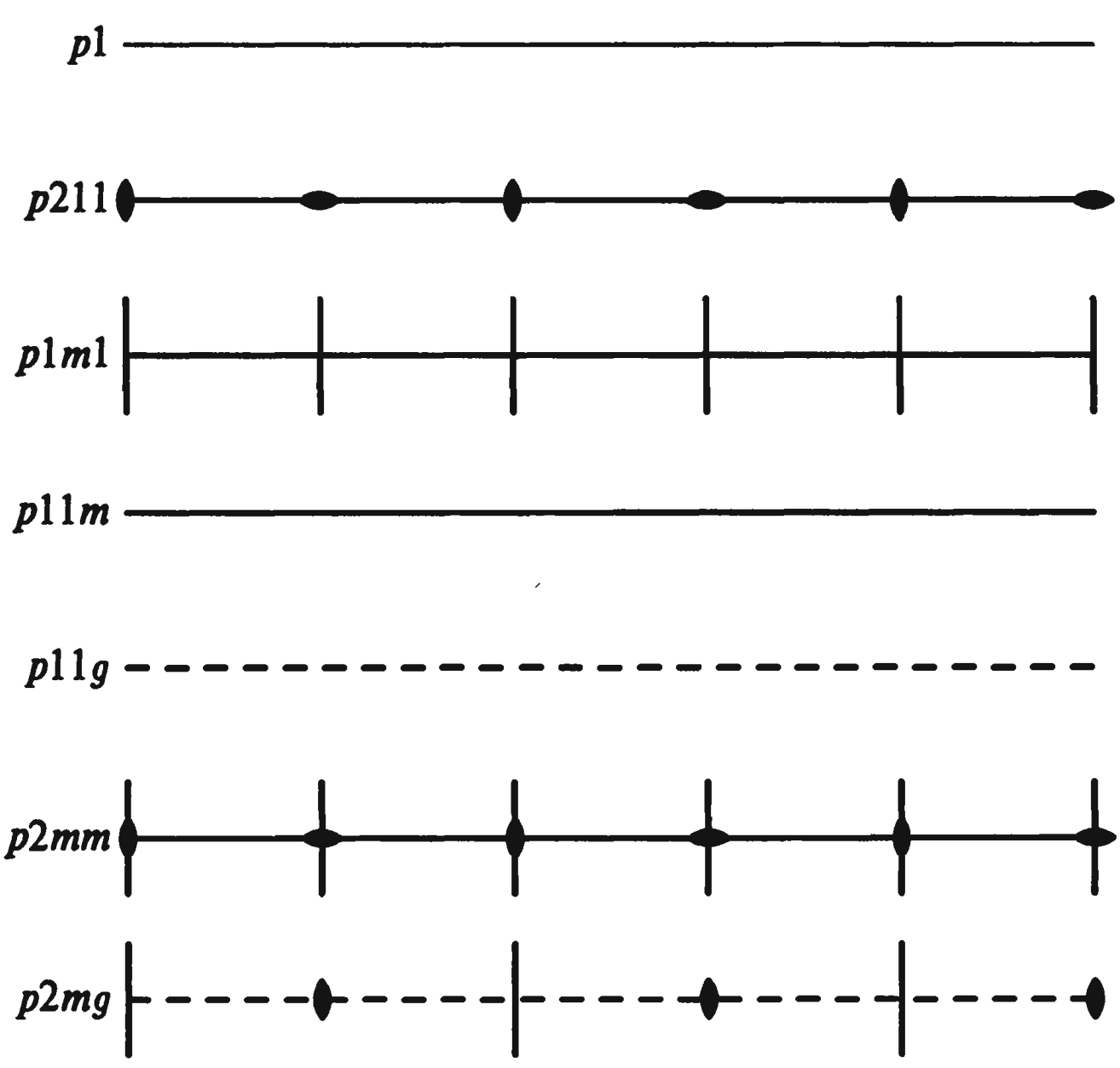


Рис. 2.27. Группы симметрий бордюров G_1^2

ставляют пример некристаллографической симметрии в одном измерении.

Бесконечное число групп G_1^3 разделяется на 15 семейств. Радиальная проекция правильной системы точек в ячейках этих групп на боковую поверхность цилиндра с центральной осью z, развернутая по углу ϕ, образует двумерную решетку, а для $z \in [0; 2\tau]$ — бордюр с периодом повторяемости $\phi = 2\pi$ (рис. 2.28, *в*). Полупрямые произведения $G_1^3 = G_1^1 \leftthreetimes G_0^3$ двух одномерных решеток $\tau 1$ и $\tau\bar{1}$ на точечные группы низшей и средней категорий (см. подразд. 1.10) дают семь семейств симморфных круговых групп с трансляцией. Остальные семейства образованы подгруппами симморфных групп.

В табл. 2.6 перечислены 75 кристаллографических групп цилиндрической симметрии. Группы G_1^3 соответствуют симметрии спиральных полимерных цепей и других цилиндрических структур — в частности, углеродных нанотрубок, при круговой симметрии (свертывании по направлениям $(n, 0)$ и (n, n)) обладающих металлическими свойствами, а при винтовой — полупроводниковыми (рис. 2.29).

Группы слоев G_2^3. Эти группы выводят из 17 плоских групп G_2^2 (см. рис. 2.22) добавлением зеркального отражения относительно координатной плоскости xy. Их обозначения по международной системе соответствуют плоским группам: в первой

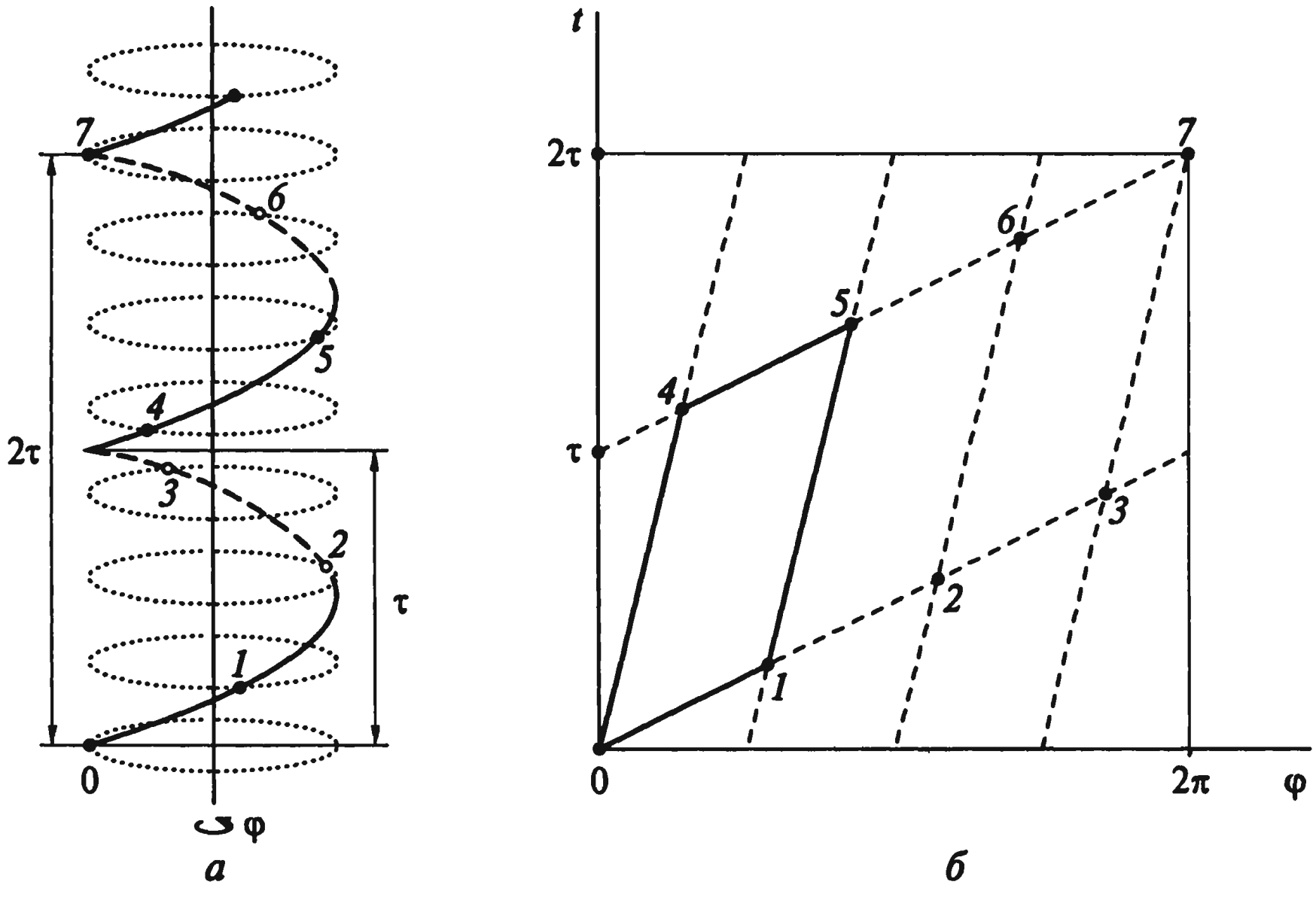


Рис. 2.28. Система точек цилиндрической симметрии $(7/2)_1^2$ (*а*) и проекция эквивалентных позиций ее группы на боковую поверхность кругового цилиндра (*б*). Показана элементарная ячейка проекции

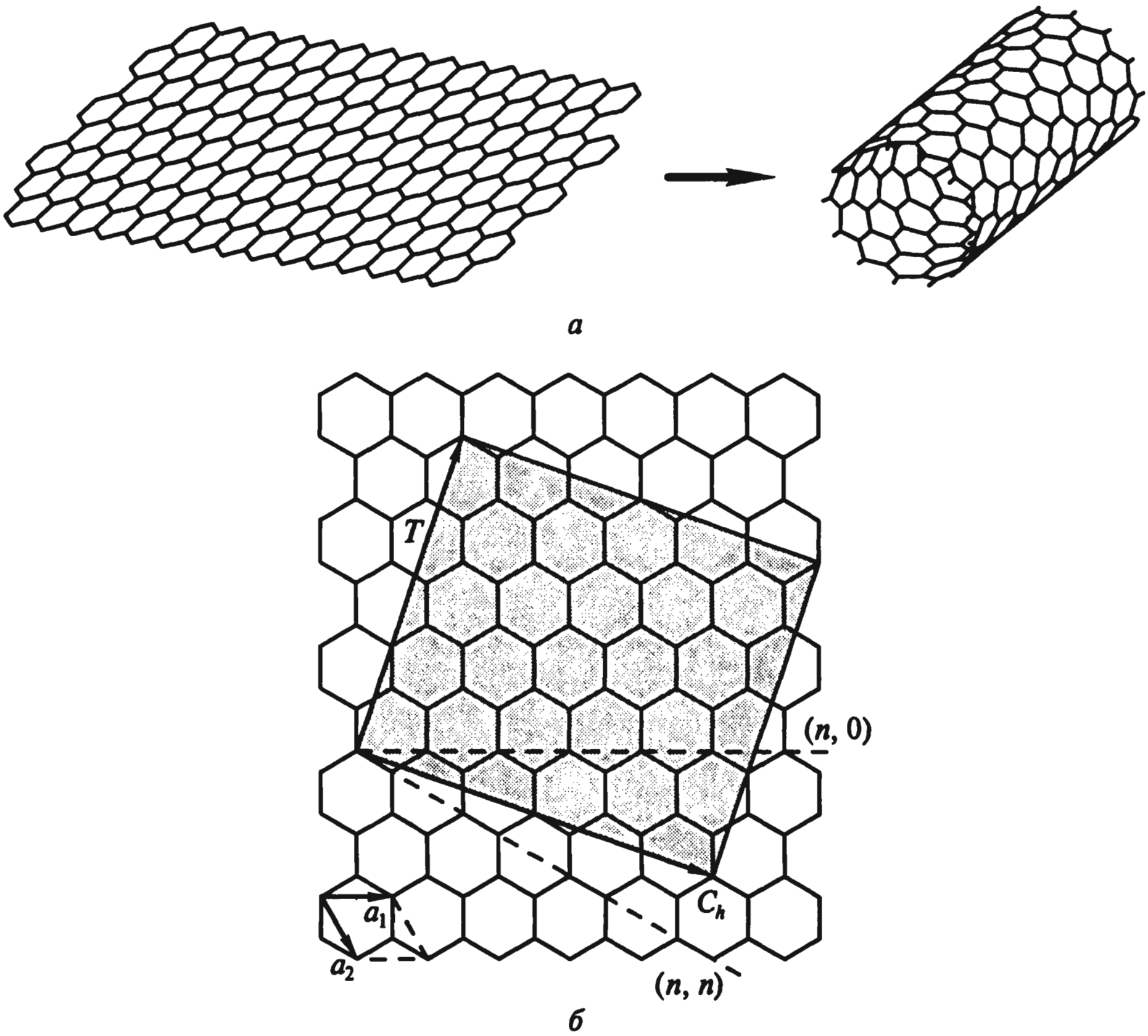
Таблица 2.6

Кристаллографические цилиндрические группы G_1^3 [115]

Класс	Группа					
1	1					
$\bar{1}$	$\bar{1}$					
2	2	2_1				
3	3	3_1	3_2			
4	4	4_1	4_3	4_2		
6	6	6_1	6_5	6_2	6_4	6_3
$\bar{3}$	$\bar{3}$					
$\bar{4}$	$\bar{4}$					
$\bar{6}$	$\bar{6}$					
12	12					
$1m$	$1m$	$1c$				
m	m					
222	222	2_122				
32	32	3_12	3_22			
422	422	4_122	4_322	4_222		
622	622	6_122	6_522	6_222	6_422	6_322
$2/m$	$2/m$	$2_1/m$				
$4/m$	$4/m$	$4_2/m$				
$6/m$	$6/m$	$6_3/m$				
$\bar{1}2/m$	$\bar{1}2/m$	$\bar{1}2/c$				
$\bar{3}2/m$	$\bar{3}2/m$	$\bar{3}2/c$				
$\bar{4}m2$	$\bar{4}m2$	$\bar{4}c2$				
$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	$\bar{6}c2$				
$2mm$	$2mm$	2_1mc	$2cc$			
$m2m$	$m2m$	$m2c$				
$3m$	$3m$	$3c$				
$4mm$	$4mm$	4_2mc	$4cc$			
$6mm$	$6mm$	6_3mc	$6cc$			
$2/mmm$	$2/mmm$	$2_1/mmc$	$2/mcc$			
$4/mmm$	$4/mmm$	$4_2/mmc$	$4/mcc$			
$6/mmm$	$6/mmm$	$6_3/mmc$	$6/mcc$			

позиции указывают тип решетки (p или c), в остальных позициях — элементы симметрии по трем кристаллографическим направлениям (для тетрагональных и гексагональных слоев — начиная с оси z). Бесконечная элементарная ячейка в группах G_2^3 проецируется на горизонтальную плоскость xy как параллелограмм повторяемости с параметрами (a, b, α) и делится ею на «верхнюю» и «нижнюю» половины.

«Верх» и «низ» относительно координатной плоскости xy, т. е. знак координаты z, графически можно изобразить белым и черным цветом. Произведениям $G_2^2 \times 1$ соответствуют 17 «одноцвет-



а *б*

Рис. 2.29. Свертывание атомного слоя графита в углеродную наноструктуру (a) и элементарная ячейка (T, C_h) на цилиндрической поверхности хиральной трубки ($б$); (a_1, a_2) — элементарная ячейка графитового атомного слоя (См. *Odom T. W et al.* // J. Phys. Chem. B. 2000. V. 104. P. 2794)

ных» групп, не меняющих местами верхнее и нижнее полупространства. Симметрия m относительно плоскости xy порождает 17 «серых» групп $G_2^2 \times m$, в которых эти полупространства эквивалентны.

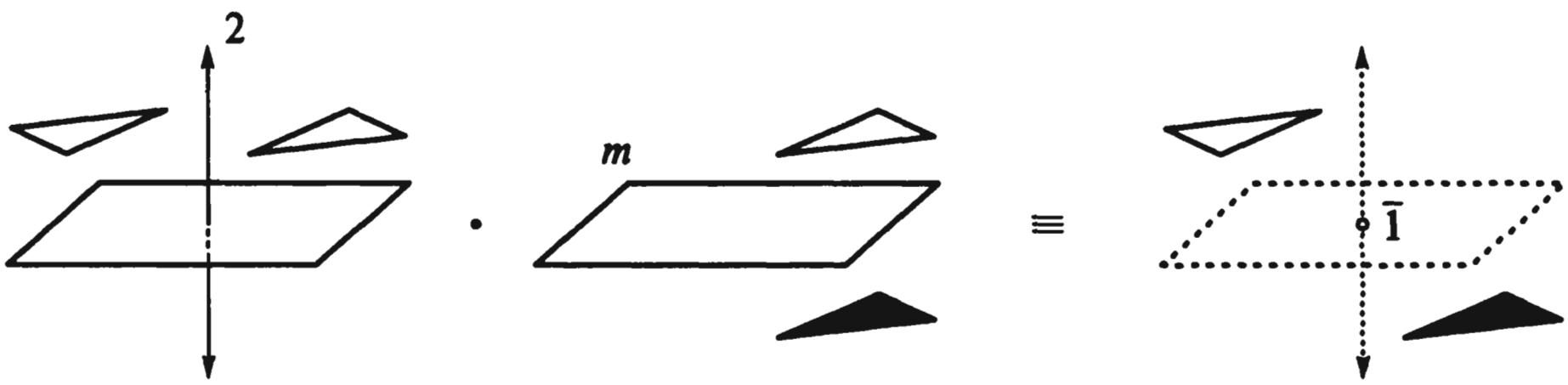


Рис. 2.30. Инверсия $\bar{1}$ как «черно-белая» операция антисимметрии в группах слоев G_2^3

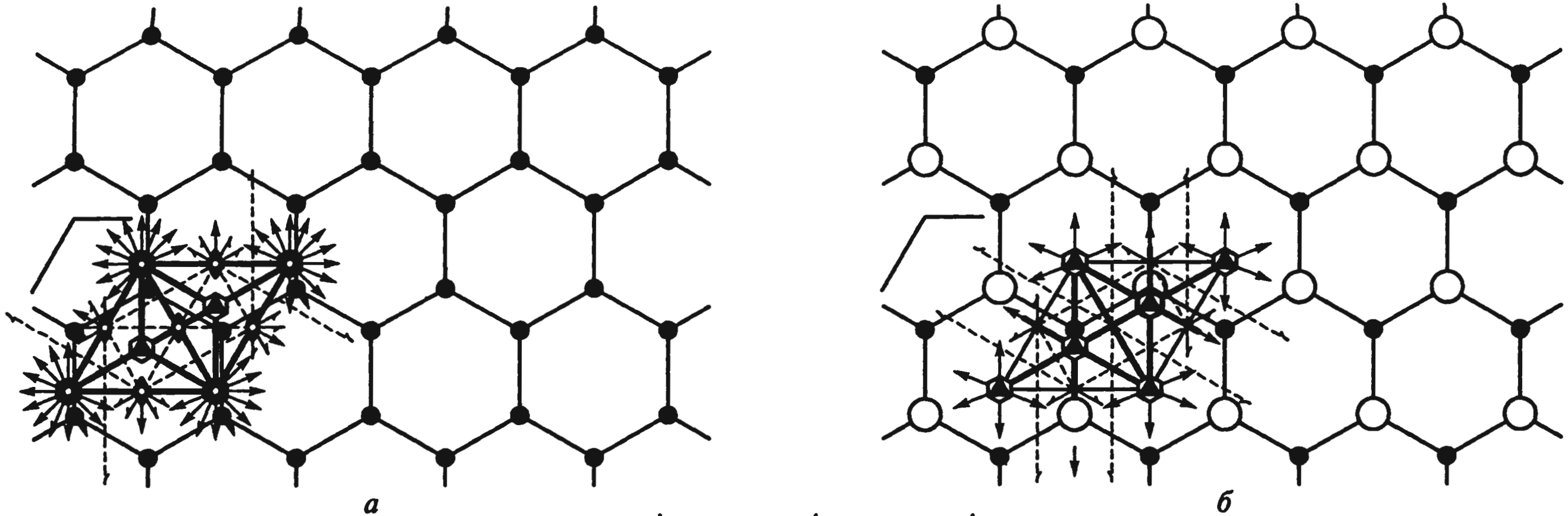


Рис. 2.31. Примеры симметрии плоских (*а* — графит, $p63/mmm$; *б* — нитрид бора, $p\bar{6}m2$) и гофрированных (*в* — фторид графита, $p\bar{3}m1$) гексагональных атомных слоев

Группы слоев G_2^3

Сингония	Класс	Группа*
Косоугольная P	1	$\underline{p1}$
	2	$\underline{p112}$
	m	$\underline{p11m}$, $p11b$
	$2/m$	$\underline{p112/m}$, $p112/b$
	$\bar{1}$	$\underline{p\bar{1}}$
Ортогональная P	$1m$	$\underline{p1m1}$, $p1b1$
	12	$\underline{p121}$, $p12_11$
	222	$\underline{p222}$, $p222_1$, $p22_12_1$
	$2/m$	$\underline{p12/m1}$, $p12/b1$, $p12_1/m1$, $p12_1/b1$
	$2mm$	$\underline{p2mm}$, $p2bm$, $p2ba$
	$m2m$	$\underline{pm2m}$, $pm2_1a$, $pa2_1m$, $pa2a$, $pn2_1m$, $pn2a$, $pb2m$, $pb2_1a$
	mmm	$\underline{pmmm}$, $pmbm$, $pmba$, $pbmm$, $pbma$, $pbbm$, $pbba$, $pnmm$, $pnbm$, $pnba$
Ортогональная C	$1m$	$\underline{c1m1}$
	12	$\underline{c121}$
	222	$\underline{c222}$
	$2/m$	$\underline{c12/m1}$
	$2mm$	$\underline{c2mm}$
	$m2m$	$\underline{cm2m}$, $ce2m$**
	mmm	$\underline{cmmm}$, $cemm$
Квадратная P	4	$\underline{p4}$
	$\bar{4}$	$\underline{p\bar{4}}$
	422	$\underline{p422}$, $p42_12$
	$4/m$	$\underline{p4/m}$, $p4/n$
	$4mm$	$\underline{p4mm}$, $p4em$
	$\bar{4}m2$	$\underline{p\bar{4}m2}$, $p\bar{4}e2$, $p\bar{4}2m$, $p\bar{4}2_1m$
	$4/mmm$	$\underline{p4/mmm}$, $p4/mem$, $p4/nmm$, $p4/nem$
Гексагональная P	3	$\underline{p3}$
	$\bar{3}$	$\underline{p\bar{3}}$
	32	$\underline{p321}$, $\underline{p312}$
	$3m$	$\underline{p3m1}$, $\underline{p31m}$
	$\bar{3}m$	$\underline{p\bar{3}m1}$, $\underline{p\bar{3}1m}$
	6	$\underline{p6}$
	$\bar{6}$	$\underline{p\bar{6}}$
	622	$\underline{p622}$
	$6/m$	$\underline{p6/m}$
	$6mmm$	$\underline{p6mmm}$
	$\bar{6}m2$	$\underline{p\bar{6}m2}$, $\underline{p\bar{6}2m}$
	$6/mmm$	$\underline{p6/mmm}$

*Подчеркнуты симморфные группы.

**Плоскость e в литературе также обозначают g или b.

В 46 «черно-белых» подгруппах «серых» групп разноцветные точки над и под плоскостью xy связаны лежащими в ней осями 2, 2_1 и скользящими отражениями, а точки одного цвета — вертикальными осями и плоскостями симметрии. Композиция отражения, меняющего цвет (знак z) точки, и поворота вокруг оси 2, сохраняющего цвет, порождает черно-белую операцию *антисимметрии* (инверсии) $1' = \bar{1}$ (рис. 2.30). Все 80 групп G_2^3, перечисленные в табл. 2.7, являются кристаллографическими. Примеры различной симметрии гексагональных моноатомных слоев в графите ($p6/mmm$), нитриде бора BN ($p\bar{6}2m$) и фториде графита $(CF)_n$ ($p\bar{3}m1$) показаны на рис. 2.31.

2.13. ЦВЕТНАЯ СИММЕТРИЯ И ПОДГРУППЫ G_4^4

Группы антисимметрии G_3^4. По аналогии с выводом групп G_2^3 добавлением двузначной операции антисимметрии к трехмерным пространственным группам G_3^3 можно получить группы G_3^4 дискретных преобразований трехмерного евклидова пространства (x_1, x_2, x_3), дополненного четвертой координатой $x_4 = \pm 1$. Координата x_4 может отражать физически измеримый признак (*нагрузку*) позиций в реальных кристаллах: природу атомов в бинарных соединениях (NaCl, CdS и т. д.), направление спина в магнитных решетках (α-Fe, MnF_2) и др.

Как и изменение знака координаты z при отражении в горизонтальной плоскости для групп G_2^3, операции групп G_3^4 в трехмерном пространстве, включающие антисимметрию $1'x_4 = -x_4$, графически изображают черно-белыми рисунками. Группы антисимметрии G_3^4 также обозначают $G_3^{3,1}$ (в этом случае группы слоев обозначаются $G_2^{2,1}$).

Операции с участием антисимметрии в символике Германа — Могена обозначаются штриховыми индексами. Из 32 трехмерных кристаллографических групп таким образом можно вывести 122 точечные группы антисимметрии, в том числе 32 «серые» группы, полносимметричные относительно операции $1'$, 32 одноцветные (полярные) группы без операции антисимметрии и 58 черно-белых групп. Порядок «серой» точечной группы $G' = G_0^3 \times 1'$ вдвое выше порядка соответствующих одноцветной и черно-белых групп, которые являются ее подгруппами. Например, из точечной группы mmm порядка 8 выводится «серая» точечная группа $mmm \times 1' \supset mmm$ порядка 16, три черно-белые подгруппы которой отвечают умножению на $1'$ всех элементов симметрии, не входящих в три нормальные подгруппы (222, $mm2$ и $2/m$) исходной группы mmm (табл. 2.8, рис. 2.32).

Из 122 кристаллографических точечных групп антисимметрии можно вывести 1651 пространственных (шубниковских) двуцветных групп $G_3^{3,1}$ (рис. 2.33). В их состав входят 230 полярных одноцветных, 230 симморфных «серых» и 1191 черно-белых групп.

Обозначения групп $G_3^{3,1}$ в международной символике строят на основе добавления штрихов и подстрочных индексов, указывающих направление *антитрансляций* $\vec{\tau} \cdot 1'$ (так, группа $P2'$ содержит антиповорот $2 \cdot 1'$, группа P_a2 — антитрансляцию вдоль $\vec{a}$, группа C_A2 — антицентрирование). Наличие черно-белых операций порождает пять новых сингоний в плоских и 22 новые сингонии в трехмерных решетках.

Группы $G_3^{3(p)}$ и G_4^4. Придавая дискретной четвертой координате x_4 несколько значений, отвечающих циклической переменной $\langle a \rangle_p$ (где $p = 3, 4, 6$), можно перейти от черно-белых групп $G_3^{3,1}$ к группам цветной симметрии $G_3^{3(p)}$. Значения нагрузки p, указанное в надстрочном индексе, графически изображают разными цветами, связанными операциями a^k. Все такие группы являются подгруппами дискретных групп симметрий G_4^4 в четырехмерном евклидовом пространстве с 227 точечными кристаллографическими группами, 64 решетками Браве и 4783 пространственными группами (табл. 2.9).

Трехмерные шубниковские группы антисимметрии при этом соответствуют группам G_3^4 периодических трехмерных «слоев» в 4-мерном пространстве. Цветную симметрию используют для описания магнитной структуры кристаллов, распределения дефектов в реальных кристаллах, строения соразмерно модулированных фаз и других сложных систем.

Таблица 2.8

Вывод точечных групп антисимметрии из операций группы mmm (D_{2h})

Нормальная подгруппа	Операция подгруппы	Прочие операции группы	Операция группы антисимметрии	Группа антисимметрии
$222\,(D_2)$	$1,\ 2_x,\ 2_y,\ 2_z$	$\bar{1},\ m_{xy},$ $m_{yz},\ m_{xz}$	$1, \bar{1}', 2_x, 2_y, 2_z,$ $m'_{xy},\ m'_{yz},\ m'_{xz}$	$m'm'm'$
$mm2\,(C_{2v})$	$1,\ m_{xy},\ m_{yz},$ 2_y	$\bar{1},\ 2_x,\ 2_z,$ m_{xz}	$1,\ \bar{1}',\ 2'_x,\ 2_y,\ 2'_z,$ $m_{xy},\ m_{yz},\ m'_{xz}$	mmm' $(mm'm,\ m'mm)$
$2/m\,(C_{2h})$	$1,\ \bar{1}',\ m_{xy},\ 2_z$	$2_x,\ 2_y,\ m_{xz},$ m_{yz}	$1,\ \bar{1},\ 2'_x,\ 2'_y,\ 2_z$ $m_{xy},\ m'_{yz},\ m'_{xz}$	$mm'm'$ $(m'm'm,\ m'mm')$

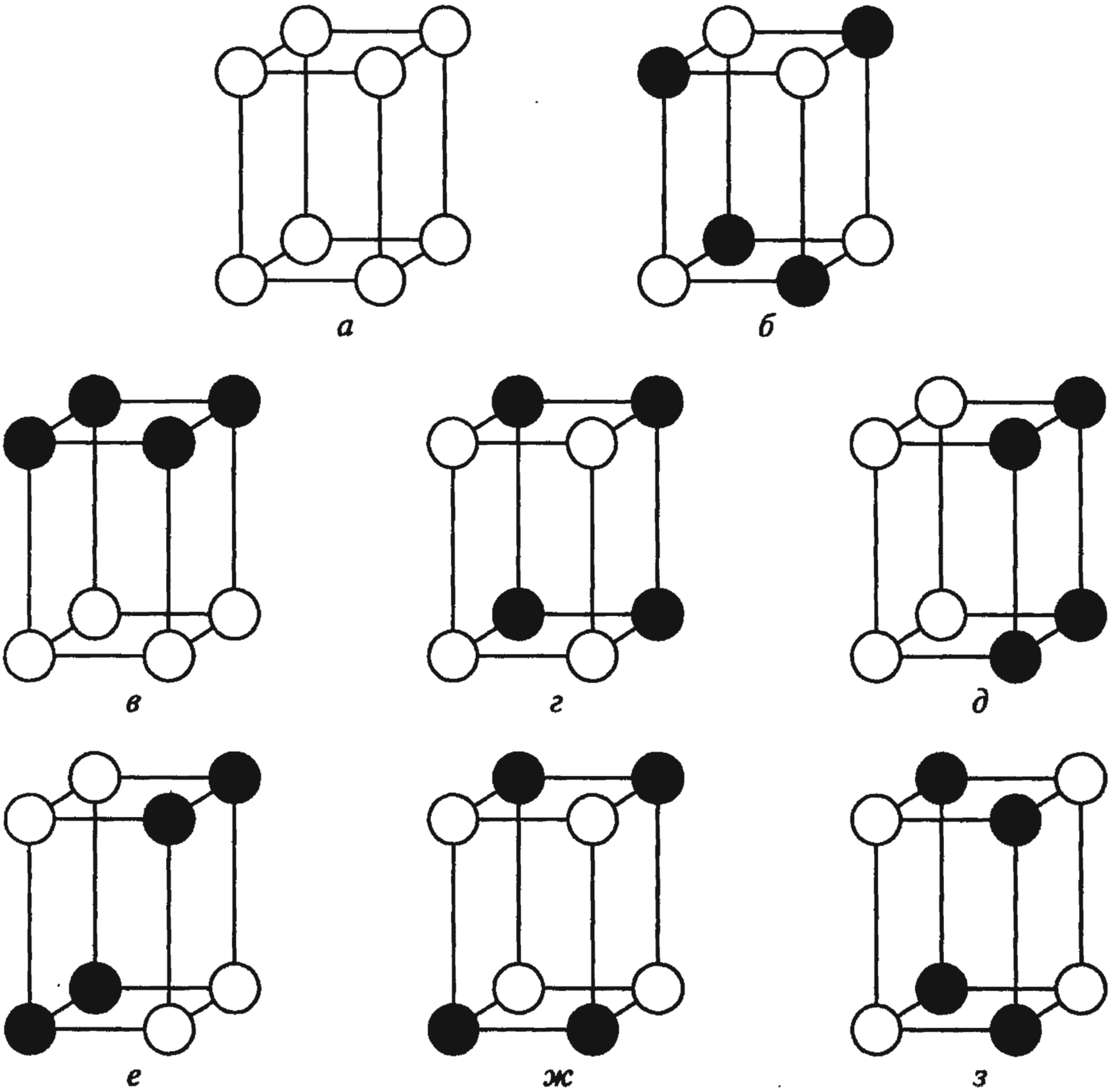
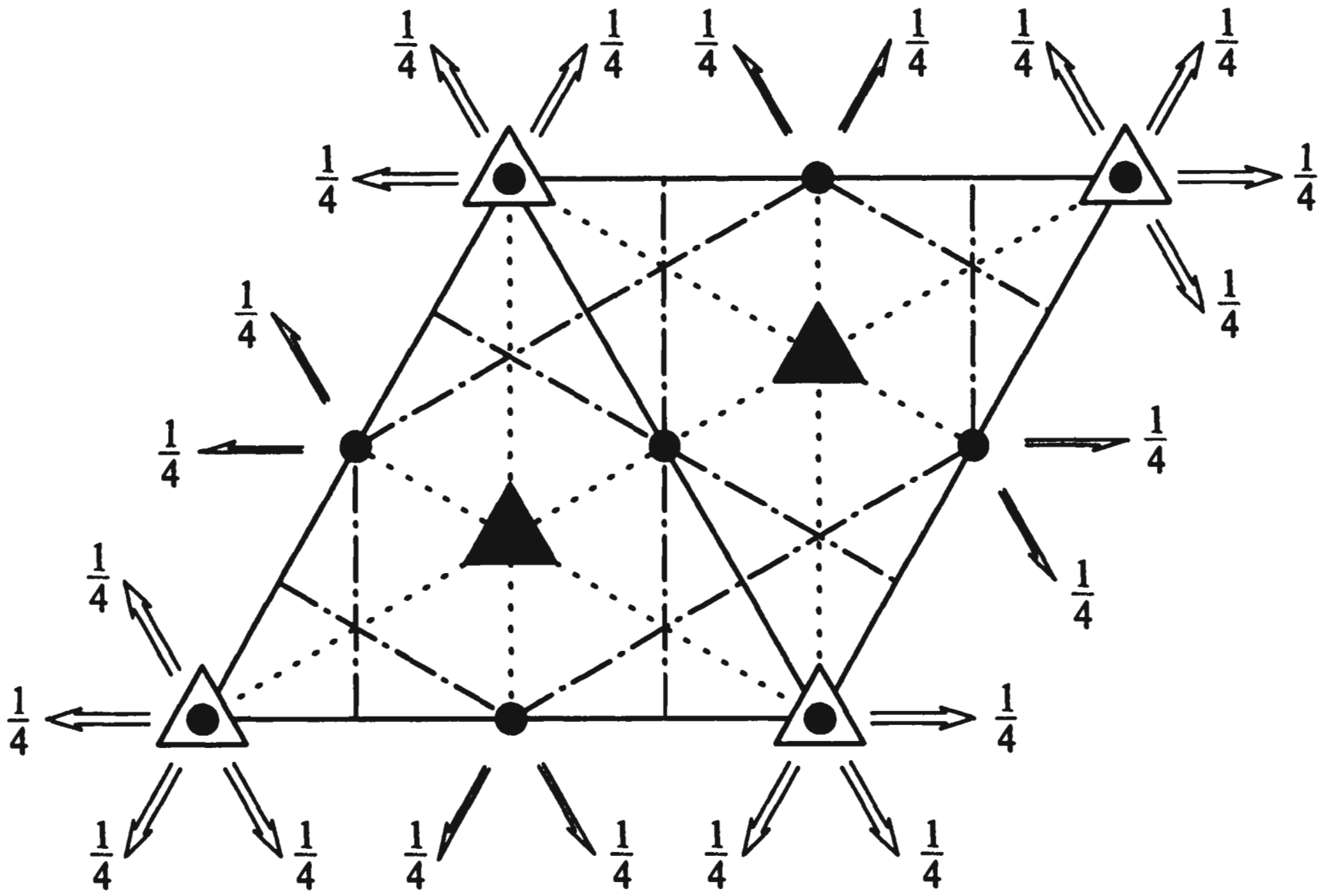


Рис. 2.32. Орторомбические ячейки, отвечающие подгруппам «серой» точечной группы $mmm \times 1'$: одноцветной mmm $(а)$ и черно-белым точечным группам $m'm'm'$ $(б)$, mmm' $(в-д)$, $mm'm'$ $(е-з)$

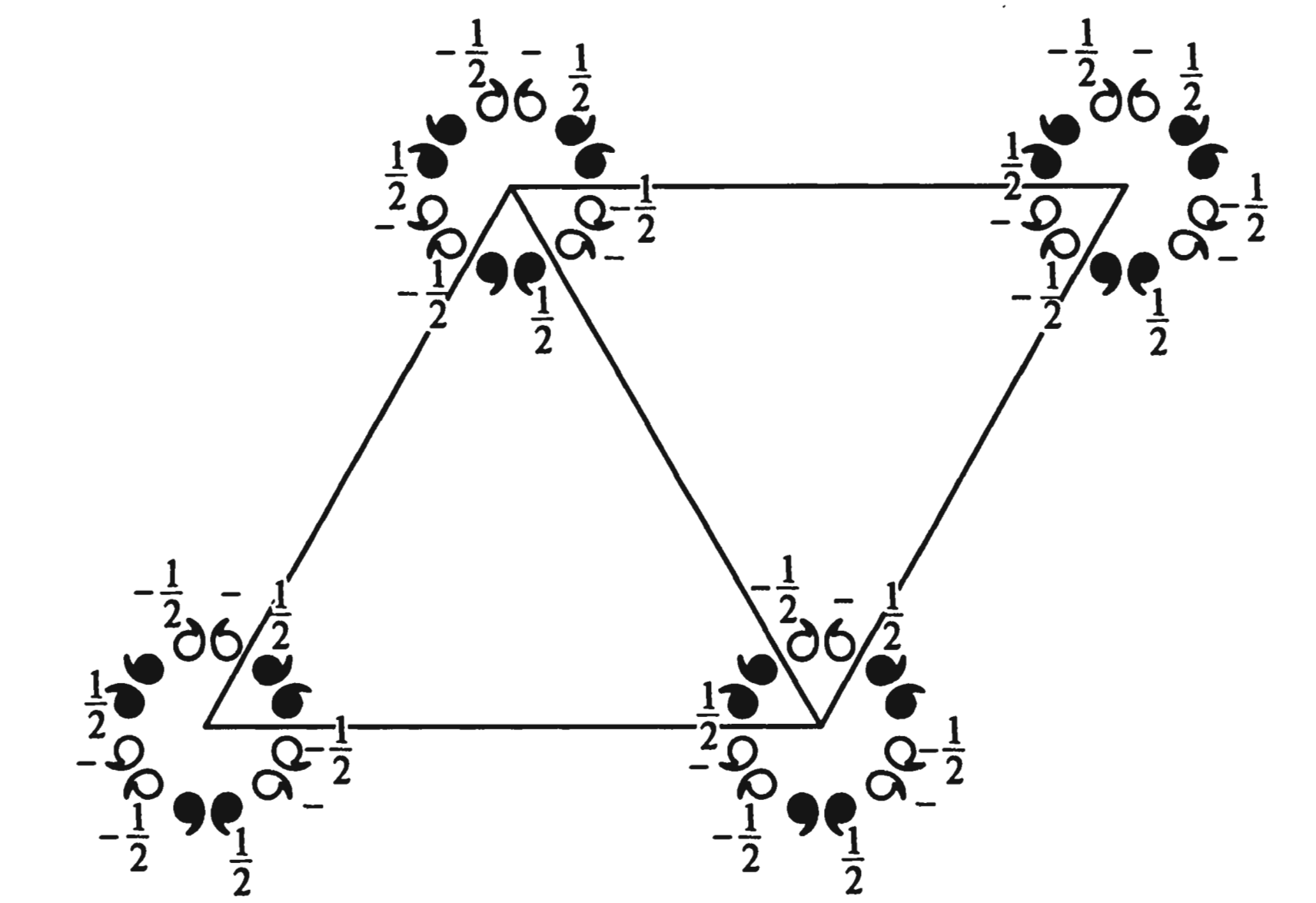
Таблица 2.9

Число кристаллографических групп G_m^n при разных размерностях пространства (n) и кристаллографического подпространства (m)

m	n			
	1	2	3	4
0	1	10	32	227
1	2	7	75	—
2		17	80	1091
3			230	1651
4				4783



а



б

Рис. 2.33. Операции симметрии (*а*) и эквивалентные позиции (*б*) черно-белой шубниковской группы $P\bar{3}'c1$. Элементы антисимметрии показаны обращенным цветом (белые стрелки — $2'$ и $2_1'$; белые треугольники — $\bar{3}'$; черные точки — $\bar{1}'$ [11, т. 1, гл. 2]

2.14. ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Упругое рассеяние монохроматического излучения (рентгеновского, нейтронного, электронного и др.) с волновым вектором $\vec{k}_0$ ($k_0 = |\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, где λ — длина волны) геометрически изображают вектором рассеяния $\vec{q} = \dfrac{1}{2\pi}(\vec{k} - \vec{k}_0)$, перпендикулярным условной плоскости отражения пучка:

$$q = \frac{2\sin\theta}{\lambda},$$

где 2θ — угол рассеяния (рис. 2.34). Количество частиц, рассеянных элементом среды с координатами $\vec{r}$, определяется плотностью $\rho(\vec{r})$ рассеивателей (электронов при рентгеновском рассеянии, атомных ядер при рассеянии протонов) в точке $\vec{r}$, а интерференция волн, рассеянных на элементах среды A и B с координатами 0 и $\vec{r}$ соответственно — множителем $e^{2\pi i\delta(\vec{r})}$, где $\delta(\vec{r}) = (AD - CB)/\lambda$ — разность хода волн между точками A и B:

$$\delta(\vec{r}) = \frac{r}{\lambda}(\cos\alpha - \cos\beta) = \frac{1}{2\pi}(\vec{r}\vec{k}_0 - \vec{r}\vec{k}) = \vec{r}\vec{q}.$$

Комплексную амплитуду $F(\vec{q})$ пучка, рассеянного в направлении $\vec{k} = \vec{k}_0 + 2\pi\vec{q}$ (где $F^2(\vec{q}) = I(\vec{q})$ — интенсивность рассеяния), задает фурье-преобразование

$$F(\vec{q}) = \int \rho(\vec{r}) e^{2\pi i\vec{q}\vec{r}}\, dr = \Phi[\rho]. \qquad (2.15)$$

Интенсивность излучения, рассеянного на трехмерном идеальном кристалле, отлична от нуля лишь в направлениях, отвечающих дискретным значениям

$$\vec{q}_{hkl} = (h/a,\ k/b,\ l/c),$$

где (h, k, l) — соответствующие отражающим плоскостям кристалла целочисленные индексы Миллера; (a, b, c) — параметры

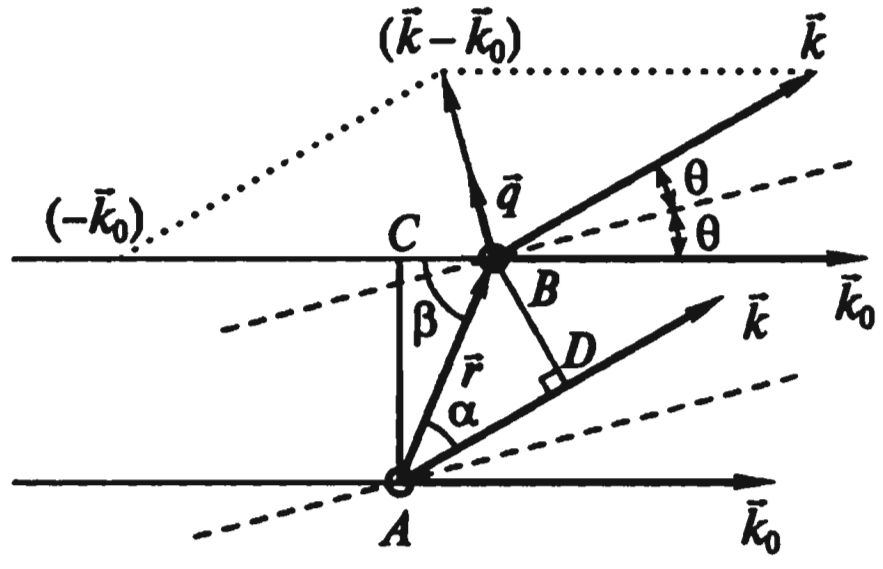


Рис. 2.34. Волновые векторы падающего ($\vec{k}_0$) и рассеянного ($\vec{k}$) монохроматического излучения при его рассеянии на элементах среды A и B. Показаны условные плоскости отражения (штриховые линии) и вектор рассеяния $\vec{q}$

элементарной ячейки. Интеграл Фурье при этом переходит в сумму по всем тройкам целых чисел (h, k, l). Дискретные векторы $\{\vec{q}_{hkl}\}$ составляют фурье-образ решетки кристалла, называемый в кристаллографии обратной решеткой*, (см. подраз. 2.2). Базисные векторы прямой $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ и обратной $(\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*)$ решеток в трехмерном пространстве связаны соотношением

$$\vec{a}_i \vec{a}_j^* = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ при} & i = j, \\ 0 \text{ при} & i \neq j \end{cases}$$

и $V^* = \vec{a}_i^* (\vec{a}_j^* \times \vec{a}_k^*) = 1/V$, т. е.

$$\vec{a}^* = (\vec{b} \times \vec{c})/V, \quad \vec{b}^* = (\vec{c} \times \vec{a})/V, \quad \vec{c}^* = (\vec{a} \times \vec{b})/V. \tag{2.16}$$

В этом случае справедлив *закон Вульфа — Брегга*:

$$q_{hkl} = 1/d_{hkl},$$

где d_{hkl} — расстояние между кристаллическими плоскостями в прямой решетке. В приведенной обратной ячейке с параметрами

$$(a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*)$$

каждый из углов не превосходит $\pi/2$. Можно показать, что фурье-образ кристаллической решетки сохраняет ее сингонию, а решетки Браве переводятся в обратные по правилу

$$P \longleftrightarrow P^*, \quad C \longleftrightarrow C^*, \quad F \longleftrightarrow I^*$$

Экспериментально регистрируемая картина рассеяния на монокристалле состоит из дифракционных рефлексов $I(hkl) = F^2(hkl)$ разных интенсивностей, образующих апериодическую обратную решетку, т. е. расположенных в точках $\{\vec{q}_{hkl}\}$ трехмерного *обратного пространства* с целочисленными координатами (h, k, l) (рис. 2.35). Из (2.15) следует

$$F(\overline{hkl}) = F^*(hkl),$$

(где $*$ — знак комплексного сопряжения), т. е. $I(\overline{hkl}) = I(hkl)$ (*закон Фриделя*).

Среди 32 кристаллографических групп точечной группой дифракционной картины кристалла является одна из 11 центросимметричных групп, показанных на рис. 2.15 (*классов Лауэ*).

---

*В строгом математическом смысле $\{\vec{q}_{hkl}\}$ является дуальной решеткой, а обратную решетку образуют векторы $\{\vec{k}_{hkl} - \vec{k}_o\} = \{2\pi\vec{q}_{hkl}\}$. В физике твердого тела обе эти решетки нередко называют «обратными» (см. подразд. 2.2).

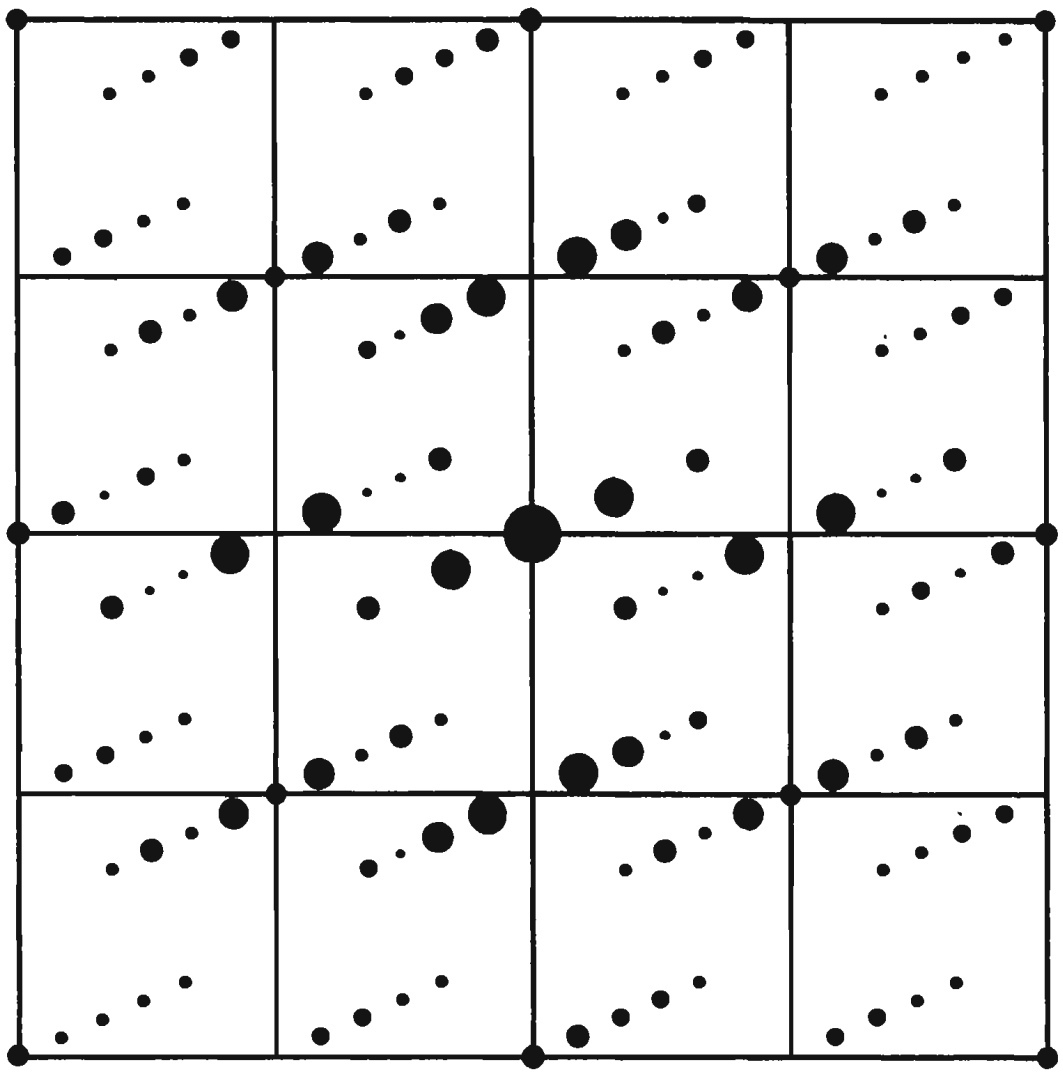


Рис. 2.35. Расположение дифракционных рефлексов монокристалла в узлах обратной решетки (сплошными линиями показан слой $0kl$)

Класс Лауэ нецентросимметричного кристалла включает его точечную группу в виде подгруппы. Более тонкие эффекты *аномального рассеяния* нарушают центральную симметрию дифракционной картины.

Увеличение периода a_i кристаллической решетки в n раз, по предложению 2.4, означает n-кратное уменьшение соответствующего периода обратной решетки a_i^* с появлением в ней дополнительных узлов — *сверхструктурных* рефлексов. Наоборот, при

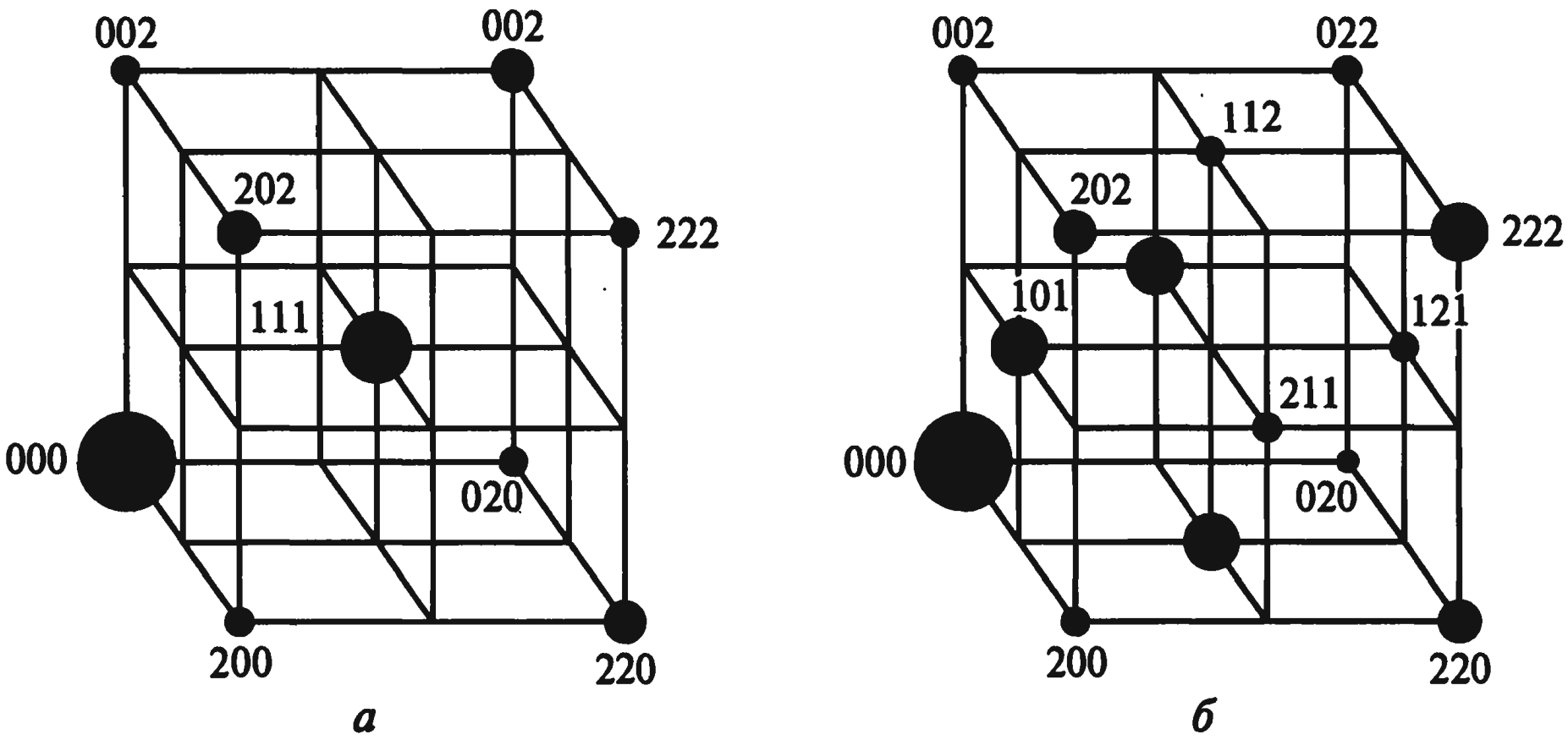


Рис. 2.36. Разрешенные рефлексы и их координаты (hkl) в узлах обратной решетки для кристаллов:
$(а)$ — с кубической F-решеткой $(h+k=2n, h+l=2n, k+l=2n)$; $(б)$ — с кубической I-решеткой $(h+k+l=2n)$

Таблица 2.10

Систематические погасания дифракционных рефлексов, вызванные симметрией кристалла [118]

Вид симметрии	Тип отражения	Символ	Индекс наблюдаемых отражений
Трансляционная	hkl	P	—
		I	$h+k+l=2n$
		A	$k+l=2n$
		B	$h+l=2n$
		C	$h+k=2n$
		F	$\begin{cases} h+k=2n \\ k+l=2n \\ h+l=2n \end{cases}$
		R^*_{obv}	$-h+k+l=3n$
		R_{rev}	$h-k+l=3n$
Плоскость скольжения (001)	$hk0$	a	$h=2n$
		b	$k=2n$
		n	$h+k=2n$
		d	$h+k=4n$
Плоскость скольжения (100)	$0kl$	b	$k=2n$
		c	$l=2n$
		n	$k+l=2n$
		d	$k+l=4n$
Плоскость скольжения (010)	$h0l$	a	$h=2n$
		c	$l=2n$
		n	$h+l=2n$
		d	$k+l=4n$
Плоскость скольжения $(1\bar{1}0)$	hkk	a, n	$h=2n$
	hhl	c, n	$l=2n$
	hkk	d	$2k+h=2n$
	hhl	d	$2h+l=4n$
Винтовая ось $\parallel c$	$00l$	$2_1, 4_2, 6_3$	$l=2n$
		$3_1, 3_2, 6_2, 6_4$	$l=3n$
		$4_1, 4_3$	$l=4n$
		$6_1, 6_5$	$l=6n$
Винтовая ось $\parallel a$	$h00$	$2_1, 4_2$	$h=2n$
		$4_1, 4_3$	$h=4n$
Винтовая ось $\parallel b$	$0k0$	$2_1, 4_2$	$k=2n$
		$4_1, 4_3$	$k=4n$

Окончание табл. 2.10

Вид симметрии	Тип отражения	Символ	Индекс наблюдаемых отражений
Винтовая ось ‖ (110)	hh0	2_1	$h = 2n$

* Различный выбор ортов в «гексагональной» R'-решетке [118, v. A].

уменьшении периода кристалла $a_i' = a_i/n$ период обратной решетки $a_i^{*\prime} = na_i^*$ увеличивается, приводя к исчезновению всех узлов с соответствующим индексом, не кратным n.

Наличие трансляций на целочисленную часть периода повторяемости (центрирований, винтовых поворотов и скользящих отражений) в пространственной группе кристалла вызывает систематические погасания его рефлексов, т. е. отсутствие отражений от определенных систем кристаллографических плоскостей (табл. 2.10). Так, например, фурье-образ F-решетки содержит только узлы ($\vec{q}_{hkl}$) с индексами, удовлетворяющими условиям $h+k=2n$, $h+l=2n$, $k+l=2n$, т. е. сам является I-решеткой с удвоенным периодом $a^*(=b^*=c^*)$, а погасания для прямой I-решетки (отсутствие отражений с индексами, не подчиняющимися условию $h+k+l=2n$) отвечают обратной F-решетке (рис. 2.36).

Систематическими погасаниями в совокупности рефлексов кристалла определяются 120 *рентгеновских групп*, которым соответствуют 230 пространственных групп. Так, например, пространственную группу $P2_12_12$ однозначно выявляют по дифракционным данным из mmm-симметрии дифракционной картины (совпадающей с классом Лауэ) и «осевых» погасаний ($h00$, $h=2n$; $0k0$, $k=2n$), тогда как группы $Pnam$ и $Pna2_1$ в том же классе имеют одинаковые погасания («плоскостные»: $0kl$, $k+l=2n$; $h0l$, $h=2n$ и вытекающие из них «осевые»: $h00$, $h=2n$; $0k0$, $k=2n$; $00l$, $l=2n$). Определение пространственной группы кристалла по симметрии и погасаниям в наборе его рефлексов является важной частью экспериментального дифракционного исследования кристаллических структур.

2.15. ГИПЕРПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ НЕСОРАЗМЕРНЫХ ФАЗ

Если в кристалле имеются атомы, положения или (и) заселенности позиций которых закономерно изменяются от одной элементарной ячейки к другой, на его дифрактограмме возникают

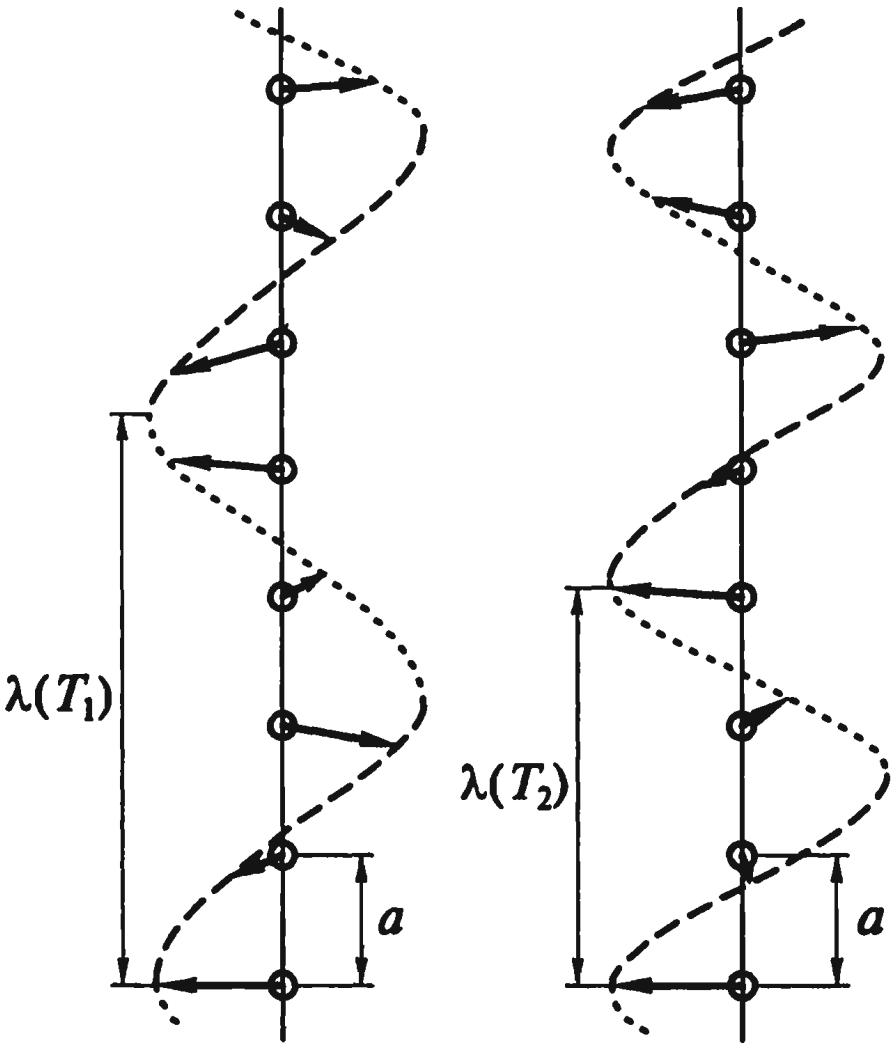


Рис. 2.37. Направления магнитных моментов (жирные стрелки) и период повторяемости λ в хелиомагнитном кристалле с атомным периодом a при температурах T_1 и T_2

слабые сателлитные рефлексы, не отвечающие основной обратной решетке (a^*, b^*, c^*). Во многих случаях нецелочисленные индексы сверхструктурных отражений непрерывно изменяются с изменением температуры, принимая иррациональные значения, свидетельствующие о несоизмеримости обратных решеток для основного набора рефлексов и набора сателлитов. Такие кристаллические структуры называют *несоразмерно модулированными*.

Примером несоразмерно модулированной фазы может служить *хелиомагнитная* структура некоторых лантаноидов, в которых направления спинов неспаренных электронов при атомах в кристаллической решетке образуют спираль с зависящим от температуры шагом (рис. 2.37).

Дифракция поляризованных нейтронов на подобной магнитной сверхструктуре дает сателлитные рефлексы с переменными дробными индексами.

Положения и заселенности сверхструктурных атомных позиций в модулированных кристаллах задает волновой вектор модуляции $\vec{k}'$, соответствующий периоду модуляции кристалла $\lambda' = 2\pi/k'$. Период λ', вообще говоря, несоизмерим с параметрами ячейки (a, b, c). Фазу модуляции ψ, принимающую разные значения в разных ячейках кристалла (непрерывный параметр нагрузки), можно рассматривать как четвертую координату несоразмерной структуры. В этом случае полной трансляционной симметрии кристалла отвечает кристаллическая решетка в четырехмерном евклидовом гиперпространстве $E(4)$, а его трехмерная атомная структура представляет сечение этой решетки трехмерной гиперплоскостью $E(3)$, расположенной «наклонно» к фазовой координате (в том смысле, что не все скалярные произведения $\vec{\psi}$ с базисными векторами $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ элементарной ячейки равны нулю).

Пример одномерной модулированной решетки, образованной подобным сечением, представлен на рис. 2.38.

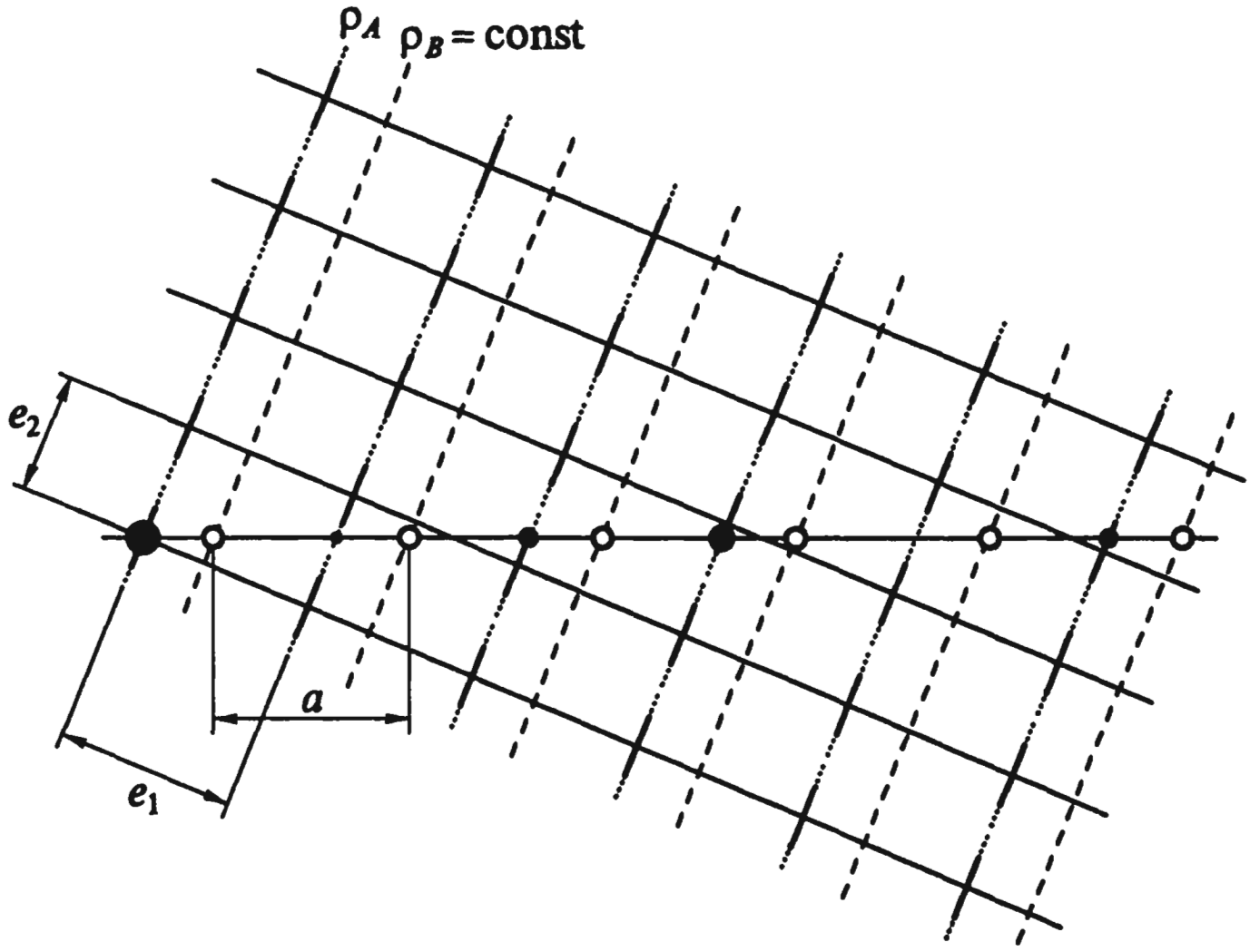


Рис. 2.38. Двумерное гиперпространство, образованное одномерной решеткой из атомных позиций A (черные точки) и B (светлые точки) с периодом e_1 и координатой нагрузки: вероятностями их заселения ρ_A (модулированной с периодом e_2) и ρ_B = const. Сечение плоскости (e_1, e_2) по наклонной прямой дает одномерную решетку из атомов B с периодом a, модулированную позициями атомов A с тем же периодом, но разными заселенностями

Симметрию несоразмерно модулированного кристалла с m независимыми волнами модуляции описывает кристаллическая *гиперрешетка* Σ в $(m+3)$-мерном евклидовом пространстве, являющемся прямой суммой «внешнего» (физического) трехмерного евклидова пространства $E(3)_{ex}$ с базисом $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ и ортогонального ему «внутреннего» m-мерного пространства $E(m)_{in}$ с базисом $(\vec{b}_1, \ldots, \vec{b}_m)$:

$$E(m+3) = E(3)_{ex} \oplus E(m)_{in},$$
$$E(3)_{ex} \cap E(m)_{in} = 0.$$

Группа симметрий гиперрешетки (*гиперпространственная группа*) $\Gamma \subset \Gamma_{ex} \times \Gamma_{in}$ состоит из всех пар операций $(g_{ex}^{(i)}, g_{in}^{(j)})$, где $g_{ex}^{(i)} \in \Gamma_{ex}$ и $g_{in}^{(j)} \in \Gamma_{in}$. Базисные векторы решетки $\Sigma(e_1, \ldots e_{m+3})$ выбирают в виде линейных комбинаций векторов $(\vec{a}_1, \ldots, \vec{b}_m)$, отвечающих симметрии Г. Базовая (*внешняя*) трехмерная пространственная группа Γ_{ex} соответствует симметрии кристалла в отсутствие модуляций.

Обратную гиперрешетку Σ^* вы бирают в виде множества $(m+3)$-мерных векторов $(z_1 e_1^*, z_2 e_2^*, \ldots, z_{m+3} e_{m+3}^*)$ с целочисленны-

ми коэффициентами z_i в базисе $(e_1^*, e_2^*, \ldots, e_{m+3}^*)$ линейных комбинаций векторов $(\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*)$ и $(\vec{b}_1^*, \ldots, \vec{b}_m^*)$. Таким образом, распределение атомов в $(m+3)$-мерном гиперпространстве задается фурье-преобразованием

$$\rho(r) = \sum F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где $F(\vec{k})$ — амплитуда рассеянного пучка, $\vec{r}$ и $\vec{k}$ — $(m+3)$-мерные векторы, соответственно, из прямой и обратной решеток.

Симметрией обратной гиперрешетки Σ^* несоразмерно модулированного кристалла определяются погасания рефлексов, имеющих в ней целочисленные индексы.

Гиперрешеткам модулированного кристалла в пространстве размерности 3+1 отвечают не все возможные четырехмерные пространственные группы. Например, наличие особого направления модуляции несовместимо с базовой трехмерной кубической сингонией. В пространстве $E(3) \oplus E(1)$ имеются 24 решетки Браве, соответствующие разным сочетаниям базовых трехмерных решеток с одномерными группами трансляций $t1$ и $t\bar{1}$ вдоль четвертой координаты $\vec{\psi}$. В частности, ортогональность $\vec{\psi}$ к оси 2 и к перпендикулярной ей плоскости в базовой моноклинной сингонии дает, соответственно, осевую и плоскостную моноклинные гиперрешетки Браве, а наклонное расположение $\vec{\psi}$ к векторам $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ порождает шесть новых типов центрирования.

Гиперпространственные группы двумерных и трехмерных несоразмерно модулированных кристаллов с одной независимой координатой модуляции были выведены в 1980 — 1981 гг. Янером и соавт. [125]. Аналогичный подход с использованием сечения пяти- либо шестимерного гиперпространства «внешним» трехмерным евклидовым пространством позволяет анализировать свойства *квазикристаллов*, в огранке и дифракционной картине которых проявляются некристаллографические элементы симметрии (поворотные оси 8, 10 или 12). Свойства квазикристаллов и методы описания их симметрии рассмотрены в гл. 6.

Контрольные вопросы

1. Доказать, что группу целых чисел $\mathbb{Z}$ нельзя разложить нетривиальным способом в прямую сумму своих подгрупп.

2. В свободной абелевой группе F с базисом e_1, e_2, e_3 взята подгруппа A, порожденная элементами: $a_1 = 5e_1 + 5e_2 + 3e_4$, $a_2 = 5e_1 + 6e_2 + 5e_4$, $a_3 = 8e_1 + 7e_2 + 9e_4$. Разложить фактор-группу F/A в прямую сумму свободных и примарных циклических групп.

3. Пусть задано афинное отображение $\Phi(x) = \phi(x) + b$ в трехмерном пространстве, причем определитель ортогонального оператора ϕ равен -1. Доказать, что существует такой вектор a, что $\Phi(a) = a$.

4. Пусть в евклидовом пространстве E задан ортонормированный базис e_1, e_2, e_3. Рассмотрим в E решетку с базисом: $a_1 = 2e_1 + e_2 - e_3$, $a_2 = -e_1 + e_2 + 4e_3$, $a_3 = e_1 - e_2 - e_3$. Найти базис обратной решетки.

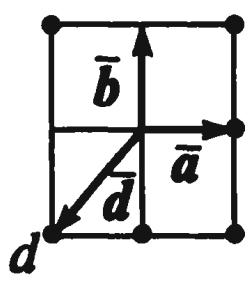
5. Найти матрицы преобразований от примитивной к объемноцентрированной $(P \to I)$ и от объемноцентрированной к примитивной $(I \to P)$ решеткам.

6. Привести матрицу

$$\begin{pmatrix} 7 & 2 & 3 \\ 21 & 8 & 9 \\ 5 & -4 & 4 \end{pmatrix}$$

целочисленными элементарными преобразованиями к диагональному виду.

7. Плоскую решетку с произвольно выбранной элементарной ячейкой (a, b, α) можно описать *однородными параметрами* (P, Q, R): скалярными произведениями: $P = (\vec{a}, \vec{b})$, $Q = (\vec{a}, \vec{d})$, $R = (\vec{b}, \vec{d})$, где вектор $\vec{d}$ удовлетворяет условию $\vec{a}+\vec{b}+\vec{d} = 0$ (см. схему). Найти соотношения между этими параметрами для пяти двумерных решеток Браве и предложить алгоритм перехода от произвольной ячейки $(\vec{a}, \vec{b})$ к *приведенной ячейке* $(\vec{a}_0, \vec{b}_0)$, однозначно характеризующей решетку.



8. Перечислить «белые», «черно-белые» и «серые» группы, получаемые при добавлении к группам бордюров операции антисимметрии (отражения в плоскости, см. рис. 2.27).

9. Набор интенсивностей рефлексов $I(hkl)$, полученных от монокристалла, показывает симметрию D_{2h} и *систематические погасания*, т. е. отсутствие отражений с индексами hkl: $h + k = 2n + 1$; $0kl$: $k = 2n + 1$; $h0l$: $h = 2n + 1$; $h00$: $h = 2n + 1$; $0k0$: $k = 2n + 1$; $00l$: $l = 2n + 1$, где n — целое число. Определить пространственную группу кристалла.

ГЛАВА 3

ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУПП

Изложена теория комплексных представлений конечных групп. Показано, что любое представление групп является прямой суммой неприводимых представлений (теорема Машке), поэтому описание произвольных представлений сводится к описанию неприводимых. Указаны свойства неприводимых представлений абелевых групп, точечных и пространственных групп, рассмотренных в предыдущих главах, групп перестановок и ряда других конструкций. Даны теория характеров представлений групп и примеры таблиц характеров.

3.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ПРИМЕРЫ

Пусть V – вещественное или комплексное векторное пространство. Обозначим, как и выше, через $\mathrm{GL}(V)$ группу всех обратимых линейных операторов на пространстве V. Если задана группа G, то *представлением* группы G в пространстве V называют гомоморфизм групп $\xi : G \to \mathrm{GL}(V)$. Другими словами, каждому элементу $g \in G$ поставлен в соответствие обратимый линейный оператор $\xi(g)$, действующий в пространстве V, причем $\xi(gh) = \xi(g)\xi(h)$ для всех $g, h \in G$. Подчеркнем, что совокупность операторов $\{\xi(g) \mid g \in G\}$ сама является группой, а именно — подгруппой $\mathrm{GL}(V)$. Если представление ξ фиксировано, то действие оператора $\xi(g)$, $g \in G$ на вектор $v \in V$ будем кратко обозначать gv. Таким образом, для всех $v, w \in V$ и $g, h \in G$ выполнены условия:

$$g(\alpha v + \beta w) = \alpha(gv) + \beta(gw), \quad (gh)v = g(hv), \quad \mathbf{1}v = v, \tag{3.1}$$

где $\mathbf{1}$ — тождественное преобразование V.

Размерностью представления $\xi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G называют размерность $\dim V$ пространства V. Представление ξ называют *вещественным*, если пространство V состоит из векторов с вещественными компонентами, и *комплексным*, если V — комплексное пространство. (Последнее, очевидно, — более общий случай.)

Приведем ряд примеров представлений групп.

1. Пусть $G = \mathbf{S}_4$ и T — тетраэдр с пронумерованными вершинами. Предположим, что тетраэдр расположен в трехмерном векторном вещественном пространстве $\mathbb{R}^3$, причем его центр находится в начале координат. Сопоставим каждой перестановке $\sigma \in \mathbf{S}_4$ ортогональное преобразование $\mathbb{R}^3$, переводящее вершины $1-4$ соответственно в $\sigma(1), \ldots, \sigma(4)$. Такое преобразование существует, так как σ является произведением транспозиций, для каждой из которых это преобразование существует. Таким образом, $\mathbf{S}_4 \simeq \operatorname{Sym} T$, и поэтому возникает трехмерное вещественное представление $\psi : \mathbf{S}_4 \to \mathbb{O}(3, \mathbb{R})$ группы $\mathbf{S}_4$ группой симметрий тетраэдра T_d (см. подразд. 1.1 и рис. 1.5).

2. Пусть $G = \mathbf{S}_4$ и Q — единичный куб в трехмерном векторном пространстве $\mathbb{R}^3$, причем его центр находится в начале координат. В кубе Q пронумерованы телесные диагонали $1, 2, 3, 4$. Каждая диагональ соединяет вершины, не лежащие на одной грани куба. Для любой вершины имеется (и притом единственная) диагональ куба, выходящая из этой вершины. Любое вращение $\mathbb{R}^3$ вокруг некоторой оси (т. е. каждый ортогональный оператор с определителем 1), принадлежащее группе симметрий куба Q, переводит набор из четырех диагоналей куба в себя. Можно показать, что если вращение $\mathbb{R}^3$ переводит каждую диагональ в себя, то оно тождественно, и любая транспозиция на множестве диагоналей реализуется некоторым поворотом в $\mathbb{R}^3$ вокруг некоторой оси. Таким образом, группа $\mathbf{S}_4$ изоморфна группе $\operatorname{SIso}(E) \cap \operatorname{Sym} Q$, и мы получаем новое трехмерное вещественное представление $\phi : \mathbf{S}_4 \to \operatorname{SO}(3, \mathbb{R})$ группы $\mathbf{S}_4$ группой вращений куба O.

3. Группа $\mathbf{S}_n$ действует в пространстве вещественных или комплексных многочленов от переменных $X_1, \ldots, X_n$ с помощью перестановок переменных: $\sigma_i f(X_1, \ldots, X_n) = f(\sigma_i X_1, \ldots, \sigma_i X_n)$.

4. Группы диэдра $\mathbf{D}_n$ имеют естественное представление в $\mathbb{R}^2$ как группы симметрий правильного n-угольника. Группа кватернионов $\mathbf{Q}_8$ имеет естественное представление в $\mathbb{C}^2$, так как она определяется как подгруппа в $\operatorname{SU}(2, \mathbb{C})$.

5. Имеется двумерное вещественное представление ψ_1 группы диэдра $\mathbf{D}_3$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

6. Имеется другое двумерное вещественное представление ψ_2 группы диэдра $\mathbf{D}_3$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

7. Имеется двумерное вещественное представление ψ_3 группы диэдра $\mathbf{D}_4$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

8. Имеется другое двумерное вещественное представление ψ_4 группы диэдра $\mathbf{D}_4$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

9. Имеется двумерное вещественное представление ψ_5 группы диэдра $\mathbf{D}_6$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

10. Имеется другое двумерное вещественное представление ψ_6 группы диэдра $\mathbf{D}_6$, при котором

$$a \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Представления $\psi_1, \ldots, \psi_6$ можно записать и в комплексной форме, полагая $a = \sqrt[n]{1}$ и $bz = \bar{z}$ на комплексной плоскости $\mathbb{C}$, где $n = 3, 4, 6$ (см. далее подразд. 3.5).

11. Если $\Psi : G \to \mathrm{GL}(V)$ — одномерное представление группы G в комплексном (вещественном) векторном пространстве V с базисом e, то для любого $g \in G$ получаем $\Psi(g) = \psi(g)e$, где $\psi(g)$ — ненулевое комплексное (вещественное) число. При этом $\psi(gh) = \psi(g)\psi(h)$ для всех $g, h \in G$. Таким образом, каждое одномерное представление можно отождествить с гомоморфизмом ψ группы G в абелеву группу ненулевых комплексных (вещественных) чисел относительно умножения.

Определение 3.1. Два представления

$$\xi : G \to \mathrm{GL}(V), \quad \phi : G \to \mathrm{GL}(W)$$

группы G называются *эквивалентными* (*изоморфными*), если существует такой изоморфизм векторных пространств $\zeta : V \to W$, что $\zeta[\xi(g)v] = \phi(g)[\zeta(v)]$ для всех $g \in G$, $v \in V$. В этом случае говорят, что для любого $g \in G$ коммутативна диаграмма

$$\begin{array}{ccc} V & \xrightarrow{\zeta} & W \\ {\scriptstyle \xi(g)}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle \phi(g)} \\ V & \xrightarrow{\zeta} & W \end{array}$$

(т. е. группа операторов $\{\xi(g)\}$ в пространстве V, на которую отображаются элементы $g \in G$, изоморфна отображению $\{\phi(g)\}$ операций группы G на другое пространство W той же размерности). Напомним, что диаграмма, состоящая из пространств и отображений между ними, называется *коммутативной*, если в ней равны все произведения отображений, соответствующих путям по стрелкам с одинаковым началом и одинаковым концом.

Понятие представления группы и эквивалентности (изоморфизма) представлений можно переформулировать в матричных терминах. Пусть задано комплексное векторное пространство V с базисом

$$\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n). \tag{3.2}$$

Если в пространстве V задано представление $\xi : G \to \mathrm{GL}(V)$, то каждому элементу $g \in G$ сопоставлена матрица $T_g = (a_{ij}(g)) \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Если $g, h \in G$, то $T_{gh} = T_g T_h$. Предположим, что $x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i \in V$, где $x_i \in \mathbb{C}$. Тогда столбец из координат вектора $T_g x$ в базисе $\mathbf{e}$:

$$T_g x = T_g \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Предположим, что $\mathbf{f} = (f_1, \ldots, f_n)$ — базис пространства W, и при представлении $\phi : G \to \mathrm{GL}(W)$ элементу $g \in G$ в базисе $\mathbf{f}$ соответствует матрица $T'_g \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Пусть $\zeta : V \to W$ — изоморфизм пространств V и W, при котором

$$\zeta(e_i) = \sum_{j=1}^{n} f_j c_{ji}, \quad c_{ji} \in \mathbb{C}, \quad 1 \leqslant i \leqslant n.$$

Положим $C = (c_{ji}) \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. По определению 3.1 эквивалентность ξ и ϕ означает, что для любого $g \in G$ выполнено равенство $CT_g = T'_g C$, т. е. $T'_g = CT_g C^{-1}$.

Эквивалентность существенно упрощает описание представлений групп. Именно, для заданной конечной группы G вместо бесконечного множества всех ее представлений достаточно взять конечный набор всех неэквивалентных представлений. Кроме того, во многих группах (не обязательно конечных) из совокупности эквивалентных представлений можно выбрать единственное представление с хорошо изученными свойствами

Будем говорить, что представление Φ группы G в вещественном (комплексном) пространстве V *эквивалентно ортогональному* (*унитарному*), если в V существует такое скалярное произведение, что каждый оператор $\Phi(g)$, $g \in G$ является ортогональным (унитарным).

ТЕОРЕМА 3.1. *Любое конечномерное вещественное (комплексное) представление конечной группы G эквивалентно ортогональному (унитарному) представлению.*

Доказательство. Рассмотрим в конечномерном комплексном пространстве V представление $\psi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G. В пространстве V всегда имеется структура эрмитова пространства со скалярным произведением (x, y) (см. гл. 7). Введем в V новое скалярное произведение

$$[x, y] = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} (\psi(g)x, \psi(g)y), \tag{3.3}$$

где $\psi(g)$ — оператор, отвечающий элементу $g \in G$.

Непосредственная проверка показывает, что $[x, y]$ — скалярное произведение, и $[\psi(g)x, \psi(g)y] = [x, y]$ для всех $x, y \in V$. Таким образом, каждый оператор $\psi(g)$, $g \in G$ является унитарным относительно нового скалярного произведения $[x, y]$ и поэтому представление ψ унитарно относительно скалярного произведения $[x, y]$.

Следовательно, можно, не теряя общности, рассматривать только унитарные представления конечных групп.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть $\psi : G \to \mathrm{GL}(V)$ из теоремы 3.1. Если подпространство $U \subseteq V$ инвариантно относительно всех операторов $\psi(g)$, $g \in G$, то $V = U \oplus W$, где подпространство W также инвариантно относительно всех операторов $\psi(g)$, $g \in G$.

Доказательство. Возьмем в пространстве V такое подпространство W', что $V = U \oplus W'$. Если $x \in V$, то $x = u + w$, где $u \in U$, $w \in W'$. В этом случае положим $\tau(x) = u$. Тогда τ является линейным оператором $\tau : V \to U$, причем $\tau(u) = u$ для всех $u \in U$, т. е. τ — *проекционный оператор*. Введем новый проекционный оператор π, полагая

$$\pi(x) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \psi(g)\tau\left[\psi(g^{-1})x\right] \in U,$$

где $\psi(g)$ — образ элемента $g \in G$ в пространстве V.

Если $u \in U$, то и $\psi(g^{-1})u \in U$. Поэтому

$$\pi(u) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \psi(g)\tau\left[\psi(g^{-1})u\right] =$$

$$= \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \psi(g)\psi(g^{-1})u = \frac{1}{|G|}|G|u = u.$$

Кроме того, как и в доказательстве теоремы 3.1, справедливо равенство $\pi(\psi(h)x) = \psi(\pi(x))$ для всех $x \in V$. Это означает, что ядро W линейного оператора π также инвариантно относительно каждого оператора $\psi(g)$, $g \in G$, и $V = U \oplus W$.

Это следствие можно следующим образом переформулировать на матричном языке. Пусть задан гомоморфизм $\psi : G \to \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ конечной группы G в группу матриц $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, причем существует такое число k с условием $1 < k < n$, что в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$:

$$\psi(g) = \left(\begin{array}{c|c} B_g & C_g \\ \hline 0 & D_g \end{array}\right),$$

для каждого элемента $g \in G$, где

$$B_g \in \mathrm{GL}(k, \mathbb{C}), \quad D_g \in \mathrm{GL}(n-k, \mathbb{C}), \quad C_g \in \mathrm{Mat}(k \times (n-k), \mathbb{C}),$$

Тогда существует такая матрица $F \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, что

$$F \left(\begin{array}{c|c} B_g & C_g \\ \hline 0 & D_g \end{array}\right) F^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} B_g & 0 \\ \hline 0 & D_g \end{array}\right)$$

для любых элементов $g \in G$. Действительно, по доказанному выше можно считать, что представление ψ ортогонально (унитарно). Тогда $W = U^{\perp}$ инвариантно относительно всех операторов $\psi(g)$, $g \in G$. Остается перейти к матричной записи операторов в случае, когда пространство разложено в прямую сумму инвариантных подпространств (см. предложение 7.15.)

У п р а ж н е н и е 3.1. Доказать ряд положений:

1. Представления ψ_1, ψ_2 группы $\mathbf{D_3}$ эквивалентны одно другому и эквивалентны естественному представлению группы диэдра $\mathbf{D_3}$ как группы симметрий правильного треугольника.

2. Представления ψ_3, ψ_4 группы $\mathbf{D_4}$ эквивалентны между собой и естественному представлению группы диэдра $\mathbf{D_4}$ как группы симметрий квадрата.

3. Представления ψ_5, ψ_6 группы $\mathbf{D_6}$ эквивалентны одно другому и естественному представлению группы диэдра $\mathbf{D_6}$ как группы симметрий правильного шестиугольника.

В заключение построим важное для дальнейших рассмотрений *регулярное* представление конечной группы G. Рассмотрим векторное пространство V с базисом, состоящим из векторов $\{e_g \mid g \in G\}$, индексированных элементами группы G. Зададим представление $\rho : G \to \mathrm{GL}(V)$, полагая $[\rho(h)](e_g) = e_{hg}$ для любого элемента $h \in G$. Построенное представление имеет размерность, равную порядку $|G|$ группы G.

Приведем примеры регулярного представления. Пусть $G = \langle a \rangle_3$ — циклическая группа третьего порядка, порожденная элементом a. В качестве пространства V берем векторное пространство с базисом e_1, e_a, e_{a^2}. В этом случае

$$\rho(a)e_1 = e_a, \quad \rho(a)e_a = e_{a^2}, \quad \rho(a)e_{a^2} = e_1.$$

Это означает, что матрица оператора $\rho(a)$ в выбранном базисе имеет вид

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

и $\rho(a^2) = \rho^2(a)$.

Рассмотрим второй пример: $G = \mathbf{S}_3$. В этом случае базисом в пространстве V регулярного представления являются векторы

$$e_1, e_{(12)}, e_{(13)}, e_{(23)}, e_{(123)}, e_{(132)}.$$

В этом базисе цикл (12) действует как

$$\rho((12))e_1 = e_{(12)}, \quad \rho((12))e_{(12)} = e_1,$$
$$\rho((12))e_{(13)} = e_{(12)(13)} = e_{(132)},$$
$$\rho((12))e_{(23)} = e_{(12)(23)} = e_{(123)},$$
$$\rho((12))e_{(123)} = e_{(12)(123)} = e_{(23)},$$
$$\rho((12))e_{(132)} = e_{(12)(132)} = e_{(13)}.$$

Цикл (123) в том же базисе действует как

$$\rho((123))e_1 = e_{(123)}, \quad \rho((123))e_{(12)} = e_{(13)}, \quad \rho((123))e_{(13)} = e_{(23)},$$
$$\rho((123))e_{(23)} = e_{(12)}, \quad \rho((123))e_{(123)} = e_{(132)}, \quad \rho((123))e_{(132)} = e_1.$$

Следовательно, в этом базисе соответствующие матрицы операторов имеют вид

$$\rho((12)) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho((123)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(преобразования базисных векторов при умножении на матрицы $\rho(12)$ и $\rho(123)$ проверяются непосредственно).

3.2. ТЕОРЕМА МАШКЕ

Пусть задано представление $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G в вещественном (комплексном) векторном пространстве V. Предположим, что в V имеется нетривиальное подпространство W, инвариантное относительно всех операторов $\phi(g)$, $g \in G$. Это означает, что если $x \in W$, то $[\phi(g)](x) \in W$ для любого $g \in G$. Определим *ограничение* $\phi(g)\,|_W$, $g \in G$, оператора $\phi(g)$ на подпространство W по правилу $\phi(g)\,|_W\,(x) = [\phi(g)](x)$ для любого $x \in W$. В этом случае ограничение $\phi(g)\,|_W$, $g \in G$ является обратимым линейным оператором в W. Таким образом, получается представление $\psi(g) = \phi(g)\,|_W$, $g \in G$ группы G в подпространстве W. Это представление ψ называется *подпредставлением* представления ϕ. Если пространство V раскладывается в прямую сумму $V = W_1 \oplus \cdots \oplus W_m$ инвариантных подпространств $W_1, \ldots, W_m$, и $\psi_j(g) = \phi(g)\,|_{W_j}$ для всех $g \in G$ и любого индекса $1 \leqslant j \leqslant m$, то говорят, что *представление ϕ разложено в прямую сумму подпредставлений ψ_j*, $\phi = \psi_1 \oplus \cdots \oplus \psi_m$, $1 \leqslant j \leqslant m$. Представление $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G на вещественном (комплексном) векторном пространстве V *неприводимо*, если в V нет инвариантных подпространств, кроме нулевого и всего пространства V. Другими словами, у неприводимого представления ϕ в этом случае нет нетривиальных подпредставлений. Представление ϕ *вполне приводимо*, если оно раскладывается в прямую сумму неприводимых подпредставлений. Частным случаем вполне приводимого представления является неприводимое представление.

ТЕОРЕМА 3.2 (теорема Машке). Любое конечномерное комплексное (вещественное) представление конечной группы вполне приводимо.

Доказательство. В силу теоремы 3.1 будем рассматривать только ортогональные (унитарные) представления. Проведем доказательство индукцией по размерности представления. Случай размерности 1 очевиден, поскольку каждое одномерное представление неприводимо.

Пусть для представлений размерности, меньшей d, теорема доказана. Рассмотрим представление $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G на вещественном (комплексном) векторном пространстве V размерности d. Выберем в V инвариантное подпространство W наименьшей ненулевой размерности. Тогда $V = W \oplus W^{\perp}$ по теореме 7.9, причем ортогональное дополнение $W^{\perp}$ также инвариантно относительно всех операторов $\phi(g)$, $g \in G$, по предложению 7.23. На пространстве W в силу его выбора имеется неприводимое подпредставление,

причем $\dim W^{\perp} = \dim V - \dim W < d$. Остается применить индукцию.

На основании теоремы Машке все (неэквивалентные) представления произвольной конечной группы G можно свести к совокупности ее неприводимых представлений. Таким образом, достаточно исследовать свойства неприводимых представлений группы.

Упражнение 3.2. Доказать следующие положения:
1) естественные двумерные представления $\mathbf{D}_n$ и $\mathbf{Q}_8$ неприводимы;
2) трехмерные представления $\mathbf{S}_4$ из примеров 1 и 2 неприводимы.

Приведем пример неприводимого представления группы $\mathbf{S}_n$ размерности $n-1$ для любого $n \geqslant 3$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3.1. Пусть V — комплексное пространство размерности n с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. Зададим представление $\mathbf{S}_n$ в V, полагая $\boldsymbol{\sigma}(e_i) = e_{\sigma i}$ для любого индекса $i = 1, \ldots, n$ и для любого элемента $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_n$. Обозначим через U подпространство, базис которого состоит из одного вектора $e_1 + \cdots + e_n$. Пусть

$$W = \{x_1 e_1 + \cdots + x_n e_n \mid x_i \in \mathbb{C}, \quad x_1 + \cdots + x_n = 0\}.$$

Тогда подпространствам U и W отвечают неприводимые подпредставления, причем $V = U \oplus W$.

Доказательство. Достаточно проверить неприводимость представления на W. Пусть $h = h_1 e_1 + \cdots + h_n e_n$ — ненулевой вектор из W, где $h_j \in \mathbb{C}$. Переставляя базисные векторы e_j, $\quad 1 \leqslant j \leqslant n$, с помощью перестановок из $\mathbf{S}_n$, можно считать, что $h_1 \neq 0$. Заметим, что случай $h_1 = h_2 = \cdots = h_n$ невозможен (иначе h был бы нулевым вектором). Поэтому, переставляя $e_2, \ldots, e_n$ с помощью перестановок из $\mathbf{S}_n$, можно считать, что $h_1 \neq h_2$. Тогда $h - (1,2)h = (h_1 - h_2)(e_1 - e_2)$. Следовательно, любое ненулевое инвариантное относительно $\mathbf{S}_n$ подпространство W_1 в W содержит вектор $(h_1 - h_2)^{-1}(h - (1,2)h) = e_1 - e_2$. Но тогда оно содержит также вектор $(2,j)(e_1 - e_2) = e_1 - e_j$ для любого $2 \leqslant j \leqslant n$, так как $j = 2$ было выбрано произвольно. Поэтому подпространство W_1 совпадает с W.

Группу перестановок $\mathbf{S}_{n-1}$ можно рассматривать как подгруппу в группе перестановок $\mathbf{S}_n$, состоящую из всех таких перестановок $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_n$, что $\boldsymbol{\sigma}(n) = n$. Подпространство W из предложения 3.1 будет также и пространством представления подгруппы $\mathbf{S}_{n-1}$ группы $\mathbf{S}_n$. Однако в рамках подгруппы $\mathbf{S}_{n-1}$ оно будет разлагаться в прямую сумму $W = W' \oplus U'$, где

$$W' = \{x_1e_1 + \cdots + x_{n-1}e_{n-1} \mid x_1 + \cdots + x_{n-1} = 0\},$$

и U' — одномерное пространство с базисом, состоящим из одного вектора $e_1 + \cdots + e_{n-1} - (n-1)e_n$. Оба подпространства W', U' инвариантны относительно действия группы $\mathbf{S}_{n-1}$. Таким образом, этот пример показывает, что при переходе к подгруппе свойство неприводимости представления не сохраняется.

3.3. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ АБЕЛЕВЫХ ГРУПП

Простейшими алгебраическими свойствами обладают абелевы группы, т. е. группы с коммутирующими элементами (см. гл. 1). Опишем все неприводимые комплексные представления конечных абелевых групп.

ТЕОРЕМА 3.3. Любое неприводимое комплексное представление абелевой группы в пространстве конечного числа измерений всегда одномерно.

Доказательство. Пусть задана абелева группа G и ее неприводимое представление ψ в комплексном пространстве V. По теореме 7.11 линейный оператор $\psi(g)$, где $g \in G$, имеет в V ненулевой собственный вектор с собственным значением λ_g. Рассмотрим подпространство U в V, состоящее из нуля и всех собственных векторов оператора $\psi(g)$ с собственными значениями λ_g. Как уже отмечалось, подпространство U содержит ненулевой вектор. Кроме того, легко показать, что подпространство U инвариантно относительно операций группы G. Действительно, пусть $h \in G$, $x \in U$ и $y = \psi(h)x = hx$. Тогда

$$gy = g(hx) = (gh)x = (hg)x = h(gx) = h(\lambda_g x) = \lambda_g(hx) = \lambda_g y,$$

т. е. $y \in U$. В силу неприводимости представления ψ получаем, что $U = V$. Так как g — любой элемент из G, то для любых $g \in G$ и $v \in V$ имеем $gv = \lambda_g v$. Следовательно, любое одномерное подпространство в V инвариантно относительно G, и поэтому $\dim V = 1$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть G либо свободная абелева группа с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$, либо аддитивная группа вещественного векторного пространство с тем же базисом. Предположим, что ψ — одномерное представление G в пространстве V с базисом f, причем отображение ψ непрерывно, если G — векторное пространство. Тогда существует та-

кой набор комплексных чисел $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{C}^n$, что для любого вектора $x = x_1 e_1 + \cdots + x_n e_n \in G$ выполнено равенство $\psi(x) f = \exp[i(\alpha, x)] f$, где $(\alpha, x) = \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n$. Если G — свободная абелева группа, то каждое число α_j определено с точностью до $2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$.

Доказательство. Как отмечено в примере 11, необходимо рассмотреть гомоморфизмы ψ группы G в группу U комплексных чисел с модулем 1 относительно умножения. Предположим, что $\psi(e_i) = \exp(i\alpha_j) \in \mathrm{U}$ для некоторого $\alpha_j \in \mathbb{C}$. Поэтому $\psi(x) = \psi(x_1 e_1) \cdots \psi(x_n e_n)$. Если $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{Z}$, то $\psi(x_j e_j) = \psi(e_j)^{x_j} = \exp[i(\alpha_j x_j)]$. Если m — произвольное целое число, то

$$\exp[i\left((\alpha_j + 2\pi m)x_j\right)] = \exp[i(\alpha_j x_j)] \exp(2\pi i m x_j) = \exp[i(\alpha_j x_j)],$$

поскольку число x_j целое. Отсюда следует утверждение для свободной абелевой группы.

Предположим, что G — векторное вещественное пространство и ψ непрерывно. Из рассмотрения свободной абелевой группы вытекает, что $\psi(x e_j) = \exp i(\alpha_j x)$ для любого рационального числа x. Если же r — произвольное вещественное число, то существует последовательность рациональных чисел p_k/q_k, сходящаяся к r. По непрерывности получаем, что

$$\exp i(\alpha_j \frac{p_k}{q_k}) = \psi(\frac{p_k}{q_k} e_j) \to \psi(r e_j),$$
$$\exp i(\alpha_j \frac{p_k}{q_k}) \to \exp i(r\alpha_j).$$

Отсюда $\psi(r e_j) = \exp i(r\alpha_j)$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть конечная абелева группа G имеет в силу теоремы 2.4 разложение

$$G = \langle a_1 \rangle_{p_1^{k_1}} \times \cdots \times \langle a_m \rangle_{p_m^{k_m}},$$

где $p_1, \ldots, p_m$ — простые числа.

Каждое неприводимое комплексное представление ψ группы G имеет вид $\psi(a_j^t) = \zeta_j^t$, где ξ_j — комплексный корень степени $p_j^{k_j}$ из 1 $(0 \leqslant s_j \leqslant p_j, s_j \in \mathbb{Z})$:

$$\zeta_j = \exp\left(\frac{2\pi i s_j}{p_j^{k_j}}\right).$$

В частности, число неэквивалентных неприводимых комплексных представлений конечной абелевой группы G равно ее порядку.

Доказательство. По предыдущей теореме каждое неприводимое представление ψ группы G является одномерным. Пусть $\psi(a_j) = \zeta_j \in \mathbb{C}^*$. Так как элемент $a_j \in G$ в степени $p_j^{k_j}$ равен единичному, то

$$\zeta_j^{p_j^{k_j}} = 1.$$

Обратно, если задан набор корней $\zeta_j \in \mathbb{C}^*$ степени $p_j^{k_j}$ из 1, то отображение $\psi : G \to \mathbb{C}^*$, при котором

$$\psi(a_1^{s_1}, \ldots, a_m^{s_m}) = \zeta_1^{s_1} \cdots \zeta_m^{s_m} \in \mathbb{C}^*$$

для любых $s_1, \ldots, s_m \in \mathbb{Z}$, задает одномерное и потому неприводимое представление группы G.

Опишем, например, все неприводимые представления циклической группы $G = \langle a \rangle_4$ порядка 4. Эта группа состоит из четырех элементов $G = \{1, a, a^2, a^3\}$ по предложению 1.7. Порождающий элемент a имеет порядок 4. Следовательно, его образ при представлении является комплексным корнем степени 4 из 1, т. е. одним из чисел $\{1, -1, i, -i\}$. При этом $\psi(a^k) = \psi(a)^k$ для любого представления ψ и любого показателя k. Таким образом, имеются четыре неэквивалентных комплексных неприводимых представления (НП) $\psi_1, \ldots, \psi_4$ группы G. Запишем этот результат в виде таблицы размера 4×4 (табл. 3.1), строки которой соответствуют каждому из представлений $\psi_1, \ldots, \psi_4$, причем на месте (r, s) стоит $\psi_r(a^{s-1})$.

Опишем теперь все неприводимые комплексные представления прямого произведения $G = \langle a \rangle_2 \times \langle b \rangle_2$ двух циклических групп порядка 2. Так как a, b имеют порядок 2, то их образы при любом неприводимом представлении равны ± 1. Получаемые представления показаны в табл. 3.2.

Опишем все двумерные комплексные представления циклической группы $G = \langle a \rangle_2$. По теореме 3.2 любое двумерное представ-

Таблица 3.1

Неприводимые представления группы $\langle a \rangle_4$

ψ_i	1	a	a^2	a^3
ψ_1	1	1	1	1
ψ_2	1	-1	1	-1
ψ_3	1	i	-1	$-i$
ψ_4	1	$-i$	-1	i

Таблица 3.2

Неприводимые представления группы $\langle a\rangle_2 \times \langle b\rangle_2$

ψ_i	**1**	a	b	a
ψ_1	1	1	1	1
ψ_2	1	−1	1	−1
ψ_3	1	1	−1	−1
ψ_4	1	−1	−1	1

Таблица 3.3

Неприводимые представления группы $\langle a\rangle_2$

ψ_i	**1**	a
ψ_1	1	1
ψ_2	1	−1

ление абелевой группы G приводимо, т. е. является прямой суммой одномерных неприводимых представлений. Имеются два различных одномерных представления группы G (табл. 3.3).

Отсюда любое двумерное представление группы $G = \langle a\rangle_2$ эквивалентно одному из следующих представлений:

$$\psi_1 \oplus \psi_1, \quad \psi_1 \oplus \psi_2, \quad \psi_2 \oplus \psi_2.$$

В каждом из этих представлений единичному элементу группы G соответствует единичная матрица размера 2, а элементу a — соответственно матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Теорема 3.3 позволяет описать все конечномерные комплексные представления абелевых групп. Справедлива также

ТЕОРЕМА 3.4. Пусть задано конечномерное комплексное представление $\phi : A \to \mathrm{GL}(V)$ абелевой группы A в пространстве V. Тогда в V существует базис, в котором матрица каждого оператора $\phi(a)$, $a \in A$ имеет верхнетреугольный вид

$$\begin{pmatrix} \phi_{11}(a) & \phi_{12}(a) & \dots & \phi_{1n}(a) \\ 0 & \phi_{22}(a) & \dots & \phi_{2n}(a) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_{nn}(a) \end{pmatrix}.$$

Каждый диагональный элемент $\phi_{jj}(a)$, $1 \leqslant j \leqslant n$ задает гомоморфизм групп $\phi_{jj} : A \to \mathbb{C}^*$, где $\mathbb{C}^*$ — мультипликативная группа ненулевых комплексных чисел. Другими словами, $\phi_{jj}(a+b) = \phi_{jj}(a)\phi_{jj}(b)$ для всех $a, b \in A$.

3.4. ОДНОМЕРНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ГРУПП

Как отмечалось, одномерные представления любых групп всегда неприводимы. Это позволяет перенести на них закономерности, установленные для неприводимых представлений абелевых групп. Приведем описание одномерных представлений произвольной группы G.

Напомним, что коммутантом группы G называется совокупность всех произведений коммутаторов вида $\{x, y\} = xyx^{-1}y^{-1}$ в G, см. подразд. 1.8.

Т Е О Р Е М А 3.5. Все одномерные представления группы G сводятся к одномерным представлениям абелевой группы G/G', где G' — коммутант группы G.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Одномерное представление группы G является гомоморфизмом $\phi : G \to \mathrm{GL}(1, \mathbb{C})$ в комплексном случае и гомоморфизмом $\phi : G \to \mathrm{GL}(1, \mathbb{R})$ в вещественном случае. Имеются очевидные изоморфизмы групп $\mathrm{GL}(1, \mathbb{C}) \simeq \mathbb{C}^*$, $\mathrm{GL}(1, \mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}^*$, причем группы $\mathbb{C}^*$, $\mathbb{R}^*$ абелевы. В силу предложения 1.19 коммутант $G' \subseteq \ker \phi$. Тем самым представление ϕ порождает представление $\overline{\phi} : G/G' \to \mathbb{C}^*$ (соответственно, $\overline{\phi} : G/G' \to \mathbb{R}^*$), при котором $\overline{\phi}(gG') = \phi(g)$ для любого $g \in G$. Здесь gG', $g \in G$ — элемент фактор-группы G/G', являющийся смежным классом группы G по нормальной подгруппе G'.

Обратно, если задано представление $\psi : G/G' \to \mathbb{C}^*$ (либо $\psi : G/G' \to \mathbb{R}^*$), то получаем представление $\phi : G \to \mathbb{C}^*$ (соответственно, $\phi : G \to \mathbb{R}^*$), при котором $\phi = \psi\pi$, где $\pi : G \to G/G'$ — естественный гомоморфизм на фактор-группу.

Эта теорема показывает, что описание одномерных представлений произвольной группы G сводится к описанию одномерных представлений абелевой группы G/G'. В качестве приложения опишем одномерные представления симметрических групп $\mathbf{S}_n$.

Т Е О Р Е М А 3.6. Имеются два одномерных представления симметрической группы $\mathbf{S}_n$ — тождественное представление $\sigma \mapsto 1$ и представление $\sigma \mapsto (-1)^\sigma$, где $\sigma \in \mathbf{S}_n$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Напомним, что $\mathbf{S}_n' = \mathbf{A}_n$ по теореме 1.16 и $\mathbf{S}_n/\mathbf{A}_n$ — циклическая группа порядка 2. Остается воспользоваться теоремой 3.5.

Рассмотрим теперь одномерные представления групп диэдра $\mathbf{D}_n$ и группы кватернионов $\mathbf{Q}_8$. Воспользуемся для этого теоре-

мой 3.5 и теоремой 1.22. Если n нечетно, то $\mathbf{D}'_n = \langle a \rangle$ и поэтому $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n \simeq \langle b \rangle_2$ имеет порядок 2. Таким образом, имеются два одномерных представления группы диэдра $\mathbf{D}_n$:

$$a \mapsto 1, \quad b \mapsto 1 \quad \text{и} \quad a \mapsto 1, \quad b \mapsto -1. \tag{3.4}$$

Если n четно, то $\mathbf{D}_n/\mathbf{D}'_n \simeq \langle a \rangle_2 \times \langle b \rangle_2$. Отсюда, как отмечено в подразд. 3.3, имеются четыре одномерных представления группы $\mathbf{D}_n$:

$$\begin{array}{ll} a \mapsto 1, & b \mapsto 1; \\ a \mapsto 1, & b \mapsto -1; \\ a \mapsto -1, & b \mapsto 1; \\ a \mapsto -1, & b \mapsto -1. \end{array} \tag{3.5}$$

Перейдем к описанию одномерных представлений группы кватернионов $\mathbf{Q}_8$. По теореме 1.22 получаем

$$\mathbf{Q}_8/\mathbf{Q}'_8 \simeq \langle I \rangle_2 \times \langle J \rangle_2.$$

Поэтому имеются четыре одномерных представления группы $\mathbf{Q}_8$:

$$\begin{array}{llll} \pm E \mapsto 1, & I \mapsto 1, & J \mapsto 1, & K \mapsto 1; \\ \pm E \mapsto 1, & I \mapsto 1, & J \mapsto -1, & K \mapsto -1; \\ \pm E \mapsto 1, & I \mapsto -1, & J \mapsto 1, & K \mapsto -1; \\ \pm E \mapsto 1, & I \mapsto -1, & J \mapsto -1, & K \mapsto 1. \end{array} \tag{3.6}$$

3.5. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП ДИЭДРА

В подразд. 3.4 были выведены все одномерные комплексные представления групп диэдра. Опишем все остальные неприводимые комплексные представления этих групп. Воспользуемся тем, что классификацию неприводимых представлений абелевых групп можно использовать и при описании многомерных неприводимых представлений некоторых неабелевых групп, в частности групп диэдра $\mathbf{D}_n$.

Т Е О Р Е М А 3.7. Предположим, что в конечной группе G имеется абелева подгруппа A индекса j. Тогда любое неприводимое комплексное представление группы G имеет размерность не выше j.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть имеется неприводимое комплексное представление $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ группы G. Им порождается представление $\phi|_A : A \to \mathrm{GL}(V)$ абелевой группы $A \in G$. По теореме 3.3 в V имеется одномерное подпространство $U = \langle z \rangle$, инвариантное относительно всех операторов

$\phi(a)$, $a \in A$. Это означает, что $az = \lambda_a z$ для любого $a \in A$, где $\lambda_a \in \mathbb{C}^*$.

По условию также имеются j левых смежных классов $g_1A, \ldots, g_jA$ группы G по подгруппе A. Пусть $g \in G$. Для любого индекса $t = 1, \ldots, j$ найдется такой индекс $t' = 1, \ldots, j$, что $gg_t = g_{t'}a_t$ для некоторого $a_t \in A$.

Рассмотрим линейную оболочку (см. подразд. 7.2) $W = \langle g_1z, \ldots, g_jz\rangle$; $z \in U$ в пространстве V. Очевидно, $\dim W \leqslant j$. Предположим, что $x = \alpha_1 g_1 z + \cdots + \alpha_j g_j z \in W$, где $\alpha_1, \ldots, \alpha_j \in \mathbb{C}$. Если $g \in G$, то

$$gx = g(\alpha_1 g_1 z + \cdots + \alpha_j g_j z) = \alpha_1 g g_1 z + \cdots + \alpha_j g g_j z =$$
$$= \alpha_1 g_{1'} a_1 z + \cdots + \alpha_j g_{j'} a_j z = \alpha_1 \lambda_{a_1} g_{1'} z + \cdots + \alpha_j \lambda_{a_j} g_{j'} z \in W.$$

Следовательно, W является подпространством V, инвариантным относительно G и поэтому, в силу неприводимости ϕ, $W = V$.

С Л Е Д С Т В И Е. Все неприводимые комплексные представления группы диэдра $\mathbf{D}_n$ имеют размерность не больше 2.

Д о к а з а т е л ь с т в о. В группе диэдра $\mathbf{D}_n$ имеется циклическая, и потому абелева, подгруппа вращений $A = \langle a\rangle_n$ индекса 2.

Доказательство теоремы 3.7 дает алгоритм построения всех двумерных неприводимых комплексных представлений группы диэдра $\mathbf{D}_n$. Пусть на комплексном двумерном пространстве V задано неприводимое представление ϕ группы диэдра $\mathbf{D}_n$ и e_1 — собственный вектор оператора поворота $a \in \mathbf{D}_n$. Так как a имеет порядок n, то $ae_1 = \lambda e_1$, где $\lambda \in \mathbb{C}$ — корень из 1 степени n. При этом базис пространства V составляют элементы e_1 и e_2. Так как $b^2 = 1$, то в базисе e_1, e_2 матрица оператора $\phi(b)$ имеет вид

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

Далее, $ae_2 = abe_1 = ba^{-1}e_1 = \lambda^{-1}be_1 = \lambda^{-1}e_2$. Это означает, что матрица оператора $\Phi(a)$ в базисе e_1, e_2 имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} \end{pmatrix}.$$

У п р а ж н е н и е 3.3. Доказать, что построенное представление группы $\mathbf{D}_n$ неприводимо тогда и только тогда, когда $\lambda \neq \pm 1$. Доказать,

что при $\lambda = \exp(2\pi/n)$ построенное представление ϕ группы $\mathbf{D}_n$ эквивалентно естественному представлению группы $\mathbf{D}_n$ как группы симметрий правильного n-угольника.

Вопрос об эквивалентности построенных представлений мы рассмотрим в подразд. 3.7.

3.6. ЛЕММА ШУРА И ЕЕ СЛЕДСТВИЯ

Рассмотрим подробнее свойства некоторых представлений групп, которые позволяют перейти в их описании от матриц T_g к числам $\operatorname{tr} T_g$.

В дальнейшем будем использовать *символ Кронекера*:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Символ Кронекера связан с элементами единичной матрицы E: на месте (i, j) в матрице E стоит элемент δ_{ij}.

ТЕОРЕМА 3.8 (лемма Шура). Пусть заданы два неприводимых представления $\phi_1 : G \to \mathrm{GL}(V_1)$ и $\phi_2 : G \to \to \mathrm{GL}(V_2)$ группы G. Предположим, что $f : V_1 \to V_2$ — линейное отображение, причем для любого $g \in G$ коммутативна диаграмма (см. сс. 4—155):

$$\begin{array}{ccc} V_1 & \xrightarrow{f} & V_2 \\ {\scriptstyle \phi_1(g)}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle \phi_2(g)} \\ V_1 & \xrightarrow{f} & V_2 \end{array}$$

Если ϕ_1, ϕ_2 не эквивалентны, то $f = 0$. Если $f \neq 0$ и $V_1 = V_2 = V$ — конечномерно, то существует такое комплексное число λ, что $f(x) = \lambda x$ для всех $x \in V$.

Доказательство. Пусть ϕ_1, ϕ_2 не эквивалентны, $f \neq 0$, и $W = \ker f$. Тогда $W \neq V_1$, причем W инвариантно относительно ϕ_1. Следовательно, $W = 0$. Аналогично $\operatorname{Im} f$ (образ V_1 в V_2, см. гл. 7) — подпространство в V_2, инвариантное относительно ϕ_2. Поэтому $\operatorname{Im} f = V_2$, т. е. f — эквивалентность, что невозможно.

Пусть $V_1 = V_2 = V$ и $\phi_1 = \phi_2 = \phi$. Тогда f имеет в V собственный вектор x с собственным значением λ. Собственное подпространство $u \subseteq V$ для оператора f с этим собственным значением λ инвариантно относительно ϕ. Но поскольк-

ку представление ϕ неприводимо, $u = V$, т. е. пространство V совпадает с собственным подпространством отображения f.

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть заданы два неприводимых конечномерных комплексных представления $\phi_1 : G \to \mathrm{GL}(V_1)$ и $\phi_2 : G \to \mathrm{GL}(V_2)$ конечной группы G. Предположим, что имеется линейное отображение $B : V_1 \to V_2$. Положим $\Phi = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \phi_2(g)B\phi_1(g^{-1}) : V_1 \to V_2$. Если V_1, V_2 не эквивалентны, то $\Phi = 0$. Если же $V_1 = V_2 = V$ и $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, то $\Phi(x) = (\operatorname{tr} B/\dim V)x$ для любого $x \in V$ (см. с. 458).

Доказательство. Для любого $h \in G$ имеем

$$\phi_2(h)\Phi = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \phi_2(h)\phi_2(g)B\phi_1(g^{-1}) =$$

$$= \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \phi_2(hg)B\phi_1(g^{-1}) = \frac{1}{|G|}\sum_{u\in G} \phi_2(u)B\phi_1(u^{-1}h) =$$

$$= \left[\frac{1}{|G|}\sum_{u\in G} \phi_2(u)B\phi_1(u^{-1})\right]\phi_1(h) = \Phi\phi_1(h).$$

Поэтому, если ϕ_1, ϕ_2 не эквивалентны, то $\Phi = 0$ по теореме 3.8.

Во втором случае (V_1 совпадает с V_2, а ϕ_1 — с ϕ_2) существует такое $\lambda \in \mathbb{C}$, что

$$\Phi(x) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \phi_2(g)B\phi_1(g^{-1})(x) = \lambda x$$

для любого $x \in V$. В частности, $\operatorname{tr}\Phi = \lambda \dim V$, т. е. $\lambda = \dfrac{\operatorname{tr}\Phi}{\dim V}$. Но

$$\operatorname{tr}\Phi = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \operatorname{tr}[\phi(g)B\phi(g)^{-1}] = \operatorname{tr} B.$$

СЛЕДСТВИЕ 2. Пусть $\mathbf{e}$ — ортонормированный базис в пространстве V_1 в условии предыдущего следствия и $\mathbf{f}$ — ортонормированный базис в пространстве V_2, причем если $V_1 = V_2 = V$ и $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, то $\mathbf{e} = \mathbf{f}$. Предположим, что заданы матрицы $\phi_1(g) = \left(T'(g)_{ij}\right)$ и $\phi_2(g) = \left(T^2(g)_{ij}\right)$ унитарных представлений ϕ_1 и ϕ_2 в базисах $\mathbf{e}$, $\mathbf{f}$ соответственно. Если представления ϕ_1, ϕ_2 не эквивалентны, то для любых индексов i, j, r, s имеем

$$\sum_{g\in G} T'(g)_{ij}\overline{T(g)_{sr}} = 0 \qquad (3.7)$$

(черта над символом означает комплексное сопряжение). Если же $V_1 = V_2 = V$ и $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, то для любого набора индексов i, j, r, s:

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} T'(g)_{ij}\overline{T(g)_{sr}} = \frac{\delta_{is}\delta_{jr}}{\dim V}. \tag{3.8}$$

Доказательство. Отметим, что в силу унитарности представления T имеем $T(g^{-1}) = T(g)^{-1} = {}^t\overline{T(g)}$, и поэтому $T(g^{-1})_{rs} = \overline{T(g)_{sr}}$.

Пусть $B : V_1 \to V_2$ — произвольный оператор, имеющий в паре базисов $(\mathbf{e}, \mathbf{f})$ ненулевую матрицу перехода $B = (b_{ij})$. Рассмотрим матрицу линейного отображения Φ из следствия I в выбранной паре базисов. В матрице Φ на месте i, s в силу сделанного выше замечания стоит число

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\sum_{j,s} T'(g)_{ij}b_{jr}\overline{T(g)_{sr}}.$$

Если ϕ_1, ϕ_2 не эквивалентны, то $\Phi = 0$ для любой матрицы B. В частности, если $b_{jr} = 1$ и все остальные элементы B нулевые, то получаем равенство (3.7).

Во втором случае по предыдущему следствию

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\sum_{j,s} T'(g)_{ij}b_{jr}\overline{T(g)_{sr}} = \frac{\operatorname{tr} B}{\dim V}\delta_{is}.$$

Взяв матрицу B, в которой $b_{jr} = 1$, а все остальные элементы нулевые, получаем (3.8).

Обозначим через $\mathfrak{L}$ пространство всех комплексных функций τ: $G \to \mathbb{C}$. Если $\tau, \psi \in \mathfrak{L}$, то положим

$$(\tau, \psi) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} \tau(g)\overline{\psi(g)}. \tag{3.9}$$

Предположим, что представления T, T' неприводимы и они заданы матрицами $T(g), T'(g)$ соответственно. Если эти представления неэквивалентны, то по (3.7) имеем

$$\left(T'(g)_{ij}, T(g)_{sr}\right) = 0. \tag{3.10}$$

Если же эти представления эквивалентны, то

$$\left(T'(g)_{ij}, T(g)_{sr}\right) = \frac{\delta_{is}\delta_{jr}}{\dim V}. \tag{3.11}$$

3.7. ХАРАКТЕРЫ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

На основании леммы Шура любому представлению T группы G можно поставить в соответствие особую функцию на элементах группы: набор комплексных чисел $\{\operatorname{tr} T(g)\}$. Для неприводимых представлений такие функции, называемые характерами, ортонормированы, что позволяет свести анализ представлений группы к обычному разложению вектора в заданном базисе. В этом подразделе будет изложена теория комплексных конечномерных характеров конечных групп.

Пусть $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ — конечномерное комплексное представление конечной группы G. *Характером* представления ϕ называется функция $\chi_\phi \in \mathcal{L}$ (см. выше), для которой $\chi_\phi(g) = \operatorname{tr} \phi(g) \in \mathbb{C}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3.2. Пусть $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ — представление. Справедливы следующие равенства:

1) $\chi_\phi(hgh^{-1}) = \chi_\phi(g)$;

2) $\chi_\phi(1) = \dim V$, здесь 1 — единичный элемент группы G;

3) $\chi_\phi(g^{-1}) = \overline{\chi_\phi(g)}$;

4) $|\chi_\phi(g)| \leqslant \dim V$, причем, если $|\chi_\phi(g)| = \dim V$, то $\phi(g) = \lambda E$, где $\lambda \in \mathbb{C}$ — комплексный корень из единицы степени $|G|$, а E — единичная матрица, размер которой равен размерности пространства V.

Доказательство. Имеем

$$\chi_\phi(hgh^{-1}) = \operatorname{tr}\left[\phi(h)\phi(g)\phi(h)^{-1}\right] = \operatorname{tr}(\phi(g)) = \chi_\phi(g).$$

Кроме того, $\chi_\phi(1) = \operatorname{tr} E = \dim V$, где E — единичная матрица. Так как $\phi(g)$ унитарно по теореме 3.1, то по теореме 1.14 матрица $\phi(g)$ в некотором ортонормированном базисе имеет диагональный вид $\operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, причем $\lambda_j^m = 1$, если $m = |g|$. Отсюда вытекают остальные утверждения.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3.3. Если $\phi = \phi_1 \oplus \phi_2$, то $\chi_\phi = \chi_{\phi_1} + \chi_{\phi_2}$. (Приводится без доказательства.)

Функция $\xi \in \mathcal{L}$ называется *центральной*, если $\xi(hgh^{-1}) = \xi(g)$ для любых элементов $g, h \in G$, т. е. ξ является *функцией на классах сопряженных элементов* в G. Нетрудно видеть, что центральные функции образуют подпространство $\mathcal{H}$, размерность которого равна числу классов сопряженных элементов в G.

ТЕОРЕМА 3.9. Пусть χ — характер некоторого неприводимого представления ϕ конечной группы G и ска-

лярное произведение (χ, χ) задано в виде 3.9. Тогда $(\chi, \chi) = 1$. Если же ϕ_1, ϕ_2 — два неприводимых неэквивалентных представления G, то $(\chi_{\phi_1}, \chi_{\phi_2}) = 0$.

Доказательство. Пусть $\phi(g)$ задается некоторой матрицей

$$T(g) = \left(T(g)_{ij}\right) \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C}).$$

По следствию II из теоремы 3.8:

$$(\chi, \chi) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \left(\sum_s T(g)_{ss} \right) \left(\sum_j \overline{T(g)_{jj}} \right) =$$

$$= \sum_{s,j} \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} T(g)_{ss} \overline{T(g)_{jj}} = \sum_{s,j} \left(T(g)_{ss}, T(g)_{jj}\right) =$$

$$= \sum_{s,j} \frac{\delta_{sj}\delta_{sj}}{\dim V} = 1.$$

Аналогично проверяется второе равенство.

ТЕОРЕМА 3.10. Пусть конечномерное комплексное представление ϕ конечной группы G с характером χ разложено в прямую сумму неприводимых представлений $\phi = \phi_1 \oplus \cdots \oplus \phi_k$. Если χ_j — характер неприводимого представления ϕ_j и r_j — его кратность в разложении ϕ, то $(\chi, \chi_j) = r_j$ (проверяется непосредственно).

СЛЕДСТВИЕ. Любое конечномерное комплексное представление ϕ конечной группы G однозначно определяется своим характером χ_ϕ. Представление ϕ неприводимо тогда и только тогда, когда $(\chi_\phi, \chi_\phi) = 1$.

ТЕОРЕМА 3.11. Пусть $n_1, \ldots, n_s$ — размерности всех неприводимых комплексных представлений конечной группы G. Тогда $|G| = n_1^2 + \cdots + n_s^2$.

Доказательство. Рассмотрим регулярное представление $\rho : G \to \mathrm{GL}(V)$ из подразд. 3.1, где $\rho(g)e_h = e_{gh}$. Тогда $\chi_\rho(1) = |G|$ и $\chi_\rho(g) = 0$, если $g \neq 1$. При этом

$$n_j = (\chi_\rho, \chi_j) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_\rho(g)\overline{\chi_j(g)} = \frac{1}{|G|}|G|\overline{\chi_j(1)} = \dim V_j.$$

(Каждое неприводимое представление содержится в разложении регулярного столько раз, какова его размерность.)

Итак, $\chi_\rho = n_1\chi_1 + \cdots + n_s\chi_s$. Приравнивая размерности, получим

$$|G| = \chi_\rho(1) = n_1^2 + \cdots + n_s^2.$$

Пусть $\mathcal{H}$ — пространство всех центральных функций на G.

ТЕОРЕМА 3.12. Пусть $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ — конечномерное комплексное представление группы G и $f \in \mathcal{H}$. Положим

$$\phi_f = \sum_{g \in G} f(g)\phi(g).$$

Если ϕ неприводимо и имеет размерность n, то

$$\phi_f = \frac{|G|}{n}(f, \overline{\chi_\phi})\varepsilon,$$

где ε — тождественный оператор.

Доказательство. Имеем

$$\phi(h)\phi_f\phi(h^{-1}) = \sum_{g \in G} \phi(h)f(g)\phi(g)\phi(h^{-1}) =$$

$$= \sum_{g \in G} f(g)\phi(hgh^{-1}) = \sum_{g \in G} f(g)\phi(g) = \phi_f.$$

Следовательно, $\phi_f(x) = \lambda x$ для некоторого комплексного числа λ по следствию 1 из теоремы 3.8. Отсюда

$$\mathrm{tr}(\phi_f) = \lambda \dim V = \sum_{g \in G} f(g)\chi_\phi(g) = |G|(f, \overline{\chi_\phi}).$$

ТЕОРЕМА 3.13. Характеры всех неприводимых неэквивалентных представлений $\chi_1, \ldots, \chi_s$ группы G составляют базис пространства $\mathcal{H}$.

Доказательство. Пусть $f \in \mathcal{H}$ и $f \perp \chi_j$ для всех j, т. е. $(f, \chi_j) = 0$ для всех j. Тогда $\phi_f = 0$ по предыдущей теореме для любого представления ϕ. В частности, при регулярном представлении ρ имеем

$$\rho_f(e_1) = \sum_{g \in G} \overline{f(g)}\rho(g)e_1 = \sum_{g \in G} \overline{f(g)}e_g = 0.$$

Следовательно, $f(g) = 0$, т. е. функция f нулевая.

СЛЕДСТВИЕ. Число классов сопряженных элементов группы G равно числу неэквивалентных неприводимых комплексных представлений группы G.

Применим полученные результаты для вычисления характеров представлений некоторых групп. Как отмечалось в подразд. 3.3, неприводимые представления циклической группы $G = \langle a \rangle_n$ одномерны и имеют вид

$$\phi_k(a) = \exp\frac{2\pi i k}{n} = \chi_{\phi_k}, \quad k = 0, \ldots, n-1.$$

Используя формулу для суммы геометрической прогрессии, получаем, что при $k \neq k'$:

$$(\chi_{\phi_k}, \chi_{\phi_{k'}}) = \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} \exp\frac{2\pi i k j}{n} \exp -\frac{2\pi i k' j}{n} =$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} \exp\frac{2\pi i (k-k') j}{n} = \frac{1}{n}\,\frac{\exp\left[\frac{2\pi i (k-k')}{n} n\right] - 1}{\exp\frac{2\pi i (k-k')}{n} - 1} = 0.$$

При $k = k'$ получаем

$$(\chi_{\phi_k}, \chi_{\phi_k}) = \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} \exp\frac{2\pi i k j}{n} \exp\frac{-2\pi i k j}{n} = \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} 1 = 1.$$

В подразд. 3.4, 3.5 описаны неприводимые комплексные представления группы кватернионов $\mathbf{Q}_8$, групп диэдра $\mathbf{D}_n$, $n \geqslant 3$. Все они имеют размерность 1 или 2. Исследуем вопрос об их эквивалентности.

Ранее отмечалось, что группа кватернионов $\mathbf{Q}_8$ имеет четыре одномерных представления (3.6). Группа $\mathbf{Q}_8$ имеет следующие классы сопряженных элементов: $\{E\}$, $\{-E\}$, $\{\pm I\}$, $\{\pm J\}$, $\{\pm K\}$. Следовательно, имеются всего пять неэквивалентных неприводимых комплексных представлений группы $\mathbf{Q}_8$; из них четыре одномерных. Следовательно, по теореме 3.11 $8 = |\mathbf{Q}_8| = 1+1+1+1+4$, т. е. имеется еще одно двумерное представление. Рассмотрим естественное двумерное представление $\mathbf{Q}_8$ матрицами вида (1.10) и докажем его неприводимость. Для этого составим таблицу его характеров. Имеем $\chi(E) = 2$, $\chi(-E) = -2$, $\chi(\pm I) = \chi(\pm J) = \chi(\pm K) = 0$. Следовательно:

$$(\chi, \chi) = \frac{1}{8}\left(|\chi(E)|^2 + |\chi(-E)|^2 + 2|\chi(I)|^2 + 2|\chi(J)|^2 + 2|\chi(K)|^2\right) =$$

$$= \frac{1}{8}(4+4) = 1,$$

т. е. это представление неприводимо по следствию из теоремы 3.10.

Рассмотрим теперь вопрос об эквивалентности неприводимых комплексных представления групп диэдра $\mathbf{D}_n$, $n \geqslant 3$, приведенных в подразд. 3.5. Как отмечено в подразд. 3.4, при нечетном n имеются два одномерных неэквивалентных представления группы диэдра $\mathbf{D}_n$, $n \geqslant 3$, указанных в (3.4). Если n четное, то имеются четыре одномерных представления группы $\mathbf{D}_n$, приведенных

в (3.5). Рассмотрим классы сопряженных элементов групп диэдра $\mathbf{D}_n$ (см. подразд. 1.7). Если n нечетно, то имеются следующие классы сопряженных элементов:

$$\{1\}, \{a, a^{n-1}\}, \ldots, \{a^{(n-1)/2}, a^{(n+1)/2}\}, \{b, ba, \ldots, ba^{n-1}\}.$$

Число таких классов равно $1 + (n-1)/2 + 1 = (n+3)/2$.

Если n четно, то имеются следующие классы сопряженных элементов:

$$\{1\}, \{a, a^{n-1}\}, \ldots, \{a^{(n-2)/2}, a^{(n+2)/2}\}, \{a^{n/2}\},$$
$$\{b, ba^2, \ldots, ba^n\}, \{ba, ba^3, \ldots, ba^{n-1}\}.$$

Число таких классов равно $1 + (n-2)/2 + 1 + 2 = (n+6)/2$.

Рассмотрим серию двумерных представлений $\{\psi_k\}$ группы диэдра $\mathbf{D}_n$ из подразд. 3.5, где $k = 1, \ldots, \left[\dfrac{n-1}{2}\right]$:

$$\psi_k(a) = \begin{pmatrix} \exp\dfrac{2\pi k i}{n} & 0 \\ 0 & \exp\dfrac{-2\pi k i}{n} \end{pmatrix}, \qquad \psi_k(b) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 3.4. Представления ψ_k и $\psi_{k'}$ при

$$1 \leqslant k \neq k' \leqslant \left[\frac{n-1}{2}\right],$$

неприводимы и неэквивалентны.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Заметим, что если χ_k — характер представления ψ_k, то $\chi_k(a) = 2\cos\dfrac{2\pi k}{n}$. Если бы представления ψ_k, $\psi_{k'}$ были эквивалентны, то $\chi_k(a) = \chi_{k'}(a)$, откуда

$$2\cos\frac{2\pi k}{n} = \exp\frac{2\pi k i}{n} + \exp\frac{-2\pi k i}{n} = \chi_k(a) =$$
$$= \chi_{k'}(a) = \exp\frac{2\pi k' i}{n} + \exp\frac{-2\pi k' i}{n} = 2\cos\frac{2\pi k'}{n}. \tag{3.12}$$

Так как $1 \leqslant k \neq k' \leqslant \left[\dfrac{n-1}{2}\right]$, то

$$\frac{2\pi}{n} \leqslant \frac{2\pi k}{n} \neq \frac{2\pi k'}{n} < \pi.$$

Следовательно, $\cos(2\pi k/n) \neq \cos(2\pi k'/n)$, что противоречит (3.12). Поэтому представления ψ_k и $\psi_{k'}$ неэквивалентны.

Если некоторое двумерное представление ψ_k приводимо, то оно вполне приводимо по теореме Машке (3.2) и, следовательно, эквивалентно прямой сумме двух одномерных подпредставлений. Поэтому существует такая обратимая матрица C, что матрицы

$$C^{-1}\psi_k(a)C, \quad C^{-1}\psi_k(b)C$$

диагональны. В этом случае эти матрицы перестановочны. Но тогда перестановочны и матрицы $\psi_k(a), \psi_k(b)$. Непосредственная проверка показывает, что

$$\psi_k(ba) = \psi(b)\psi(a) = \begin{pmatrix} 0 & \exp\dfrac{-2\pi ki}{n} \\ \exp\dfrac{2\pi ki}{n} & 0 \end{pmatrix}.$$

Однако

$$\psi_k(ab) = \psi(a)\psi(b) = \begin{pmatrix} 0 & \exp\dfrac{2\pi ki}{n} \\ \exp\dfrac{-2\pi ki}{n} & 0 \end{pmatrix}.$$

Если $\psi_k(ba) = \psi_k(ab)$, то $\exp\dfrac{2\pi ki}{n} = \exp\dfrac{-2\pi ki}{n}$, откуда $\exp\dfrac{4\pi ki}{n} = 1$ и $\dfrac{4\pi k}{n} = 2m\pi$, для некоторого $m \in \mathbb{Z}$. Следовательно, $k = \dfrac{mn}{2}$, что противоречит условию $1 \leqslant k \leqslant (n-1)/2$. Поэтому представления $\{\psi_k\}$ неприводимы.

Таким образом, при нечетном $n = 2m+1$ нами построено m неприводимых двумерных представлений. Всего же неприводимых представлений $(n+3)/2 = (2m+4)/2 = m+2$, из них два одномерных. Итак, найдены все неприводимые комплексные представления группы диэдра $\mathbf{D}_n$ при нечетном n .

При четном $n = 2m$ нами построено $m-1$ неприводимых двумерных представлений. Всего же неприводимых представлений $(n+6)/2 = (2m+6)/2 = m+3$, из них четыре одномерных.

Таким образом, найдены все неприводимые комплексные представления группы $\mathbf{D}_n$ при четном n.

Опишем все неприводимые представления групп $\mathbf{S}_3$ и $\mathbf{S}_4$. Их число совпадает с числом классов сопряженных элементов в группе. Напомним, что в $\mathbf{S}_3$ имеются три класса сопряженных элементов: $\{1\}, \{(12)\}, \{(123)\}$ (см. подразд. 1.7). Поэтому группа $\mathbf{S}_3$

имеет три неприводимых представления. Два из них одномерные (см. подразд. 3.4). Следовательно, имеется еще одно неприводимое представление размерности n, причем $|\mathbf{S}_3| = 6 = 1 + 1 + n^2$ по теореме 3.11. Отсюда $n = 2$. Это представление совпадает с естественным представлением $\mathbf{S}_3 \simeq \mathbf{D}_3$. Действительно, в этом представлении

$$(23) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (123) \mapsto \begin{pmatrix} \cos\dfrac{2\pi}{3} & -\sin\dfrac{2\pi}{3} \\ \sin\dfrac{2\pi}{3} & \cos\dfrac{2\pi}{3} \end{pmatrix}.$$

Следовательно

$$\chi(1) = 2, \quad \chi(23) = 0, \quad \chi(123) = 2\cos\frac{2\pi}{3} = -2 \cdot \frac{1}{2} = -1.$$

В группе $\mathbf{S}_3$ помимо тождественной перестановки имеются три цикла длины 2 и два цикла длины 3. Циклы одинаковой длины составляют классы, в каждом из которых компоненты характера χ одинаковы. Поэтому

$$(\chi, \chi) = \frac{1}{6}\left[4 + 3 \cdot 0 + 2(-1)^2\right] = 1,$$

т. е. это представление неприводимо. Итак, имеются три неприводимых представления ψ_1, ψ_2, ψ_3. В табл. 3.4 характеров на месте (i, j) стоит значение характера χ_{ψ_i} на j-м классе сопряженных элементов:

Опишем все неприводимые представления группы $\mathbf{S}_4$. Напомним, что в $\mathbf{S}_4$ имеются 5 классов сопряженных элементов: {1}, {(12)}, {(123)}, {(1234}, {(12)(34)}, содержащих, соответственно, 1, 6, 8, 6, 3 элементов (см. теорему 1.13). Поэтому имеется пять неприводимых представлений группы $\mathbf{S}_4$. Два из них одномерны (см. подразд. 3.4). Одно представление двумерное и порождено изоморфизмом $\mathbf{S}_4/\mathbf{V}_4 \simeq \mathbf{S}_3$ (см. теорему 1.12). Оно задается следующими матрицами:

Таблица 3.4

Характеры неприводимых представлений групп $\mathbf{S}_3$

ψ_i	{1}	{(12)}	{(123)}
ψ_1	1	1	1
ψ_2	1	–1	1
ψ_3	2	0	–1

Таблица 3.5

Характеры неприводимых представлений группы S_4

ψ_i	$\{1\}$	$\{(12)\}$	$\{(123)\}$	$\{(1234)\}$	$\{(12)(34)\}$
ψ_1	1	1	1	1	1
ψ_2	1	−1	1	−1	1
ψ_3	2	0	−1	0	2
ψ_4	3	1	0	−1	−1
ψ_5	3	−1	0	1	−1

$$(12) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (123) \mapsto \begin{pmatrix} \cos\dfrac{2\pi}{3} & -\sin\dfrac{2\pi}{3} \\ \sin\dfrac{2\pi}{3} & \cos\dfrac{2\pi}{3} \end{pmatrix},$$

$$(12)(34) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Добавим сюда два неэквивалентных неприводимых трехмерных представления группы $\mathbf{S_4}$ в качестве группы симметрий тетраэдра и группы вращений куба (см. подразд. 3.4, пример 1, случай 2)). Сумма квадратов размерностей всех пяти представлений равна 1 + 1+ +4 + 9 + 9 = 24 (т. е. порядку $\mathbf{S_4}$). Характеры группы $\mathbf{S_4}$ показаны в табл. 3.5.

В этой таблице в строке, соответствующей представлению ψ_k, и в столбце, соответствующем, например, классу сопряженных элементов $\{(1234)\}$, стоит значение характера представления ψ_k на классе сопряженных элементов, состоящем из всех циклов длины 4.

3.8. ТЕНЗОРНЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В основе теории представлений лежит теорема Машке, позволяющая свести произвольное представление заданной группы к прямой сумме неприводимых. Важную роль при этом играет операция прямой суммы, позволяющая строить новые представления по заданному набору исходных. Другой важной конструкцией является тензорное произведение представлений. Это произведение будет далее применяться при описании неприводимых представлений ряда групп.

Предположим, что заданы два представления Φ, Ψ группы G в пространствах V, W. В тензорном произведении пространств (см. подразд. 7.11) $V \otimes W$ имеется представление $\Phi \otimes \Psi$, называемое *тензорным произведением представлений*, которое задается по правилу

$$[(\Phi \otimes \Psi)(g)]\,(v \otimes w) = \Phi(g)v \otimes \Psi(g)w$$

для всех $g \in G$ и $v \in V$, $w \in W$.

ТЕОРЕМА 3.14. Пусть заданы два конечномерных представления Φ, Ψ группы G. Если $g \in G$, то $\chi_{\Phi\otimes\Psi}(g) = \chi_\Phi(g)\chi_\Psi(g)$.

Доказательство. Найдем формулу для характеров представления $\Phi \otimes \Psi$ группы G в предположении, что оба представления Φ и Ψ конечномерны. Выберем базис $\mathbf{e} = \{e_1, \ldots, e_n\}$ в пространстве V и базис $\mathbf{f} = \{f_1, \ldots, f_m\}$ в пространстве W. Тогда векторы $\{e_i \otimes f_j \mid 1 \leqslant i \leqslant n, 1 \leqslant j \leqslant m\}$ составляют базис пространства $V \otimes W$. Пусть элементу $g \in G$ в базисе $\mathbf{e}$ соответствует матрица $A = (a_{rs}) \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, а в базисе $\mathbf{f}$ — матрица $B = (b_{pq}) \in \mathrm{GL}(m, \mathbb{C})$. Тогда

$$\Phi(g)e_s = \sum_{r=1}^{n} e_r a_{rs}, \quad \Psi(g)f_q = \sum_{p=1}^{m} f_p b_{pq}.$$

Поэтому

$$[(\Phi \otimes \Psi)g]\,(e_s \otimes f_q) = \sum_{r,p} (e_r \otimes f_p) a_{rs} b_{pq}.$$

Следовательно:

$$\chi_{\Phi\otimes\Psi}(g) = \sum_{s,p} a_{ss} b_{pp} = \left(\sum_s a_{ss}\right)\left(\sum_p b_{pp}\right) = \chi_\Phi(g)\chi_\Psi(g).$$

Тензорное произведение неприводимых представлений $\Phi \otimes \Psi$ конечных групп раскладывается в пространстве $V \otimes W$ в прямую сумму неприводимых представлений. Поэтому $V \otimes W = V_1 \oplus \cdots \oplus \oplus V_d$, где V_i, $1 \leqslant i \leqslant d$ — пространства соответствующих неприводимых представлений. Выберем в пространствах V, W, V_i, соответственно, базисы $\{e_r\}$, $\{f_p\}$, $\{a_{is}\}$, тогда

$$e_r \otimes f_p = \sum_{i,s} a_{is} c(r, p, i, s), \quad c(r, p, i, s) \in \mathbb{C}.$$

Коэффициенты $c(r, p, i, s)$ в этом разложении называют *коэффициентами Клебша — Гордана*. Эта ситуация переносится на случай представлений непрерывных компактных групп. Явный

вид этих коэффициентов для прямого произведения групп $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ приведен в [12, гл. 3, § 5, 12].

Рассмотрим еще одну конструкцию произведения представлений, связанную с тензорным произведением. Пусть Φ и Ψ — представления групп G_1 и G_2 соответственно в пространствах V и W. Зададим представление $\Phi \otimes \Psi$ прямого произведения групп $G_1 \times G_2$ в $V \otimes W$ по правилу

$$[(\Phi \otimes \Psi)(g_1 \times g_2)]\,(v \otimes w) = \Phi(g_1)v \otimes \Psi(g_2)w$$

для всех $g_1 \in G$, $g_2 \in G_2$ и $v \in V$, $w \in W$. Как и в теореме 3.14, получаем, что если представления Φ, Ψ конечномерны, то

$$\chi_{\Phi\otimes\Psi}(g_1 \times g_2) = \chi_\Phi(g_1)\chi_\Psi(g_2). \tag{3.13}$$

ТЕОРЕМА 3.15. Если представления Φ, Ψ конечных групп G_1, G_2 неприводимы, то неприводимо и представление $\Phi \otimes \Psi$ группы $G_1 \times G_2$. Каждое неприводимое представление группы $G_1 \times G_2$ разлагается в произведение $\Phi \otimes \Psi$ неприводимых представлений Φ, Ψ конечных групп G_1, G_2 [77, ч. II, § 3.2].

Доказательство. Пусть Φ, Ψ — соответственно неприводимые представления конечных групп G_1 и G_2. По следствию 3.4 имеем

$$\frac{1}{|G_1|}\sum_{g_1\in G_1}|\chi_\Phi(g_1)|^2 = \frac{1}{|G_2|}\sum_{g_2\in G_2}|\chi_\Psi(g_2)|^2 = 1.$$

Перемножая эти равенства, в силу (3.13) получаем, что

$$\frac{1}{|G_1 \times G_2|}\sum_{g_1\in G_1, g_2\in G_2}|\chi_{\Phi\otimes\Psi}(g_1 \times g_2)|^2 = 1.$$

Таким образом, по следствию из теоремы 3.10 представление $\Phi \otimes \Psi$ группы $G_1 \times G_2$ неприводимо.

Для доказательства обратного утверждения в силу теоремы 3.13 достаточно показать, что если центральная функция $f(g_1, g_2)$ на $G_1 \times G_2$ ортогональна всем функциям $\chi_\Psi(g_1)\chi_\Phi(g_2)$, то она нулевая. Итак, пусть

$$\sum_{g_1\in G_1, g_2\in G_2} f(g_1, g_2)\overline{\chi_\Phi(g_1)\chi_\Psi(g_2)} = 0$$

для произвольной пары неприводимых представлений Φ, Ψ конечных групп G_1, G_2. Положим

$$h(g_1) = \sum_{g_2\in G_2} f(g_1, g_2)\overline{\chi_\Psi(g_2)}.$$

Тогда $h(g_1)$ — центральная функция на G_1, ортогональная характерам всех неприводимых представлений. По теореме 3.13 характеры всех неприводимых представлений составляют базис пространства центральных функций, и поэтому функция h нулевая. Следовательно, при каждом $g_1 \in G_1$ центральная функция $f(g_1, g_2)$ на G_2 ортогональна характерам всех неприводимых представлений группы G_2. Снова применяя теорему 3.13, получаем, что $f(g_1, g_2) = 0$.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть группа G имеет прямое разложение $G \simeq H \times \langle j \rangle_2$, где $j^2 = 1$. Рассмотрим неприводимое представление Φ группы H на пространстве V. Продолжим Φ на группу G, взяв в качестве $\Phi(j)$ тождественный оператор $\mathcal{E}$ или оператор центральной симметрии (инверсии) $-\mathcal{E}$. Тогда получается неприводимое представление группы G. Более того, указанным способом строится любое неприводимое представление группы G.

В частности, это следствие применимо для точечных групп

$$D_{nh} = D_n \times C_i, \quad C_{nh} = C_n \times C_i \, (n = 2k).$$

Пусть задано представление Ψ группы G в пространстве V и m — натуральное число. Тогда имеется представление Ψ^m группы G в тензорной степени пространства $V^{\otimes m} = \underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_{m}$. Именно, если $g \in G$ и $v_1, \ldots, v_m \in V$, то

$$\Psi^m(g)(v_1 \otimes \cdots \otimes v_m) = \Psi(g)v_1 \otimes \cdots \otimes \Phi(g)v_m \in V^{\otimes m}.$$

Заметим, что представление Ψ^m является композицией гомоморфизма Δ группы G на прямое произведение $\underbrace{G \times \cdots \times G}_{m}$ и представления $\underbrace{\Psi \otimes \cdots \otimes \Psi}_{m}$ группы $\underbrace{G \times \cdots \times G}_{m}$. Здесь $\Delta(g) = (g, \ldots, g) \in \underbrace{G \times \cdots \times G}_{m}$ для всех $g \in G$.

В тензорной степени $V^{\otimes m}$ можно задать также представление Φ симметрической группы $\mathbf{S}_m$ по правилу

$$\Phi(\sigma)(v_1 \otimes \cdots \otimes v_m) = v_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes v_{\sigma(m)},$$

где $\sigma \in \mathbf{S}_m$ и $v_1 \ldots, v_m \in V$. При этом

$$\Phi(\sigma)\Psi(g)^m = \Psi(g)^m \Phi(\sigma) \tag{3.14}$$

для всех $g \in G$ и $\sigma \in \mathbf{S}_m$. Говорят, что пространство $V^{\otimes m}$ разложено в прямую сумму неприводимых подпредставлений груп-

пы $\mathbf{S}_m$. Группируя эквивалентные неприводимые подпредставления, получаем разложение $V^{\otimes m} = \oplus W_j$, где каждое W_j отвечает прямой сумме эквивалентных представлений группы $\mathbf{S}_m$, причем при разных j неприводимые слагаемые неэквивалентны. По лемме Шура и (3.14) каждая компонента W_j инвариантна относительно представления Ψ^m.

В частности, если W_j является прямой суммой тривиальных одномерных представлений группы $\mathbf{S}_m$, то W_j называют пространством $S^m(V)$ всех симметрических тензоров ранга m (см. подразд. 7.11). В этом случае ограничение представления Ψ^m на $S^m(V)$ является *симметризованной компонентой* (*степенью*) $[\Psi^m]^+$ представления Ψ группы G.

Например, при $m = 2$ базисом $S^2(V)$ являются все векторы $e_i \otimes e_j + e_j \otimes e_i$, где e_i, e_j — элементы базиса пространства V.

Если $\Phi(\sigma) = (-1)^\sigma$ для всех $\sigma \in \mathbf{S}_m$, то соответствующая компонента W_j совпадает с пространством $\Lambda^m(V)$ антисимметричных (кососимметричных) тензоров ранга m. Соответствующее представление группы G на $\Lambda^m(V)$ называется *антисимметризованной компонентой* (*степенью*) и обозначается $[\Psi^m]^-$.

Если $m = 2$, то базисом $\Lambda^2(V)$ являются все векторы $e_i \wedge e_j = e_i \otimes \otimes e_j - e_j \otimes e_i$.

Можно показать, что характеры симметризованной и антисимметризованной компонент тензорного произведения $[\Psi \times \Psi]$ равны

$$\chi[\Psi^2(g)]^\pm = \frac{1}{2}[\chi^2(g) \pm \chi(g^2)]$$

для $g \in G$. Выбирая в качестве g единичный элемент e, непосредственно видим, что тензорное произведение одномерного представления на себя является симметризованным (т. е. полносимметричным). Аналогичное произведение («квадрат») двумерного представления разлагается на симметризованную и антисимметризованную части с размерностями 3 и 1, трехмерного — соответственно с размерностями 6 и 3, и т. д. Для более высоких степеней [58]:

$$[\chi]^3(g)^\pm = \frac{1}{3}\chi(g^3) \pm \frac{1}{2}\chi(g^2)\chi(g) + \frac{1}{6}\chi^3(g),$$

$$[\chi]^4(g)^\pm = \pm\frac{1}{4}\chi(g^4) + \frac{1}{3}\chi(g^3)\chi(g) + \frac{1}{8}\chi^2(g^2) \pm \frac{1}{4}\chi(g^2)\chi^2(g) + \frac{1}{24}\chi^4(g),$$

$$[\chi]^5(g)^\pm = \frac{1}{5}\chi(g^5) \pm \frac{1}{4}\chi(g^4)\chi(g) \pm \frac{1}{6}\chi(g^3)\chi(g^2) + \frac{1}{6}\chi(g^3)\chi^2(g) +$$

$$+ \frac{1}{8}\chi^2(g^2)\chi(g) \pm \frac{1}{12}\chi(g^2)\chi^3(g) + \frac{1}{120}\chi^5(g).$$

Симметризованные произведения многомерных представлений используют, в частности, для описания переходов между вырожденными состояниями квантовых систем.

3.9. ИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Пусть в конечной группе G выделена подгруппа H. Предположим, что задано представление ϕ группы H в пространстве V. Рассмотрим пространство W всех функций f, определенных на группе G и принимающих значения в пространстве V, для которых выполнено условие $f(hg) = \phi(h)f(g)$ при всех $h \in H$ и $g \in G$. Заметим, что исходное пространство V вложено в W. Сопоставим каждому элементу $v \in V$ функцию $f_v \in W$, которая задается по следующему правилу: если $g \in G$, то

$$f_v(g) = \begin{cases} \phi(g)v, & g \in H; \\ 0, & g \notin H. \end{cases} \tag{3.15}$$

Функция f_v задает проекцию группы G на подпространство $V \subset W$.

Зададим в W представление Φ группы G по правилу

$$[\Phi(g_1)f](g) = f(gg_1) \tag{3.16}$$

для всех $g, g_1 \in G$ и $f \in W$. Введенное представление Φ группы G называется *индуцированным представлением* или *представлением, индуцированным* с представления ϕ. При этом представление ϕ группы H становится ограничением индуцированного представления Φ группы G на подгруппу H. Индуцированные представления необходимы для описания неприводимых представлений полупрямых произведений групп и пространственных групп (см. ниже).

Упражнение 3.4. Доказать, что если $v \in V$ и $h \in H$, то $\Phi(h)f_v = f_{\phi(h)v}$, где f_v из (3.15).

Выберем систему представителей $T = \{t\}$ всех левых смежных классов группы G по подгруппе H.

ТЕОРЕМА 3.16. Пространство W является прямой суммой пространств

$$W = \oplus_{t \in T} \Phi(t)V.$$

В частности, его размерность $\dim W = \frac{|G|}{|H|} \dim V$. Если $g \in H$, то характер χ_Φ представления Φ вычисляется по формуле

$$\chi_\Phi(g) = \frac{1}{|H|}\sum \chi_\phi(s^{-1}gs),$$

где суммируют по всем таким элементам $s \in G$, что $s^{-1}gs \in H$. [77, ч. II, § 7.2]

ТЕОРЕМА 3.17 (формула взаимности Фробениуса). Пусть H — подгруппа в конечной группе G и ϕ — представление H в пространстве V. Пусть Φ — представление группы G, индуцированное с представления ϕ подгруппы H. Если Ψ — произвольное представление группы G, то $(\chi_\Phi, \chi_\Psi) = (\chi_\phi, \chi_\psi)$, где $\psi = \Psi|_H$ — ограничение представления Ψ на подгруппу H и (a, b) — скалярное произведение (3.9).

Доказательство. Пусть j — число левых смежных классов G по подгруппе H. Тогда $|G| = j|H|$ по теореме Лагранжа 1.7. Поэтому

$$(\chi_\Phi, \chi_\Psi) = \frac{1}{|H|j} \sum_{\substack{g,s\in G \\ s^{-1}gs\in H}} \chi_\phi(s^{-1}gs)\overline{\chi_\psi(g)}.$$

Заменяя $s^{-1}gs$ на $h \in H$, получаем

$$(\chi_\Phi, \chi_\Psi) = \frac{1}{|H|j} \sum_{h\in H,\, s\in G} \chi_\phi(h)\overline{\chi_\psi(shs^{-1})} =$$
$$= \frac{1}{|H|} \sum_{h\in H} \chi_\phi(h)\overline{\chi_\psi(h)} = (\chi_\phi, \chi_\psi).$$

Отметим, что в [77, ч. II, § 7] приведен критерий неприводимости индуцированного представления.

Упомянем приложение теории индуцированных представлений к представлениям полупрямых произведений. Предположим, что группа $G = H \leftthreetimes F$ является полупрямым произведением, где H — нормальная абелева подгруппа в G (и, соответственно, F — фактор-группа). Рассмотрим множество $\hom(H, \mathbb{C}^*)$ всех гомоморфизмов абелевой группы H в группу $\mathbb{C}^*$ ненулевых комплексных чисел (компонент характеров). Если $\chi \in \hom(H, \mathbb{C}^*)$ и $u \in F$, то положим $(u\chi)(h) = \chi(u^{-1}hu)$ для всех $h \in H$.

Пусть $\chi_1, \ldots, \chi_m$ — характеры всех неприводимых представлений абелевой группы H (совпадающие с самими этими одномерными представлениями). Каждому вектору χ_i $(i = 1, \ldots, m)$, заданному в m-мерном пространстве характеров $\mathbb{C}^m$, соответствует некоторая подгруппа $H_i \subset H$. Обозначим F_i подгруппу в F, состоящую из всех таких элементов $u \in F$, что $u\chi_i = \chi_i$. Таким

образом, F_i — локальная группа вектора χ_i в $\mathbb{C}^m$, где $m = |H|$. Тогда представление χ_i можно продолжить до одномерного представления группы $H_i \times F_i$, если положить $\chi_i(u^{-1}hu) = \chi_i(h)$ для любых $h \in H$ и $u \in F_i$.

Если ρ_j — произвольное неприводимое представление группы F_i, то $\chi_i \otimes \rho_j$ является неприводимым представлением группы $H \leftthreetimes F_i$ (см. подразд. 3.8).

ТЕОРЕМА 3.18. Каждое неприводимое представление группы $G = H \leftthreetimes F$ индуцировано некоторым представлением $\chi \otimes \rho$ ее подгруппы $H_i \times F_i$, где $H_i \subset H$ — подгруппа группы H, заданная ее неприводимым представлением χ. Все эти индуцированные представления неприводимы. При разных χ, ρ эти представления неэквивалентны.

Эту теорему можно обобщить на случай произвольной нормальной подгруппы H.

В качестве примера рассмотрим группу диэдра $\mathbf{D}_n$, являющуюся полупрямым произведением циклической подгруппы вращений $H = \langle a \rangle_n$ порядка n и циклической группы $F = \langle b \rangle_2$, порядка 2, порожденной зеркальной симметрией b относительно оси OX. Каждое неприводимое представление абелевой группы $H = \langle a \rangle_n$ одномерно и задается значением $\chi(a)$ своего характера χ на порождающем элементе a. Так как элемент a имеет порядок n, то $\chi(a)$ является комплексным корнем степени n из 1.

Рассмотрим затем подгруппу F_1 всех таких элементов u из $F = \langle b \rangle_2$, что

$$\chi(u^{-1}au) = \chi(a). \tag{3.17}$$

Так как F имеет порядок 2, то по теореме Лагранжа 1.7 либо $F_1 = F$, либо $F_1 = \mathbf{1}$.

Пусть $F_1 = F$. Из (3.17) и равенства $ba = a^{-1}b$ (см. с. 18) следует

$$\chi(a^2) = \chi(a)^2 = \chi(a)\chi(b^{-1}ab) = \chi(a)\chi(a^{-1}) = \chi(\mathbf{1}) = 1.$$

Таким образом, $\chi(a) = \pm 1$, и если n нечетно, то $\chi(a) = 1$. Пусть ρ — неприводимое одномерное представление абелевой группы $F = \langle b \rangle_2$. Так как элемент b имеет порядок 2, то $\rho(b) = \pm 1$. Тогда получается одномерное представление $\chi \otimes \rho$ группы $\mathbf{D}_n = H \leftthreetimes F$, при котором $\chi(b^m a^j) = \chi(a^j)\rho(b^m) = \chi(a)^j \rho(b)^m$ для любых $j = 0, \ldots, n-1$ и $m = 0, 1$. Тем самым получаются все одномерные представления из подразд. 3.5.

Предположим, что $F_1 = \mathbf{1}$. Тогда $\rho(u) = 1$. Подгруппа $H \leftthreetimes F_1 = H$ имеет индекс 2 в группе $\mathbf{D}_n$. Поэтому представление, индуцированное с представления χ группы H, имеет в $\mathbf{D}_n$ размерность 2.

В пространстве индуцированного представления имеется базис e_1, e_2, причем $ae_1 = \chi(a)e_1$ и $e_1 = be_2$. Отсюда

$$be_2 = e_1, \quad ae_2 = abe_1 = ba^{-1}e_1 = \chi(a)^{-1}e_2.$$

Тем самым получаются двумерные неприводимые представления из подразд. 3.5.

3.10. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $\mathbf{S}_n$

Приведем без доказательства общее описание неприводимых представлений симметрической группы $\mathbf{S}_n$ (группы перестановок). Как и в подразд. 1.7, назовем *разбиением* числа n набор

$$\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \tag{3.18}$$

из n натуральных чисел $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, такой что

1) $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$;

2) $\lambda_1 + \cdots + \lambda_n = n$.

Это разбиение обозначается $(1^{b_1} 2^{b_2} \ldots n^{b_n})$ или $[n^{b_n} \ldots 1^{b_1}]$, где b_j указывает, сколько раз j встречается среди $\lambda_1 \ldots \lambda_n$.

Схемой Юнга, соответствующей разбиению (3.18), называется таблица из k строк, в которой первая строка содержит λ_1 клетку, вторая — λ_2 клеток, ..., k-я — λ_k клеток, причем $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$, если $k < n$. Например, при $\lambda_1 = 3$, $\lambda_2 = 2$, $\lambda_3 = \lambda_4 = 1$, $\lambda_5 = \lambda_6 = \lambda_7 = 0$ получаем схему Юнга на рис. 3.1.

Диаграммой Юнга называется схема Юнга, в которой все клетки заполнены числами от 1 до n, причем в каждой строке числа возрастают слева направо, а в каждом столбце — сверху вниз. В частности, в разных клетках стоят разные числа. Так, можно построить диаграммы, приведенные на рис. 3.2, *а*, *б*, но не на рис. 3.2, *в* (так как клетки в первой строке и в первом столбце третьей диаграммы на рис. 3.2 занумерованы неправильно).

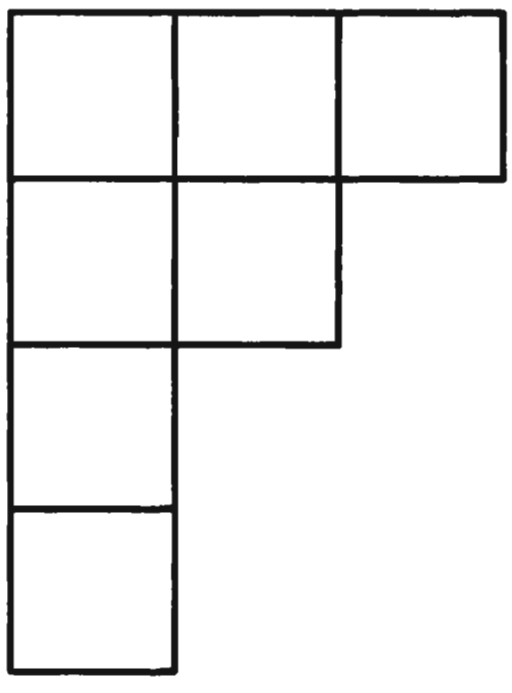


Рис. 3.1. Схема Юнга для разбиения (3, 2, 1, 1, 0, 0, 0)

Покажем, что каждой схеме Юнга отвечает неприводимое представление группы $\mathbf{S}_n$, размерность которого равна числу различных диаграмм, получаемых из этой схемы. Число различных диаграмм Юнга, соответствующих одной схеме с разбиением (3.18), равно

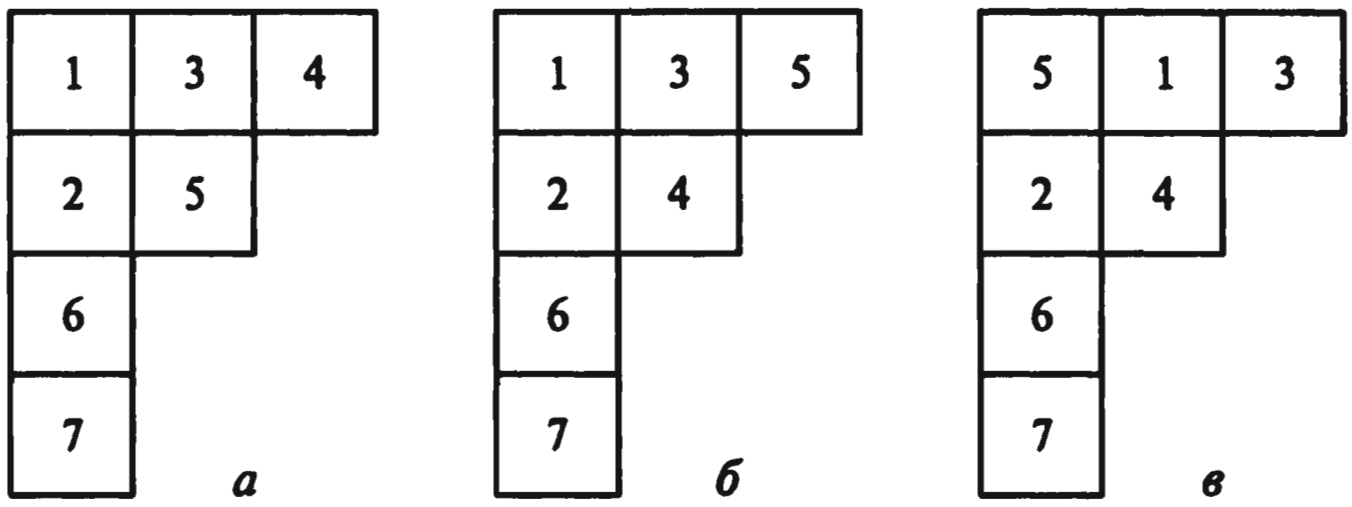


Рис. 3.2. Диаграмма Юнга:
а, *б* — правильные формы; *в* — недопустимая форма

$$\frac{n!}{\prod_{i=1}^{n}(\lambda_i+n-i)!}\prod_{i<j}(\lambda_i-i-\lambda_j+j). \tag{3.19}$$

Например, разбиению $(3,2,1,1) = (3,2,1,1,0,0,0)$ числа 7 на рис. 3.1 и 3.2 отвечает 35 диаграмм Юнга

$$\begin{aligned}
&7![(3+7-1)!(2+7-2)!(1+7-3)!(1+7-4)!\times\\
&\times(0+7-5)!(0+7-6)!(0+7-7)!]^{-1}\times\\
&\times[(3+7-1)-(2+7-2)][(3+7-1)-(1+7-3)]\times\\
&\times[(3+7-1)-(1+7-4)][(3+7-1)-(0+7-5)]\times\\
&\times[((3+7-1)-(0+7-6)][(3+7-1)-(0+7-7)]\times\\
&\times[((2+7-2)-(1+7-3)][(2+7-2)-(1+7-4)]\times\\
&\times[(2+7-2)-(0+7-5)][(2+7-2)-(0+7-6)]\times\\
&\times[(2+7-2)-(0+7-7)][(1+7-3)-(1+7-4)]\times\\
&\times[(1+7-3)-(0+7-5)][(1+7-3)-(0+7-6)]\times\\
&\times[(1+7-3)-(0+7-7)][(1+7-4)-(0+7-5)]\times\\
&\times[(1+7-4)-(0+7-6)][(1+7-4)-(0+7-7)]\times\\
&\times[(0+7-5)-(0+7-6)][(0+7-5)-(0+7-7)]\times\\
&\times[(0+7-6)-(0+7-7)]=\\
&=7![9!\,7!\,5!\,4!\,2!\,1!\,0!]^{-1}\times\\
&\times(2\cdot4\cdot5\cdot7\cdot8\cdot9\cdot2\cdot3\cdot5\cdot6\cdot7\cdot1\cdot3\times\\
&\times4\cdot5\cdot2\cdot3\cdot4\cdot1\cdot2\cdot1)=35.
\end{aligned}$$

Пусть D — фиксированная диаграмма Юнга и R_D — подгруппа в $\mathbf{S}_n$, состоящая из всех перестановок, которые переставляют числа в каждой из строк (не переставляя их из одной строки в другую). Соответственно, обозначим C_D подгруппу всех таких перестановок из $\mathbf{S}_n$, которые переставляют числа в каждом столбце диаграммы.

Например, в первой из диаграмм в рис. 3.2 R_D состоит из перестановок (1, 3, 4), (1, 3), (2, 5) и их произведений. Подгруппа C_D для той же диаграммы состоит из перестановок (1, 2, 6, 7), (1, 2), (3, 5) и их произведений.

Определим элемент

$$e_D = \frac{1}{|R_D||C_D|} \sum_{\substack{p \in R_D \\ q \in C_D}} (-1)^q pq \tag{3.20}$$

из пространства регулярного представления группы $\mathbf{S}_n$ (см. подразд. 3.7).

ТЕОРЕМА 3.19. Рассмотрим в регулярном представлении группы $\mathbf{S}_n$ линейную оболочку T_D всех векторов σe_D для всех $\sigma \in \mathbf{S}_n$. Тогда на T_D получается неприводимое представление группы $\mathbf{S}_n$. Каждое неприводимое представление группы $\mathbf{S}_n$ эквивалентно некоторому представлению T_D. Представления T_D и $T_{D'}$ эквивалентны тогда и только тогда, когда диаграммы D, и D' возникают из одной схемы Юнга. Разбиению $\lambda = (1, \ldots, 1)$ (или диаграмме D, состоящей из одного столбца) соответствует тривиальное одномерное представление группы $\mathbf{S}_n$. Разбиению $\lambda = (n)$ (или диаграмме D, состоящей из одной строки) соответствует одномерное представление $\sigma \mapsto (-1)^\sigma$ группы $\mathbf{S}_n$ [51, § 28].

Неприводимое представление, соответствующее разбиению $[n^{b_n} \ldots 1^{b_1}]$, часто обозначают $\Gamma[n^{b_n}, \ldots 1^{b_1}]$. Классы сопряженных элементов группы $\mathbf{S}_n$, отвечающие разбиению перестановок n элементов на циклы (подразд. 1.7), при этом обозначают числами клеток в столбцах схемы Юнга (перечисляемых справа налево). Символы строк таблицы при обозначении представлений записывают в квадратных скобках, а символы столбцов при обозначении классов — в круглых скобках. Так, например, схему на рис. 3.2 можно записать по строкам [3, 2, 1, 1] (в сокращенной форме $[321^2]$), а по столбцам (1, 2, 4). Полное число элементов в классе можно определить по (1.21). Классу (1, 2, 4) группы $\mathbf{S}_7$ отвечает, например, 630 перестановок, тогда как классам (7) и (1^7) той же группы — соответственно 6! перестановок и единственная тождественная перестановка.

Упражнение 3.5. Найти все классы группы $\mathbf{S}_7$ и числа элементов в них.

Приведем формулы для характеров неприводимых представлений групп перестановок, см. [1, § 7.3, 61, § 1.7]. Пусть $\chi^{(\lambda)}$ — характер неприводимого представления группы $\mathbf{S}_n$, соответствующего разбиению $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_k)$ числа n.

Предположим, что перестановка $\sigma \in \mathbf{S}_n$ разлагается в соответствии с теоремой 1.2 в произведение независимых циклов с набором длин $(\rho_1, \ldots, \rho_n)$, где

$$\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n \geqslant 0, \quad \rho_1 + \cdots + \rho_n = n.$$

Введем для этого функции s_λ от переменных $X_1, \ldots, X_n$ как отношение определителя квадратной матрицы размера n, в которой на месте (i, j) стоит $X_i^{\lambda_j + n - j}$, к определителю

$$\begin{vmatrix} X_1^{n-1} & X_1^{n-2} & \ldots & X_1 & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ X_n^{n-1} & X_n^{n-2} & \ldots & X_n & 1 \end{vmatrix} = \prod_{1 \leqslant i < j \leqslant n} (X_i - X_j).$$

Можно показать, что s_λ является многочленом с целыми коэффициентами [61, § 1.7].

ТЕОРЕМА 3.20. Справедливо равенство

$$s_\lambda = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in \mathbf{S}_n} \chi^{(\lambda)}(\sigma) \prod_{i=1}^{n} \left(X_1^{\rho_i} + \cdots + X_n^{\rho_i} \right).$$

СЛЕДСТВИЕ. Пусть задано разбиение (3.18) числа n, и $\chi^{(\lambda)}$ — характер неприводимого представления, соответствующего разбиению $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Предположим, что σ — цикл длины $r \leqslant n$. Тогда

$$\chi^{(\lambda)}(\sigma) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(n-r)! D(\mu_1, \ldots, \mu_{i-1}, \mu_i - r, \mu_{i+1}, \ldots, \mu_n)}{(\mu_1)! \cdots (\mu_{i-1})! \cdot (\mu_i - r)! \cdot (\mu_{i+1})! \cdots (\mu_n)!}, \qquad (3.21)$$

где $\mu_i = \lambda_i + n - i$ и $D(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{1 \leqslant i < j \leqslant n} (x_i - x_j)$ [61, § 1.7].

Отметим, что в (3.21) в числителе и в знаменателе в i-м слагаемом μ_i заменено на $(\mu_i - r)$.

В частности, размерность представления равна значению его характера $\chi^{(\lambda)}$ на тождественной (единичной) перестановке $\sigma = \varepsilon$. В этом случае $\rho_1 = \cdots = \rho_n = 1$. Таким образом, получается, что $\dim \left(\chi^{(\lambda)} \right) = \chi^{(\lambda)}(\varepsilon)$ совпадает с числом всех диаграмм Юнга, соответствующих разбиению λ числа n (формула (3.19)).

Продемонстрируем вычисления характеров цикла $\sigma \in \mathbf{S}_5$ длины $r = 5$ по (3.21). Заметим, что в каждом ненулевом слагаемом суммы (3.21) должно быть $\mu_i - 5 = \lambda_i + 5 - i - 5 = \lambda_i - i \geqslant 0$, или $\lambda_i \geqslant i$.

Имеются следующие разбиения числа 5: (5); (4,1); (3,2); (3,1,1); (2,2,1); (2,1,1,1); (1,1,1,1,1).

Последнему разбиению — (1,1,1,1,1) — соответствует представление $\sigma \mapsto (-1)^\sigma$. В этом представлении $\chi^{[11111]}(\sigma) = (-1)^\sigma = 1$,

поскольку σ — четная перестановка. Аналогично, первому разбиению (5) соответствует тривиальная («единичная») перестановка, также задающая четное одномерное представление. Поэтому $\chi^{[5]}(\sigma) = 1$.

Рассмотрим остальные разбиения. Условию $\lambda_i \geqslant i$ при $i = 1$ удовлетворяют все разбиения. Это же условие при $i = 2$ выполнено только для (3,2) и (2,2,1). При $i = 3, 4, 5$ это условие не выполняется. Следовательно, при подсчете $\chi^{(\lambda)}(\sigma)$ для разбиений (4,1), (3,1,1) и (2,1,1,1) в (3.21) остается одно слагаемое. Для разбиения (4,1) имеем $\mu_1 - 5 = 4+5-1-5 = 3$, $\mu_2 = 1+5-2 = 4$, $\mu_3 = 0+5-3 = 2$, $\mu_4 = 0+5-4 = 1$, $\mu_5 = 0+5-5 = 0$.

Поэтому в (3.21) получаем

$$\chi^{[4,1]}(\sigma) = \frac{0!D(3,4,2,1,0)}{3!\cdot 4!\cdot 2!\cdot 1!\cdot 0!} =$$

$$= \frac{(3-4)(3-2)(3-1)(3-0)(4-2)(4-1)(4-0)(2-1)(2-0)(1-0)}{3!\cdot 4!\cdot 2!\cdot 1!\cdot 0!} =$$

$$= \frac{(-1)\cdot 2\cdot 3\cdot 2\cdot 3\cdot 4\cdot 2}{3!\cdot 4!\cdot 2!} = -\frac{3!\cdot 4!\cdot 2}{3!\cdot 4!\cdot 2!} = -1.$$

Аналогичные вычисления показывают, что $\chi^{[3,1,1]}(\sigma) = 1$, $\chi^{[2,1,1,1]}(\sigma) = -1$.

Для случая (3,2) в (3.21) имеем два слагаемых, соответствующих $i = 1$ и $i = 2$. При $i = 1$ имеем набор $\mu_1 - 5 = 3+5-1-5 = 2$, $\mu_2 = 2+5-2 = 5$, $\mu_3 = 0+5-3 = 2$, $\mu_4 = 0+5-4 = 1$, $\mu_5 = 0+5-5 = 0$.

Соответствующее слагаемое в (3.21) равно

$$\frac{0!D(2,5,2,1,0))}{2!\cdot 5!\cdot 2!\cdot 1!\cdot 0!} =$$

$$= \frac{(2-5)(2-2)(2-1)(2-0)(5-2)(5-1)(5-0)(2-1)(2-0)(1-0)}{2!\cdot 5!\cdot 2!} = 0.$$

При $i = 2$ получаем $\mu_1 = 3+5-1 = 7$, $\mu_2 - 5 = 2+5-2-5 = 0$, $\mu_3 = 0+5-3 = 2$, $\mu_4 = 0+5-4 = 1$, $\mu_5 = 0+5-5 = 0$.

Соответствующее слагаемое в (3.21) равно

$$\frac{0!D(7,0,2,1,0))}{7!\cdot 0!\cdot 2!\cdot 1!\cdot 0!} =$$

$$= \frac{(7-0)(7-2)(7-1)(7-0)(0-2)(0-1)(0-0)(2-1)(2-0)(1-0)}{2!\cdot 5!\cdot 2!} = 0.$$

Отсюда $\chi^{[3,2]}(\sigma) = 0$. Аналогично вычисляется $\chi^{[2,2,1]}(\sigma) = 0$. Итак, элементы столбца в таблице характеров группы $\mathbf{S}_5$ для цикла (класса) σ=(5) и всех неприводимых представлений группы в сокращенных обозначениях равны: $\chi^{[5]} = 1$, $\chi^{[41]} = -1$, $\chi^{[32]} = 0$, $\chi^{[31^2]} = 1$, $\chi^{[2^21]} = 0$, $\chi^{[21^3]} = -1$, $\chi^{[1^5]} = 1$.

Предположим, что на пространстве V задано представление Γ группы $\mathbf{S}_n$. Тогда на том же пространстве V можно задать *сопряженное представление* Γ' той же группы $\mathbf{S}_n$ по правилу

$$\Gamma'(\sigma)x = (-1)^{\sigma}\Gamma(\sigma)x$$

для всех $x \in V$ и $\sigma \in \mathbf{S}_n$. Здесь $(-1)^{\sigma}$ — знак перестановки σ. Нетрудно видеть, что $(\Gamma')' = \Gamma$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3.5. Если Γ — неприводимое представление группы $\mathbf{S}_n$, то и представление Γ' неприводимо. Если неприводимое представление Γ соответствует диаграмме D, то сопряженное представление Γ' соответствует сопряженной диаграмме D', симметричной D относительно главной диагонали.

Например, если Γ — представление группы $\mathbf{S}_4$, связанное с симметриями тетраэдра, то представление Γ' связано с симметриями октаэдра (см. подразд. 3.1). В группе $\mathbf{S}_5$ представление $\Gamma^{[5]}$ сопряжено с $\Gamma^{[1^5]}$, $\Gamma^{[41]}$ с $\Gamma^{[21^3]}$ и $\Gamma^{[32]}$ с $\Gamma^{[2^21]}$.

Двумерные неприводимые представления Γ групп $\mathbf{S}_3$, $\mathbf{S}_4$ являются *самосопряженными*, т. е. Γ и Γ' для них эквивалентны. В $\mathbf{S}_5$ самосопряженным является шестимерное представление $\Gamma^{[31^2]}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3.6. Полносимметричное неприводимое представление $\Gamma^{[n]}$ группы $\mathbf{S}_n$ входит в прямое произведение двух ее одинаковых (эквивалентных) неприводимых представлений. Антисимметричное представление $\Gamma^{[1^n]}$ входит в прямое произведение двух сопряженных неприводимых представлений.

Рекуррентная схема построения диаграмм Юнга для групп перестановок показана на рис. 3.3. По определению схем и диаграмм Юнга при переходе $\mathbf{S}_{n-1} \to \mathbf{S}_n$ ко всем диаграммам, отвечающим неприводимым представлениям группы $\mathbf{S}_{n-1}$, следует добавить новую клетку с числом n в любую из строк либо под нижнюю клетку левого столбца (создав таким образом новую строку). Число диаграмм, построенных этим способом на одной схеме Юнга, равно размерности соответствующего неприводимого представления. Обратное направление стрелок, иллюстрирующих алгоритм построения, показывает разбиение представлений при понижении симметрии от $\mathbf{S}_n$ до $\mathbf{S}_{n-1}$. Так, при переходе $\mathbf{S}_5 \to \mathbf{S}_4$ пятимерное представление $\Gamma^{[2^21]}$ распадается на трехмерное $\Gamma^{[21^2]}$ и двумерное $\Gamma^{[2^2]}$, а четырехмерное $\Gamma^{[41]}$ — на трехмерное $\Gamma^{[31]}$ и одномерное $\Gamma^{[4]}$ полносимметричное представление.

Из алгоритма вывода очевидно, что в группе перестановок всегда присутствуют два одномерных представления (полносимметричное и антисимметричное), а также хотя бы одно самосопряженное представление со схемой, симметричной относитель-

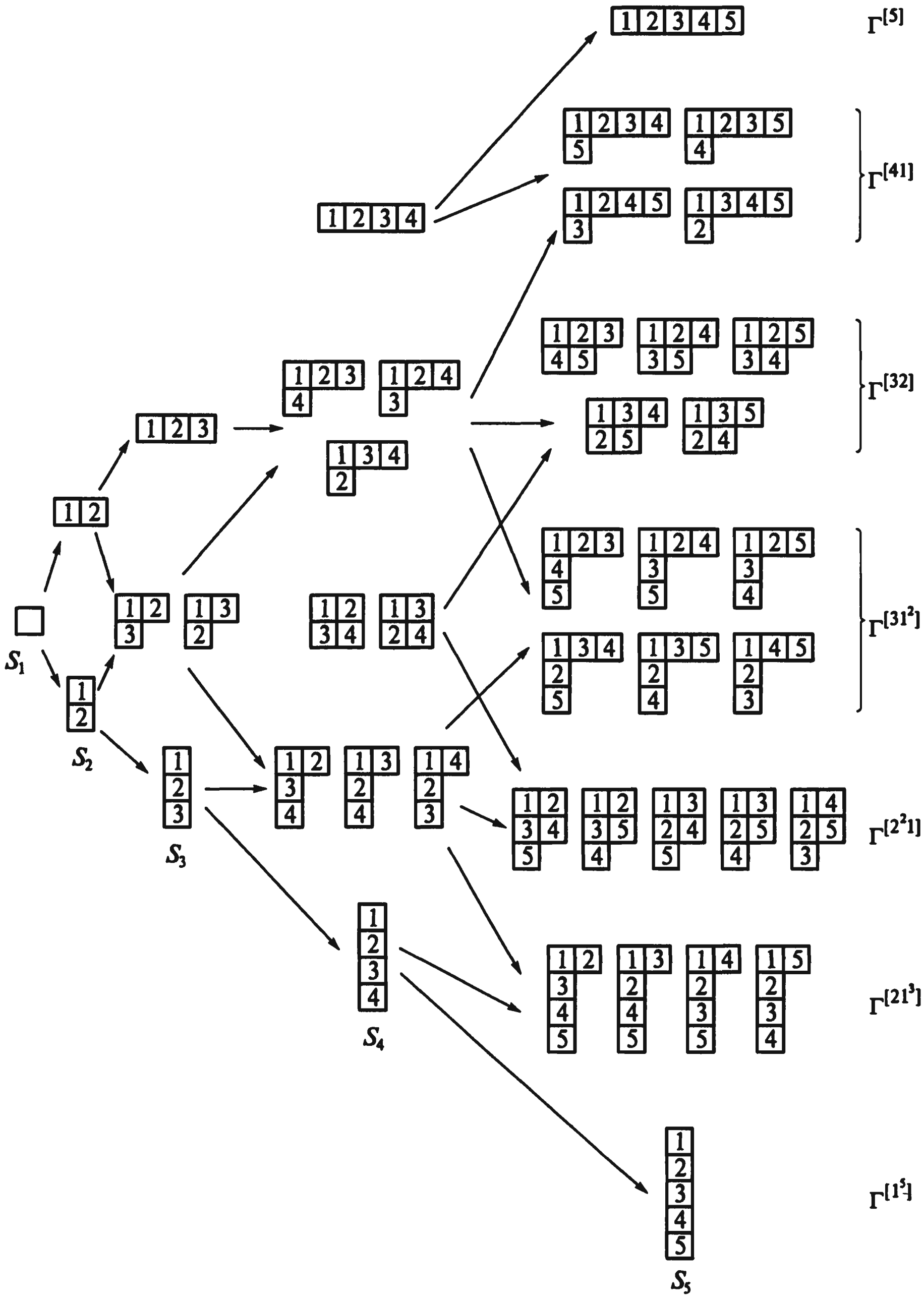


Рис. 3.3. Построение диаграммы Юнга для $n \leqslant 5$

но своей диагонали. Таблицы характеров групп $\mathbf{S}_n$ с $2 < n < 7$ представлены в прил. 1.

Заметим, что группа $\mathbf{S}_5$ порядка 120, содержащая семь классов и, соответственно, семь неприводимых представлений, не изоморфна группе симметрий икосаэдра $I_h = I \times C_i \sim \mathbf{A}_5 \times \mathbf{S}_2$ того же порядка, имеющей 10 классов и пять пар неприводимых представлений g- и u-типов. Характеры неприводимых представлений для групп стереохимически нежестких молекул $\mathbf{S}_{n_1} \times \mathbf{S}_{n_2} \times \ldots \times \langle j \rangle_2$ (групп Лонге—Хиггинса, или групп перестановок химически идентичных ядер, см. подразд. 1.10) могут быть получены из таблиц характеров групп перестановок с использованием свойств прямого произведения [4, 89].

У п р а ж н е н и е 3.6. Построить полную таблицу характеров группы $\mathbf{S}_5$

3.11. КОНЕЧНОМЕРНЫЕ НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$

Неприводимые представления симметрической группы $\mathbf{S}_n$ позволяют описать все неприводимые конечномерные представления группы квадратных невырожденных матриц $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, используя тензорное произведение (подразд. 3.8). Пусть V — комплексное пространство размерности n и $V^{\otimes d}$ — тензорное произведение d копий пространства V (см. подразд. 7.11). На пространстве $V^{\otimes d}$ зададим следующее представление группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$: если $g \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ и $x_1, \ldots, x_d \in V$, то

$$g \cdot (x_1 \otimes \cdots \otimes x_d) = g(x_1) \otimes \cdots \otimes g(x_d).$$

Кроме того, в $V^{\otimes d}$ имеется представление группы перестановок $\mathbf{S}_d$. Действительно, если $\sigma \in \mathbf{S}_d$ и $x_1, \ldots, x_d \in V$, то полагаем

$$\sigma \cdot (x_1 \otimes \cdots \otimes x_d) = x_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes x_{\sigma(d)},$$

где $\sigma(1), \ldots, \sigma(d)$ — результаты применения перестановки σ к элементам $1, \ldots, d$. Заметим, что операторы из $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ и из $\mathbf{S}_d$ перестановочны. С каждой диаграммой Юнга D свяжем оператор, который, как и в (3.20), обозначим e_D. Этот оператор действует на любой вектор $x = x_1 \otimes \cdots \otimes x_d$ как

$$e_D x = \frac{1}{|R_D||C_D|} \sum_{p \in R_D,\, q \in C_D} (-1)^q pq \cdot x,$$

где p, q — элементы подгрупп перестановок чисел соответственно в строках R_D и столбцах C_D диаграммы, см. подразд. 3.10.

ТЕОРЕМА 3.21. Пространство $e_D V$ либо равно нулю, либо на нем задано неприводимое представление группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Каждое неприводимое представление группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ эквивалентно представлению на $e_D V$ для некоторых d, D. Представления на $e_D V$ и $e_{D'} V$ эквивалентны тогда и только тогда, когда D, D' возникают из одной схемы Юнга. Таким образом, конечномерные неприводимые представления группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ полностью определяются разбиением $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ числа n [51, § 67].

Можно показать, что этот результат верен и для группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$. Кроме того, ограничения неприводимого представления на пространстве $e_D V$ группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ на подгруппы

$$\mathrm{SL}(n, \mathbb{C}),\ \mathrm{U}(n, \mathbb{C}),\ \mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$$

являются неприводимыми конечномерными представлениями этих групп, и таким образом получаются все неприводимые конечномерные представления указанных групп [5, т. 1, гл. 8]. Для компактных групп $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$ и $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$, все неприводимые представления которых конечномерны, таким образом получаются все неприводимые представления (см. подразд. 4.7).

3.12. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП

Пространственной группой в общем случае называется группа $G = \mathrm{Sym}\, K$ симметрий кристаллического множества K любого конечного числа измерений n. По теореме 2.13 Шенфлиса—Бибербаха подгруппа N сдвигов кристаллического множества является нормальной подгруппой конечного индекса и точечная группа $\Delta = G/N$ состоит из линейных операторов. Более того, N является свободной абелевой группой с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ и группа Δ действует как группа линейных операторов в линейной оболочке векторов $e_1, \ldots, e_n$ (т. е. в евклидовом пространстве E).

Предположим, что задано неприводимое комплексное конечномерное представление ψ пространственной группы G. В соответствии с подразд. 2.2 назовем подгруппу N *решеткой* L данного кристаллического множества. По следствию I из теоремы 3.3 существуют такие ненулевой вектор $f \in V$ и набор $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{C}^n$, что

$$\psi(x_1e_1 + \cdots x_ne_n)f = \exp[i(\alpha, x)]\, f,$$

где $(\alpha, x) = \alpha_1x_1 + \cdots + \alpha_nx_n$ и вектор $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)$ лежит в n-мерном евклидовом пространстве с дуальной решеткой L^*. Масштабным преобразованием (умножением на $1/2\pi$) перейдем к векторам $k = (k_1, ..., k_n)$ в аналогичном пространстве с *обратной* решеткой L' (см. подразд. 2.2):

$$\psi(x_1e_1 + \cdots x_ne_n)f = \exp[i(k, x)]\, f,$$

где $(k, x) = k_1x_1 + \cdots + k_nx_n$.

Учитывая формулу (2.8), получаем, что если $g \in G$, то выполняется соотношение

$$\begin{aligned}\psi(x \cdot g)\, f = \psi\left[g\left(g^{-1}xg\right)\right] f = \psi\left[g \cdot \left((dg)^{-1}(x)\right)\right] f = \\ = \psi(g) \exp\left[i(k, (dg)^{-1}(x))\right] f = \\ = \exp\left[i\left(k, (dg)^{-1}(x)\right)\right] \psi(g) f,\end{aligned}$$

где dg — дифференциал преобразования g, т. е. вращение пространства V (см. подразд. 2.4). При этом

$$\left(k, (dg)^{-1}(x)\right) = \left((dg)^{*-1}(k), x\right), \tag{3.22}$$

где $(dg)^*$ — оператор, сопряженный к dg (см. подразд. 7.7). Таким образом, вектор $k = (k_1, ..., k_n)$ преобразуется операциями точечной группы Δ.

Множество всех векторов $(dg)^{*-1}(k)$, связанных операциями точечной симметрии, в кристаллографии называется *звездой* $^*k$ вектора k.

Обозначим через G_k множество всех таких элементов $g \in G$, что $(dg)^{*-1}k = k$ (т. е. набор операций dg^*, относительно которого вектор k в звезде инвариантен). Нетрудно проверить, что G_k является подгруппой в группе G, содержащей нормальную подгруппу трансляций N. Таким образом, $\Delta_k = G_k/N$ является конечной подгруппой в точечной группе $\Delta = G/N$. Обозначим через L_k наименьшее подпространство в $\mathbb{C}^n$, инвариантное относительно действия всех операторов $(dg)^*$, где $g \in G_k$.

У п р а ж н е н и е 3.7. Пусть $g_1, \ldots, g_m \in G$, причем группа Δ является объединением непересекающихся левых смежных классов

$$\Delta = (g_1N)(G_k/N) \cup \cdots \cup (g_mN)(G_k/N).$$

Доказать, что группа G является объединением непересекающихся левых смежных классов $G = g_1G_k \cup \cdots \cup g_mG_k$.

У п р а ж н е н и е 3.8. Обозначим V_k линейную оболочку всех векторов $\psi(h)f$, где $h \in G_k$ и $f \in L_k$. Показать, что ψ задает на V_k неприводимое представление группы G_k. Кроме того, линейная оболочка всех векторов

$$\psi(g_1)V_k + \cdots + \psi(g_m)V_k$$

инвариантна относительно всех операторов $\psi(g)$, $g \in G$, где элементы $g_1, \ldots, g_m$ взяты из предыдущего упражнения.

Т Е О Р Е М А 3.22. Неприводимое представление ψ группы G является индуцированным представлением с неприводимого представления группы G_k на пространстве V_k. Таким образом, пространство V является прямой суммой подпространств

$$V = \psi(g_1)V_k \oplus \cdots \oplus \psi(g_m)V_k.$$

В частности, справедлива формула

$$\dim V = |G/G_k| \dim V_k.$$

3.13. ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРОВ НЕКОТОРЫХ КОНЕЧНЫХ ГРУПП

Точечные и пространственные группы, рассмотренные в предыдущих главах, используются во многих областях физики и химии. Ниже обсуждаются неприводимые представления таких групп.

3.13.1. Точечные и двойные группы

Представления точечных групп удобно находить с помощью таблиц их характеров. В спектроскопии и химии для неприводимых представлений этих групп обычно используют обозначения Малликена. Представления, полносимметричные относительно главных операций C_n и S_n (с наибольшим n), обозначают A, антисимметричные — B. Центросимметричные неприводимые представления имеют подстрочный индекс g (нем. *gerade* — четный), а антисимметричные относительно инверсии i — индекс u (нем. *ungerade* — нечетный). Полносимметричные относительно плоскости отражения σ_h представления обозначают штрихом, антисимметричные — двойным штрихом. Если в группе есть представления с одинаковыми характерами относительно всех перечисленных операций, их нумеруют нижними индексами.

Таблица 3.6

Характеры изоморфных точечных групп порядка 4

C_{2h}	C_{2h}	$D_2 \simeq V_4$	e e e	$C_2(z)$ $C_2(z)$ $C_2(z)$	i σ_{xz} $C_2(x)$	σ_{xy} σ_{yz} $C_2(y)$
A_g	A_1; z	A	1	1	1	1
B_g	B_2; y	B_3; x	1	–1	1	–1
A_u; z	A_2	B_1; z	1	1	–1	–1
B_u; x, y	B_1; x	B_2; y	1	–1	–1	1

Все неприводимые представления семи абелевых точечных групп низшей категории (см. подразд. 1.10) одномерные. Таблицы характеров для изоморфных групп 4-го порядка C_{2h}, C_{2v} и D_2 представлены в табл. 3.6 (указаны также неприводимые представления, по которым в этих группах преобразуются базисные векторы x, y, z трехмерного пространства). Заметим, что все эти группы отличаются одна от другой и от группы прямого произведения $\langle a\rangle_2 \times \langle b\rangle_2$ (см. табл. 3.2) только обозначениями операций симметрии и неприводимых представлений. Также подобные таблицы простейших групп порядка 2 ($C_i \sim C_s \sim C_2 \sim \langle a\rangle_2$, см. табл. 3.3).

Таблицу характеров группы $D_{2h} = D_2 \times C_i$ можно построить, удвоив наборы элементов симметрии и неприводимых представлений группы D_2 (см. подразд. 1.10). Каждому неприводимому представлению D_2 в центросимметричной группе D_{2h} соответствует пара представлений: полносимметричного и антисимметричного относительно инверсии i ($A \to A_g + A_u$, $B_1 \to B_{1g} + B_{1u}$, и т. д.).

Одномерные представления абелевых групп C_n и $S_{2k} \simeq C_{2k}$ с $n \geqslant 3$, $k \geqslant 2$ также отличаются от представлений циклических групп, рассмотренных в подразд. 3.3 и 3.7, только обозначе-

Таблица 3.7

Характеры изоморфных точечных группы T_d и O

T_d	O	e e	$8C_3$ $8C_3$	$3C_2$ $3C_2$	$6\sigma_d$ $6C_2$	$6S_4$ $6C_4$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	–1	–1
E	E	2	–1	2	0	0
T_1	T_1; x, y, z	3	0	–1	–1	1
T_2; x, y, z	T_2	3	0	–1	1	–1

ниями. Группы средней категории симметрии с некоммутирующими элементами родственны группам диэдра (см. подразд. 3.7).

Столбцы таблиц характеров отвечают классам сопряженных элементов группы; в них указаны числа c_i элементов этого класса, если $c_i > 1$. В частности, группы D_3 и C_{3v} имеют ту же таблицу, что и изоморфная им группа перестановок $\mathbf{S}_3$ (см. табл. 3.4), но с другими обозначениями представлений и классов. В обоих группах единичной перестановке $\{1\}$ соответствует элемент e, перестановкам $\{(123)\}$ — класс $2C_3$, а двумерное представление ψ_3 по Малликену обозначают E. Кроме того, в таблице группы D_3 $\{(12)\} \to 3C_2$ и $\psi_1 \to A$, $\psi_2 \to B$; в таблице C_{3v} $\{(12)\} \to 3\sigma_v$ и $\psi_1 \to A'$, $\psi_2 \to A''$. Поскольку большинство физических величин, преобразуемых по парам комплексно сопряженных одномерных представлений абелевых групп C_n с $n > 2$, совпадают, в учебной и справочной литературе эти пары иногда объединяются в представления E-типа.

Характеры неприводимых представлений всех остальных групп средней категории (D_4, C_{4v}, D_{2d} и др.) выводят из групп диэдра с учетом удвоения числа операций и представлений в центросимметричных группах, являющихся прямыми произведениями ($D_{3d} = D_3 \times C_i$ и др.). Подобно группе $D_{2h} = D_2 \times C_i$, таблицы характеров всех прямых произведений имеют «клеточный» вид.

Семь групп высшей категории изоморфны группам перестановок ($T_d \simeq O \simeq \mathbf{S}_4$), их знакопеременным подгруппам ($T \simeq \mathbf{A}_4$, $I \simeq \mathbf{A}_5$) и прямым произведениям ($T_h \simeq T \times C_i$, $O_h \simeq O \times C_i$, $I_h \simeq I \times C_i$). Эти соотношения определяют вид их таблиц характеров. Трехмерные неприводимые представления точечных групп обозначают T (в ранней квантовомеханической и спектроскопической литературе F), четырех- и пятимерные представления (в группе I_h) обозначают G и H соответственно. Таким образом, например, изоморфные группы T_d и O имеют одну таблицу характеров (табл. 3.7), эквивалентную таблице группы $\mathbf{S}_4$ (см. табл. 3.5, где $\psi_1 \sim A_1$, $\psi_2 \sim A_2$, $\psi_3 \sim E$, $\psi_4 \sim T_2$ и $\psi_5 \sim T_1$).

Таблицу характеров для группы O_h легко получить, удваивая число классов сопряженных элементов в O или T_d добавлением центра инверсии i и заменяя каждое неприводимое представление парой из симметричного и антисимметричного относительно инверсии ($A_1 \to A_{1g} + A_{1u}$ и т. д.). Комплексно сопряженные одномерные представления, соответствующие «физически вырожденным» характеристикам в таблицах групп T и I, аналогично группам C_n, нередко объединяют.

Таблицы характеров для основных точечных групп молекул приведены в прил. 2. В правом столбце ($f_{\text{НП}}$) каждой таблицы,

отделенном вертикальной чертой, указаны неприводимые представления сдвигов x, y, z, поворотов R_x, R_y, R_z и квадратичных функций $x^2, \ldots, yz$ в данной группе. Число строк (неприводимых представлений) в таблице характеров любой группы равно числу столбцов (классов). Строка полносимметричного неприводимого представления состоит из единиц, столбец единичной операции e — из размерностей неприводимых представлений.

Характеры-строки (с компонентами, умноженными на числа элементов в классах) и классы-столбцы в таблице ортогональны со скалярным произведением (3.9). Поэтому сумма компонент характеров (т. е. сумма цифр в строке таблицы характеров, умноженных на числа элементов в каждом классе) для любого вещественного неприводимого представления, кроме полносимметричного, равна нулю. Сумма компонент всех характеров любой неединичной операции (сумма цифр в столбце таблицы, умноженных на размерности соответствующих представлений) также равна нулю.

Сумма квадратов всех компонент строки, умноженных на число элементов соответствующего класса-столбца, по теореме 3.11 равна порядку группы. Эти соотношения позволяют вывести таблицу характеров для произвольной точечной группы по набору ее элементов.

Упражнение 3.9. Построить таблицу характеров для группы T_h.

Двойные группы $\overline{G}$ получают из точечных групп G добавлением такой операции E поворота на 2π, коммутирующей со всеми операциями группы, что $E^2 = e$ (это удваивает порядок группы). Неприводимые представления группы $\overline{G}$ состоят из неприводимых представлений исходной группы G, полносимметричных относительно E, и новых представлений, антисимметричных по отношению к E:

$$\chi(Eg_i) = \chi(g_iE) = -\chi(g_i),$$

где $g \in G$. Поскольку в двойных группах $C_2^2 = E$, для операций C_2 и $\overline{C}_2$, если они находятся в одном классе, $\chi(C_2) = -\chi(\overline{C}_2) = 0$.

Число неприводимых представлений, антисимметричных относительно E, и их размерности n_i выводятся из количества классов в $\overline{G}$ и порядка исходной группы G ($\sum_i n_i^2 = |G|$). Так, из наличия в группе $\overline{D}_2$ порядка 8, полученной из абелевой группы D_2 порядка 4, пяти классов следует $n_5^2 = 8 - 4 = 4$, $n_5 = 2$. Учитывая, что $\chi(EC_2) = \chi(C_2) = 0$, получим таблицу характеров $\overline{D}_2$, подтверждающую ее изоморфизм с группой кватернионов Q_8 (см. табл. 3.8, подразд. 3.4 и 3.7).

Таблица 3.8

Характеры представлений двойной группы $\overline{D}_2$

$\bar{D}_2$	e	$\bar{C}_2^{(x)}, C_2^{(x)}$	$\bar{C}_2^{(y)}, C_2^{(y)}$	$\bar{C}_2^{(z)}, C_2^{(z)}$	E
A	1	1	1	1	1
B_1	1	–1	–1	1	1
B_2	1	–1	1	–1	1
B_3	1	1	–1	–1	1
$E_{1/2}$	2	0	0	0	–2

Таблица 3.9

Двузначные представления группы $\overline{T}$

$\overline{T}$	e	E	$3C_2, 3\bar{C}_2$	$4C_3^1$	$4\bar{C}_3$	$4C_3^2$	$4\bar{C}_3^2$
$E_{1/2}$	2	–2	0	1	–1	1	–1
$E_{3/2}^+$	2	–2	0	ε	$-\varepsilon$	ε^2	$-\varepsilon^2$
$E_{3/2}^-$	2	–2	0	ε^2	$-\varepsilon^2$	ε	$-\varepsilon$

Неприводимые представления двойных групп, антисимметричные относительно E, фактически являются двузначными (спинорными) представлениями соответствующих им обычных точечных групп (см. гл. 4). Характеры этих представлений $\chi(\overline{C}_n)$ можно вывести, заменяя в матричных элементах $e^{i\phi k}$ (где $\phi = 2\pi/n$) целые числа k полуцелыми. При выводе следует помнить, что каждому классу R_i исходной точечной группы G, не содержащему осей 2-го порядка, в двойной группе отвечает пара классов $R_i, \bar{R}_j$, однако при наличии в G взаимно перпендикулярных осей C_2, C_2' в соответствующие классы $\overline{G}$ входят пары $(C_2, \overline{C}_2)$ и $(C_2', \overline{C}_2')$. Так, в двойной группе $\overline{T}$ порядка 24 с семью классами имеется подгруппа $T \sim A_4$ (12 элементов и четыре класса) и четыре ее однозначных неприводимых представления, а также три двузначных представления (табл. 3.9), где $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$. Двумерные представления $\bar{E}_{3/2}^+$ и $\bar{E}_{3/2}^-$ физически эквивалентны и часто объединяются в четырехмерное представление $G_{3/2}$. В кубических двойных группах имеются истинные четырехмерные неприводимые представления, в икосаэдрических — шестимерные. Отметим, что группа $\overline{T}$ не изоморфна ни T_d, ни T_h (упражнение 3.2).

Характеры двузначных неприводимых представлений для некоторых точечных групп приведены в прил. 3.

3.13.2. Приведение представлений с помощью таблицы характеров

Пользуясь таблицами характеров, легко находить неприводимые представления, отвечающие какому-либо параметру физической системы с заданной симметрией. Так, например, смещения атомов в плоской молекуле трехфтористого бора BF_3 (точечная группа D_{3h}) из их равновесных положений по декартовым координатным осям трехмерного пространства удобно принять за базисные векторы 12-мерного пространства смещений V ($e_1 = \Delta x_B$, ..., $e_4 = \Delta x_{F(1)}$, ..., $e_{12} = \Delta z_{F(3)}$) (рис. 3.4). Набор из 12 ортогональных матриц (12×12), отвечающих преобразованиям векторов $(e_1, ..., e_{12})$ под действием операций группы D_{3h}, задает ее представление в пространстве V. Компоненты характера $\chi(g_i) = \operatorname{tr}\Gamma(g_i)$ этого представления для $g_i \in D_{3h}$ равны следам соответствующих матриц из подразд. 3.7:

Очевидно, что ненулевые диагональные элементы в каждой из матриц $\Gamma(g_i)$ определяются смещениями атомов в молекуле из их позиций, инвариантных относительно данной операции симметрии g_i. Например, поворот на $2\pi/3$ вокруг оси C_3 молекулы BF_3 оставляет на месте только атом B, смещения которого преобразуются блоком $\Gamma'(C_3)$ размера 3×3 (остальные девять диагональных элементов матрицы $\Gamma(C_3)$ равны 0):

$$\Gamma'(C_3) = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{3} & -\sin\frac{2\pi}{3} & 0 \\ \sin\frac{2\pi}{3} & \cos\frac{2\pi}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

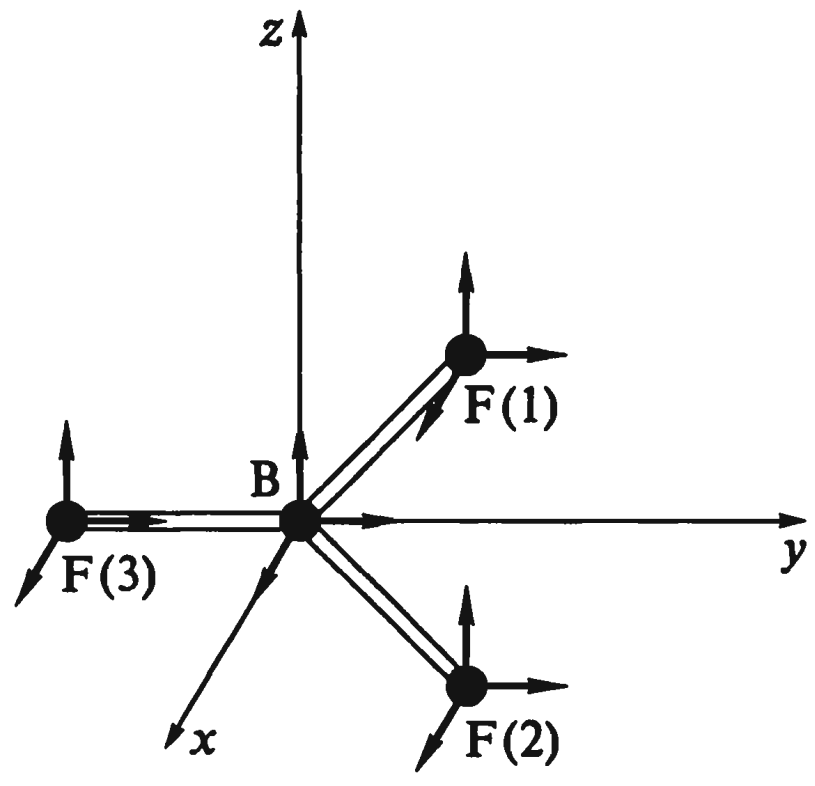


Рис. 3.4. Смещения атомов в молекуле трифторида бора

откуда $\chi(C_3) = \operatorname{tr}\Gamma(C_3) = \operatorname{tr}\Gamma'(C_3) = 0$. Отражение в «вертикальной» плоскости σ_v^{xz} оставляет на месте атомы B и F(1), сохраняя для каждого из них смещения по x, z и обращая знак смещений по y. Это отвечает следу матрицы с ненулевым диагональным блоком 6×6, т. е. характеру

$$\chi(\sigma_v) = \operatorname{tr}\begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & -1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & -1 & \\ 0 & & & & & 1 \end{pmatrix} = 2.$$

Для «горизонтальной» плоскости симметрии σ_h^{xy}, оставляющей на месте все атомы в молекуле, аналогично получаем $\chi(\sigma_h) = 4$, и т. д.

Учитывая симметрию молекулы BF_3, легко найти все компоненты характера 12-мерного представления Г ее атомных смещений. Его удобно записать под таблицей характеров неприводимых представлений точечной группы D_{3h} (табл. 3.10).

Согласно теореме 3.10 кратность j-го неприводимого представления группы G в разложении представления Г:

$$r_j^{(\Gamma)} = (\chi^{(\Gamma)}, \chi_j) = \frac{1}{|G|}\sum_{c_i \subset G} c_i \chi_j(g_i)\chi^{(\Gamma)}(g_i) \qquad (3.23)$$

с суммированием по классам группы.

В нашем случае

$$\begin{aligned} r_{A_1'} &= (1/12)[12 \cdot 1 - 2 \cdot 0 + 3 \cdot (-2) + 4 + 2 \cdot (-2) + 3 \cdot 2] = \\ &= (1/12)(12 - 6 + 4 - 4 + 6) = 1 \end{aligned}$$

(напомним, что произведение компонент характеров $\chi^{(\Gamma)}$ и χ_j в каждом классе сопряженных элементов следует умножить на число c_i операций симметрии в этом классе). Аналогично получаем

$$\begin{aligned} r_{A_1''} &= (1/12)(12 - 6 - 4 + 4 - 6) = 0, \\ r_{A_2'} &= (1/12)(12 + 6 + 4 - 4 - 6) = 1, \\ r_{A_2''} &= (1/12)(12 + 6 - 4 + 4 + 6) = 2, \\ r_{E'} &= (1/12)(24 + 8 + 4) = 3, \\ r_{E''} &= (1/12)(24 - 8 - 4) = 1, \end{aligned}$$

т. е.

$$\Gamma = A_1' + A_2' + 2A_2'' + 3E' + E''. \qquad (3.24)$$

Таблица 3.10

Представление атомных смещений в молекуле BF_3

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	$f_{НП}$
A_1'	1	1	1	1	1	1	
A_1''	1	1	1	−1	−1	−1	
A_2'	1	1	−1	1	1	−1	R_z
A_2''	1	1	−1	−1	−1	1	z
E'	2	−1	0	2	−1	0	x, y
E''	2	−1	0	−2	1	0	R_x, R_y
Γ	12	0	−2	4	−2	2	
$E' \times E''$	4	1	0	−4	−1	0	

Как видно из табл. 3.10, в разложение 12-мерного представления Γ входят компоненты представления трансляций $\Gamma(xyz) = A_2'' + E'$ и представления вращений $\Gamma_R = A_2' + E''$ в группе D_{3h}, которые отвечают смещениям и поворотам молекулы BF_3 как целого. Все остальные неприводимые компоненты представления Γ в разложении (3.24) соответствуют представлению Γ_v, порожденному шестью независимыми колебаниями молекулы BF_3, т. е.

$$\Gamma_v = \Gamma - \Gamma(xyz) - \Gamma_R = A_1' + A_2'' + 2E'.$$

Приведение представления молекулы, заданного смещениями ее атомов, и выделение из него представления молекулярных колебаний Γ_v используются в анализе колебательных спектров (см. гл. 5).

С помощью таблиц характеров также легко найти компоненты прямого произведения представлений, перемножая элементы характеров представлений в соответствующих классах и затем используя соотношения ортогональности. Так, прямое произведение $E' \times E''$ двумерных представлений группы D_{3h} дает четырехмерное приводимое представление, показанное в табл. 3.10. Аналогично приведению Γ получим $E' \times E'' = A_1'' + A_2'' + E''$.

3.14. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП И СИММЕТРИЯ ОСОБЫХ ТОЧЕК ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

Любая из 230 трехмерных пространственных групп кристаллов, согласно подразд. 2.11, является подгруппой одной из фик-

сированного набора симморфных групп: полупрямых произведений дискретной абелевой группы сдвигов (трансляций) трехмерного кристаллического множества, или кристаллической решетки, на ее точечную группу $\Delta = G/N$. Как принято в кристаллографии, мы будем обозначать нормальную подгруппу трансляций кристаллической решетки символом $\mathcal{T}$.

Элемент $\vec{\tau} \in \mathcal{T}$ подгруппы трансляций переводит точку $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ в эквивалентную ей точку $\vec{r} + \vec{\tau}$ ($\vec{\tau} = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$, где (a_1, a_2, a_3) — базисные векторы элементарной ячейки, (n_1, n_2, n_3) — целые числа. Непрерывный индекс $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ неприводимого представления подгруппы $\mathcal{T}$:

$$T^{(k_1,k_2,k_3)}\vec{r} = \exp[2\pi i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)]\vec{r}, \qquad (3.25)$$

согласно подразд. 3.12 рассматривается как вектор трехмерного *обратного пространства*, где имеется обратная решетка L' с базисными векторами (b_1, b_2, b_3):

$$(b_i, a_j) = 2\pi\delta_{ij}.$$

Прямое произведение двух трансляционных представлений с индексами $\vec{k}$ и $\vec{k'}$ определено с точностью до произвольного вектора обратной решетки $y \in L'$:

$$T(\vec{k}) \times T(\vec{k'}) = T(\vec{k} + \vec{k'} + L'),$$

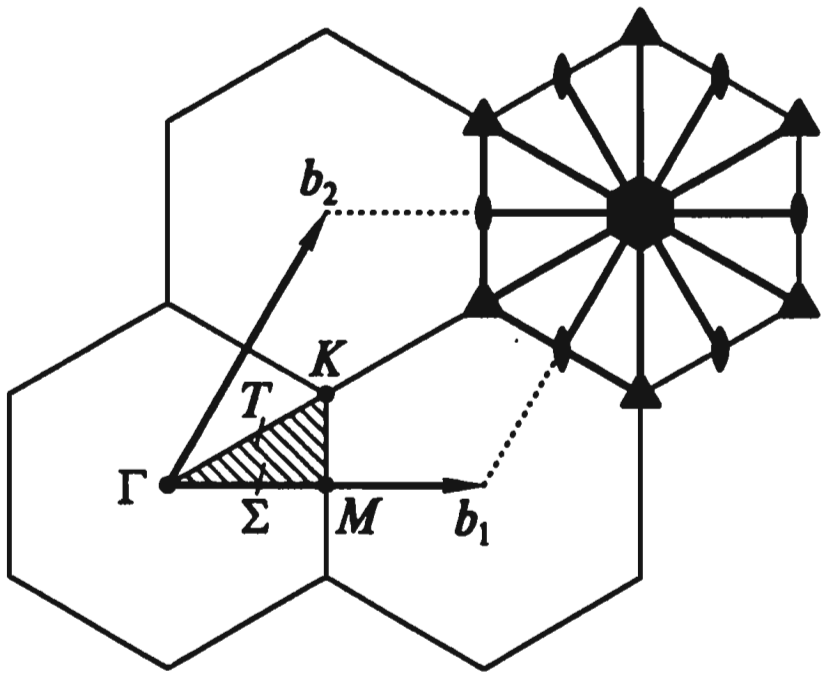
где

$$L' = m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3,$$

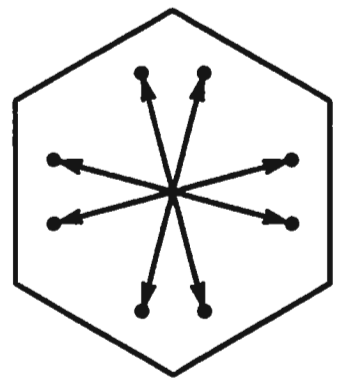
m_1, m_2, m_3 — целые числа.

Множество трансляционно независимых векторов $\vec{k}$, называемое *зоной Бриллюэна*, обычно выбирают в виде ячейки Дирихле в обратной решетке. По доказанному (см. (3.22)), точечная группа зоны Бриллюэна совпадает с точечной группой Δ «прямой» решетки. Зоны Бриллюэна плоской гексагональной и трехмерной ГЦК-решеток показаны, соответственно, на рис. 3.5 и 3.6.

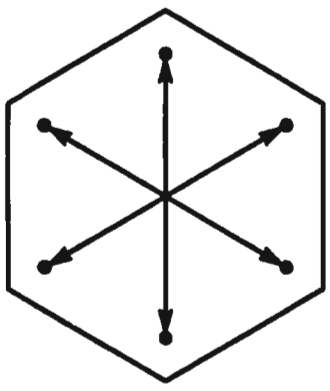
В соответствии с подразд. 2.6 для кристаллов всех сингоний имеется 24 зоны Бриллюэна. Они геометрически совпадают с полиэдрами Вороного аналогичных решеток в прямом пространстве и выводятся из пяти основных параллелоэдров Федорова (см. рис. 2.11, 2.12). Так, для примитивных решеток кубической, тетрагональной и ромбической сингоний зоны Бриллюэна представляют соответственно куб, тетрагональную призму и прямоугольный параллелепипед, а для примитивной гексагональной решетки — гексагональную призму. Поскольку ГЦК- и ОЦК-решетки взаимно обратны, зона Бриллюэна «прямой» ГЦК-решетки — ромбододекаэдр (т. е. ячейка Дирихле обратной



а



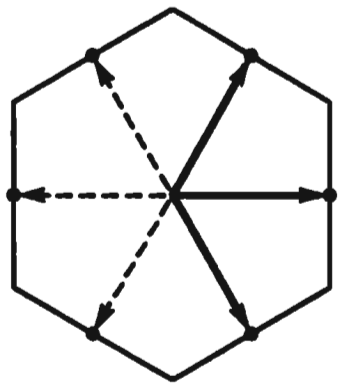
б



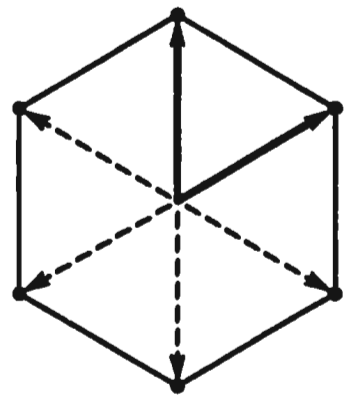
в



г



д



е

Рис. 3.5. Зона Бриллюэна плоской гексагональной решетки и позиции векторов $\vec{k}$ в ней:

$а$ — $\Gamma(0,0), C_{6v}$; $б$ — $(k_1,k_2), C_1$; $в$ — $T(k_1,k_1), C_s$; $г$ — $\Sigma(k_1,0), C_s$; $д$ — $M(\pi/a,0), C_{2v}$; $е$ — $K(2\pi/(3a),\ 2\pi/(3a)), C_{3v}$

ОЦК-решетки), а «прямой» ОЦК-решетки — кубооктаэдр. Символы 14 обратных решетокБраве, используемые в физике твердого тела, представлены в табл. 3.11.

Вектор $\vec{k}$ в зоне Бриллюэна под действием операций фактор-группы $G_k/\mathcal{T}_k$ переводится в симметрически эквивалентные ему

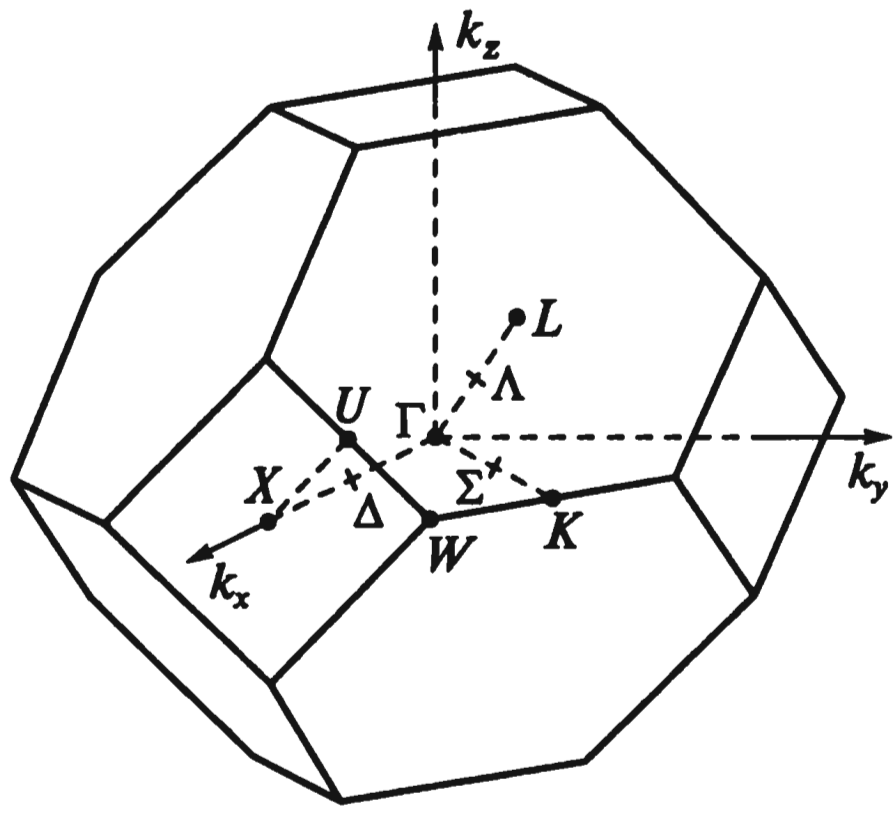


Рис. 3.6. Особые точки зоны Бриллюэна гранецентрированной кубической решетки

Таблица 3.11

Обратные решетки Браве

Решетка Браве	Обозначение			Объем зоны Бриллюэна
	ФТТ	Шенфлиса	Германа — Могена	
Триклинная P	Γ_t	C_i^1	$P\bar{1}$	$\vec{\mathbf{b}}_1[\vec{\mathbf{b}}_2 \times \vec{\mathbf{b}}_3]^*$
Моноклинная P	Γ_m	C_{2h}^1	$P2/m$	$8\pi^3/(abc\sin\beta)$
Моноклинная C	$\Gamma_m^{b\,**}$	C_{2h}^3	$C2/m$	$16\pi^3/(abc\sin\beta)$
Орторомбическая P	Γ_o	D_{2h}^1	$Pmmm$	$8\pi^3(abc)$
Орторомбическая C	$\Gamma_o^{b\,**}$	D_{2h}^{19}	$Cmmm$	$16\pi^3(abc)$
Орторомбическая I	Γ_o^v	D_{2h}^{25}	$Immm$	$16\pi^3(abc)$
Орторомбическая F	Γ_o^f	D_{2h}^{23}	$Fmmm$	$32\pi^3(abc)$
Тетрагональная P	Γ_q	D_{4h}^1	$P4/mmm$	$8\pi^3/(a^2c)$
Тетрагональная I	Γ_q^v	D_{4h}^{17}	$I4/mmm$	$16\pi^3/(a^2c)$
Тригональная P	$\Gamma_{rh}{}^{***}$	D_{3d}^5	$R\bar{3}m$	$16\pi^3/(3\sqrt{3}a^2c)$
Гексагональная P	Γ_h	D_{6h}^1	$P6/mmm$	$16\pi^3/(\sqrt{3}a^2c)$
Кубическая P	Γ_c	O_h^1	$Pm\bar{3}m$	$8\pi^3/a^3$
Кубическая I	Γ_c^v	O_h^9	$Im\bar{3}m$	$16\pi^3/a^3$
Кубическая F	Γ_c^f	O_h^5	$Fm\bar{3}m$	$32\pi^3/a^3$

* $\vec{\mathbf{b}}_1 = (\vec{\mathbf{a}}_2 \times \vec{\mathbf{a}}_3)/V$, $\vec{\mathbf{b}}_2 = (\vec{\mathbf{a}}_3 \times \vec{\mathbf{a}}_1)/V$, $\vec{\mathbf{b}}_3 = (\vec{\mathbf{a}}_1 \times \vec{\mathbf{a}}_2)/V$ (см. (2.16)).

** Обозначения ФТТ отвечают B-решетке (ось 2 в направлении $0z$, центрированные грани $x0z$).

*** Примитивная ромбоэдрическая ячейка.

векторы, образующие звезду ${}^*\vec{k}$. Число векторов в звезде равно кратности положения вектора $\vec{k}$ в независимой области обратной решетки (при общем положении $\vec{k}$ — порядку точечной группы Δ). Группа G_k вектора $\vec{k}$ в звезде называется *малой группой*, а ее точечная фактор-группа $\Delta_k = G_k/\mathcal{T}_k$ — локальной группой вектора $\vec{k}$ (или *малой когруппой*).

На рис. 3.5 изображены зона Бриллюэна плоской гексагональной решетки ($а$) и звезды векторов $\vec{k}$, занимающих общее ($б$) и два частных положения ($в$, $г$) внутри этой зоны. При частном положении вектора $\vec{k}$ на границе зоны некоторые из векторов $g\vec{k}$ ($g \in \Delta$), получаемых операциями точечной группы, переводятся в $\vec{k}$ трансляциями на период повторяемости обратной решетки, т. е. трансляционно эквивалентны ему. При этом число независимых векторов в звезде уменьшается, т. е. симметрия позиции $\vec{k}$ возрастает (рис. 3.5 $д$, $е$). Симметрически независимая часть зоны Бриллюэна, показанная для плоской гексагональной решетки на рис. 3.5, $а$, называется ее *фундаментальной областью*.

Легко видеть, что малая группа G_k вектора $\vec{k}$ в общей позиции внутри зоны Бриллюэна на рис. 3.5, $б$ совпадает с группой трансляций решетки $\mathcal{T}$ и, таким образом, его локальная группа $\Delta_k \sim C_1$ состоит только из операции идентичности. Кроме того, вектор $\vec{k} = 0$ (точка Γ на рис. 3.5, $а$) инвариантен относительно всех операций точечной группы решетки $\Delta_0 \sim G/\mathcal{T}$. Для особых точек и линий зоны Бриллюэна, обладающих локальной симметрией, в физике твердого тела используются специальные обозначения (табл. 3.12).

Таким образом, пространственная группа G имеет бесконечный набор неприводимых представлений $\Gamma_j^{(\vec{k})}$, каждое из которых полностью определяется звездой вектора k и j-м неприводимым представлением локальной группы Δ_k. Каждой звезде ${}^*\vec{k}$ соответствует представление вида

$$\Gamma(G) = \Gamma'(\vec{k}) \exp(i\vec{k}\vec{a}), \tag{3.26}$$

где $\Gamma'(\vec{k})$ — представление локальной группы Δ_k любого вектора в этой звезде, $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$. При общем положении $\vec{k}$ (т. е. тривиальной группе $\Delta_k \sim C_1$) это представление является неприводимым, а относящиеся к нему физические величины — m-кратно вырожденным по порядку звезды ${}^*\vec{k}$. Таким образом, симметрически независимая часть зоны Бриллюэна и ее особые точки содержат полную информацию о всех неприводимых представлениях пространственной группы.

Таблица 3.12

Особые точки зон Бриллюэна в группе $Fm\bar{3}m$ (см. рис. 3.5)

Позиция	Координаты	Кратность звезды $^*k$	Порядок группы Δ_k	Изоморфизм группы Δ_k
Γ	$(0,0,0)$	1	48	O_h
X	$(2\pi/f,0,0)^*$	3	16	D_{4h}
Δ	$(k,0,0)$	6	8	C_{4v}
L	$(\pi/f,\pi/f,\pi/f)^*$	4	12	D_{3h}
Λ	(k,k,k)	8	6	C_{3v}
K	$(3\pi/2f,3\pi/2f,0)^*$	3	16	D_{4h}
Σ	$(k,k,0)$	12	4	C_{2v}
W	$(2\pi/f,\pi/f,0)^*$	6	8	D_{2d}
U	$(2\pi/f,\pi/(2f),\pi/(2f))^*$	12	4	C_{2v}
Общая	(k_1,k_2,k_3)	48	1	C_1

*Вектор $\vec{f}$ соответствует центрирующим трансляциям в ГЦК-ячейке.

Звезда векторов, лежащих на элементах симметрии, отвечает сумме неприводимых представлений $\Gamma'_j(\vec{k})$ вида (3.26). Размерность неприводимого представления $\Gamma'_j(G)$ в общем случае равна

$$s^{(j)}_{\Delta_k}|\Delta|/|\Delta_k|, \tag{3.27}$$

где $s^{(j)}_{\Delta_k}$ — размерность j-го представления локальной группы, $|\Delta_k|$ — ее порядок, а $|\Delta|$ — порядок точечной группы решетки (см. подразд. 3.12).

Неприводимые представления пространственных групп нумеруются двумя индексами $(\vec{k},j)$: непрерывным вектором обратного пространства $\vec{k}=(k_1,k_2,k_3)$ и дискретным индексом j неприводимого представления фактор-группы $G/\mathcal{T}(\vec{k})$. Для симморфных групп G эта фактор-группа часто совпадает с локальной группой Δ_k точки $\vec{k}$ в зоне Бриллюэна. В частности, звезде из 12 векторов на рис. 3.5, *а* отвечает двенадцатимерное представление, а звездам из шести векторов на рис. 3.5, *б*, *в* — по два шестимерных. Точке Г (0,0) на рис. 3.5, *а* соответствуют шесть представлений: четыре одномерных и два двумерных, совпадающих с набором неприводимых представлений группы C_{6v}. Представления про-

странственных групп используются в описании спектров и физических свойств кристаллов (см. гл. 5).

В несимморфных группах для вектора $\vec{k}$ в общей позиции также $\Delta_k \sim C_1$, а в позиции Г ($k = 0$) фактор-группа $\Delta_0 = G/\mathcal{T}$ изоморфна кристаллическому классу. В этой точке представления несимморфных пространственных групп сводятся к представлениям точечных групп, получаемых заменой всех «открытых» элементов (винтовых осей и плоскостей скользящего отражения) на «закрытые» (соответственно поворотные оси и плоскости m).

В особых точках других типов порядок конечной фактор-группы $\Delta_k = G/\mathcal{T}(\vec{k})$ для групп с открытыми элементами симметрии может быть выше, чем у соответствующей кристаллографической точечной группы, что приводит к повышению размерности представлений. Так, например, в точке зоны Бриллюэна $(\pi/a_1, 0, 0)$ соотношение (3.25) для операции трансляции $\tau(a_1)$ превращается в

$$T^{\left(\frac{\pi}{a_1},0,0\right)}\vec{r} = e^{i\frac{\pi}{a_1}a_1}\vec{r} = e^{i\pi}\vec{r} = -\vec{r}.$$

Таким образом, для представления пространственной группы G, отвечающего этой точке, сдвиг на период a_1 элементарной

Таблица 3.13

Неприводимые представления фактор-группы $Fd\bar{3}m/\tau$ в точке $X_1 = (2\pi/f, 0, 0)$ зоны Бриллюэна, антисимметричные относительно центрирующей трансляции $f = (a/2, a/2, 0)$

	Класс							
Представление	e	f	C_4^2	$C_4^2 f$	$2C_4\tau$, $2C_4(\tau+f)$	$C_2\tau$, $C_2'(\tau+f)$	$C_2'\tau$, $C_2(\tau+f)$	$2C_2''$, $2C_2''f$
X_1	2	−2	2	−2	0	0	0	0
X_2	2	−2	2	−2	0	0	0	0
X_3	2	−2	−2	2	0	2	−2	0
X_4	2	−2	−2	2	0	−2	2	0

Окончание

	Класс					
Представление	$i\tau$, $i(\tau+f)$	$2S_4, 2S_4 f$	$2\sigma_v$	$2\sigma_v f$	$2\sigma_v'\tau$, $2\sigma_v'(\tau+f)$	$\sigma_h\tau$, $\sigma_h(\tau+f)$
X_1	0	0	2	−2	0	0
X_2	0	0	−2	2	0	0
X_3	0	0	0	0	0	0
X_4	0	0	0	0	0	0

ячейки переводит вектор $\vec{r}$ в трансляционно неэквивалентный ему вектор $-\vec{r}$. При этом, аналогично операции E в двойных точечных группах, $\tau(a_1)^2 \sim e$, и набор элементов локальной симметрии в точке $(\pi/a_1, 0, 0)$ удваивается за счет добавления к ним трансляции $\tau(a_1)$ в ячейке с удвоенным периодом $2a_1$.

В симморфных группах G, не содержащих трансляций на рациональные части периода a_1, возникающие классы $\{-g_i\}$ фактор-группы дублируют набор классов $\{g_i\}$ локальной группы Δ_k в точке $(\pi/a_1, 0, 0)$, и ее неприводимые представления, антисимметричные относительно $\tau(a_1)$, взаимно-однозначно соответствуют представлениям Δ_k. Локальная группа Δ_k на границе зоны Бриллюэна в этом случае по-прежнему совпадает с точечной симметрией соответствующей позиции $\vec{k}$. Если же в группе G имеются элементы $g(\tau)$ с трансляцией на $\frac{1}{p}a_1$ (где $p = 2, 3, 4, 6$), элементы $g(\tau)$ и $g(\tau)t(a_1)$ попадают в один класс. В этом случае число классов в группе $G_k/\mathcal{T}_k$ удвоенного порядка оказывается меньше двойного числа классов в точечной группе позиции $\vec{k}$, что по теореме 3.11 порождает представления размерности выше 1. Иными словами, в особых точках зоны Бриллюэна этих групп трансляции на соответствующие периоды решетки не коммутируют с открытыми элементами симметрии и смешиваются с ними, повышая размерность неприводимых представлений фактор-группы.

У п р а ж н е н и е 3.10. Построить таблицу характеров фактор-группы двумерной группы $p2mg$, относящейся к примитивной ортогональной сингонии (см. рис. 2.22; скользящее отражение в направлении a_2) в точке зоны Бриллюэна $(0, \pi/a_2)$. Найти неприводимое представление, антисимметричное относительно трансляции $\tau(a_2)$ в этой точке.

Фактор-группы «расширенных» ячеек кристалла, аналогично двойным группам молекул, позволяют объяснить дополнительное вырождение состояний в особых точках зоны Бриллюэна («склеивание» энергетических зон, см. гл. 5). Некоторые кристаллы с несимморфными пространственными группами могут вообще не иметь одномерных неприводимых представлений в особых точках $\vec{k}$. В частности, локальная группа точки X $(2\pi/f, 0, 0)$* в кубоктаэдрической зоне Бриллюэна ГЦК-ячейки с параметром a в группе $Fm\bar{3}m$ имеет порядок 16 и изоморфна D_{4h}, однако в пространственной группе $Fd\bar{3}m$ точке X отвечает локальная группа 32-го порядка с четырьмя новыми двумерными

* $\vec{f} = \frac{\vec{a}}{\sqrt{2}}$ отвечает центрирующим трансляциям в ГЦК-ячейке (см. рис. 2.8 и табл. 3.12).

неприводимыми представлениями (табл. 3.13). Поэтому в точке X группы $Fm\bar{3}m$ могут существовать одномерные неприводимые представления, тогда как для $Fd\bar{3}m$ все неприводимые представления в этой точке, антисимметричные относительно центрирующих трансляций $\vec{f}$, двумерны.

Подробнее с неприводимыми представлениями пространственных групп можно познакомиться в [1, гл. 6; 30; 99, т. 2, гл. 14, § 9], [93, гл. 6]. В [44] представлены таблицы характеров для всех трехмерных пространственных групп, а в [71] приведены оригинальные работы по выводу фактор-групп для некоторых кристаллов.

Контрольные вопросы

1. Составить таблицу характеров для группы D_7.

2. Найти размерность неприводимого представления группы перестановок S_8, соответствующую набору [5, 2, 1].

3. Сколько существует неэквивалентных двумерных комплексных представлений групп $\mathbf{S_3}$ и $\mathbf{S_6}$?

4. Сколько существует неэквивалентных трехмерных комплексных представлений групп $\mathbf{S_6}$ и $\mathbf{S_7}$?

5. Пусть задано двумерное комплексное представление ϕ циклической группы $\langle a\rangle_4$, при котором в некотором базисе пространства V матрица вектора $\phi(a)$ имеет вид

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

Разложить пространство V в прямую сумму подпространств.

6. Пусть задано двумерное комплексное представление ϕ циклической группы $\langle a\rangle_6$, при котором в некотором базисе пространства V матрица вектора $\phi(a)$ имеет вид

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

Найти базис пространства V, в котором матрица оператора $\phi(a)$ унитарна.

7. Пользуясь таблицей характеров из прил. 2, вывести спинорные представления группы вращений икосаэдра I.

8. Найти неприводимые представления группы $P2_12_12$ в точке $(0,0,0)$ и на границах зоны Бриллюэна.

ГЛАВА 4

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ГРУПП ЛИ

Рассмотрены свойства непрерывных групп Ли и соответствующих им алгебр с операцией лиевского умножения. Кратко описаны неприводимые представления важнейших групп Ли.

4.1. ЛИНЕЙНЫЕ ГРУППЫ ЛИ

В гл. 3 были рассмотрены представления конечных и конечно порожденных дискретных групп. В гл. 1 также упоминались бесконечные группы, элементы которых непрерывно заполняют некоторую область, например группа любых трансляций по определенной координате (изоморфная $\mathbb{R}^1$) или группа поворотов на любой угол вокруг заданной оси. Очевидно, не все свойства конечных и бесконечных групп одинаковы. Так, использованные в гл. 3 нормировки скалярных произведений (3.3), (3.9) для группы вращений надо преобразовать в интегральную форму, тогда как для неограниченной группы $\mathbb{R}^1$ эти условия вообще не соблюдаются. Поэтому на бесконечные группы нельзя непосредственно переносить соотношения, выведенные для конечных групп и их представлений: такую переносимость в каждом случае следует доказывать.

В данной главе будет рассмотрен важный класс бесконечных групп, на который переносимы основные свойства представлений конечных групп и их характеров: линейные группы Ли, распространенные в физических приложениях. Любой элемент $g(t_1,\ldots,t_m)$ этих групп можно задать конечным числом непрерывных параметров $(t_1,\ldots,t_m)$; минимальное число таких параметров называют размерностью группы.

В теории групп Ли часто используют геометрический язык. Группам Ли изоморфны линейные группы невырожденных матриц заданного размера, элементы которых (x_{ij}) удовлетворяют некоторым алгебраическим условиям, т. е. уравнениям. Такие линейные группы матриц образуют поверхность в некотором пространстве. Практически вся информация о группе содержится в касательном пространстве к этой поверхности в точ-

ке единичного элемента группы, снабженном новой алгебраической операцией лиевского умножения. Исследование свойств касательного пространства приводит к алгебрам Ли — новой математической конструкции, дополняющей понятие группы.

В основных чертах теория представлений компактных групп Ли (например, $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$) аналогична теории представлений конечных групп. В частности, для них справедлив аналог теоремы Машке, все их неприводимые представления конечномерны и имеется теория характеров. Для некомпактных групп это уже неверно. Нами будут кратко рассмотрены неприводимые представления некомпактных групп: $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, $\mathbb{O}(1,3)$ (группы Лоренца) и $\mathcal{P}(1,3)$ (группы Пуанкаре).

Подгруппу G в группе матриц $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$ или $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ называют *линейной группой Ли*, если существует конечная система из N вещественных (соответственно, комплексных) многочленов вида

$$f_i(X_{11}, X_{12}, \ldots, X_{1n}, X_{21}, \ldots, X_{2n}, \ldots, X_{nn}), \quad i = 1, \ldots, N$$

от n^2 переменных $\{X_{rs}\}$, где $1 \leqslant r, s \leqslant n$, налагающая условия на элементы этих матриц. Именно, квадратная матрица

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{n1} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

принадлежит группе G тогда и только тогда, когда все ее элементы a_{rs}, $1 \leqslant r, s \leqslant n$ удовлетворяют системе уравнений

$$f_i(a_{11}, a_{12}, \ldots, a_{1n}, a_{21}, \ldots, a_{2n}, \ldots, a_{nn}) = 0, \quad (i = 1, \ldots, N), \tag{4.2}$$

т. е. $f_i(X_{rs}) = 0$. Каждую матрицу A вида (4.1) можно рассматривать как точку A в пространстве R^{n^2} (или в $\mathbb{C}^{n^2}$) размерности n^2, координатами которой $(a_{11}, a_{12}, \ldots, a_{1n}, a_{21}, \ldots, a_{2n}, \ldots, a_{nn})$ являются элементы этой матрицы. Тогда условия (4.2), уменьшая число независимых переменных, выделяют в таком пространстве некоторую *поверхность*, которую мы тоже будем обозначать символом G. Из обычных формул для вычисления элементов произведения матриц и обратной матрицы (см. гл. 7) видно, что умножение элементов в G и переход к обратной матрице являются дифференцируемыми отображениями.

Рассмотренные выше в этой книге непрерывные группы

$$\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})\ [n^2],\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{R})\ [n^2-1],\ \mathbb{O}(n,\mathbb{R})\ \left[\frac{n(n-1)}{2}\right],$$

$$\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})\ \left[\frac{n(n-1)}{2}\right]\ \mathrm{Sp}(n,\mathbb{R})\ [n^2],\ \mathrm{SU}(n,\mathbb{C})\ [n^2-1],$$

являются вещественными линейными группами Ли, а группы

$$\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})\ [2n^2],\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{C})\ [2n^2-2],$$
$$\mathbb{O}(n,\mathbb{C})\ [n(n-1)],\ \mathrm{SO}(n,\mathbb{C})\ [n(n-1)],\ \mathrm{Sp}(n,\mathbb{C})\ [n^2]$$

являются комплексными линейными группами Ли. (В квадратных скобках указана размерность каждой группы, т. е. число переменных величин в матрице минус число независимых условий.) Заметим, что каждой комплексной величине $a+bi$ отвечают две независимые вещественные переменные a, b. Далее, вещественная (комплексная) матрица $A = (a_{ij})$ является ортогональной (элементом группы $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ или $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$) в том и только в том случае, если ${}^tAA = E$. Для ее элементов это означает $n^2/2 + n/2 = n(n+1)/2$ условий ортогональности и нормировки

$$\sum_{t=1}^{n} a_{ti}a_{tj} - \delta_{ij} = 0, (i,j = 1, \ldots, n). \tag{4.3}$$

Матрица $A = (a_{ij})$ лежит в группе $\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})$ или в группе $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$ в том и только в том случае, если ее определитель равен 1. Это условие, выраженное в виде равенства нулю многочлена

$$\det A - 1 = \sum_{\sigma\in\mathbf{S}_n} (-1)^{\sigma} a_{1,\sigma 1}\cdots a_{n,\sigma n} - 1 = 0 \tag{4.4}$$

от n^2 коэффициентов a_{ij} матрицы A, уменьшает число ее независимых элементов на единицу. Если элементы a_{ij} комплексные, условие превращается в $\det A = \alpha + \beta i$ при $\alpha = 1, \beta = 0$.

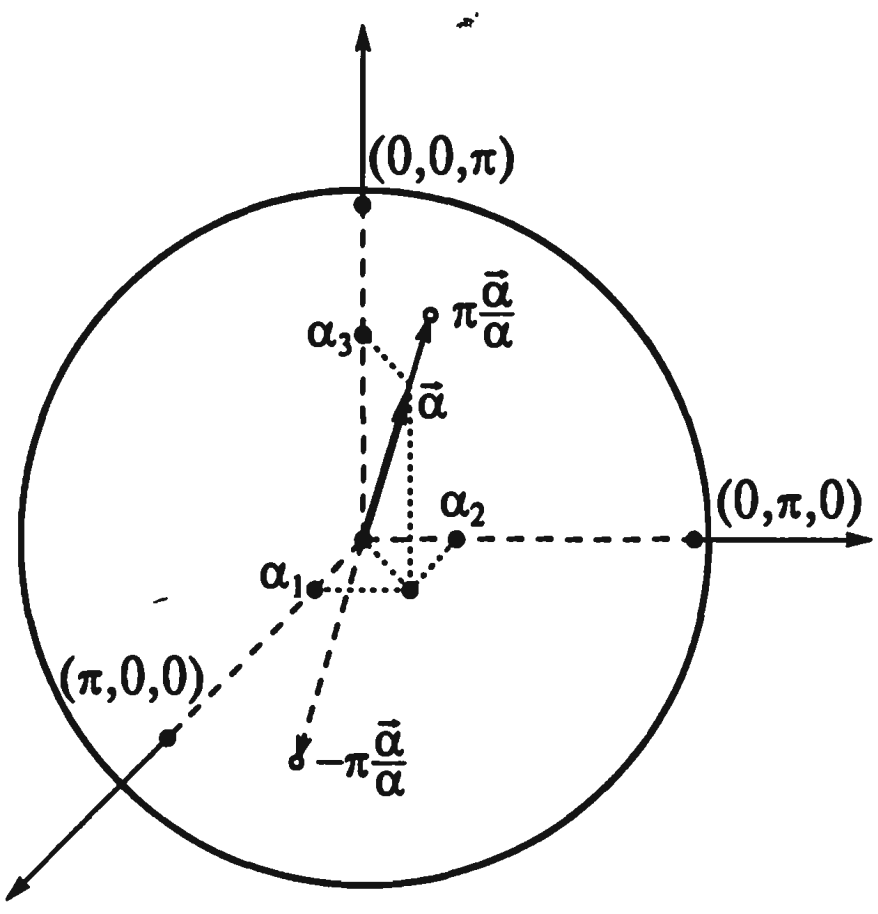


Рис. 4.1. Параметризация элементов группы трехмерных вращений $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ [59, гл. 2]

Из упражнения 1.12, случай 8) вытекает, что группа унитарных матриц $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ является вещественной линейной группой Ли, именно, подгруппой в $\mathrm{GL}(2n,\mathbb{R})$. Используя предложение 1.20, мы получаем, что и группа $\mathrm{SU}(n,\mathbb{C})$ является вещественной линейной группой.

Другим примером линейных групп Ли являются группы $\mathrm{Aff}(V)$ всех аффинных преобразований n-мерного пространства. Действительно, выберем в

пространстве V базис $(e_1, \ldots, e_n)$ и построим пространство W с базисом $(e_1, \ldots, e_n, e)$ размерности $n+1$. По предложению 1.10 и упражнению 1.13 группа $\mathrm{Aff}(V)$ изоморфна группе всех матриц вида (1.8) и потому является линейной группой Ли размерности $n(n+1)-(n+1)=n^2-1$.

Важные для приложений группы $\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$ с $n=2,3,4$ имеют размерности, соответственно, 1, 3 и 6. Элемент группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, т. е. поворот на произвольный угол α вокруг начала координат в трехмерном декартовом пространстве можно изобразить вектором $\vec{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$, направленным по оси вращения (знак «+» по часовой стрелке) и пропорциональным по длине углу поворота (рис. 4.1). Очевидно, угол α всегда можно выбрать так, что $|\alpha| \leqslant \pi$. Таким образом, все векторы α лежат внутри сферы радиуса π, т. е. группа $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ компактна. Так как повороту на π вокруг любой оси отвечает двузначное представление векторами $\vec{\alpha}$ и $-\vec{\alpha}$, противоположные точки на поверхности сферы $|\alpha|=\pi$ следует отождествить. Координатные проекции вектора $\vec{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$ можно представить в виде

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

$$g(\alpha_3)=\begin{pmatrix}\cos\alpha_3 & -\sin\alpha_3 & 0\\ \sin\alpha_3 & \cos\alpha_3 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Дифференцируя элемент $g(\alpha_1,\ldots,\alpha_m)$ и полагая единичный элемент $e=g(0,\ldots,0)$, получим

$$\lim_{g\to e} g(\alpha_1,\ldots\alpha_m)=e+\sum_i (\partial g/\partial\alpha_i)_{g=e}\alpha_i.$$

Мы видим, что в малой окрестности единичного элемента e все операции бесконечной группы G определяются конечным набором ее линейных дифференциальных, или *инфинитезимальных*, операторов вида $(\partial g/\partial\alpha_i)_{g=e}$. В частности, для группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ получаются операторы

$$\hat{J}_1=(\partial g/\partial\alpha_1)_{\alpha_1=0}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & -\sin\alpha_1 & -\cos\alpha_1\\ 0 & \cos\alpha_1 & -\sin\alpha_1\end{pmatrix}_{\alpha_1=0}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},$$

$$\hat{J}_2=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{J}_3=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

или

$$\hat{J}_1 = E_{32} - E_{23},$$
$$\hat{J}_2 = E_{13} - E_{31}, \tag{4.5}$$
$$\hat{J}_3 = E_{21} - E_{12}$$

(где в квадратной матрице E_{mk} элемент $\epsilon_{mk} = 1$, а все остальные элементы равны нулю, см. подразд. 1.8). Непосредственно выводится, что операторы $\hat{J}_1$, $\hat{J}_2$ и $\hat{J}_3$ антиэрмитовы, а их произведения удовлетворяют *коммутационным соотношениям*

$$\hat{J}_1\hat{J}_2 - \hat{J}_2\hat{J}_1 = \hat{J}_3,$$
$$\hat{J}_2\hat{J}_3 - \hat{J}_3\hat{J}_2 = \hat{J}_1, \tag{4.6}$$
$$\hat{J}_3\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_3 = \hat{J}_2.$$

Три дифференциальных оператора $(\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$ с алгебраическими соотношениями (4.5) задают *инфинитезимальное представление* группы $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. В общем случае для набора дифференциальных операторов $\{\hat{J}_i\}$ группы G справедливы соотношения

$$\hat{J}_p\hat{J}_q - \hat{J}_q\hat{J}_p = \sum c_{pq}^{(i)}\hat{J}_i,$$

где коэффициенты $c_{pq}^{(i)}$, называемые *структурными константами* группы G, не зависят от ее представления. Далее будет приведено строгое доказательство этих утверждений.

О п р е д е л е н и е 4.1. Пусть линейная группа G задана системой уравнений (4.2) и $A \in G$. *Касательным пространством* $T_G(A)$ к группе G в точке (матрице) A называется линейное пространство, состоящее из всех матриц $dX = (dX_{pq}) \in \mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$ (либо $dX = (dX_{pq}) \in \mathrm{Mat}(n, \mathbb{C})$), называемых *инфинитезимальными*, с условием

$$\sum_{p,q} \frac{\partial f_i}{\partial X_{pq}}(A)dX_{pq} = 0, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{4.7}$$

Иными словами, касательное пространство в точке (матрице) $A \in G$ получают дифференцированием условий (4.2), наложенных на элементы группы $g \in G$. Опишем касательные пространства $T_G(E)$ в «точке», заданной единичной матрицей E, для разных линейных групп G.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 4.1. Касательное пространство $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})}(E)$ $(T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})}(E))$ состоит из множества $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{R})$ (соответственно, $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{C})$) всех вещественных (комплексных) матриц $n \times n$ с нулевым следом.

Доказательство. Пусть $G = \mathrm{SL}(n, \mathbb{R})$ (или $G = \mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$). Тогда G задается одним уравнением (4.4). Поэтому касательное пространство $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})}(A)$ для точки (матрицы) $A \in \mathrm{SL}(n, \mathbb{R})$ (соответственно, пространство $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})}(A)$ для матрицы $A \in \mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$) тоже задается одним уравнением

$$\sum_{p,q} \frac{\partial f}{\partial X_{pq}} dX_{pq} = \sum_{p,q} \frac{\partial(\det X)}{\partial X_{pq}} dX_{pq} =$$

$$= \sum_{p,q} \frac{\partial(\sum_{i=1}^{n} A_{iq} X_{iq})}{\partial X_{pq}} dX_{pq} = \sum_{p,q} A_{pq}\, dX_{pq} = 0,$$

где A_{pq} — алгебраическое дополнение к элементу a_{pq} в матрице A (см. гл. 7). Взяв в качестве A единичную матрицу E, получим $A_{pq} = \delta_{pq}$, откуда

$$\sum_{p,q} \frac{\partial f}{\partial X_{pq}}(E) dX_{pq} = \sum_{p,q} \delta_{pq} dX_{pq} = \sum_{p} dX_{pp} = \mathrm{tr}(dX) = 0.$$

Следовательно, подпространства $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})}(E)$ и $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})}(E)$ задаются уравнением $\mathrm{tr}(dX) = 0$, где $\mathrm{tr}(dX)$ означает *след* матрицы dX, т. е. сумму $dX_{11} + \cdots + dX_{nn}$ ее диагональных элементов.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.2. Касательное пространство $T_{\mathbb{O}(n,\mathbb{R})}(E)$ ($T_{\mathbb{O}(n,\mathbb{C})}(E)$) состоит из множества $\mathfrak{o}(n, \mathbb{R})$ ($\mathfrak{o}(n, \mathbb{C})$) всех кососимметрических вещественных (комплексных) матриц $dX = (dX_{ij})$.

Доказательство. Пусть $G = \mathbb{O}(n, \mathbb{R})$. Тогда по (4.7) касательное пространство $T_{\mathbb{O}(n,\mathbb{R})}(A)$ в произвольной точке A задается системой уравнений, получаемых дифференцированием условий (4.3):

$$\sum_{r,s} \frac{\partial}{\partial X_{rs}} \left(\sum_{q=1}^{n} X_{qi} X_{qj} - \delta_{ij} \right) dX_{rs} =$$

$$= \sum_{r,s} \sum_{q=1}^{n} \left(\frac{\partial X_{qi}}{\partial X_{rs}} X_{qj} + X_{qi} \frac{\partial X_{qj}}{\partial X_{rs}} \right) dX_{rs} =$$

$$= \sum_{r,s} \sum_{q=1}^{n} (\delta_{qr}\delta_{is} X_{qj} + X_{qi}\delta_{qr}\delta_{js}) dX_{rs} = 0.$$

Поэтому в точке, соответствующей единичной матрице E,

$$\sum_{q=1}^{n}(\delta_{qr}\delta_{is}\delta_{qj}+\delta_{qi}\delta_{qr}\delta_{js})dX_{rs}=0.$$

Отсюда вытекает, что $T_{\mathbb{O}(n,\mathbb{R})}(E)$ задается уравнениями

$$\sum_{q,s,r=1}^{n}(\delta_{qr}\delta_{is}\delta_{qj}+\delta_{qi}\delta_{qr}\delta_{js})dX_{rs}=\sum(dX_{ji}+dX_{ij})=0,$$

т. е. $dX_{ji}=-dX_{ij}$. Случай $G=\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$ рассматривается аналогично.

Простейшим примером касательного пространства $T_{\mathbb{O}(2,\mathbb{R})}(E)$, где E — единичная матрица размера 2×2, может служить множество квадратных матриц

$$T_x=\begin{pmatrix}0 & \alpha\\ -\alpha & 0\end{pmatrix}.$$

Пусть G — линейная группа. *Дифференцируемым путем* в группе G из единичного элемента E в элемент $g\in G$ называется такое дифференцируемое отображение $p:[0,1]\to G$, что $p(0)=E$, $p(1)=g$. Это означает, что каждому числу $t\in[0,1]$ сопоставлена матрица

$$p(t)=\begin{pmatrix}p_{11}(t) & \dots & p_{1n}(t)\\ p_{21}(t) & \dots & p_{2n}(t)\\ \dots & \dots & \dots\\ p_{n1}(t) & \dots & p_{nn}(t)\end{pmatrix},$$

в которой каждая числовая функция $t\to p_{rs}(t)$ является дифференцируемой. При этом производная

$$p'(t)=\begin{pmatrix}p'_{11}(t) & \dots & p'_{1n}(t)\\ p'_{21}(t) & \dots & p'_{2n}(t)\\ \dots & \dots & \dots\\ p'_{n1}(t) & \dots & p'_{nn}(t)\end{pmatrix}$$

также является квадратной матрицей размера n.

П Р Е Д Л Ѳ Ж Е Н И Е 4.3. Пусть задан дифференцируемый путь $p:[0,1]\to G$ в группе G, причем $p(t_0)=p_0\in G$ для некоторого $t_0\in[0,1]$. Тогда $p'(t_0)\in T_G(p_0)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим, что группа G задается системой уравнений (4.2) и матрица $p(t)=(p_{ij}(t))\in G$ для любого $t\in[0,1]$. Используя правило дифференцирования сложной функции, для любого $s=1,\dots,N$ получаем

$$\sum_{ij}\frac{\partial f_s}{\partial p_{ij}}(g)p'_{ij}(t_0)=0.$$

Отсюда в силу определения 4.1 получаем требуемое утверждение.

В курсе математического анализа с помощью теоремы о неявной функции доказывается, что касательное пространство $T_G(g)$ состоит из всех касательных векторов $p'(t)$ в точке g для всех дифференцируемых путей, проходящих через g (рис. 4.2). Покажем, что такое пространство $T_G(g)$, заданное в точке $g = E$, полностью определяет группу G.

Зафиксируем элемент g линейной группы G и рассмотрим произвольный элемент $x \in G$. Отображение *правого сдвига* $R_g : G \to G$, при котором $x \mapsto xg$, является дифференцируемым отображением, поскольку коэффициенты $(xg)_{ij}$ его матрицы задаются линейными функциями от коэффициентов матрицы $x \in G$. Пусть $x(t)$ — дифференцируемый путь, проходящий через E. Тогда $R_g(x(t)) = x(t)g$ является дифференцируемым путем, проходящим через $R_g(E) = g$. Этот путь в точке g касается вектора $\big(R_g(x(t))\big)' = (x(t)g)' = x'(t)g$ (так как g не зависит от t). Таким образом, $T_G(g) \supseteq T_G(E)g$. С другой стороны, аналогично, $T_G(E) \supseteq T_G(g)g^{-1}$, откуда

$$T_G(g) = (T_G(E))\, g. \tag{4.8}$$

Это же равенство можно получить и из следующих соображений. Отображение R_g задается линейными функциями от коэффициентов матрицы $x \in G$. Поэтому дифференциал dR_g этого отображения совпадает с матрицей g, т. е.

$$dR_g : T_G(x) \to T_G(xg),$$
$$dR_g(dX) = (dX)g.$$

Но $R_{g_1 g_2} = R_{g_1} R_{g_2}$. Следовательно, dR_g задает линейный изоморфизм $T_G(E)$ и $T_G(g)$, т. е. (4.7) выполнено для любого $g \in G$. В частности, справедливо следующее предложение.

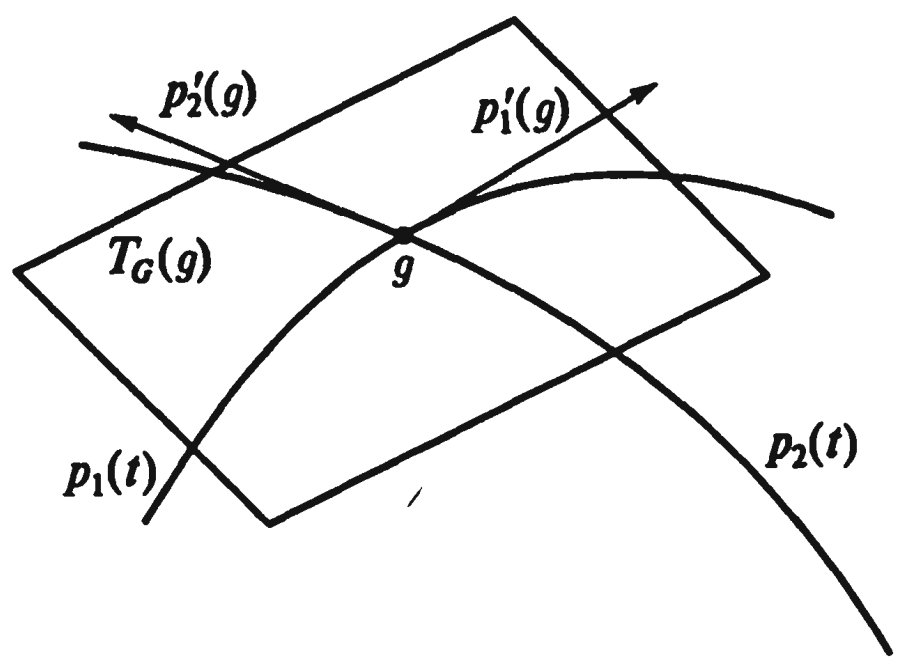


Рис. 4.2. Касательное пространство и касательные векторы путей

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.4. $\dim T_G(E) = \dim T_G(g)$ для любого $g \in G$.

Связной компонентой G_E единичного элемента E в линейной группе G называется множество всех элементов $g \in G$, обладающих путем из E в g. Группа G *связная*, если $G_E = G$.

ТЕОРЕМА 4.1. Связная компонента G_E единичного элемента E является нормальной подгруппой в G.

Доказательство. Пусть G_E — связная компонента E, и элементы $g, h \in G_E$ соединены путями $x(t)$, $y(t)$: $[0,1] \to G$ с единичным элементом E. Тогда произведение $x(t)y(t)$ задает дифференцируемый путь из E в gh. Кроме того, получаем дифференцируемые пути

$$E \xrightarrow{x(t)^{-1}} X^{-1}, \quad E \xrightarrow{Zx(t)Z^{-1}} ZXZ^{-1},$$

где X, Z — произвольные матрицы из группы G.

Из курса анализа известно, что в некоторой окрестности единичного элемента E имеется *локальный диффеоморфизм* G и $T_G(E)$. Это означает существование такого биективного дифференцируемого отображения $f : U(E) \to V(0)$ некоторой окрестности $U(E) \subset G$ точки $E \in G$ в окрестность $V(0) \subset T_G(E)$ точки $0 \in T_G(E)$, что обратное отображение $f^{-1} : V(0) \to U(E)$ также является дифференцируемым. Таким образом, касательные пространства T_G к группе G и T_{G_E} к связной компоненте G_E ее единичного элемента совпадают в точке E.

ТЕОРЕМА 4.2. Пусть группа G связна. Тогда группа G определяется касательным пространством $T_G(E)$.

Доказательство. Пусть $X \in G$ и $x(t)$ — путь из E в X. В силу (4.8) $x'(t) \in T_G(x(t)) = T_G(E)x(t)$ для всех $t \in [0,1]$. Поэтому

$$x'(t) = A(t)x(t), \quad A(t) \in T_G(E) \tag{4.9}$$

для всех $t \in [0,1]$. Обратно, если $A \in T_G(E)$, то рассмотрим дифференциальное уравнение (4.9), где $A(t) = A$ с начальным условием $x(0) = E$. Оно имеет (и притом единственное) решение: *экспоненциальное отображение* $x(t) = \exp(At)$, где

$$\exp(At) = E + \frac{At}{1!} + \frac{(At)^2}{2!} + \cdots + \frac{(At)^n}{n!} + \cdots . \tag{4.10}$$

Можно показать, что этот ряд сходится.

Отметим ряд свойств экспоненциального отображения.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.5. Справедливы следующие утверждения:

1) ряд (4.10) сходится при любой матрице A и при любом параметре t;

2) если A, B — перестановочные квадратные матрицы размера n, то $\exp(A+B) = \exp A \exp B$;

3) если A, C — матрицы размера n, причем матрица C обратима, то $\exp(C^{-1}AC) = C^{-1}(\exp A)C$.

Доказательство. Выберем в пространстве квадратных матриц размера n такую новую систему координат y_j, $j = 1, \ldots, n^2$, что $T_G(E)$ задается системой уравнений $y_i = 0$, где i пробегает первые d индексов. Тогда существует локальный диффеоморфизм $T_G(E)$ и G в окрестности единичной матрицы E. Поэтому решение (4.9) лежит в G. Но это решение есть $\exp(At)$. Таким образом, $\exp : T_G(E) \to G$ является локальным диффеоморфизмом в окрестности U точки E. Так как отображение $x \mapsto x^{-1}$ непрерывно дифференцируемо, то можно считать, что $U^{-1} \subseteq U$. Обозначим H множество всех произведений любого числа элементов из U. Если $x \in H$, то $xU \subseteq H$ является открытым подмножеством в G.

Предположим, что $G \neq H$. Выберем произвольный элемент $z \in G$, не лежащий в H. Если zU пересекается с H, то $zu = u_1 \cdots u_t$, для некоторых элементов $u, u_1, \ldots, u_t \in U$. Отсюда $z = u_1 \cdots u_t u^{-1} \in H$, поскольку, как отмечено выше, $u^{-1} \in U^{-1} \subseteq U$. Но это противоречит предположению о том, что z не лежит в H. Следовательно, $zU \cap H$ пусто. Это означает, что дополнение $G \setminus H$ подмножества H в G является открытым множеством. Отсюда вытекает, что G является объединением двух непересекающихся открытых подмножеств $G = H \cup (G \setminus H)$.

Пусть $g \in G \setminus H$ и $x : [0,1] \to G$ — дифференцируемый путь, причем $x(0) = E$, и $x(1) = g$. Тогда отрезок $[0,1]$ является объединением двух непересекающихся открытых непустых подмножеств $x^{-1}(H)$ и $x^{-1}(G \setminus H)$, что невозможно в силу связности G.

Из этого доказательства, в частности, вытекает, что экспоненциальное отображение $\exp(At)$ задаёт локальный диффеоморфизм окрестности нуля в $T_G(E)$ и окрестности единичной матрицы E в группе G.

Рассмотрим экспоненциальное отображение порождающих элементов для ряда групп. (Напомним, что подмножество $S \subset G$ называется *порождающим*, если все элементы группы G можно представить в виде произведений конечного числа элементов

$s_i \in S$ и обратных им элементов s_i^{-1}.) Пусть $G = \mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$. Тогда $T_{\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})}(E) = \mathfrak{sl}(n, \mathbb{C})$. Заметим, что базис пространства $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{C})$ составляют матрицы*

$$E_{ij}, \quad 1 \leqslant i \neq j \leqslant n, \qquad E_{11} - E_{jj}, \quad 1 < j \leqslant n.$$

Непосредственная проверка показывает, что

$$\exp(E_{ij}) = E + E_{ij}, \quad 1 \leqslant i \neq j \leqslant n.$$

Кроме того, $\exp(E_{11} - E_{jj})$ является диагональной матрицей размера n, в которой на главной диагонали на месте $(1,1)$ стоит число e, а на месте (j,j) стоит e^{-1}. Все остальные диагональные элементы равны 1.

Рассмотрим группу всех ортогональных матриц $G = \mathbb{O}(2, \mathbb{R})$ размера 2. Как отмечалось, $T_{\mathbb{O}(2,\mathbb{R})}(E) = \mathfrak{o}(2, \mathbb{R})$. Заметим, что

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ -\alpha & 0 \end{pmatrix} = C^{-1} A C,$$

где

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} i\alpha & 0 \\ 0 & -i\alpha \end{pmatrix}.$$

При этом

$$\exp A = \exp \begin{pmatrix} i\alpha & 0 \\ 0 & -i\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(i\alpha) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha) \end{pmatrix}.$$

По свойству 3) из предложения 4.5 получаем

$$\exp \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ -\alpha & 0 \end{pmatrix} = \exp(C^{-1} A C) = C^{-1} (\exp A) C =$$

$$= C^{-1} \begin{pmatrix} \exp(i\alpha) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha) \end{pmatrix} C = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix},$$

т. е. экспоненциальным отображением матрицы $\mathfrak{o}(2, \mathbb{R}) \in T_{\mathbb{O}(2,\mathbb{R})}(E)$ действительно восстанавливается исходная ортогональная матрица $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$.

Свяжем рассмотренную в подразд. 1.9 конструкцию прямого произведения с линейными группами Ли.

ТЕОРЕМА 4.3. Пусть G — линейная подгруппа в $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ и H — линейная подгруппа в $\mathrm{GL}(m, \mathbb{C})$. Тогда прямое произведение $G \times H$ является линейной подгруппой в $\mathrm{GL}(n+m, \mathbb{C})$.

---

*Как и выше, E_{ij} — квадратная матрица размера n, в которой на месте (i,j) стоит число 1, а все остальные элементы равны 0. Разумеется, $1 \leqslant i, j \leqslant n$.

Доказательство. Предположим, что группа G задается системой уравнений (4.2) и H — системой уравнений

$$g_j(Y_{pq}) = 0, \quad j = 1, \ldots, M, \quad 1 \leqslant p, q \leqslant m,$$

где Y_{pq} заданы аналогично X_{pq} в (4.2). Тогда $G \times H$ изоморфно группе всех блочно-диагональных матриц вида

$$\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix} \tag{4.11}$$

размера $n+m$, где $A \in G$, $B \in H$. Таким образом, множество матриц $Z = (Z_{\alpha,\beta})$ вида (4.11) задается уравнениями вида (4.2)

$$f_i(Z_{\alpha,\beta}) = 0, \quad i = 1, \ldots, N, \; 1 \leqslant \alpha, \beta \leqslant n;$$
$$g_j(Z_{\alpha,\beta}) = 0, \quad j = 1, \ldots, M, \; n+1 \leqslant \alpha, \beta \leqslant n+m;$$
$$Z_{\alpha,\beta} = 0, \text{если либо } \alpha < n, \; \beta > n, \text{либо } \alpha > n, \; \beta < n. \tag{4.12}$$

4.2. АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НА $T_G(E)$

Как отмечалось, линейные группы образуют некоторую поверхность в пространстве матриц размерности n^2. В геометрии важным инструментом при изучении поверхностей является исследование касательных пространств к точкам поверхностей. Эта идея оказалась очень плодотворной для теории линейных групп, поскольку каждая такая группа полностью определяется своим касательным пространством $T_G(E)$ в точке E, отвечающей единичной матрице (операции). На этом пространстве можно ввести новую алгебраическую структуру.

Для любых двух квадратных матриц A, B одного размера найдем *лиевский коммутатор* $[A, B]$, полагая* $[A, B] = AB - BA$.

ТЕОРЕМА 4.4. Пусть G — линейная группа Ли, и $A, B \in T_G(E)$. Тогда $[A, B] \in T_G(E)$.

Доказательство. Заметим, что матрицы $\exp(At)$, $\exp(Bt)$ лежат в группе G для всех достаточно малых t (см. доказательство теоремы 4.1). Следовательно, для всех достаточно малых t

$$\{\exp(A\sqrt{t}), \exp(B\sqrt{t})\} \in G, \tag{4.13}$$

*Лиевский коммутатор, или *лиевское умножение* $[A, B]$, вводимое для элементов непрерывных групп, не следует путать с коммутатором $\{a, b\} = aba^{-1}b^{-1}$ элементов a и b произвольной группы, см. подразд. 1.8.

где $\{a,b\} = aba^{-1}b^{-1}$. Вычислим касательный вектор к коммутатору (4.13) в точке E. Имеем

$$\exp(A\sqrt{t}) = E + A\sqrt{t} + \frac{A^2t}{2} + o(t);$$

$$\exp(B\sqrt{t}) = E + B\sqrt{t} + \frac{B^2t}{2} + o(t);$$

$$\exp(A\sqrt{t})^{-1} = \exp(-A\sqrt{t})E - A\sqrt{t} + \frac{A^2t}{2} + o(t);$$

$$\exp(B\sqrt{t})^{-1} = \exp(-B\sqrt{t})E - B\sqrt{t} + \frac{B^2t}{2} + o(t).$$

Таким образом, по определению группового коммутатора из подразд. 1.8 получаем

$$\{\exp(A\sqrt{t}), \exp(B\sqrt{t})\} =$$

$$= \exp(A\sqrt{t})\exp(B\sqrt{t})\exp(A\sqrt{t})^{-1}\exp(B\sqrt{t})^{-1} =$$

$$= E + (A + B - A - B)\sqrt{t} + \tag{4.14}$$

$$+\left(\frac{A^2}{2} + \frac{B^2}{2} + \frac{A^2}{2} + \frac{B^2}{2} + AB - A^2 - AB - BA - B^2 + AB\right)t +$$

$$+ o(t) = E + (AB - BA)t + o(t) = E + [A,B]t + o(t).$$

Следовательно, касательным вектором к групповому коммутатору (4.13) является множитель при t в (4.14). Так как он равен лиевскому коммутатору $[A,B]$, то $[A,B] \in T_G(E)$ по предложению 4.3.

Предположим, что заданы две линейные группы Ли G_1, G_2, причем G_1 является подгруппой в группе невырожденных матриц размера n_1, а G_2 является подгруппой в группе невырожденных матриц размера n_2. Гомоморфизм групп $f : G_1 \to G_2$ называется *гомоморфизмом линейных групп*, если существуют такие многочлены $f_{ij}(X_{rs})$ от переменных X_{rs}, где $1 \leqslant r, s \leqslant n_1$, причем $1 \leqslant i, j \leqslant n_2$, что для любого элемента $g = (g_{rs}) \in G_1$ коэффициент матрицы $f(g)$, стоящий на месте (i,j), равен $f_{ij}(g_{rs})$.

Упражнение 4.1. Доказать, что ядро гомоморфизма линейных групп также является линейной группой.

Если $x(t)$ — дифференцируемый путь в G_1, проходящий через элемент $g = x(t_0)$, то $x'(t_0) \in T_{G_1}(g)$. Тогда $(fx)(t) = f(x(t))$ — дифференцируемый путь в G_2, проходящий через $f(x(t_0)) = f(g)$. В этом случае полагаем $(df)x'(t_0) = (fx)'(t_0) \in T_{G_2}(f(g))$. Таким образом, получается отображение $df : T_{G_1}(E) \to T_{G_2}(E)$, называемое *дифференциалом гомоморфизма* f. В силу этого опреде-

ления и правила дифференцирования сложной функции получаем, что для любого пути $x(t)$ в группе G справедливо равенство

$$(df)\left[x'(0)\right] = (fx)'(0) = \begin{pmatrix} J(f_{11}) & \dots & J(f_{1n_1}) \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots & & \\ J(f_{n_2 1}) & \dots & J(f_{n_2 n_1}) \end{pmatrix}, \qquad (4.15)$$

где

$$J(f_{ij}) = \sum_{r,s} \frac{\partial f_{ij}}{\partial X_{rs}} X'_{rs}(0).$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.6. Пусть $f : G_1 \to G_2$ — гомоморфизм линейных групп, и $A \in T_{G_1}(E)$. Тогда $f(\exp(At)) = \exp\left[(df)At\right]$ при достаточно малых t.

Доказательство. Положим

$$h(t) = f\left(\exp(At)\right), \quad g(t) = \exp\left[(df)At\right].$$

Заметим, что $h'(0) = g'(0) = (df)A$ и $(At)(As) = (As)(At)$. Поэтому $\exp\left(A(t+s)\right) = \exp(At)\exp(As)$ в силу свойства 2) из предложения 4.5. Таким образом, при достаточно малых значениях t, s имеем

$$h(t+s) = f\left[\exp(A(t+s))\right] = f\left[\exp(At)\exp(As)\right] = \\ = f\left[\exp(At)\right] f\left[\exp(As)\right] = h(t)h(s).$$

Далее, как и выше:

$$g(t+s) = \exp\left[(df)A(t+s)\right] = \exp\left[(df)At\right]\exp\left[(df)As\right] = g(t)g(s).$$

Следовательно:

$$\frac{\partial h(t+s)}{\partial t} = h'(0)h(s), \quad \frac{\partial g(t+s)}{\partial t} = g'(0)g(s).$$

Таким образом, $h(t)$, $g(t)$ являются решениями системы дифференциальных уравнений $X'(t) = \left[(df)A\right]X(t)$ с начальным условием $X(0) = E$. В силу локальной единственности такого решения получаем требуемое утверждение.

ТЕОРЕМА 4.5. Пусть $f : G_1 \to G_2$ — гомоморфизм линейных групп. Тогда дифференциал $df : T_{G_1}(E) \to T_{G_2}(E)$ является линейным отображением. Если A, $B \in T_{G_1}(E)$, то

$$(df)\left([A,B]\right) = \left[(df)(A), (df)(B)\right].$$

Доказательство. Первое утверждение следует из (4.15). Рассмотрим второе утверждение. Пусть A, $B \in T_{G_1}(E)$. Тогда по предложению 4.6 получаем

$$f(\{\exp(A\sqrt{t}), \exp(B\sqrt{t})\}) = \{f(\exp(A\sqrt{t})), f(\exp(B\sqrt{t}))\}. \quad (4.16)$$

Дифференцируя (4.16) по t и полагая $t = 0$, как и в доказательстве предложения 4.6 и теоремы 4.4, получаем требуемое утверждение.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть $f : G_1 \to G_2$ — гомоморфизм линейных групп, причем группа G_1 связна. Тогда ограничение df на $T_{G_1}(E)$ однозначно определяет f.

Иными словами, с помощью касательного пространства группы G_1 в точке E можно задать не только саму группу G_1, но и ее гомоморфизм на другую линейную группу G_2.

4.3. ГРУППЫ ЛИ И ИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ: ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ИЛЛЮСТРАЦИИ

Рассмотрим на качественном уровне несколько широко используемых линейных групп Ли. Простейшим примером такой группы может служить абелева группа всех поворотов трехмерного пространства вокруг заданной оси (C_∞ в обозначениях Шенфлиса, или ∞ в международной символике). Она изоморфна группе $\mathbb{O}(2, \mathbb{R})$ собственных вращений двумерной плоскости вокруг начала координат и унитарной группе $\mathrm{SU}(1, \mathbb{R}) = \mathbf{U}(1)$ комплексных чисел $e^{i\varphi}$ с модулем 1 (см. подразд. 1.1). Характеры одномерных неприводимых представлений этой группы для произвольных элементов ϕ_1, ϕ_2 удовлетворяют соотношениям

$$\chi(\varphi_1 + \varphi_2) = \chi(\varphi_1)\chi(\varphi_2), \quad (4.17)$$
$$\chi(\varphi + 2\pi) = \chi(\varphi)\chi(2\pi) = \chi(\varphi)\chi(0) = \chi(\varphi),$$

откуда

$$\chi(\varphi) = e^{im\varphi}, \qquad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi.$$

Действительное число $m \in \mathbb{R}$ называется *индексом* неприводимого представления группы C_∞. Очевидно, что представления $\phi \to e^{im\varphi}$ при целых $m \in \mathbb{Z}$ однозначны, а при $m \neq 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ неоднозначны.

В частности, для полуцелых $m = (2n+1)/2$, $n \in \mathbb{Z}$

$$e^{im\varphi} = e^{i(2n+1)\varphi/2}, \qquad e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{i[(2n+1)\varphi/2+\pi]} = -e^{im\varphi}.$$

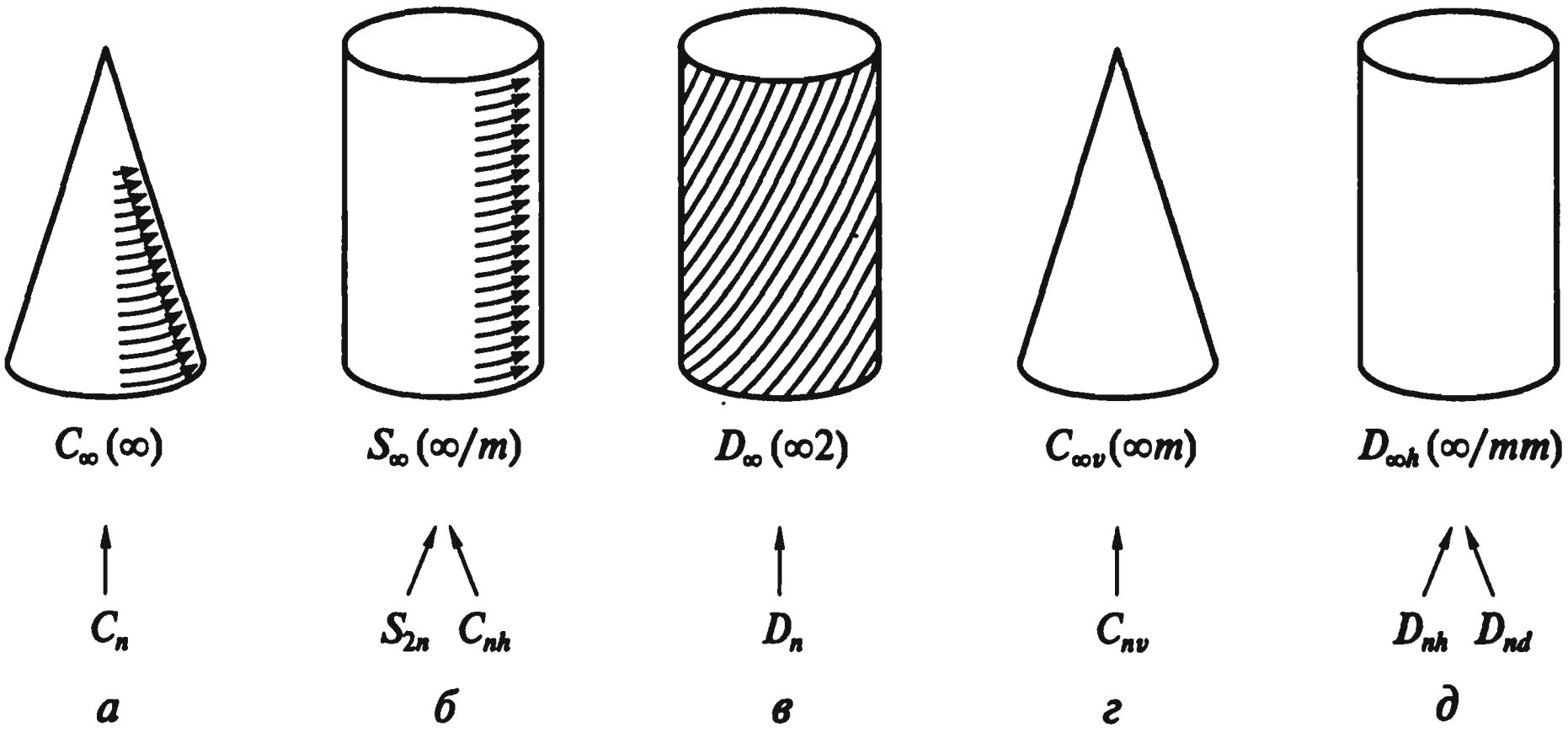


Рис. 4.3. Бесконечные подгруппы симметрий трехмерного пространства $(a-\partial)$ на основе $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$

Группа с непрерывными многозначными представлениями называется *многосвязной*. Любую многосвязную группу можно, однако, представить в виде гомоморфного образа некоторой односвязной *накрывающей группы*. Для абелевой группы C_∞ накрывающей является односвязная группа $\mathbb{R}^*$ всех действительных чисел со следующим гомоморфизмом на полуинтервал $(0, 2\pi]$:

$$x \to \theta = x - 2\pi \left[\frac{x}{2\pi}\right],$$

где $x \in \mathbb{R}$, а $[x/2\pi] \in \mathbb{Z}$ — целая часть числа $x/2\pi$.

Далее в этой главе будет дано строгое определение накрывающего гомоморфизма.

В кристаллографии группу C_∞ изображают геометрически как совокупность симметрий вращающегося конуса (рис. 4.3, *а*). Изоморфную ей группу всех зеркальных поворотов вокруг заданной оси называют *группой вращающегося цилиндра* S_∞ (в международной символике ∞/m) (рис. 4.3, *б*). Добавление к главной поворотной оси бесконечного порядка одной перпендикулярной оси C_2 порождает бесконечное число симметрически эквивалентных перпендикулярных осей C_2, давая *группу скрученного цилиндра* $D_\infty = C_\infty \leftthreetimes C_2$ (или $\infty\,2$, рис. 4.3, *в*). Замена осей C_2 на плоскости σ_v, проходящие через главную ось, дает группу симметрий неподвижного конуса $C_{\infty v} = C_\infty \leftthreetimes C_s$, изоморфную D_∞ ($\infty\, m$, рис. 4.3, *г*).

Добавляя к симметрическим элементам групп $C_{\infty v}$ или D_∞ единственную горизонтальную плоскость σ_h, получим центросимметричную группу $D_{\infty h} = C_\infty \leftthreetimes C_2 \times C_i$, или $\infty/m\, m$ (поскольку

среди всех вращений вокруг главной оси есть поворот на π (C_2), в сочетании с σ_h порождающий центр инверсии i) (рис. 4.3, *д*). Группы C_∞, S_∞, D_∞, $C_{\infty v}$ и $D_{\infty h}$ являются предельными для семи семейств точечных групп средней категории, рассмотренных в п. 1.10 (пары групп C_{nh}, S_n и D_{nh}, D_{nd} «сходятся», соответственно, к группам S_∞ и $D_{\infty h}$, см. рис. 4.3, *б*, *д*).

Абелева группа C_∞ состоит из бесконечного числа одноэлементных классов C_φ, где φ — угол поворота, включая тождественное преобразование $e = C_{2\pi k}$, $k \in \mathbb{Z}$. В неабелевой группе $C_{\infty v}$ имеется бесконечное множество классов из двух поворотов $(C_\varphi, C_{-\varphi})$ и один класс $\infty\sigma_v$ из всех плоскостей симметрии, проходящих через поворотную ось. В группе $D_{\infty h} = C_{\infty v} \times C_i$ классы и представления группы $C_{\infty v}$ удваиваются. Симметрией $C_{\infty v}$ обладают, например, линейные гетероатомные молекулы (CO, HCl, HCN), а $D_{\infty h}$-симметрией — гомоатомные (H_2, O_2, N_2) и другие линейные центросимметричные молекулы (CO_2, $HC{\equiv}CH$ и др.).

Неприводимые представления всех бесконечных групп, показанных на рис. 4.3, легко вывести из соотношений (4.17) и свойств произведений. Так, группа C_∞ содержит одномерное полносимметричное представление A (с индексом $m = 0$) и бесконечный набор одномерных представлений с характерами $\pm\exp(im\varphi)$, где $m = 1, 2, 3, \ldots$, φ — угол поворота). Поскольку попарно сопряженные одномерные неприводимые представления для каждого m физически эквивалентны, в приложениях их часто группируют в двумерные представления E_m. Появление плоскостей σ_v в группе $C_{\infty v}$ превращает эквивалентные пары одномерных представлений в двумерные с характерами

$$\chi(\varphi) = \mathrm{tr}\begin{pmatrix} e^{im\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-im\varphi} \end{pmatrix} = 2\cos(m\varphi).$$

Одномерному представлению A группы C_∞ с $m = 0$, полносимметричному относительно всех поворотов, в группе $C_{\infty v}$ соответствуют два одномерных неприводимых представления: полносимметричное и антисимметричное относительно любой «вертикальной» плоскости σ_v. В химической и спектроскопической литературе эти одномерные представления обозначают, соответственно, Σ^+ и Σ^-, а первые двумерные представления — Π ($m = 1$), Δ ($m = 2$) и Φ ($m = 3$). Наконец, добавление центра симметрии в группе $D_{\infty h}$, по свойствам прямого произведения групп, превращает каждое неприводимое представление группы $C_{\infty v}$ в пару представлений: полносимметричного (g) и антисимметричного (u) относительно инверсии. Характеры неприводимых представлений групп C_∞, $C_{\infty v}$ и $D_{\infty h}$ показаны в табл. 4.1.

Неприводимые представления групп C_∞, $C_{\infty v}$, $D_{\infty h}$

НП	e	∞C_φ	$\infty\sigma_v$	i	∞S_φ	∞C_2	σ_h
Группа C_∞							
A	1	1					
γ_2^+	1	$\exp(i\varphi)$					
γ_2^-	1	$-\exp(i\varphi)$					
γ_3^+	1	$\exp(2i\varphi)$					
γ_3^-	1	$-\exp(2i\varphi)$					
...		...					
γ_m^+	1	$\exp(im\varphi)$					
γ_m^-	1	$-\exp(im\varphi)$					
...	...	...					
Группа $C_{\infty v}$							
Σ^+	1	1	1				
Σ^-	1	1	–1				
Π	2	$2\cos\varphi$	0				
Δ	2	$2\cos(2\varphi)$	0				
Φ	2	$2\cos(3\varphi)$	0				
...		...					
Группа $D_{\infty h}$							
Σ_g^+	1	1	1	1	1	1	1
Σ_u^+	1	1	1	–1	–1	–1	–1
Σ_g^-	1	1	–1	1	1	–1	1
Σ_u^-	1	1	–1	–1	–1	1	–1
Π_g	2	$2\cos\varphi$	0	2	$-2\cos\varphi$	0	–2
Π_u	2	$2\cos\varphi$	0	–2	$2\cos\varphi$	0	2
Δ_g	2	$2\cos(2\varphi)$	0	2	$2\cos(2\varphi)$	0	2
Δ_u	2	$2\cos(2\varphi)$	0	–2	$-2\cos(2\varphi)$	0	–2
Φ_g	2	$2\cos(3\varphi)$	0	2	$-2\cos(3\varphi)$	0	–2
Φ_u	2	$2\cos(3\varphi)$	0	–2	$2\cos(3\varphi)$	0	2
...		...	...	...	...	...	...

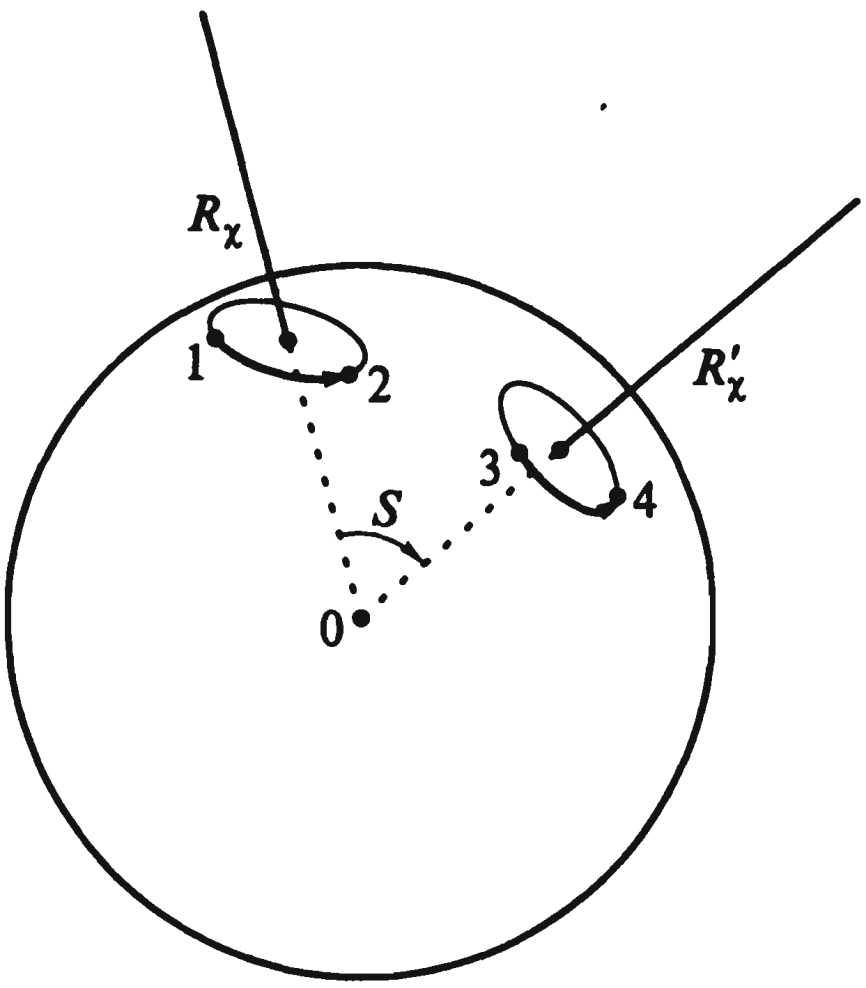
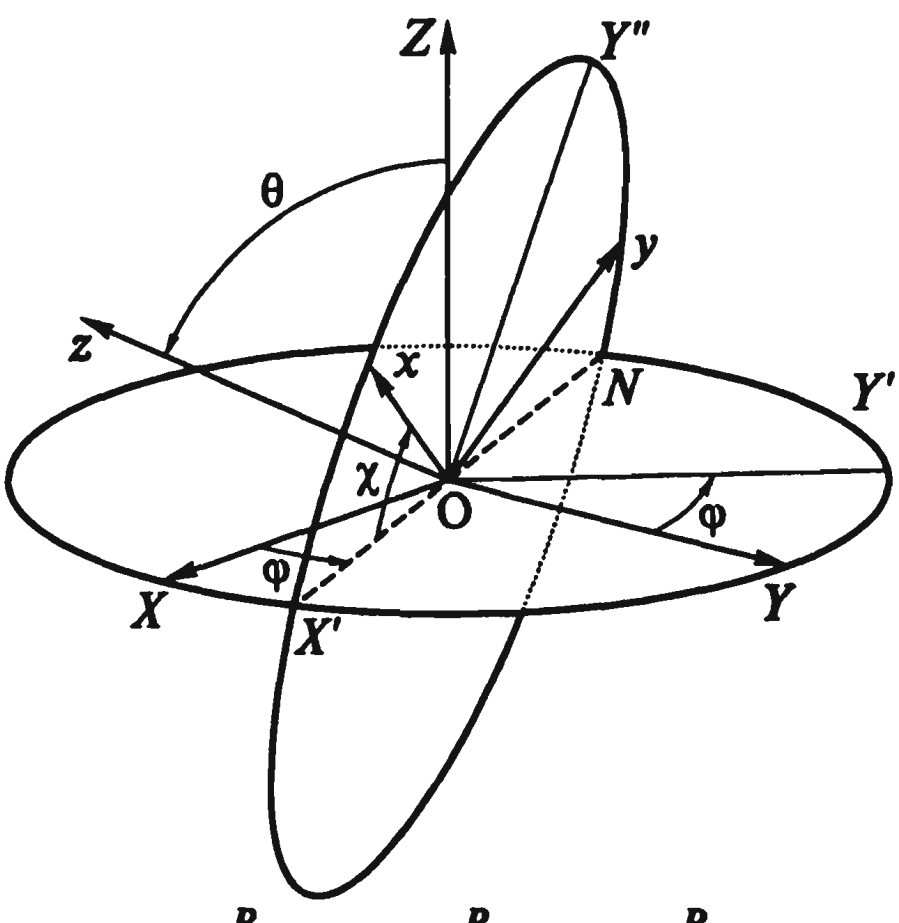


Рис. 4.4. Связь двух разных поворотов на угол χ в группе вращений трехмерной сферы ($R_\chi = S^{-1}R'_\chi S$; $R_\chi : 1 \to 2$, $S^{-1}R'_\chi S : 1 \to 3 \to 4 \to 2$)

Трехпараметрическую группу $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ всех вращений трехмерного пространства, обозначаемую также $O^+(3,\mathbb{R})$ или $O^+(3)$, в кристаллографии называют *группой сферы с вращающимися точками* (т. е. сферы, не имеющей плоскостей симметрии). Помимо единичного элемента, в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ имеется бесконечное число классов, состоящих из бесконечного множества поворотов R_χ на один и тот же угол χ вокруг произвольной прямой, проходящей через начало координат. (Такие повороты связаны ортогональным преобразованием $S^{-1}R'_\chi S = R_\chi$, т. е. $R'_\chi S = SR_\chi$, где поворот S переводит одну ось вращения в другую, рис. 4.4.)

При добавлении к операциям группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ центра инверсии возникает группа симметрий сферы, или *полная ортогональная группа* $\mathbb{O}(3,\mathbb{R}) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \langle j \rangle_2$ (в других обозначениях $\mathbb{O}(3)$) всех собственных и несобственных вращений трехмерного пространства, оставляющих неподвижной точку начала координат. Композиция центра инверсии с поворотами на угол π вокруг всех осей, проходящих через него, порождает бесконечное множество плоскостей симметрии, также входящих в группу $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$. По Шенфлису группа трехмерных вращений обозначается K, а полная ортогональная группа — $K_h = K \times C_i$. В международной кристаллографической системе эти группы называют, соответственно, $\infty\infty$ и $\infty/m\,\infty$. С геометрической точки зрения группа K служит «предельной» для точечных групп, содержащих только собственные вращения, а группа K_h —



$$XYZ \xrightarrow{R_\varphi} X'Y'Z' \xrightarrow{R_\theta} X'Y''z \xrightarrow{R_\chi} xyz$$

Рис. 4.5. Углы Эйлера φ, χ, θ

для всех остальных точечных групп. Семь предельных бесконечных групп $C_\infty, S_\infty, D_\infty, C_{\infty v}, D_{\infty h}, K$ и K_h в физике кристаллов называют также *группами Кюри*.

В качестве непрерывных параметров, задающих произвольный элемент $g \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, удобно выбрать три угла «постадийного» поворота исходной декартовой системы координат: углы Эйлера (φ, θ, χ) (рис. 4.5).

В этих обозначениях исходная система координат (XYZ) переводится в конечную (xyz) тремя последовательными вращениями: (а) на угол φ вокруг оси OZ исходной системы, (б) на угол θ вокруг нового положения оси OX' (эта «промежуточная» ось называется также *узловой линией* N) и затем (в) на угол χ вокруг нового положения оси Oz. Иными словами, углы φ и θ задают положение оси поворота относительно исходного репера (XYZ) в сферических координатах, а угол χ — величину поворота вокруг этой оси. Последовательность вращений $R(\varphi, \theta, \chi)$ можно выразить через дифференциальные операторы поворотов относительно исходных осей OX и OZ

$$R(\varphi,\theta,\chi) = \exp(-i\chi\hat{J}_z)\exp(-i\theta\hat{J}_{X'})\exp(-i\varphi\hat{J}_Z) = \\ = \exp(-i\chi\hat{J}_Z)\exp(-i\theta\hat{J}_X)\exp(-i\varphi\hat{J}_Z), \qquad (4.18)$$

— см. рис. 4.4, где

$$R_\chi = \exp(-i\chi\hat{J}_Z), \quad R'_\chi = \exp(-i\chi\hat{J}_z),$$
$$S = \exp(-i\theta\hat{J}_{X'})\exp(-i\varphi\hat{J}_Z).$$

В квантовой механике неприводимые представления группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ получают с помощью линейных комбинаций «повышающих» и «понижающих», или «лестничных», операторов:

$$\hat{J}_+ = i\hat{J}_1 - \hat{J}_2,$$
$$\hat{J}_- = i\hat{J}_1 + \hat{J}_2, \qquad (4.19)$$
$$\hat{J}_z = i\hat{J}_3$$

(см. (4.4), (4.18)) и оператора $\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = -\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z - \hat{J}_z^2$ (операторы $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$ эрмитовы, операторы $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$ эрмитово сопряжены). Скалярный оператор $\hat{J}^2$, коммутирующий со всеми элементами группы, называется *оператором Казимира*. Можно доказать, что матрицы $\hat{J}_z$ и $\hat{J}^2$ имеют одинаковые наборы собственных векторов.

Базисные векторы (e_{jm}) неприводимых представлений группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, пронумерованные двумя дискретными индексами (j,m), удовлетворяют соотношениям (см. [52, т. 3]):

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_z \mathrm{e}_{j,m} &= m\mathrm{e}_{j,m},\\
\hat{J}_- \mathrm{e}_{j,m} &= \sqrt{(j+1)-m(m-1)}\,\mathrm{e}_{j,m-1},\\
\hat{J}_+ \mathrm{e}_{j,m} &= \sqrt{(j+1)-m(m+1)}\,\mathrm{e}_{j,m+1},\\
\hat{J}^2 \mathrm{e}_{j,m} &= -j(j+1)\mathrm{e}_{j,m}.
\end{aligned}
\tag{4.20}
$$

Применяя рекуррентные соотношения (4.20) для повышающего оператора $\hat{J}_+$ и понижающего оператора $\hat{J}_-$ к набору базисных векторов $\{\mathrm{e}_{jm}\}$, можно показать, что неприводимому представлению с индексом j отвечают $2j+1$ векторов с собственными значениями $m = -j, -(j-1), \ldots, j-1, j$. Поэтому неприводимые представления $D^{(j)}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ имеют размерность $2j+1$, где индекс j может принимать как целые, так и полуцелые значения. Полносимметричное одномерное представление $D^{(0)}$ называется *скалярным*, трехмерное $D^{(1)}$ — *векторным* представлением. Неприводимые представления $D^{(j)}$ с целочисленными $j > 1$ называются *тензорными*, а с полуцелыми $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ — *спинорными*. Представления $D^{(j)}$ с целочисленными индексами однозначны, спинорные представления двузначны*.

Матрицы неприводимых представлений $D^{(j)}$ можно выразить через углы Эйлера. Например, из соотношений (4.18) и матриц операторов вида

$$
D^{(1/2)}(0,0,\varphi) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad
D^{(1/2)}(\theta,0,0) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} & -i\sin\dfrac{\theta}{2} \\ -i\sin\dfrac{\theta}{2} & \cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}
$$

легко получить матрицы двумерного представления $D^{(1/2)}$:

$$
D^{(1/2)}(\varphi,\theta,\chi) = \pm \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{i}{2}(\varphi+\chi)} & -i\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}(\chi-\varphi)} \\ -i\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{i}{2}(\chi-\varphi)} & \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}(\varphi+\chi)} \end{pmatrix}. \tag{4.21}
$$

Непосредственно проверяется, что $D^{(1/2)}(\varphi,\theta,\chi)$ — унитарные матрицы с определителем $+1$. Таким образом, спинорное представление $D^{(1/2)}$ задает гомоморфизм группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ на группу $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, при котором каждому вращению $R(\varphi,\theta,\chi)$ соответствуют две матрицы $\pm g \in \mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$, различающиеся знаком (см. п. 4.5).

*Каждому двузначному представлению группы трехмерных вращений соответствует однозначное представление накрывающей ее *спинорной* группы $\mathrm{Spin}(3,\mathbb{R})$, см. подразд. 4.5.

В общем случае характер представления $D^{(j)}$ для поворота на угол φ вокруг произвольной оси

$$\chi[D^{(j)}(0,0,\varphi)] = \mathrm{tr}\begin{pmatrix} e^{ij\varphi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(j-1)\varphi} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-ij\varphi} \end{pmatrix} = \tag{4.22}$$

$$= \sum_{m=-j}^{j} e^{im\varphi} = \frac{\sin(j+1/2)\varphi}{\sin(\varphi/2)}.$$

Классы сопряженных элементов и неприводимые представления полной ортогональной группы $O(3,\mathbb{R}) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \langle j \rangle_2$ легко вывести, пользуясь свойствами прямого произведения. Из бесконечного множества классов ∞S_φ, отвечающих зеркальным поворотам на угол φ, в этой группе обычно выделяют класс $\infty\sigma$ всех операций отражения ($\sigma = S_1$) и класс из единственной операции инверсии $i = S_2$.

Любому однозначному неприводимому представлению $D^{(j)}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ с целочисленным j в $O(3,\mathbb{R})$ соответствует пара представлений: полносимметричное $D_g^{(j)}$ и антисимметричное $D_u^{(j)}$ относительно инверсии, матрицы которых различаются знаком. Поскольку матрицы двузначных представлений $D^{(j)}$ при умножении на -1 переходят одна в другую, каждому полуцелому j в группе $O(3,\mathbb{R})$ по-прежнему отвечает только одно двузначное представление $D^{(j)}$ (табл. 4.2, 4.3).

Характеры неприводимых представлений группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, показанные в табл. 4.2, выводятся из (4.22) элементарными тригонометрическими преобразованиями. Из величин $\chi^{(j)}(C_\varphi)$ можно непосредственно получить разложения прямых произведений представлений с целыми и полуцелыми j; например:

$$\begin{gathered} \chi[D^{(1)} \times D^{(1)}] = (1+2\cos\varphi)(1+2\cos\varphi) = \\ = 1 + 4\cos\varphi + 4\cos^2\varphi + 2\sin^2\varphi - 2\sin^2\varphi = \\ = 3 + 4\cos\varphi + 2\cos(2\varphi) = \\ = 1 + (1+2\cos\varphi) + (1+2\cos\varphi+2\cos(2\varphi)), \end{gathered} \tag{4.23}$$

т. е.

$$D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)}.$$

Аналогично можно показать, что

$$D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} = D^{(0)} + D^{(1)}, \quad D^{(1)} \times D^{(2)} = D^{(1)} + D^{(2)} + D^{(3)}.$$

В общем случае

$$D^{(j)} \times D^{(j')} = D^{(j+j')} + D^{(j+j'-1)} + \ldots + D^{(|j-j'|)}. \qquad (4.24)$$

Таким образом, прямое произведение двух неприводимых представлений группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ содержит полносимметричное представление только при $j = j'$, и все неприводимые компоненты входят в разложение (4.24) с единичными множителями (это характерно для *полупростых* групп, см. подразд. 4.7). Произведение двух двузначных представлений однозначно. Знак произведения представлений ортогональной группы $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$ относительно инверсии определяется по обычным правилам:

$$D_g^{(j)} \times D_u^{(j')} = \sum_J D_u^{(J)}, \quad D_u^{(j)} \times D_u^{(j')} = D_g^{(j)} \times D_g^{(j')} = \sum_J D_g^{(J)},$$

где J — результат сложения индексов j и j'.

Базисные векторы $\{\mathrm{e}_{JM}\}$, приводящие произведение неприводимых представлений $D^{(j)} \times D^{(j')}$ к квазидиагональному виду, являются линейными комбинациями базисных векторов перемножаемых представлений $\{\mathbf{e}_{jm}\}$ и $\{\mathbf{e}_{j'm'}\}$:

$$\mathbf{e}_{JM} = \sum C^{JM}_{jj'mm'} \mathbf{e}_{jm} \mathbf{e}_{j'm'}.$$

Коэффициенты Клебша — Гордана $C^{JM}_{jj'mm'}$, или $(JM \mid jj'mm')$ (см. подразд. 3.8) в этом разложении для группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ кратко рассмотрены в гл. 5.

Таблица 4.2

Характеры неприводимых представлений группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$

НП	E	∞C_φ	(∞C_2)
$D^{(0)}$	1	1	1
$D^{(1)}$	3	$1 + 2\cos\varphi$	-1
$D^{(2)}$	5	$1 + 2(\cos\varphi + \cos(2\varphi))$	1
$D^{(3)}$	7	$1 + 2(\cos\varphi + \cos(2\varphi) + \cos(3\varphi))$	-1
...	...	...	...
$D^{(i)}$	$2j+1$	$1 + \Sigma\cos(j\varphi)$	$(-1)^j$
...	...	...	...
$D^{(1/2)}$	± 2	$\pm 2\cos(\varphi/2)$	0
$D^{(3/2)}$	± 4	$\pm 2(\cos(\varphi/2) + \cos(3\varphi/2))$	0
$D^{(5/2)}$	± 6	$\pm 2(\cos(\varphi/2) + \cos(3\varphi/2) + \cos(5\varphi/2))$	0
...	...	...	...
$D^{(j)}$	$\pm(2j+1)$	$\pm 2\Sigma\cos(j\varphi/2)$	0
...	...	...	...

Таблица 4.3

Характеры неприводимых представлений группы $O(3,\mathbb{R})$

НП	E	∞C_φ	(∞C_2)	i	∞S_φ	$(\infty\sigma)$
$D_g^{(0)}$	1	1	1	1	1	1
$D_u^{(0)}$	1	1	1	−1	−1	−1
$D_g^{(1)}$	3	$1+2\cos\varphi$	−1	3	$1-2\cos\varphi$	−1
$D_u^{(1)}$	3	$1+2\cos\varphi$	−1	−3	$-(1-2\cos\varphi)$	1
$D_g^{(2)}$	5	$1+2(\cos\varphi+\cos(2\varphi))$	1	5	$1-2(\cos\varphi-\cos(2\varphi))$	1
$D_u^{(2)}$	5	$1+2(\cos\varphi+\cos(2\varphi))$	1	−5	$-1+2(\cos\varphi-\cos(2\varphi))$	−1
$D_g^{(3)}$	7	$1+2(\cos\varphi+\cos(2\varphi)+\cos(3\varphi))$	−1	7	$1-2(\cos\varphi-\cos(2\varphi)+\cos(3\varphi))$	−1
$D_u^{(3)}$	7	$1+2(\cos\varphi+\cos(2\varphi)+\cos(3\varphi))$	−1	−7	$-1+2(\cos\varphi-\cos(2\varphi)+\cos(3\varphi))$	1
...	...	...	...	...	...	...
$D^{(1/2)}$	±2	$\pm 2\cos(\varphi/2)$	0	±2	$\pm 2\sin(\varphi/2)$	0
$D^{(3/2)}$	±4	$\pm 2(\cos(\varphi/2)+\cos(3\varphi/2))$	0	±4	$\pm 2(\sin(\varphi/2)-\sin(3\varphi/2))$	0
...	...	...	...	...	...	...

«Предельным случаем» трехмерных пространственных групп является полупрямое произведение $\mathcal{E}(3) = \mathcal{T} \leftthreetimes \mathbb{O}(3, R)$ абелевой группы произвольных трансляций $\mathcal{T} = T_x \times T_y \times T_z$ в трехмерном евклидовом пространстве $E(3)$ на полную ортогональную группу (группа Евклида). В отличие от дискретных решеток, трансляции $\vec{\tau}$ могут быть сколь угодно большими или малыми. Всякое преобразование из группы $\mathcal{E}(3)$ задается шестью непрерывными параметрами — например, компонентами вектора $\vec{\tau} = (x, y, z)$ и углами Эйлера (φ, θ, χ). Как было показано в гл. 2, любая операция симметрии $g \in \mathcal{E}(3)$ имеет вид $\varphi\vec{r} + \vec{\tau}$ (где $\phi \in \mathbb{O}(3, \mathbb{R})$ — ортогональное преобразование; $\vec{\tau} \in \mathcal{T}$ — трансляция, и оставляет неизменным расстояние между точками $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

Дифференциальные операторы подгруппы трансляций $\mathcal{T}$ имеют вид $\hat{P} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$. Два оператора Казимира в евклидовой группе $\hat{P}^2 = (\hat{P}_x^2, \hat{P}_y^2, \hat{P}_z^2)$ и $\hat{P}\hat{J} = \sum \hat{P}_i \hat{J}_i$, коммутирующие со всеми ее операциями, соответствуют сохранению кинетической энергии частицы и проекции m_j ее углового момента на направление движения.

Неприводимые представления группы $\mathcal{E}(3)$, аналогично неприводимым представлениям пространственных групп (см. подразд. 3.12), индуцируются малой группой трехмерного вектора $\vec{k}$. В данном случае звезда ${}^*\vec{k}_0$ произвольного вектора содержит бесконечное множество векторов одинаковой длины k_0, а его локальная группа изоморфна группе двумерных вращений $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ (рис. 4.6). Бесконечномерные представления $\Gamma_{|\vec{k}|,m}$ группы $\mathcal{E}(3)$, соответственно, нумеруются непрерывным индексом k и дискретным индексом $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. При $k = 0$, т. е. в отсутствие трансляций они, очевидно, превращаются в конечномерные представления $D^{(j)}$ группы трехмерных вращений $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$.

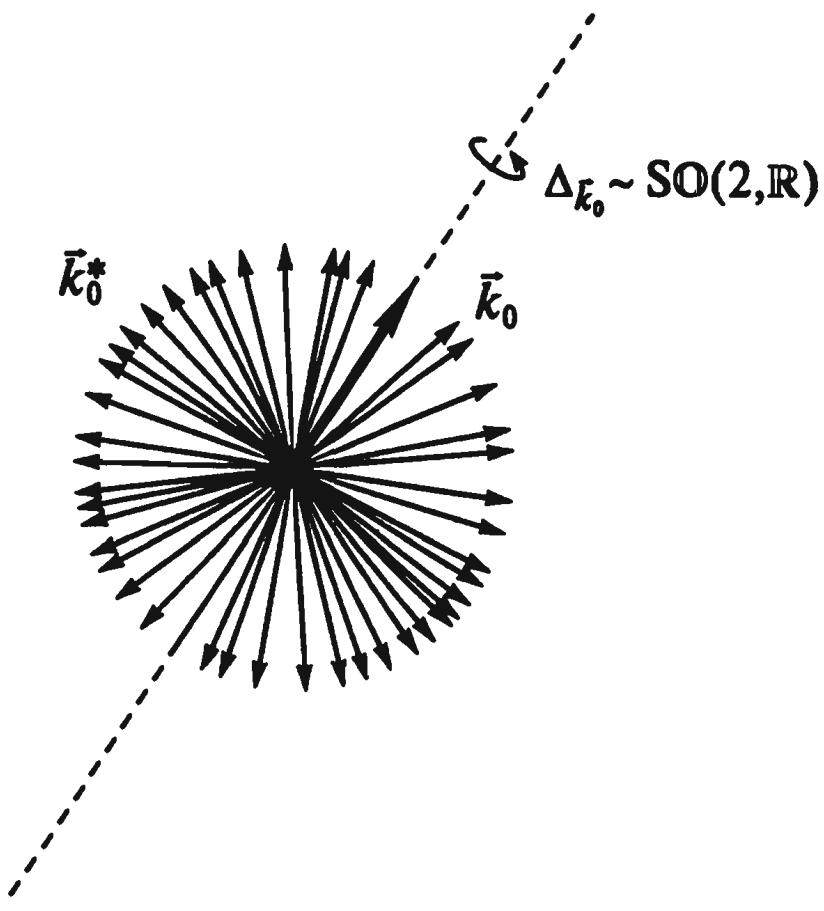


Рис. 4.6. Звезда и группа симметрии вектора $\vec{k}_0$ в группе Евклида $\mathcal{E}(3)$

Вращения четырехмерного евклидова пространства $E(4)$, сохраняющие неизменной квадратичную форму $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$ (где $\{x_i\}$ — координаты в $E(4)$), образуют шестипараметрическую группу $\mathrm{SO}(4, \mathbb{R})$. Ее непрерывными параметрами являются повороты на произвольный угол в шести координатных плоскостях (x_i, x_j) $(i, j = 1, \ldots, 4)$. Соответству-

ющие дифференциальные операторы $\hat{J}_{ij}$ отвечают четырем пересекающимся подгруппам трехмерных вращений $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, удовлетворяя 12 перестановочным соотношениям вида (4.5). При этом операторы, действующие на разные пары координат x_i, x_j, перестановочны (т. е. их лиевские коммутаторы равны нулю):

$$[\hat{J}_{12}, \hat{J}_{34}] = [\hat{J}_{13}, \hat{J}_{24}] = [\hat{J}_{14}, \hat{J}_{23}] = 0.$$

Набор дифференциальных операторов группы $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$ можно ортогонализовать, составив их линейные комбинации с тремя операторами $\hat{J}_{ij}$ с фиксированным индексом i:

$$\begin{aligned}
\hat{\alpha}_1 &= 1/2(\hat{J}_{34} + \hat{J}_{12}), \qquad & \hat{\beta}_1 &= 1/2(\hat{J}_{34} - \hat{J}_{12});\\
\hat{\alpha}_2 &= 1/2(\hat{J}_{42} + \hat{J}_{13}), \qquad & \hat{\beta}_2 &= 1/2(\hat{J}_{42} - \hat{J}_{13});\\
\hat{\alpha}_3 &= 1/2(\hat{J}_{23} + \hat{J}_{14}), \qquad & \hat{\beta}_1 &= 1/2(\hat{J}_{23} - \hat{J}_{14}).
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Непосредственная проверка показывает, что операторы $\{\hat{\alpha}_i\}$ и $\{\hat{\beta}_j\}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям (4.5) и коммутируют:

$$[\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}_j] = 0.$$

Таким образом, группа $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$ локально изоморфна прямому произведению $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Ее неприводимые представления нумеруются парой индексов (j, j') и имеют размерность $(2j+1)(2j'+1)$. Группа вращений четырехмерного пространства позволяет, в частности, описать симметрию электронных состояний атома водорода (см. гл. 5).

Из экспериментально установленной неизменности максимальной скорости относительного движения во всех инерциальных системах координат (скорости света c) в релятивистской механике следует инвариантность квадратичной формы

$$x_0^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 = x_0'^2 - x_1'^2 - x_2'^2 - x_3'^2, \tag{4.26}$$

где (x_1, x_2, x_3) — декартовы координаты (x, y, z) в трехмерном пространстве, $x_0 = ct$, а t — время. Преобразования четырехмерных векторов (x_0, x_1, x_2, x_3), отвечающие условию (4.26) (*4-векторов*), образуют *группу Лоренца* $\Lambda = \mathbb{O}(1,3)$. Непрерывные параметры этой группы можно получить из поворотов четырехмерного пространства заменой координаты $x_0 = ix_0$, $x_0' = ix_0$ и переходом от вещественных углов поворота в координатных плоскостях (x_0', x_i) к чисто мнимым:

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \cos i\varphi & -\sin i\varphi \\ \sin i\varphi & \cos i\varphi \end{pmatrix}.$$

Преобразования в плоскостях (x_0, x_i) $(i = 1, 2, 3)$:

$$\begin{pmatrix} \operatorname{ch}\beta & \operatorname{sh}\beta \\ \operatorname{sh}\beta & \operatorname{ch}\beta \end{pmatrix}, \tag{4.27}$$

эквивалентны преобразованиям Лоренца: гиперболическим поворотам или «бустам», т. е. переходам от покоящейся системы координат к системе координат, равномерно движущейся в направлении x_i с постоянной скоростью v [64]:

$$x_i' = x_i \operatorname{ch}\beta + x_0 \operatorname{sh}\beta; \qquad x_0' = x_0 \operatorname{ch}\beta + x_i \operatorname{sh}\beta,$$

или

$$x_i' = \frac{x_i + vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \qquad t' = \frac{t + x_i v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \tag{4.28}$$

где $v_i/c = x_i/ct = \operatorname{th}\beta$.

В пределе $c \to \infty$ (4.28) переходят в обычные соотношения классической механики $x' = x + vt$ и $t' = t$). Шесть инфинитезимальных операторов группы Лоренца включают три дифференциальных вращения $(\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$ в обычном трехмерном пространстве и три инфинитезимальных преобразования Лоренца $(\hat{B}_1, \hat{B}_2, \hat{B}_3)$, получаемых дифференцированием «гиперболических вращений» (4.27).

У п р а ж н е н и е 4.2. Найти матричную форму инфинитезимальных операторов группы $\mathbb{O}(1,3)$.

Таким образом, шестипараметрическая группа Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ тесно связана с группой четырехмерных вращений $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$. Ее конечномерные неприводимые представления $D^{(jj')}$ заданы парой целых либо полуцелых индексов, хотя $\mathbb{O}(1,3)$, как некомпактная группа, имеет и представления бесконечной размерности (см. подразд. 4.8). По представлению $D^{(1/2,0)}$ преобразуются спиноры, по $D^{(0,1/2)}$ — *сопряженные спиноры*, по $D^{(1/2,1/2)}$ — 4-векторы и т. д. Собственные значения операторов Казимира $\hat{A}^2, \hat{C}^2$ группы $\mathbb{O}(1,3)$, обычно выбираемых в виде

$$\hat{A}_k = \frac{1}{2}(\hat{J}_k + i\hat{B}_k), \quad \hat{C}_k = \frac{1}{2}(\hat{J}_k - i\hat{B}_k),$$

соответственно равны $j(j+1)$ и $j'(j'+1)$. Построенные из $\hat{A}$ и $\hat{C}$ групповые инварианты определяют сохранение антисимметричного 4-тензора момента $M_{\gamma\delta} = \sum(x_\gamma \hat{P}_\delta - x_\delta \hat{P}_\gamma)$, отражающее изотропность пространства-времени (см. подразд. 5.5).

Группа вращений 3-мерного евклидова пространства $\mathrm{SO}(3,\mathrm{R})$, не затрагивающих координаты x_0, является подгруппой группы Лоренца. Другими важными подгруппами в $\mathbb{O}(1,3)$ являются

собственная группа Лоренца $\Lambda_+ = \mathrm{SO}(1,3)$, преобразования которой $g \in \Lambda_+$ отвечают условию $detg = +1$, т. е. не инвертируют координат пространства $M(1,3)$, и ортохронная группа Лоренца $\Lambda^+ = \mathbb{O}_+(1,3)$, операции которой не обращают направления времени x_0 (см. подразд. 1.1). Любой элемент из собственной ортохронной группы Лоренца $\Lambda_+^+ = \mathrm{SO}_+(1,3)$ можно однозначно представить в виде произведения поворота и гиперболического поворота.

Преобразования Лоренца выступают в роли ортогональных преобразований четырехмерного пространства Минковского $M(1,3)$ с псевдоевклидовой метрикой (4.26) (см. гл. 1). Более общие преобразования вида $\alpha x + a$, совершаемые над четырехмерным вектором $x \in M(1,3)$, где a — трансляция в $M(1,3)$, составляют десятипараметрическую группу Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$. Ее операторы Казимира:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}_0^2 - \hat{P}_1^2 - \hat{P}_2^2 - \hat{P}_3^2 \quad \text{и} \quad \hat{W}^2 = \sum \hat{W}_\alpha^2,$$

где $\hat{W}_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}\hat{P}_\beta M_{\gamma\delta}$ и $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ — полностью асимметричный 4-тензор 4-го ранга (см. гл. 7); $\hat{P}_\beta$, $M_{\gamma\delta}$ — компоненты 4-вектора энергии-импульса и 4-тензора момента соответственно. Оператор $\hat{P}^2$ с собственными значениями k^2 отвечает сохранению полной энергии, а оператор $\hat{W}^2$ с собственными значениями $j(j+1)k^2$ — сохранению полного момента релятивистской частицы. Для неподвижной ($k_1 = k_2 = k_3 = 0, k_0 \neq 0$) частицы $\hat{P}^2$ задает массу покоя, а $\hat{W}^2$ — спин (см. подразд. 5.5). Представления групп Лоренца и Пуанкаре широко используются в релятивистской физике. Далее в этой главе перечисленные группы и их представления будут рассмотрены строго.

В подразд. 4.5 мы продолжим исследование свойств связных линейных групп Ли. Для этого потребуется дополнительный алгебраический материал, связанный с изучением понятия алгебры над полем.

4.4. КОЛЬЦА И АЛГЕБРЫ

При изложении сведений о линейных группах у нас возникли новые алгебраические структуры — квадратные матрицы с новым (лиевским) умножением $[A, B] = AB - BA$. С их помощью удается построить теорию представлений линейных групп Ли.

Кольцом называется абелева группа относительно сложения $x+y$, в которой имеется еще одна, новая операция *умножения* xy, причем справедливы равенства, отражающие дистрибутивность сложения относительно умножения:

$$(x+y)z = xz + yz, \quad z(x+y) = zx + zy.$$

Примерами колец относительно естественных операций сложения и умножения являются множество целых чисел, множество всех многочленов с целыми коэффициентами и т. д.

Для дальнейшего обсуждения нам необходимо расширить понятие кольца и рассмотреть кольца, являющиеся одновременно вещественными (комплексными) векторными пространствами. Тем самым мы приходим к математическому понятию алгебры.

Вещественное (комплексное) векторное пространство A называется вещественной (комплексной) *алгеброй*, если для каждой пары элементов a, $b \in$ A однозначно определен элемент $ab \in$ A, называемый *произведением*, причем выполнены следующие аксиомы. Если a, a_1, b, $b_1 \in$ A и α, β — числа, то

1) $(\alpha a + \beta a_1)b = \alpha ab + \beta a_1 b$;

2) $a(\alpha b + \beta b_1) = \alpha ab + \beta ab_1$.

Таким образом, алгеброй называется множество A, в котором, помимо операции умножения элементов $a, b \in$ A, имеются коммутативные операции сложения $(a + b = b + a)$ и умножения на скаляры из $\mathbb{R}$ (в комплексной алгебре — из $\mathbb{C}$). Единичный элемент A относительно операции сложения в этом случае называется *нулем*, а единичный элемент относительно умножения (если такой элемент есть в A) — *единицей*. Поскольку A является вещественным (комплексным) векторным пространством, говорят, что *алгебра задана над* $\mathbb{R}$ (соответственно, над $\mathbb{C}$).

Алгебра A называется:

•*ассоциативной*, если умножение ассоциативно, т. е. $(ab)c = a(bc)$ для любых элементов a, b, $c \in$ A;

•*коммутативной*, если $ab = ba$ для любых элементов $a, b \in$ A;

•*антикоммутативной*, если $ab = -ba$ для любых элементов $a, b \in$ A;

•*алгеброй Ли*, если $ab = -ba$ для любых элементов $a, b \in$ A и в ней выполняется тождество Якоби $(ab)c + (bc)a + (ca)b = 0$, где 0 — нулевой вектор из A как векторного пространства.

Приведем примеры разных видов алгебр. Все квадратные вещественные (комплексные) матрицы размера n образуют ассоциативную алгебру матриц $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$ (соответственно, $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{C})$) относительно обычной операции умножения матриц. Эта алгебра не является ни коммутативной, ни антикоммутативной при $n \geqslant 2$.

Все линейные операторы на вещественном (комплексном) векторном пространстве образуют ассоциативную алгебру над $\mathbb{R}^1$ ($\mathbb{C}^1$), где в качестве умножения берется композиция операторов.

Если нам задана ассоциативная алгебра A, то положим $[a,b]=ab-ba$. Простая проверка показывает, что A относительно умножения $[a,b]$ является алгеброй Ли. Эта алгебра обозначается $\mathrm{A}^{(-)}$. Отметим, что $[a,b]=0$ для всех $a,b\in\mathrm{A}$ тогда и только тогда, когда алгебра A коммутативна.

Примером алгебры Ли может служить касательное пространство $T_G(E)$, возникшее при рассмотрении линейных групп Ли, с операцией умножения $[A,B]=AB-BA$.

Все вещественные (комплексные) многочлены от переменных $X_1,\ldots,X_n$ образуют коммутативную ассоциативную алгебру вещественных (комплексных) многочленов $\mathbb{R}[X_1,\ldots,X_n]$ (соответственно, $\mathbb{C}[X_1,\ldots,X_n]$).

Все непрерывные (гладкие, аналитические) функции в некоторой области D евклидова (эрмитова) пространства образуют коммутативную ассоциативную алгебру, где сложение и умножение функций и умножение на скаляры определяется поточечно, т. е. $(f+g)(x)=f(x)+g(x)$, $(fg)(x)=f(x)g(x)$, $(\lambda f)(x)=\lambda f(x)$. Нулевым элементом этой алгебры является функция, тождественно равная нулю.

Пусть задана линейная группа Ли G, являющаяся подгруппой либо в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$, либо в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$. Тогда все функции на G, представимые многочленами от переменных X_{ij}, $1\leqslant i,j\leqslant n$, образуют коммутативную ассоциативную алгебру $\mathbb{R}[G]$ (соответственно, $\mathbb{C}[G]$).

Отметим, что каждую комплексную алгебру (т. е. алгебру над множеством $\mathbb{C}$) можно рассматривать и как вещественную алгебру (над множеством $\mathbb{R}$), поскольку множество вещественных чисел содержится в множестве комплексных чисел.

Следующие два важных примера алгебр связаны с понятиями тензоров и тензорных произведений векторных пространств, (см. подразд. 7.11). Зададим n-мерное векторное пространство V с базисом e_i, $1\leqslant i\leqslant n$ в тензорной степени

$$V^{\otimes m}=\underbrace{V\otimes\cdots\otimes V}_{m}$$

для любого $m\geqslant 1$. Для произвольных индексов $1\leqslant i_1,\ldots,i_m\leqslant n$ рассмотрим элементы

$$S(e_{i_1},\ldots,e_{i_m})=\frac{1}{m!}\sum_{\sigma\in\mathbf{S}_m}e_{\sigma(i_1)}\otimes\cdots\otimes e_{\sigma(i_m)}\in V^{\otimes m}.$$

В частности, при $m=2$ получаем

$$S(e_{i_1},e_{i_2})=\frac{1}{2}\left(e_{i_1}\otimes e_{i_2}+e_{i_2}\otimes e_{i_1}\right).$$

Заметим, что элемент $S(e_{i_1},\dots,e_{i_m})$ не изменяется при любой перестановке индексов $1\leqslant i_1,\dots,i_m\leqslant n$. Таким образом, можно считать, что эти индексы упорядочены, т. е. $1\leqslant i_1\leqslant\dots\leqslant i_m\leqslant n$. Можно показать, что при разных наборах упорядоченных индексов элементы $S(e_{i_1},\dots,e_{i_m})$ независимы в $V^{\otimes m}$.

Линейная оболочка всех векторов вида $S(e_{i_1},\dots,e_{i_m})$ называется m-й *симметрической* или *симметризованной степенью пространства* V и обозначается $S^m(V)$.

Рассмотрим теперь в $V^{\otimes m}$ для произвольных $1\leqslant i_1,\dots,i_m\leqslant n$ элементы

$$e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m}=\frac{1}{m!}\sum_{\sigma\in\mathbf{S}_m}(-1)^\sigma e_{\sigma(i_1)}\otimes\dots\otimes e_{\sigma(i_m)}\in V^{\otimes m}.$$

В частности, при $m=2$ получаем

$$e_{i_1}\wedge e_{i_2}=\frac{1}{2}\,(e_{i_1}\otimes e_{i_2}-e_{i_2}\otimes e_{i_1}).$$

Для разных упорядоченных наборов индексов $(i_1,\dots,i_m)$ элементы $e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m}$ независимы в $V^{\otimes m}$. Нетрудно видеть, что $e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m}=0$, если хотя бы два индекса среди $1\leqslant i_1\leqslant\dots\leqslant i_m\leqslant n$ совпадают. Кроме того, $e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m}$ меняет знак, если переставить два базисных вектора местами.

Линейная оболочка всех векторов вида $e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m}$ называется m-й *внешней* (или *антисимметризованной*) *степенью пространства* V и обозначается $\wedge^m V$. Базисом пространства $\wedge^m V$ являются все элементы

$$e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_m},\quad 1\leqslant i_1<\dots<i_m\leqslant n.$$

В частности, размерность $\wedge^m V$ равна $\binom{n}{m}=\dfrac{n!}{m!(n-m)!}$, и $\wedge^m V=0$ при $m>n$.

Упражнение 4.3. Пусть $x_i=x_{i1}e_1+\dots+x_{in}e_n\in V$, $1\leqslant i\leqslant n$. Составим квадратную матрицу $X=(x_{ij})$ размера n, в которой на месте (i,j) стоит x_{ij}. Доказать, что

$$x_1\wedge\dots\wedge x_n=(\det X)(e_1\wedge\dots\wedge e_n).$$

Упражнение 4.4. Показать, что $V^{\otimes 2}=S^2(V)\oplus\wedge^2(V)$.

Обозначим через $T(V)$ прямую сумму всех пространств $V^{\otimes m}$ для всех $m\geqslant 1$. Тогда $T(V)$ является ассоциативной алгеброй, умножение в которой задается по правилу

$$(e_{i_1}\otimes\dots\otimes e_{i_m})(e_{j_1}\otimes\dots\otimes e_{j_k})=$$
$$=e_{i_1}\otimes\dots\otimes e_{i_m}\otimes e_{j_1}\otimes\dots\otimes e_{j_k}\in V^{\otimes(m+k)}$$

и дальше распространяется по линейности. Эта алгебра называется *тензорной алгеброй пространства* V.

Рассмотрим прямую сумму $S(V)$ всех пространств

$$S^m(V), \quad m \geqslant 1.$$

Сумма $S(V)$ является ассоциативной коммутативной алгеброй относительно умножения

$$S(e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_m}) S(e_{j_1} \otimes \cdots \otimes e_{j_k}) =$$
$$= S(e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_m} \otimes e_{j_1} \otimes \cdots \otimes e_{j_k}) \in S^{\otimes(m+k)}.$$

Эта алгебра называется *симметрической алгеброй пространства* V. Можно показать, что она изоморфна алгебре многочленов от n переменных с нулевым свободным членом.

Наконец, рассмотрим прямую сумму $\wedge(V)$ векторных пространств $\wedge^m V$, $1 \leqslant m \leqslant n$. Пространство $\wedge(V)$ является алгеброй относительно умножения, которое обозначается $\wedge$ и задается по правилу

$$(e_{i_1} \wedge \cdots \wedge e_{i_m}) \wedge (e_{j_1} \wedge \cdots \wedge e_{j_k}) =$$
$$= e_{i_1} \wedge \cdots \wedge e_{i_m} \wedge e_{j_1} \wedge \cdots \wedge e_{j_k} \in \wedge^{\otimes(m+k)} V.$$

Далее умножение распространяется по линейности. Алгебра $\wedge(V)$ называется *внешней алгеброй пространства* V (или его *алгеброй Грассмана*). Нетрудно проверить, что размерность алгебры $\wedge(V)$ равна $2^n - 1$.

Перейдем к изучению простейших свойств алгебр.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.7. В любой алгебре справедливы равенства $0x = x0 = 0$.

Доказательство. Для нулевого вектора справедливо равенство $0 = 0 + 0$. Домножая это равенство слева на произвольный элемент x алгебры, получаем $x0 = x(0 + 0) = x0 + x0$. Прибавляя к обеим частям этого равенства противоположный вектор $-x0$, получаем $0 = x0$. Аналогично проверяется равенство $0 = 0x$.

Единицей в алгебре A называется такой элемент $\mathbf{1}$, что $1x = x\mathbf{1} = x$ для всех $x \in$ A. Как и в предложении 1.1, показывается, что единичный элемент единствен. В алгебре матриц единицей является единичная матрица. В алгебре функций в области D единицей является функция, тождественно равная 1. В антикоммутативной алгебре (в частности, в любой алгебре Ли) нет единичного элемента.

Элемент x^{-1} алгебры A с единицей называется *обратным* к элементу $x \in \mathrm{A}$, если $x^{-1}x = xx^{-1} = \mathbf{1}$. Если у элемента $x \in \mathrm{A}$ имеется обратный, то элемент x называется *обратимым*. Как и в предложении 1.1, показывается, что обратный элемент в ассоциативной алгебре A с единицей определяется однозначно.

Упражнение 4.5. Доказать, что в ассоциативной алгебре A с единицей все элементы, обратимые относительно заданного в ней умножения, образуют *группу обратимых элементов алгебры* A^*. В частности, $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{R})^* = \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$, $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})^* = \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$. Группой обратимых элементов $\mathbb{R}^*$ является множество $\mathbb{R}\backslash 0$ всех действительных чисел с выколотой точкой 0.

Подпространство B в алгебре A называется *подалгеброй*, если $ab \in \mathrm{B}$ для всех $a, b \in \mathrm{B}$. Например, множество $\mathrm{T}(n,\mathbb{R})$ ($\mathrm{T}(n,\mathbb{C})$) всех верхнетреугольных матриц, т. е. матриц вида

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

образует подалгебру в алгебре матриц.

В алгебрах Ли $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{R})^{(-)}$ и в $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})^{(-)}$ с коммутатором $[a,b]$ все матрицы со следом 0 и все кососимметричные матрицы образуют подалгебры Ли $\mathfrak{sl}(n,\mathbb{R})$, $\mathfrak{sl}(n,\mathbb{C})$ и $\mathfrak{o}(n,\mathbb{R})$, соответственно.

Простейшим примером ассоциативных коммутативных (абелевых) алгебр могут служить кольца $\mathbb{R}$ и $\mathbb{C}$ с обычными операциями сложения и умножения. Ассоциативная коммутативная алгебра A с единицей называется *полем*, если каждый ее ненулевой элемент обратим. Например, кольца $\mathbb{R}$ и $\mathbb{C}$ являются также и полями.

Рассмотрим алгебру матриц $\mathrm{Mat}(2,\mathbb{C})$ как вещественную алгебру (т. е. алгебру над $\mathbb{R}$). Тогда в этой алгебре множество $\mathbb{H}$ всех матриц вида

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

образует подалгебру, называемую *телом кватернионов*. Отметим, что каждый элемент конечной группы кватернионов $\mathbf{Q}_8$ лежит в $\mathbb{H}$, причем матрицы E, I, J, K (см. п. 1.1) составляют базис $\mathbb{H}$ как вещественного векторного пространства. Таким образом, размерность $\mathbb{H}$ равна 4.

В общем случае ассоциативная некоммутативная алгебра A с единицей, в которой каждый ненулевой элемент обратим, на-

зывается *телом*. Например, телом является алгебра кватернионов $\mathbb{H}$. Действительно, для любого ее элемента

$$z = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{C},$$

положим $\|z\| = \sqrt{\det z} = \sqrt{|a|^2 + |b|^2}$. Нетрудно видеть, что $\|z\| > 0$, если $z \neq 0$, и $z^{-1} = \bar{z}/\|z\|$, где $\bar{z}$ — элемент, сопряженный с z:

$$\bar{z} = \begin{pmatrix} \bar{a} & -b \\ \bar{b} & a \end{pmatrix}.$$

Можно показать [59], что $\overline{z_1 z_2} = \bar{z}_2 \bar{z}_1$ $(z_1, z_2 \in \mathbb{H})$. Произведение $z\bar{z} = n^2(z)I$, где

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

задает *норму кватерниона* $n(z) = \|z\|$, а сумма $t(z) = z + \bar{z}$ — его *след*.

Справедлива следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4.6 (теорема Фробениуса). Пусть A — конечномерное тело над $\mathbb{R}$. Тогда $A = \mathbb{H}$ [47, с. 172].

Существует еще один важный пример алгебр, не являющихся уже ассоциативными [32, гл. 2, 72]. Это *алгебры Кэли — Диксона* или *алгебры октонионов* $\mathbb{O}$. Данная алгебра строится с помощью тела кватернионов $\mathbb{H}$; рассматривается двумерное правое* векторное пространство $\mathbb{O}$ над $\mathbb{H}$ с базисом, состоящим из двух элементов $1, v$. Таким образом, каждый элемент из $x \in \mathbb{O}$ однозначно представляется в виде $x = y + vz$, где $y, z \in \mathbb{H}$. Умножение октонионов определено по правилу

$$(y_1 + vz_1) \cdot (y_2 + vz_2) = (y_1 y_2 - z_2 {}^t z_1) + v({}^t y_1 z_2 + y_2 z_1).$$

где t_z — транспонированная матрица кватерниона:

$${}^t z = {}^t \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -\bar{b} \\ b & \bar{a} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, $\mathbb{O}$ является 8-мерной алгеброй над $\mathbb{R}$. Некоторый ее базис указан в [32, с. 48]. Для любого $x = y + vz \in \mathbb{O}$ положим $\bar{x} = {}^t y - vz$.

---

*Векторное пространство V называется *правым*, если для его элементов $v \in V$ определено умножение справа на элементы некоторого множества F: $v \mapsto vf$, где $f \in F$; при аналогичном определении для $v \in V$ умножения слева $v \mapsto fv$ пространство V называется *левым*. В нашем случае определено умножение справа векторов $x \in \mathbb{O}$ на элементы тела кватернионов $y, z \in \mathbb{H}$.

Упражнение 4.6. Показать, что для любых $x, y \in \mathbb{O}$ и любых вещественных чисел α, β выполнены условия:

1) если $t(x) = x + \bar{x}$, $n(x) = x \cdot \bar{x}$, то $t(x), n(x) \in \mathbb{R}$;

2) $x^2 - t(x)x + n(x) = 0$;

3) если $x \neq 0$, то $n(x) \neq 0$;

4) $n(xy) = n(x)n(y)$, $n(\alpha x) = \alpha^2 n(x)$, $t(\alpha x + \beta y) = \alpha t(x) + \beta t(y)$.

Как показано в [32, с. 46], справедлива следующая теорема, дополняющая теорему Фробениуса.

ТЕОРЕМА 4.7. Пусть задана вещественная алгебра A с единицей и функцией нормы $n(x)$, обладающей свойствами 3), 4). Тогда в A нет делителей нуля. Поэтому, если алгебра A ассоциативна, то A — одна из алгебр $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, $\mathbb{H}$. Если алгебра A неассоциативна, то она изоморфна $\mathbb{O}$.

Подпространство I в алгебре A называется *идеалом*, если из условия $a \in I$, $b \in$ A следует, что произведения ab, $ba \in I$. Для записи того факта, что I является идеалом в A, используется обозначение $I \lhd$ A.

Подпространство I в алгебре A называется *левым идеалом*, если $xy \in I$ для любых элементов $x \in$ A, $y \in I$. Аналогично, подпространство I в алгебре A называется *правым идеалом*, если $ab \in I$ для любых элементов $a \in I$, $b \in$ A. Таким образом, левый идеал, являющийся одновременно правым, является идеалом. Иногда идеалы алгебры называются также *двусторонними идеалами*. Примерами левых (правых) идеалов в алгебре матриц $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$ являются все матрицы, у которых элементы всех столбцов (строк), начиная со второго (второй) — нулевые. Эти левые (правые) идеалы не являются идеалами в $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$. Наоборот, можно показать, что в алгебре Ли понятия левого, правого и двустороннего идеалов эквивалентны, т. е. всякий идеал в ней является двусторонним. Двусторонний идеал I в алгебре A выполняет ту же роль, что нормальная подгруппа N в группе G.

Отметим одно замечательное свойство алгебры матриц.

Определение 4.2. Алгебра *проста*, если в ней всего два идеала $I = 0$ и $I = A$.

Упражнение 4.7. Доказать, что если идеал I ассоциативной алгебры A с единицей содержит обратимый элемент, то $I =$ A. В частности, любое тело и любое поле просты.

Можно показать [47], что алгебры $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$, $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{C})$, $\mathbb{H}$ просты.

Приведем примеры идеалов. Пусть $\mathrm{A} = \mathbb{R}[X]$ — алгебра вещественных многочленов от одной переменной X и $f(X) \in \mathbb{R}[X]$. Тогда множество всех многочленов из A, делящихся на $f(X)$,

образует идеал. Аналогичное утверждение верно и для алгебры комплексных многочленов.

Пусть A — алгебра аналитических функций в некоторой области D и $c \in D$ — некоторая точка. Тогда множество I_c всех функций из A, принимающих нулевое значение в точке c, образует идеал в A. Аналогично, пусть $\mathbb{C}[G]$ — алгебра функций на линейной группе G, представимых многочленами от элементов матриц группы G (см. с. 241), и $c \in G$. Тогда множество I_c всех функций, принимающих нулевое значение в точке c, образует идеал в $\mathbb{C}[G]$.

О п р е д е л е н и е 4.3. Пусть A, B — две вещественные (комплексные) алгебры. Линейное отображение $\phi : A \to B$ называется *гомоморфизмом алгебр*, если произведение переходит в произведение. Другими словами, для гомоморфизма алгебр ϕ справедливы равенства:

1) $\phi(\alpha a + \beta b) = \alpha\phi(a) + \beta\phi(b)$,
2) $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$

для всех $a, b \in A$ и любых чисел α, β. Биективный гомоморфизм называется *изоморфизмом*. Если алгебры A и B изоморфны, это обозначают $A \simeq B$. *Ядром гомоморфизма алгебр* называется множество $\ker\phi$ всех таких элементов $a \in A$, что $\phi(a) = 0$.

Непосредственная проверка показывает, что $\ker\phi \lhd A$.

Приведем примеры гомоморфизмов алгебр и их ядер. Пусть A — алгебра аналитических функций в некоторой области D или алгебра $\mathbb{R}[G]$ (соответственно, $\mathbb{C}[G]$) всех функций на G (см. с. 241). Зафиксируем точку $c \in D$ или элемент $\bar{c} \in G$. Зададим отображение $\phi : A \to \mathbb{R}$ (соответственно, $\phi : A \to \mathbb{C}$) по следующему правилу: каждой функции $f \in A$ сопоставим ее значение $f(c)$ в точке c, т. е. $\phi(f) = f(c)$. Можно проверить, что ϕ является гомоморфизмом алгебр и $\ker\phi = I_c$ — идеал всех функций, обращающихся в нуль в точке $c \in D$ (соответственно, $c \in G$).

О п р е д е л е н и е 4.4. Пусть задана алгебра A с идеалом $I \lhd A$. Рассмотрим фактор-группу (относительно сложения) A/I (см. подразд. 1.6). Напомним, что элементами A/I являются смежные классы $a+I$, $a \in A$, причем сложение смежных классов определяется по правилу $(a+I)+(b+I) = (a+b)+I$. Превратим A/I в алгебру. Для этого для любых смежных классов $a+I$, $b+I \in A/I$ и любого числа α положим

$$(a+I)(b+I) = ab+I \in A/I, \quad \alpha(a+I) = \alpha a + I.$$

Получающаяся алгебра называется *фактор-алгеброй*.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 4.8. Если алгебра A ассоциативна (коммутативна, или является алгеброй Ли), то этим же свойством обладает фактор-алгебра A/I.

Рассмотрим отображение $\pi : A \to A/I$, при котором элемент $a \in A$ отображается в смежный класс $\mapsto a + I \in A/I$. Отображение (гомоморфизм) π называется *естественным гомоморфизмом алгебр*. Несложно проверяется, что $\ker \pi = I$.

ТЕОРЕМА 4.8 (теорема о гомоморфизмах для алгебр). Пусть $\phi : A \to B$ — гомоморфизм алгебр. Тогда $\operatorname{Im} \phi \simeq A/\ker \phi$.

(Напомним, что *образом* $\operatorname{Im}\phi$ произвольного отображения множеств $\phi : X \to Y$ называется подмножество в Y, состоящее из всех таких элементов $y \in Y$, что $y = \phi(x)$ для некоторого $x \in X$.)

Упражнение 4.8. Доказать, что выполняются следующие соотношения:

1) $\mathbb{C}[X, Y]/(X) \simeq \mathbb{C}[X]$;

2) $\mathbb{R}[X]/(X^2 + X + 1) \simeq \mathbb{C}$.

Укажем на связь понятия идеала и фактор-алгебры с теорией линейных групп.

ТЕОРЕМА 4.9. Пусть задана система комплексных многочленов $f_1, \ldots, f_N \in \mathbb{C}[X_1, \ldots, X_n]$. Обозначим через I множество всех таких многочленов h, что

$$h^d = a_1 f_1 + \cdots + a_N f_N \tag{4.29}$$

для некоторого натурального числа d и некоторых множителей $a_1, \ldots, a_N$. Тогда I является идеалом в алгебре многочленов.

ТЕОРЕМА 4.10. Пусть линейная группа G, как подгруппа в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$, задается системой уравнений (4.2). Обозначим I идеал в алгебре многочленов $\mathbb{C}[X_{ij} \mid 1 \leqslant i, j \leqslant n]$, построенный в теореме 4.9. Тогда алгебра функций $\mathbb{C}[G]$ на группе G изоморфна фактор-алгебре $\mathbb{C}[X_{ij} \mid 1 \leqslant i, j \leqslant n]/I$.

СЛЕДСТВИЕ. Каждый гомоморфизм линейных групп $f : G \to H$ индуцирует гомоморфизм алгебр функций $f^0 : \mathbb{C}[G] \to \mathbb{C}[H]$. При этом если $g : H \to F$ — другой гомоморфизм линейных групп, то $(fg)^0 = g^0 f^0$.

Приведем важную конструкцию в теории алгебр: их тензорное произведение $A \otimes B$. Предположим, что нам заданы алгебры A, B. Тогда на тензорном произведении пространств $A \otimes B$ (см. подразд. 7.11) можно задать умножение по следующему правилу: если $a, a' \in A$ и $b, b' \in B$, то

$$(a \otimes b)(a' \otimes b') = (aa' \otimes bb').$$

Нетрудно показать, что если алгебры A, B коммутативны или(и) ассоциативны, то этим свойством обладает и $A \otimes B$. Если в алгебрах A, B имеются единичные элементы $\mathbf{1_A} \in A$ и $\mathbf{1_B} \in B$, то $\mathbf{1_A} \otimes \mathbf{1_B}$ является единичным элементом $A \otimes B$. Кроме того, можно показать, что если заданы алгебры многочленов

$$\mathbb{C}[X_1, \ldots, X_n], \quad \mathbb{C}[Y_1, \ldots, Y_m],$$

то их тензорное произведение изоморфно алгебре многочленов

$$\mathbb{C}[Z_1, \ldots, Z_{n+m}],$$

где изоморфизм устанавливается по следующему правилу:

$$Z_i \mapsto \begin{cases} X_i \otimes 1, & 1 \leqslant i \leqslant n; \\ 1 \otimes Y_j, & 1 \leqslant j \leqslant m. \end{cases}$$

Аналогичное утверждение верно и для алгебр вещественных многочленов.

ТЕОРЕМА 4.11. Предположим, что G, H, $G \times H$ из теоремы 4.3. Тогда $\mathbb{C}[G \times H] \simeq \mathbb{C}[G] \otimes \mathbb{C}[H]$.

Доказательство. Пусть G задается системой (4.2), а H задается системой уравнений

$$g_j(Y_{ps}) = 0, \qquad 1 \leqslant j \leqslant M, \quad 1 \leqslant p, q \leqslant m.$$

Обозначим через I идеал в $\mathbb{C}[X_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n]$, соответствующий элементам f_i, $1 \leqslant i \leqslant N$, а через J — идеал в $\mathbb{C}[Y_{pq} \mid 1 \leqslant p, q \leqslant m]$, соответствующий элементам g_j, $1 \leqslant j \leqslant M$. По теореме 4.3 $G \times H$ задается системой уравнений

$$f_i(Z_{rs}) = g_j(Z_{n+p,n+q}) = Z_{r,n+q} = Z_{n+p,s} = 0, \tag{4.30}$$

где $1 \leqslant r, s \leqslant n$, $1 \leqslant p, q \leqslant m$.

Обозначим W идеал в $\mathbb{C}[Z_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n+m]$, построенный по элементам (4.30). По теореме 4.3 и теореме 4.10 получаем

$$\mathbb{C}[G] \simeq \mathbb{C}[X_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n]/I;$$
$$\mathbb{C}[H] \simeq \mathbb{C}[Y_{pq} \mid 1 \leqslant p, q \leqslant m]/J;$$
$$\mathbb{C}[G \times H] \simeq \mathbb{C}[Z_{ij} \mid 1 \leqslant i, j \leqslant n+m]/W.$$

Но

$$\mathbb{C}[Z_{ij} \mid 1 \leqslant i, j \leqslant n+m]/W \simeq$$
$$\mathbb{C}[X_{rs}, Y_{pq} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n, \, 1 \leqslant p, q \leqslant m]/V,$$

где идеал V построен по всем многочленам f_i, g_j, $1 \leqslant i \leqslant N$, и $1 \leqslant j \leqslant M$. Остается установить изоморфизм

$$\mathbb{C}[X_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n]/I \otimes \mathbb{C}[Y_{pq} \mid 1 \leqslant p, q \leqslant m]/J \to$$
$$\mathbb{C}[X_{rs}, Y_{pq} \mid 1 \leqslant r,\ s \leqslant n,\ 1 \leqslant p, q \leqslant m]/V$$

по правилу

$$[X_{rs} + I] \otimes \mathbf{1} \rightleftharpoons [X_{rs} + V]; \quad \mathbf{1} \otimes [Y_{rs} + J] \rightleftharpoons [Y_{rs} + V],$$

где знак $x \rightleftharpoons y$ означает, что элементы x, y соответствуют один другому при указанном изоморфизме.

Другие примеры тензорных произведений алгебр мы рассмотрим ниже.

В заключение приведем еще один интересный пример ассоциативных алгебр, играющий важную роль в приложениях. Напомним сначала, что для элементов x, y любой ассоциативной алгебры можно определить новую операцию композиции $[x, y] = xy - yx$, тем самым превратив ее в алгебру Ли.

Следующее утверждение проверяется непосредственно.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 4.9. В любой ассоциативной алгебре A выполнены равенства $[x, yz] = [x, y]z + y[x, z]$, $[x, y] = -[y, x]$.

Пусть $\mathrm{V} = \mathbb{C}[X_1, \ldots, X_n]$ — алгебра комплексных многочленов от переменных $X_1, \ldots, X_n$. Рассмотрим в V линейные операторы $p_1, \ldots, p_n, q_1, \ldots, q_n$, где

$$p_i(f) = \frac{\partial f}{\partial X_i}, \quad q_i f = X_i f \tag{4.31}$$

для любого $f \in V$.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 4.10. Справедливы соотношения

$$[p_i, p_j] = [q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, q_j] = \delta_{ij}. \tag{4.32}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Достаточно проверить лишь последнее равенство. Пусть $f \in \mathrm{V}$. Тогда

$$\begin{aligned} f = (p_i q_j - q_j p_i) f = \frac{\partial (X_j f)}{\partial X_i} - X_j \frac{\partial f}{\partial X_i} = \\ = \frac{\partial X_j}{\partial X_i} f + X_j \frac{\partial f}{\partial X_i} - X_j \frac{\partial f}{\partial X_i} = \frac{\partial X_j}{\partial X_i} f = \delta_{ij} f. \end{aligned} \tag{4.33}$$

Некоммутативность сопряженных координат и импульсов $[p_i, q_i] = 1$ порождает *соотношение неопределенности* в квантовых системах. Перестановочные соотношения динамических переменных играют важную роль в классической и квантовой механике (см. подразд. 5.1, 5.5).

Алгеброй Вейля $A_n(\mathbb{C})$ называется подалгебра с единицей в алгебре линейных операторов на пространстве комплексных многочленов $V = \mathbb{C}[X_1, \dots, X_n]$, порожденная всеми операторами p_i, q_j, где $i, j = 1, \dots, n$.

В силу предложения 4.10 произвольный элемент из $A_n(\mathbb{C})$ является конечной линейной комбинацией одночленов

$$q_1^{m_1} \cdots q_n^{m_n} p_1^{s_1} \cdots p_n^{s_n} \tag{4.34}$$

с целыми неотрицательными показателями m_i, s_j и с комплексными коэффициентами. В частности, каждый элемент F из $A_n(\mathbb{C})$ можно представить в виде конечной суммы

$$F = \sum_i f_i(q_1, \dots, q_n) g_i(p_1, \dots, p_n). \tag{4.35}$$

В обозначениях (4.31) выражение (4.35) можно записать как

$$F = \sum_{l_1, \dots, l_n \geqslant 0} \alpha_{l_1, \dots, m_n} X_1^{l_1} \cdots X_n^{l_n} \frac{\partial^{m_1 + \cdots + m_n}}{\partial^{m_1} X_1 \cdots \partial^{m_n} X_n},$$

где $\alpha_{l_1, \dots, m_n} \in \mathbb{C}$. Это означает, что элемент F является дифференциальным оператором. Поэтому алгебра Вейля $A_n(\mathbb{C})$ также называется *алгеброй дифференциальных операторов*. Для F из (4.35) положим

$$\frac{\partial F}{\partial p_j} = \sum_i f_i(q_1, \dots, q_n) \frac{\partial g_i(p_1, \dots, p_n)}{\partial p_i};$$

$$\frac{\partial F}{\partial q_j} = \sum_i \frac{\partial f_i(q_1, \dots, q_n)}{\partial q_j} g_i(p_1, \dots, p_n).$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.11. Если $F \in A_n(\mathbb{C})$, то для всех $i = 1, \dots, n$ справедливы *уравнения Гамильтона*

$$[p_i, F] = \frac{\partial F}{\partial q_i}, \quad [q_j, F] = -\frac{\partial F}{\partial p_j}. \tag{4.36}$$

Доказательство. Без ограничения общности можно считать, что F является одночленом (4.34). В силу предложений 4.8 и 4.9 получаем

$$[p_i, F] = q_1^{m_1} \cdots q_{i-1}^{m_{i-1}} [p_i, q_i^{m_i}] q_{i+1}^{m_{i+1}} \cdots q_n^{m_n} p_1^{s_1} \cdots p_n^{s_n}. \tag{4.37}$$

Остается показать, что

$$[p_i, q_i^m] = m q_i^{m-1}. \tag{4.38}$$

Если $m=1$, то (4.38) вытекает из предложения 4.9. Пусть для m равенство (4.38) доказано. Тогда по предложения 4.8

$$[p_i, q_i^{m+1}] = [p_i, q_i]q_i^m + q_i[p_i, q_i^m] = q_i^m + q_i m q_i^{m-1} = (m+1)q_i^m.$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.12. Одночлены из (4.34) независимы.

Доказательство. Пусть F — ненулевой элемент из (4.35). Предположим обратное и представим одночлен F в виде $F = \sum_{i=0}^{m} u_j q_n^j$, где u_j — многочлены от

$$p_1, \ldots, p_n, q_1, \ldots, q_{n-1}.$$

Из предложения 4.11 (так как все $\partial u_j/\partial q_n \equiv 0$) получаем, что

$$0 = [p_n, F] = \sum_{j \leqslant m} u_j j q_n^{j-1}.$$

Продолжая эти рассуждения до исчезновения переменной q_n, получаем в алгебре Вейля ненулевой многочлен сначала от $p_1, \ldots, p_n, q_1, \ldots, q_{n-1}$, затем от $p_1, \ldots, p_n, q_1, \ldots, q_{n-2}$ и, наконец, от $p_1, \ldots, p_n$. Аналогично рассматривая $0 = [q_i, F]$, получаем, что F является ненулевой константой, что невозможно.

ТЕОРЕМА 4.12. Алгебра $A_n(\mathbb{C})$ проста.

Доказательство. Пусть $0 \neq I \lhd A_n(\mathbb{C})$. Предположим, что идеал I содержит ненулевой многочлен из доказательства предложения 4.11. Рассматривая $[p_i, F], [q_i, F] \in I$, как и в доказательстве предложения 4.11, получаем, что I содержит ненулевой элемент из поля $\mathbb{C}$. Этот элемент обратим в $A_n(\mathbb{C})$, и поэтому $I = A_n(\mathbb{C})$.

Упражнение 4.9. Доказать, что

$$A_n(\mathbb{C}) \simeq \underbrace{A_1(\mathbb{C}) \otimes \cdots \otimes A_1(\mathbb{C})}_{n \text{ раз}}.$$

4.5. СВЯЗНЫЕ И НЕСВЯЗНЫЕ ГРУППЫ ЛИ

В подразд. 4.3 упомянуты двузначные, или спинорные, неприводимые представления групп $\mathrm{SO}(n, \mathbb{R})$ с полуцелыми индексами. Хотя такие конструкции, ставящие в соответствие одному элементу группы две разные матрицы, не являются представлениями в смысле подразд. 3.1, они широко распространены

в физике — прежде всего в описании спина. Однако на группу с двузначными представлениями можно так отобразить некоторую более широкую *спинорную* группу, что двузначным представлениям исходной группы будут соответствовать однозначные представления спинорной группы.

Вначале рассмотрим подробнее свойства связных и несвязных групп Ли. Полученные результаты необходимы для понимания построения спинорных групп, а также группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ и группы Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$. Напомним,

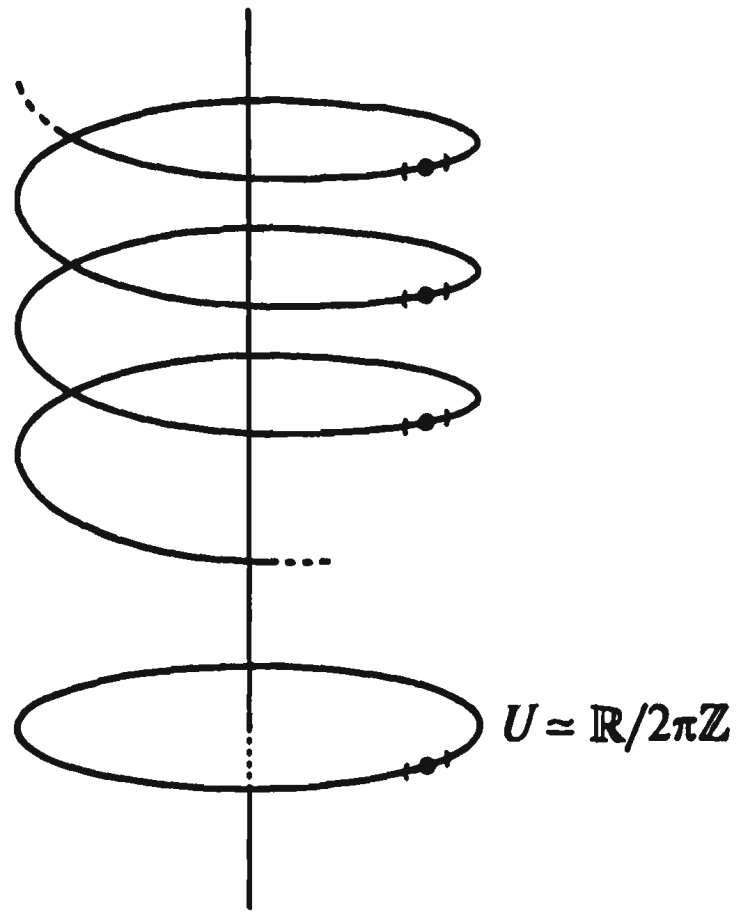


Рис. 4.7. Накрывающее отображение $\mathbb{R} \to \mathbf{U}(1,\mathbb{C})$

что группа G *связна*, если для любого элемента $g \in G$ найдется такой дифференцируемый путь $x : [0,1] \to G$, что $x(0) = E$ и $x(1) = g$.

Показано [16, с. 26], что группы

$$\mathrm{GL}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{R}),\ \mathrm{U}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{SU}(n,\mathbb{C}),\ \mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$$

связны. Кроме того, связна группа вещественных квадратных матриц размера n с положительным определителем.

Отметим, что группы $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$ и $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ несвязны. Действительно, возьмем матрицу A с отрицательным определителем и предположим, что существует дифференцируемый путь $x(t)$, причем $x(0) = E$ и $x(1) = A$. В этом случае $\det x(t)$ является дифференцируемой вещественной функцией, причем $\det x(0) = 1$ и $\det x(1) < 0$. Из курса анализа известно, что найдется такая точка $t_0 \in (0,1)$, что $\det x(t_0) = 0$. Но это противоречит тому, что $\det x(t) \neq 0$ для всех t.

О п р е д е л е н и е 4.5. Гомоморфизм групп Ли $f : G \to H$ называется *накрывающим*, или *накрытием*, если выполнено одно из эквивалентных условий:

1) подгруппа $\ker f$ дискретна;

2) $df : T_G(E) \to T_H(E)$ является изоморфизмом векторных пространств;

3) f индуцирует диффеоморфизм окрестностей $x \in G$ и $f(x) \in$ $\in H$.

Например, гомоморфизм $f : \mathbb{R} \to \mathrm{U}(1,\mathbb{C}) = \mathbf{U}$, при котором $f(x) = \exp(2\pi i x)$, $x \in \mathbb{R}^1$, является накрывающим (рис. 4.7). Другой важный пример накрывающих отображений представляет следующая теорема. В ней фигурирует группа $\mathrm{SO}(n,\mathbb{C})$ (см. под-

разд. 1.4), при $n = 3$ состоящая из всех комплексных квадратных матриц A размера 3 с определителем 1, причем ${}^tAA = E$.

ТЕОРЕМА 4.13. Существует накрывающий гомоморфизм

$$f : \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(3,\mathbb{C})$$

с ядром $\ker f = \pm 1$. При этом $f(\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$.

Доказательство. Пусть $L = \mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$ — множество матриц со следом нуль, т. е.

$$\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C}) = \left\{ \begin{pmatrix} a & c \\ b & -a \end{pmatrix} \mid a,b,c \in \mathbb{C} \right\}.$$

Рассмотрим *присоединенное* представление Ad группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ в пространстве L. Это представление задается по правилу

$$(\mathrm{Ad}\, g)(x) = gxg^{-1}, \quad x \in L,\ g \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}).$$

Заметим, что представление Ad сохраняет билинейную функцию

$$\begin{vmatrix} a & c \\ b & -a \end{vmatrix} = -a^2 - bc = (ia)^2 + \left[\frac{(b-c)}{2}\right]^2 + \left[\frac{i(b+c)}{2}\right]^2.$$

Кроме того, $\det g = 1$ по определению группы $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$. Следовательно, $\mathrm{Ad}\, g \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{C})$. Ясно, что $\ker \mathrm{Ad} = \pm 1$. При этом $\mathrm{Im}\,\mathrm{Ad} = \mathrm{SO}(3,\mathbb{C})$.

Эта конструкция применяется и для построения накрытия $f : \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}_+(1,3)$, где $\mathrm{SO}_+(1,3)$ — связная компонента единичного элемента группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$, см. подразд. 1.7.

ТЕОРЕМА 4.14. [26, гл. 1, § 5.7] Имеется накрытие

$$f : \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}_+(1,3),$$

ядро которого состоит из матриц $\pm E$. Если

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}),$$

то

$$f(A) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2) & \mathrm{Re}(\alpha\overline{\beta} + \gamma\overline{\delta}) & \mathrm{Im}(\overline{\alpha}\beta + \overline{\gamma}\delta) & \frac{1}{2}(|\alpha|^2 - |\beta|^2 + |\gamma|^2 - |\delta|^2) \\ \mathrm{Re}(\alpha\overline{\gamma} + \beta\overline{\delta}) & \mathrm{Re}(\alpha\overline{\delta} + \beta\overline{\gamma}) & \mathrm{Im}(\overline{\gamma}\beta - \overline{\delta}\alpha) & \mathrm{Re}(\alpha\overline{\gamma} - \beta\overline{\delta}) \\ \mathrm{Im}(\alpha\overline{\gamma} + \beta\overline{\delta}) & \mathrm{Im}(\alpha\overline{\delta} + \beta\overline{\gamma}) & \mathrm{Re}(\alpha\overline{\delta} - \beta\overline{\gamma}) & \mathrm{Im}(\alpha\overline{\gamma} - \beta\overline{\delta}) \\ \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - |\gamma|^2 - |\delta|^2) & \mathrm{Re}(\alpha\overline{\beta} - \gamma\overline{\delta}) & \mathrm{Im}(\overline{\alpha}\beta + \gamma\overline{\delta}) & \frac{1}{2}(|\alpha|^2 - |\beta|^2 - |\gamma|^2 - |\delta|^2) \end{pmatrix} \in$$

$\in \mathrm{SO}_+(1,3)$.

Аналогичные соображения показывают, что имеется сюръективный гомоморфизм групп

$$f : \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(4,\mathbb{C})$$

с ядром $\{(E,E), (-E,-E)\}$. Построение гомоморфизма f осуществляется следующим образом. Четырехмерное комплексное пространство $\mathbb{C}^4$ отождествляется с тензорным произведением двух двумерных пространств $\mathbb{C}^2$, т. е. $\mathbb{C}^4 = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Сопоставим теперь паре матриц $(g,h) \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ линейный оператор $f(g,h)$ в $\mathbb{C}^4 = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ по правилу

$$f(g,h)(u \otimes v) = g(u) \otimes g(v), \quad u, v \in \mathbb{C}^2.$$

Можно показать, что каждый $f(g,h) \in \mathrm{SO}(4,\mathbb{C})$ [19, с. 91]. Как и для ограничений гомоморфизма группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ на ее подгруппу $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ в теореме 4.13, справедлива следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4.15. Ограничение гомоморфизма f на подгруппу

$$\mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \subset \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$$

задает сюръективный гомоморфизм групп

$$f : \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$$

с ядром $\{(E,E), (-E,-E)\}$.

Выше при рассмотрении алгебры кватернионов $\mathbb{H}$ мы использовали понятие кватернионного сопряжения $z \mapsto \bar{z}$, или инволюции — операции, квадрат которой является тождественным отображением. Для изучения спинорных групп нам потребуется понятие инволюции в произвольной алгебре A. Линейный оператор $x \mapsto \bar{x}$ в алгебре A, при котором $\overline{xy} = \overline{yx}$ для всех $x, y \in \mathrm{A}$, называется *инволюцией*.

Упражнение 4.10. Доказать следующие положения:

1) переход к комплексно сопряженному элементу $z \mapsto \bar{z}$ является инволюцией в множестве $\mathbb{C}$ всех комплексных чисел как вещественной алгебре;

2) переход к транспонированной матрице $B \mapsto {}^tB$ является инволюцией в алгебрах квадратных матриц $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})$ и $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{R})$;

3) переход к транспонированной комплексно сопряженной матрице $B \mapsto^t \bar{B}$ является инволюцией в алгебре квадратных матриц $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})$ и в теле кватернионов $\mathbb{H}$;

4) переход к сопряженному оператору $A \mapsto A^*$ (см. подразд. 7.7) в алгебре линейных операторов в евклидовом (эрмитовом) пространстве является инволюцией.

Конструкция теоремы 4.13 обобщается на произвольное n-мерное комплексное пространство $\mathbb{C}^n$, где $n \geqslant 2$, см. [19, гл. 3, § 2.10]. Зафиксируем в комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$ базис $e_1, \ldots, e_n$. Через C_n обозначим векторное пространство размерности 2^n, базис которого образуют специальные одночлены: упорядоченные формальные произведения базисных векторов $\{e_i\}$

$$e_{i_1} \cdots e_{i_m}, \quad 1 \leqslant i_1 < \ldots < i_m \leqslant n \tag{4.39}$$

Превратим C_n в ассоциативную комплексную алгебру, задав правило умножения одночленов вида (4.39) соотношениями

$$e_k e_j = -e_j e_k \text{ при } 1 \leqslant k \neq j \leqslant n, \text{ и } e_j^2 = 1.$$

Например:

$$(e_1 e_2 e_4)(e_2 e_3) = e_1 e_2 (e_4 e_2) e_3 = -e_1 e_2 (e_2 e_4) e_3 = -e_1 e_2^2 (e_4 e_3) = e_1 e_3 e_4.$$

Отсюда видно, что произведение одночленов вида (4.39) снова, с точностью до знака, является одночленом. Кроме того, имеется разложение алгебры $\mathbf{C}_n$ в прямую сумму подпространств $\mathbf{C}_n = \mathbf{C}_n^0 \oplus \mathbf{C}_n^1$, где базис $\mathbf{C}_n^k$, $k = 0, 1$, составляют одночлены (4.39), у которых числа m образующих базисных векторов имеют четность, одинаковую с k.

Отметим, что построенная алгебра $\mathbf{C}_n$ ассоциативна, но не является коммутативной при $n > 1$. Выведем полезное свойство умножения элементов $x = \sum_j x_i e_j$, $y = \sum_j y_j e_j \in \mathbb{C}^n$. Для этого рассмотрим в пространстве $\mathbb{C}^n$ билинейную функцию $(x, y) = \sum_{j=1}^n x_j y_j$. Легко проверить, что $xy + yx = (x, y)$ для всех $x, y \in \mathbb{C}^n$. Построенная алгебра $\mathbf{C}_n$ называется *алгеброй Клиффорда*.

В алгебре $\mathbf{C}_n$ имеется инволюция $x \mapsto \bar{x}$, при которой $\overline{e_{i_1} \cdots e_{i_m}} = e_{i_m} \cdots e_{i_1}$. Например:

$$\overline{e_1 e_2 e_4} = e_4 e_2 e_1 = -e_4 e_1 e_2 = e_1 e_4 e_2 = -e_1 e_2 e_4.$$

Таким образом, если z — одночлен вида (4.39), то $\bar{z} = \pm z$, причем $\bar{z} = z$ для $z \in C_n^0$ и $\bar{z} = -z$ для $z \in C_n^1$.

Для любого $u \in C_n$ определим норму $n(u) = u\bar{u}$.

Обозначим через $\mathbf{C}_n^*$ группу обратимых элементов алгебры $\mathbf{C}_n$. Через $\mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ обозначим подгруппу всех таких элементов $u \in \in (\mathbf{C}_n^0)^*$, что $n(u) = 1$ и

$$u\langle e_1, \ldots, e_n\rangle u^{-1} = \langle e_1, \ldots, e_n\rangle, \tag{4.40}$$

в алгебре $\mathbf{C}_n$, где $\langle e_1, \ldots, e_n\rangle$ — комплексная линейная оболочка векторов $e_1, \ldots, e_n$. Таким образом, элементы подгруппы переводят векторное пространство $\mathbb{C}^n$ алгебры Клиффорда $\mathbf{C}_n$ в себя. Это означает, что для любого $u \in \mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ существует такая обратимая комплексная матрица A_u, что

$$(ue_1, \ldots, ue_n) = (e_1, \ldots, e_n) A_u u. \tag{4.41}$$

Такому условию удовлетворяют, в частности, элементы вида

$$u_{ij} = \exp\left\{\frac{\varphi}{2} e_i e_j\right\}, \text{ т. е.}$$

$$u_{ij} = 1 \cdot \cos\frac{\varphi}{2} + e_i e_j \sin\frac{\varphi}{2} \quad \text{при} \quad e_i^2 e_j^2 = 1,$$

$$u_{ij} = 1 \cdot \operatorname{ch}\frac{\varphi}{2} + e_i e_j \operatorname{sh}\frac{\varphi}{2} \quad \text{при} \quad e_i^2 e_j^2 = -1, \tag{4.42}$$

где $\varphi \in \mathbb{R}^1$ (см. [59, с. 83]).

Определение 4.6. Группа $\mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ называется *комплексной спинорной группой.*

Из (4.41) следует, что отображение $\pi : \mathrm{Spin}(n, \mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(n, \mathbb{C})$, при котором $\pi(u) = A_u$, является гомоморфизмом групп. Можно показать, что гомоморфизм π сюръективен, $\ker \pi = \pm 1$, и группа $\mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ связна. При этом

$$\mathrm{Spin}(n, \mathbb{R})/\{\pm 1\} \simeq \mathrm{SO}(n, \mathbb{R}).$$

Для описания элементов $\mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ обозначим через Q^{n-1} все такие $y \in \langle e_1, \ldots, e_n \rangle$, что $y = \sum y_j e_j$ и $\sum y_j^2 = 1$. В этом случае $y \in \mathbf{C}_n^*$, и $\mathrm{Spin}(n, \mathbb{C})$ состоит из произведений четного числа элементов из Q^{n-1}.

Пусть $n = 2l + 1$ (нечетно). Тогда алгебра $\mathbf{C}_n^0 \simeq \mathrm{Mat}(2^l, \mathbb{C})$. Следовательно, в ней имеется простой левый идеал I размерности 2^l. Тем самым возникает неприводимое представление $\mathrm{Spin}(2l+1, \mathbb{C})$, которое называется *спинорным представлением.*

Если же $n = 2l$, то алгебра $\mathbf{C}_n$ проста, и поэтому имеется представление $\mathrm{Spin}(2l, \mathbb{C})$ в левом идеале J размерности 2^l, состоящем из всех матриц, в котором все столбцы, начиная со второго, являются нулевыми. В этом случае снова возникает спинорное представление, но оно приводимо и разлагается в прямую сумму двух подпредставлений — «четного» и «нечетного»:

$$J = (J \cap C_n^0) \oplus (J \cap C_n^1).$$

Можно показать [19, гл. 4, § 1; предложение 2.4], что касательное пространство $T_{\mathrm{Spin}(n,\mathbb{C})}(E)$ в $\mathbf{C}_n^0$ к единичной матрице совпадает с линейной оболочкой всех элементов $e_i e_j$, $i < j$. Подробнее с алгебрами Клиффорда и их приложениями можно познакомиться по [102].

Пусть p, q — неотрицательные целые числа и $n = p + q$. Зафиксируем в вещественном пространстве $\mathbb{R}^n$ базис $e_1, \ldots, e_n$. Через $C_{p,q}$ обозначим векторное пространство размерности 2^n, базис которого образуют специальные одночлены вида (4.39). Превратим $C_{p,q}$ в ассоциативную вещественную алгебру, в которой правило умножения одночленов вида (4.39) задается соотношениями

$$e_k e_j = -e_j e_k \text{ при } 1 \leqslant k \neq j \leqslant n$$

и

$$e_j^2 = \begin{cases} -1 & \text{при } 1 \leqslant i \leqslant p, \\ 1 & \text{при } p < i \leqslant n = p+q. \end{cases}$$

Введем в V невырожденную билинейную функцию

$$f(x,y) = -\sum_{i=1}^{p} x_i y_i + \sum_{i=p+1}^{n} x_i y_i.$$

Тогда можно показать, что умножение в $\mathbf{C}_{p,q}$ обладает свойством $xy + yx = f(x,y)$ для всех $x, y \in V$. Как и в комплексном случае, показывается, что имеется разложение $\mathbf{C}_{p,q} = \mathbf{C}^0_{p,q} \oplus \mathbf{C}^1_{p,q}$ и можно по аналогии со $\mathrm{Spin}(n,C)$ рассмотреть соответствующую спинорную группу $\mathrm{Spin}(p,q)$.

Введем важное понятие односвязной накрывающей группы (односвязного накрытия), которое будет использоваться в описании представлений групп Ли.

О п р е д е л е н и е 4.7. Группа Ли G *односвязна*, если в G любой путь стягивается в точку.

Т Е О Р Е М А 4.16. Любая связная группа Ли G имеет вид $G \simeq \widetilde{G}/N$, где $\widetilde{G}$ — односвязная группа Ли, и N — ее дискретный центральный нормальный делитель. Пара $\widetilde{G}, N$ определена однозначно.

Напомним, что нормальный делитель N в группе $\widetilde{G}$ является центральным, если каждый элемент $x \in N$ лежит в центре группы $\widetilde{G}$, т. е. $gxg^{-1} = x$ для всех $g \in \widetilde{G}$.

О п р е д е л е н и е 4.8. Группа $\widetilde{G}$ называется *односвязным накрытием* G.

Приведем примеры односвязных групп и односвязных накрытий [17, гл. 1, § 4.4]. Односвязными являются следующие группы: $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SU}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{Spin}(n,\mathbb{C})$.

Имеются следующие односвязные накрытия:

1) $\mathbb{R} \to \mathrm{U}(1,\mathbb{C}) = \mathbf{U}$;
2) $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(3,\mathbb{C})$;
3) $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$;
4) $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(4,\mathbb{C})$;
5) $\mathrm{SL}(4,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(6,\mathbb{C})$.

Выше также было показано, что односвязным накрытием является отображение $\mathrm{Spin}(n,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(n,\mathbb{C})$. При этом, в силу единственности накрытия, имеем $\mathrm{Spin}(3,\mathbb{C}) \simeq \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, $\mathrm{Spin}(4,\mathbb{C}) \simeq$ $\simeq \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, $\mathrm{Spin}(6,\mathbb{C}) \simeq \mathrm{SL}(4,\mathbb{C})$. Итак, любому двузначному представлению группы $\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$ с заданным полуце-

лым индексом соответствует некоторое однозначное представление группы $\mathrm{Spin}(n,\mathbb{R})$ с нечетным индексом, а (однозначные) представления $\mathrm{Spin}(n,\mathbb{R})$ с четными индексами соответствуют однозначным представлениям $\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$ с целыми индексами. На этом основании, например, тензорные и спинорные представления $D^{(j)}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ в физических приложениях рассматриваются как равноправные.

В заключение приведем описание коммутативных групп Ли [17, гл. 2, § 2.7]. Каждая связная вещественная абелева группа Ли изоморфна прямому произведению $\mathbf{U}^m \times \mathbb{R}^t$ для некоторых целых неотрицательных чисел m, t. Каждая комплексная абелева связная группа Ли изоморфна одной из групп $\mathbb{C}$, $\mathbb{C}^*$, $\mathbb{C}/(\mathbb{Z}+\mathbb{Z}u)$, где $u \in \mathbb{C}$, причем мнимая часть u положительна.

Кроме того, приведем теорему о строении разрешимых связных подгрупп в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$. Дадим определение разрешимой группы G (см. далее определение 6.1). Рассмотрим в G ряд коммутантов G', $G'' = (G')'$, ..., $G^{(m)} = (G^{(m-1)})'$. Группа G называется разрешимой, если найдется такое натуральное число m, что $G^{(m)}$ является единичной группой. Обозначим $T(n,C)$ множество всех *верхнетреугольных матриц*, т. е. всех матриц вида

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Можно показать, что $T(n,C)$ является разрешимой подгруппой в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$. Ясно также, что если G — разрешимая подгруппа в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, то и сопряженная с ней подгруппа AGA^{-1}, где $A \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, также является разрешимой. Следующая теорема, по существу, утверждает, что верно и обратное соотношение.

ТЕОРЕМА 4.17 (теорема Колчина—Ли). Предположим, что G — подгруппа в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, причем выполнено одно из условий:

1) если $g \in G$, то $g-1$ — *нильпотентная матрица*, т. е. $(g-1)^m = 0$ для некоторого натурального числа m;

2) G — связная линейная подгруппа в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$.

Тогда существует такая матрица $A \in \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, что AGA^{-1} состоит из верхнетреугольных матриц, т. е. $AGA^{-1} \subseteq \mathrm{T}(n,\mathbb{C})$ [81, с. 28, 78, с. 60].

Разрешимые и нильпотентные группы подробнее рассмотрены в гл. 6.

4.6. АЛГЕБРЫ ЛИ

При рассмотрении линейных групп Ли G в подразд. 4.1 у нас возникали касательные пространства $T_G(E)$, состоящие из специальных матриц. В теореме 4.4 было показано, что $T_G(E)$ является алгеброй Ли относительно нового умножения матриц $[A, B] = AB - BA$.

Напомним, что *алгеброй Ли* L называют неассоциативную алгебру с умножением $[x, y]$, удовлетворяющую тождествам:

$$[x, x] = 0,$$
$$[[x, y], z] + [[y, z], x] + [[z, x], y] = 0.$$

Примерами алгебр Ли являются:

1) алгебра $\mathrm{A}^{(-)}$, получаемая из ассоциативной алгебры A, в которой вместо ассоциативного умножения рассматривается новое умножение

$$[x, y] = xy - yx; \tag{4.43}$$

здесь символ $\mathrm{A}^{(-)}$ отражает введение нового умножения (4.43);

2) трехмерное вещественное пространство $\mathbb{R}^3$, где в качестве умножения $[x, y]$ берется векторное произведение $x \times y$.

Пусть A — произвольная алгебра. Линейный оператор D на A называется *дифференцированием*, если $D(xy) = D(x)y + xD(y)$. Через $\mathrm{Der}(\mathrm{A})$ обозначается множество всех дифференцирований алгебры A.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.13. Пусть $\mathcal{L}(\mathrm{A})$ — алгебра всех линейных операторов на алгебре A. Тогда $\mathrm{Der}(\mathrm{A})$ является подалгеброй Ли в алгебре Ли всех линейных операторов $\mathcal{L}(\mathrm{A})^{(-)}$ на A.

Доказательство. Нужно показать, что если $d_1, d_2 \in \mathrm{Der\,A}$, то $[d_1, d_2] = d_1 d_2 - d_2 d_1 \in \mathrm{Der\,A}$. Рассмотрим для этого произвольные элементы $x, y \in \mathrm{A}$ и применим $[d_1, d_2]$ к произведению операторов xy. Получаем

$$\begin{gathered}
[d_1, d_2](xy) = d_1\left(d_2(xy)\right) - d_2\left(d_1(xy)\right) = \\
= d_1\left(d_2(x)y + xd_2(y)\right) - d_2\left(d_1(x)y + xd_1(y)\right) = \\
= \left((d_1 d_2)(x)\right)y + d_2(x)d_1(y) + d_1(x)d_2(y) + x\left((d_1 d_2)y\right) - \\
- \left((d_2 d_1)(x)\right)y - d_1(x)d_2(y) - d_2(x)d_1(y) - x\left((d_2 d_1)y\right) = \\
= \left((d_1 d_2)(x)\right)y + x\left((d_1 d_2)y\right) - \left((d_2 d_1)(x)\right)y - x\left((d_2 d_1)y\right) = \\
= \left([d_1, d_2]x\right)y + x\left([d_1, d_2]y\right),
\end{gathered}$$

т. е. $[d_1, d_2]$ действительно является дифференцированием.

Упражнение 4.11. Доказать ряд утверждений.

1. Пусть f — квадратичная форма на n-мерном вещественном (комплексном) пространстве V. Обозначим $\mathfrak{o}(n,f)$ множество всех кососимметричных относительно f линейных операторов в V, т. е. множество всех таких линейных операторов $\mathcal{C}$ в V, что $f(\mathcal{C}x,y) = -f(x,\mathcal{C}y)$. Доказать, что $\mathfrak{o}(n,f)$ — подалгебра Ли в $\mathcal{L}(V)^{(-)}$, где $\mathcal{L}(V)$ — ассоциативная алгебра всех линейных операторов в V.

2. Пусть f — полуторалинейная эрмитова форма на n-мерном комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$. Обозначим $\mathfrak{su}(n,f)$ множество всех кососимметричных относительно f линейных операторов в $\mathbb{C}^n$, т. е. множество всех таких линейных операторов $\mathcal{A}$ в $\mathbb{C}^n$, что $f(\mathcal{A}x,y) = -f(x,\mathcal{A}y)$. Доказать, что $\mathfrak{su}(n,f)$ — подалгебра Ли в $\mathrm{Mat}(2n,\mathbb{R})^{(-)}$.

3. В алгебре Ли $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ (в $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$) рассмотрим базис $H = E_{11} - E_{22}$, $X = E_{12}$, $Y = E_{21}$, где E_{ij} — матричные единицы (см. подразд. 4.1). Доказать, что

$$[X,Y] = H, \quad [H,X] = 2X, \quad [H,Y] = -2Y. \tag{4.44}$$

ТЕОРЕМА 4.18. Алгебра Ли $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ (соответственно, $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$) проста.

Ранее в качестве примера алгебры Ли было указано трехмерное векторное пространство $\mathbb{R}^3$, где в качестве умножения выбрано векторное произведение $[x,y] = x \times y$. Выберем в $\mathbb{R}^3$ ортонормированный базис e_1, e_1, e_2, тогда $[e_1,e_2] = e_3$, $[e_2,e_3] = e_1$, $[e_3,e_1] = e_2$. Можно показать, что и эта алгебра Ли проста.

4.7. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ КОМПАКТНЫХ ГРУПП ЛИ

Аналогом конечных групп в теории групп Ли являются компактные группы. Напомним, что линейная группа Ли $G \subseteq \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ (либо $G \subseteq \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$) *компактна*, если элементы всех матриц из G ограничены. Примерами компактных линейных групп Ли являются группа ортогональных матриц $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$, группа унитарных матриц $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ и их подгруппы Ли. Линейная группа Ли *полупроста*, если в ней нет неединичных связных нормальных абелевых подгрупп. Примерами полупростых групп являются группы $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SU}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. В этом разделе под линейной группой мы будем понимать компактную связную (но не обязательно односвязную) полупростую линейную группу Ли.

Определим аналог скалярного произведения в непрерывной группе.

ТЕОРЕМА 4.19. На компактной линейной группе Ли существует такой единственный интеграл $\int_G f(g)dg$, что для любых аналитических функций f, h на G и скаляров α, β выполнены равенства

1) $\int_G(\alpha f+\beta h)dg=\alpha\int_G f\,dg+\beta\int_G h dg$;
2 $\int_G dg=1$;
3) $\int_G|f(g)|^2dg>0$, если $f\neq 0$;
4) $\int_G f(g)dg=\int_G f(g^{-1})dg=\int_G f(gx)dg=\int_G f(xg)dg$, если $x\in G$ [10, § 6.2].

Как и в теореме 3.1, получаем, что справедливо следствие.

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть задано представление $\phi: G\to \mathrm{GL}(V)$ группы G в конечномерном комплексном пространстве V с произвольным скалярным произведением (x,y). По аналогии с формулой (3.3) ведем в V новое скалярное произведение

$$\langle x,y\rangle=\int_G(\phi(g)x,\phi(g)y)dg.$$

Тогда каждый оператор $\phi(h)$, $h\in G$ является унитарным относительного нового скалярного произведения.

Таким образом, для компактных линейных групп Ли справедлив аналог теоремы Машке (подразд. 3.2).

СЛЕДСТВИЕ 2. Любое конечномерное представление компактной группы Ли вполне приводимо.

Согласно теореме 3.7 любое неприводимое представление конечной группы всегда конечномерно. Обобщением этого результата является теорема 4.20.

ТЕОРЕМА 4.20. Каждое неприводимое комплексное представление компактной группы Ли конечномерно.

Кроме того, можно показать, что неприводимые представления связных абелевых компактных групп одномерны.

С теорией характеров представлений групп Ли можно познакомиться в [10, § 7; 16, гл. 3, § 2]. Отметим, что для представлений компактной группы Ли справедливы основные результаты гл. 3, сформулированные для конечных групп.

Напомним, что подгруппы H_1, H_2 в группе G *сопряжены*, если существует такой элемент $g\in G$, что $gH_1g^{-1}=H_2$. Это означает, что H_2 совпадает с множеством всех элементов вида ghg^{-1}, где $h\in H_1$.

Из следствия I теоремы 4.19 вытекает следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4.21. Группа всех унитарных матриц $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ является максимальной компактной подгруппой в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$. Любая другая максимальная компактная подгруппа в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ сопряжена с $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$.

Группа всех ортогональных матриц $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ является максимальной компактной подгруппой в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$. Любая другая максимальная компактная подгруппа в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$ сопряжена с $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$.

Остановимся на представлениях одного важного специального класса групп Ли.

О п р е д е л е н и е 4.9. *Максимальным тором* в группе Ли G называется максимальная связная коммутативная подгруппа Ли.

Если G — комплексная линейная группа, то можно показать, что максимальный тор является прямым произведением групп $\mathbb{C}^*$. В частности, для двумерных комплексных групп максимальным тором является $\mathbb{C}^* \times \mathbb{C}^*$ (рис. 4.8).

Приведем примеры максимальных торов для ряда групп:

• в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ максимальным тором является подгруппа диагональных матриц $\mathbf{D}(n,\mathbb{C}) \simeq \underbrace{\mathbb{C}^* \times \cdots \times \mathbb{C}^*}_{n \text{ раз}}$;

• в $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$ максимальным тором является подгруппа $\mathbf{D}(n,\mathbb{C}) \cap$ $\cap \mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$ диагональных матриц с определителем 1.

В группе G максимальный тор не является единственным.

Т Е О Р Е М А 4.22. Все максимальные торы в связной комплексной линейной группе сопряжены [16, гл. I, § 9].

Важную роль в теории представлении линейных групп играют разрешимые группы, определение которых приведено в подразд. 4.5 (см. также определение 6.1). *Подгруппой Бореля* называется максимальная связная разрешимая подгруппа Ли B в группе Ли G.

Заметим, что B содержит максимальный тор H. Примером подгруппы Бореля в группе $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$ является подгруппа $T(n,C)$ всех верхнетреугольных матриц.

Т Е О Р Е М А 4.23 (теорема Морозова, Бореля). Все подгруппы Бореля B связной комплексной группы Ли G сопряжены между собой в G.

Аналогично примерам к определению 4.8, если G — одна из групп $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SU}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SO}(n,\mathbb{C})$, то $B = T(n,\mathbb{C}) \cap G$.

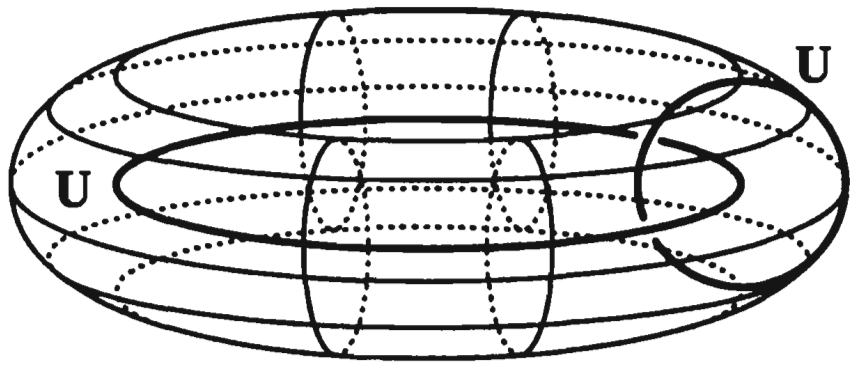


Рис. 4.8. Поверхность тора $\mathbf{U} \times \mathbf{U}$

Определение 4.10. Пусть $\phi : G \to \mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ — комплексное представление группы Ли G. Для произвольного гомоморфизма $\chi : G \to \mathbb{C}^*$ через V_χ обозначим подпространство, состоящее из всех таких векторов $v \in V$, что $\phi(g)v = \chi(g)v$ для любого $g \in G$. Ненулевое подпространство V_χ называется *весовым*, ненулевые векторы из V_χ — *весовыми*, а функция χ (аналог характера представления для бесконечной группы) в этом случае называется *весом*.

Другими словами, каждый весовой вектор v является собственным для каждого линейного оператора $\phi(g)$, $g \in G$ с собственным значением $\chi(g)$. Например, рассмотрим тождественное представление группы верхнетреугольных матриц $G = T(n, \mathbb{C})$, когда каждой матрице из этой группы сопоставляется эта же матрица. Тогда первый базисный вектор e_1 является единственным собственным вектором для каждой матрицы из $G = T(n, \mathbb{C})$. Заметим, что если

$$g = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} \in T(n, \mathbb{C}),$$

то $ge_1 = a_{11}e_1$. Поэтому $\chi(g) = a_{11}$.

Если H — максимальный тор в G, то H является компактной абелевой группой. Следовательно, все ее неприводимые представления одномерны. Поэтому, если задано конечномерное представление $\phi : G \to \mathrm{GL}(V)$ связной компактной группы Ли G с максимальным тором H, то $V = V_{\lambda_1}(H) \oplus \dots \oplus V_{\lambda_s}(H)$, где $\lambda_1, \dots, \lambda_s$ — веса представления ϕ, а $V_{\lambda_i}(H)$ — соответствующие весовые подпространства.

Например, пусть G — группа унитарных матриц $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$. Тогда в качестве H можно взять подгруппу всех диагональных матриц, принадлежащих $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$. Это означает, что H состоит из всех матриц g вида

$$g = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

где каждое комплексное число λ_j имеет модуль, равный 1. Группа $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$ является группой линейных операторов в эрмитовом пространстве $V = \mathbb{C}^n$ с базисом $e_1, \dots, e_n$. Можно показать, что каждый вектор e_j весовой с весом λ_j. Поэтому $V = V_{\lambda_1} \oplus \dots \oplus V_{\lambda_n}$.

Определение 4.11. Весовой вектор $v \in V_j \setminus 0$ для H называется *старшим*, если для каждого элемента $g \in B$ найдется

такое число $\chi_g \in \mathbb{C}$, что $\phi(g)v = \chi_g v$. Функция $g \mapsto \chi_g$, $g \in B$ называется *старшим весом*.

Заметим, что старший вес является гомоморфизмом групп $\chi : B \to \mathbb{C}^*$.

ТЕОРЕМА 4.24. Неприводимое конечномерное представление связной полупростой алгебраической группы G однозначно, с точностью до эквивалентности, определяется своим старшим весом [10, § 7.2, теорема 1].

4.8. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП $\mathbf{SU(2,\mathbb{C})}$, $\mathbf{SO(3,\mathbb{R})}$, $\mathbf{SO(4,\mathbb{R})}$

Применим рассмотренные соотношения к описанию неприводимых представлений компактных групп $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ и $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Укажем сначала серию неприводимых представлений группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ [81, с. 50 — 51]. Имеется естественное комплексное неприводимое представление Ψ_n группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ в пространстве P_n однородных комплексных многочленов от X, Y степени n, а именно матрицы

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

действующие на пространстве P_n как операторы замены переменных, Другими словами, результат действия такой матрицы на однородный многочлен $A \circ f(X,Y) = f(aX+cY, bX+dY)$ (знак $\circ$ отвечает действию матрицы B на переменные (X,Y) в многочлене).

Борелевская подгруппа группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ состоит из всех верхнетреугольных матриц

$$B = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & d \end{pmatrix}, \quad a, d \in \mathbb{C}^*, \quad b \in \mathbb{C}.$$

Старшим вектором этого представления является X^n, так как $B \circ X^n = a^n X^n$.

Легко видеть, что в представлении Ψ_n группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ матрица $-E$ действует тождественно, если n — четная степень. Следовательно, при четном $n = 2k$ в силу теоремы 4.13 получается неприводимое комплексное представление группы

$$\mathrm{SO}(3,\mathbb{C}) \simeq \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})/\{\pm E\} \simeq \mathrm{SO}_+(1,3)$$

степени $2k+1$.

Рассмотрим ограничение представления Ψ_n группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ на подгруппу $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$. Напомним, что подгруппа $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ в группе $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ состоит из всех матриц вида

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ \bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix},$$

где $a, b \in \mathbb{C}$, причем $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Определим представление Φ_n группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ в пространстве P_n как ограничение представления Ψ_n группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ в P_n на подгруппу $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$. Получается неприводимое представление группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ со старшим вектором X^n. Действительно, ее подгруппа Бореля $B = \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \cap T(2,\mathbb{C})$ состоит из всех матриц

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & \bar{a} \end{pmatrix},$$

в которых $a \in \mathbb{C}$, и $|a| = 1$, поэтому

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & \bar{a} \end{pmatrix} \circ X^n = a^n X^n.$$

При четном $n = 2k$ получается неприводимое комплексное представление $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ степени $2k+1$.

ТЕОРЕМА 4.25. *Любое неприводимое представление группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ эквивалентно представлению Φ_n на P_n. Любое неприводимое представление группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ эквивалентно представлению Φ_{2k} на P_{2k}. При разных n и $2k$ получаются неэквивалентные представления групп $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ и $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$.*

Представление Φ_n группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ можно описать и в других терминах. Пусть H_n — пространство всех однородных комплексных многочленов f степени n от трех переменных x, y, z, удовлетворяющих дифференциальному уравнению

$$\Delta f = 0,$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Действие $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ индуцировано естественным действием на координатах трехмерных векторов, т. е. матрица $A \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ переводит вектор со столбцом координат $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ в ортонормирован-

ном базисе в вектор, столбец координат которого в этом же базисе равен $A\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$. Это представление имеет размерность $2n+1$ над $\mathbb{C}$ [47], и оно эквивалентно представлению в P_n. Таким образом, получаются все неприводимые представления $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, т. е. в строгом математическом смысле они исчерпываются представлениями $D^{(j)}$ из подразд. 4.3 с целочисленными индексами j. Явный вид матриц указанных неприводимых представлений групп $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ и $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ приведен в [1, § 3.7].

Опишем теперь неприводимые представления компактной группы $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$. По теореме 4.15 имеется сюръективный гомоморфизм групп

$$f : \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(4,\mathbb{R}), \quad \ker f = \{(E,E),\,(-E,-E)\}.$$

Таким образом, для описания неприводимых представлений группы $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$ нужно брать те неприводимые представления группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$, в которых $(-E)\otimes(-E)$ действует тождественным образом. В силу теоремы 3.15, которая верна и для компактных групп, каждое неприводимое представление группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ совпадает с представлением $\Phi_n \otimes \Phi_m$ на пространстве $P_n \otimes P_m$, где Φ_n, Φ_m — неприводимые представления группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ на указанных выше пространствах многочленов P_n, P_m. Тогда результат действия пары матриц

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ \bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c & -d \\ \bar{d} & \bar{c} \end{pmatrix} \in \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}) \times \mathrm{SU}(2,\mathbb{C}), \qquad |a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1 \tag{4.45}$$

на многочлен

$$f(X,Y) \otimes g(Z,T) \in P_n \otimes P_m \tag{4.46}$$

равен

$$f(aX + \bar{b}Y, -bX + \bar{a}Y) \otimes g(cZ + \bar{d}T, -dZ + \bar{c}T). \tag{4.47}$$

В частности, результат применения $(-E)\otimes(-E)$ к (4.46)

$$f(-X,-Y) \otimes g(-Z,-T) = (-1)^{n+m} f(X,Y) \otimes g(Z,T).$$

Следовательно, для того чтобы получалось неприводимое представление группы $\mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$, необходимо и достаточно, чтобы $n+m$ было четным числом. Отметим, что пространство $P_n \otimes P_m$ совпадает с пространством $P_{n,m}$ многочленов от четырех переменных X, Y, Z, T, однородных по X, Y степени n и однородных по Z, T степени m. Итак, справедлива следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4.26. Пусть $P_{n,m}$ — пространство многочленов от четырех переменных X, Y, Z, T, однородных по X, Y степени n и однородных по Z, T степени m, причем $n + m$ четно. Тогда (4.45) — (4.47) задают $(n + 1)(m + 1)$-мерное неприводимое представление группы $\mathrm{SO}(4, \mathbb{R})$. Обратно, каждое неприводимое представление $\mathrm{SO}(4, \mathbb{R})$ имеет указанный вид. При разных наборах n, m эти представления неэквивалентны.

Подробнее с неприводимыми представлениями других компактных групп можно также ознакомиться в [26]. Общий подход к представлениям групп $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$, $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C})$, связанный с рассмотрениями разбиений числа n, см. п. 3.11.

4.9. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$ И $\mathbb{O}(1, 3)$

Конечномерные неприводимые представления групп $\mathrm{GL}(n, C)$ описаны в п. 3.11. Можно показать, что ограничение каждого неприводимого конечномерного представления группы $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ на подгруппу $\mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$ задает неприводимое конечномерное представление группы $\mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$ и таким образом получаются все неприводимые конечномерные представления этой группы [5, гл. 8]. Там же описаны конечномерные неприводимые комплексные представления групп $\mathrm{U}(n, \mathbb{C})$, $\mathbb{O}(n, \mathbb{R})$, $\mathrm{SO}(n, \mathbb{R})$, $\mathrm{SO}(p, q)$, $\mathrm{Sp}(m, n)$ из подразд. 1.7.

Опишем неприводимые, не обязательно конечномерные, представления групп $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$ и $\mathbb{O}(1, 3)$, не являющихся компактными. Начнем с конечномерных неприводимых представлений группы $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$.

Рассмотрим векторное пространство $R_{r,s}$ всех комплексных многочленов $p(z, \bar{z})$ от двух переменных $z, \bar{z}$, где $\bar{z}$ — число, комплексно сопряженное к z, причем степень $p(z, \bar{z})$ по z не больше r, а степень по $\bar{z}$ не больше s, где $r, s \in \mathbb{Z}$. Зададим на пространстве $R_{r,s}$ представление $\Phi_{r,s}$ группы $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$ по следующему правилу. Если

$$g = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2, \mathbb{C}), \tag{4.48}$$

то

$$\Phi_{r,s}(g)\,[p(z, \bar{z})] = \\ = (a_{12}z + a_{22})^r \overline{(a_{12}z + a_{22})}^s p\left(\frac{a_{11}z + a_{21}}{a_{12}z + a_{22}}, \frac{\bar{a}_{11}\bar{z} + \bar{a}_{21}}{\bar{a}_{12}\bar{z} + \bar{a}_{22}}\right). \tag{4.49}$$

Построенное представление $\Phi_{r,s}$ по аналогии с подразд. 4.5 называется *спинорным*. Так, если $r = s = 1$, то

$$\Phi_{11}(g)[p(z,\bar{z})] = (v\bar{v})p\left(\frac{u}{v}, \frac{u}{\bar{v}}\right),$$

где $u = a_{11}z + a_{21}$, $v = a_{12}z + a_{22}$.

ТЕОРЕМА 4.27. Каждое спинорное представление группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ является неприводимым. Каждое неприводимое конечномерное представление группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ эквивалентно спинорному [67, с. 116 — 120].

Упражнение 4.12. Какому спинорному представлению эквивалентно представление группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ из подразд. 4.8? Какому спинорному представлению эквивалентно конечномерное неприводимое представление группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, являющееся ограничением на $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ неприводимого представления группы $\mathrm{GL}(2,\mathbb{C})$, связанного с разбиением $m = (m_1, \ldots, m_k)$ (см. подразд. 3.11)?

Группа $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ не является компактной, и для нее существуют также бесконечномерные неприводимые представления. Приведем серию бесконечномерных неприводимых представлений группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, называемых *основной серией*. Рассмотрим пространство $\mathcal{L}_2(\mathbb{C})$ всех *квадратично интегрируемых* функций на $\mathbb{C}$, т. е. таких, для которых выполнено условие

$$\int_z |f(z)|^2 dz < \infty,$$

где для любой комплексной функции $h(z)$, $z = x + iy$, имеем

$$\int_z h(z)dz = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} h(x,y)dxdy. \tag{4.50}$$

В пространстве $\mathcal{L}_2(\mathbb{C})$ имеется эрмитово скалярное произведение

$$(f_1, f_2) = \int_z f_1(z)\overline{f_2(z)}dz.$$

Пусть $m \in \mathbb{Z}$ и $\rho \in \mathbb{C}$. Зададим в $\mathcal{L}_2(\mathbb{C})$ представление $\Psi_{m,\rho}$ группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ по следующему правилу. Если g из (4.48), то

$$\Psi_{m,\rho}(g)\,[f(z)] =$$
$$= |a_{12}z + a_{22}|^{-m-i\rho-2}(a_{12}z + a_{22})^m f\left(\frac{a_{11}z + a_{21}}{a_{12}z + a_{22}}\right) \tag{4.51}$$

(обобщение комплексного представления многочленов (4.49) на произвольные квадратично интегрируемые функции).

ТЕОРЕМА 4.28. Представление $\Psi_{m,\rho}$ неприводимо в том смысле, что в $\mathcal{L}_2(\mathbb{C})$ нет замкнутых ненулевых инвариантных подпространств [67, с. 131].

Приведем другую эквивалентную реализацию введенного представления $\Psi_{m,\rho}$. Для этого рассмотрим пространство $\mathcal{L}_2^m(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}))$ всех измеримых функций f на $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$ со следующими условиями:

1) для любых $u \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ и $\omega \in \mathbb{R}$ выполнено равенство

$$f\left[\begin{pmatrix} \exp(-i\omega) & 0 \\ 0 & \exp(i\omega) \end{pmatrix} u\right] = \exp(im\omega) f(u),$$

2) сходится интеграл

$$\int_{\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})} |f(u)|^2 du < \infty, \tag{4.52}$$

взятый по группе $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$.

Интеграл (4.52) определен так же, как и в теореме 4.19, за исключением условия 2). В данном случае он является аналогом несобственного интеграла (4.50).

В пространстве $\mathcal{L}_2^m(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}))$ зададим представление $\Psi_{m,\rho}$ по следующему правилу:

$$\Psi_{m,\rho}(g)\,[f(u)] = \frac{\alpha(ug)}{\alpha(u\bar{g})} f(u\bar{g}), \tag{4.53}$$

где для матрицы $g \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ из (4.48) имеем

$$\alpha(g) = |a_{22}|^{i\rho-m-2} a_{22}^m. \tag{4.54}$$

Можно показать, что это представление индуцировано представлением подгруппы $\mathrm{T}(2,\mathbb{C})$ всех верхнетреугольных матриц из группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$.

Также можно показать, что представления $\Psi_{m,\rho}$ и $\Psi_{-m,-\rho}$ *унитарно эквивалентны* [67, с. 145]. Это означает наличие унитарного оператора $\xi : \mathcal{L}_2^m(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})) \to \mathcal{L}_2^{-m}(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}))$, задающего эквивалентность представлений в с соответствии определением 3.1.

В [67, с. 205—211] введено понятие *вполне неприводимого представления*, обобщающего на бесконечномерный случай понятие неприводимого представления. Отмечается, что конечномерное неприводимое представление всегда вполне неприводимо.

ТЕОРЕМА 4.29. Всякое вполне неприводимое представление группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ задается парой чисел (m,ρ), где m — целое число, определяющее пространство представления, ρ — комплексное число, определяющее вместе с m вид представления. Если $\rho^2 \neq -(|m|+2n)^2$ для любого натурального числа n, то вполне неприводимое представление группы

$\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ изоморфно введенному выше представлению $\Psi_{m,\rho}$. Если $\rho^2 = -(|m|+2n)^2$ для некоторого натурального числа n, то представление изоморфно спинорному конечномерному представлению $\Phi_{r,s}$, где

$$r = \frac{|m|}{2} + \frac{i\rho}{2} - 1, \quad s = -\frac{|m|}{2} + \frac{i\rho}{2} - 1.$$

Представления, соответствующие парам (m,ρ) и $(-m,-\rho)$, унитарно эквивалентны [67, с. 251, 252].

Приступим теперь к описанию неприводимых представлений группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$. Согласно теореме 4.14, имеется изоморфизм групп $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})/\{\pm E\} \simeq \mathrm{SO}_+(1,3)$. Поэтому неприводимые представления группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$ получаются из тех неприводимых представлений группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$, указанных в теореме 4.29, в которых матрица $-E$ действует тождественно.

У п р а ж н е н и е 4.13. Найти неприводимые представления $\Psi_{m,\rho}$ и $\Phi_{r,s}$, в которых матрица $-E$ действует тождественно.

Как отмечено в упражнении 1.23 и примере 4) на с. 51, имеются разложения

$$\mathbb{O}(1,3) = \mathrm{SO}_+(1,3) \leftthreetimes (\langle s\rangle_2 \times \langle t\rangle_2) = \mathbb{O}_+(1,3) \times \langle j\rangle_2,$$
$$\mathbb{O}_+(1,3) = \mathrm{SO}_+(1,3) \leftthreetimes \langle s\rangle_2,$$

где $j = st = -E$ и s, t из (1.17), т. е.

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad t = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4.55}$$

Поэтому мы расширим все неприводимые представления группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$ до неприводимых представлений группы $\mathbb{O}_+(1,3)$, а затем воспользуемся следствием из теоремы 3.15. Приведем окончательный результат.

Рассмотрим пространство $\mathcal{L}_2^0(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}))$ всех измеримых функций f на $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ с условием (4.52), причем $f(\gamma u) = f(u)$ для всех матриц

$$\gamma = \begin{pmatrix} \exp(-i\omega) & 0 \\ 0 & \exp(i\omega) \end{pmatrix}, \quad \omega \in \mathbb{R}.$$

Если $\rho \in \mathbb{C}$ — комплексное число, причем $\rho \neq -4n^2$, $n \in \mathbb{Z}$, то определим представление Θ_ρ группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ в $\mathcal{L}_2^0(\mathrm{SL}(2,\mathbb{C}))$ по следующему правилу. Если g из (4.48), то

$$\Theta_\rho\,[f(u)] = \frac{\alpha(ug)}{\alpha(u\bar{g})} f(u\bar{g}),$$

где $\alpha(g) = |a_{22}|^{i\rho-2}$ (см. (4.53)). Другими словами, мы рассматриваем представление $\Psi_{0,\rho}$. Доопределим $\Theta_\rho(s)$ для матрицы s, полагая

$$\Theta_\rho(s)\{f(u)\} = \varepsilon f\left[u\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\right],$$

где $\varepsilon = \pm 1$. Соответственно получаются два бесконечномерных неприводимых представления $D^+_{0,\rho}$ и $D^-_{0,\rho}$ группы $\mathbb{O}_+(1,3)$. Можно показать, что эти представления вполне неприводимы.

Если $\rho = -4n^2$ для некоторого натурального числа n, то в качестве представлений $D^+_{0,\rho}$ и $D^-_{0,\rho}$ группы $\mathbb{O}_+(1,3)$ возьмем $(r+1)$-мерные спинорные представления $\Phi_{r,r}$ группы $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ на пространстве $R_{r,r}$, где $m = 0$ и $r = s = +\dfrac{i\rho}{2} - 1$, см. теорему 4.27.

Рассмотрим теперь представление $\Psi_{m,0}$ группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$ в пространствах $\mathcal{L}_2^m(U)$ и $\mathcal{L}_2^{-m}(U)$. Эти представления эквивалентны, т. е. существует изоморфизм пространств $W : \mathcal{L}_2^{-m}(U) \to \mathcal{L}_2^m(U)$, при котором $W\Psi_{-m,0}W^{-1} = \Psi_{m,0}$. Зададим для матрицы s из (4.55) оператор $\Psi(s)$ в пространстве $\mathcal{L}_2^m(U)$ по правилу

$$\Psi(s)\,[f(u)] = \kappa W\left\{f\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}u\right]\right\},$$

где

$$\kappa = \begin{cases}(-1)^{\frac{m}{2}}, & \text{если } m \text{ четное};\\ (-1)^{\frac{m-1}{2}}, & \text{если } m \text{ нечетное.}\end{cases}$$

В результате получается представление $D^+_{\frac{m}{2},0}$ группы $\mathbb{O}_+(1,3)$ в пространстве $\mathcal{L}_2^m(U)$. Аналогично строится представление $D^-_{\frac{m}{2},0}$ группы $\mathbb{O}_+(1,3)$ в пространстве $\mathcal{L}_2^m(U)$, если положить

$$\Psi(s)\{f(u)\} = -\kappa W\left\{f\left[u\left(\begin{smallmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{smallmatrix}\right)\right]\right\}.$$

Пусть ν — полуцелое положительное число и ρ — ненулевое комплексное число. Положим $m = 2\nu \in \mathbb{Z}$. В пространстве $\mathcal{L}_2^m(U) \oplus \mathcal{L}_2^{-m}(U)$, состоящем из пар функций $\{f_1(u), f_2(u)\}$, определим оператор S по правилу

$$S\{f_1(u), f_2(u)\} = \kappa\left\{f_2\left[u\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\right], (-1)^m f_1\left[u\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\right]\right\}.$$

Получающееся представление группы $\mathbb{O}_+(1,3)$ в пространстве

$$\mathcal{L}_2^m(U) \oplus \mathcal{L}_2^{-m}(U),$$

при котором $s \mapsto S$, обозначается $D_{\nu,\rho}$. Для получения неприводимого представления группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3) = \mathbb{O}_+(1,3) \times \langle j\rangle_2$,

см. пример на с. 50, случай 4), во всех случаях воспользуемся следствием на с. 181 (гл. 3) и доопределим действие центральной симметрии j как $\pm E$.

ТЕОРЕМА 4.30. Каждое вполне неприводимое представление группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ эквивалентно одному из представлений $D^+_{0,\rho}$, $D^-_{0,\rho}$, $D^+_{\nu,0}$, $D^-_{\nu,0}$, $D_{\nu,\rho}$, где ν — полуцелое положительное число, ρ — ненулевое комплексное число. Все эти представления попарно неэквивалентны [67, гл. 3, § 16.7].

Опишем теперь все неприводимые комплексные представления группы Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$. Напомним, что группа $\mathcal{P}(1,3)$ состоит из всех аффинных преобразований пространства Минковского $M(1,3)$ вида $x \mapsto \alpha(x)+a$, где $\alpha \in \mathbb{O}(1,3)$. Таким образом, эта группа изоморфна полупрямому произведению $\mathcal{P}(1,3) \simeq M(1,3) \leftthreetimes \mathbb{O}(1,3)$, где каждый вектор a из пространства $M(1,3)$ отождествляется со сдвигом (трансляцией) $x \mapsto x+a$. Как отмечено в [26, гл. III, § 6.7], при любом конечномерном представлении группы $\mathcal{P}(1,3)$ подгруппа трансляций $M(1,3)$ действует тождественно (т. е. не участвует). Поэтому представление в данном случае сводится к конечномерному представлению группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$.

Рассмотрим бесконечномерные представления группы Пуанкаре. Для простоты приведем описание неприводимых представления группы $\mathcal{P}_{++}(1,3) \simeq M(1,3) \leftthreetimes \mathrm{SO}_+(1,3)$. Таким образом, каждый элемент из группы $\mathcal{P}_{++}(1,3)$ можно отождествить с парой (a,α), где $a \in M(1,3)$, $\alpha \in \mathrm{SO}_+(1,3)$. Можно показать, что каждое из перечисленных множеств инвариантно относительно операций группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$:

1) поверхность $H_{\varepsilon m}$, $\varepsilon = \pm 1$, состоящая из всех точек

$$p = (p_0, p_1, p_2, p_3) \in M(1,3) \tag{4.56}$$

с условием $p_0^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2 = k^2, \quad k > 0$;

2) поверхность $K_{\pm 1}$, состоящая из всех точек (4.56) с условием

$$p_0^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2 = 0, \quad p_0 \neq 0;$$

3) поверхность Γ_k, состоящая из всех точек (4.56) с условием

$$p_0^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2 = -k^2, \quad k > 0;$$

4) точку 0=(0,0,0,0).

Для первого случая рассмотрим неприводимое представление Φ_n группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$ в пространстве P_n всех комплексных однородных многочленов степени n от двух переменных X, Y. Обо-

значим через $\mathcal{L}^2(H_{\varepsilon m}, P_n)$ гильбертово пространство* квадратично интегрируемых функций f на $H_{\varepsilon m}$, принимающих значения в P_n. Зададим представление $\Phi_{m,n,\varepsilon}$ группы $\mathcal{P}_{++}(1,3)$ в пространстве $\mathcal{L}^2(H_{\varepsilon m}, P_n)$ по правилу

$$\left[\Phi_{m,n,\varepsilon}((a,\alpha))\right] f(p) = \exp\left(i\sum_{j=0}^{3} p_j a_j\right) \Phi_n\left[\alpha_b(p)\alpha\alpha_b^{-1}(p\alpha)\right] f(p\alpha),$$

где $p, a \in M(1,3)$, $\alpha \in \mathrm{SO}_+(1,3)$, $f \in \mathcal{L}^2(H_{\varepsilon m}, P_n)$, причем

$$\alpha_b(p) = \begin{pmatrix} p_0 & p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & 1+p_1^2(1+p_0)^{-1} & p_1p_2(1+p_0)^{-1} & p_1p_3(1+p_0)^{-1} \\ p_2 & p_2p_1(1+p_0)^{-1} & 1+p_2^2(1+p_0)^{-1} & p_2p_3(1+p_0)^{-1} \\ p_3 & p_3p_1(1+p_0)^{-1} & p_3p_2(1+p_0)^{-1} & 1+p_3^2(1+p_0)^{-1} \end{pmatrix}.$$

Представления, соответствующие остальным поверхностям $K_{\pm 1}, \Gamma_k$ и 0, описаны в [26, гл. 3, § 6.7].

Упражнение 4.14. Представлением какой группы в P_n индуцировано представление $\Phi_{m,n,\varepsilon}$?

Контрольные вопросы

1. Доказать, что представление Φ_n группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$ из подразд. 4.8 в пространстве однородных многочленов P_n неприводимо.

2. Пусть $\mathbb{H}$ — тело кватернионов. Доказать, что оно является евклидовым пространством относительно скалярного произведения, при котором $(z,z) = \det z$. Будет ил базис $(1, I, J, K)$ ортонормированным относительно этого скалярного произведения?

3. Пусть $\mathbb{H}_0$ — множество кватернионов с нулевым следом. Доказать, что отображение $P(A)X = AXA^{-1}, X \in \mathbb{H}_0$ задает вещественное представление $A \mapsto P(A)$ группы $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$. Доказать, что образ P совпадает с группой всех ортогональных преобразований $\mathbb{H}_0$ с определителем, равным 1.

4. Будет ли алгебра Ли $\mathbb{H}^-$ простой?

5. Доказать, что все матрицы с нулевым следом образуют идеал в алгебре Ли $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})^{(-)}$.

6. Доказать, что все квадратичные матрицы размера n с четными коэффициентами образуют идеал в алгебре всех матриц размера n с целыми коэффициентами.

7. Найти инфинитезимальные операторы и конечномерные неприводимые представления группы $\mathcal{O}(1,2)$.

---

*Гильбертовым называют бесконечномерное вещественное или комплексное пространство со скалярным произведением и рядом дополнительных условий. В данном случае скалярное произведение функций f, g, имеет вид $(f,g) = \iint_{x,y} f\bar{g}dxdy$.

ГЛАВА 5

ПРИЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ ГРУПП В ФИЗИКЕ И ХИМИИ

Рассмотрены стандартные приложения теории групп в физических и химических задачах. Кратко изложены алгебраический формализм классической и квантовой механики, примеры правил отбора по симметрии в молекулярной спектроскопии и квантовой химии. Обсуждаются зонная структура и спектры кристаллов, фазовые переходы 2-го рода и другие свойства твердых тел, обусловленные трансляционной симметрией, а также использование групп вращений и групп перестановок в описании линейных молекул, атомов и атомных ядер. Показана связь инвариантных характеристик элементарных частиц, в частности спина, с представлениями групп Лоренца и Пуанкаре.

5.1. АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ МЕХАНИКИ

Описание классической механической системы основано на зависимостях от времени t ее n (обобщенных) координат $q = \{q_i(t)\}$ с наложенными связями

$$f_k(q_1, \ldots, q_n, t) = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, s.$$

Возможным состояниям системы (например, совокупности взаимодействующих классических частиц, или *материальных точек*) отвечают области $(n+1)$-мерного пространства $V_{q,t}$ непрерывных переменных $\{q_1, \ldots, q_n, t\}$, в котором определены *функции состояния*, такие как функция Лагранжа L и Гамильтона H^*:

$$L(q, \dot{q}, t) = T - U,$$

$$H(q, p, t) = T + U = \sum p_i \dot{q}_i - L, \tag{5.1}$$

*Дифференцирование по времени в механике часто обозначают точкой над буквой: $v_x = dx/dt \equiv \dot{x}$.

где $\dot{q} = \{dq_i/dt\}$ — обобщенные скорости; $p = \{\partial T/\partial \dot{q}_i\}$ — обобщенные импульсы*; $T(q, \dot{q})$, $U(q)$ — соответственно кинетическая и потенциальная энергия в консервативных системах**.

В нерелятивистской классической механике все инерциальные (т. е. связанные соотношением $q'(t) = q(t) + v_{qq'}t$, где $v_{qq'} = \text{const}$) системы координат эквивалентны, а сами координаты $q(t)$ и скорости $\dot{q}(t)$ — гладкие (непрерывно дифференцируемые) функции независимого параметра t. Таким образом, пространство переменных в классической механике:

$$V_{q,t} = V_q \oplus V_t, \tag{5.2}$$

где $V_q \simeq E(n)$ — n-мерное евклидово пространство координат (*конфигурационное пространство*); $V_t \simeq \mathbb{R}^1$ — ортогональная ему координата времени; все преобразования $V_{q,t}$ действуют только в V_q, не затрагивая «абсолютного» времени t.

В релятивистской механике при сохранении эквивалентности всех инерциальных систем координат скорости $\dot{q}_i$ ограничены сверху значением $c \geqslant |\dot{q}|$ (*скоростью света*), отчего пространство $V_{q,t}$ приобретает неевклидову метрику и в нем появляются преобразования, «перемешивающие» q и t (см. подразд. 4.3).

В нерелятивистской квантовой механике пространство $V_{q,t}$ сохраняет структуру прямой суммы пространств (5.2), однако функции $q(t), p(t)$ уже отнюдь не гладкие, так как квантовые частицы не имеют определенных траекторий, и их движение в конфигурационном пространстве «размыто» флуктуациями $\Delta q(t)$, $\Delta p(t)$ [52, т. 3, с. 17].

Положение и скорость каждой частицы в момент времени t можно предсказать лишь с некоторой вероятностью $0 \leqslant P(q, \dot{q}, t) \leqslant\leqslant 1$ — последняя распределена в конфигурационном пространстве уже непрерывно. Поэтому состояния квантовых систем описывают не их координатами q и импульсами p, а непрерывными комплексными *волновыми функциями* $\Psi(q_1, \ldots, q_n, t)$ или $\Phi(p_1, \ldots, p_n, t)$, квадраты модулей которых $\Psi^*\Psi$ ($\Phi^*\Phi$) полагают равными плотностям вероятности соответствующих значений $q(p)$.

Наконец, в *релятивистской квантовой механике*, являющейся частью *квантовой теории поля*, «квантовые» аргументы $\{q, t\}$ бесконечного набора волновых (либо *полевых*) функций заданы в «релятивистском» неевклидовом пространстве $V_{q,t}$.

---

*В разделах механики, основанных на гамильтоновом формализме, вместо обобщенных скоростей $\{\dot{q}_i\}$ обычно используют обобщенные импульсы $\{p_i\}$. Для простейшего случая материальной точки $p_i = m\dot{q}_i$, где $q_i = x, y, z$ и m — масса.

**В ряде систем (например, при движении заряда в магнитном поле) $U = U(q, \dot{q})$.

Таким образом, нерелятивистское приближение отделимости времени t от пространства обобщенных координат V_q выполняется при $|\dot{q}| << c$, где c — предельная скорость, а классическое приближение непрерывности $q(t)$ — при $\Delta q << D$, где D — характерный масштаб координат рассматриваемой системы, а Δq — размеры их флуктуаций.

Далее мы будем называть классическими как релятивистские, так и нерелятивистские механические системы, в которых заданы непрерывные функции $q(t), p(t)$.

5.1.1. Классическая механика

Обобщенные координаты q и обобщенные скорости $\dot{q}$ в n-мерном конфигурационном пространстве классической механики V_q связаны в систему n линейных дифференциальных уравнений 2-го порядка — *уравнений Лагранжа*

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0; \quad i = 1, 2 \ldots, n, \tag{5.3}$$

где L — функция Лагранжа из (5.1).

Решениями (5.3) являются траектории $q(t) \in V_q \oplus V_t$. Рассматривая обобщенные импульсы p как независимые переменные, можно представить множество состояний классической системы по-другому — непрерывными траекториями $p(q,t)$ в $2n$-мерном *фазовом пространстве* $V'_{q,p}$. Функции $p(q,t)$ являются решениями системы $2n$ линейных дифференциальных уравнений 1-го порядка — *уравнений Гамильтона*

$$\begin{aligned} \{p_i, H\} &= \frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ \{q_i, H\} &= -\frac{\partial H}{\partial p_i}, \end{aligned} \tag{5.4}$$

эквивалентной уравнениям Лагранжа (5.3). В системе (5.4) $\{\}$ — скобки Пуассона (см. далее).

Вид функций (5.1) и уравнений (5.3, 5.4) определяется симметрией пространств V_q и $V'_{q,p}$. Так, например, симметрию трехмерного конфигурационного пространства для движущейся материальной точки описывает группа Евклида $\mathcal{E}(3)$ (см. подразд. 4.3), неприводимыми представлениями которой задаются законы сохранения импульса и кинетической энергии (однородность пространства), а также момента импульса относительно

произвольной точки (изотропность пространства). При движении классической частицы в поле неподвижного центра, которому соответствует группа $\mathbb{O}(3,\mathbb{R}) \subset \mathcal{E}(3)$, сохраняются момент импульса частицы относительно этого центра и ее полная энергия $T+U$.

Дифференциальные соотношения (5.4) задают в фазовом пространстве $V'_{q,p}$ алгебру инфинитезимальных операторов, порожденную группой Ли пространства координат $G(V_q)$, с лиевским умножением $[x,y]$ $(x,y \in T_{G(q)})$. Эта вещественная алгебра содержит (всюду плотно) алгебру Вейля $A_n(\mathbb{R})$ с коммутационными соотношениями (4.32) (см. подразд. 4.4). В роли лиевской операции в классической механике выступают *скобки Пуассона* физических величин A и B:

$$\{A,B\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} \right). \tag{5.5}$$

Выбирая в (4.36) в качестве дифференциального оператора F функцию Гамильтона (5.1), можно преобразовать уравнения Гамильтона из гл. 4 к виду (5.4). Производная любой непрерывной функции координат и импульсов $f(p,q,t)$ от времени есть

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H,f\}. \tag{5.6}$$

Если p и q явно не зависят от времени, из (5.6) можно вывести канонические уравнения Гамильтона классической механики:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}. \tag{5.7}$$

Заметим, что координата q_i и импульс p_i, сопряженные по (5.5)

$$\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$$

(см. (4.32)), в классической механике могут быть измерены одновременно с любой точностью, поскольку $p_i(t), q_i(t)$ — гладкие функции, а t — независимый параметр. Это обстоятельство соответствует *детерминированности* классического движения. Так, положение материальной точки в момент времени $t_0+\delta t$ с точностью до бесконечно малых высшего порядка определяется положением и скоростью, измеренными в момент t_0:

$$q(t_0+\delta t) = q(t_0) + \dot{q}(t_0)\delta t + o(\delta t). \tag{5.8}$$

5.1.2. Релятивистская механика

В классической релятивистской механике используются подалгебры алгебры $so(1,n)$, в свою очередь представляющей частный случай алгебры $so(m,n)$ — т. е. касательного пространства к группе $\mathrm{SO}(m,n)$, в котором заданы лиевское умножение $[x,y]$ и неевклидова метрика:

$$(x,y) = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i - \sum_{i=m+1}^{m+n} x_i y_i.$$

Четырехмерному пространству Минковского $M(1,3)$, представляющему неевклидово пространство—время релятивистской механики, соответствует алгебра $so(1,3)$.

Интервал между произвольными точками 1 и 2 в пространстве $M(1,3)$ равен

$$s^2(x^{(1)},x^{(2)}) = (\Delta x_0)^2 - (\Delta x_1)^2 - (\Delta x_2)^2 - (\Delta x_3)^2 = c^2(\Delta t)^2 - (\Delta l)^2,$$

где $x_0 = ct$, (x_1,x_2,x_3) — декартовы координаты; $\Delta x_i = x_i^{(1)} - x_i^{(2)}$, Δl — расстояние между точками 1 и 2 в обычном трехмерном пространстве.

Две точки в $M(1,3)$, называемые *событиями*, отстоят одна от другой на времениподобный интервал, если $s^2 > 0$, или на пространственноподобный интервал, если $s^2 < 0$.

Пространственноподобные и времениподобные области $M(1,3)$ по отношению к событию $0 = (0,0,0,0)$ (точке начала координат) показаны на рис. 5.1, где трехмерное физическое пространство (x_1,x_2,x_3) условно обозначено одной его координатой x_i.

Области времениподобных и пространственноподобных интервалов $s^2(x,0)$ разделены гиперповерхностью $s^2 = 0$: *световым конусом*, образованным «светоподобными» точками (например, состояниями фотона, распространяющегося со скоростью c в трехмерном пространстве).

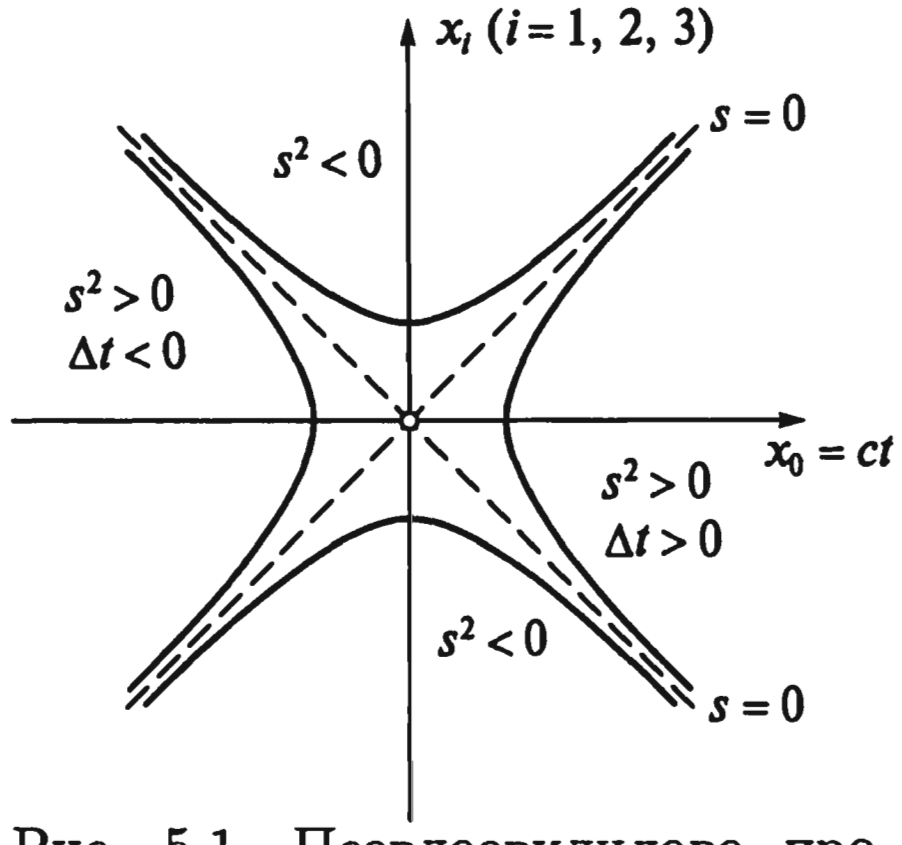


Рис. 5.1. Псевдоевклидово пространство—время релятивистской механики (схема). Штриховые линии — граница светового конуса $x_i = \pm ct$

За пределами светового конуса находится связная пространственноподобная область (части которой на рис. 5.1 переводятся одна в другую поворотами в трехмерном пространстве), а его внутренние области

с $x_0 > 0$ (абсолютного будущего по отношению к точке 0) и $x_0 < 0$ (абсолютного прошлого) времениподобны и разделены выколотой точкой начала координат $(0,0,0,0)$ (см. подразд. 4.8).

Классическому материальному объекту, движущемуся из точки 0 со скоростью $v < c$, в пространстве Минковского отвечает непрерывная «траектория» (*мировая линия*), лежащая целиком во времениподобной области. Из-за ограничения $v \leqslant c$ причинно-следственные связи могут существовать только между событиями, разделенными времениподобным интервалом.

Координатную форму интервала s^2 в пространстве $M(1,3)$ задает *метрический тензор* 2-го ранга $\mathrm{g}_{\mu\nu}$:

$$\mathrm{g}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Физическим величинам $A(r,t)$ в $M(1,3)$ в общем случае соответствуют 4-мерные тензоры и спиноры. Учитывая неевклидову метрику $M(1,3)$, скалярное произведение двух 4-мерных тензоров 1-го ранга (4-векторов) записывают как сумму произведений компонент *ковариантного* 4-вектора $\{A_i\}$ на компоненты *контравариантного** 4-вектора $\{B^j\}$:

$$(A,B) = A_0B_0 - A_1B_1 - A_2B_2 - A_3B_3 = \left(\sum\right) A^iB_i = \left(\sum\right) g_{ij}A^iB^j.$$

Знаки компонент этих векторов в общем случае связаны соотношением $g_{ij}A_j = A^i$, что в данном случае дает

$$A_0 = A^0, \quad A_1 = -A^1, \quad A_2 = -A^2, \quad A_3 = -A^3.$$

Знак суммирования по совпадающим индексам тензоров обычно опускается.

Релятивистская ограниченность скорости передачи любых взаимодействий между частицами $v_{\text{вз}} \leqslant c$ равнозначна наличию передающей материальной среды: *поля* — например, электромагнитного поля с 4-векторным потенциалом $(\varphi, \vec{A})$ (где φ — скалярный электростатический, $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ — векторный магнитный потенциалы) и тензором напряженности

---

*Т. е компоненты, преобразуемые операциями группы Лоренца аналогично и противоположно диагональным элементам метрического тензора $\mathrm{g}_{\mu\nu}$. Компоненты ковариантных векторов и тензоров преобразуются теми же матрицами (a_{ij}), что и базисные векторы $\{e_i\}$, а компоненты контравариантных — матрицами $(a_{ji})^{-1}$, обратными к транспонированной матрице ${}^t(a_{ij})$. Для декартова базиса в евклидовом пространстве ковариантные и контравариантные векторы совпадают, поскольку в этом случае ${}^t(a_{ij}) = (a_{ij})^{-1}$.

$$F_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -H_z & H_y \\ -E_y & H_z & 0 & -H_x \\ -E_x & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix}.$$

Пространство $M(1,3)$ релятивистских физических величин инвариантно относительно операций группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$: поворотов и инверсии координат евклидова подпространства $E(3) \subset M(1,3)$, самих преобразований Лоренца (т. е. переходов от одной инерциальной системы отсчета к другой) и инверсии времени. Преобразованиям Лоренца, сохраняющим интервал s^2, отвечает движение по поверхности 4-мерного гиперболоида (на рис. 5.1 — по ветви гиперболы) внутри светового конуса (см. (4.28)). Из этого геометрического образа можно вывести сокращение расстояний и замедление времени в инерциальных системах, равномерно движущихся относительно выбранного начала координат, а также недостижимость скорости света для объектов, точки состояний которых изначально находились внутри светового конуса [64]. Напомним, что добавление к операциям группы Лоренца $\mathbb{O}(1,3)$ трансляций на произвольный 4-вектор $x \in M(1,3)$ преобразует ее в группу Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$, которая играет важную роль в квантовой релятивистской теории поля (см. подразд. 5.5).

5.1.3. Квантовая механика

Возможным состояниям квантовой системы с n степенями свободы и независимыми параметрами $x(t) = \{x_1(t), \ldots, x_n(t)\} \in V_x$ соответствует множество F непрерывных *волновых функций* $\psi(x_1, \ldots, x_n, t)$, которыми определяется «статистический вес» каждого вектора x в пространстве V_x. Функции $|\psi_\alpha\rangle = \psi_\alpha(x,t)$ из такого (вообще говоря, бесконечного) множества F, в свою очередь, рассматриваются как векторы бесконечномерного линейного *гильбертова пространства* (см. подразд. 4.8) с непрерывным либо дискретным индексом α и нормой

$$\langle \psi_\alpha \mid \psi_\alpha \rangle = \int \psi_\alpha^* \psi_\alpha dx = 1$$

(здесь $*$ — знак комплексного сопряжения).

Волновая функция $\psi(x,t) : V_x \mapsto F$ отвечает определенному состоянию квантовой системы в момент t, которое можно представить *суперпозицией* (линейной комбинацией) $\sum c_i \phi_i$ некоторых базисных состояний $\{\phi_i\}$ с комплексными коэффициентами $c_i = \langle \phi_i \mid \psi \rangle$. Произведением $\psi^* \psi \geqslant 0$ задается «поле» плотности

вероятности разных значений $x \in V_x$ в этом состоянии, а скалярным произведением $\langle \phi \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid \phi \rangle^*$ — комплексная амплитуда вероятности перемешивания состояний ϕ и ψ. Если $\langle \phi \mid \psi \rangle = 0$, то состояния ψ и ϕ ортогональны, т. е. несовместимы.

Изменениям состояния системы (квантовым переходам) соответствуют линейные дифференциальные операторы $\hat{L}$:

$$\hat{L}\psi_\alpha = \psi_\beta \in F.$$

Физически измеримым параметрам квантовой системы при этом отвечают самосопряженные эрмитовы операторы $\hat{A}$, собственные значения которых действительны (см. гл. 7). Собственные функции каждого такого оператора в F:

$$\hat{A}\psi_\alpha = a_\alpha \psi_\alpha$$

образуют полный набор ортогональных состояний системы, в которых параметр A имеет определенные значения $A = \{a_\alpha\}$. В произвольном состоянии $|\Phi\rangle = \sum c_i \psi_i$ вероятность значения $A = a_i$ пропорциональна $|c_i|^2$. Обобщенная функция $A(x,t)$ в таком состоянии задается распределением плотности вероятности $\Phi^* \hat{A} \Phi$ по параметрам $x \in V_x$ со средним значением

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Phi | \hat{A} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

и флуктуациями $\Delta A(t)$.

Лиевским умножением операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в квантовой механике является коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Выбирая в качестве базиса в F собственные функции $\{\psi_\alpha\}$ какого-либо из операторов, можно представить любой оператор $\hat{L}$ матрицей $\| L_{ij} \|$, где $L_{ij} = \langle \psi_j | \hat{L} | \psi_i \rangle$. Коммутирующие эрмитовы (в случае действительных волновых функций — симметричные) матрицы A и B ($[A, B] = AB - BA = 0$) одновременно приводятся к диагональному виду в общем наборе собственных функций. Соответствующие им физические величины в заданном состоянии ψ_i принимают точные собственные значения a_i, b_i (т. е. в этом состоянии $\Delta a, \Delta b \equiv 0$). Если же операторы $\hat{U}$ и $\hat{W}$ в произвольном состоянии $|\Phi\rangle$ не коммутируют, произведение флуктуаций соответствующих им величин $u(t)$ и $w(t)$ пропорционально среднему значению коммутатора

$$\Delta u \Delta w \sim \langle [\hat{U}, \hat{W}] \rangle$$

(*соотношение неопределенности Гейзенберга*). В частности, если $|\Phi\rangle = |\psi_i\rangle$ — собственная функция величины u с (точным) собственным значением u_i, то величины, операторы которых не коммутируют с $\hat{U}$, в состоянии $|\psi_i\rangle$ не определены, т. е. могут принимать произвольные значения.

Таким образом, соотношениям квантовой механики отвечает алгебра эрмитовых операторов в бесконечномерном гильбертовом пространстве F с лиевским умножением $[x, y]$. Поскольку векторы $|\psi\rangle$ сохраняют норму $\langle\psi \mid \psi\rangle$ при унитарных (для действительных волновых функций — при ортогональных) преобразованиях U ($|\det U| = 1$), любые группы нерелятивистских квантовых систем являются подгруппами $\mathrm{SU}(n, \mathbb{C}) \times \langle j\rangle_2$, где n — число координат системы; j — операция их инверсии.

Предельный переход от квантовой механики к классической задают перестановочные соотношения $[q_i, p_i] = i\hbar I$, где I — единичный оператор; $\hbar$ — масштабный множитель (*постоянная Планка*). В классическом пределе единичный оператор заменяется на единичный множитель, а коммутатор $\frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]$ переходит в скобку Пуассона (5.5). При обратном переходе («квантовании» классических уравнений движения) функции координат, импульсов и полной энергии заменяются операторами:

$$q_j \to i\hbar q_j, \qquad p_j \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_j} = -i\hbar\nabla_j$$

$$H = T + U \to -\frac{\hbar^2}{2m}\sum\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} + U(q) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(q),$$

где $\Delta = \sum\nabla_j^2 = \sum\limits_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial q_j^2}$.

Флуктуации некоммутирующих (канонически сопряженных) обобщенных импульсов и обобщенных координат, не устранимые улучшением методики измерения, связаны квантовомеханическими соотношениями неопределенности*:

$$\Delta q_i \Delta p_i \geqslant \hbar, \tag{5.9}$$

$$\Delta E \Delta t \geqslant \hbar. \tag{5.10}$$

---

*Содержание фундаментальных постулатов квантовой механики в настоящее время уточняется на основе экспериментальных исследований простейших квантовомеханических систем. В частности, независимость координат q и времени t в пространстве переменных $V_{q,t}$ квантовой системы (см. (5.2)) позволяет измерить координату и сопряженный ей импульс нерелятивистской квантовой частицы одновременно с любой степенью точности — однако движение такой частицы остается недетерминированным, так как соотношение (5.8) справедливо лишь для гладких классических траекторий $q(t)$. В экспериментах по рассеянию импульсных пучков атомов He на двух щелях (см. *Kurtsiefer C. et al.* Nature. — 1997. — V. 386. — P. 150) регистрировались серии точно измеренных значений (p_i, q_i) (распределение которых, в соответствии с (5.9), обнаруживало флуктуации $(\Delta p, \Delta q)$) и наблюдалась обычная дифракция дебройлевских волн гелия с длиной $\lambda = 2\pi\hbar/p$. Эти данные подтверждают статистический характер соотношений квантовой механики, который был предметом дискуссий в первой половине XX в.

В релятивистской квантовой механике соотношение (5.10) (определяющее, например, естественную ширину линий в спектрах атомов и молекул) объединяется с (5.9) в общее соотношение неопределенности компонент 4-вектора энергии-импульса (E, p_1, p_2, p_3) и сопряженных им координат (x_0, x_1, x_2, x_3) (см. подразд. 5.5).

Собственные значения оператора Гамильтона (*гамильтониана*) $\hat{H}$ являются значениями энергии в состояниях квантовой системы, удовлетворяющих *уравнению Шредингера*

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{5.11}$$

для $\hat{H} = \hat{H}(t)$ и *стационарному уравнению Шредингера*

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \tag{5.12}$$

если $\hat{H}$ не содержат производных по времени, т. е.

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\Psi(x,t_0).$$

Квантовомеханическим аналогом движения является эволюция оператора $\hat{A}$ физической величины A:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + [\hat{H},\hat{A}] \tag{5.13}$$

(в классическом пределе (5.13) переходит в (5.6)). Все величины A, удовлятворяющие условию $[\hat{A},\hat{H}] = 0$ — в частности, значения энергии E_i собственных состояний «стационарного» гамильтониана в (5.12) — сохраняются во времени, т. е. являются интегралами движения.

Операторы, коммутирующие с гамильтонианом, образуют *группу уравнения Шредингера* $G(\hat{H})$. Собственные функции гамильтониана $\{\psi_\alpha\}$ можно выбрать соответствующими неприводимым представлениям Γ_α группы $G(\hat{H})$. В таком базисе матрица $\hat{H}$ приобретает блочный вид

$$\begin{pmatrix} \|H_1\| & & 0 \\ & \|H_2\| & \\ 0 & & \|H_M\| \end{pmatrix},$$

где $\{\|H_\alpha\|\}(\alpha = 1,\ldots,M)$ — ненулевые квадратные блоки, размеры которых соответствуют размерностям Γ_α.

Для состояний ψ_α и ψ_β, относящихся к разным представлениям:

$$\langle\psi_\beta|\hat{H}|\psi_\alpha\rangle \equiv 0. \tag{5.14}$$

Соотношения ортогональности (5.14) играют большую роль в нерелятивистской квантовой механике. Поскольку входящий в гамильтониан $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ оператор кинетической энергии частицы $\hat{T} = -\sum \frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 = \sum \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$ пропорционален оператору Казимира группы $\mathcal{E}(3)$ (см. подразд. 4.3), он полносимметричен в пространствах координат и импульсов. Таким образом, группа $G(\hat{H})$ определяется симметрией потенциала U: точечными группами молекул, пространственными группами кристаллов или непрерывными группами Ли в высокосимметричных системах: двухатомных молекулах, атомах, ядрах и др. (см. ниже).

Если потенциал U в (5.11) и (5.12) инвариантен относительно инверсии координат $\hat{j}$, волновые функции ψ ($\hat{j}^2\psi = a^2\psi = \psi$, т. е. $a = \pm 1$) могут быть четными ($\hat{j}\psi = \psi$) либо нечетными ($\hat{j}\psi = -\psi$). Свойства четности квантовых состояний также сохраняются во времени. Кроме того, уравнение Шредингера (5.11) инвариантно относительно обращения времени $t \to -t$ с заменой волновых функций на комплексно сопряженные:

$$\psi(x,t) \to \psi^*(x,-t), \text{ т. е. } |\psi(t)\rangle \to \langle\psi(-t)|.$$

Можно показать [73], что для систем с полуцелым спином операция обращения времени $\hat{T}$ является антиунитарной: $\hat{T}^2\psi = -\psi$. Симметрия относительно обращения времени используется в описании магнитных явлений. Дискретные операции $\hat{j}$ и $\hat{T}$ вместе с другими операциями группы Лоренца будут рассмотрены в подразд. 5.5.

5.1.4. Перестановки тождественных частиц: бозоны и фермионы

Отсутствие непрерывных траекторий в квантовой механике приводит к неразличимости одинаковых частиц внутри квантовой системы (рис. 5.2) — например, протонов в атомном ядре. Гамильтониан $\hat{H}(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n)$ системы из n неразличимых частиц (где ξ_i — параметры i-й частицы) коммутирует с их перестановками, и состояния такой системы можно разбить по неприводимым представлениям группы $\mathbf{S}_n$.

Поскольку любую перестановку можно представить в виде произведения транспозиций (парных перестановок) (см. теорему 1.3), волновые функции $\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n)$ должны быть собственными функциями относительно транспозиции $\hat{P}_{ij}$ любой пары

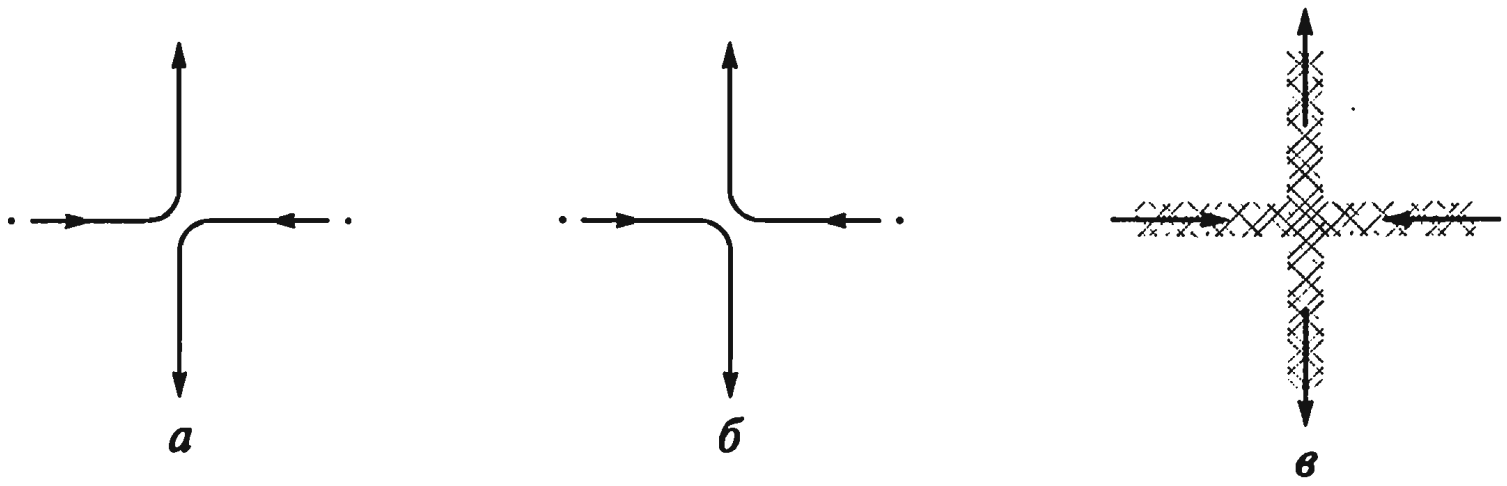


Рис. 5.2. Различимость частиц с классическими траекториями (*а*, *б*) и неразличимость квантовых частиц (*в*) (см. *Гершейн С. С*, *Берестецкий В. Б.* Физическая энциклопедия. М.: Сов. энциклопедия, 1990. Т. 2. С. 290)

частиц. Так как $\hat{P}_{ij}^2 = 1$, собственные значения оператора $\hat{P}_{ij}$ равны ± 1. Поэтому все многочастичные квантовые системы разделяются на два класса по четности их волновых функций относительно парных перестановок:

$$\hat{P}_{ij}\Psi(\xi_1, ..., \xi_n) = \Psi(\xi_1, ..., \xi_n) \text{ — бозоны,}$$
$$\hat{P}_{ij}\Psi(\xi_1, ..., \xi_n) = -\Psi(\xi_1, ..., \xi_n) \text{ — фермионы.} \qquad (5.15)$$

Фундаментальное разделение (5.15) квантовых частиц на бозоны и фермионы выводится в квантовой теории поля из принципа причинности. Оно однозначно связано с релятивистской характеристикой частицы: *спином*, или собственным моментом количества движения (см. подразд. 5.5). Напомним, что спин частицы, подобно орбитальному моменту, имеет дискретные проекции $\hbar\sigma$ (где $\sigma = -s, -s+1, \ldots, s$) на произвольное направление в трехмерном пространстве с целым либо, в отличие от орбитального момента, полуцелым σ. В нерелятивистской квантовой механике постулируется, что элементарные частицы с целочисленным спином (фотоны, пионы, каоны) являются бозонами, а частицы с полуцелым спином (электроны, позитроны, нуклоны, нейтрино) — фермионами. Перестановочная симметрия составной частицы определяется ее суммарным спином: так, «четные» ядра ^{2}H, ^{4}He, ^{16}O и других атомов являются бозонами, а «нечетные» ядра (^{3}H, ^{7}Li, ^{13}C и др.) — фермионами.

Квантовомеханические соотношения, используемые для описания систем частиц с целыми и полуцелыми спинами (в том числе квантово-статистического при ненулевой температуре) различны и называются, соответственно, *статистикой Бозе — Эйнштейна* и *статистикой Ферми — Дирака* (рис. 5.3). Так, любое число одинаковых бозонов может находиться в одном и том же состоянии системы — в частности, на низшем энергетическом уровне. В то же время никакие два фермиона не могут нахо-

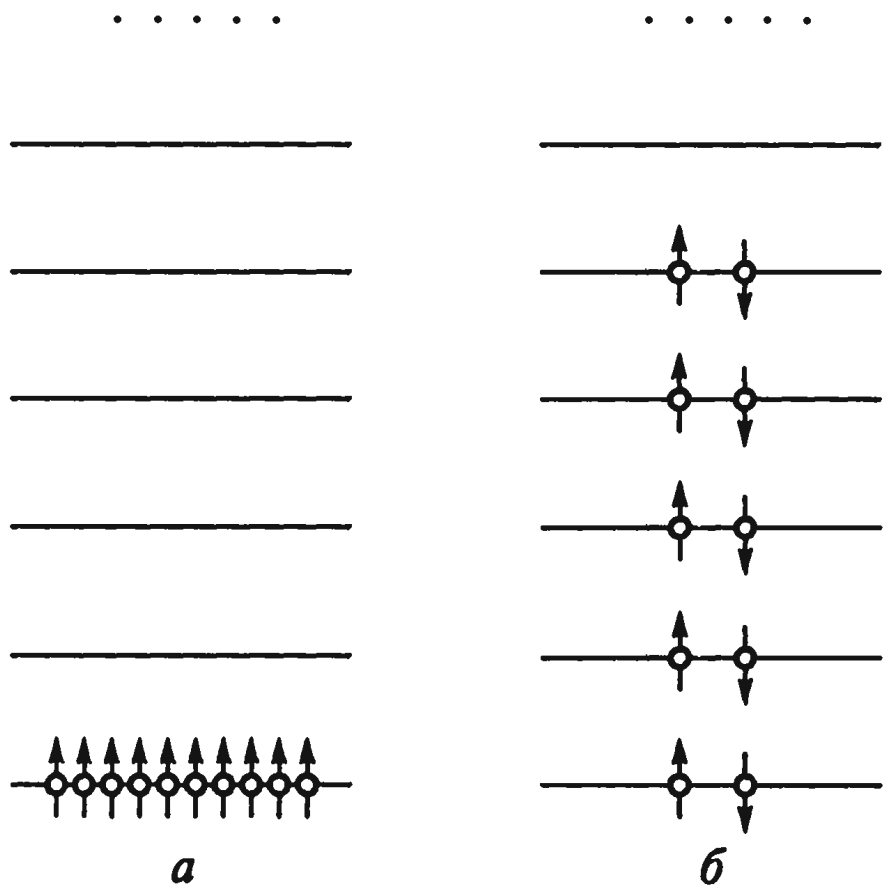


Рис. 5.3. Низшее энергетическое состояние системы:
а — N бозонов; *б* — N фермионов ($N = 10$; стрелками обозначены спины)

диться в одном состоянии $\xi_1 \equiv \xi_2$ (*принцип Паули*), поскольку их перестановка обращает в нуль волновую функцию:

$$\Psi(\xi_1, \xi_1, \ldots) = -\Psi(\xi_1, \xi_1, \ldots) \equiv 0. \tag{5.16}$$

Системой бозе-частиц являются, например, фотоны в пучке лазерного света, системой фермионов — электроны в атоме.

Двухчастичные волновые функции независимых бозонов и фермионов являются, соответственно, симметризованными (+) и антисимметризованными (–) комбинациями одночастичных состояний:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \pm \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)].$$

Функции n независимых частиц в том же приближении имеют вид

$$\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) = \left(\frac{n_1! \ldots n_k!}{n!}\right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) \ldots \psi_{p_n}(\xi_n)$$

для бозонов (с суммированием по всем перестановкам индексов $(p_1, \ldots p_n)$, где n_i — число частиц в состоянии i, $\sum n_i = n$), и

$$\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \ldots & \psi_1(\xi_n) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \ldots & \psi_2(\xi_n) \\ \ldots & & & \\ \psi_n(\xi_1) & \psi_n(\xi_2) & \ldots & \psi_n(\xi_n) \end{pmatrix} \tag{5.17}$$

для фермионов (*слейтеровский детерминант*). Любая перестановка двух строк, т. е. функций, или двух столбцов, т. е. пространственных и спиновых координат частиц, изменяет знак детерминанта; совпадение любых двух строк или столбцов обращает его в нуль.

Полную волновую функцию $\Psi(\xi) = \Psi(r, \sigma)$ частицы со спином s записывают в виде $(2s+1)$-компонентного вектора из (разных) координатных волновых функций $\psi_\sigma(r)$, отвечающих различным проекциям спина. Состояния с полуцелыми числами σ преобразуют по двузначным (спинорным) представлениям группы $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$: поворот на 2π обращает знак спинора (см. подразд. 4.3). В частности, волновая функция электрона является *спинором 1-го ранга* — двухкомпонентным вектором:

$$\Psi(r, \sigma) = \begin{pmatrix} \psi_\alpha(r) \\ \psi_\beta(r) \end{pmatrix}, \tag{5.18}$$

преобразуемым по двузначному представлению $D^{(1/2)}$ (индексами α и β, соответственно, обозначены проекции $\sigma = \frac{1}{2}$ и $\sigma = -\frac{1}{2}$). Волновая функция n-электронной системы состоит из 2^n компонент и преобразуется как *спинор n-го ранга*, т. е. как прямое произведение n двухкомпонентных спиноров 1-го ранга. В [73, гл. 13] доказывается, что уровни энергии системы из нечетного числа фермионов в отсутствие магнитного поля по крайней мере двукратно вырождены (*теорема Крамерса*).

Спиновые операторы можно выразить через *матрицы Паули*:

$$\begin{aligned} \hat{s}_1 &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_1, \\ \hat{s}_2 &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_2, \\ \hat{s}_3 &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_3, \end{aligned} \tag{5.19}$$

образующие базис в пространстве матриц группы $\mathrm{SU}(2, C)$:

$$\begin{pmatrix} u & v \\ -\overline{v} & \overline{u} \end{pmatrix},$$

где

$$u = \pm\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\chi+\phi}{2}}, \quad v = \mp i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\chi-\phi}{2}}$$

(см. (4.21)). Нетрудно проверить, что матрицы $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ и $\hat{\sigma}_3$ вместе с единичной квадратной (2×2) матрицей $\sigma_0 = (\delta_{ij})$ $(i, j = 1, 2)$ образуют группу относительно умножения, изоморфную группе кватернионов $\mathbb{Q}_8$ (см. упражнение 5.1)*.

*Следует помнить, что устоявшиеся в физической литературе обозначения спиновых переменных (σ_i) и матриц Паули ($\hat{\sigma}_k$) похожи. В химической литературе проекцию спина электрона чаще обозначают m_s.

Упражнение 5.1. Доказать антикоммутативность матриц Паули

$$\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l + \hat{\sigma}_l\hat{\sigma}_k = 2\sigma_0 \quad (k,l = 1,2,3).$$

Полная волновая функция n-электронной системы, гамильтониан которой не зависит от спина, разделяется на координатную (скалярную) и спинорную части (см. (5.18)):

$$\Psi(\xi_1,\ldots,\xi_n) = \psi(r_1,\ldots,r_n)\chi(\sigma_1,\ldots,\sigma_n), \qquad (5.20)$$

преобразуемые по некоторым неприводимым представлениям группы $\mathbf{S}_n$. Так как, в соответствии с принципом Паули, полная волновая функция $\Psi(\xi_1,\ldots,\xi_n)$ полностью антисимметрична относительно перестановок $\{\xi_i\}$, т. е. преобразуется по одномерному неприводимому представлению $[1^n]$, представления $\Gamma(\psi)$ и $\Gamma(\chi)$ — сопряженные (см. предложение 3.6).

Поскольку аргументы спиновой функции $\chi(\sigma_1,\ldots,\sigma_n)$ могут принимать только два значения $\pm 1/2$, неприводимым представлениям $\Gamma(\chi)$ отвечают диаграммы Юнга, содержащие не более двух строк* (рис. 5.4, *а*). Двухстрочная схема Юнга с n_1 и $n_2 < n_1$ клеток (где $n_1 + n_2 = n$) соответствует выделению среди n электронов n_2 «антисимметризованных» пар с противоположными спинами и очевидной суммарной проекцией $M_S^{(n_2)} = 0$. Остальным клеткам в верхней строке соответствуют симметризованные комбинации всех возможных произведений $(n_1 - n_2)$ состояний с проекциями спина $\sigma = \frac{1}{2}$ (α) и $\sigma = -\frac{1}{2}$ (β), например единственная компонента:

$$\chi(\underbrace{\alpha,\alpha,\ldots,\alpha}_{n_1-n_2 \text{ раз}}), \quad M_S = \frac{1}{2}(n_1 - n_2),$$

$(n_1 - n_2)$ компонент

$$\chi(\beta,\alpha,\ldots,\alpha) + \chi(\alpha,\beta,\ldots,\alpha) + \ldots + \chi(\alpha,\alpha,\ldots,\beta), \quad M_S = \frac{1}{2}(n_1 - n_2) - 1$$

и т. д. Нетрудно видеть, что всего таких комбинаций $(n_1 - n_2) + 1$, и каждой из них отвечает определенная сумма проекций спина $M_S = \frac{n_1 - n_2}{2}, \frac{n_1 - n_2}{2} - 1, \ldots, -\frac{n_1 - n_2}{2}$. Другими словами, каждой схеме Юнга соответствует разбиение n-электронной системы на (n_1, n_2) электронов с противоположными спинами и суммарным спином $S = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)$ (в единицах $\hbar$). Перестановочная симметрия

*Антисимметризация по трем или более двузначным переменным, ввиду совпадения некоторых из них, обратит волновую функцию в нуль, см. (5.16).

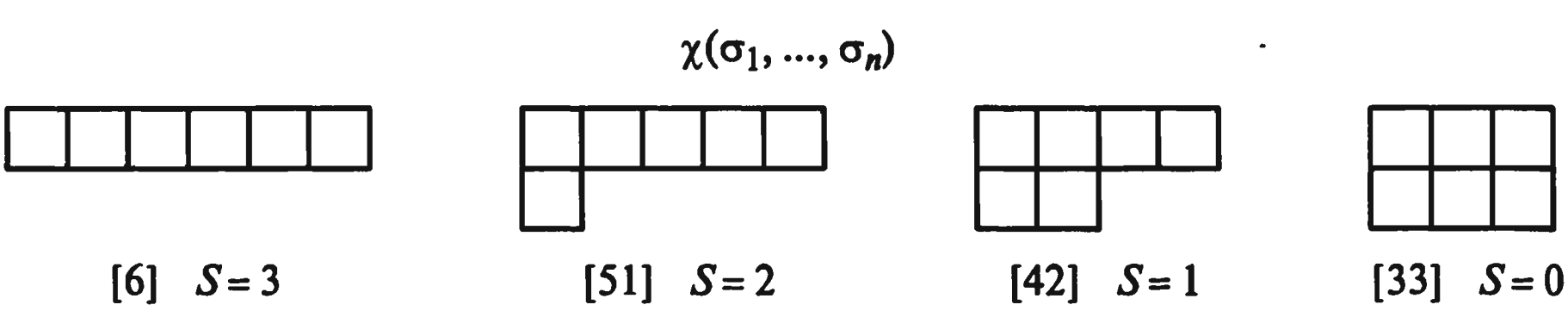


Рис. 5.4. Перестановочная симметрия спиновой χ ($а$) и координатной ϕ ($б$) частей n-электронной волновой функции $\psi = \phi\chi$ ($n = 6$)

координатной функции электронов $\phi(r_1, \ldots, r_n)$ в соответствии с (3.5) задается сопряженными схемами Юнга из двух столбцов (см. рис. 5.4, $б$).

Таким образом, каждому неприводимому представлению группы перестановок в n-электронной системе отвечает определенное значение ее полного спина S. Можно показать [52, т. 3, § 63; 73, гл. 18], что в общем случае волновые функции системы n частиц со спином s «нумеруются» n-клеточными диаграммами Юнга с $(2s+1)$ строками, однако определенным значениям полного спина S отвечают уже не сами эти функции, а их линейные комбинации.

5.2. СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

На основании соотношения ортогональности (5.14) представления точечных групп молекул используются в молекулярной спектроскопии и квантовой химии для оценки интегралов вида

$$\langle j|\hat{F}|i\rangle = \int \psi_j^*(\vec{r})\hat{F}\psi_i(\vec{r})d\vec{r}, \qquad (5.21)$$

где $\hat{F}$ — оператор перехода молекулы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|j\rangle$, ψ_i, ψ_j — симметризованные волновые функции этих состояний (т. е. Γ_i, Γ_j — представления точечной группы моле-

кулы G), а интегрирование выполняется по всему пространству их аргументов $(\vec{r})^*$. Поскольку подынтегральным выражением $\psi_j^* \hat{F} \psi_i$ порождается некоторое (приводимое) представление Γ группы G, интеграл (5.21) равен 0, если только в разложение Γ по неприводимым представлениям G не входит полносимметричное представление этой группы**. Переходы $\psi_i \to \psi_j$, для которых $\langle \psi_j | \hat{F} | \psi_i \rangle = 0$, не проявляются в спектрах или ослаблены (см. далее).

Таким образом, интеграл $\langle j | \hat{F} | i \rangle$, называемый *матричным элементом* перехода $\psi_i \to \psi_j$, может отличаться от нуля в том и только в том случае, если в прямом произведении представлений $\Gamma_i \times \Gamma_j \times \Gamma_F$ содержится полносимметричное представление Γ_0 точечной группы молекулы:

$$(\Gamma_i \times \Gamma_j \times \Gamma_F) \cap \Gamma_0 \neq 0. \tag{5.22}$$

Для этого представление Γ_F (в общем случае приводимое) и прямое произведение $\Gamma_i \times \Gamma_j$ должны содержать хотя бы один общий неприводимый компонент:

$$(\Gamma_i \times \Gamma_j) \cap \Gamma_F \neq 0.$$

Если, как это часто бывает, волновая функция ψ_i исходного состояния молекулы полносимметрична, (5.22) упрощается до

$$\Gamma_j \cap \Gamma_F \neq 0$$

(в представлении оператора перехода $|i\rangle \to |j\rangle$ должны содержаться какие-либо неприводимые компоненты конечного состояния $|j\rangle$).

Таким образом, молекулярная симметрия позволяет вывести *правила отбора* всех возможных переходов молекулы из одного квантового состояния в другое. Переходы, для которых $\langle j | \hat{F} | i \rangle = 0$, называются *запрещенными*, все прочие переходы — *разрешенными*.

Отметим, что симметрийные правила отбора могут нарушаться, ибо представления $\Gamma_F, \Gamma_i, \Gamma_j$ обычно определены в рамках некоторой приближенной модели, а величину ненулевого интеграла $\langle j | \hat{F} | i \rangle$ в общем случае нельзя оценить из соображений симметрии. Поэтому некоторые разрешенные переходы $\psi_i \to \psi_j$

---

*Далее в этой главе векторы в трехмерном «физическом» пространстве обозначаются символами со стрелкой по обычным правилам, а 4-векторы в пространстве $M(1,3)$ — символами без стрелок.

** Доказательство этого утверждения, очевидного при антисимметрии $\psi_j^* F \psi_i$ относительно центра инверсии i или плоскости σ, см. [52, т. 3, гл. 12].

могут иметь низкую вероятность (например, из-за малого перекрывания соответствующих состояний в пространстве или большой разницы в их энергиях), а запрещенные переходы нередко проявляются под действием факторов, не учтенных в теоретической модели. Тем не менее, правила отбора по симметрии играют огромную роль в молекулярной спектроскопии, а также в ряде других разделов физики и химии, позволяя предсказать многие экспериментально наблюдаемые явления на качественном уровне без проведения трудоемких расчетов.

5.2.1. Правила отбора в оптической спектроскопии

Оператор перехода молекулы $\psi_i \to \psi_j$ из одного квантового состояния в другое под действием электромагнитного излучения имеет вид [58, гл. 14]:

$$\hat{F} = \sum e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{P} \cdot \vec{n}, \tag{5.23}$$

где $\vec{k}$ — волновой вектор электромагнитного излучения ($k = 2\pi/\lambda$), $\vec{n}$ — единичный вектор, перпендикулярный направлению распространения волны (т. е. параллельный ее электрическому полю), $\hat{P} = -i\hbar\vec{\nabla}_r$ — оператор импульса, и суммирование проводится по всем атомам с координатами $\vec{r}$ в молекуле.

Волновые функции ψ_i, ψ_j быстро обращаются в нуль за пределами молекулы, поэтому размеры области ее взаимодействия с излучением в диапазоне от радиоволн до жесткого ультрафиолетового (УФ) малы по сравнению с λ (обычно $|kr| \leqslant 10^{-3}$). Поэтому можно положить $e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1$, т. е.

$$\langle j|\hat{F}|i\rangle = \langle j|\hat{P} \cdot \vec{n}|i\rangle. \tag{5.24}$$

Кроме того,

$$\langle \psi_j \mid \frac{\partial \psi_i}{\partial x}\rangle = A\langle \psi_j|x|\psi_i\rangle, \tag{5.25}$$

где $A = -\dfrac{m}{\hbar^2}(E_j - E_i)$, m — масса электрона; x — координатная проекция вектора $\vec{r}$; E_i и E_j — соответственно энергии начального и конечного состояний [92, гл. 8].

Таким образом, правила отбора (5.22) определяются представлениями проекции вектора $\vec{r}$, которому пропорционален дипольный момент перехода $\vec{\mu} = q_e\vec{r}$ (q_e — заряд электрона), на направление поля в электромагнитной волне. Данное приближение называется *дипольным*, а переходы с ненулевыми матричными

элементами $\langle j|\vec{r}\cdot\vec{n}|i\rangle$ — *разрешенными электрическими дипольными переходами.* По (5.22), для таких разрешенных переходов $\psi_i \to \psi_j$ неприводимые компоненты представления $\Gamma_i \times \Gamma_j$ должны совпадать с неприводимыми представлениями сдвигов в трехмерном пространстве $\Gamma(xyz)$. Если переход разрешен лишь по одной или двум декартовым координатам, соответствующая полоса в спектре *поляризована.*

Если матричный элемент (5.21) равен нулю (например, по соображениям симметрии), приближения $e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1$ уже недостаточно. В таком случае экспоненциальный множитель разлагают в ряд

$$e^{i\vec{\vec{k}\vec{r}}} = 1 + i\vec{\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{2}(\vec{\vec{k}\vec{r}})^2 - \ldots + \frac{i^m}{m!}(\vec{\vec{k}\vec{r}})^m + \ldots,$$

подставляя в (5.23) первый ненулевой член такого разложения.

Получаемые матричные элементы вида

$$\langle\psi_j|\hat{F}|\psi_i\rangle = \langle\psi_j|\sum\frac{(\vec{\vec{k}\vec{r}})^m}{m!}|\psi_i\rangle \qquad (5.26)$$

соответствуют *мультипольному* приближению (при $m = 1$ — *квадрупольному*). Компоненты электрического мультиполя преобразуются по (симметризованному) тензорному произведению смещений $[\Gamma(\vec{r}) \times \ldots \times \Gamma(\vec{r})]^+$ (см. п. 3.8).

Переходы $\psi_i \to \psi_j$, запрещенные в электрическом дипольном приближении, могут происходить также под действием магнитной составляющей световой волны. В этом случае в первом ненулевом матричном элементе

$$\langle j|\hat{M}|i\rangle = A'\langle\psi_j|\vec{r}\times\hat{P}|\psi_i\rangle$$

содержится магнитный диполь $\frac{e}{2mc}\vec{r}\times\hat{P}$, и сами переходы называются *магнитными дипольными.*

С учетом симметрии оператора $\hat{F}$ (табл. 5.1), разрешенные электрические дипольные переходы определяются неприводимыми представлениями компонент сдвига (x, y, z), магнитные дипольные — представлениями компонент поворота (R_x, R_y, R_z), а электрические квадрупольные — представлениями произведений координат $\vec{r}$ в точечной группе G молекулы. Интенсивности полос магнитных дипольных и электрических квадрупольных переходов в спектре обычно на несколько порядков ниже, чем у электрических дипольных.

Переходы между разными колебательными состояниями N-атомной молекулы проявляются в инфракрасном (ИК) спектре. В *гармоническом приближении* колебания нелинейной моле-

Таблица 5.1

Правила отбора для молекулярных переходов в оптической спектроскопии

Переход	Правило отбора
Электрический дипольный	$\Gamma_i \times \Gamma_j \supseteq \Gamma(\vec{r})$
ИК-спектры:	
основные полосы	$\Gamma(x,y,z) \cap \Gamma(Q_m) \neq 0$
комбинационные полосы	$\Gamma(x,y,z) \cap \Gamma(Q_m \times Q_k) \neq 0$
обертоны	$\Gamma(x,y,z) \cap \Gamma([Q_m \times Q_m \times \ldots \times Q_m]^+) \neq 0$
КР-спектры:	
основные полосы	$\Gamma(x^2,y^2,z^2,xy,yz,xz) \cap \Gamma(Q_m) \neq 0$
комбинационные полосы	$\Gamma(x^2,y^2,z^2,\ldots,xz) \cap \Gamma(Q_m \times Q_k) \neq 0$
обертоны	$\Gamma(x^2,\ldots,xz) \cap \Gamma([Q_m \times Q_m \times \ldots \times Q_m]^+) \neq 0$
УФ-спектры:	
основные полосы	$\Gamma(x,y,z) \cap \Gamma(\Psi_1 \times \Psi_2) \neq 0$
вибронные полосы	$\Gamma(x,y,z) \cap \Gamma(\Psi_1 \times \Psi_2 \times Q_m) \neq 0$
Магнитный дипольный	$\Gamma_i \times \Gamma_j \supseteq \Gamma(\vec{R})$
ИК	$\Gamma(R_x,R_y,R_z) \cap \Gamma(Q_m) \neq 0$
КР	$\Gamma(R_x,R_y,R_z) \cap \Gamma([Q_m \times Q_m]^+) \neq 0$
УФ	$\Gamma(R_x,R_y,R_z) \cap \Gamma(\Psi_1 \times \Psi_2) \neq 0$
Электрический квадрупольный	$\Gamma_i \times \Gamma_j \supseteq \Gamma(\vec{r} \cdot \vec{r})$
ИК	$\Gamma(x^2,y^2,\ldots,xz) \cap \Gamma(Q_m) \neq 0$
КР	$\Gamma(x^2,y^2,\ldots,xz) \cap \Gamma([Q_m \times Q_m]^+) \neq 0$
УФ	$\Gamma(x^2,y^2,\ldots,xz) \cap \Gamma(\Psi_1 \times \Psi_2) \neq 0$

кулы преобразуются к совокупности $3N-6$ *нормальных колебаний*, или *нормальных мод* $\{Q_\alpha\}$ ($\alpha = 1, 2, \ldots, 3N-6$), эквивалентных колебаниям $3N-6$ независимых гармонических осцилляторов с изменением колебательного квантового числа $\Delta v = \pm 1$ (рис. 5.5). Комбинации смещений атомов из равновесных положений в каждом нормальном колебании (формы колебаний) преобразуются по определенному неприводимому представлению точечной группы G, описывающей геометрию неискаженной молекулы [52, т. 3, гл. 13].

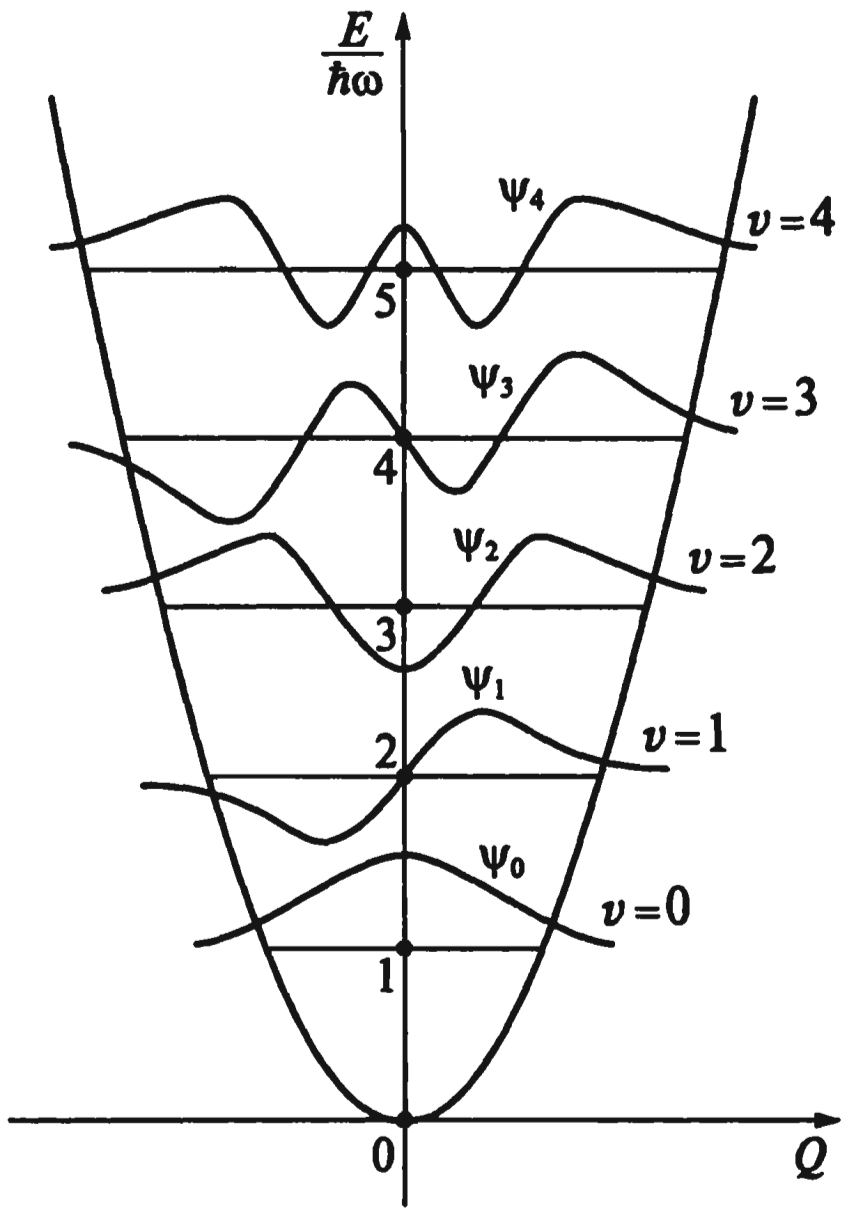


Рис. 5.5. Колебательные уровни энергии $E_v = \hbar\omega(v + 1/2)$ и волновые функции $\psi_v(Q)$ одномерного гармонического осциллятора

Поскольку в группе G основное колебательное состояние с $v = 0$ и отсутствием атомных смещений полносимметрично, в ИК-спектрах разрешены только те колебания Q_α, неприводимые представления которых совпадают с компонентами $\Gamma(xyz)$. При отклонениях межатомных потенциалов молекулы (*силового поля* связей) от гармонической формы ($U_\alpha = k_\alpha Q_\alpha^2$) в ИК-спектре могут возникать *комбинационные полосы* с одновременным возбуждением двух (или нескольких) нормальных колебаний, а также переходы с $\Delta v \neq \pm 1$ (*обертоны*). Эти переходы разрешены, если компоненты $\Gamma(xyz)$ содержатся в разложении прямого произведения $\Gamma(Q_i \times Q_j)$ возбуждаемых нормальных колебаний (для комбинационных полос) или симметризованного произведения $\Gamma(Q_i \times Q_i)^+$ (для обертонов, см. табл. 5.1). При высокой интенсивности возбуждающего излучения (например, лазерного) некоторые возбужденные молекулы до возвращения в основное состояние успевают поглотить следующий фотон (*двух- и многофотонные* переходы).

При взаимодействии интенсивного электромагнитного излучения с веществом наблюдается также неупругое *комбинационное рассеяние* фотона на молекуле с потерей кванта энергии $h\omega = E^{(v)} - E^{(0)}$ на возбуждение нормального колебания $Q_\alpha^{(v)}$. Этот эффект, обычно наблюдаемый при рассеянии лазерного излучения в видимом и УФ диапазонах, используется в спектроско-

пии комбинационного рассеяния (КР), или *рамановской* спектроскопии. Правила отбора для матричных элементов переходов в КР-спектрах определяются симметрией тензора поляризуемости α_{ij}, совпадающей с симметрией произведений координат вектора смещений $(x^2, y^2, ..., xz)$. Таблицы характеров точечных групп обычно содержат неприводимые представления компонент полярного вектора x, y, z, аксиального вектора R_x, R_y, R_z и произведений $x_k x_m$ $(k, m = 1, 2, 3)$ (см. прил. 2).

Нормальные колебания N-атомной молекулы находят приведением представления $\Gamma_v = \Gamma(\delta x, \delta y, \delta z) - \Gamma(\vec{r}) - \Gamma(\vec{R})$ (см. подразд. 3.13.2). Напомним, что для этого надо вычислить характер представления $3N$ атомных смещений молекулы, а затем вычесть из него трехмерные представления сдвигов и поворотов молекулы как целого. Ненулевые вклады в характер $\chi(g_i)$ дают только атомы, оставляемые на месте операциями $g_i \in G$, т. е. расположенные на элементах симметрии (табл. 5.2). Так, смещения атомов в плоской молекуле этилена C_2H_4 (точечная группа D_{2h}, табл. 5.3) порождают 18-мерное представление этой группы

$$\Gamma(\delta x, \delta y, \delta z) = 3A_g + 3B_{1g} + 2B_{2g} + B_{3g} + A_u + 2B_{1u} + 3B_{2u} + 3B_{3u}. \quad (5.27)$$

Вычитая из него представления полярного вектора сдвигов $\Gamma(\vec{r}) = B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$ и аксиального вектора поворотов $\Gamma(\vec{R}) = B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}$, получим 12-мерное представление $(3N-6)$ колебаний

$$\Gamma_v = 3a_g + 2b_{1g} + b_{2g} + a_u + b_{1u} + 2b_{2u} + 2b_{3u} \quad (5.28)$$

(координатная ось $C_2^{(z)}$ направлена по связи C═C, ось $C_2^{(x)}$ перпендикулярна плоскости рисунка). Далее будем обозначать заглавными буквами неприводимые представления и отвечающие

Таблица 5.2

Вклад атома, расположенного на элементе симметрии точечной группы G, в характер представления атомных смещений $\Gamma(\delta x, \delta y, \delta z)$

Элемент и операция симметрии	Вклад в характер	Элемент и операция симметрии	Вклад в характер
Поворотная ось C_n^k	$2\cos(2\pi k/n) + 1$	Плоскость симметрии $\sigma = S_1$	+1
Зеркально-поворотная ось S_n^k	$2\cos(2\pi k/n) - 1$	Центр инверсии $i = S_2$	−3
Поворотная ось C_2	−1	Тождественное преобразование e	+3

Представления атомных смещений $\Gamma(\delta x \delta y \delta z)$, трансляций $\Gamma(xyz)$, вращений $\Gamma(R_x R_y R_z)$ и колебаний Γ_v молекулы этилена C_2H_4

D_{2h}	e	$C_2^{(z)}$	$C_2^{(y)}$	$C_2^{(x)}$	i	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	$f_{НП}$*
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2; y^2; z^2$
B_{1g}	1	1	–1	–1	1	1	–1	–1	xy, R_z
B_{2g}	1	–1	1	–1	1	–1	1	–1	xz, R_y
B_{3g}	1	–1	–1	1	1	–1	–1	1	yz, R_x
A_u	1	1	1	1	–1	–1	–1	–1	
B_{1u}	1	1	–1	–1	–1	–1	1	1	z
B_{2u}	1	–1	1	–1	–1	1	–1	1	y
B_{3u}	1	–1	–1	1	–1	1	1	–1	x
$\Gamma(\delta x \delta y \delta z)$	18	0	0	–2	0	6	2	0	
$\Gamma(xyz)$	3	–1	–1	–1	–3	1	1	1	
$\Gamma(R_x R_y R_z)$	3	–1	–1	–1	3	–1	–1	–1	
Γ_v	12	2	2	0	0	6	2	0	

*См. подразд. 3.13.1.

им волновые функции молекул и кристаллов, а строчными — нормальные колебания и симметризованные одноэлектронные молекулярные орбитали.

Пользуясь правилами отбора (см. табл. 5.1), окончательно получаем, что в ИК-спектре этилена в электрическом дипольном приближении могут проявляться пять нормальных колебаний $(b_{1u} + 2b_{2u} + 2b_{3u})$, а в КР-спектре — шесть других нормальных колебаний $(3a_g + 2b_{1g} + b_{2g})$. Колебание a_u запрещено в обоих спектрах, однако может проявляться в составе комбинационных полос и обертонов, а также среди магнитных дипольных и электрических квадрупольных переходов в КР. Заметим, что в ИК- и КР-спектрах центросимметричных молекул проявляются их разные нормальные колебания, поскольку «разрешающие» их представления сдвигов $\Gamma(\vec{r})$ антисимметричны, а представления поворотов $\Gamma(\vec{R})$ симметричны относительно инверсии (*альтернативный запрет*).

Вклады смещений атомов в нормальные колебания молекулы (форму колебаний) также легко определить с помощью таблицы характеров, действуя на смещения атомов (δx, δy, δz) проекционными операторами, принадлежащими неприводимым представ-

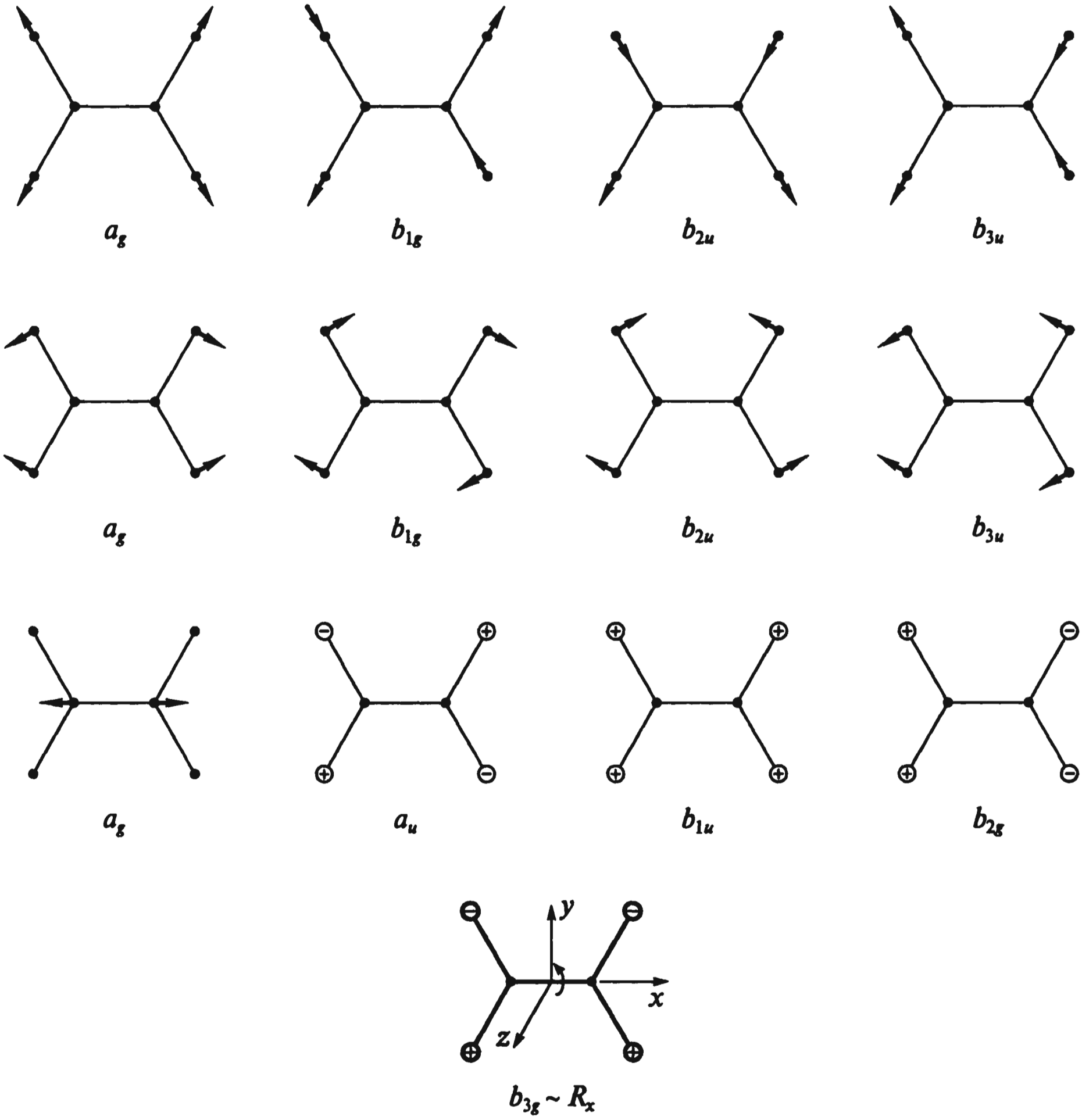


Рис. 5.6. Нормальные колебания молекулы этилена C_2H_4 (указана система координат)[31, с. 653]

лениям Γ_α ее точечной группы G:

$$\hat{O}_G^{(\alpha)} = \frac{1}{|G|} \sum_{g_i \in G} \chi(g_i) g_i, \tag{5.29}$$

где $|G|$ — порядок группы; α — индекс представления, суммирование по всем элементам группы $g_i \in G$. Напомним, что такие проекционные операторы «вырезают» из $\Gamma(\delta x, \delta y, \delta z)$ подпространство векторов атомных смещений, преобразующихся по представлению Γ_α, и обладают свойствами ортогональности:

$$\hat{O}^{(i)} \hat{O}^{(j)} = \hat{O}^{(j)} \hat{O}^{(i)} = 0, \quad i \neq j$$

и идемпотентности:

$$[\hat{O}^{(i)}]^2 = \hat{O}^{(i)} \hat{O}^{(i)} = \hat{O}^{(i)}.$$

Действуя операторами $\hat{O}^{(\alpha)}$ группы D_{2h} (где α из (5.28)), на смещения атомов C и H молекулы C_2H_4, направленных по линиям связей C—H и C=C, можно вывести форму пяти *валентных* колебаний: $a_g(C{=}C) + a_g(C{-}H) + b_{1g}(C{-}H) + b_{2u}(C{-}H) + b_{3u}(C{-}H)$. Прочие линейно независимые комбинации атомных смещений в этой молекуле соответствуют четырем *деформационным* колебаниям: $a_g + b_{1g} + b_{2u} + b_{3u}$ с изменениями *валентных углов* между связями, не выводящими атомы из плоскости, и трем неплоскостным колебаниям: «крутильному» a_u и «веерным» b_{1u}, b_{2g} (рис. 5.6; знаки (+) и (–) показывают выход атомов в разные стороны от плоскости σ_{xy})*.

Нормальные колебания одинаковых неприводимых представлений могут смешиваться, давая линейные комбинации с определенными значениями частот, например:

$$Q_{1,2}(a_g) = \frac{1}{\sqrt{2}}[Q_{C\text{–}H}(a_g) \pm Q_{C=C}(a_g)].$$

Заметим, что b_{3g}-комбинация смещений атомов H из плоскости σ_{xy}, также показанная на рис. 5.6, не порождает колебаний, отвечая повороту молекулы как целого вокруг связи C=C. Колебания линейных и нежестких молекул будут кратко рассмотрены в подразд. 5.4.

У п р а ж н е н и е 5.2. Найти ИК- и КР-активные нормальные колебания молекулы BF_3 (см. подразд. 3.13.2) в электрическом дипольном и магнитном дипольном приближениях.

У п р а ж н е н и е 5.3. Определить нормальные колебания молекулы бензола C_6H_6. Какие из них разрешены в ИК- и КР-спектрах в электрическом дипольном приближении?

5.2.2. Симметризованные молекулярные орбитали

С помощью проекционных операторов можно также симметризовать электронные волновые функции молекул, или *молекулярные орбитали* (МО). Волновые функции многоатомных молекул, используемые в химии, обычно выбирают на основе следующих приближений:

$$\Psi(\vec{R}_1, \ldots, \vec{R}_N, \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n) = \Theta_{\vec{R}_1,\ldots,\vec{R}_N}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n)\Phi(\vec{R}_1, \ldots, \vec{R}_N), \tag{5.30}$$

*В общем случае плоская N-атомная молекула обладает $(2N-3)$ плоскостными и $(N-3)$ неплоскостными колебаниями, а у линейной молекулы есть $(N-1)$ «линейных» и $(N-2)$ дважды вырожденных нелинейных колебаний.

где $(\vec{R}_1, \ldots, \vec{R}_N)$ — координаты атомных ядер; $(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n)$ — координаты электронов в молекуле (*адиабатическое* приближение, или *приближение Борна — Оппенгеймера*); $\Theta(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n)$ — *одноэлектронное* приближение:

$$\Theta(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_n) = \prod_{k=1}^{n} \psi_k(\vec{r}), \tag{5.31}$$

$\psi_k(\vec{r})$ — приближение *линейных комбинаций атомных орбиталей* (*ЛКАО*):

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{M} c_{ik}\phi_i(\vec{r}). \tag{5.32}$$

Волновую функцию ядер в (5.30) часто преобразуют к функциям нормальных колебаний $\Phi'(Q_1, ..., Q_{3N-6})$, а произведения (5.31) одноэлектронных волновых функций представляют в виде слейтеровского детерминанта, антисимметризованного относительно перестановок электронов (см. подразд. 5.1.4).

Интегралы перекрывания $\langle\Psi_j|\Psi_i\rangle$ симметризованных МО ЛКАО, относящихся к разным неприводимым представлениям, равны нулю. На этом, в частности, основано разделение σ- и π-МО плоских органических молекул с кратными связями — соответственно полносимметричных и антисимметричных относительно отражения σ_h в плоскости молекулы.

Молекулярные π-орбитали, отвечающие более слабому межатомному связыванию, обычно включают высшую занятую (ВЗМО) и низшую свободную (НСМО), а также не участвующие в связывании неподеленные электронные пары атомов N, O, S и др. (если такие атомы есть в молекуле). Так, p_z-АО двух атомов С в молекуле этилена C_2H_4 порождают двумерное представление Γ_π, приводимое к двум молекулярным орбиталям π-типа*: низкоэнергетической *π-связывающей* (b_{1u}) и высокоэнергетической *π^*-разрыхляющей* (b_{2g}):

$$\psi(b_{1u}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2), \qquad \psi(b_{2g}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2),$$

где ϕ_1, ϕ_2 обозначают p_z-АО атомов углерода.

---

*Относительные энергии $\{\varepsilon_i\}$ этих орбиталей можно рассчитать в приближении *простого метода Хюккеля* (ПМХ) (молекулярного аналога *приближения сильной связи*), решая уравнение $\det(H_{ij} - \varepsilon\delta_{ij}) = 0$. В приближении ПМХ (H_{ij}) — матрица (для π-системы этилена — размера 2×2) с элементами $H_{ii} = \alpha$, $H_{ij} = \beta$ для соседних атомов С и $H_{ij} = 0$ для остальных пар атомов. Форму и относительные энергии хюккелевских МО (см., например, [29, 83] и цитированную там литературу) для высокосимметричных молекул можно вывести из теоретико-групповых соотношений.

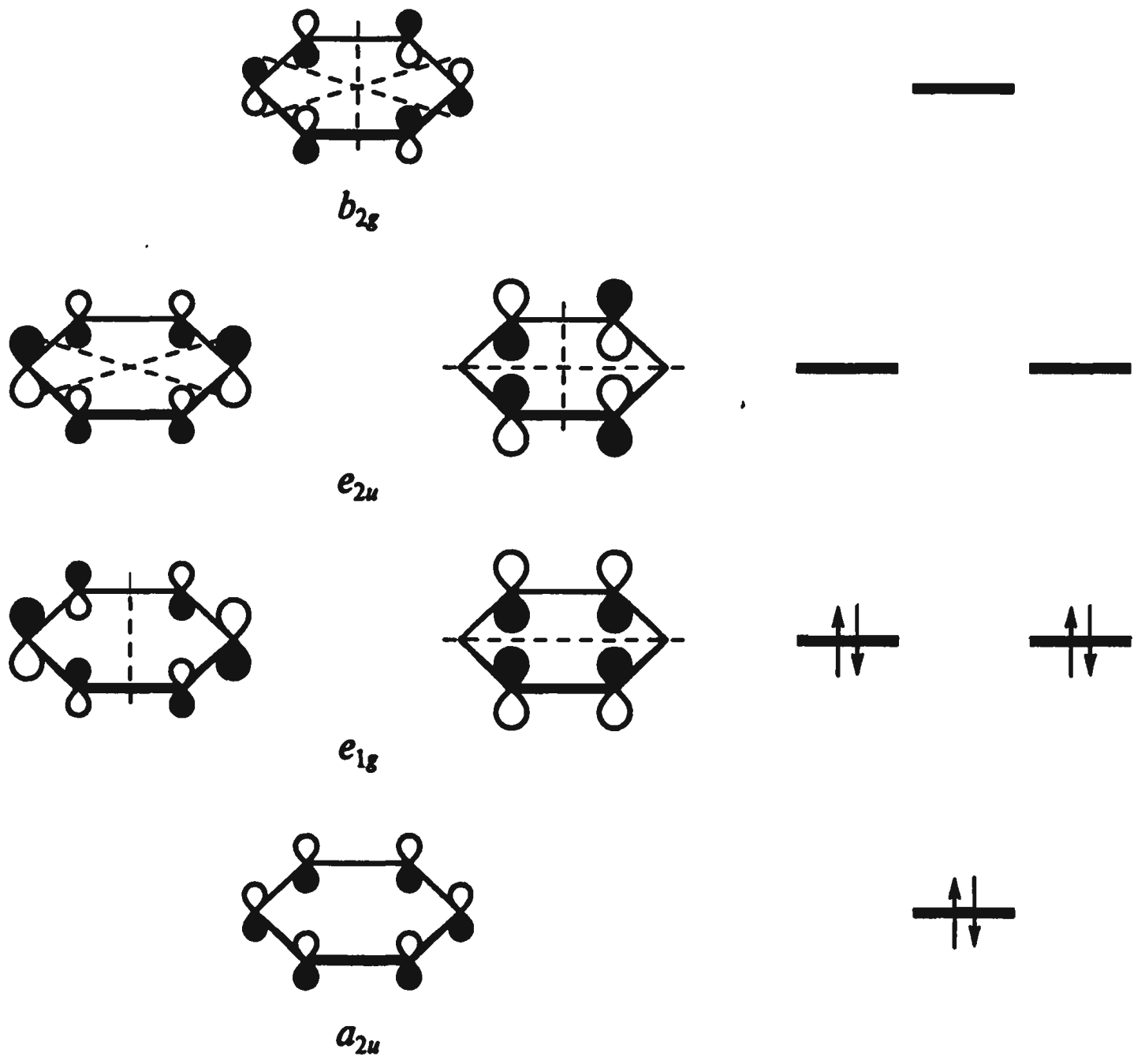


Рис. 5.7. Молекулярные π-орбитали бензола (штриховые линии — узловые поверхности)

На рис. 5.7 изображены π-МО бензола C_6H_6, построенные в приближении ЛКАО действием проекционных операторов (5.29) на набор $(\phi_1, \ldots, \phi_6)$ шести p_z-АО ее атомов углерода. Для упрощения вывода этих МО воспользуемся «клеточным» видом таблицы характеров точечной группы $D_{6h} = C_{6v} \times C_s$: используем только операции группы C_{6v} и затем укажем неприводимые представления полученных π-МО в группе D_{6h} (табл. 5.4). Легко убедиться, что в группе C_{6v} ненулевые линейные комбинации p_z-АО создаются только операторами $\hat{O}^{(\alpha)}$ представлений

$$\Gamma_\pi = A_1 + B_2 + E_1 + E_2.$$

Операторы одномерных представлений A_1 и B_2 дают одинаковые результаты при действии на любую функцию базиса $(\phi_1, \ldots, \phi_6)$. В то же время операторы двумерных представлений E_1 и E_2 при действии на ϕ_1 и ϕ_2 порождают разные функции:

$$\hat{O}^{E_1}\phi_1 = 2\phi_1 + \phi_2 - \phi_3 - 2\phi_4 - \phi_5 + \phi_6 = \xi_1,$$
$$\hat{O}^{E_1}\phi_2 = \phi_1 + 2\phi_2 + \phi_3 - \phi_4 - 2\phi_5 - \phi_6 = \xi_2;$$
$$\hat{O}^{E_2}\phi_1 = 2\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + 2\phi_4 - \phi_5 - \phi_6 = \zeta_1,$$
$$\hat{O}^{E_2}\phi_2 = -\phi_1 + 2\phi_2 - \phi_3 - \phi_4 + 2\phi_5 - \phi_6 = \zeta_2.$$

Таблица 5.4

Характеры представления атомных p_z-орбиталей молекулы C_6H_6 (Γ_π) в группах C_{6v} и D_{6h}

Группа C_{6v}							Группа D_{6h}
НП	e	C_6^1, C_6^5	C_3^1, C_3^2	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	
A_1	1	1	1	1	1	1	A_{2u}
A_2	1	1	1	1	−1	−1	
B_1	1	−1	1	−1	1	−1	
B_2	1	−1	1	−1	−1	1	B_{2g}
E_1	2	1	−1	−2	0	0	E_{1g}
E_2	2	−1	−1	2	0	0	E_{2u}
Γ_π	6	0	0	0	2	0	$A_{2u} + B_{2g} + E_{1g} + E_{2u}$
$E_1 \times E_2$	4	−1	1	−4	0	0	$B_{1u} + B_{2u} + E_{1u}$

Полученные орбитали ξ_1, ξ_2 и ζ_1, ζ_2 вырожденных электронных состояний можно ортогонализовать:

$$\psi_{1,2}(e_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1 \pm \xi_2), \quad \psi_{1,2}(e_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_1 \pm \zeta_2).$$

В точечной группе D_{6h} окончательно получим

$$\begin{aligned}
\psi(a_{2u}) &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 + \phi_5 + \phi_6),\\
\psi_1(e_{1g}) &= \frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2 - \phi_4 - \phi_5),\\
\psi_2(e_{1g}) &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(\phi_1 - \phi_2 - 2\phi_3 - \phi_4 + \phi_5 + 2\phi_6),\\
\psi_1(e_{2u}) &= \frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2 + \phi_4 - \phi_5),\\
\psi_2(e_{2u}) &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(\phi_1 + \phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4 + \phi_5 - 2\phi_6),\\
\psi(b_{2g}) &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 + \phi_5 - \phi_6).
\end{aligned} \tag{5.33}$$

На рис. 5.7 в качественной форме показано расположение симметризованных π-МО бензола по энергии (возрастающей с увеличением числа узловых поверхностей, на которых волновая функция обращается в нуль). В основном электронном состоянии молекулы C_6H_6 три из шести π-МО полностью заполнены

электронами в соответствии с принципом Паули (подразд. 5.1.4), отвечая замкнутой электронной конфигурации вида (5.31):

$$\Psi_0(\pi) = a_{2u}^2 e_{1g}^4 e_{2u}^0 b_{2g}^0,$$

где верхние индексы показывают числа электронов на соответствующих ЛКАО. Первому возбужденному состоянию соответствует недозаполненная (*открытая*) конфигурация

$$\Psi_1(\pi) = a_{2u}^2 e_{1g}^3 e_{2u}^1 b_{2g}^0.$$

Симметризованные МО ЛКАО используют при выводе правил отбора для электронных переходов, проявляющихся в видимой и УФ областях спектра. В соответствии с (5.22) электронные дипольные переходы молекул с полносимметричным основным состоянием (без участия колебаний) разрешены в УФ-спектрах, если в представлении $\Gamma(\text{ВЗМО} \times \text{НСМО})$ содержатся неприводимые компоненты $\Gamma(xyz)$. Можно показать [92, гл. 7, § 7.9], что замкнутая электронная конфигурация всегда отвечает полносимметричному неприводимому представлению многоэлектронной функции вида (5.31). Для бензола в группе D_{6h} π-конфигурация Ψ_0 полносимметрична, а e_{1g}^3-компонента конфигурации Ψ_1 эквивалентна одной электронной вакансии («дырке») на e_{1g}-МО:

$$\Gamma(\Psi_0) = A_{1g}, \qquad \Gamma(\Psi_1) = E_{1g} \times E_{2u} = B_{1u} + B_{2u} + E_{1u}.$$

В частности, для $\pi \to \pi^*$-перехода с наинизшей энергией $\Psi_0 \to \Psi_1$ разрешена $E_{1u} = \Gamma(x, y)$-компонента, поляризованная в плоскости молекулы.

Понижение молекулярной симметрии от группы G к подгруппе $H \subset G$ вызывает расщепление тех вырожденных состояний, многомерные представления которых в G становятся приводимыми в группе H. Например, в молекуле бромбензола C_6H_5Br (точечная группа C_{2v}) двукратно вырожденные электронные состояния бензольного ядра расщепляются, поскольку все неприводимые представления в C_{2v} одномерны. Чтобы найти компоненты неприводимого представления $\Gamma_i(G)$ группы G в ее подгруппе H (в частности, представление e_{1g}-ВЗМО бензола в C_6H_5Br), надо записать все компоненты характера $\chi[\Gamma_i(G)]$ относительно оставшихся в H операций симметрии и привести полученное представление группы H по обычной схеме. В выбранном примере, согласно табл. 3.7, запишем

C_{2v}	e	C_2^z	σ_{xz}	σ_{yz}
$\psi(e_{1g})$	2	0	−2	0

откуда сразу получается расщепление вырожденной π-ВЗМО бензольного ядра в молекуле C_6H_5Br:

$$\Gamma(\text{«}e_{1g}\text{»}) = A_2 + B_2,$$

где символом «e_{1g}» обозначено представление, порожденное π-орбиталью бензола $\psi(e_{1g})$) в группе C_{2v}.

5.2.3. Электронно-колебательные взаимодействия

В адиабатическом приближении (5.30) электронно-ядерная волновая функция молекулы $\Psi(\vec{r}, Q)$ разделяется на функцию системы электронов $\psi(r, Q_0) = \psi_{Q_1,\ldots,Q_{3N-6}}(r_1, \ldots, r_n)$, зависящую от координат ядер $\{Q_0\}$ как от непрерывных параметров, и функцию колебательного движения ядер $\Phi(Q)$:

$$\Psi(r, Q) = \psi(r, Q_0)\Phi(Q)$$

(см. (5.30)). При отказе от этого приближения электронные и ядерные координаты смешиваются, а матричные элементы переходов $\Psi_{i\alpha} \to \Psi_{j\beta}$ зависят одновременно от r и Q. Такие электронно-колебательные, или *вибронные*, переходы наблюдаются в УФ-спектрах высокого разрешения.

Вибронные переходы обычно рассматривают по теории возмущений [92, гл. 8], разлагая молекулярный гамильтониан $\hat{H}(r, Q) = H_0(r) + H'(r, Q)$ в ряд по нормальным колебаниям $\{Q_\alpha\}$ и оставляя только линейные члены:

$$H' \simeq \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \left(\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha}\right)_0 Q_\alpha = \sum_\alpha V_\alpha Q_\alpha. \qquad (5.34)$$

Волновые функции i-го электронного состояния $\psi_i(r, Q)$ в первом порядке теории возмущений

$$\psi_i^{(1)}(\vec{r}, Q) = \psi_i^{(0)}(\vec{r}, Q_0) + \sum_{i \neq j} V_{ij}^{(\alpha)} Q_\alpha \psi_j^{(0)}(\vec{r}, Q_0) \qquad (5.35)$$

зависят от интегралов $V_{ij}^{(\alpha)} = (E_j^{(0)} - E_i^{(0)})^{-1} \langle \psi_j^{(0)} | V_\alpha | \psi_i^{(0)} \rangle$, отражающих смешивание разных электронных состояний молекулы под действием нормального колебания Q_α.

Матричный элемент перехода молекулы из основного электронно-колебательного состояния Ψ_{00} в дипольном приближении имеет вид

$$\mathbf{M_{00}^{i\alpha}} = \langle \Psi_{00}|\vec{r}|\Psi_{i\alpha}\rangle = \int\int \psi_0(\vec{r},Q)\vec{r}\,\psi_i(\vec{r},Q)\Phi_0^{(0)}(Q)\Phi_\alpha^{(i)}(Q)d\vec{r}dQ =$$

$$= \int \langle \psi_0|\vec{r}|\psi_i\rangle \Phi_0^{(0)}\Phi_\alpha^{(i)}dQ = \int \mathbf{m_{0i}}(Q)\Phi_0^{(0)}\Phi_\alpha^{(i)}dQ,$$

где $\mathbf{m_{0i}}(Q)$ — матричный элемент электронного перехода, зависящий от колебательной координаты, а волновая функция $\Phi_\alpha^{(i)}$ соответствует возбуждению нормального колебания Q_α в i-м электронном состоянии.

В случае слабого электронно-колебательного взаимодействия $\mathbf{m_{0i}}(Q) \approx \text{const}$, т. е.

$$\mathbf{M_{00}^{i\alpha}} \simeq \mathbf{m_{0i}}\langle \Phi_0^{(0)} \mid \Phi_\alpha^{(i)}\rangle. \tag{5.36}$$

Колебательные функции $\Phi_0^{(0)}$ и $\Phi_\alpha^{(i)}$, входящие в (5.36), при $\alpha \neq 0$ не ортогональны, так как геометрические параметры молекулы в основном и возбужденном состояниях обычно различаются.

Однако интеграл перекрывания этих функций $\langle \Phi_0^{(0)}|\Phi_\alpha^{(i)}\rangle$ (*интеграл Франка — Кондона*) обращается в нуль, если функция $\Phi_\alpha^{(i)}$ не полносимметрична.

Поэтому полосы в низкотемпературных УФ-спектрах при слабом вибронном взаимодействии состоят из электронно-разрешенных ($\mathbf{m_{0i}} \neq \mathbf{0}$) переходов с $\Phi_0^{(0)}$ на полносимметричные колебательные уровни i-го электронного состояния, а также на их обертоны (рис. 5.8). Для переходов с возбужденных колебательных состояний основного уровня $\Phi_\beta^{(0)}$ выполняется условие $\langle \Phi_\beta^{(0)}|\Phi_\alpha^{(i)}\rangle \neq 0$, т. е. $\Gamma(Q_\beta \times Q_\alpha) \supset \Gamma_0$.

Если в адиабатическом приближении «электронный» матричный элемент перехода $\mathbf{m_{0i}}(Q_0)$ равен нулю по симметрии, т. е. $\Gamma(\psi_i)$ не содержит компонент $\Gamma(xyz)$, переход $\Psi_{00} \to \Psi_{i\alpha}$ все же может наблюдаться в УФ-спектре за счет перемешивания с разрешенным электронным переходом $\psi_0 \to \psi_j$ под действием колебания Q_α. В этом случае

$$\mathbf{M_{00}^{i\alpha}} \simeq \mathbf{m_{0j}} V_{ij}^{(\alpha)} \langle \Phi_0^{(0)}|\Phi_\alpha^{(i)}\rangle,$$

и правило отбора (5.22) для ненулевых матричных элементов $V_{ij}^{(\alpha)}$ дает $(\Gamma(\psi_i) \times \Gamma(\psi_j)) \cap \Gamma(Q_\alpha) \neq 0$. Поскольку переход $\psi_0 \to \psi_j$ разрешен, т. е. $\Gamma(\psi_j) \cap \Gamma(\vec{r}) \neq 0$, имеем

$$(\Gamma(Q_\alpha) \times \Gamma(\psi_i)) \cap \Gamma(\vec{r}) \neq 0,$$

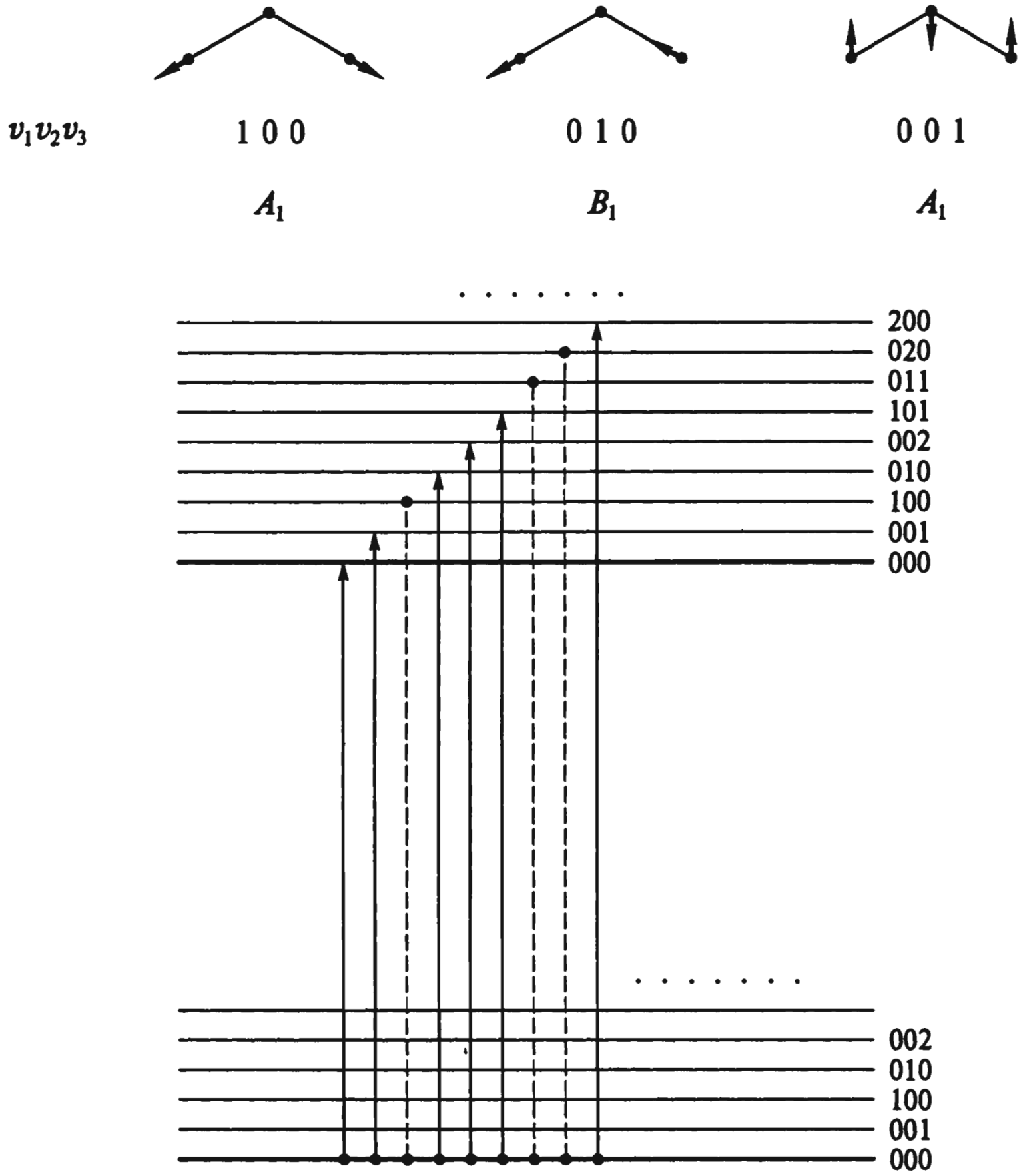


Рис. 5.8. Разрешенные и запрещенные электронно-колебательные переходы в молекуле AB_2 (C_{2v}) при слабом вибронном взаимодействии

т. е. в произведении представлений конечного электронного состояния и возмущающего колебания Q_α должны содержаться компоненты $\Gamma(xyz)$. А поскольку представление функции ψ_i таких компонент не содержит (переход $\psi_0 \to \psi_i$ запрещен), колебание Q_α в данном случае обязано быть неполносимметричным. В частности, в УФ-спектре бензола под действием нормальных колебаний E_{2g}-типа могут проявляться электронные переходы $A_{1g} \to B_{1u}$ и $A_{1g} \to B_{2u}$, запрещенные в адиабатическом приближении, так как

$$b_{1u} \times e_{2g} = b_{2u} \times e_{2g} = e_{1u} = \Gamma(x, y).$$

Вывод правил отбора по симметрии для вибронных переходов общего типа можно найти в [92] и в литературе по спектроскопии (см., например, [23, 31]).

5.2.4. Химические приложения симметрии

Одним из проявлений электронно-колебательных взаимодействий является часто упоминаемый в химической литературе *эффект Яна — Теллера*: самопроизвольное искажение геометрии высокосимметричных нелинейных молекул и ионов с вырожденным основным электронным состоянием. Его причиной является энергетически выгодное расщепление электронных уровней при снятии вырождения из-за понижения симметрии. Форма ян-теллеровских искажений определяется матричными элементами возмущений $\langle\psi_i|Q_\alpha|\psi_i\rangle$, где ψ_i — вырожденная МО в исходной высокосимметричной конфигурации молекулы или иона, а Q_α — нормальное колебание. Таким образом, *активные* колебания, приводящие к искажениям молекулы, удовлетворяют условию

$$\big([\Gamma(\psi_i)\times\Gamma(\psi_i)]^+\times\Gamma(Q_\alpha)\big)\cap\Gamma_0\neq 0,$$

или

$$[\Gamma(\psi_i)\times\Gamma(\psi_i)]^+\cap\Gamma(Q_\alpha)\neq 0, \tag{5.37}$$

где Γ_0 — полносимметричное представление. Иными словами, представление возмущающих атомных смещений должно содержаться в симметризованном квадрате представления вырожденного электронного состояния. Доказано, что условие (5.37) выполняется для всех конечных точечных групп [52, § 102].

Примером ян-теллеровских структур могут служить координационные соединения кобальта(II) с искаженно-октаэдрическим ближайшим окружением атома Co лигандами L (NH_3, H_2O, CN^- и др.). В соответствии с (4.22), пятикратно вырожденные d-орбитали атома переходного металла (представление $D_g^{(2)}$ группы $O(3,\mathbb{R})$, см. п. 4.3) образуют в группе O_h приводимое представление и расщепляются на T_{2g}- и E_g-компоненты. Размещение семи валентных электронов иона $Co^{(2+)}$ в неискаженном октаэдрическом окружении на этих уровнях в рамках теории поля лигандов (подробнее рассмотренной далее в п. 5.4.4) дает вырожденное неполносимметричное электронное состояние

$$\psi(E_g)=t_{2g}^6e_g^1.$$

Представление, порожденное валентными колебаниями шести связей Co — L в октаэдрическом фрагменте CoL_6 (без учета собственных колебаний лигандов) легко привести по таблице характеров группы O_h (прил. 2):

$$\Gamma_v=a_{1g}+e_g+t_{1u}. \tag{5.38}$$

Нормальные колебания E_g-типа совпадают по симметрии с одной из компонент произведения $[E_g \times E_g]^+ = A_{1g} + E_g$ и, таким образом, могут искажать геометрию координационного окружения иона Co^{2+}. Форма этих колебаний соответствует растяжению двух противоположных связей Co — L и укорочению четырех остальных связей с превращением октаэдра в квадратную бипирамиду (группа D_{4h}). Пользуясь таблицей характеров этой группы из прил. 2, можно непосредственно проверить, что исходные электронные состояния t_{2g} и e_g при таком искажении расщепляются (рис. 5.9):

$$\Gamma(\text{«}t_{2g}\text{»}) = B_{1g} + E_g, \qquad \Gamma(\text{«}e_g\text{»}) = A_{1g} + B_{1g}.$$

Отметим, что октаэдрические комплексы ионов $Co^{(3+)}$ с невырожденной полносимметричной электронной конфигурацией $t_{2g}^6 e_g^0$ не искажены.

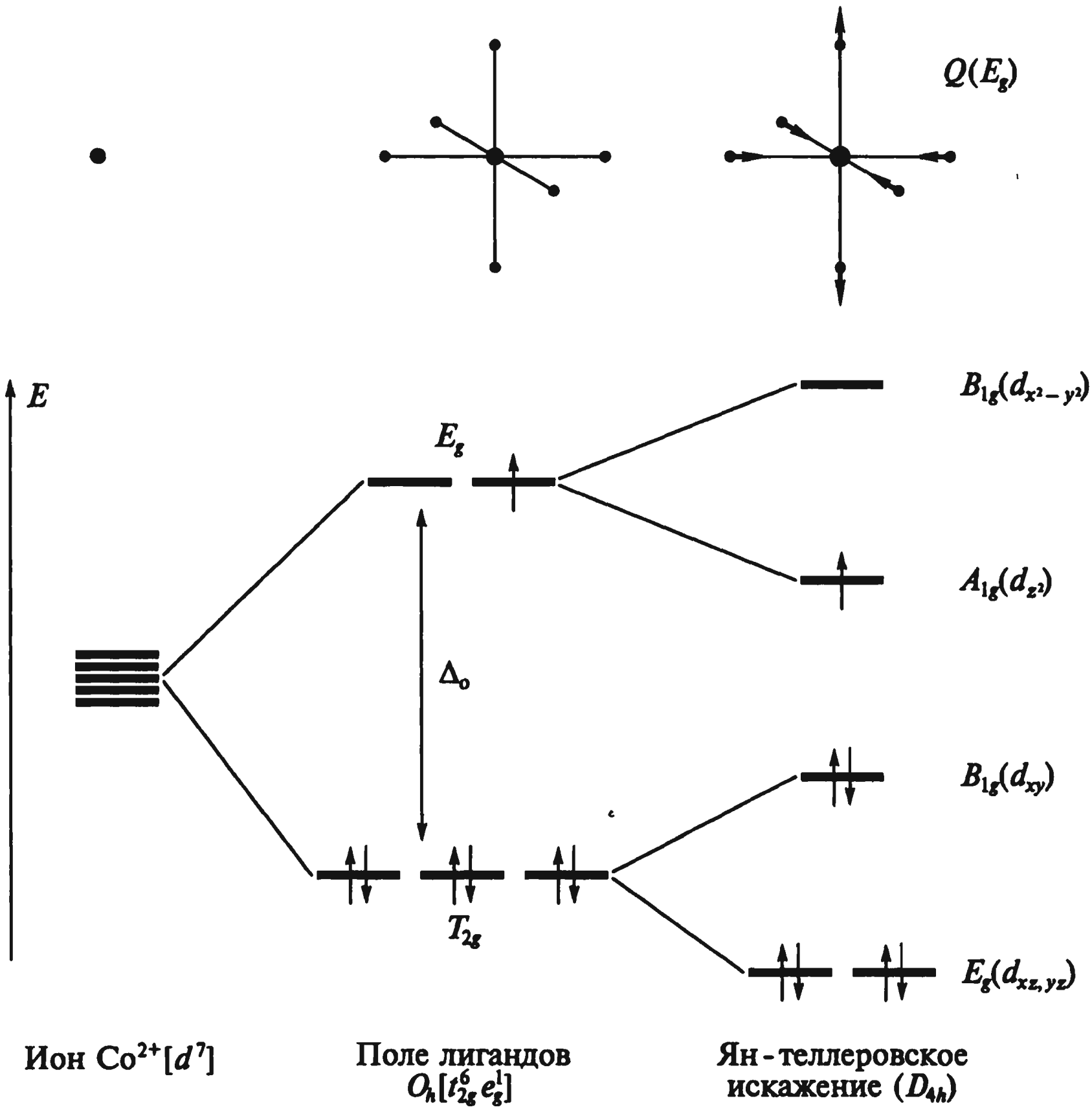


Рис. 5.9. Расщепление атомных d-орбиталей и ян-теллеровское искажение октаэдрических комплексов иона Co^{2+}

У п р а ж н е н и е 5.4. Получить перечисленные выше результаты для октаэдрического комплекса ML_6.

Энергию электронных состояний многоатомной молекулы можно рассчитать с варьированием молекулярной геометрии приближенными методами, основанными на модельном «одноэлектронном» гамильтониане Хартри — Фока. В химической литературе результаты таких расчетов нередко представляют в виде *диаграмм Уолша*: графиков изменения энергии одноэлектронных ЛКАО при варьировании выбранного геометрического параметра молекулы. Для малых молекул однотипного строения по диаграммам Уолша в ряде случаев можно предсказать зависимость геометрии от общего числа валентных электронов и относительную устойчивость разных геометрических форм молекулы в основном и возбужденном электронных состояниях. Так, молекулы дигидридов AH_2, а также *изоэлектронных* им (имеющих то же общее число валентных электронов при атоме A) галогенидов AX_2 (где X = F, Cl) в случае A = Be с четырьмя валентными электронами линейны, тогда как их аналоги с A = O, S и восемью электронами, а также реакционноспособные *карбеноидные* частицы с A = C, Si и шестью электронами имеют уголковое строение (рис. 5.10).

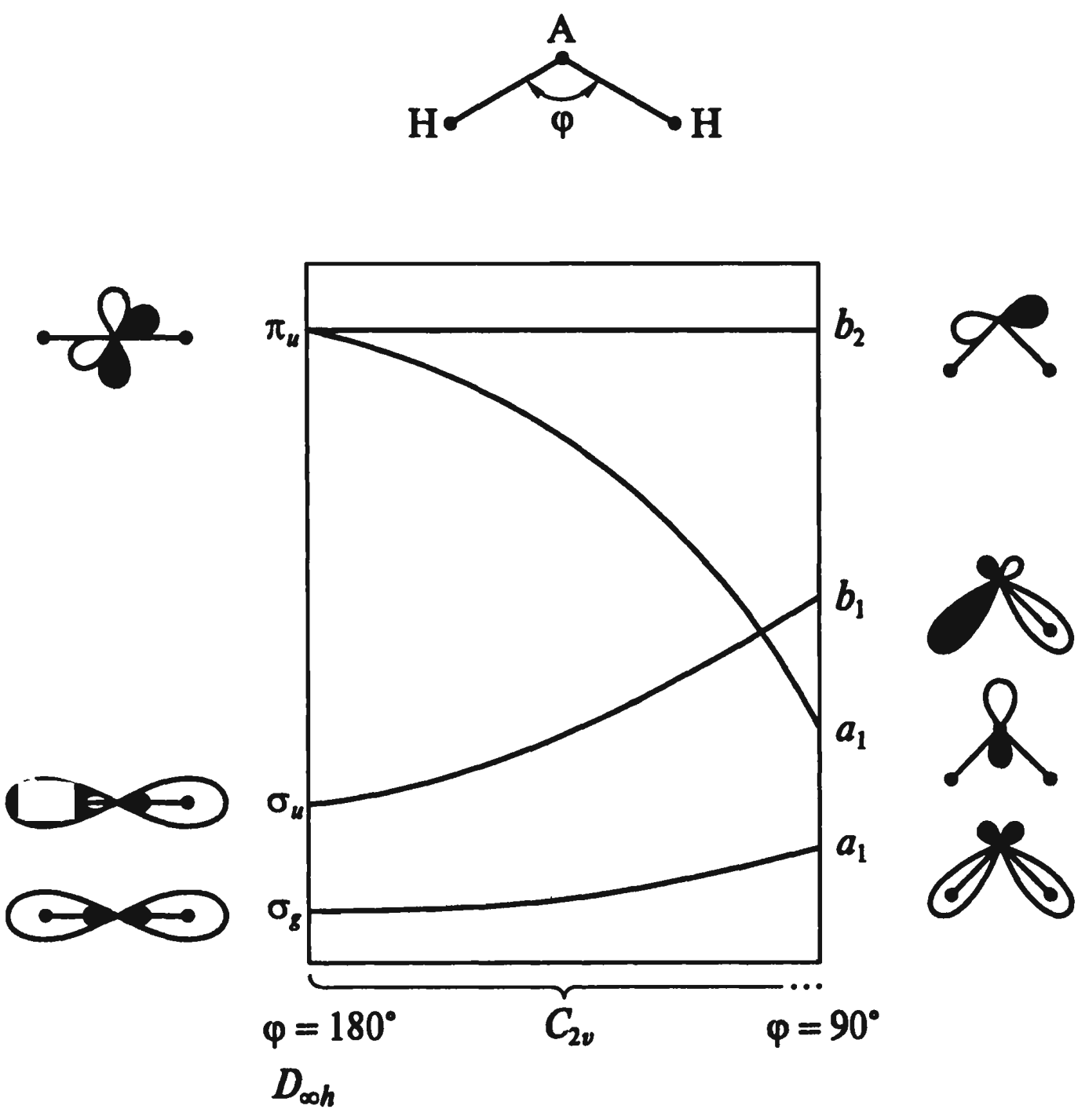


Рис. 5.10. Диаграмма Уолша для дигидридов AH_2

В теоретической химии диаграммами Уолша часто иллюстрируют изменения энергий высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО) при варьировании молекулярной геометрии. На качественном сопоставлении энергий и формы ВЗМО и НСМО молекулярных фрагментов с привлечением теоретико-групповых подходов для оценки их интеграла перекрывания основан *метод граничных орбиталей*, широко используемый в органической химии.

Одним из общих правил построения диаграмм Уолша, вытекающим из адиабатического приближения [52, т. 3, гл. 13], является непересечение состояний, преобразующихся по одному и тому же неприводимому представлению точечной группы рассматриваемой системы. В 1965 г. Вудворд и Хоффман распространили это правило на химические реакции: граничные орбитали соединяющихся молекул в их промежуточном агрегате («переходном состоянии») непрерывно преобразуются в ВЗМО и НСМО продуктов реакции без пересечения энергетических уровней, относящихся к одному типу симметрии (*принцип сохранения орбитальной симметрии*). На основе принципа Вудворда — Хоффмана были выведены правила отбора, позволяющие предсказывать продукты некоторых реакций органической химии [29].

5.3. СИММЕТРИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Высокая трансляционная симметрия кристаллов непосредственно определяет многие их свойства. В этом разделе мы рассмотрим связь физических характеристик кристаллов с их точечными и пространственными группами.

5.3.1. Матрица термодинамических коэффициентов

Феноменологическое описание состояния кристаллической среды в поле внешних сил строят на основе термодинамических потенциалов. Напомним, что состояние изотропной однокомпонентной системы (например, газа) характеризуется двумя *обобщенными силами* (температурой T и давлением p) и двумя *обобщенными координатами* (энтропией S и объемом V). Их функциями являются четыре взаимосвязанных *термодинамических потенциала*: внутренняя энергия U, энтальпия $H = U + pV$, потенциал Гельмгольца $F = U - TS$ и потенциал Гибб-

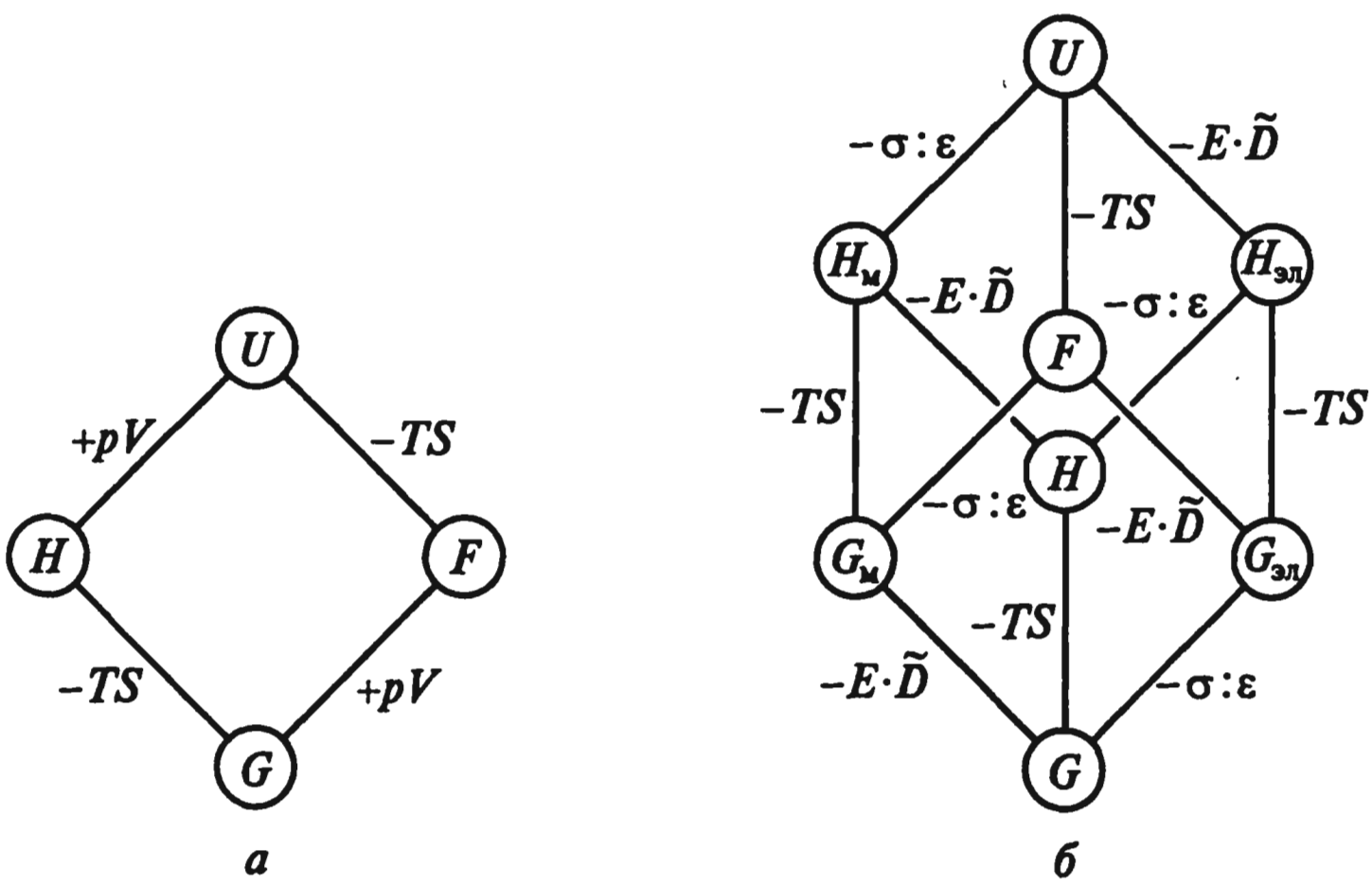


Рис. 5.11. Термодинамические потенциалы:
а — газа («термодинамический квадрат»); *б* — кристалла в электрическом поле («термодинамический куб»)

са $G = F + pV = U - TS + pV$ (рис. 5.11, *а*). Приращения внутренней энергии U и потенциала Гиббса G при изменении состояния системы равны

$$\begin{aligned} dU &= \delta Q - \delta W = TdS - pdV, \\ dG &= -SdT + Vdp, \end{aligned} \tag{5.39}$$

где $\delta Q = TdS$ — приращение теплоты в системе; $\delta W = pdV$ — работа, совершенная системой [84, гл. 2].

Для кристалла в отсутствие магнитного поля аналогами (5.39) служат термодинамические соотношения*

$$\begin{aligned} dU &= TdS + \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathrm{D}} + \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon} = \sum X_i dx_i, \\ dG &= -SdT - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathrm{E} - \boldsymbol{\varepsilon} : d\boldsymbol{\sigma} = \sum x_i dX_i, \end{aligned} \tag{5.40}$$

где $\mathbf{E}$ — вектор напряженности электрического поля; $\tilde{\mathbf{D}} = \dfrac{1}{4\pi}\mathbf{D}$ — нормированный вектор диэлектрического смещения $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ ($\mathbf{P}$ — вектор поляризации среды); $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_{ij}\}$ — тензор механических напряжений (симметричный тензор 2-го ранга); $\boldsymbol{\varepsilon} = \{\varepsilon_{ij}\}$ — такой же тензор деформаций.

В равновесном начальном состоянии (S_0, T_0) без приложенных извне полей все компоненты $\{x_i\}$ и $\{X_i\}$ равны нулю. Дифференцируя потенциал Гиббса (5.40) как функцию нескольких переменных $[df(x,y) = (\partial f/\partial x)dx + (\partial f/\partial y)dy]$ и разлагая $x_i = -\partial G/\partial X_i$ по линейным приращениям обобщенных сил вблизи начального

*Как принято в физической кристаллографии [79], скалярное произведение векторов в этом разделе обозначено (·), произведение двух тензоров 2-го ранга со сверткой по координатам — (:).

состояния, получим связь обобщенных координат $\{x_i\} = (\Delta S, D_i, \varepsilon_{ij})$ и соответствующих им обобщенных сил $\{X_i\} = (\Delta T, E_i, \sigma_{ij})$ (где $\Delta S = S - S_0$, $\Delta T = T - T_0$) через матрицу термодинамических коэффициентов

$$\mathbf{x} = \mathbf{M}\mathbf{X},$$

где $\mathbf{M}$ — симметричная квадратная матрица вторых производных $-(\partial^2 G/\partial x_i \partial x_j)_0$:

$$\mathbf{M} = \left(\begin{array}{c|c|c} c_p/T & p_1 p_2 p_3 & \chi_{11}\chi_{12}\cdots\chi_{33} \\ \hline p_1 \\ p_2 & \{\alpha_{ij}\} & \{d_{ijk}\} \\ p_3 \\ \hline \{\chi_{ij}\} & \{d_{ijk}\} & \{s_{ijkl}\} \end{array}\right)$$

Блоками матрицы M, действующими на соответствующие части вектора обобщенных сил, являются: c_p — скалярная удельная (изобарная) теплоемкость; $\{p_i\}$ — вектор пироэлектрических коэффициентов; $\{\chi_{ij}\}$ — симметричный тензор 2-го ранга коэффициентов теплового расширения; $\{\alpha_{ij}\}$ — такой же тензор диэлектрической проницаемости; $\{d_{ijk}\}$ — тензор 3-го ранга пьезоэлектрических коэффициентов; $\{s_{ijkl}\}$ — симметричный тензор 4-го ранга модулей упругости ($s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk}$).

Тепловые, электрические и механические воздействия на кристалл задают в нем $2^3 = 8$ взаимосвязанных термодинамических потенциалов (рис. 5.11, *б*). Физические явления, наблюдаемые при таких воздействиях, схематически представлены на рис. 5.12 и обсуждаются в [66, 79].

Симметрию тензоров T_{ij} (см. подразд. 7.11), определяющую «правила отбора» для коэффициентов в матрице $\mathbf{M}$, на качественном уровне характеризуют их *указательные поверхности*, задаваемые уравнением

$$\vec{r}(\vec{n}) = \vec{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \vec{n} = \sum T_{ij} n_i n_j,$$

где $\vec{n}$ — единичный вектор в произвольном направлении пространства, $i, j = x, y, z$.

Группа $G_Y^{\text{кр}}$ свойства Y кристалла в соответствии с принципом Кюри является пересечением группы G_Y^0 симметрии этого свойства в «пустом» пространстве и кристаллографического класса $G^{\text{кр}}$:

$$G_Y^{\text{кр}} = G_Y^0 \cap G^{\text{кр}}.$$

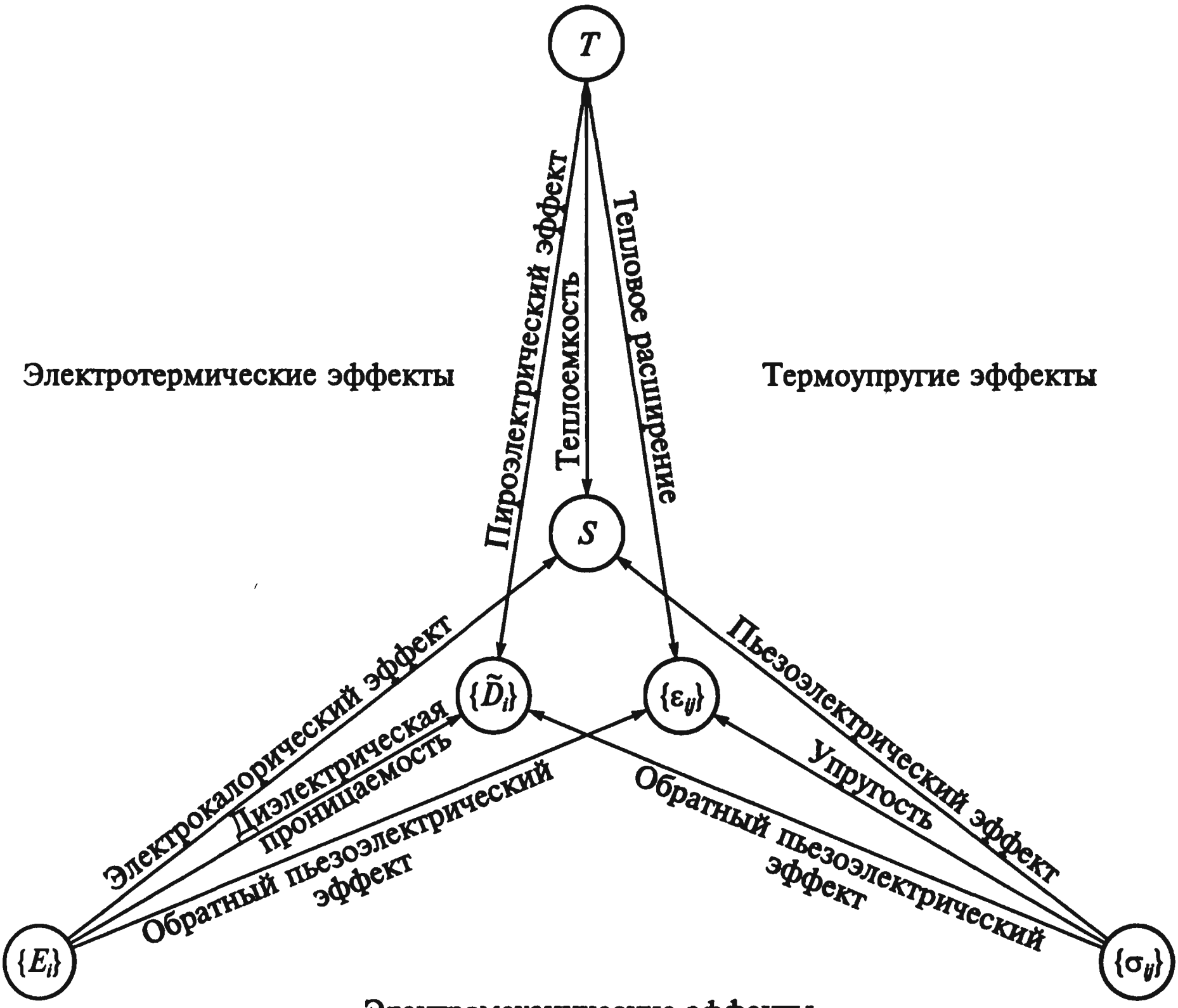


Рис. 5.12. Термодинамические параметры ($T, \{E_i\}, \{\sigma_{i,j}\}$ — обобщенные силы; $S, \{D_i\}, \{\varepsilon_{i,j}\}$ — обобщенные координаты) и физические свойства кристаллов [79, с. 389]

Например, пиро- и пьезоэлектрический эффекты могут наблюдаться только у нецентросимметричных кристаллов, поскольку при наличии центра симметрии $\bar{1}$ все компоненты тензоров нечетных рангов $\{p_i\}$ и $\{d_{ijk}\}$ обращаются в нуль. Можно показать, что кристаллы класса 432 (O) также не имеют (линейных) пьезоэлектрических свойств, а в классах 622 (D_6) и 422 (D_4) не обнаруживают продольного пьезоэлектрического эффекта при одноосном сжатии.

Симметричные тензоры 2-го ранга ($æ, \alpha$) приводятся к диагональному виду, например:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}, \tag{5.41}$$

откуда следует три возможных типа симметрии их свойств: $\infty/m\infty$ (K_h) ($\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{33}$), ∞/mm ($D_{\infty h}$)($\alpha_{11} = \alpha_{22} \neq \alpha_{33}$)

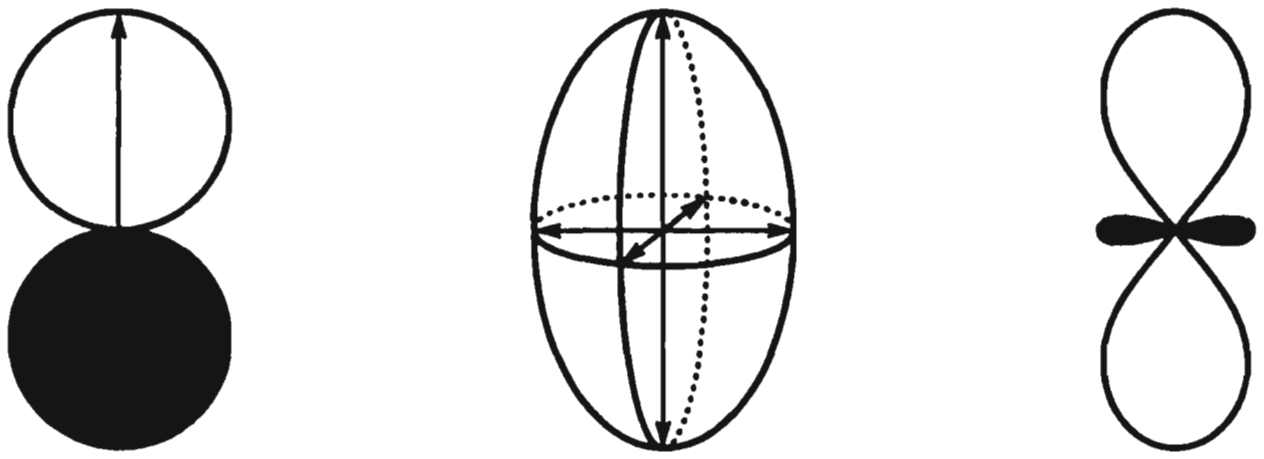


Рис. 5.13. Указательные поверхности:

а — вектора (∞m); *б* — тензора 2-го ранга (mmm; $a_1, a_2, a_3 > 0$); *в* — коэффициента теплового расширения кальцита (∞/mm); отрицательные значения показаны черным

и mmm (D_{2h}) ($\alpha_{11} \neq \alpha_{22} \neq \alpha_{33}$). Соответственно, диэлектрическая проницаемость и коэффициент расширения кубических кристаллов изотропны и графически изображаются сферой, тогда как в кристаллах средних сингоний этим тензорам отвечают эллипсоиды вращения, а в ромбической сингонии — трехосные эллипсоиды, главные оси которых совпадают с направлениями (**a**, **b**, **c**). В моноклинных кристаллах эти эллипсоиды при изменениях электрического поля (тензор α) и температуры (тензор χ) могут поворачиваться в плоскости симметрии, а в триклинных кристаллах — вокруг произвольного направления в пространстве. Для ряда кристаллов (например, кальцита $CaCO_3$) некоторые из главных компонент тензора χ могут быть отрицательными: размеры такого монокристалла по соответствующему направлению уменьшаются при нагревании (рис. 5.13).

Характеристическая поверхность* тензора диэлектрической проницаемости

$$\vec{r} \cdot \alpha \cdot \vec{r} = 1, \qquad \text{т. е.} \quad \alpha_{ij} x_i x_j = 1, \tag{5.42}$$

называемая *эллипсоидом Френеля*, показывает также и анизотропию оптических свойств кристалла. Кубические кристаллы (где этот эллипсоид становится сферой) оптически изотропны; в кристаллах средней и низшей сингоний наблюдаются двойное лучепреломление и вращение плоскости поляризации света.

Упругие свойства кристаллов в линейном приближении определяются симметричным тензором 4-го ранга $\{s_{ijkl}\}$ по *обобщенному закону Гука*

$$\varepsilon = s : \sigma, \tag{5.43}$$

*В системе координат, совпадающей с главными осями тензора x_1, x_2, x_3, характеристическая поверхность имеет вид $T_1 x_1^2 + T_2 x_2^2 + T_3 x_3^2 = 1$. Для тензоров с $T_1, T_2, T_3 > 0$ она также изображается эллипсоидом.

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ — соответственно тензоры деформаций и напряжения.

Число независимых модулей упругости, входящих в $\{s_{ijkl}\}$, изменяется от 21 в триклинных кристаллах до трех в кубических и двух в изотропных средах (стеклах) симметрии $\infty/m\infty$. (Таким образом, упругие свойства кубического кристалла не изотропны.) Свойства симметрии тензора $\mathbf{s}$ и связанных с ним *тензоров Кристоффеля* определяют распространение звуковых волн в кристалле [79, гл. 6].

Магнитную симметрию кристалла описывают шубниковскими точечными и пространственными группами, содержащими операцию обращения времени $1'$ (см. подразд. 2.13). Экспериментально их находят из данных по дифракции поляризованных нейтронов или (циркулярно поляризованного) рентгеновского синхротронного излучения. Кристаллы 230 «серых» пространственных групп $G \times 1'$ немагнитны, тогда как 230 полярных (белых) и 1191 черно-белых групп допускают магнетизм. Ферромагнитные кристаллы охватывают 275 шубниковских групп, относящихся к 31 магнитному классу: точечным подгруппам группы симметрии аксиального вектора магнитного момента ∞/mm'. (Напомним обозначение $R' = R \cdot 1'$, где R — символ произвольного элемента симметрии.) К шубниковским группам, выводимым из остальных 59 белых и черно-белых точечных групп, а также к черно-белым пространственным группам из 32 «серых» кристаллических классов, относятся, соответственно, антиферромагнетики 1-го и 2-го рода.

Учет влияния магнитного поля — т. е. аксиальных векторов напряженности поля $\mathbf{H}$ и магнитной индукции $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/4\pi$, связанных тензором магнитной проницаемости $\{\tilde{\chi}_{ij}\}$ — увеличивает число термодинамических потенциалов до $2^4 = 16$. В симметричной матрице термодинамических коэффициентов $\mathbf{M}$ (13×13) при этом возникают блоки, отвечающие *пиромагнитному* (*магнитокалорическому*), *пьезомагнитному* и *магнитоэлектрическому* эффектам.

Последний заключается в электрической поляризации кристалла в магнитном поле (прямой магнитоэлектрический эффект) либо в его намагничивании в электрическом поле (обратный магнитоэлектрический эффект). Величины поляризации (соответственно, намагничивания) определяются компонентами несимметричного тензора магнитоэлектрических коэффициентов (2-го ранга) $\{\nu_{ij}\}$, которые могут отличаться от нуля в ряде нецентросимметричных белых и черно-белых точечных групп. Пиро- и пьезомагнетизм наблюдались только в магнитных кристаллах, шубниковские группы которых не содержат инверсии времени $1'$ (табл. 5.5).

Таблица 5.5

Зависимость физических свойств кристаллов от точечной симметрии

Физический эффект	Кристаллографический класс	
	Эффект разрешен	Эффект запрещен
Пироэлектрический, электрокалорический	10 полярных классов: 1, 2, 3, 4, 6, m, $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$	Центросимметричные; 222, 32, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 422, $\bar{6}$, $\bar{6}2m$, 622, 23, 432, $\bar{4}3m$
Сегнетоэлектрические свойства	$T < T_c$: 10 полярных классов $T > T_c$: обычно 222, $\bar{4}2m$, $m\bar{3}m$	То же
Тепловое расширение пьезокалорический	Все классы (анизотропны в низших и средних, изотропны в высших сингониях)	Нет
Прямой и обратный пьезоэлектрический	20 нецентросимметричных	Центросимметричные; 432
Двойное лучепреломление	18 нецентросимметричных: низшие сингонии двуосные, средние сингонии одноосные	Центросимметричные; все кубические
Вращение плоскости поляризации света	1, 2, m, 222, $mm2$, 3, 32, 4, $\bar{4}$, 422, $\bar{4}2m$, 6, 622, 23, 432	Центросимметричные; $3m$, $4mm$, $\bar{6}$, $6mm$, $\bar{6}m2$, $\bar{4}3m$
Ферромагнетизм	Подгруппы ∞/mm' (31 магнитный класс)	«Серые» пространственные групы
Антиферромагнетизм	I тип: 59 «белых» и «черно-белых» магнитных классов; II тип: «белые» и «черно-белые» пространственные групы в «серых» классах	То же
Пиромагнитный	31 ферромагнитный класс	»
Пьезомагнитный	66 магнитных классов*	21 антисимметричный магнитный класс (с операцией $\bar{1} \times 1'$); 432, $\bar{4}32$, $m3m$

Физический эффект	Кристаллографический класс	
	Эффект разрешен	Эффект запрещен
Магнитоэлектрический	58 магнитных классов*	Центросимметричные «серые» и «черно-белые»; $\bar{6}$, $6'$, $6'/m$, $\bar{6}m2$, $\bar{6}m'2'$, $6'm'm$, $6'22'$, $6'/mmm'$, $\bar{4}3'm'$, $4'3'2'$, $m'3m$

* Фактически наблюдались в небольшом числе кристаллов.

Учет кубических членов вида $-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^3 G}{\partial X_i \partial X_j \partial X_k}\right)_0$ в разложении потенциала Гиббса позволяет описать нелинейные эффекты высших порядков — например, квадратичную диэлектрическую проницаемость (тензор 3-го ранга с компонентами $\frac{\partial^3 G}{\partial E_i \partial E_j \partial E_k}$), электрострикцию (тензор 4-го ранга $\frac{\partial^3 G}{\partial E_i \partial E_j \partial \sigma_{kl}}$), фотоупругость и другие поправки, существенные в сильных внешних полях. В частности, генерирование вторых гармоник лазерного излучения с круговой частотой $2\omega_0$ (где ω_0 — частота падающего света) в нецентросимметричных кристаллах сегнетоэлектриков определяется тензором квадратичной поляризации.

5.3.2. Колебательные спектры кристаллов

Трехмерный кристалл, как гигантская молекула из N элементарных ячеек с p независимыми атомами в каждой ячейке, обладает $3Np-6 \simeq 3Np$ (N очень велико) нормальными модами, которые преобразуются операциями симметрии по неприводимым представлениям его пространственной группы G. По аналогии с колебаниями молекул, эти моды можно построить, действуя на смещения $\{\delta\vec{r}\}$ всех атомов кристалла проекционными операторами

$$O[\Gamma_{\alpha p}(\vec{k})] = \sum_{g_i \in G/\mathcal{T}} e^{i\vec{k}\vec{\tau}} \chi_p^{(\alpha)}(g_i) g_i, \qquad (5.44)$$

где $\vec{k}$ — непрерывный трехкомпонентный индекс неприводимого представления подгруппы трансляций $\mathcal{T}$; вектор $\vec{\tau} \in \mathcal{T}$ соответ-

ствует переносу на период повторяемости кристаллической решетки; g_i — операция из фактор-группы $G/\mathcal{T}$ пространственной группы кристалла G по подгруппе его трансляций; α — индекс неприводимого представления этой группы; p — номер компоненты этого представления, если оно многомерно.

Для симморфных пространственных групп $G/\mathcal{T}$ изоморфна точечной группе кристалла, т. е. кристаллографическому классу (см. подразд. 2.3).

В отличие от дискретных частот колебаний молекулы ω_i, частота любой нормальной моды кристалла образует непрерывную полосу $\omega_i(\vec{k})$, где вектор $\vec{k}$ обратной решетки изменяется в пределах симметрически независимой части зоны Бриллюэна. Зависимость смещений от времени t при гармонических колебаниях

$$Q(\omega) = Q_0 e^{i\omega t}$$

дает для нормальной моды кристалла уравнение плоской бегущей волны

$$Q[\omega(\vec{k})] = Q_0 \exp[i(\vec{k}\vec{\tau} - \omega t)] \qquad (5.45)$$

с волновым вектором $\vec{k}$. (Напомним, что функции $\{e^{i\vec{k}\vec{\tau}}\}$ преобразуемые по неприводимым представлениям группы трансляций $\mathcal{T}$, составляют полный набор, по которому можно разложить любую непрерывную функцию.)

Учет трансляционной симметрии в (5.44) позволяет строить приводимое представление $\Gamma\{\delta\vec{r}\}$, действуя операциями пространственной группы G только на смещения p независимых атомов в элементарной ячейке кристалла. Вклады атомных смещений в характер представления $\Gamma\{\delta\vec{r}\}$ определяют по обычным правилам:

$$\chi(g_i) = p(g_i)(2\cos\varphi + 1) \quad \text{для собственных вращений,}$$
$$\chi(g_i) = p(g_i)(2\cos\varphi - 1) \quad \text{для несобственных вращений,} \qquad (5.46)$$

где $p(g_i)$ — число атомов в ячейке, оставляемых операцией g_i на месте либо переносимых ею на трансляцию решетки; $\varphi = 2\pi k/n$ — угол собственного или несобственного поворота в этой операции. Для винтовых поворотов и скользящих отражений, которые переносят все атомы ячейки в симметрически неэквивалентные позиции на $1/m$ периода решетки (где $m \in \mathbb{Z}^1$), $p(g_i) = 0$. Таким образом, при определении нормальных мод кристалла совокупность атомов в его элементарной ячейке служит аналогом молекулы из подразд. 5.2.1. В процедуре приведения используются лишь «закрытые» элементы симметрии пространственной группы G — однако, в отличие от анализа молекулярных колебаний,

учитываются также трансляционно эквивалентные позиции атомов.

Вклад шести линейных комбинаций атомных смещений, отвечающих сдвигам и поворотам кристалла как целого, в бесконечномерное представление $\Gamma\{\delta\vec{r}\}$, пренебрежимо мал и потому не учитывается. Но разложение вектора смещений $\vec{r} = (x, y, z)$ по плоским волнам, т. е. представление $\Gamma(xyz)e^{i\vec{k}\vec{\tau}}$ отвечает трем физически реализуемым независимым колебаниям с параллельными сдвигами атомов во всех элементарных ячейках кристалла. Такие колебания, соответствующие распространению в кристалле звуковых волн, называются *акустическими*, а прочие $(3p-3)$ нормальных мод кристалла — *оптическими*.

При $k \to 0$ частоты акустических колебаний $\omega_{ак}(\vec{k})$ линейно ($e^x \sim 1+x$ при малых x) стремятся к нулю, а отвечающее им представление становится представлением смещений кристалла как целого $\Gamma(xyz)$. Длины волн для акустических мод, очевидно, не могут быть меньше периодов элементарной ячейки. Максимальная частота акустических колебаний ω_D называется *дебаевской частотой* кристалла, а отвечающая ей эффективная температура $\Theta = \hbar\omega_D/k_B$, где k_B — постоянная Больцмана, — *температурой Дебая*.

Полосы оптических колебаний $\omega_{оп}(\vec{k})$ при k=0 преобразуются по неприводимым представлениям точечной группы кристалла, а при $\vec{k} \neq 0$ — по представлениям локальной группы вектора $\vec{k}$, образующего звезду ${}^*\vec{k}$. Таким образом, размерности представлений $\Gamma[\omega_i(0)]$ (для оптических мод) равны размерностям неприводимых представлений соответствующей кристаллографической группы, а $\Gamma[\omega_i(\vec{k})]$ (для любых мод) — размерностям представлений их локальной точечной группы, умноженным на число векторов в звезде ${}^*\vec{k}$ (см. подразд. 3.14).

Атомные смещения при акустических и оптических колебаниях схематично показаны на рис. 5.14 на примере двумерного ортогонального кристалла, составленного из двухатомных молекул. Такой кристалл, очевидно, имеет две акустические и две оптические моды; последние включают высокочастотную моду $\omega_в(\vec{k})$, составленную из валентных колебаний молекул, и низкочастотную моду $\omega_л(\vec{k})$ их крутильных колебаний (*либраций*) в плоскости рисунка.

Нормальные моды трехмерного кристалла определим на примере алмаза, принадлежащего к несимморфной кубической группе $Fd\bar{3}m$ (O_h^7) с двумя атомами C в минимальной элементарной ячейке (рис. 5.15, *а*). Позиции этих атомов (0,0,0) и ($^1/_4$, $^1/_4$, $^1/_4$, $^1/_4$) в обычной ГЦК-ячейке учетверенного объема (см.

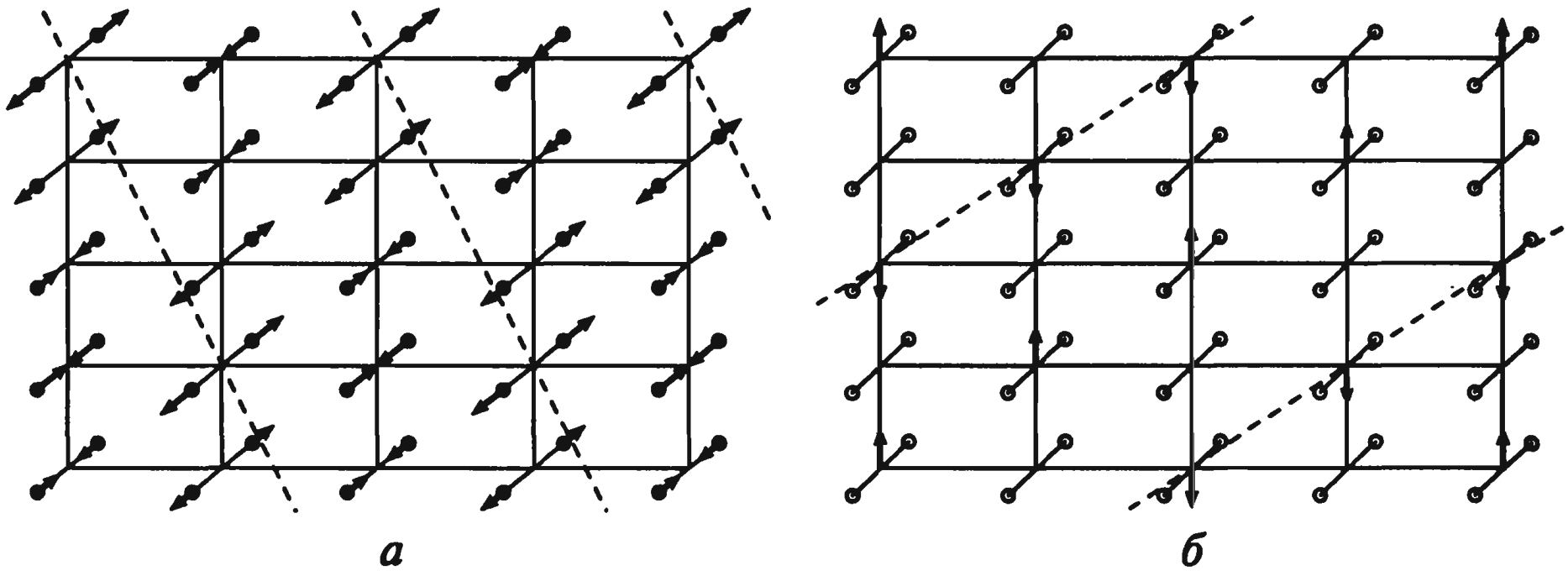


Рис. 5.14. Оптическая ($а$) и акустическая ($б$) моды двумерного кристалла

рис. 2.8) имеют локальную симметрию $4\bar{3}m$ (T_d) и связаны «открытыми» операциями симметрии: винтовыми осями 4_1 и «алмазными» плоскостями d. Такую же структуру имеют кубические кристаллы Si и Ge. Применяя соотношения (5.46), можно найти представление атомных смещений по таблице характеров группы T_d:

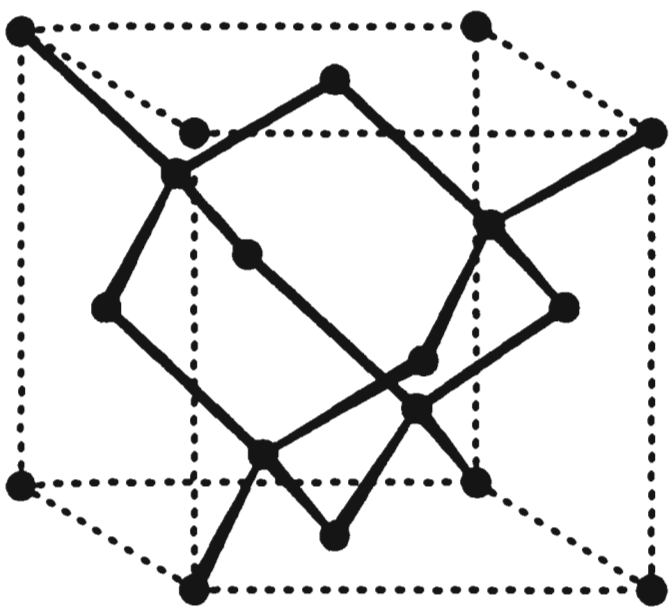
	e	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
$\Gamma\{\delta\vec{r}\}$	6	0	−2	0	0,

откуда в группе $O_h = T_d \times C_i$ имеем

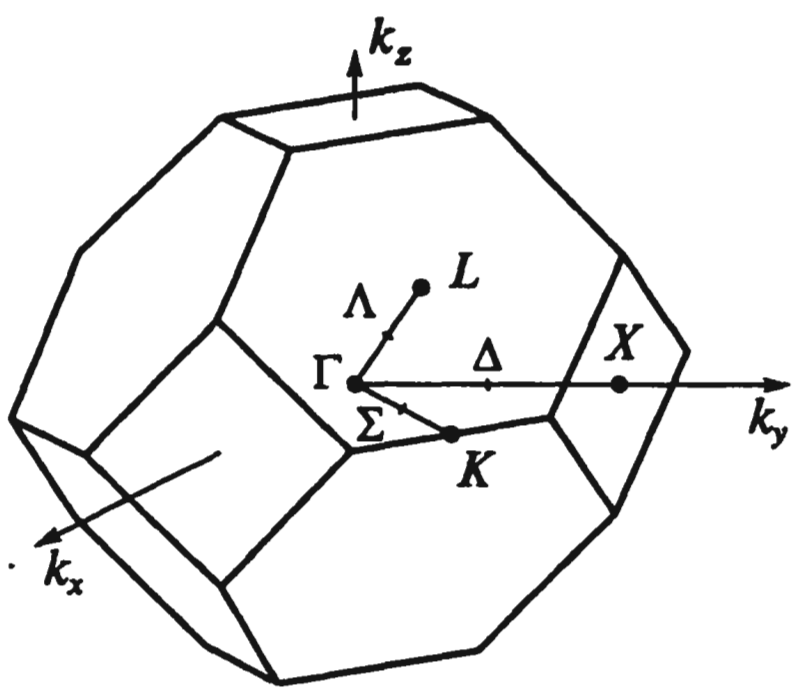
$$\Gamma\{\delta\vec{r}\} = T_{1u} + T_{2g}.$$

Представление T_{1u} в группе O_h отвечает смещениям (x, y, z), т. е. трижды вырожденной акустической моде, а T_{2g} — трижды вырожденной оптической моде, разрешенной в КР-спектре.

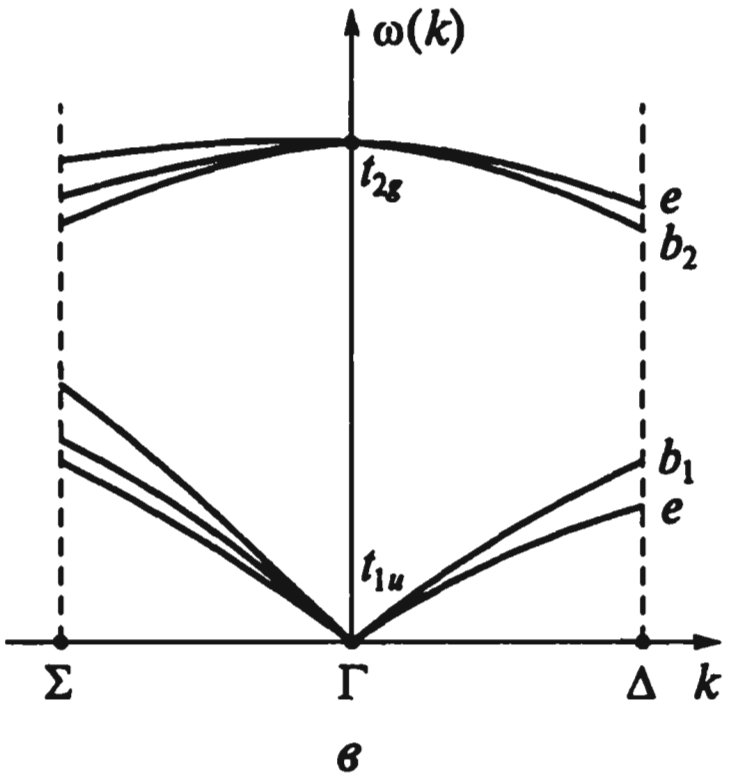
При $\vec{k} \neq 0$ акустические и оптические ветви колебательного спектра расщепляются. Так, локальные группы вектора k в точках Λ (C_{3v}) и Δ (C_{4v}) зоны Бриллюэна (рис. 5.15, $б$) задают расщепление трижды вырожденного оптического колебания t_{2g} на невырожденную и дважды вырожденную компоненты ($a_1 + e$ в точке Λ и $b_2 + e$ в точке Δ, рис. 5.15, $в$). В точке Σ (локальная группа C_{2v}) происходит полное расщепление «t_{2g}» $\rightarrow a_1 + a_2 + b_1$. В действительности расщепление и дисперсия оптической КР-полосы кристаллического алмаза с волновым числом 1333 см$^{-1}$ очень невелики (ее полуширина около 2 см$^{-1}$), однако полосы колебаний кристаллов Si и Ge значительно шире. По колебательным спектрам можно идентифицировать полиморфные модификации, различающиеся пространственными группами G и количествами атомов p в элементарной ячейке.



а



б



в

Рис. 5.15. Кристаллическая структура (*а*); зона Бриллюэна (*б*) и колебательные дисперсионные кривые (*в*) алмаза (пространственная группа $Fd\bar{3}m$)

У п р а ж н е н и е 5.5. Найти представления колебаний $\omega(0)$ кристалла перовскита $CaTiO_3$ (пространственная группа $Pm\bar{3}m$, см. рис. 5.24, *а*).

Из дисперсионных кривых $\omega_i(\vec{k})$ можно рассчитать макроскопические характеристики кристалла — в частности, температурную зависимость удельной теплоемкости (при $T < \Theta$ возбуждаются только акустические моды и $c_v \sim T^3$). Для описания теплового расширения и теплопроводности кристалла необходимо учитывать ангармонические поправки $\partial^n U/\partial Q_i ... \partial Q_k$ $(n = 3, 4)$ к потенциалу межатомных взаимодействий*. Показателем ангармоничности колебаний кристалла служит *параметр Грюнайзена* $\gamma = \partial(\ln\Theta)/\partial(\ln V)$, связывающий (изотропный) коэффициент

*В гармоническом приближении кристалл имеет нулевой коэффициент теплового расширения и бесконечную теплопроводность, поскольку возбужденные состояния гармонических осцилляторов симметричны относительно их равновесных положений (см. рис. 5.5), а волны гармонических колебаний распространяются независимо одна от другой.

теплового расширения æ с удельной теплоемкостью c_v и модулем всестороннего сжатия $B = -V(\partial P/\partial V)_T$:

$$æ = \gamma c_v/(3B).$$

5.3.3. Зонная структура кристалла

При упругом рассеянии электрона на атомах кристалла его трансляционные индексы (k_1, k_2, k_3) сохраняются и могут рассматриваться как квантовые числа: компоненты волнового вектора $\vec{k}$, связанного с *квазиимпульсом* $\vec{p}_{эл}$ электрона в кристалле обычным соотношением $\vec{p}_{эл} = \hbar\vec{k}$. Волновые функции кристалла, отвечающие неприводимому представлению подгруппы трансляций с волновым вектором $\vec{k}$ в 1-й зоне Бриллюэна, записывают в виде разложения по *функциям Блоха*, построенных из орбиталей атомов в кристалле подобно разложению ЛКАО для молекулярных волновых функций:

$$\psi^{(\vec{k})}(\vec{r}) = \sum_j C_j e^{i\vec{k}\vec{R}_j} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_j), \qquad (5.47)$$

где $\{\phi_j(\vec{r} - \vec{R}_j)\}$ — набор АО атомов с координатами $\vec{R}_j$ в ячейке. Одноэлектронные состояния кристалла можно построить, действуя проекционными операторами (5.44) на валентные АО всех атомов в элементарной ячейке. Дисперсионные зависимости электронных состояний $\varepsilon(\vec{k})$ называются *электронными зонами* (или *полосами электронных энергий*) кристалла*. Простое введение в зонную теорию твердых тел можно найти в [3] и [91].

Поскольку размеры реальных кристаллов конечны, электронная зона $\varepsilon(k)$ фактически состоит из очень близко расположенных дискретных энергетических уровней, заполняемых электронами в соответствии с принципом Паули (подразд. 5.1). Это дает конечную плотность состояний $n(E)$ электронов в любом заданном энергетическом интервале $(E, E + \delta E)$. Верхний занятый уровень в квазинепрерывном распределении $n(E)$ называется *уровнем Ферми* ε_F. Электропроводность кристалла определяется плотностью вакантных электронных состояний, близких по энергии к этому уровню. Напомним, что в металлах полоса состояний $\varepsilon(k)$, образованная валентными АО, недозаполнена, в полуметаллах имеется вакантная *зона проводимости*, вплотную

*Следует обратить внимание на случайное совпадение разных по значению терминов «зона Бриллюэна» (геометрическая область обратной решетки кристалла) и «электронная зона» (полоса энергетических уровней кристалла $\varepsilon(\vec{k})$). В зарубежной литературе используются более однозначные термины: соответственно, Brillouin zone и (electron) energy band.

примыкающая к заполненной *валентной зоне*, а в полупроводниках и диэлектриках эти две зоны разделены энергетическим интервалом (*запрещенной зоной*) шириной, соответственно, от 0,1 до 2—3 эВ и свыше 5—6 эВ (1 эВ = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж соответствует 8066 $см^{-1}$).

Зонная структура кристалла в k-пространстве обладает симметрией его точечной группы (см. подразд. 3.14). Зависимости одноэлектронных энергий $\varepsilon(k)$ обычно рассчитывают в базисе функций Блоха приближенными квантовомеханическими методами, представляя результаты в виде графиков (наподобие диаграмм Уолша, см. рис. 5.10) с варьированием модуля волнового вектора k вдоль особых направлений зоны Бриллюэна (см. подразд. 3.14). В *приближении сильной связи*, нередко используемом в таких расчетах, учитывают перекрывание АО лишь между соседними атомами, т. е. полагают, что атом в кристалле химически связан лишь со своим непосредственным окружением. На качественном уровне данное приближение позволяет утверждать, что валентная зона и зона проводимости составлены, соответственно, из «связывающих» и «разрыхляющих» одноэлектронных уровней по аналогии с МО простых молекул, хотя в трехмерном кристалле эти зоны могут перекрываться [91].

Для простых высокосимметричных кристаллов качественный вид диаграмм $\varepsilon(k)$, определяющих функцию плотности электронных состояний $n(E)$, можно найти теоретико-групповыми методами без проведения расчета. Например, электропроводность графита определяется в первую очередь π-электронной системой его двумерного гексагонального атомного слоя симметрии $p6/mmm$ (см. рис. 2.31, *а*), зона Бриллюэна которой является правильным шестиугольником в области $(-\pi/a < k_x, k_y < \pi/a)$ (см. рис. 3.5). Представления π-электронных состояний такого слоя вида (5.47) в особых точках зоны $\Gamma(D_{6h})$, $K(D_{3h})$ и $M(D_{2h})$, получают действием операторов (5.44) на p_z-АО (ϕ_1, ϕ_2) двух атомов С, содержащихся в его элементарной ячейке (рис. 5.16).

Количественный расчет π-электронных энергий $\varepsilon(k)$ графита, в соответствии с орбитальным составом π- и π^*-зон, показывает их значительное расщепление в точке Г, меньшее расщепление в точке М и вырождение (соединение) в точке K, где π- и π^*-комбинации АО одинаковы (рис. 5.17, *а*). Функция плотности состояний графита, таким образом, имеет минимум на уровне Ферми, и кристаллический графит является полуметаллом. Повышение температуры, а также внедрение электронодонорных (атомы металлов) или электроноакцепторных частиц ($Cl_2 + AlCl_3$ и др.) между атомными слоями графита увеличивают их электропроводность.

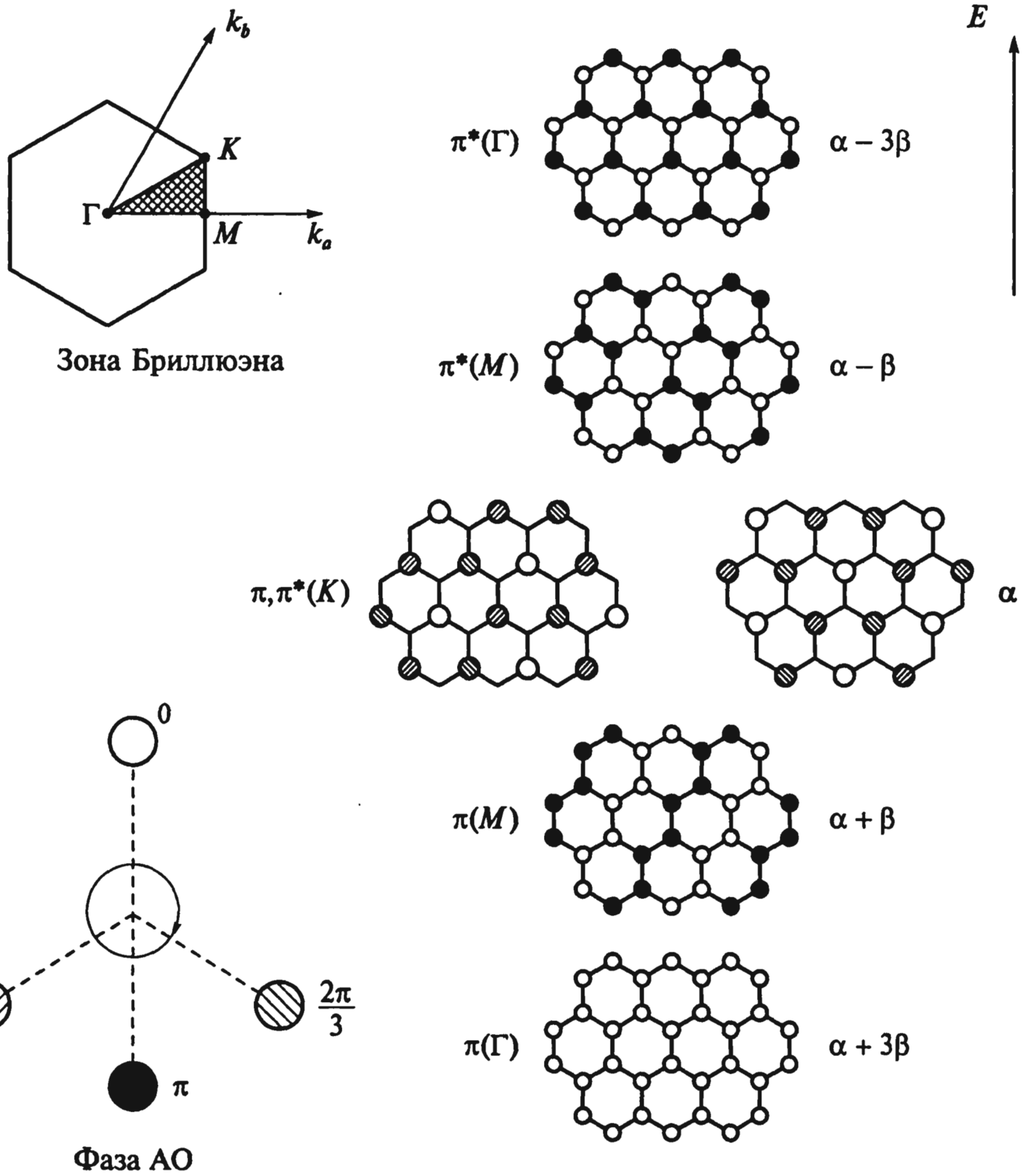
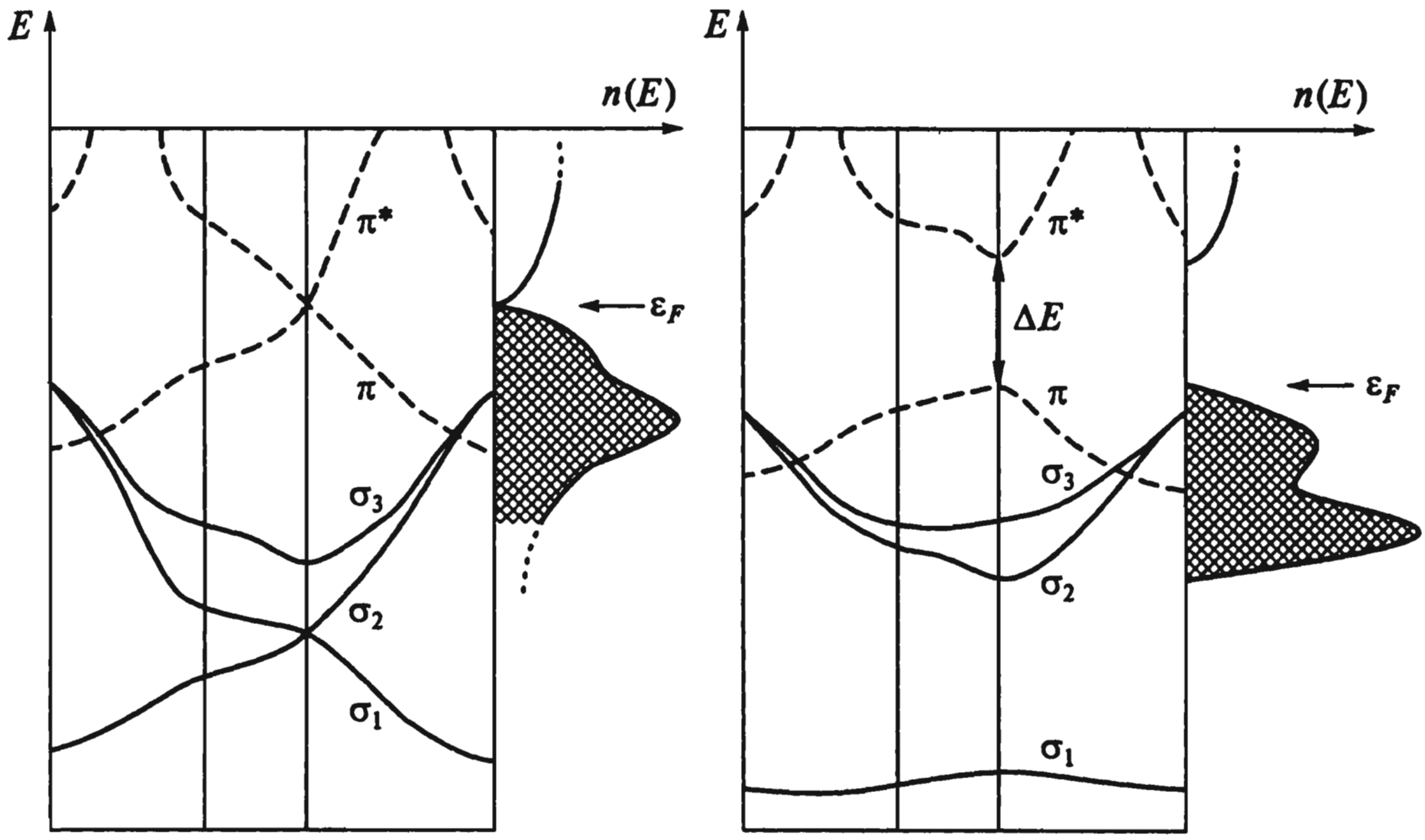


Рис. 5.16. π-Электронные состояния графитового слоя в особых точках зоны Бриллюэна (*Johnston R. L.*, *Hoffman R.* // Polyhedron. 1990. V. 9. P. 1901)

В то же время гексагональный нитрид бора BN, имеющий графитоподобную структуру плоского атомного слоя (см. рис. 2.31, *б*) и такое же число (8) валентных электронов в элементарной ячейке, является диэлектриком вследствие расщепления π- и π*-ветвей по энергии в точке K. Возникновение *энергетической щели* на уровне Ферми в гексагональном нитриде бора (рис. 5.17, *б*) происходит ввиду разного строения его π- и π*-зон, составленных в этой точке, соответственно, из p_z-АО атомов B и N. В теоретико-групповых терминах двумерное представление $\Gamma(\pi,\pi^*)$ слоя графита в точке K его зоны Бриллюэна порождается расширением фактор-группы $G/\mathcal{T}$ (где $G = p6/mmm$, $\mathcal{T}$ — ее подгруппа трансляций) выше локальной D_{3h}-симметрии точки K за счет скользящего отражения $g \in p6/mmm$, связывающего



а *б*

Рис. 5.17. Кривые электронной энергии $\varepsilon(k)$ и плотности состояний $n(E)$ для гексагонального слоя графита (*а*) и нитрида бора (*б*) (*Zupan J.* // Phys. Rev. 1972. V. 6. P. 2477). Символы особых точек см. рис. 5.16

позиции атомов C (см. подразд. 3.14). В группе $p\bar{6}m2$ гексагонального слоя BN эта операция отсутствует, и $G/\mathcal{T} \simeq D_{3h}$.

Электронные зоны в трехмерном кристалле алмазоподобного кубического кремния, образованные валентными *s*- и *p*-АО, показаны на рис. 5.18. Везде, где это не вызывает путаницы, мы обозначаем группы точечной симметрии по Шенфлису, а их представления — по Малликену*.

По ширине запрещенной зоны алмаз (ΔE=5,4 эВ) относится к диэлектрикам или широкозонным полупроводникам, а кремний (1,14 эВ) и германий (0,74 эВ) — к обычным полупроводникам. Ветви $\varepsilon(k)$, составленные из валентных АО кремния, расщепляются в точках зоны Бриллюэна в соответствии с локальной группой вектора $\vec{k}$ (см. рис. 5.15, *б*). В точке Г(O_h) σ-связи Si—Si, расположенные по тетраэдру вокруг каждого атома, дают свя-

*В физике твердого тела элементы пространственных групп обозначают символом $\{R|t\}$, где t соответствует трансляции, а R — собственному либо несобственному повороту. Ранее в физической литературе любые операции точечной симметрии R не совсем удачно назывались «вращениями». Для неприводимых представлений ветвей $\varepsilon(k)$ также используются символы их точек в зоне Бриллюэна с произвольно установленными индексами: это позволяет учитывать варьирование локальной симметрии вектора $\vec{k}$ в особых точках, но делает формализм более громоздким и неединообразным.

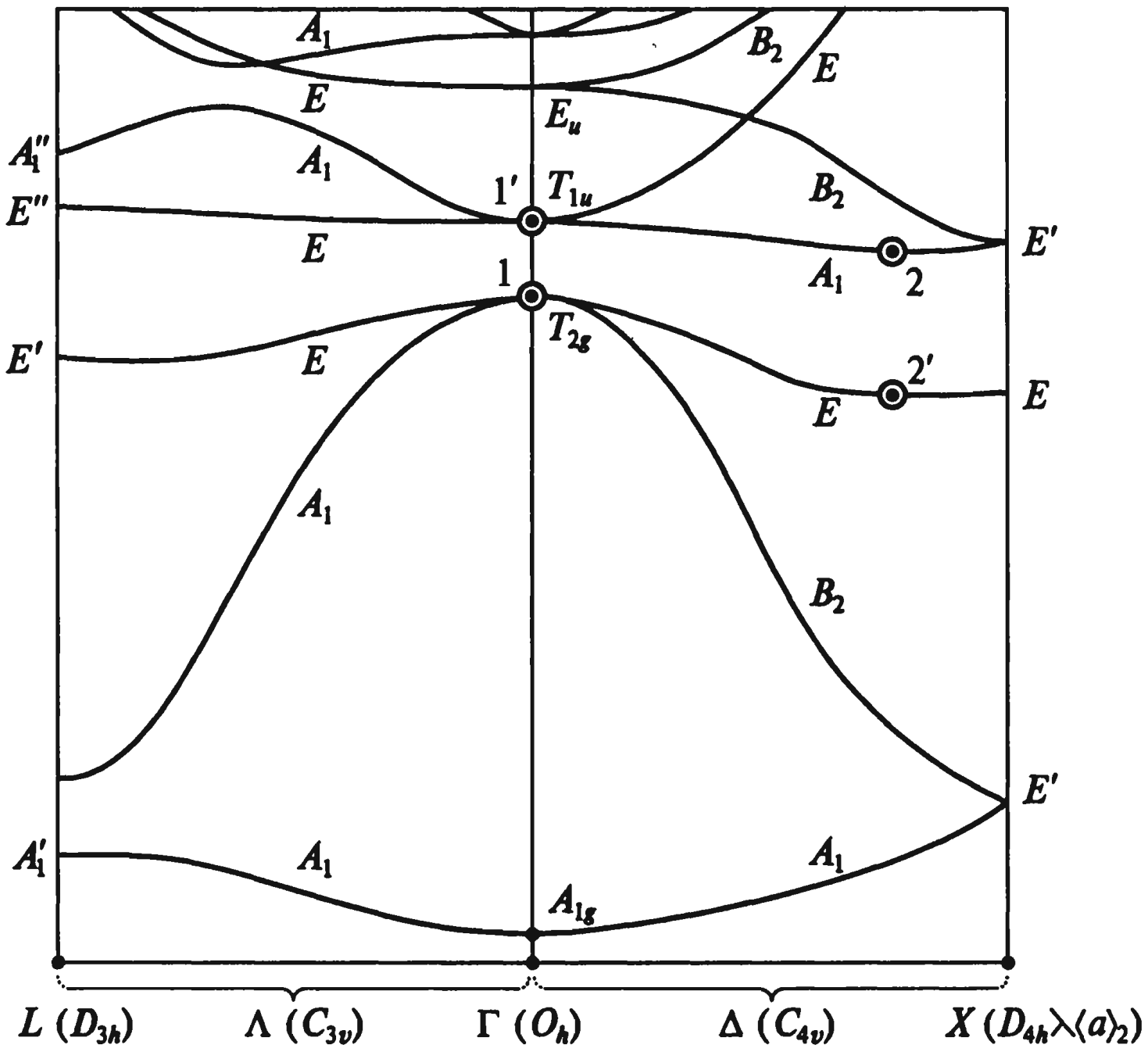


Рис. 5.18. Электронные зоны кремния

зывающие комбинации A_{1g} и T_{2g}, расщепляемые при понижении симметрии в направлениях (100) (C_{4v}) и (111) (C_{3v}) на три ветви валентной зоны. Низкоэнергетические компоненты нижней σ^*-разрыхляющей комбинации АО (T_{1u} в точке Г), расщепляясь в указанных направлениях, образуют дно зоны проводимости. Заметим, что, аналогично вырождению π- и π^*-зон графита в точке K, все ветви $\varepsilon(k)$ в точке X двукратно вырождены из-за наличия плоскостей скользящего отражения между позициями (0,0,0) и $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$: эта дополнительная операция симметрии порождает к точке X фактор-группу $D_{4h} \lambda \langle a \rangle_2$ с двумерными неприводимыми представлениями (подразд. 3.14).

5.3.4. Электрон-фононное взаимодействие

Распространение колебаний в кристалле можно представить в виде движения *фононов*: модельных квантовых *квазичастиц*, подчиняющихся статистике Бозе. Колебательные дисперсионные кривые $\omega_i(\vec{k})$ в этом случае называют *фононными зонами*. Модельными квазичастицами описывают и другие возбуждения кристалла: плазменные колебания электронов в решетке (*плаз-*

моны), неионизированные (*экситоны*) и ионизированные (*поляроны*) возбужденные электронные состояния атомов и др. При учете ангармоничности тепловых колебаний фононы в кристалле могут взаимодействовать между собой или с иными частицами. В отличие от электронов, квазичастицы в кристалле не сохраняются; в их описании используется формализм операторов рождения и уничтожения, разработанный в квантовой теории поля (см. подразд. 5.5).

Учет электронно-фононного, т. е. электронно-колебательного взаимодействия позволяет описать оптические переходы и некоторые макроскопические свойства кристаллов, в частности, увеличение электропроводности полупроводников под действием света. Последний эффект вызван ростом плотности носителей зарядов (электронов в зоне проводимости и вакансий — «дырок» в валентной зоне) при фотовозбуждении электронов валентной зоны с энергиями вблизи уровня Ферми. Оптические переходы между точками зон $\Psi_i(\vec{k}) \to \Psi_j(\vec{k}')$ при этом подразделяются на прямые ($\vec{k} = \vec{k}'$) и непрямые, вызванные электрон-фононным взаимодействием с очевидным правилом отбора (см. (5.22)):

$$\vec{k} + \vec{q} = \vec{k}', \tag{5.48}$$

где $\vec{q}$ — волновой вектор фонона.

Переход (см. рис. 5.18) из точки 1 в валентной зоне Si в точку 2 в его зоне проводимости с минимальной энергией возбуждения, равной ширине запрещенной зоны ΔE, может произойти двумя путями: $1 \to 1' \to 2$ и $1 \to 2' \to 2$. Вертикальный оптический переход $1(T_{2g}) \to 1'(T_{1u})$ в точке Г разрешен в дипольном приближении, так как в произведении этих представлений содержится представление смещений Г(xyz) (T_{1u} в группе O_h):

$$T_{2g} \times T_{1u} = A_{2u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}.$$

Фононный переход $1' \to 2$ между точками Г- и Δ-типов разрешен в группе C_{4v}, если матричный элемент $\langle \Psi(2)|Q|\Psi(1')\rangle$ в этой группе содержит полносимметричную часть:

$$\Gamma(T_{1u}) \times A_1 \times Q = (A_1 + E) \times A_1 \times Q = Q + E \times Q,$$

где компоненты представления Г(T_{1u}) состояния $1'$ в локальной группе C_{4v} определяются непосредственно, а фононное представление обозначено Q.

Таким образом, переход $1' \to 2$, как и весь переход $1 \to 2$ по этому каналу, разрешен при участии акустического ($Q = A_1$) и оптического ($Q = E$) колебаний решетки. Другой канал перехода

$1 \to 2' \to 2$ в части $1 \to 2'$ разрешен для всех колебаний алмазоподобной решетки (см. рис. 5.15):

$$\Gamma(T_{2g}) \times E \times Q = (B_2 + E) \times E \times QE \times Q + (A_1 + A_2 + B_1 + B_2) \times Q,$$

а его вертикальная оптическая компонента $2' \to 2$ ($A_1 \times E = E(x, y)$) разрешена под действием света, поляризованного в кристаллографической плоскости (001). Анализ переходов между точками с разными локальными группами (например, низкоэнергетического перехода $L_3(D_{3h}) \to X_1(D_{4h} \leftthreetimes \langle a \rangle_2)$ в кристаллическом германии) приведен в [71].

Из-за электрон-фононного взаимодействия (т. е. ангармоничности колебаний решетки) волновой вектор $\vec{k}$ движущегося электрона перестает быть квантовым числом: сохраняется только сумма $\vec{k} + \vec{q}$ с произвольным числом фононов. Обращенное соотношение (5.48) отвечает рождению фононов при движении электрона через кристалл, т. е. передаче части кинетической энергии электрона колебаниям решетки (электрическому сопротивлению). Матричный элемент неупругого рассеяния электрона на атомах кристалла («рассеяния на фононах»):

$$\mathbf{M}(\vec{k}, \vec{k}') = \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \delta V_{ij} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r}, \tag{5.49}$$

где V_{ij} — тензорный потенциал деформации решетки; $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$.

При движении с неупругим рассеянием область кристалла, деформированная одним электроном, может влиять на распро-

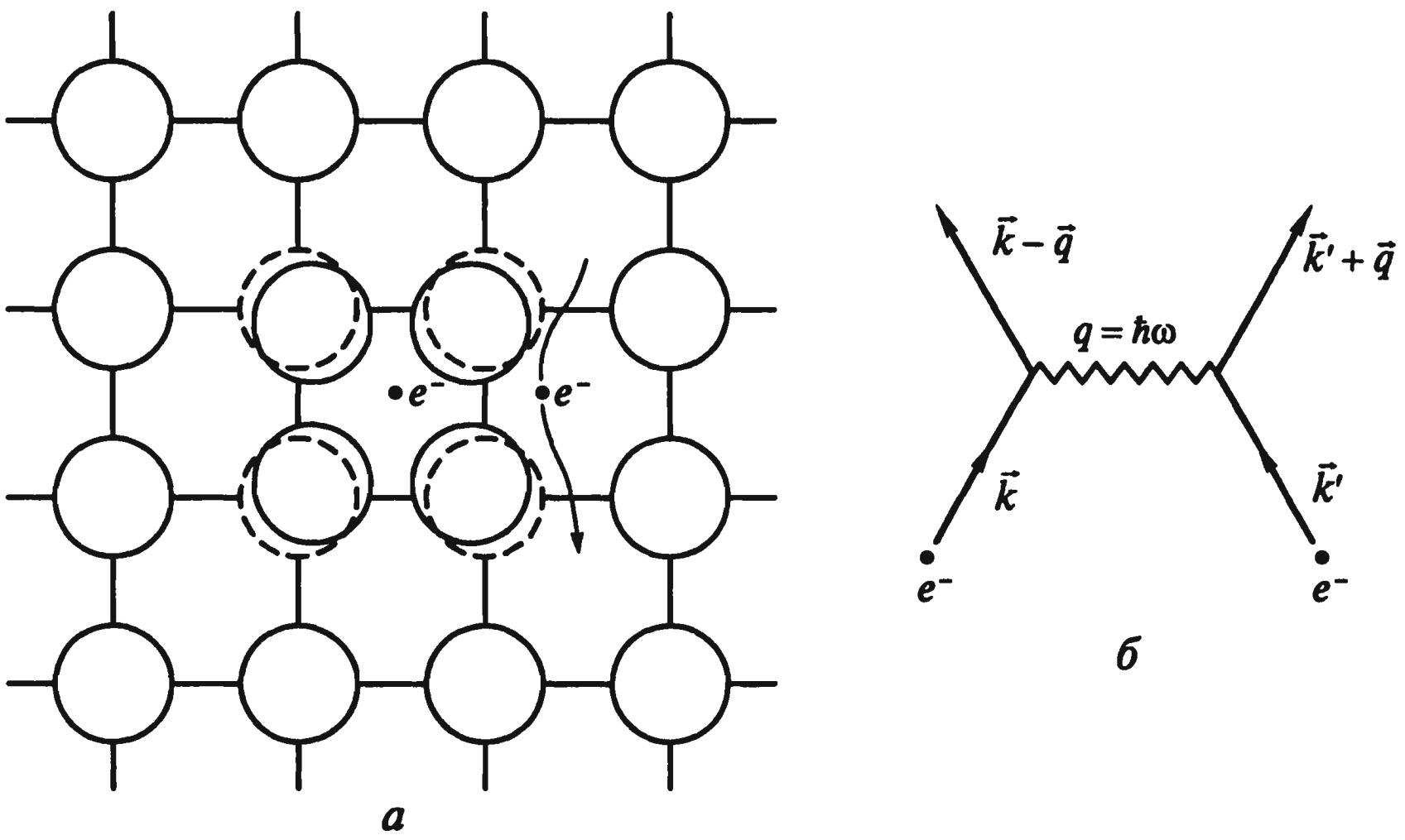


Рис. 5.19. Взаимное притяжение электронов через деформацию решетки ($а$) и обмен виртуальным фононом ($б$) [39]

странение другого электрона, порождая их виртуальное взаимодействие (рис. 5.19, *а*). Матричный элемент такого взаимодействия двух электронов через деформацию решетки («обмен виртуальным фононом», рис. 5.19, *б*), рассчитанный по теории возмущений:

$$\langle \vec{k}-\vec{q}, \vec{k}'+\vec{q}|\delta V_{ij}|\vec{k}, \vec{k}'\rangle \frac{|\mathbf{M}(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \hbar\omega}{[E(\vec{k})-E(\vec{k}')]^2-(\hbar\omega)^2}, \qquad (5.50)$$

где ω — круговая частота колебаний решетки в интервале энергий $E(\vec{k}) - E(\vec{k}') < \hbar\omega(\vec{q})$ отвечает их взаимному притяжению (точнее, притяжению электронов к деформированному участку кристалла, аналогичному притяжению одноименно заряженных ядер в молекуле к области повышенной электронной плотности между ними)*.

5.3.5. Приближение слабой связи

Некоторые физические свойства кристаллов определяются формой изоэнергетических поверхностей в обратном пространстве $\varepsilon(\vec{k})$ = const — в частности, формой *поверхности Ферми* $\varepsilon_F(\vec{k})$. На качественном уровне такие поверхности строят в приближении *слабой связи*, рассматривая движение «электронного газа» в периодическом возмущающем поле кристалла. С учетом принципа Паули кинетическая энергия $E_{\text{кин}} = \hbar^2 k^2/2m$ свободных электронов в трехмерном пространстве ограничена сферической поверхностью $\varepsilon_F(k)$. Рассеяние электронов на кристаллической решетке приводит к разбиению обратного пространства на зоны Бриллюэна объемом $\simeq 8\pi^3/V_{\text{яч}}$, где $V_{\text{яч}}$ — объем элементарной ячейки кристалла в «прямом» пространстве, и разделению многозначной зависимости энергии электронов от волнового вектора на энергетические зоны — полосы $\varepsilon_i(\vec{k})$ с периодами $a^* = 2\pi/\tau$, где $\vec{a}^*$ — вектор обратной решетки. (Напомним, что первой зоной Бриллюэна служит полиэдр Вороного обратной решетки, см. подразд. 2.6 и 3.14.)

Для одномерной цепочки атомов (рис. 5.20) первая зона Бриллюэна занимает интервал $(-\pi/a \leqslant k \leqslant \pi/a)$, вторая — интервалы $(-2\pi/a \leqslant k \leqslant -\pi/a,\ \pi/a \leqslant k \leqslant 2\pi/a)$ и т. д. На границах зон Бриллюэна находятся области запрещенных значений кинетической энергии электронов. Можно доказать, что изоэнергети-

*При определенных условиях это может приводить к *куперовскому спариванию*: коррелированному движению электронов, лежащему в основе *сверхпроводимости* (см. подразд. 5.3.6).

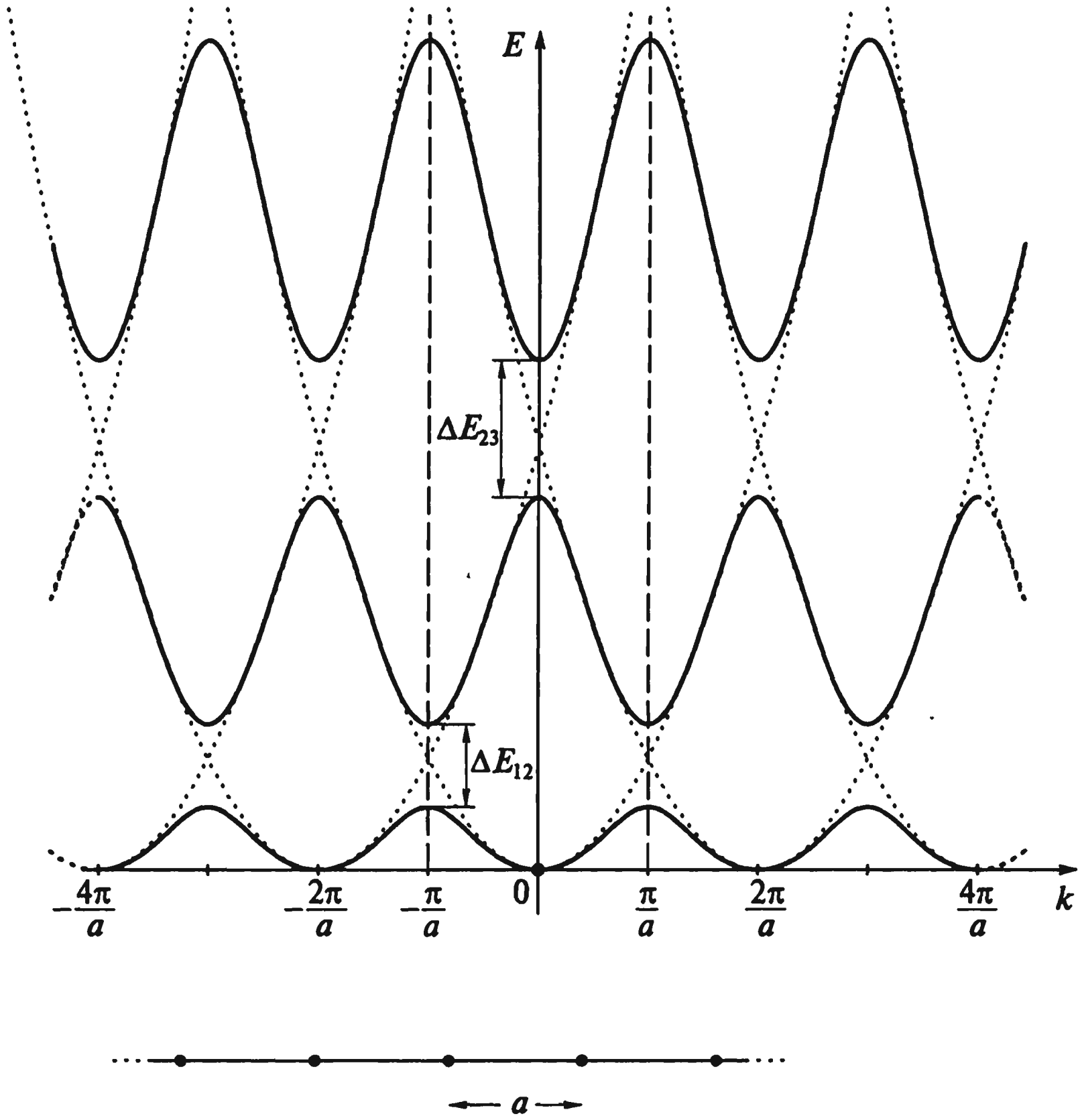


Рис. 5.20. Зоны $\varepsilon(k)$ электронного газа в одномерной цепочке атомов (точки — симметрически эквивалентные параболы $\varepsilon(k) = (\hbar^2/(2m)) \times \times (k - 2n\pi/a)^2$; $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$). Выделена первая зона Бриллюэна, показаны «щели» запрещенных значений энергии (ΔE_{12}, ΔE_{23})

ческие поверхности, построенные с учетом рассеяния электронного газа на решетке, перпендикулярны границам бриллюэновских зон [39].

При понижении трансляционной симметрии, т. е. увеличении периода повторяемости решетки, размеры зоны Бриллюэна уменьшаются, а число ветвей $\varepsilon_i(k)$ в ней увеличивается — происходит «складывание» зоны Бриллюэна (рис. 5.21).

Для плоских волн свободного электрона $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ в «пустой» трехмерной решетке справедливо соотношение

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} + \vec{K}_n)^2, \tag{5.51}$$

где $\vec{K}_n = (\pm n_1 a^*, \pm n_2 b^*, \pm n_3 c^*)$ — векторы обратной решетки, а (n_1, n_2, n_3) — целые положительные числа или нуль.

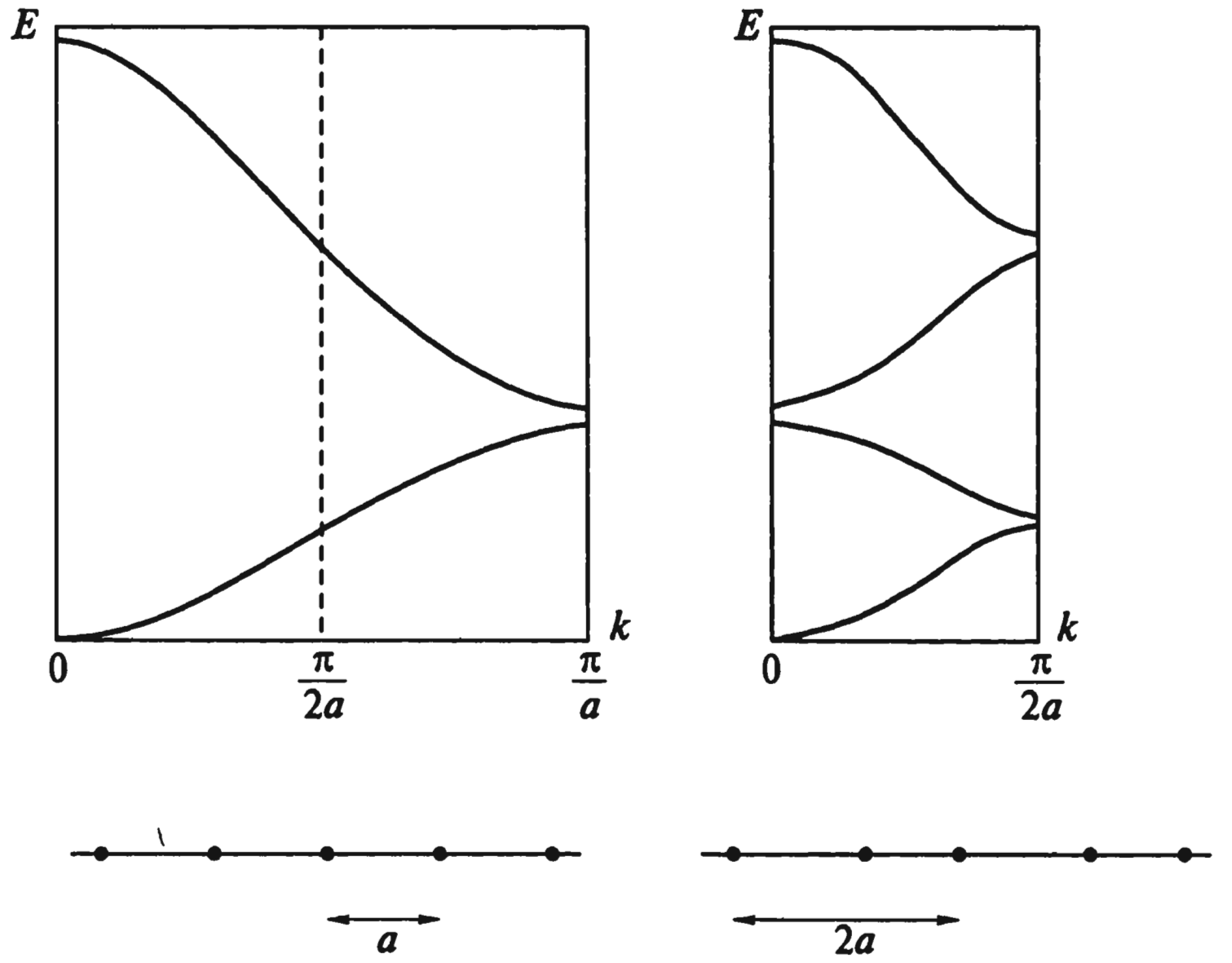


Рис. 5.21. «Складывание» зонной структуры при удвоении периода одномерной цепочки

Качественный вид и симметрию электронных зон $\varepsilon(\vec{k})$ с вектором $\vec{k}$ в особых направлениях зоны Бриллюэна можно определить в приближении слабой связи, построив ветви параболических функций (5.51) по всем симметрически эквивалентным направлениям обратной решетки и затем «складывая» интервал значений k до их попадания в первую зону Бриллюэна (рис. 5.22). Возмущения, вносимые потенциалом кристалла, приводят к снятию вырождения ветвей $\varepsilon(k)$, относящихся к разным неприводимым представлениям локальных групп, и к образованию щелей на границах зоны Бриллюэна.

Приближение слабой связи позволяет, в частности, объяснить изменения кристаллической решетки в бинарных сплавах $M_{1-x}M'_x$ с увеличением числа n_e валентных электронов, приходящихся на один атом металла в элементарной ячейке (*правило Юма — Розери*). Так, сплавы Cu-Zn (латунь) и Ag-Cd в интервале $1 \leqslant n_e < 1,38 \div 1,42$ имеют ГЦК-структуру металлической меди, в интервале $1,48 \leqslant n_e \leqslant 1,60$ — структуру типа ОЦК, а при $n_e > 1,68 \div 1,70$ — ГПУ (гексагональную плотнейшую упаковку атомов). При пороговых величинах n_e сферическая поверхность Ферми в 1-й зоне Бриллюэна начинает касаться граней зоны, что сопровождается деформацией электронной сферы и заполнением высокоэнергетических состояний (вблизи вершин 1-й зоны и во второй зоне).

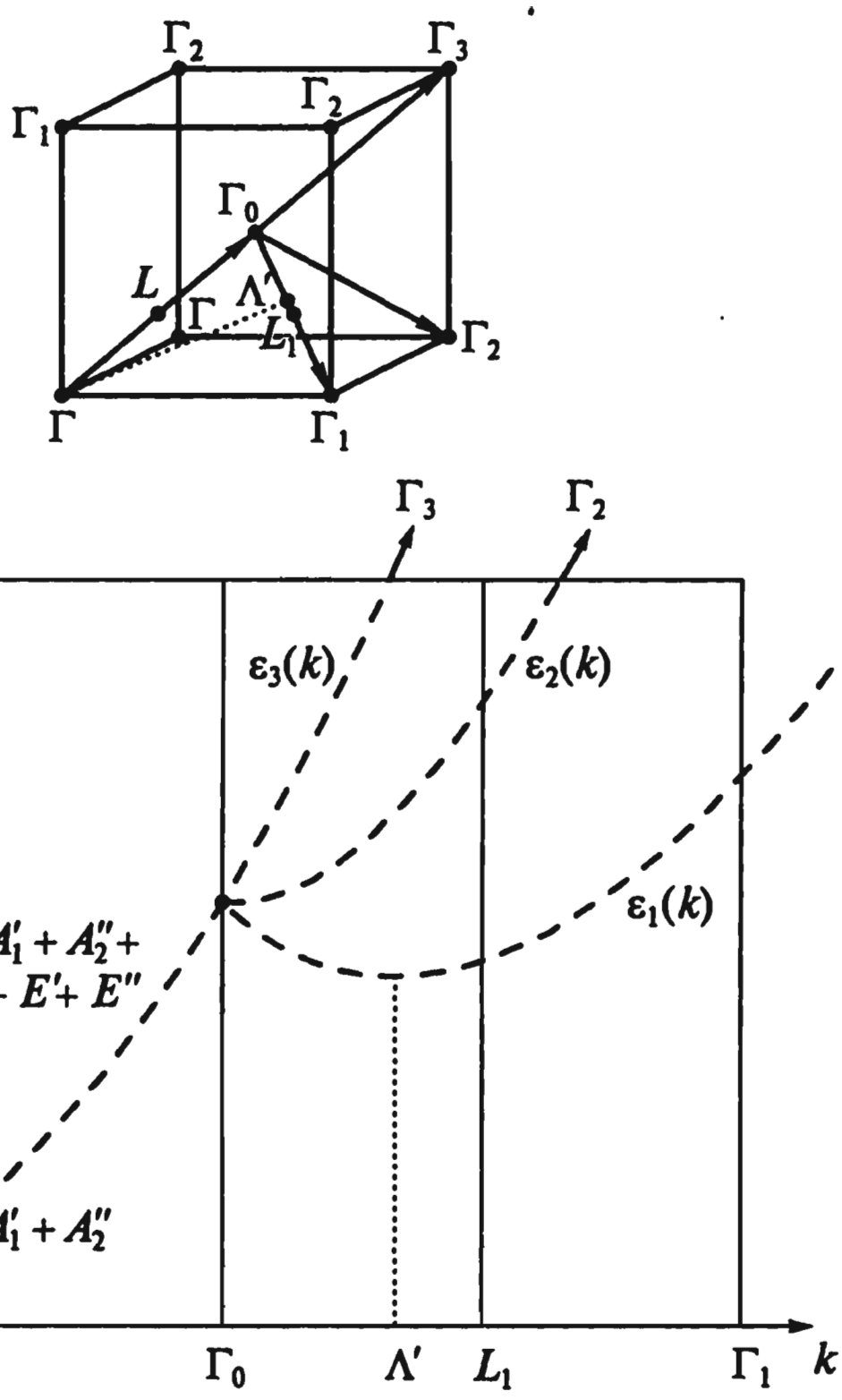
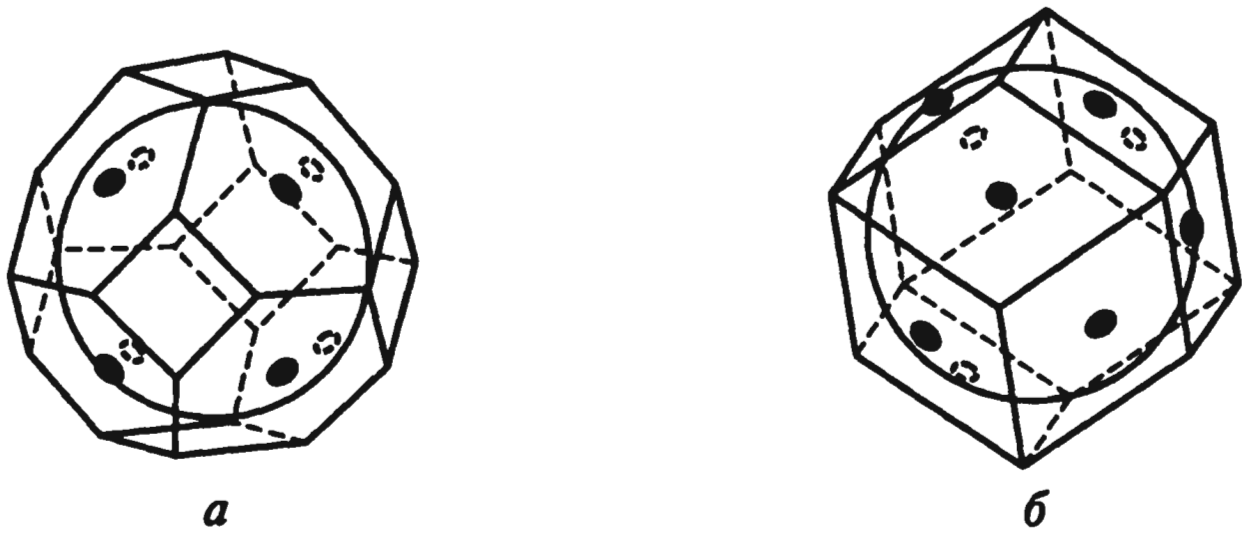


Рис. 5.22. Зоны свободных электронов в гранецентрированном кубическом кристалле в направлении диагоналей обратной решетки $(\pm k, \pm k, \pm k)$. Схема построения зон показана стрелками

Такое «давление» избыточного электронного газа вызывает перестройку кристаллической решетки сплава с расширением зоны Бриллюэна (рис. 5.23).



а *б*

Рис. 5.23. Поверхность Ферми в решетках:

а — ГЦК, $V_F = 0,680V_0^*$; *б* — ОЦК, $V_F = 0,741V_0^*$ (V_F — объем сферы электронных состояний; V_0^* — объем зоны Бриллюэна; показаны области соприкосновения)

5.3.6. Фазовые переходы в твердом теле

Температурные превращения конденсированных фаз с перераспределением связей между атомами, сопровождаемые скачкообразными изменениями энтропии и объема кристалла (*фазовые переходы 1-го рода* — например, графит $\rightleftharpoons$ алмаз), фактически являются химическими реакциями в твердом теле. При *фазовых переходах 2-го рода*, протекающих с непрерывными изменениями S, V и разрывами вторых производных потенциалов: теплоемкости $T(\partial S/\partial T)_p$ и изотермической сжимаемости $(\partial V/\partial p)_T$, общее расположение атомов в кристалле сохраняется. К таким переходам относятся превращения типа «порядок-беспорядок» с изменениями относительных заселенностей атомных позиций, многие сегнетоэлектрические и магнитные переходы и др. Пространственная группа G_1 фазы низкой симметрии в этом случае является подгруппой группы G_0 высокосимметричной фазы, а сам переход 2-го рода отвечает некоторому неприводимому представлению группы G_0.

В *теории Ландау* фазовый переход 2-го рода характеризуется *параметром порядка* η (вектором поляризации сегнетоэлектриков $\vec{P}$, намагниченностью магнетиков $\vec{M}$, разностью заселенностей атомных позиций в разупорядоченных структурах и др.), который равен нулю в высокосимметричной фазе и отличен от нуля в (низкосимметричной) упорядоченной фазе. Разложение термодинамического потенциала Гельмгольца $F(p,T)$ (см. подразд. 5.3.1) в ряд по степеням параметра η вблизи температуры перехода T_c (*критической точки*) в упорядоченной фазе дает

$$F(T,p,\eta) = F_0(T_c,p) + \sum \frac{1}{n!}(\partial^n F/\partial\eta^n)\eta^n \simeq F_0 + A\eta^2 + B\eta^4 \quad (5.52)$$

в силу четности F. Из условия минимума F в состоянии термодинамического равновесия ($\partial F/\partial\eta = 0$, $\partial^2 F/\partial\eta^2 > 0$) можно вывести [52, т. 5, гл. 14], что в окрестности T_c:

$$A = a(T - T_c); \qquad a, B \approx \text{const}, \qquad B > 0,$$

откуда получается экспериментально наблюдаемая температурная зависимость параметра порядка в фазовых переходах 2-го рода:

$$\eta = \sqrt{\frac{a}{2B}}(T - T_c)^{1/2}. \quad (5.53)$$

Воздействия, способные вызвать фазовый переход 2-го рода в кристаллической среде с параметром порядка вида $\eta(\vec{k}) = \eta(0)e^{i\vec{k}\vec{\tau}}$

(в первую очередь колебания решетки) должны преобразовываться по *активным* представлениям $\Gamma_\eta(\vec{k})$ пространственной группы G_0, которые удовлетворяют условиям:

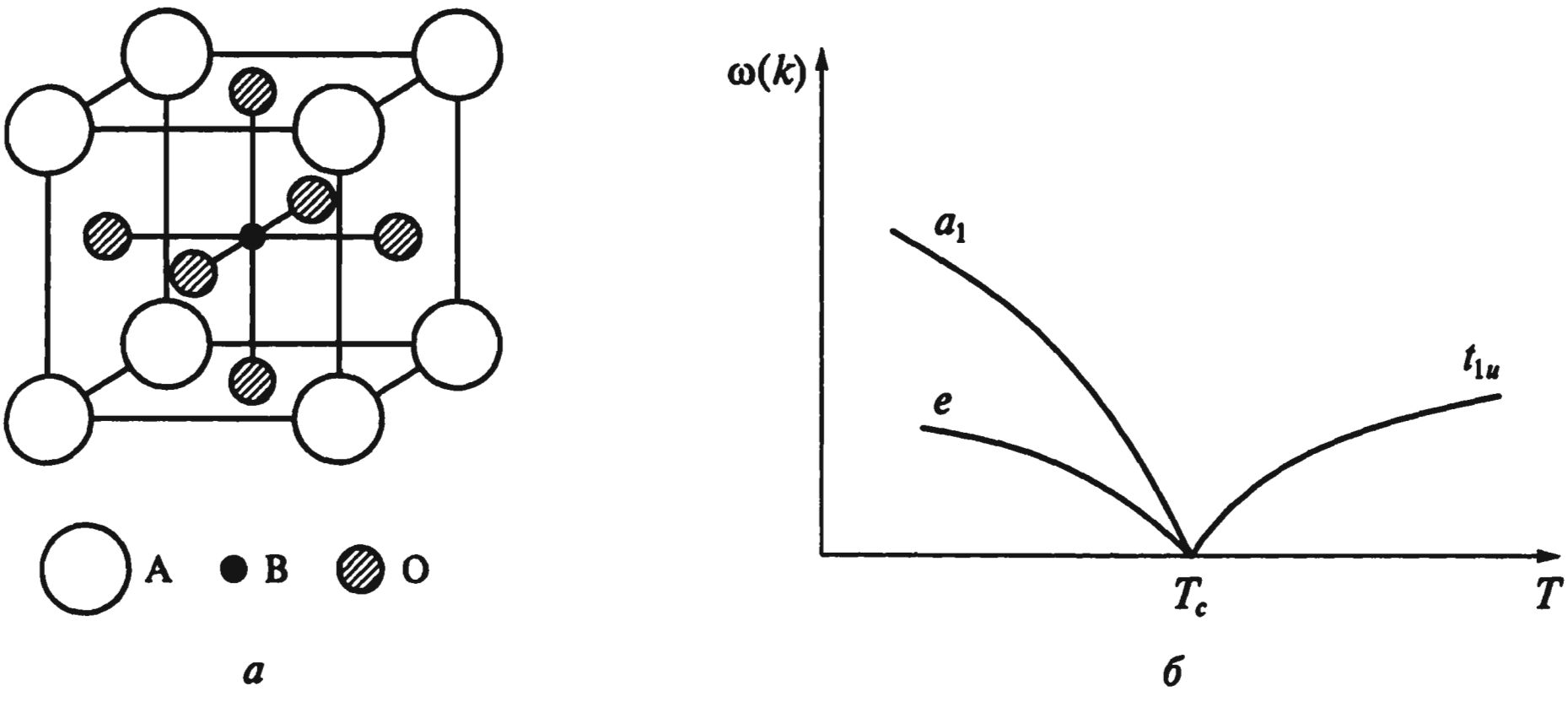
$$
\begin{aligned}
{}^{+} \cap \Gamma(xyz) = 0 \quad &\text{в локальной группе } G_{\vec{k}}, \\
[\Gamma_\eta^2(0)]^{-} \cap \Gamma(xyz) = 0 \quad &\text{в группе } G_0, \\
[\Gamma_\eta^3(0)]^{+} \cap \Gamma_0 = 0 \quad &\text{в группе } G_0,
\end{aligned}
\tag{5.54}
$$

где $\Gamma(xyz)$ — представление трансляций; $[\Gamma_\eta^n]^+$ — симметризованные степени представления Γ_η; Γ_0 — полносимметричное неприводимое представление в группе G_0 (см. подразд. 3.8).

Из (5.54), в частности, следует, что вектор $\vec{k}$ активного представления $\Gamma_\eta(\vec{k})$ может находиться только в центре зоны Бриллюэна либо на границе зоны в ее особых точках. Соответственно, периоды повторяемости решетки в точке перехода или не изменяются (с понижением точечной симметрии кристалла), или возрастают в целое число раз (с понижением трансляционной симметрии). Возможные пространственные группы и изменения периодов повторяемости при фазовых переходах 2-го рода для всех 14 сингоний обсуждаются в [79, гл. 7].

Сегнетоэлектрические переходы. При переходе кристалла в сегнетоэлектрическую, или ферроэлектрическую, фазу параметром порядка служит вектор спонтанной поляризации $\vec{P}$ симметрии ∞m $(C_{\infty v})$. Переход $G_0 \to G_1 = G_0 \cap C_{\infty v}$ может происходить под действием колебаний решетки, представление которых в группе G_0 содержит компоненты $\Gamma(xyz)$. В частности, титанат бария $BaTiO_3$ со структурой перовскита при 393 K переходит из высокотемпературной кубической модификации ($Pm\bar{3}m$, пять атомов в элементарной ячейке, рис. 5.24, *а*) в сегнетоэлектрическую тетрагональную ($P4mm$) с отношением $c/a \simeq 1{,}01$. Малые смещения атомов Ti внутри октаэдров, порождающие ненулевой дипольный момент элементарной ячейки, создаются одной из трижды вырожденных оптических мод кристалла T_{1u}-типа (упражнение 5.5): *мягкой модой*, частота которой обращается в нуль при $T = T_c$ (рис. 5.24, *б*). Расщепление $T_{1u} \to A_1 + E$ в точечной группе C_{4v} тетрагональной фазы содержит компоненту A_1, которая отвечает дипольному моменту $P_c \neq 0$, направленному вдоль оси c (*спонтанная поляризация*).

При отсутствии внешнего поля сегнетоэлектрический переход сопровождается *двойникованием* кристалла: появлением участков с мезоскопическими размерами (*доменов*), поляризованных в различных направлениях. При этом усредненная симметрия первоначальной фазы сохраняется, и $\langle \vec{P} \rangle = 0$. Так, в тетраго-



а *б*

Рис. 5.24. Кубическая элементарная ячейка перовскита ABO_3 (*а*) и ее мягкая мода (*б*)

нальном $BaTiO_3$ возникают домены, поляризованные по всем шести направлениям (1,0,0), $(\bar{1},0,0),...,(0,0,\bar{1})$ исходной кубической ячейки. Пример сегнетоэлектрического фазового перехода без изменения сингонии кристалла представляет нитрит натрия $NaNO_2$, при $T > 438$ K имеющий псевдотетрагональную ромбическую ячейку с центром симметрии (пространственная группа $Immm$) и разупорядоченными положениями атомов, а ниже 436 K — упорядоченную нецентросимметричную структуру ($Im2m$) [53].

Магнитные переходы. Ненулевые магнитные моменты атомов, возникающие при наличии в них неспаренных электронов, складываются из орбитальной и спиновой компонент (см. подразд. 5.4). Взаимодействие свободных магнитных моментов $\vec{\mu}_i$ соседних атомов в кристалле стабилизирует их параллельную ориентацию, однако энергия такого взаимодействия на несколько порядков ниже фактической энергии магнитного перехода $E_{\text{магн}} \sim k_B T_c$ (где T_c — критическая температура; k_B — постоянная Больцмана). Формализм независимых электронов, лежащий в основе зонной теории, не позволяет описать магнитное упорядочение, поскольку стабилизированные одноэлектронные состояния (например, связывающие комбинации АО в молекулах), в соответствии с принципом Паули, порождают антисимметричные спиновые функции, т. е. антипараллельное расположение спинов.

Параллельная ориентация соседних атомных магнитных моментов в кристалле достигается при расположении неспаренных электронов в атомах металла на локализованных, слабо перекрывающихся d- или f-орбиталях за счет коллективных электростатических взаимодействий этих АО с валентными электрон-

ными состояниями. Возникающие отсюда эффективные взаимодействия соседних спинов описывает *спиновый гамильтониан Гейзенберга*

$$\hat{H}_{\text{спин}} = -\sum J_{\alpha\beta}\vec{S}_\alpha \cdot \vec{S}_\beta, \qquad (5.55)$$

где $\vec{S}_\alpha$, $\vec{S}_\beta$ — спины атомов; $(\cdot)$ — скалярное произведение (см. подразд. 5.3.1); $J_{\alpha\beta}$ — *обменный интеграл*, отражающий коллективное взаимодействие локализованных неспаренных электронов при атомах α и β с валентными состояниями кристалла.

Заметим, что под спином S_α в данном случае понимается сумма спинового и орбитального момента локализованного электрона, порождающая атомный магнитный момент. Положительное значение обменного интеграла стабилизирует параллельную ориентацию соседних спинов, создавая возможность для перехода в ферромагнитную фазу; при $J_{\alpha\beta} < 0$ стабилизируется антиферромагнитное состояние с противоположной ориентацией спинов. Простое введение в теорию магнитных явлений в твердом теле см. [3, гл. 32, 33] и [39, гл. 10].

Переходы парамагнитных кристаллов в ферромагнитную или антиферромагнитную фазы сопровождаются макроскопическим упорядочением магнитных моментов атомов и нарушением симметрии относительно инверсии времени в исходной «серой» группе $G_0 = G \times 1'$ (см. подразд. 5.3.1). Формальное описание магнитных переходов подобно теории сегнетоэлектриков с заменой вектора напряженности электрического поля $\vec{E}$ аксиальным вектором магнитной индукции $\vec{B}$ (обобщенные силы), вектора поляризации $\vec{P}$ — аксиальным вектором намагниченности $\vec{M}$ (обобщенные координаты) и федоровских групп — шубниковскими*. Однако из-за более значительных флуктуаций параметра порядка в магнитных системах по сравнению с кулоновскими магнитные переходы не соответствуют теории Ландау в близкой окрестности T_c, где *критические характеристики* фаз расходятся по степенному закону, например:

$$\chi \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{-\varepsilon} \qquad (\varepsilon = 1/3 - 1/2).$$

Для расчетов магнитных переходов используется *модель Изинга*: кристаллическая решетка с магнитными моментами $\pm\mu$

*Фазовый переход α-Fe в ферромагнитное состояние при $T < 1043$ K сопровождается лишь малыми тетрагональными искажениями кристалла ($\Delta c/a \sim 10^{-5}$), не выявляемыми в обычном дифракционном исследовании. Поэтому тетрагональные кристаллы ферромагнитного α-Fe (шубниковская группа $I4/mm'm'$) приближенно считают кубическими ($Im\bar{3}m$), хотя истинно кубической является только высокотемпературная парамагнитная фаза ($Im\bar{3}'m$).

в узлах, связанных с соседними узлами локальными обменными взаимодействиями. Использование группы перенормировок в описании критических явлений при фазовых переходах кратко рассмотрено в гл. 6.

Сверхпроводимость. Притяжение электронов, близких по энергии к уровню Ферми ($\varepsilon(\vec{k}) \leqslant \varepsilon_F$), к деформированным областям кристаллической решетки (см. рис. 5.19) приводит к корреляции их движения в металле: образованию *куперовских пар*. Такие пары, рассматриваемые как квазичастицы с целочисленным (нулевым) спином, при $T < T_c$ способны к *бозе-конденсации* с переходом металла в *сверхпроводящее* состояние. В *теории Гинзбурга — Ландау* возникновение сверхпроводимости рассматривается как фазовый переход 2-го рода с нарушением калибровочной симметрии волновой функции электронов в кристалле (см. подразд. 6.4). В роли параметра порядка выступает комплексная волновая функция коррелированных электронных пар $\Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2)$ (где σ_1, σ_2 — спиновые переменные): $\Psi = 0$ при $T > T_c$. Нарушение симметрии электронных состояний приводит к частичному снятию их трансляционного вырождения, т. е. к появлению запрещенной области значений k (щели $\Delta_F(T) \to \Delta_F(0) \simeq 1,76 k_B T_c$) на уровне Ферми.

Зависимость $T_c \sim m_X^{-1/2}$ от атомной массы в ряде сверхпроводящих металлов (*изотопный эффект*) свидетельствует в пользу электрон-фононного механизма спаривания. Благодаря спариванию спинов сверхпроводник является диамагнетиком при внешних магнитных полях ниже критической напряженности H_c. Когерентное движение электронов в сверхпроводящем кристалле при наличии щели Δ_F делает невозможным их неупругие взаимодействия с атомами, т. е. рассеяние на фононах: поскольку импульс колеблющегося атома передается всему электронному газу как целому, возбуждение электрона на уровень выше Δ_F, разрушающее межэлектронную корреляцию, требует $E \sim n_e \Delta_F >> \hbar\omega$ (где n_e — число электронов сверхпроводимости в образце) (рис. 5.25). До сих пор остается открытым вопрос о причинах межэлектронных корреляций в *высокотемпературных сверхпроводниках*,

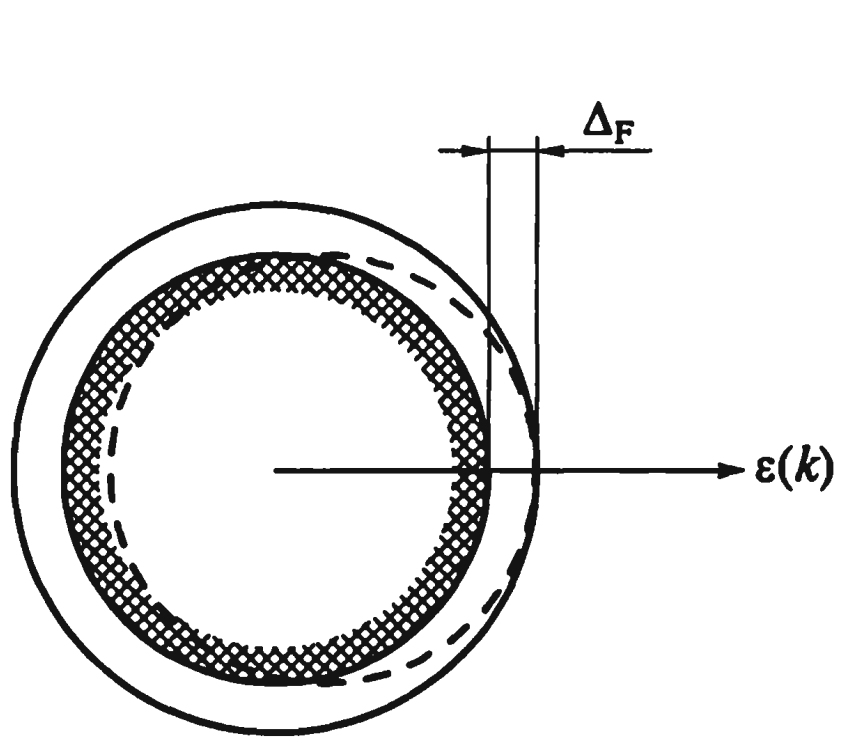


Рис. 5.25. Поверхность Ферми сверхпроводника, штриховой линией показано разрушение куперовских пар

или ВТСП (смешанных оксидах металлов, металлофуллеренах и др.) с сильной зависимостью T_c (30 — 160 K) от переменного («нестехиометрического») состава образца.

5.3.7. Молекулярные кристаллы

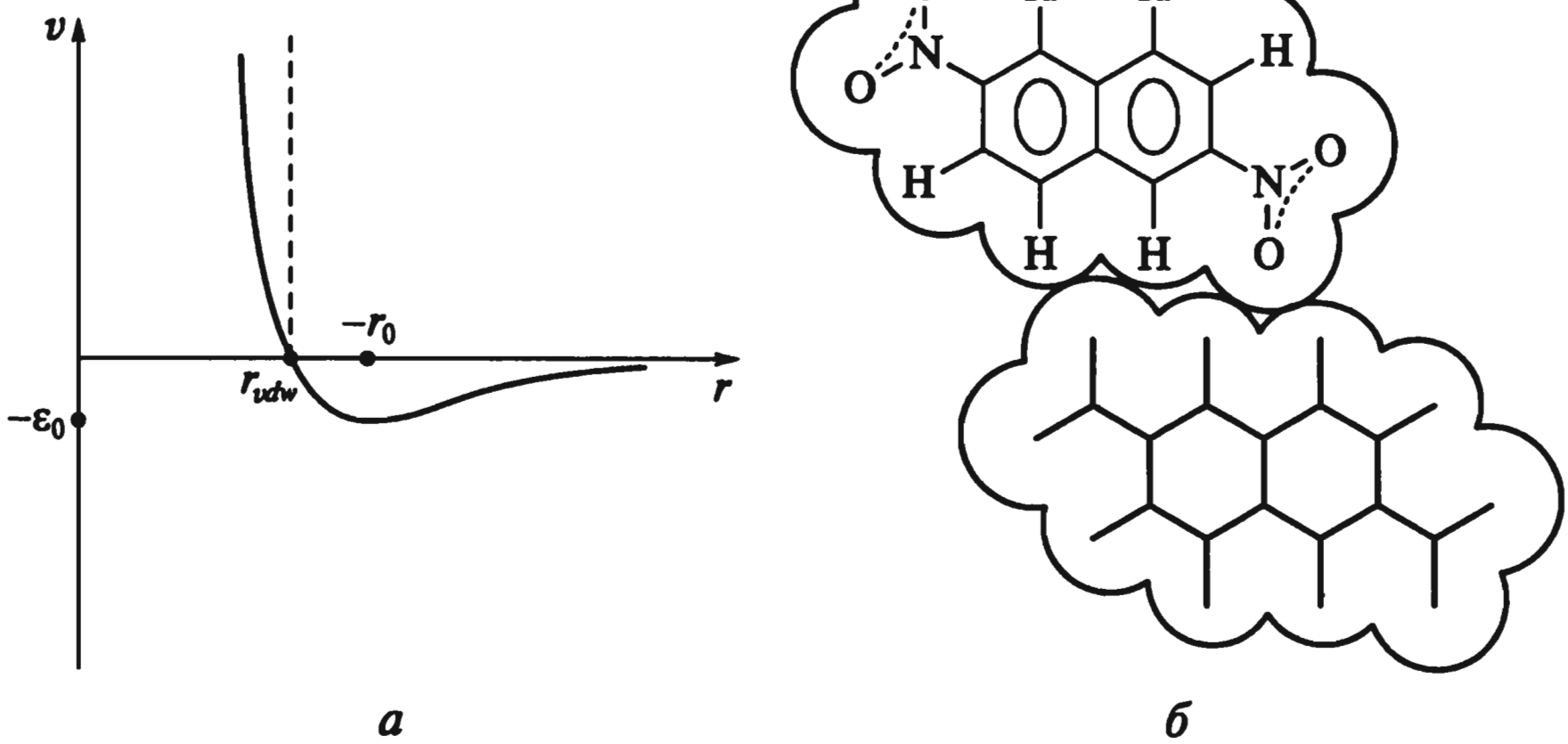
К молекулярным, или ван-дер-ваальсовым, относятся кристаллы, построенные из дискретных многоатомных молекул, связанных короткодействующими дисперсионными силами. Поле таких сил можно приближенно представить суммой двухцентровых *потенциалов Леннарда — Джонса*:

$$u(r) = -Ar^{-6} + Br^{-12} = -\epsilon_0 \left[2\left(\frac{r_0}{r}\right)^6 - \left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} \right], \qquad (5.56)$$

где r — расстояние между атомами; r_0 и ϵ_0 — соответственно расстояние и энергия в минимуме потенциальной кривой.

В наиболее грубом приближении *жестких сфер* каждому атому i-го элемента в молекуле отвечает твердая сфера с *ван-дер-ваальсовым радиусом* $r_{vdW}^{(i)} \leqslant r_0^{(i)}$ (рис. 5.26, *а*). В молекулярных кристаллах, характерных для органических соединений и комплексов металлов с органическими лигандами, наблюдаются плотные упаковки молекулярных «тел», ограниченных атомными ван-дер-ваальсовыми сферами (рис. 5.26, *б*).

Плотной упаковкой молекул обусловлены относительно узкий интервал заполнения объема кристалла молекулярными «телами» (коэффициент упаковки 0,65 — 0,80), характерные кратчайшие расстояния между атомами соседних молекул (близкие к суммам ван-дер-ваальсовых радиусов $r_{vdW}^{(i)}$) и высокие *молекулярные координационные числа* (МКЧ). Последние определяются как общее число соседних молекул, образующих короткие контакты с данной молекулой (10 — 14). Для молекулярных кристаллов типичны операции симметрии, совместимые с плотной упаковкой низкосимметричных трехмерных фигур (трансляции, центр инверсии, скользящие отражения, винтовые повороты) и нехарактерны операции, несовместимые с ней (например, пересекающиеся зеркальные плоскости; рис. 5.27). Поэтому, например, собственный центр инверсии $\bar{1}$ центросимметричных молекул обычно является элементом пространственной группы молекулярного кристалла, тогда как плоскости m и оси 2 молекул значительно реже переходят в элементы кристаллической симметрии. Среди молекулярных кристаллов, исследованных дифракционными методами (свыше 300 000 соединений на 2004 г.)

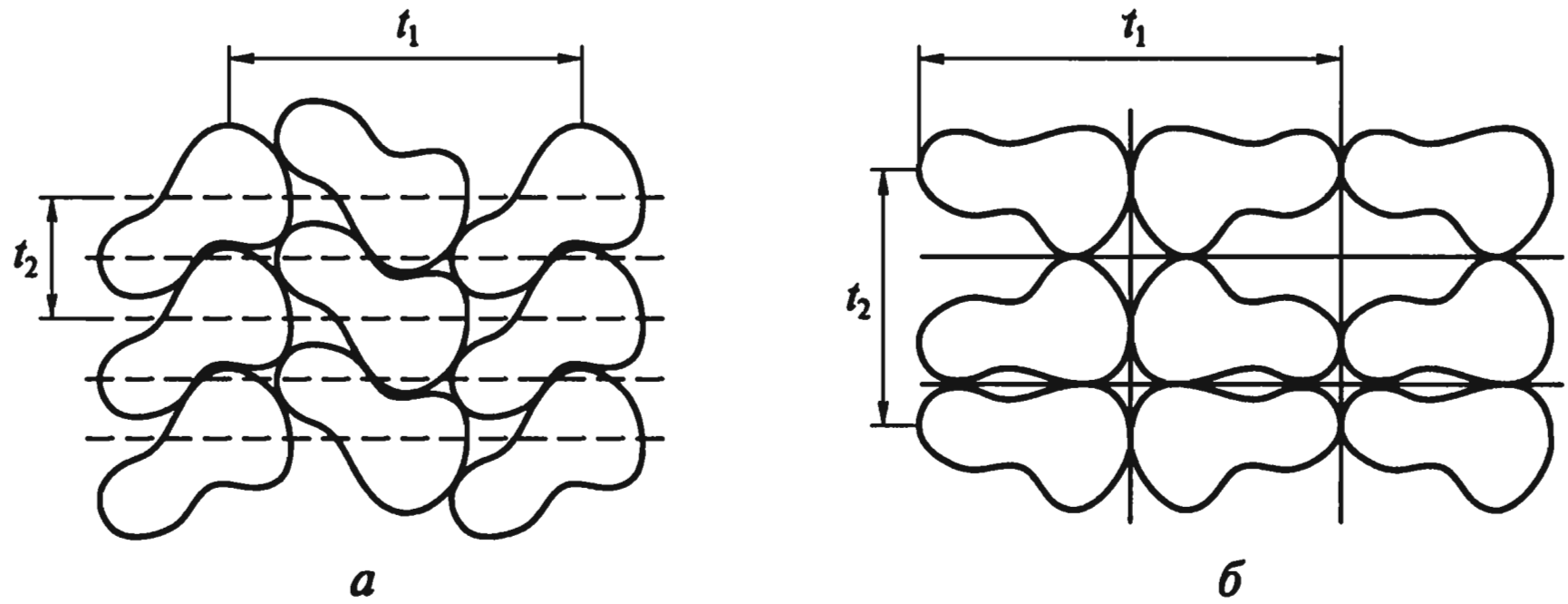


а *б*

Рис. 5.26. Потенциал ван-дер-ваальсова взаимодействия атомов (штриховая линия — модель жестких сфер) (*а*) и расположение молекул (*б*) в кристалле 2,6-динитронафталина (*Китайгородский А. И.* Органическая кристаллохимия. М.: Изд-во АН СССР, 1955. С. 425)

три четверти всех структур относятся к пяти пространственным группам: $P2_1/c$ (35 %), $P\bar{1}$ (13 %), $P2_12_12_1$ (12 %), $P2_1$ (8 %) и $C2/c$ (7 %) [115] (табл. 5.6).

Принцип плотной упаковки молекул [43] фактически постулирует родство молекулярных кристаллов с высокосимметричными плотнейшими упаковками шаров. Различие ван-дер-ваальсовых размеров атомов и связи между ними при этом играют роль возмущений. Так, температуры плавления ($T_{\text{пл}}$) и кипения ($T_{\text{кип}}$) органических соединений близкого элементного состава [123] коррелируют со степенью *диссимметрии* их молекул в конденсированной фазе: отклонением ван-дер-ваальсовой формы молекулы (которой определяется возмущающее «контактное»



а *б*

Рис. 5.27. Упаковки: плотная *pg* (*а*) и неплотная *pmm* (*б*) низкосимметричных фигур на плоскости [43, с. 36]

Таблица 5.6

Наиболее вероятные пространственные группы молекулярных кристаллов [43]

Симметрия позиции молекулы в кристалле							
1	$\bar{1}$	2	m	$mm2$	$2/m$	222	mmm
$P\bar{1}$	$P\bar{1}$	$C2/c$	$Pmc2_1$	$Fmm2$	$C2/m$	$C222$	$Cmmm$
$P2_1$	$P2_1/c$	$P2_12_12$	$Cmc2_1$	$Pmma$	$Pban$	$F222$	$Fmmm$
$P2_1/c$	$C2/c$	$Pbcn$	$Pnma$	$Pmmn$	$Cmca$	$I222$	$Immm$
$Pca2_1$	$Pbca$					$Ccca$	
$Pna2_1$							
$P2_12_12_1$							

поле W ее ближнего окружения) от приближенной симметрии $G(U_0)$ суммарного поля всех молекул среды. В частности, альтернирование $T_{\text{пл}}$ *нормальных*, т. е. цепочечных, предельных углеводородов (*алканов*) C_nH_{2n+2} с четными и нечетными n соответствует меньшим отклонениям «четных» линейных молекул от идеализированной D_{2h}-симметрии кристаллического поля (рис. 5.28).

Понижение симметрии среднего поля $G(U_0)$ от молекулярных кристаллов к жидкостям из-за присутствия в последних вакансий приводит к различию структурных корреляций для $T_{\text{пл}}$ и $T_{\text{кип}}$. Присоединение заместителя к крупному молекулярному остову высокой симметрии обычно сопровождается понижением $T_{\text{пл}}$ (бензол C_6H_6, 279 K $\rightarrow$ толуол $C_6H_5CH_3$, 178 K) и повышением $T_{\text{кип}}$ (бензол, 353 K $\rightarrow$ толуол, 384 K при 760 торр). Кристаллы, построенные из высокосимметричных молекул (CH_4, SF_6, C_2Cl_6 и др.), при атмосферном давлении нередко возгоняются, не плавясь. Подробнее о строении молекулярных кристаллов и других конденсированных фаз с преобладанием невалентных межмолекулярных взаимодействий см. [43].

Колебания кристалла, содержащего в элементарной ячейке Z одинаковых n-атомных молекул, разделяются на $(3n-6)Z$ *внутренних* мод (собственно молекулярных колебаний) и $6Z$ *внешних* мод, отвечающих смещениям молекул относительно кристаллической решетки. В число внешних мод входят три акустических и $6Z-3$ низкочастотных оптических колебаний решетки; последние складываются из $3(Z-1)$ трансляционных и $3Z$ вращательных колебаний молекул (либраций). Вырожденные колебательные и электронные переходы высокосимметричных молекул или

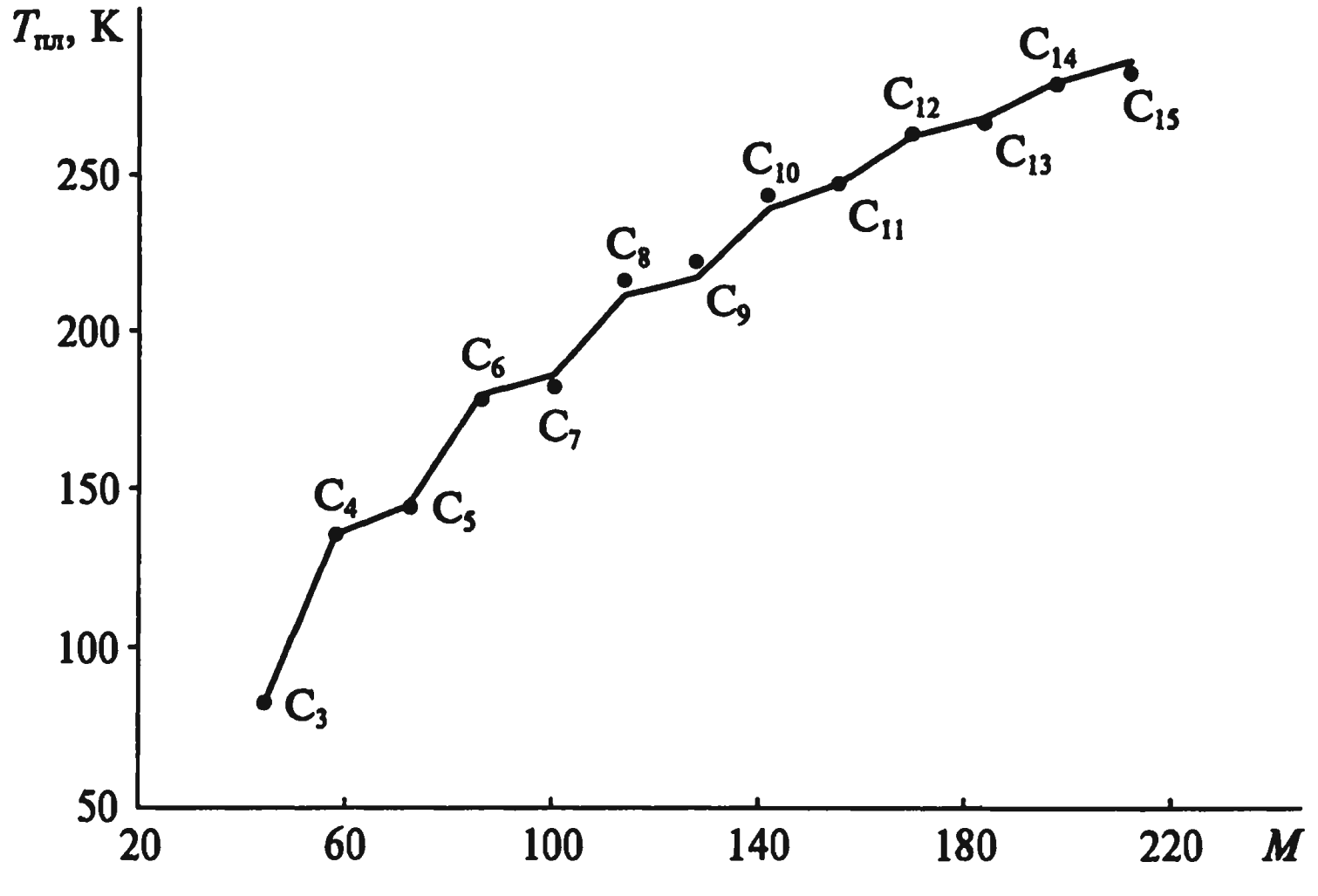


Рис. 5.28. Альтернирование температур плавления в четных и нечетных нормальных алканах C_nH_{2n+2}. Точки — экспериментальные данные; линия — результаты расчета по уравнению $T_{пл} = 120(lnM) - 2417a_s - 216$ (M — молекулярная масса; a_s — отклонение ван-дер-ваальсовой формы молекулы от D_{2h}-симметрии) (*Slovokhotov Y. L., Neretin I. S., Howard J. A. K.* // New J. Chem. 2004. V. 28. P. 967)

ионов (C_6H_6, NO_3^-, NH_4^+ и т. д.) могут расщепляться в низкосимметричном кристалле под воздействием поля их ближнего окружения.

Помимо расщепления вырожденных молекулярных колебаний, в спектрах кристаллов, содержащих несколько симметрически независимых молекул в элементарной ячейке, проявляется специфическое *давыдовское расщепление*. Этот эффект вызван взаимодействием переходов одинаковой симметрии — например, колебаний $Q_\alpha(A)$ и $Q_\alpha(B)$ — в молекулах A и B, находящихся в разном ближнем окружении. Суперпозиция молекулярных мод порождает колебания вида $Q_\alpha(A) \pm Q_\alpha(B)$ с несколько различающимися частотами (аналогичные симметричному и антисимметричному валентным колебаниям молекулы H_2O на рис. 5.8). В данном случае расщепление полос в спектре кристалла может порождаться невырожденными квантовыми переходами. Анализ давыдовского расщепления в колебательном спектре сводится к приведению представления $\Gamma(Z'Q)$, порожденного суммой Z' колебаний Q_α симметрически неэквивалентных молекул, в фактор-группе кристалла [92, гл. 10].

Хотя большинство молекулярных кристаллов — диэлектрики, среди них также встречаются полупроводники и соединения с металлической проводимостью. «Одномерным металлом» с анизотропной электропроводностью, близкой к электропровод-

ности графита, вдоль направления c при 295 K являются, например, тетрагональные кристаллы нестехиометрического ионного комплекса $K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \cdot 3H_2O$ — продукта частичного окисления (*допирования*) непроводящего $K_2Pt(CN)_4 \cdot 3H_2O$. Расстояния Pt – Pt в стопках анионов $[Pt(CN)_4]^{x-}$ вдоль оси c при допировании уменьшаются от 330 до 289 пм (в металлической платине 277 пм), и линейная цепочка $[Pt(CN)_4^{-1,7}]_\infty$ с недозаполненной зоной проводимости из d_{z^2}-АО атомов Pt приобретает металлоподобную «дырочную» электропроводность (рис. 5.29, *а*).

При низкой температуре многие квазиодномерные проводники переходят в диэлектрики с понижением трансляционной симметрии (т. е. увеличением периода повторяемости вдоль прежнего направления максимальной электропроводности) и появлением щели на уровне Ферми. Этот *переход Пайерлса*, являющийся «трансляционным» аналогом молекулярного эффекта Яна—Теллера, вызван неустойчивостью линейной атомной цепочки с недозаполненной зоной проводимости относительно продольной оптической моды с периодом $2\pi/k_F$, где k_F — модуль волнового вектора на уровне Ферми. Упомянутый комплекс

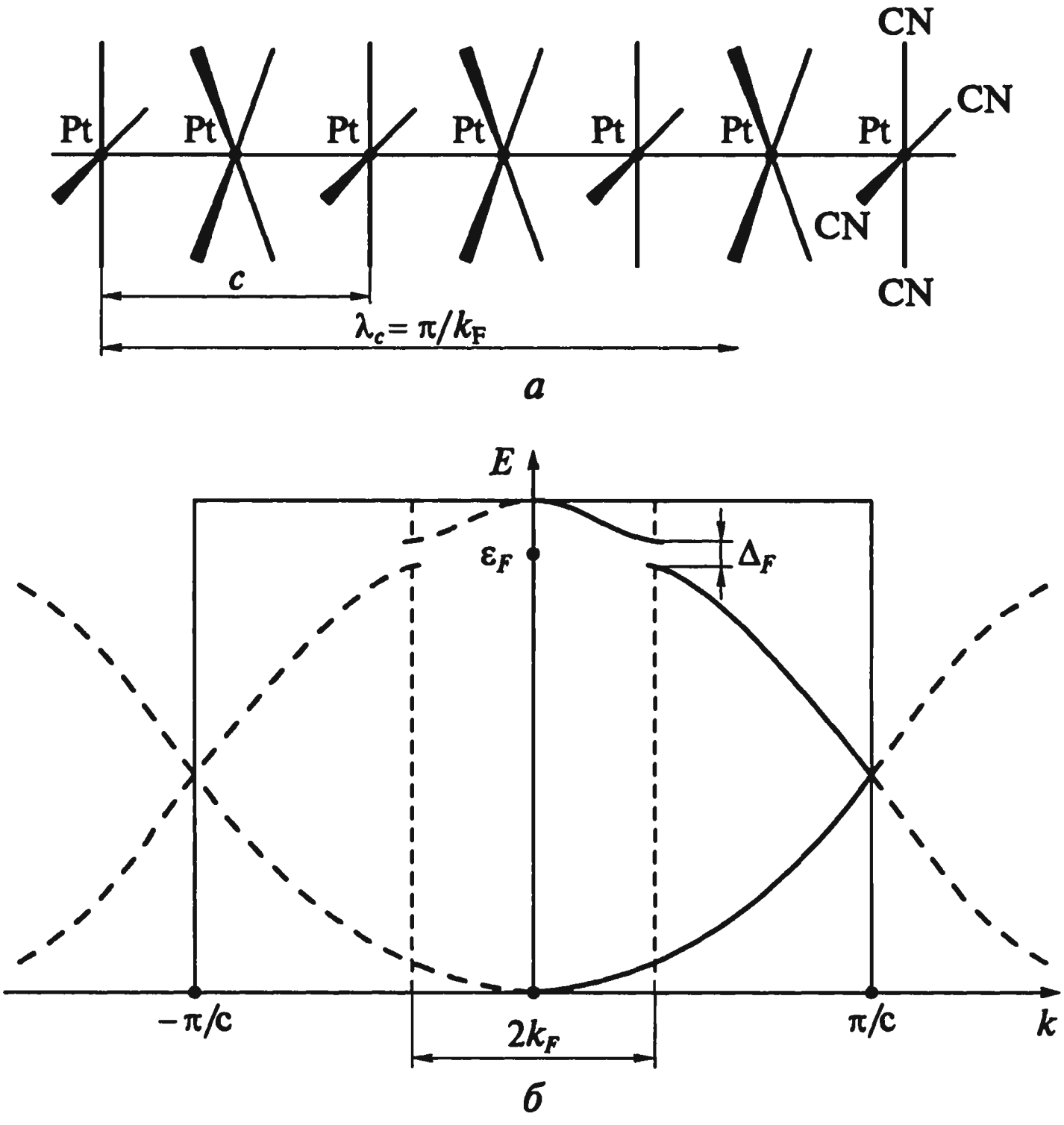


Рис. 5.29. Пайерлсовское искажение бесконечной линейной цепочки $[Pt(CN)_4^{-1,7}]_\infty$ с периодом c

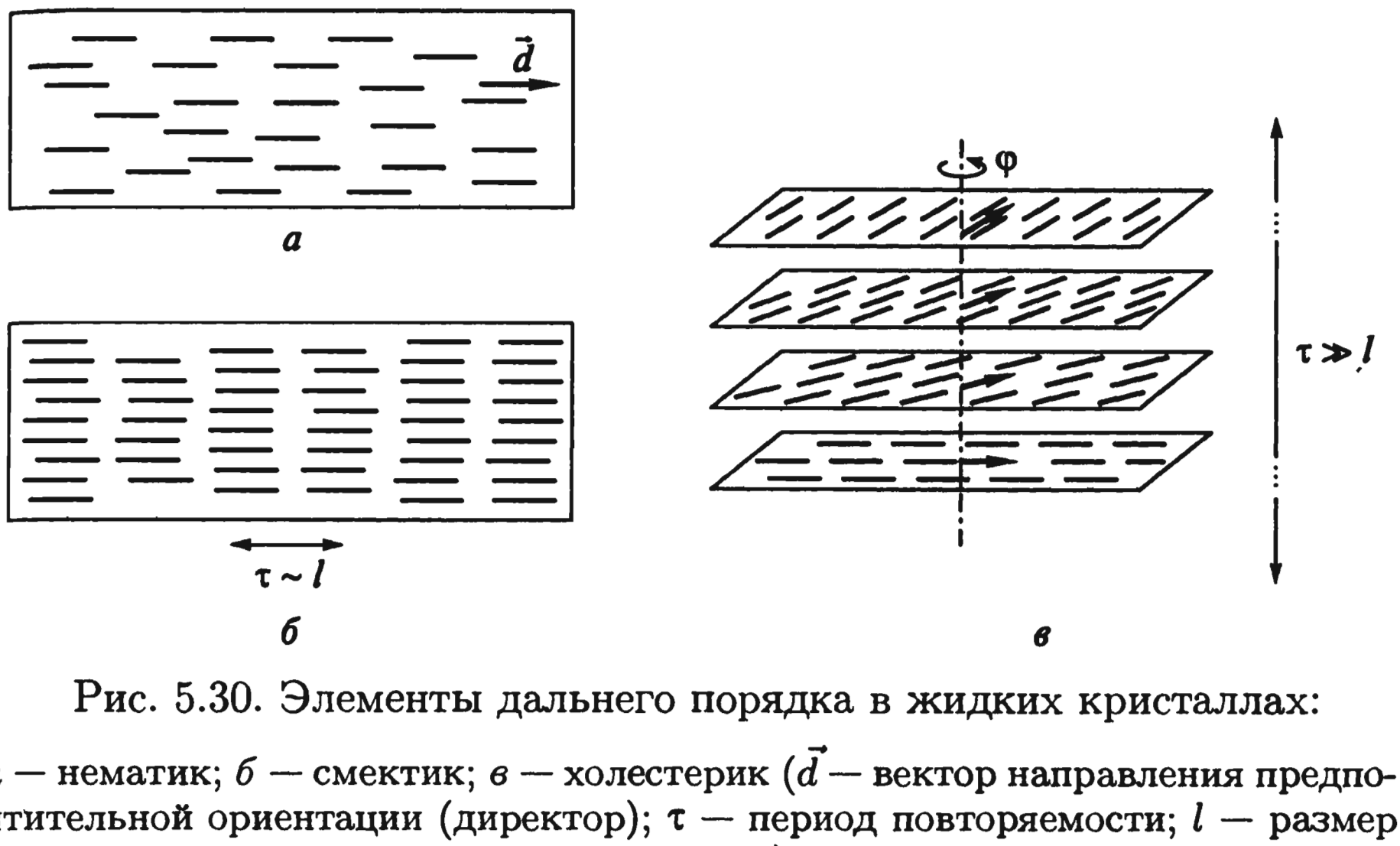


Рис. 5.30. Элементы дальнего порядка в жидких кристаллах:
а — нематик; *б* — смектик; *в* — холестерик ($\vec{d}$ — вектор направления предпочтительной ориентации (директор); τ — период повторяемости; l — размер молекулы)

$K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \cdot 3H_2O$, d_{z^2}-зона которого заполнена на $^5/_6$, ниже 120 K становится диэлектриком со сверхструктурной модуляцией вдоль направления цепочек с периодом $\lambda' \simeq 6,7c$ (рис. 5.29, *б*; [24, гл. 7]). Переходы пайерлсовского типа наблюдаются также в кристаллах с двумерной анизотропной электропроводностью, в частности дихалькогенидах переходных металлов MX_2 (где $M = Nb, Ta; X = S, Se$) и в соединениях внедрения на их основе [24, гл. 6]. Модуляции атомных слоев, возникающие при фазовом переходе в таких соединениях, называют *волнами зарядовой плотности* (charge-density waves, CDW).

Некоторые молекулярные кристаллы ниже температур плавления или возгонки переходят в *мезофазные* состояния с частичным нарушением «дальнего порядка», свойственного кристаллической решетке. Так, либрационные колебания кристаллов, построенных из молекул высокосимметричной ван-дер-ваальсовой формы (метана CH_4, фуллерена C_{60}, длинных цепочечных алканов C_nH_{2n+2} и др.), являются мягкими модами для их перехода в *ротационные* фазы с ограниченным вращением молекул, неподвижные центры (CH_4, C_{60}) или цилиндрические оси которых (C_nH_{2n+2}) подчиняются трансляционной симметрии (соответственно кубической и гексагональной). Другой пример частично упорядоченных фаз представляют *жидкие кристаллы*, в которых сохраняются элементы трансляционного порядка в расположении анизотропных (вытянутых или уплощенных) молекул (рис. 5.30). Связь физических свойств и фазовых переходов жидких кристаллов с их симметрией рассмотрена в [11, т. 4, гл. 8].

5.4. НЕПРЕРЫВНЫЕ ГРУППЫ В ТЕОРИИ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

Наиболее высокосимметричным физическим системам соответствуют непрерывные группы бесконечного порядка. Многие характеристики таких систем, определяющие ряд важнейших свойств вещества (валентности элементов, теплоемкости газов, устойчивость атомных ядер и др.) можно вывести теоретико-групповыми методами. В этом разделе мы рассмотрим дискретные состояния атомов, атомных ядер и молекул, используя представления непрерывных групп Ли.

5.4.1. Одноэлектронные состояния атома и правила отбора

Электроны в атомах, занимая область пространства с диаметром $\sim 10^{-10}$ м, находятся в суммарном поле электростатического притяжения к положительно заряженному «точечному» ядру (диаметром $\sim 10^{-15}$ м) и межэлектронного отталкивания с усредненной симметрией $\mathbb{O}(3,\mathbb{R}) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \langle j \rangle_2$ (см. гл. 4). Одноэлектронные волновые функции атома $\psi(\vec{r})$ в сферических координатах (r, θ, φ) разделяются на радиальную и угловую части:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Функции $R(r)$, полносимметричные в группе $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$ (представление $D_g^{(0)}$), описывают радиальную зависимость состояний электрона. *Сферические функции* $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, задающие их угловую зависимость, являются решениями системы дифференциальных уравнений с инфинитезимальными операторами (4.5) группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\
\hat{L}_y &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) = i\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \qquad (5.57) \\
\hat{L}_z &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned}$$

Функции Y_{lm} образуют $(2l+1)$-мерное неприводимое представление $D^{(l)}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. По условию непрерывности $\psi(\vec{r})$, они

Таблица 5.7

Сферические функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ при $m = 0, \pm 1$ [12]

l	$m=0$	$m=\pm 1$
0	$(4\pi)^{-1/2}$	
1	$(3/4\pi)^{1/2}\cos\theta$	$(3/8\pi)^{1/2}(\sin\theta)e^{\pm i\varphi}$
2	$(5/16\pi)^{1/2}(1+3\cos(2\theta))$	$(15/32\pi)^{1/2}(\sin(2\theta))e^{\pm i\varphi}$
3	$(7/256\pi)^{1/2}(3\cos\theta+5\cos(3\theta))$	$(21/1024\pi)^{1/2}(\sin\theta+5\sin(3\theta))e^{\pm i\varphi}$

определены лишь для целочисленных $l = j$, $m = -j, \ldots, j$ и имеют вид (табл. 5.7):

$$Y_{lm} = e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)/\sqrt{2\pi},$$

где $P_l^m(\cos\theta)$ — *присоединенные полиномы Лежандра* ([52, т. 3, гл. 5]. Функциям $|Y_{lm}|^2$ пропорциональна плотность вероятности угловых координат (θ,φ) для любых частиц, движущихся в сферически симметричном поле. В частности, эти функции определяют форму s-$(l=0)$, p-$(l=1)$, d-$(l=2)$ и f-АО $(l=3)$, которые преобразуются, соответственно, по неприводимым представлениям $D_g^{(0)}$, $D_u^{(1)}$, $D_g^{(2)}$ и $D_u^{(3)}$ группы $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$ (см. подразд. 4.3).

Дискретные состояния электрона в кулоновском поле ядра с зарядом Z получают решением стационарного уравнения Шредингера $\hat{H}_0\psi = E\psi$ с гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{Ze^2}{r}\right) \sim -\Delta - \frac{2Z}{r}. \qquad (5.58)$$

Их энергии равны

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2} = -\left(\frac{e^2}{2a_B}\right)\frac{Z^2}{n^2} \sim -\frac{Z^2}{n^2}, \qquad (5.59)$$

где e — заряд; m — масса электрона; $\hbar$ — постоянная Планка; $a_B = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ — боровский радиус; $n = 1, 2, 3\ldots$ — *главное квантовое число*. n^2-Кратное вырождение одноэлектронных состояний с $l = 0, 1, \ldots, n-1$ в оболочке с заданным n показывает, что симметрия $G(\hat{H}_0)$ «кулоновского» гамильтониана (5.58) выше точечной группы трехмерной сферы:

$$G(\hat{H}_0) \supset \mathbb{O}(3,\mathbb{R}).$$

Таблица 5.8

Сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ при $m = \pm 2$, $m = \pm 3$ [12]

l	$m = \pm 2$	$m = \pm 3$
2	$(15/128\pi)^{1/2}(1 - \cos(2\theta))e^{\pm i2\varphi}$	
3	$(105/512\pi)^{1/2}(\cos\theta - \cos(3\theta))e^{\pm i2\varphi}$	$(35/1024\pi)^{1/2}(3\sin\theta - \sin(3\theta))e^{\pm i3\varphi}$

Дополнительные инфинитезимальные операторы группы $G(\hat{H}_0)$ выводятся из специфического инварианта водородоподобного атома, коммутирующего с гамильтонианом (5.58), — *вектора Рунге — Ленца*:

$$\hat{A} = \frac{\vec{r}}{r} - \frac{1}{2}([\vec{\nabla}, [\vec{r}, \vec{\nabla}]] - [[\vec{r}, \vec{\nabla}], \vec{\nabla}]),$$

где $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$; квадратные скобки обозначают векторное произведение. Можно непосредственно показать, что компоненты операторов $\hat{A} = (A_x, A_y, A_z)$ и $\hat{L} = (L_x, L_y, L_z)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} [L_\alpha, A_\beta] &= i\delta_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma, \\ [A_\alpha, A_\beta] &= -i\hat{H}_0\delta_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma, \end{aligned} \tag{5.60}$$

где $\alpha, \beta, \gamma = x, y$ или z; $\hat{H}_0$ — гамильтониан (5.59); $\delta_{\alpha\beta\gamma}$ — символ Леви — Чивита (см. гл. 7); $(\hat{A}, \hat{L}) = (\hat{L}, \hat{A}) = 0$. Полагая

$$\hat{A}' = \hat{A}/\sqrt{-H_0},$$

для связанных состояний ($H_0 < 0$) получают две тройки эрмитовых инфинитезимальных операторов $(L_i,\ A'_k)$ с коммутационными соотношениями, изоморфными соотношениям (4.25) в группе $SO(4, \mathbb{R}) = SO(3, \mathbb{R}) \times SO(3, \mathbb{R})$.

Таким образом, связанным состояниям водородоподобного атома соответствуют неприводимые представления $D^{(jj')}$ группы четырехмерных вращений (см. гл. 4). Как показано в [99, т. 2, гл. 20], условие $(\hat{L}, \hat{A}) = 0$ накладывает дополнительные ограничения на индексы $j = j'$, поэтому в (5.59) $n = 2j + 1$, где $j = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2}, \ldots$, и уровни энергии такого атома $(2j + 1)^2$-кратно вырождены*.

*В ранней квантовомеханической литературе вырождение выше обусловленного точечной или пространственной группой называли *случайным*. Примером подобного вырождения может также служить «склеивание» ветвей $\varepsilon(k)$ на границах зоны Бриллюэна в кристаллах с открытыми элементами симметрии (см. подразд. 3.14).

Правила отбора для электронных переходов между АО в водородоподобных атомах следуют из общего правила (5.22) с учетом разложения (4.24) произведения неприводимых представлений в группе $\mathbb{O}(3,\mathbb{R})$. (В полносимметричной радиальной части волновых функций $R(r)$ разрешены переходы с любыми Δn). В дипольном приближении

$$D^{(l)}_{\xi(l)} \times D^{(l')}_{\xi(l')} = D^{(l+l')}_{\xi(l+l')} + \ldots + D^{(|l-l'|)}_{\xi(|l-l'|)} \supset D^{(1)}_{u} = \Gamma(\vec{\mu}) \qquad (5.61)$$

(нижний индекс $\xi(l)$ — «g» при четном l и «u» при нечетном l). Поскольку при $l = l' + 2k$, $k \in \mathbb{Z}^1$ произведение $D^{(l)} \times D^{(l)}$ может содержать только четные компоненты $D^{(L)}_{g}$, переходы с ($\Delta n \neq 0, \Delta l = 0, 2, 4, \ldots$) запрещены. Ввиду ортогональности спиновых функций с $s = 1/2$ и $s = -1/2$ матричные элементы (5.21) переходов с «переворачиванием» спина равны нулю. Таким образом:

$$\Delta l = \pm 1, \qquad \Delta s = 0. \qquad (5.62)$$

Первое условие автоматически обеспечивает положительную четность матричного элемента $\langle l'|\vec{r}|l\rangle$, так как вектор $\vec{r}$ антисимметричен относительно инверсии. Наиболее интенсивными в

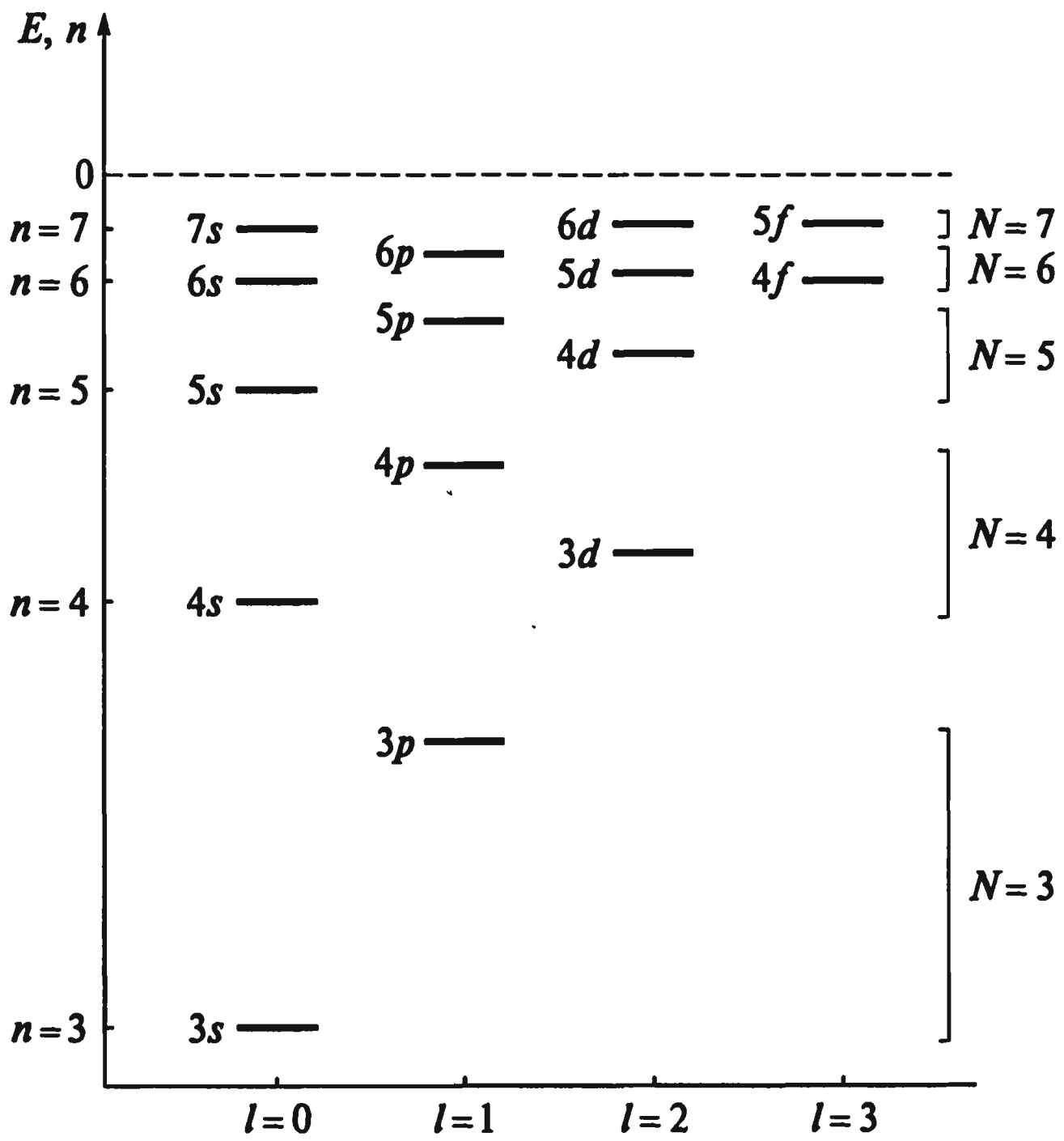


Рис. 5.31. Орбитальные уровни энергии многоэлектронного атома (N — номер периода)

спектрах атома H являются разрешенные электронные переходы $s \to p$, $p \to d$, $f \to d$ и др., тогда как линии запрещенных переходов с $\Delta l = 0$ ($1s \to 2s$ и др.) и $\Delta l = 2$ ($s \to d$, $f \to p$ и др.) проявляются гораздо слабее.

Взаимное отталкивание электронов в многоэлектронных атомах снимает дополнительное «кулоновское» вырождение и расщепляет атомные уровни с данным n на $(2l+1)$-кратно вырожденные *подоболочки* (рис. 5.31). В силу принципа Паули, по мере увеличения числа электронов в атоме ими последовательно заполняются все более высокоэнергетические АО, вследствие чего с увеличением атомного номера Z возрастают главное квантовое число n внешней (*валентной*) оболочки и атомный радиус. Это сопровождается ослаблением электростатического притяжения валентных электронов к ядру и кулоновского отталкивания между ними. Поэтому в тяжелых атомах вновь наблюдается приближенное N^2-кратное вырождение состояний валентных электронов, где, однако, N — уже номер периода в Периодической системе Менделеева. (Валентную оболочку тяжелого атома составляют близкие по энергии АО с разными главными квантовыми числами n.) Наиболее устойчивы атомы инертных газов с *замкнутыми* конфигурациями из $2N^2$ валентных электронов.

5.4.2. Термы многоэлектронного атома

Дискретные состояния многоэлектронного атома (*термы*) преобразуются по неприводимым представлениям группы $G(\hat{H})$ его гамильтониана, который в упрощенной «безразмерной» форме (полагая $\hbar, m_e = 1$) записывают как

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}' = -\frac{1}{2}\sum\left(\Delta_i + \frac{Z}{r_i}\right) + \sum\frac{1}{r_{ij}} + \sum a_i \hat{l}_i \hat{s}_i + \ldots, \quad (5.63)$$

где $\hat{H}_0$ — сумма одноэлектронных операторов $\Delta_i = \nabla_i^2$ и Z/r_i; $i = 1, 2, \ldots, N$; поправки на межэлектронное отталкивание $\hat{H}_1$, спин-орбитальное взаимодействие $\hat{H}_2$ и прочие эффекты $\hat{H}'$ учитываются по теории возмущений.

В нулевом приближении ($\hat{H} = \hat{H}_0$) гамильтониан (5.63) отвечает совокупности N не взаимодействующих между собой электронов в кулоновском поле ядра с зарядом $+Z$. Такую систему можно описать группой

$$G(\hat{H}_0) = \underbrace{\mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \ldots \times \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})}_{N \text{ раз}} \times \mathbf{S}_N \times \langle j \rangle_2, \quad (5.64)$$

где прямому произведению N групп $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ отвечает сохранение всех «одноэлектронных» орбитальных моментов $(\hat{l}_1,\ldots\hat{l}_N)$, группе $\mathbf{S}_N$ — перестановочная симметрия системы из N неразличимых электронов, а подгруппа $\langle j\rangle_2 \sim C_i$ определяет четность состояний. Волновые функции нулевого приближения имеют вид антисимметризованных произведений водородоподобных спин-орбиталей (см. подразд. 5.1)

$$\Pi\psi_i(\vec{r_j})\chi_i(\sigma_j).$$

При учете «безразмерной» поправки на межэлектронное отталкивание

$$\hat{H}_1 = \sum \frac{1}{r_{ij}}$$

независимые повороты векторов $\vec{r}_i$ вокруг ядра изменяют межэлектронные расстояния r_{ij}, и гамильтониан $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ остается инвариантным лишь при поворотах совокупности всех N электронов как целого:

$$G(\hat{H}_0 + \hat{H}_1) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \mathbf{S}_N \times \langle j\rangle_2 = \mathbb{O}(3,\mathbb{R}) \times \mathbf{S}_N. \qquad (5.65)$$

Неприводимые представления группы $G(\hat{H}_0+\hat{H}_1)$, отвечающие N-электронному атомному терму, находят приведением прямого произведения N одноэлектронных представлений $D^{(l_i)}$ и всех возможных представлений группы перестановок электронов

$$\Gamma = D^{(l_1)} \times \ldots \times D^{(l_N)} \times \sum \Gamma^{[\lambda_i]}. \qquad (5.66)$$

Орбитальный момент L атома нумерует компоненты разложения $D^{(l_1)} \times \ldots \times D^{(l_N)}$ как векторной суммы N орбитальных моментов $\{l_i\}$. Его проекции $M_L = -L, -L+1, \ldots, L$ образуют $(2L+1)$-мерные представления подгруппы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \subset G(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)$. Кроме того, как было показано в п. 5.1.4, каждому неприводимому представлению группы перестановок N частиц со спином $1/2$ отвечает определенная векторная сумма $S = \frac{1}{2}(N_+ - N_-)$ спинов $\vec{s}_i$ этих частиц с проекциями $m_s = \pm 1/2$.

Таким образом, термы N-электронного атома в группе нерелятивистского гамильтониана (5.65) вырождены $(2L+1)(2S+1)$-кратно, причем

$$L = \sum l_i, \qquad M_L = \sum m_l^{(i)},$$
$$S = \sum s_i, \qquad M_S = \sum m_s^{(i)}, \qquad (5.67)$$

и суммирование проводится по всем неполным электронным конфигурациям атома. (Замкнутые электронные конфигурации

$[ns^2]$, $[np^6]$, $[nd^{10}]$ и $[nf^{14}]$, где надстрочный индекс указывает число электронов на подоболочке с заданными числами (n, l), невырождены и полносимметричны, см. [52, т. 3, гл. 10].)

$(2L+1)(2S+1)$-Кратное вырождение терма в $G(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)$ частично снимается при введении поправки на спин-орбитальное взаимодействие:

$$\hat{H}_2 = \sum a_i \hat{l}_i \hat{s}_i, \qquad a_i \sim \frac{1}{c^2 r_j}\left(\frac{dU}{dr_j}\right),$$

где c — скорость света; множители a_i пропорциональны градиенту суммарного потенциала U, действующего на электрон в атоме. Можно показать [52, т. 3, гл. 10, § 72], что оператор $\hat{H}_2$ не коммутативен с $\hat{L}$ и $\hat{S}$ по отдельности, но коммутирует с их векторной суммой — *оператором полного момента* $\hat{J}$:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} = \sum \hat{j}_i, \qquad M_J = |L-S|, |L-S|+1, \ldots, L+S. \qquad (5.68)$$

Благодаря спин-орбитальному взаимодействию $(2L+1)(2S+1)$-кратно вырожденный атомный терм расщепляется на $(2S+1)$ компонент, если $L > S$, и на $(2L+1)$ компонент, если $L < S$ (в последнем случае $M_J = S-L, S-L+1, \ldots, S+L$). При этом сохраняется $(2J+1)$-кратное вырождение уровней, т. е.

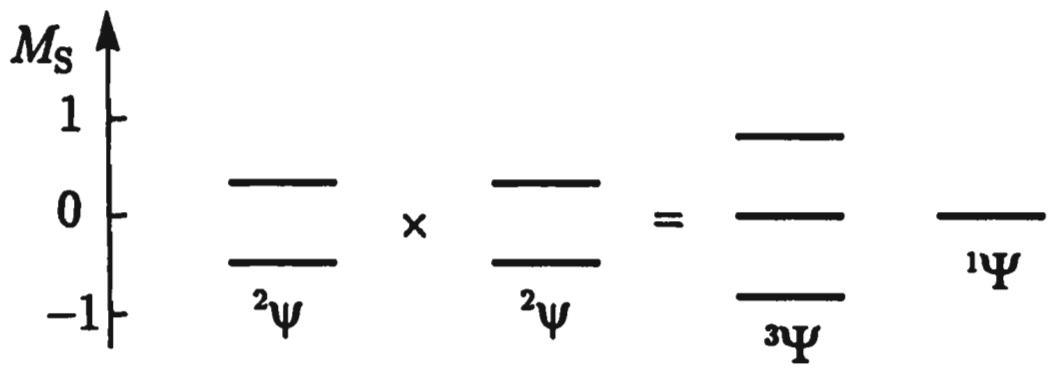
$$G(\hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2) \sim \mathbb{O}(3, \mathbb{R}),$$

где индексы $(2J+1)$-мерных представлений $D^{(J)}$ — из (5.68).

Релятивистская поправка $\hat{H}_2$, пропорциональная $(v/c)^2$, где v — «классическая» скорость движения электрона в атоме, становится сравнимой с $\hat{H}_1$ для электронов на внутренних оболочках тяжелых атомов. При малых $\hat{H}_2$ орбитальные состояния атома ${}^{2S+1}\Psi_J$ с $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ обозначают заглавными буквами $S, P, D, F, G, H, \ldots$, их формальную кратность по спину выносят в левый надстрочный индекс, а фактическую кратность по полному моменту $(2J+1)$ обозначают правым подстрочным индексом J (*LS-схема*). Например, возбужденные электронные состояния атома He $[1s^1 2p^1]$ с $L = 0+1 = 1$ и $S = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} = 0, 1$ обозначаются, соответственно, ${}^1P_1$ и ${}^3P_0$.

Сложение моментов удобно выполнять графически с помощью диаграмм, суммируя проекции $\{m_l^{(i)}\}$ и (или) $\{m_s^{(i)}\}$ всех *микросостояний* электронов (m_l, m_s) в заданной орбитальной конфигурации и разбивая полученные компоненты M_L и M_S в соответствии с (5.67), (5.68). В частности, синглетное $(S = 0)$ и триплетное $(S = 1)$ спиновые состояния атома или «карбеноид-

ной» молекулы с двумя неспаренными электронами непосредственно получаются диаграммным сложением проекций спина этих электронов $m_s = \pm 1/2$



в соответствии с разложением прямого произведения спиноров

$$D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} = D^{(1)} + D^{(0)}.$$

(Две проекции m_s одного из электронов последовательно складывают с проекциями m'_s другого электрона, располагая полученные суммы M_S столбцами на диаграмме.)

Термы недозаполненных электронных конфигураций $[p^a]$, $[d^a]$ и т. д. (где a — число электронов), учитывая принцип Паули, находят графическим сложением всех комбинаций из a несовпадающих векторов, принадлежащих «звезде» микросостояний (m_s, m_l) данной (n,l)-подоболочки.

Полученную совокупность векторов в координатах (M_L, M_S) разделяют на «прямоугольные» наборы из $(2L+1)(2S+1)$ точек, отвечающие неприводимым представлениям группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \mathbf{S}_a$ (рис. 5.32).

Поскольку заполненные электронные конфигурации полносимметричны, недозаполненные подоболочки с одинаковым чис-

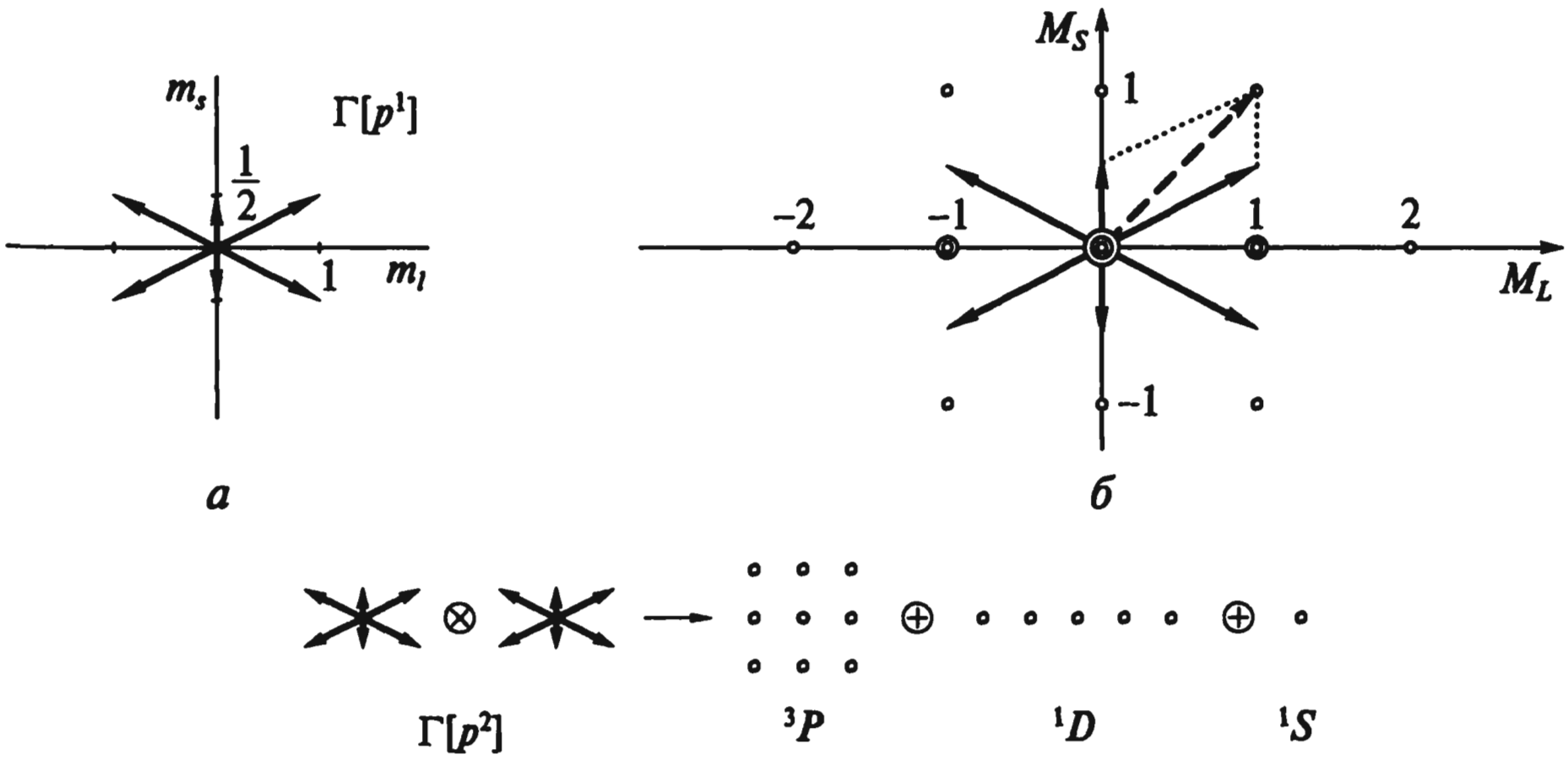


Рис. 5.32. Графическое определение термов $[p^2]$-конфигурации атома:

а — представление микросостояния $[p^1]$; *б* — сложение несовпадающих векторов

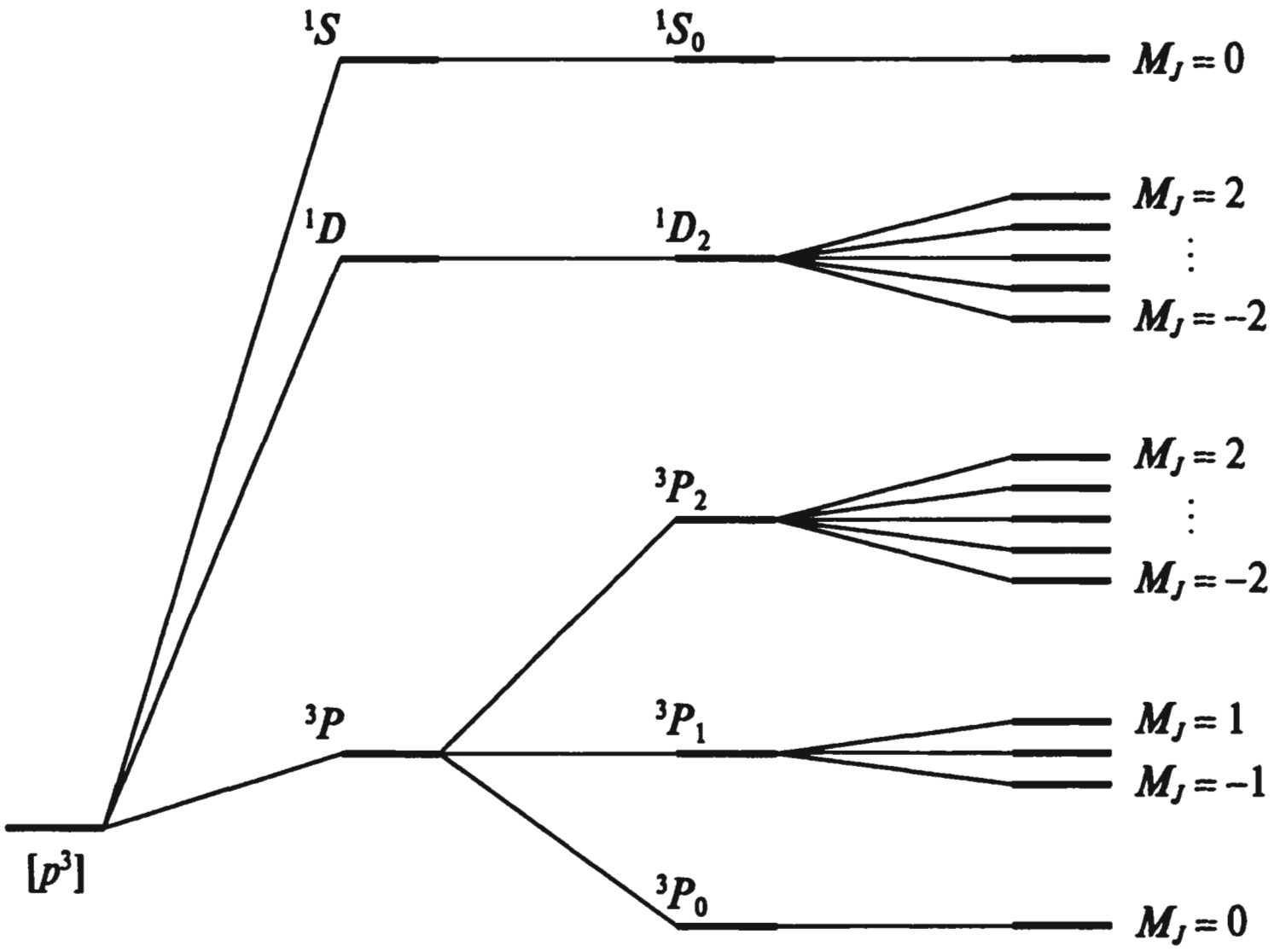


Рис. 5.33. Квантовые состояния $[p^2]$-конфигурации

лом электронов и «дырок» (например, $[p^2]$ и $[p^4]$ или $[d^3]$ и $[d^7]$) состоят из одинаковых термов.

По *правилам Хунда*, термы с низшей энергией в каждой конфигурации имеют максимальную спиновую мультиплетность $(2S+1)$, а самым низкоэнергетическим из них является терм с максимальной орбитальной мультиплетностью $(2L+1)$*.

Для конфигураций с $a < N/2$ (где N — максимальное число электронов на подоболочке) энергии уровней $^{2S+1}\Psi_J$ возрастают, а при $a \geqslant N/2$ — убывают с увеличением J. Так, например, валентные конфигурации $[p^2]$ (атом C) и $[p^4]$ (атом O) состоят из одинаковых термов ^1S, ^3P и ^1D (рис. 5.33) и имеют основное состояние ^3P с компонентами $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$, однако в атоме C низшим уровнем является $^3P_0$, а в атоме O — $^3P_2$. Во внешнем

Неспаренные электроны с одинаковым спином не могут сблизиться: двухчастичные плотности вероятности $\rho(r_1, r_2)$ при $r_1 \simeq r_2$ для них малы из-за принципа Паули и непрерывности волновых функций («дырка Ферми»*). Максимальный суммарный спин S соответствует наибольшему возможному числу таких электронов. В состояниях с большими L электроны более всего удалены от ядра и, следовательно, среднее расстояние между ними максимально. Оба фактора уменьшают межэлектронное электростатическое отталкивание и понижают энергию терма. Таким образом, параллельная ориентация моментов в многоэлектронном атоме, как и в ферромагнитном кристалле (см. подразд. 5.3.6), определяется не магнитными, а кулоновскими силами.

Таблица 5.9

«Дырочные» термы атома и рентгеновские диаграммные линии*

«Дырочная» конфигурация	Состояние «дырки»			Рентгеновский терм	Разрешенные переходы ($K \to N_{II,III}$)	Линии в спектре ($K_{\beta 2}$)**
	$l=0$	$l=1$	$l=2$			
$3d^1$			$3d_{5/2}$	M_V	$K \to M_{IV,V}$ $L_{III} \to M_V$ $L_{III} \to M_{IV}$	$K_{\beta 5}$ $L_{\alpha 1}$ $L_{\alpha 2}$
			$3d_{3/2}$	M_{IV}		
$3p^1$		$3p_{3/2}$		M_{III}	$K \to M_{III}$ $K \to M_{II}$ $L \to M_{III}$ $L_I \to M_{II}$ $L_I \to M_V$ $L_I \to M_{IV}$	$K_{\beta 1}$ $K_{\beta 3}$ $L_{\beta 3}$ $L_{\beta 4}$ $L_{\beta 9}$ $L_{\beta 10}$
		$3p_{1/2}$		M_{II}		
$3s^1$	$3s_{1/2}$			M_I	$L_{III} \to M_I$ $L_{II} \to M_I$	L_l L_η
$2p^1$		$2p_{3/2}$		L_{III}	$K \to L_{III}$	$K_{\alpha 1}$
		$2p_{1/2}$		L_{II}	$K \to L_{II}$	$K_{\alpha 2}$
$2s^1$	$2s_{1/2}$			L_I		
$1s^1$	$1s_{1/2}$			K		

* Энергия «дырочных» термов атомов в таблице возрастает сверху вниз.

** N-термы содержат вакансию на 4-й электронной оболочке (N_{II}: $4p_{1/2}$; N_{III}: $4p_{3/2}$).

магнитном поле (слагаемое $\hat{H}'$ в гамильтониане (5.63)) наблюдается полное расщепление уровней $^{2S+1}\Psi_J$ на $(2J+1)$ компонент.

У п р а ж н е н и е 5.6. Определить термы и низший энергетический уровень свободного иона Cr^{3+} $[d^3]$.

В отличие от одноэлектронных АО четность состояний многоэлектронного атома относительно инверсии определяется уже не орбитальным квантовым числом L, а множителем $\prod(-1)^{l_i}$, где $\{l_i\}$ — орбитальные квантовые числа АО, входящих в электронную конфигурацию (например, в конфигурациях $[p^2]$ и $[p^4]$ все термы четные, а в $[p^3]$ — нечетные). Поэтому для многоэлектронных атомов в общем случае разрешены переходы между термами с одинаковыми L (если они имеют противоположные четности):

$$\Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0, \quad \Delta J = 0, \pm 1. \tag{5.69}$$

В частности, внутри низшего терма ^4F иона Cr^{3+} (упражнение 5.6) разрешен переход с основного уровня $^4F_{3/2} \to {}^4F_{5/2}$

($\Delta L = 0, \Delta J = 1,\ \Delta S = 0$), тогда как переходы с $^4F_{3/2}$ на $^4F_{7/2}$ и $^4F_{9/2}$ ($\Delta J > 1$), а также на любые уровни ^4P-терма ($\Delta L = 2$) и на остальные термы $[d^3]$- конфигурации ($\Delta S \neq 0$) запрещены*.

Упражнение 5.7. Определить запрещенные и разрешенные переходы из невозбужденной электронной конфигурации $[3d^3]$ в возбужденную конфигурацию $[3d^2 4s^1]$ иона Cr^{3+}.

Высокоэнергетические метастабильные состояния ионизированных атомов с «дыркой» на внутренней оболочке (*рентгеновские термы*), в которых энергии межэлектронного отталкивания и спин-орбитального взаимодействия сравнимы, задаются номером оболочки с вакансией и квантовым числом ее полного момента $j = l \pm \frac{1}{2}$ (*jj-схема*). Таким состояниям с полуцелыми индексами соответствуют четномерные спинорные неприводимые представления группы $\mathbb{O}(3, \mathbb{R})$ (см. подразд. 4.5). «Дырочная» одночастичная модель ионизированного атома используется в описании рентгеновских спектров (табл. 5.8).

5.4.3. Коэффициенты векторного сложения

Матричные элементы переходов в многоэлектронных атомах и других сферически симметричных системах вычисляют с помощью коэффициентов Клебша — Гордана $C^{JM}_{j_1 j_2 m_1 m_2}$, или $(j_1 j_2 m_1 m_2 | JM)$ (см. подразд. 3.8) (также называемых *коэффициентами векторного сложения* и *коэффициентами Вигнера*). Эти коэффициенты равны вкладам двух микросостояний (j_1, m_1) и (j_2, m_2) в состояние складывающейся из них системы с квантовыми числами (J, M):

$$\Psi_{JM} = \sum_{m_1 + m_2 = M} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}. \qquad (5.70)$$

Действительные числа $(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM)$ представляют собой элементы ортогональной матрицы $\mathbf{C}$ перехода от базиса произведений одночастичных волновых функций $\{\psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}\}$ к базису двухчастичных функций $\{\Psi_{JM}\}$:

*Правилом отбора $\Delta S = 0$ обусловлен, например, вид УФ-спектра гелия, представляющего наложение двух систем полос: переходов $^3\Psi_i \to {}^3\Psi_j$ между спин-триплетными состояниями (*орто*-гелий) и переходов $^1\Psi_i \to {}^1\Psi_j$ между спин-синглетными состояниями (*пара*-гелий). Запрещенные синглет-триплетные переходы могут проявляться как слабые линии в спектрах атомов и молекул благодаря спин-орбитальному взаимодействию [92].

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM) = (JM \mid j_1 j_2 m_1 m_2), \text{ т. е.}$$
$$\Psi_{j_1 m_1} \Psi_{j_2 m_2} = \sum_{|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM) \Psi_{J(m_1+m_2)}. \qquad (5.71)$$

В общем случае коэффициенты $(j_1 j_2 m_1 m_2 | JM)$ связывают волновые функции Ψ_{JM} некоторой сложной сферически симметричной системы, состоящей из двух подсистем 1 и 2, с волновыми функциями ψ_{j_1,m_1} и ψ_{j_2,m_2} этих подсистем (не обязательно одночастичных).

При этом предполагается, что подсистемы лишь слабо взаимодействуют между собой, поэтому их состояния можно приближенно задать квантовыми числами (j_1, m_1) и (j_2, m_2).

Все элементы квадратной матрицы $\mathbb{C}$ размера $(2j_1+1)(2j_2+1)$, для которых не выполнено *правило треугольника*:

$$M = m_1 + m_2,$$
$$|j_1 + j_2| \geqslant J \geqslant |j_1 - j_2|,$$

равны нулю. Столбцы и строки $\{(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM)\}$ этой матрицы можно рассматривать как компоненты векторов, связанных соотношениями ортогональности

$$\sum_{m_1,m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | JM)(j_1 j_2 m_1 m_2 | J'M') = \delta_{JJ'}\delta_{MM'},$$
$$\sum_{J,M} (j_1 j_2 m_1 m_2 | JM)(j_1 j_2 m_1' m_2' | JM) = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}, \qquad (5.72)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Коэффициенты Клебша — Гордана обладают также симметрией относительно перестановок индексов:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM) = (-1)^{j_1+j_2-J}(j_2 j_1 m_2 m_1 \mid JM) =$$
$$= (-1)^{j_1+j_2-J}(j_1 j_2 \overline{m}_1 \overline{m}_2 \mid J\overline{M}) =$$
$$= (-1)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}}(Jj_2\overline{M}m_2 \mid j_1\overline{m}_1).$$

где $\overline{m}_i = -m_i$.

Коэффициенты векторного сложения микросостояний часто также записывают в форме *3j-символов*:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2-M}\frac{1}{\sqrt{2J+1}}(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid J\overline{M}),$$
$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | JM) = (-1)^{j_1-j_2+M}\sqrt{2J+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} \qquad (5.73)$$

Коэффициенты Клебша — Гордана $(JM|j_1j_2m_1m_2)$ при $j_2 = 1/2$

J	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j_1 + 1/2$	$\left(\frac{j_1 + M + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{j_1 - M + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$
$j_1 - 1/2$	$-\left(\frac{j_1 - M + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{j_1 + M + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$

с более простой перестановочной симметрией индексов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & j_1 & j_2 \\ M & m_1 & m_2 \end{pmatrix} =$$

$$= \sigma \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & J \\ m_2 & m_1 & M \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \overline{m}_1 & \overline{m}_2 & \overline{M} \end{pmatrix},$$

где $\sigma = (-1)^{j_1+j_2+J}$. $3j$-Символы равны амплитудам вероятности векторного сложения трех моментов в нулевую сумму:

$$\hat{j}_1 + \hat{j}_2 + \hat{J} = 0.$$

Коэффициенты Клебша — Гордана и $3j$-символы существенно упрощают расчеты физических величин в сферически симметричных системах, сводя их к решению простых детерминантных уравнений [12]. В частности, по *теореме Вигнера — Эккарта*, матричные элементы переходов $\psi_{jm} \to \psi_{j'm'}$ под действием произвольного тензорного оператора $\hat{T}^{(J)}_M$ ранга J с компонентами $(M = -J, \ldots J)$, преобразующегося по неприводимому представлению $D^{(J)}$ группы $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, имеют вид

$$\langle j'm'|\hat{T}^{(J)}_M|jm\rangle = (jj'mm' \mid JM)\langle j'||\hat{T}_J||j\rangle, \qquad (5.74)$$

где $\langle j'||\hat{T}_J||j\rangle$ — *приведенный матричный элемент*, инвариантный относительно вращений. Соотношение (5.74) позволяет разделить симметрийные характеристики оператора $\hat{T}^{(J)}_M$, определяющие числовой множитель $(jj'mm'|JM)$, и его аналитическую форму, от которой зависит значение интеграла $\langle j'||\hat{T}_J||j\rangle$.

Коэффициенты Клебша — Гордана для малых значений индексов (j, j') представлены в табл. 5.10 — 5.13. Также вычислены и сведены в таблицы коэффициенты векторного сложения для произвольных тройных произведений вида $\psi_{jm}\psi_{j'm'}\psi_{j''m''}$

Таблица 5.11

Коэффициенты Клебша — Гордана $(JM|j_1j_2m_1m_2)$ при $j_2 = 1$

J	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{j_1-M+1}{(2j_1+1)(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
j_1	$-\left[\frac{(j_1+M)(j_1-M+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$M\,[j_1(j_1+1)]^{-1/2}$	$\left[\frac{(j_1-M)(j_1+M+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{(j_1-M)(j_1+M)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{j_1(2j_1+1)}\right]$

Таблица 5.12

Коэффициенты Клебша — Гордана $(JM|j_1j_2m_1m_2)$ при $j_2 = 3/2$; $m_2 = 1/2, 3/2$

J	$m_2 = 3/2$	$m_2 = 1/2$
$j_1 + 3/2$	$\left[\dfrac{(j_1+M-1/2)(j_1+M+1/2)(j_1+M+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{3(j_1+M+1/2)(j_1+M+3/2)(j_1-M+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$
$j_1 + 1/2$	$-\left[\dfrac{3(j_1+M-1/2)(j_1+M+1/2)(j_1-M+3/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$	$-\left(j_1-3M+\dfrac{3}{2}\right)\left[\dfrac{j_1+M+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 1/2$	$\left[\dfrac{3(j_1+M-1/2)(j_1-M+1/2)(j_1-M+3/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$-\left(j_1+3M-\dfrac{1}{2}\right)\left[\dfrac{j_1-M+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 3/2$	$-\left[\dfrac{(j_1-M-1/2)(j_1-M+1/2)(j_1-M+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{3(j_1+M-1/2)(j_1-M-1/2)(j_1-M+1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}\right]^{1/2}$

Таблица 5.13

Коэффициенты Клебша — Гордана $(JM|j_1 j_2 m_1 m_2)$ при $j_2 = 3/2$; $m_2 = -3/2, -1/2$

J	$m_2 = -1/2$	$m_2 = -3/2$
$j_1 + 3/2$	$\left[\dfrac{3(j_1+M+3/2)(j_1-M+1/2)(j_1-M+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{(j_1-M-1/2)(j_1-M+1/2)(j_1-M+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$
$j_1 + 1/2$	$\left(j_1+3M+\frac{3}{2}\right)\left[\dfrac{j_1-M+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{3(j_1+M+3/2)(j_1-M-1/2)(j_1-M+1/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 1/2$	$-\left(j_1-3M-\dfrac{1}{2}\right)\left[\dfrac{j_1+M+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{3(j_1+M+1/2)(j_1+M+3/2)(j_1-M-1/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 3/2$	$-\left[\dfrac{3(j_1+M-1/2)(j_1+M+1/2)(j_1-M-1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{(j_1+M-1/2)(j_1+M+1/2)(j_1+M+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}\right]^{1/2}$

(*коэффициенты Рака*, *6j-символы*) и более сложных комбинаций микросостояний (*3jn-символы*). Подробнее с теорией коэффициентов векторного сложения можно познакомиться, например, в [37] и [52]; их полные таблицы имеются в литературе по атомным термам [12].

5.4.4. Теория поля лигандов

Термы валентной оболочки атома, окруженного лигандами, расщепляются на компоненты, отвечающие неприводимым представлениям точечной группы его окружения (лигандного полиэдра). Вид расщепления зависит от относительных величин спин-орбитального взаимодействия $\hat{H}_2$ и *поля лигандов* $\hat{H}'$ в гамильтониане (5.63)*. В распространенных примерах катиона d- или f-элемента в октаэдрическом лигандном окружении неприводимыми компонентами АО металла в группе O_h (см. подразд. 5.2.4) соответственно являются

	e	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2$		
$D_g^{(2)}$	5	−1	1	−1	1	=	$T_{2g}+E_g$
$D_u^{(3)}$	7	1	−1	−1	−1	=	$A_{1u}+T_{1u}+T_{2u}$

В [89] показано, что при таком расщеплении d-подоболочки энергия трехкратно вырожденного одноэлектронного t_{2g}-уровня понижается на $\frac{2}{5}\Delta$, а e_g-уровня — повышается на $\frac{3}{5}\Delta$, где Δ — полуэмпирический параметр расщепления («сила поля»).

Многоэлектронные конфигурации $[t_{2g}^a e_g^b]$ катионов переходных металлов в октаэдрическом окружении без учета спин-орбитального взаимодействия определяются природой металла, зарядом катиона и параметром расщепления Δ (т. е. природой лигандов). Так, например, ион Fe^{2+} $[d^6]$, окруженный шестью молекулами воды (лиганды слабого поля) в парамагнитном гексааквакатионе $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$, имеет конфигурацию $t_{2g}^4 e_g^2$ с четырьмя неспаренными электронами, а в диамагнитном гексацианоферрат-анионе $[Fe(CN)_6]^{4-}$ (лиганды сильного поля) — конфигурацию $t_{2g}^6 e_g^0$

*В *теории кристаллического поля*, описывающей спектры катионов металлов M^{q+} в кристалле, ближайшие атомы в окружении М представляют точечными зарядами. Однако эта теория на качественном уровне применима и к комплексным соединениям MX_n с ковалентными связями М – Х, поскольку тип расщепления электронных уровней атома М определяется симметрией лигандного окружения, а не точной формой создаваемого им потенциала.

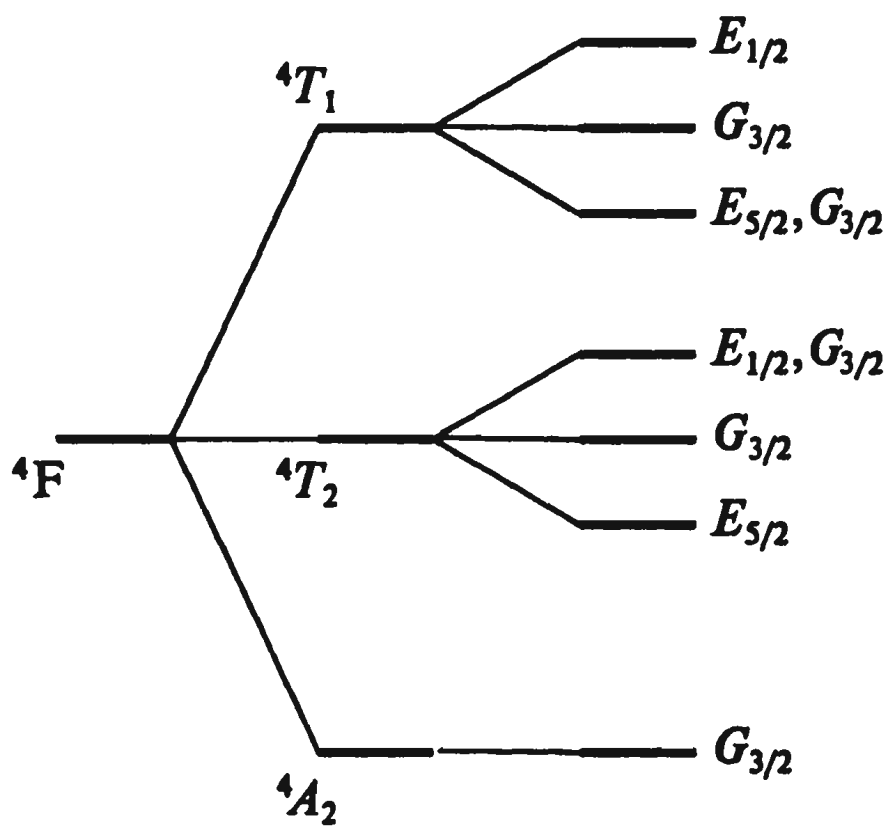


Рис. 5.34. Расщепление ^{4}F-терма в октаэдрическом поле лигандов [99]

со спаренными спинами электронов (см. рис. 5.9). Расщепление многоэлектронного терма в таком поле устанавливается по обычным правилам: например, основной d-электронный терм ^{4}F катиона $[Cr(H_2O)_6]^{3+}$ расщепляется на $^4A_{2u}$, $^4T_{1u}$ и $^4T_{2u}$-компоненты.

При учете спин-орбитального взаимодействия следует приводить представления всех компонент терма $^{2S+1}\Psi_J$ в группе $G(\hat{H}')$ поля лигандов; для полуцелых J рассматривают двузначные представления (рис. 5.34; упражнение 5.8). Заметим, что низкосимметричное поле лигандов не снимает $(2S+1)$-кратного вырождения атомных уровней по спину. Полуколичественные данные о расщеплении уровней катионов металлов в лигандном поле содержатся в спектроскопических *диаграммах Танабе.— Сугано* (см. например, [48]). Энергетические уровни многоэлектронного атома в кристаллическом поле при разных относительных величинах возмущений $\hat{H}_2$ и $\hat{H}'$ рассмотрены в [99, гл. 9].

Упражнение 5.8. **Определить электронные состояния гексааква-иона $[Cr(H_2O)_6]^{3+}$, возникающие из компонент терма ^{4}F в поле лигандов O_h-симметрии, и разрешенные переходы между ними с учетом спин-орбитального взаимодействия.**

5.4.5. Квантовые состояния атомных ядер

Еще одним примером высокосимметричной квантовой системы может служить атомное ядро: совокупность *нуклонов* (положительно заряженных протонов p и электрически нейтральных

нейтронов n) со спинами $1/2$, связанных силами межнуклонного притяжения и взаимного электростатического отталкивания протонов. Особенностями *сильных* внутриядерных взаимодействий нуклонов являются их насыщаемость и экспоненциальное убывание на расстояниях $\geqslant 10$ фм. Хотя общая аналитическая форма ядерных потенциалов неизвестна, спектры дискретных состояний ядер удается описать на полуколичественном уровне с использованием сферической симметрии — в частности, коэффициентов Клебша — Гордана [52, т. 3, гл. 14].

В рамках одночастичной *оболочечной модели* нуклонов, движущихся в усредненном сферически-симметричном поле $\langle U_{\text{яд}} \rangle$, гамильтониан атомного ядра имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum \Delta_i + \langle U_{\text{яд}} \rangle + \sum U_{ik} + \sum a_i (\hat{l}_i \hat{s}_i), \qquad (5.75)$$

где ($m \simeq m_p, m_n$ — масса нуклона); нецентральные нуклон-нуклонные потенциалы $\hat{H}_1 = \sum\limits_{i,j} U_{ik}$ и спин-орбитальные взаимодействия $\hat{H}_2 = \sum a_i (\hat{l}_i \hat{s}_i)$ учитываются как поправки.

Поскольку скорости движения нуклонов в ядре ($\sim \frac{1}{4} c$) не малы по сравнению со скоростью света, спин ядра J равен векторной сумме полных моментов нуклонов $j_i = l_i \pm \frac{1}{2}$ (jj-схема, см. подразд. 5.4.2), а потенциал $\sum U_{ik}$, имеющий сложную форму, также зависит от j_i, j_k.

Нулевое приближение для усредненного ядерного потенциала $\langle U_{\text{яд}} \rangle$ получают, разлагая его в ряд Тейлора по малым отклонениям $\{r_i\}$ позиций нуклонов от центра масс ядра и оставляя лишь первые ненулевые квадратичные члены. В пренебрежении H_1 и H_2 модельный гамильтониан H_0 принимает вид суммы n независимых трехмерных гармонических осцилляторов:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{n} \hat{h}_0^{(i)} = \sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 \right), \qquad (5.76)$$

где $\omega/(2\pi)$ — классическая частота «радиальных» колебаний частицы массы m в поле центрально-симметричного квадратичного потенциала; n — число частиц.

В единицах $E/\hbar\omega$ и r/b, где $b = \sqrt{\hbar/m\omega^2}$, одночастичный гамильтониан $\hat{h}_0$ имеет «безразмерный» вид

$$\hat{h}_0 = \frac{1}{2}(-\Delta + r^2). \qquad (5.77)$$

Как и в случае водородоподобного атома, симметрия $\hat{h}_0$ выше, чем у трехмерной сферы. Именно, для (5.77) можно построить эрмитово-сопряженные *повышающие* $\hat{a}_q^+$ и *понижающие* $\hat{a}_q$ операторы

$$\hat{a}_q^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - \partial/\partial q),$$

$$\hat{a}_q = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + \partial/\partial q),$$

где $q = x, y, z$ с перестановочными свойствами

$$[\hat{a}_q, \hat{a}_{q'}] = [\hat{a}_q^+, \hat{a}_{q'}^+] = 0,$$

$$[\hat{a}_q, \hat{a}_{q'}^+] = \delta_{qq'}, \quad [\hat{a}_q, \hat{h}_0] = \hat{a}_q, \quad [\hat{a}_q^+, \hat{h}_0] = -\hat{a}_q^+. \tag{5.78}$$

В соответствии с названием, действие оператора $\hat{a}_q$ на собственную функцию ψ_i «безразмерного» одночастичного гамильтониана (5.77), отвечающую собственному значению энергии E_i, дает функцию ψ_{i-1} с энергией $E_i - 1$, а оператор $\hat{a}_q^+$ превращает ψ_i в ψ_{i+1} с энергией $E_i + 1$. Непосредственно проверяется, что (5.77) можно выразить через произведения этих операторов:

$$\hat{h}_0 = \sum_q \left(\hat{a}_q^+ \hat{a}_q + \frac{1}{2} \right). \tag{5.79}$$

Девять операторов $\{\hat{a}_q^+ \hat{a}_{q'}\}$, коммутирующих с $\hat{h}_0$, преобразуются в набор инфинитезимальных операторов 9-параметрической группы U(3) унитарных матриц 3×3 ([99, гл. 19]. В этот набор входят три «безразмерных» оператора углового момента, порожденных подгруппой $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R}) \subset \mathrm{U}(3)$:

$$\hat{L}_x = i(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y) = -i(\hat{a}_y^+ \hat{a}_z - \hat{a}_z^+ \hat{a}_y),$$

$$\hat{L}_y = i(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z) = -i(\hat{a}_z^+ \hat{a}_x - \hat{a}_x^+ \hat{a}_z),$$

$$\hat{L}_z = i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x) = -i(\hat{a}_x^+ \hat{a}_y - \hat{a}_y^+ \hat{a}_x). \tag{5.80}$$

Волновые функции возбужденных состояний трехмерного гармонического осциллятора с квантовым числом N получают N-кратным действием повышающих операторов $\hat{a}_q^+$ на функцию основного состояния ψ_0:

$$\psi_N = (\hat{a}_x^+)^{N_1} (\hat{a}_y^+)^{N_2} (\hat{a}_z^+)^{N_3} \psi_0,$$

где $N = N_1 + N_2 + N_3$. Состояния ψ_N вырождены $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$-кратно в соответствии с числом разбиений N на целые слагаемые (N_1, N_2, N_3). Им отвечают собственные значения $N + \frac{3}{2}$ гамильтониана (5.77) или, в обычной записи, энергии

$$E_N = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right).$$

Таким образом, квантовые состояния ядра с модельным гамильтонианом нулевого приближения (5.77) соответствуют состояниям сферически симметричного трехмерного гармонического осциллятора, описываемого группой $G(\hat{H}_0) \simeq \mathrm{U}(3)$. В отличие от атомных уровней (см. рис. 5.31), нуклонные подоболочки ядра с каждым орбитальным квантовым числом l нумеруются (1, 2, 3,...) в порядке возрастания энергии. Состояние с $N = 0$ $(1s)$ невырождено, с $N = 1$ $(1p)$ трижды вырождено, с $N = 2$ $(2s, 1d)$ вырождено шестикратно, с $N = 3$ $(2p, 1f)$ — десятикратно и т. д. (рис. 5.35).

Ядерные конфигурации оболочечной модели получают, раздельно заполняя уровни на рис. 5.35 протонами и нейтронами — например, $(1s^1)_p(1s^1)_n$ для дейтерия ^{2}H, $(1s^1)_p(1s^2)_n$ для трития ^{3}H, $(1s^2)_p(1s^2)_n$ для ^{4}He и т. д., в согласии с их экспериментально наблюдаемыми ядерными спинами $J = \sum j_i$ (соответственно, 1, 1/2 и 0). Спин ядра вместе с его четностью, равной произ-

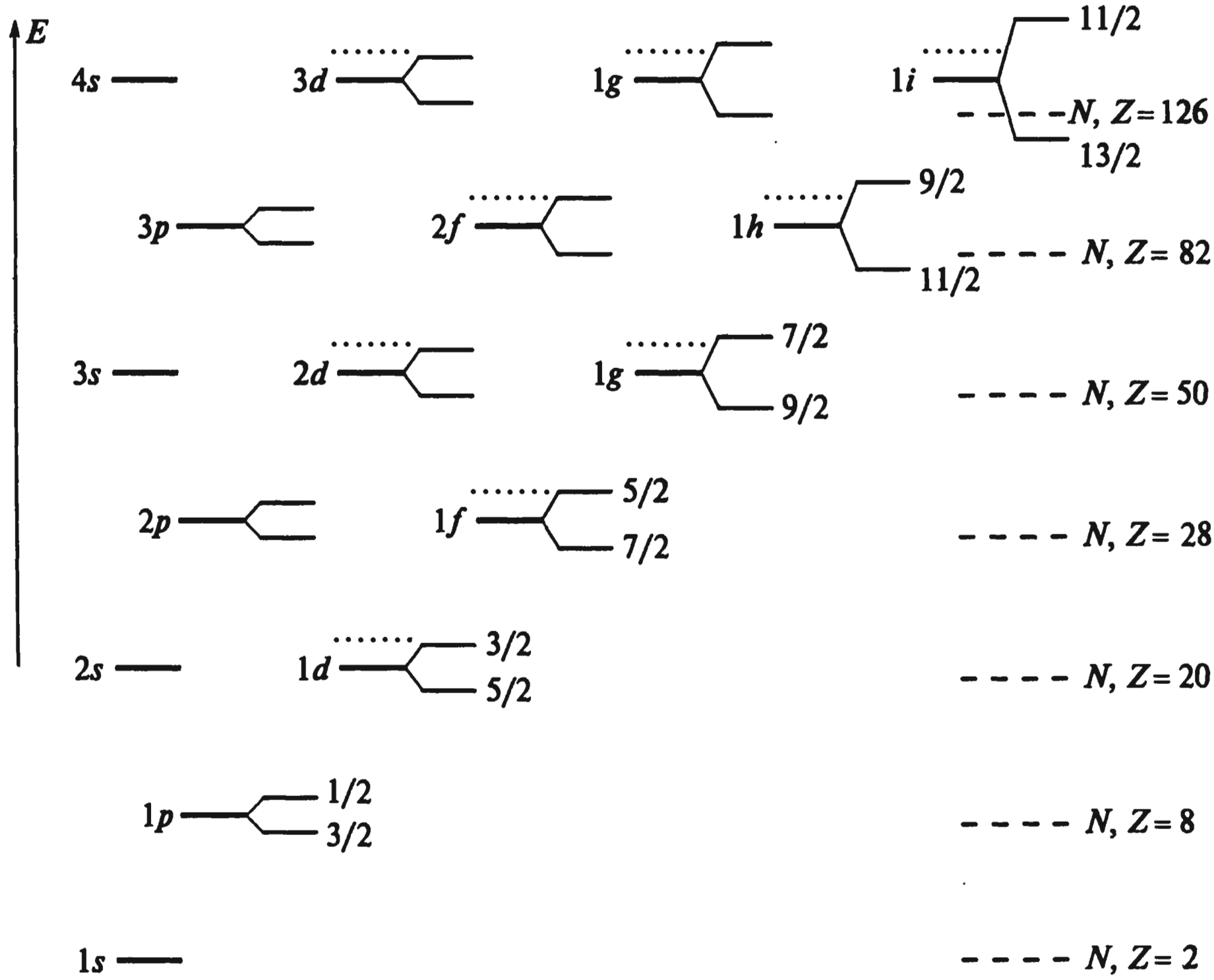


Рис. 5.35. Оболочечные уровни энергии атомного ядра (пунктир – модель трехмерного гармонического осциллятора, штриховые линии – «магические» ядра)

ведению $\prod_i (-1)^{l_i}$ орбитальных четностей нуклонов*, составляют *характеристику* ядра $J^{(\pm)}$, где верхний индекс показывает четность (1^+ для ^{2}H, $\frac{1^+}{2}$ для ^{3}H, 0^+ для ^{4}He, $\frac{1^-}{2}$ для гипотетического ядра ^{5}Li с протоном на $1p_{1/2}$-подоболочке, и т. д.).

С учетом отклонения потенциала $\langle U_{\text{яд}} \rangle$ от квадратичной формы, а также возмущающих вкладов $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ в (5.75), в схему уровней на рис. 5.35 необходимо ввести расщепление осцилляторных оболочек с одинаковым N и разными l ($E_{Nl_2} < E_{Nl_1}$ при $l_2 > l_1$) и спин-орбитальное расщепление подоболочек по полному моменту $j = l \pm 1/2$ ($E_{l+\frac{1}{2}} < E_{l-\frac{1}{2}}$). Из-за тензорного вклада $\hat{H}_1 = \sum U_{ik}$ в гамильтониане (5.75) на подоболочках с четным числом нуклонов все спины спарены, поэтому ненулевой спин имеют только четно-нечетные и нечетно-нечетные ядра (называемые так по числам протонов и нейтронов в ядре).

Оболочечная модель ядра позволяет объяснить *магические числа* нуклонов в устойчивых ядрах с заполненными j-подоболочками (Z, N = 2, 8, 20, 50, 82, 126 — аналоги замкнутых электронных конфигураций в атомах инертных газов, см. подразд. 5.4.1). Наиболее стабильны «дважды магические» (по протонам и нейтронам) ядра $^4_2$He, $^{16}_8$O, $^{40}_{20}$Ca, $^{208}_{82}$Pb (атомный номер Z в левом подстрочном индексе, суммарное число протонов и нейтронов $B = Z + N$ («барионный заряд» ядра) в левом верхнем индексе). Для ряда четно-нечетных ядер с одним неспаренным (так называемым «валентным») нуклоном на уровне либо одной «дыркой» на недозаполненной подоболочке модель правильно предсказывает характеристики ядер, в частности,

$$^{13}_6\text{C}: \quad (1s^2_{1/2}2p^4_{3/2})_p(1s^2_{1/2}2p^4_{3/2}2p^1_{1/2})_n \qquad (1/2)^-$$

$$^{17}_5\text{O}: \ (1s^2_{1/2}2p^4_{3/2}p^2_{1/2})_p(1s^2_{1/2}2p^4_{3/2}p^2_{1/2}d^1_{5/2})_n \quad (5/2)^+$$

Однако, например, характеристика $(5/2)^+$, предсказываемая оболочечной моделью для ядра $^{19}_9$F, расходится с экспериментальными данными ($[^{16}_8\text{O}](2s^1)_p(2s^2)_n$, $(1/2)^+$, где $[^{16}_8\text{O}]$ — полносимметричная «дважды магическая» нуклонная конфигурация кислорода-16).

Многие ядра тяжелых элементов с A>150 и частично заполненными нуклонными оболочками обладают не сферической, а аксиальной симметрией. Спины таких ядер определяются проекцией Ω суммы спина и орбитального момента, соответствен-

*Собственные («внутренние») четности нуклонов и электрона равны +1, позитрона −1; фотон не имеет определенной внутренней четности [6].

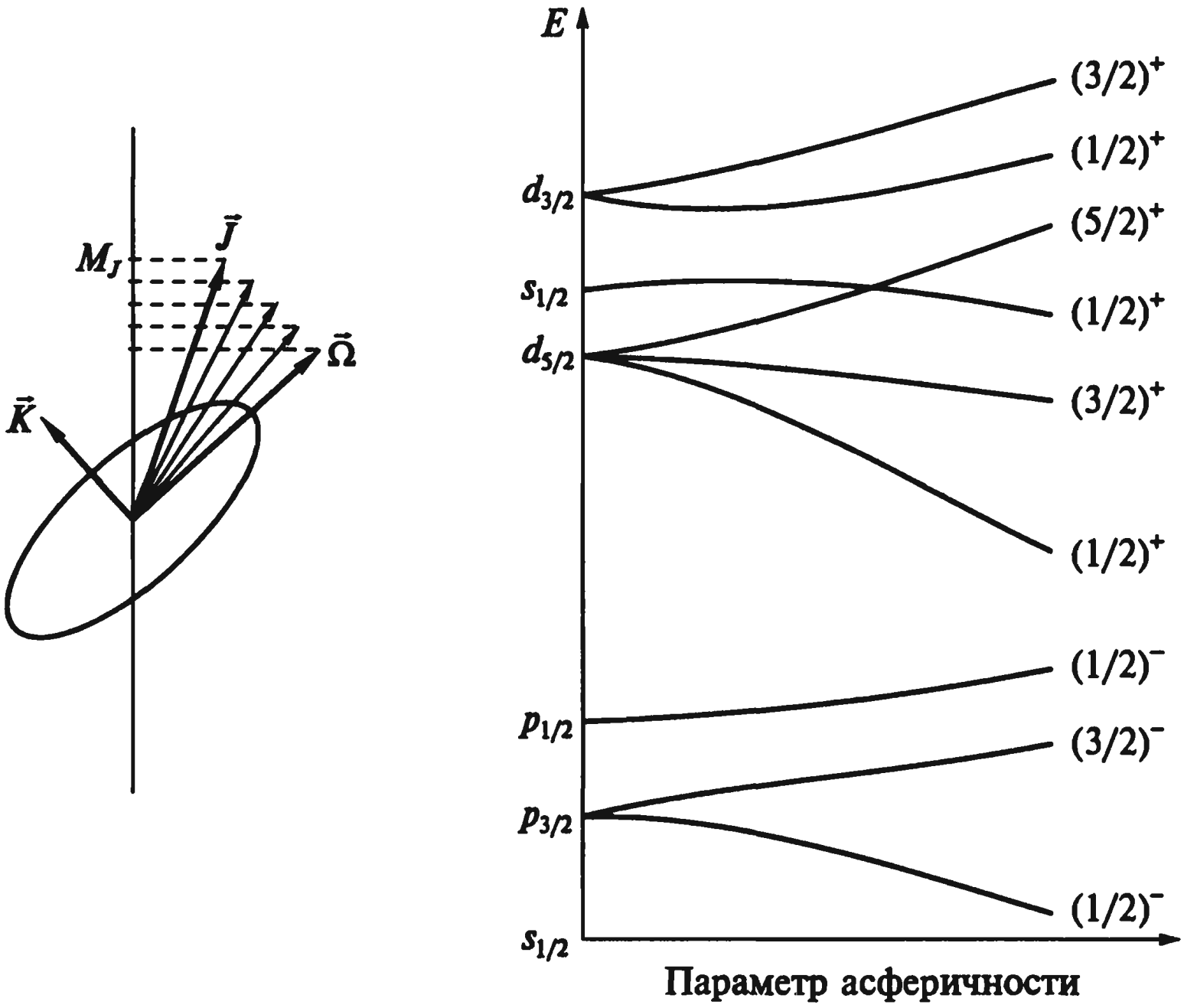


Рис. 5.36. Полный момент и расщепление уровней несферического ядра (*А. С. Давыдов.* Теория атомного ядра. М.: ГИФМЛ, 1958. С. 69)

но, одного (четно-нечетные) и двух (нечетно-нечетные) неспаренных нуклонов на ось C_∞ ядра. Характеристики несферических ядер с нулевым спином $0^{(\pm)}_{(g,u)}$, в соответствии с неприводимыми представлениями группы $D_{\infty h}$, включают симметрию относительно инверсии координат (индекс g, u) и плоскостей σ_v, проходящих через ось C_∞ (надстрочный индекс $\pm$).

Несферические ядра могут находиться в возбужденных вращательных состояниях с квантовым числом K и энергиями $\sim 0{,}1-1$ МэВ

$$E_K = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \qquad J \neq \frac{1}{2}, \tag{5.81}$$

где $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} + \vec{K}$ — полный момент ядра с учетом вращательного момента $\vec{K}$, перпендикулярного оси C_∞, а I — момент инерции ядра (рис. 5.36)*. Поскольку проекция $\vec{J}$ на произвольную ось равна сумме проекций $\vec{\Omega}$ и $\vec{K}$, квантовое число полного момента не может быть меньше Ω:

$$J = \Omega,\ \Omega+1,\ \Omega+2, \ldots .$$

* «Вращение» аксиально симметричной квантовой системы вокруг главной оси, как и сферически симметричного ядра вокруг любой его оси, не имеет физического смысла, так как волновая функция в этих случаях не зависит от угла поворота вокруг оси, и проекция момента вращения на такую ось всегда равна нулю.

Из-за того, что протоны и нейтроны являются фермионами, вращательные состояния четно-четных ядер с $\Omega = 0$ дополнительно ограничены свойствами перестановочной симметрии переменных в их спин-орбитальных волновых функциях, т. е. принципом Паули (см. подразд. 5.1.4):

$$\begin{aligned} &J = 2, 4, 6, \ldots \text{для ядер с } 0_g^+ \text{ и } 0_u^-, \\ &J = 1, 3, 5, \ldots \text{для ядер с } 0_g^- \text{ и } 0_u^+. \end{aligned} \tag{5.82}$$

Четно-четные несферические ядра имеют характерный спектр γ-излучения при переходах из (так называемых «изомерных») возбужденных состояний 2^+, 4^+, 6^+ и т. д. в основное состояние 0_g^+. Квантовые состояния ядер рассмотрены, например, в [52, т. 3, гл. 16] и [97].

5.4.6. Термы линейных молекул

tolerance=8000 Электронные термы линейных молекул в адиабатическом приближении соответствуют неприводимым представлениям групп

$$C_{\infty v}\ (\mathrm{CO},\ \mathrm{NO},\ \mathrm{HCN}) \quad \text{или} \quad D_{\infty h}\ (\mathrm{H_2},\ \mathrm{CO_2},\ \mathrm{C_2H_2})$$

и зависят от межъядерного расстояния R как от параметра. Индексу неприводимого представления в неподвижной молекуле отвечает квантовое число $\Lambda (= M_L)$ проекции орбитального момента электронов на ось C_∞. Состояния с $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$ обозначаются, соответственно, Σ, Π, Δ, $\Phi, \ldots$ по мнемонической аналогии с S, P, D и F-термами атомов. Благодаря спин-орбитальному взаимодействию термы со спином S расщепляются на $(2S+1)$ двукратно вырожденных компонент с проекциями полного момента $\Omega = \Lambda + S, \Lambda + S - 1, \ldots, \Lambda - S$, обозначаемых подстрочным индексом J (например, $^2\Pi \to \Pi_{1/2}{+}\Pi_{3/2}$). Вырождение состояний с $\pm\Lambda$ снимается за счет влияния вращения и спин-орбитальных эффектов высших порядков, а также во внешнем магнитном поле (*Λ-удвоение*).

Электронная конфигурация гомоядерной двухатомной молекулы X_2, аналогично конфигурации многоэлектронного атома, складывается из связывающих $(\sigma_g, \pi_u, \delta_g, \ldots)$ и разрыхляющих $(\sigma_u^*, \pi_g^*, \delta_u^*, \ldots)$ занятых МО (например, конфигурация $[1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_u^4 1\pi_g^{*2}]$ молекулы O_2 с двумя электронными парами на π_u-связывающем и двумя неспаренными электронами на π_g^*-разрыхляющем уровнях).

В простейшем примере молекулярного иона H_2^+ орбитали, относящиеся к неприводимым представлениям группы $D_{\infty h}$, являются собственными функциями гамильтониана

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \qquad (5.83)$$

(в «безразмерной» форме), где r_1, r_2 — расстояния от единственного электрона до ядер, расположенных на расстоянии R одно от другого. Заметим, что, как и в случае водородоподобного атома, $G(\hat{H}_0) \supset D_{\infty h}$ из-за отсутствия межэлектронного отталкивания. Поэтому для волновых функций $\psi(\xi, \eta, \phi)$ иона H_2^+ в эллиптических координатах ($\xi = (r_1 + r_2)/R$, $\eta = (r_1 - r_2)/R$, φ), где φ — угол поворота плоскости, проходящей через два протона и электрон, относительно оси C_∞, достигается полное разделение переменных $\psi = u(\xi)w(\eta)e^{im\varphi}$. По этой причине возбужденные состояния H_2^+ с одинаковыми $\Lambda = m$, но разными $u_i(\xi)w_j(\eta)$ при варьировании R могут пересекаться. (В многоэлектронных молекулах, где симметрия поля, действующего на электрон, совпадает с точечной группой, пересечения одинаковых термов запрещены, см. подразд. 5.2.4.)

Другой особенностью иона H_2^+ является отсутствие Σ^--состояний, антисимметричных относительно «вертикальной» плоскости симметрии ввиду непрерывности волновых функций. Однако уже у молекулы H_2 имеются возбужденные Σ^--состояния, построенные из антисимметризованных комбинаций двухэлектронных функций вида $\psi^{(1,2)}e^{\pm m\varphi_{1,2}}$ с $\Lambda = m - m = 0$ [80].

Термы двухатомных многоэлектронных молекул, как и атомные термы, можно находить по графической схеме, указанной в подразд. 5.4.2. Так, состояния парамагнитной молекулы O_2, учитывая принцип Паули, получают сложением всех несовпадающих векторов в двух «звездах» из π_g-микросостояний ($m_\lambda = \pm 1$, $m_s \pm 1/2$) (рис. 5.37): $\Gamma(\pi_g^2) = {}^1\Sigma_g^+ + {}^3\Sigma_g^- + {}^1\Delta_g$ (полносимметричные заполненные МО не изменяют представления $\Gamma(\pi_g^2)$)*. Низшей энергией, в соответствии с правилами Хунда, обладает спин-триплетное состояние ${}^3\Sigma_g^-$.

Правила отбора для электронных переходов под действием электромагнитного излучения в линейных молекулах с осью $C_\infty^{(z)}$, вытекающие из общих соотношений (5.21) и (5.22), разные для μ_z- и $\mu_{x,y}$-компонент дипольного момента. Поскольку в группе $C_{\infty v}$ проекция μ_z преобразуется по полносимметричному

*Симметрия полученных термов относительно инверсии следует из перемножения двух π_g-функций, а симметрия Σ_g-состояний относительно вертикальной плоскости — из антисимметрии полной двухэлектронной волновой функции $\Psi(1,2) = \psi(1,2)\chi(1,2)$ относительно перестановок электронов: спиновая компонента полносимметрична в триплетном состоянии $\chi(\alpha\alpha)$ и антисимметрична в синглетном состоянии $\chi(\alpha\beta)$. Соответственно, Σ^+-термы имеют четность $(-1)^S$, а Σ^--термы — четность $(-1)^{S+1}$.

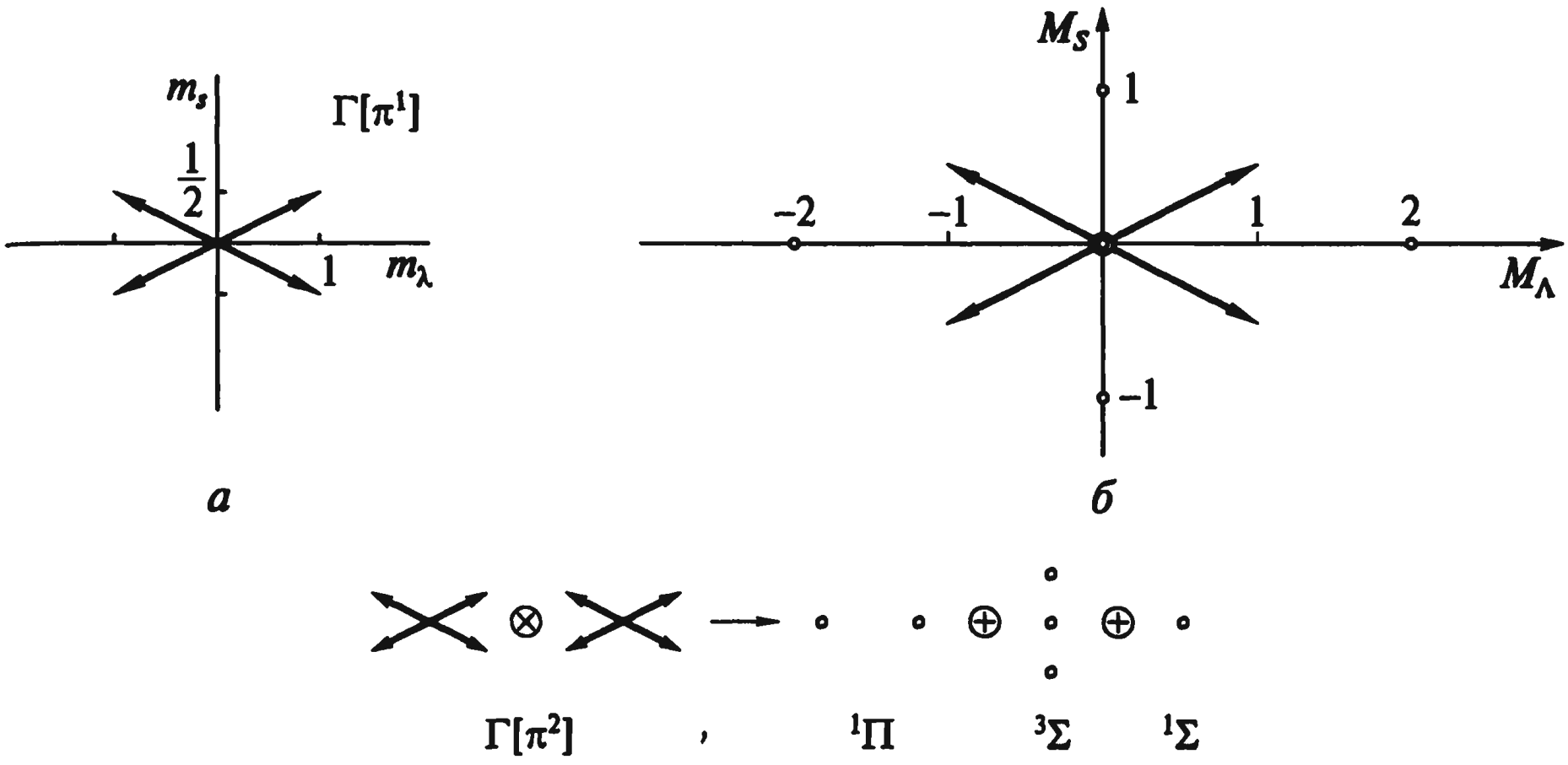


Рис. 5.37. Графическое определение термов $[\pi^2]$-конфигурации молекулы O_2:

а — микросостояние $[\pi^1]$; *б* — результат сложения векторов

Σ^+-представлению, а $\mu_{x,y}$ — по П-представлению (см. табл. 4.1), непосредственно выводятся следующие соотношения:

$$\begin{gathered}\text{при } z\text{-поляризации света} \quad \Delta\Lambda = 0;\\ \text{при } x,\ y\text{-поляризации} \quad \Delta\Lambda = \pm 1; \quad \Delta S = 0.\end{gathered} \tag{5.84}$$

В группе $D_{\infty h}$ $\Gamma(\mu_z) = \Sigma_u^+$, $\Gamma(\mu_{x,y}) = \Pi_u$ и в дополнение к (5.84), разрешены только переходы $g \to u$, $u \to g$, а переходы $\Sigma_g^+ \to \Sigma_u^-$, $\Sigma_g^- \to \Sigma_u^+$ запрещены. Термы линейных молекул рассмотрены в [52, т. 3, гл. 11] и [80].

5.4.7. Вращательные состояния молекул и структурная нежесткость

Колебания и вращения большинства молекул в низших электронных и колебательных состояний при $T \sim 300$ K можно приближенно считать независимыми, а сами молекулы — жесткими. Напомним, что линейная N-атомная молекула имеет $3N-5$ независимых колебаний (в том числе $N-2$ вырожденных пар деформационных колебаний, нарушающих линейность), так как вращения вокруг оси C_∞ невозможны (см. сноску на с. 369).

Вращательным состояниям двухатомных молекул с синглетными $^1\Sigma$-термами в модели жесткого ротатора отвечают сферические гармоники Y_{KM}, где $K = 0,\ 1,\ 2, \ldots$ — вращательное квантовое число, $M = -K, \ldots, K$. Таким образом, эти состояния

$(2K+1)$-кратно вырождены в соответствии с (5.81), в котором $I = m_{\text{пр}}R^2$, $m_{\text{пр}} = m_1 m_2/(m_1+m_2)^{0,5}$ — приведенная масса атомных ядер в молекуле, R — межатомное расстояние (и квантовое число J следует заменить на K). В случае несинглетных термов ($^3\Sigma$, $^1\Pi$, $^3\Pi$ и т. д.), аналогично вращательным состояниям ядер, $K = \Omega,\ \Omega+1,\ \Omega+2, \ldots$, где Ω — проекция суммы спинового и орбитального момента электронов на ось молекулы.

В гомоядерных молекулах X_2 сойства симметрии полной волновой функции ядер $Y_{KM}\chi(1,2)$ (где $\chi(1,2)$ — спиновая часть), разные для фермионов и бозонов, накладывают дополнительные ограничения на координатную часть Y_{KM}. Именно, полносимметричная спиновая функция $\chi(\alpha,\alpha)$ (спины ядер параллельны) требует полносимметричности Y_{KM} для ядер с целым спином и антисимметричности для ядер с полуцелым спином; в случае антисимметричной спиновой функции $\chi(\alpha,\beta)$ правила противоположны (подразд. 5.1.4). Таким образом, молекулы водорода H_2 с суммарным спином двух протонов $S_{\text{яд}} = 1$ ($^3\chi(\alpha,\alpha)$: *орто-водород*) могут иметь только нечетные вращательные состояния: $K = 1,\ 3,\ 5, \ldots$, а молекулы H_2 с $S_{\text{яд}} = 0$ ($^1\chi(\alpha,\beta)$: *пара*-водород) — только четные состояния: $K = 0,\ 2,\ 4,\ 6, \ldots$, тогда как молекулы дейтерия D_2 со спиновыми состояниями $^5\chi$, $^3\chi$ и $^1\chi$ подчиняются обратному правилу*. Подобно четности орбитально-невырожденных состояний электронов, знак функций $Y_{KM}\chi(1,2)$ для молекул X_2 с Σ^+-термами задает множитель $(-1)^K$, а для молекул с Σ^--термами — множитель $(-1)^{K+1}$.

Правилом отбора для дипольных вращательных переходов в микроволновых спектрах линейных молекул $C_{\infty v}$-симметрии является $\Delta K = \pm 1$ (ввиду вырождения уровней, $\Delta K = 0$ отвечает отсутствию перехода), тогда как в центросимметричных молекулах ($D_{\infty h}$, $\mu = 0$) такие переходы в дипольном приближении запрещены. Вращательные состояния центросимметричных линейных молекул проявляются в спектрах КР (где $\Delta K = \pm 2$) и в тонкой структуре колебательно-вращательных либо электронно-колебательно-вращательных спектров, а также в термодинамических характеристиках соответствующих веществ.

Вращательные состояния многоатомных молекул в общем случае определяются гамильтонианом

---

*Так как спиновые состояния ядер лишь слабо взаимодействуют с электронными оболочками молекулы, теплоемкость молекулярного водорода H_2 в обычных условиях ($p \sim 1$ бар, $T \sim 300$ K) соответствует смеси двух газов с различными наборами вращательных состояний в соотношении $\sim 3:1$ (соотношение спиновых мультиплетностей *о-* и *п*-H_2). Запрещенные переходы с «переворотами» ядерных спинов в этих условиях незначительны, однако адсорбция H_2 на металлической поверхности приводит к выравниванию содержания *орто-* и *пара*-молекул.

$$\hat{H} = \frac{\hat{J}_x^2}{2I_{xx}} + \frac{\hat{J}_y^2}{2I_{yy}} + \frac{\hat{J}_z^2}{2I_{zz}} = A\hat{J}_x^2 + B\hat{J}_y^2 + C\hat{J}_z^2, \qquad (5.85)$$

где $\hat{J}_x = i\hbar(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y), \ldots, \{I_{ii}\}$ — главные компоненты тензора инерции; $A, B, C = \hbar(4\pi I_{ii})^{-1}$ — вращательные постоянные.

По соглашению, $I_{xx} \leqslant I_{yy} \leqslant I_{zz}$, т. е. $A \geqslant B \geqslant C$. По относительным величинам $\{I_{ii}\}$, определяющим симметрию тензора 2-го ранга (см. подразд. 5.3.1), все молекулы можно разделить на три типа волчков (табл. 5.14).

Симметричные волчки подразделяют на вытянутые с $I_{xx} = I_{yy} > I_{zz}$, т. е. $A = B < C$ (например, CH_3CN), и сплющенные ($I_{xx} = I_{yy} < I_{zz}$, т. е. $A = B > C$ (например, $CHCl_3$). Нетрудно видеть, что асимметричными волчками являются молекулы низших точечных групп, симметричными — молекулы с одной осью C_n (S_n) порядка $n \geqslant 3$, а сферическими — молекулы тетраэдрической, кубической и икосаэдрической симметрий.

Квантовые состояния сферического волчка $(2J+1)$-кратно вырождены:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = AJ(J+1) \qquad (5.86)$$

при $J = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Как и для гомоядерных двухатомных молекул, переходы между ними не проявляются в микроволновых спектрах, но наблюдаются в КР и в тонкой структуре ИК- и УФ-спектров поглощения, а также определяют теплоемкости веществ. Подчеркнем, что в отличие от сферических ядер возбужденные вращательные состояния «сферических» волчков возможны, так как в данном случае симметрией K_h обладают не сами молекулы, а лишь указательные поверхности их тензоров инерции.

Состояния симметричного волчка можно разложить на (разрешенное) вращение вокруг главной оси C_n ($n < \infty$) и вращение вокруг произвольной перпендикулярной оси (см. рис. 5.35, где проекцию момента Ω следует заменить квантовым числом K состояний вращения вокруг C_n, а квантовое число K вращений

Таблица 5.14

Типы волчков

I_{ii}	A, B, C	Волчок	Группа	Пример
$I_{xx} = I_{yy} = I_{zz}$	$A = B = C$	Сферический	K_h	CH_4
$I_{xx} = I_{yy} \neq I_{zz}$	$A = B \neq C$	Симметричный	$D_{\infty h}$	CH_3Cl
$I_{xx} \neq I_{yy} \neq I_{zz}$	$A \neq B \neq C$	Асимметричный	D_2	CH_2Cl_2

ядра — числом R вращений молекулы вокруг перпендикулярной оси). В результате понижения молекулярной симметрии каждый уровень с $J = 0, 1, 2, \ldots$ расщепляется на $(J+1)$ подуровней с $K = J, J-1, \ldots, 0$, дважды вырожденных при $K \neq 0$ (K-удвоение):

$$E_{JK} = AJ(J+1) + (C-A)K^2. \tag{5.87}$$

Заметим, что для вытянутого волчка $C - A > 0$, а для сплющенного $C - A < 0$.

Для асимметричных волчков наблюдается полное расщепление уровней с квантовым числом J на $(2J+1)$ невырожденных компонент. Состояния такого волчка преобразуются по неприводимым представлениям A_0, B_1, B_2, B_3 точечной группы D_2 его тензора инерции. Однако во многих случаях их удобнее описывать в рамках приближенной аксиальной симметрии, представляя волновые функции линейными комбинациями состояний вытянутого (ψ_{JK}) и сплющенного $(\psi_{J\bar{K}})$ волчков:

$$\Psi_{JK}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{JK} + (-1)^{\alpha}\psi_{J\bar{K}}], \tag{5.88}$$

где $\bar{K} = -K$; α — индекс (номер) представления группы D_2, выбираемый так, чтобы $\alpha = 0$ для полносимметричного A-представления.

Степень отклонения молекулы от обоих типов симметричного волчка характеризуется параметром асимметрии

$$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}, \tag{5.89}$$

т. е. $\kappa = 1$ для вытянутого и $\kappa = -1$ для сплющенного симметричных волчков; $\kappa = 0$ отвечает максимальной асимметрии $2B = A + C$ (рис. 5.38).

Правила отбора для вращательных переходов молекул с ненулевым дипольным моментом можно вывести из правил для жесткого ротатора с дополнительными условиями, накладываемыми точечной группой молекулярного тензора инерции.

В частности, для симметричных волчков из $\Gamma(\mu_z) = \Sigma_u^+$ и $\mu_{x,y} = 0$ следует

$$\begin{gathered} \Delta J = 0, \pm 1, \\ \Delta K = 0, \\ g \to g,\ u \to u \text{ при } \Delta J = \pm 1, \\ g \to u,\ u \to g \text{ при } \Delta J = 0. \end{gathered} \tag{5.90}$$

Переходы между невырожденными уровнями асимметричного волчка задаются неприводимыми представлениями группы

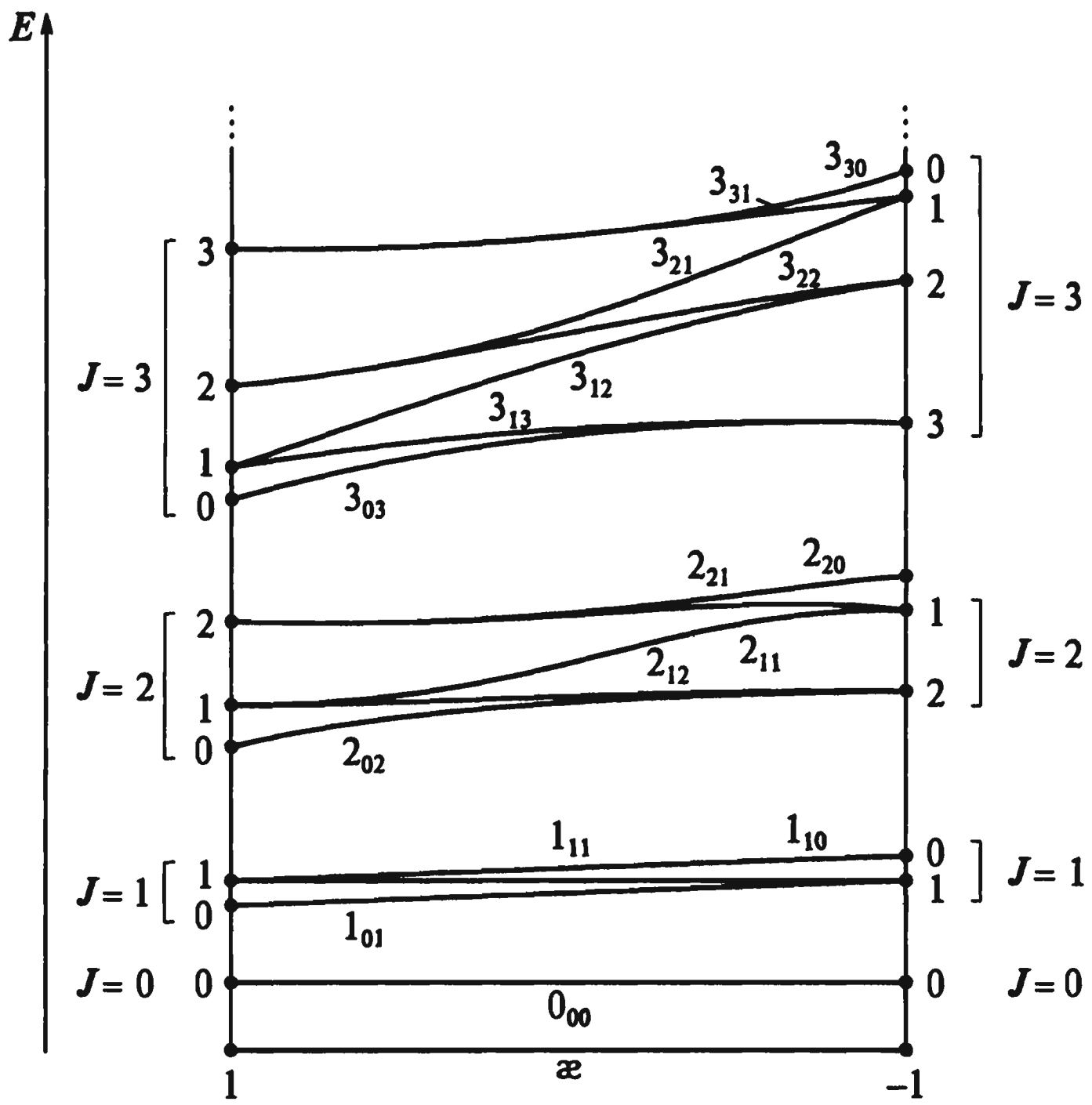


Рис. 5.38. Вращательные уровни асимметричного волчка. Уровни симметричных волчков соответствуют параметру асимметрии æ = 1 (вытянутого) и æ = −1 (сплющенного)

D_2. Вращательные спектры молекул и правила отбора в них рассмотрены в [4, 31].

У п р а ж н е н и е 5.9. Найти систему вращательных уровней асимметричного волчка с A = 10 см$^{-1}$, B = 6 см$^{-1}$, C = 2 см$^{-1}$ и указать их корреляцию с уровнями вытянутого (A = 10 см$^{-1}$, B = C = 2 см$^{-1}$) и сплющенного волчка (A = B = 10 см$^{-1}$, C = 2 см$^{-1}$). Определить разрешенные переходы.

В многоатомных молекулах возможно *конфигурационное вырождение*: наличие нескольких геометрически эквивалентных конфигураций ядер с одинаковой энергией, не связанных операциями точечной группы. Если эквивалентные конфигурации разделены высоким энергетическим барьером (как, например, в молекуле CH_3F, где для перестановки атомов H и F при неподвижном CH_2-фрагменте нужно перейти через энергетически невыгодную плоскую структуру либо разорвать связи), конфигурационное вырождение не проявляется в физических свойствах молекулы.

В стереохимически нежестких молекулах с низкими энергетическими барьерами ($\leqslant 5-10$ кДж/моль) состояния сосед-

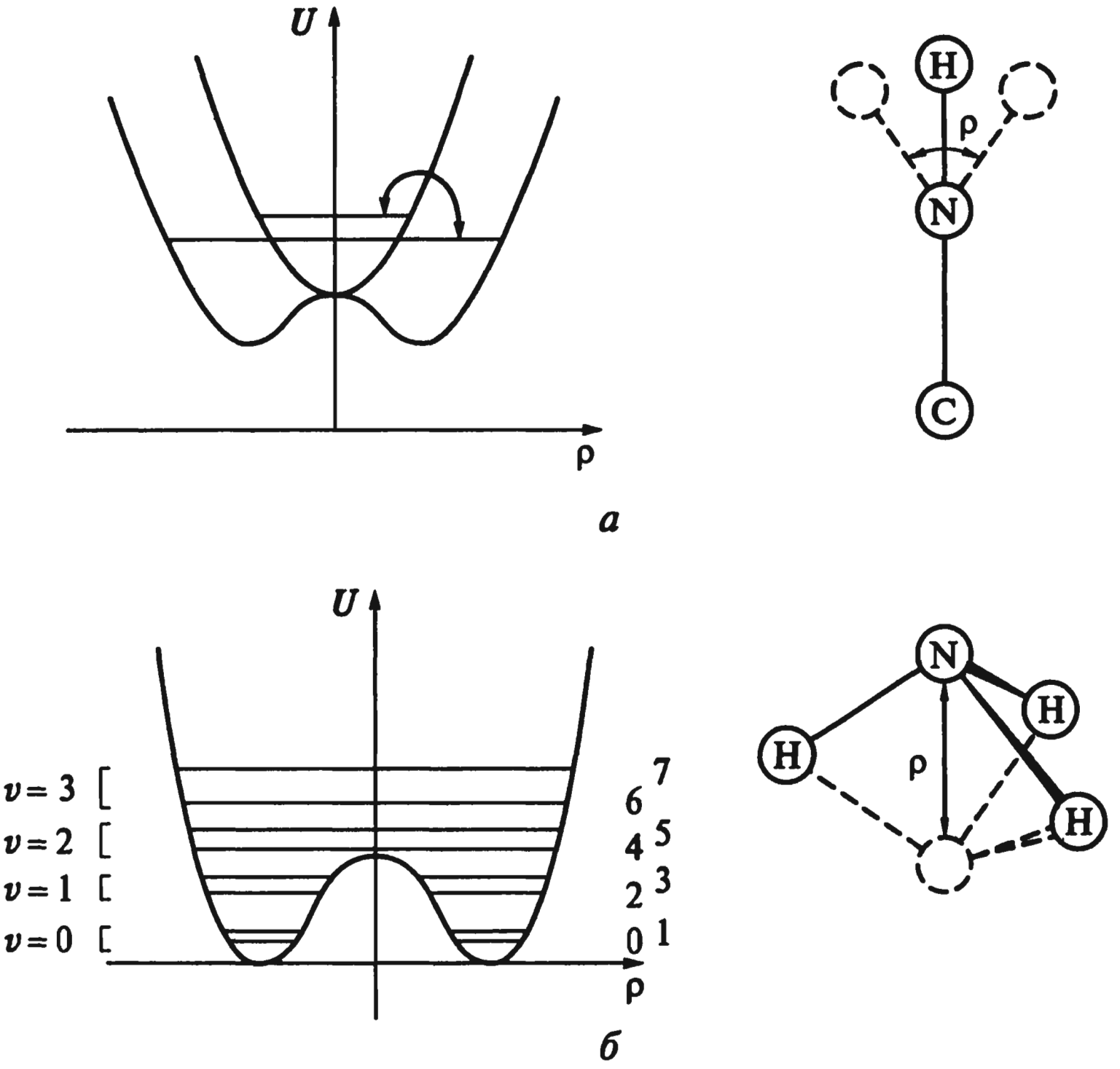


Рис. 5.39. Расщепление электронных уровней и эффект Реннера в молекуле HCN (*а*), туннельное расщепление колебательных уровней в молекуле NH_3 (*б*)

них конфигураций (условно обозначенных здесь (1) и (2)) могут взаимодействовать из-за туннельного эффекта, что приводит к расщеплению соответствующих им уровней на компоненты $\psi^{(1)} \pm \psi^{(2)}$. Смешивание конфигураций эквивалентно повышению размерности пространства независимых координат для комбинации из N атомов от шести (жесткая нелинейная молекула) вплоть до $3N$ (полностью диссоциированная молекула). «Мягкую моду», переводящую одну конфигурацию в другую, называют *конторсионной* координатой.

Структурная нежесткость молекул приводит к взаимодействию их электронных, колебательных и вращательных состояний с перераспределением энергий уровней и вероятностей переходов (вибронные (колебательно-вращательные) и *ровибронные*, т. е. электронно-колебательно-вращательные спектры). В частности, возбужденные термы линейных молекул могут расщепляться под действием деформационных колебаний, порождая интенсивные линии переходов между вибронными состояниями с близкой энергией (*эффект Реннера*, рис. 5.39, *а*). Туннельное расщепление колебательных состояний в конфи-

гурациях, связанных «мягкой модой», наблюдается, например, при инверсионных переходах в молекуле аммиака NH_3 (рис. 5.39, *б*), внутреннем вращении CH_3-фрагментов в диметилацетилене $H_3C{-}C{\equiv}C{-}CH_3$ и т. д.

Полосы конторсионных переходов в нежестких молекулах лежат в той же области спектра, что и вращательные переходы, и анализируются вместе с ними. В гамильтониане таких молекул конторсионная координата (в простейшем случае одна) и углы Эйлера отделяются от $(3N-7)$ «жестких» молекулярных колебаний. Симметрия такого вращательно-конторсионного гамильтониана $G \subset \mathrm{SO}(4,\mathbb{R})$; при слабой зависимости дипольного момента от «мягкой» координаты (диметилацетилен) $G \sim \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})\times$ $\times\,\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$.

Состояния и правила отбора для нежестких молекул рассмотрены в монографии [4].

5.4.8. Ядерные спиновые состояния молекул

Как и в случае двухатомных молекул, спины ядер в многоатомной молекуле модифицируют правила отбора для ее вращательных и конторсионных переходов. Волновая функция системы N одинаковых ядер

$$\Psi(R_1,\ldots R_N,\sigma_1,\ldots,\sigma_N)=\Phi(R_1,\ldots,R_N)\phi(\sigma_1,\ldots,\sigma_N),$$

(где $\{R_i\}$ — пространственные; $\{\sigma_i\}$ — спиновые ядерные координаты; $i=1,\ldots,N$) полносимметрична либо антисимметрична относительно перестановок ядер в зависимости от их спина s. Спиновые функции ${}^{2S+1}\phi$, где $S=\sum s_i$, определяют числа возможных вращательных состояний (их *ядерные статистические веса*) и переходы между ними с правилом $\Delta S=0$.

При наличии в молекуле p типов разных ядер их спиновые (но не координатные!) функции можно представить в виде $\phi=$ $=\prod_{i=1}^{p}\phi_i(\sigma_1,\ldots,\sigma_{N_i})$.

Спины одинаковых ядер в молекуле образуют $(2s_i{+}1)^{N_i}$-мерное приводимое представление молекулярной точечной группы, где N_i — число ядер, s_i — их спин [52, т. 3, гл. 13]. Ненулевой вклад в компоненты $\chi(g_k)$ характера такого представления, очевидно, вносят только функции с одинаковыми проекциями спина у атомов, переставляемых операцией g_k. Например, трем ядрам ${}^1\mathrm{H}$ $(s=1/2)$ в молекуле ${}^{14}\mathrm{N}{}^1\mathrm{H}_3$ соответствуют восемь спиновых функций $\{|\alpha\alpha\alpha>,\ |\alpha\alpha\beta>,\ldots,|\beta\beta\beta>\}$, преобразуемых по произведению спинорных представлений $D^{(1/2)}\times D^{(1/2)}\times D^{(1/2)}=D^{(3/2)}+$ $+2D^{(1/2)}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, как показано на схеме:

M_S									
3/2							$\|\alpha\alpha\alpha>$		
1/2	$\|\alpha>$		$\|\alpha>$		$\|\alpha>$		$\|\alpha\alpha\beta>$	$\|\alpha\beta\alpha>$	$\|\beta\alpha\alpha>$
		$\times$		$\times$		$=$			
−1/2	$\|\beta>$		$\|\beta>$		$\|\beta>$		$\|\alpha\beta\beta>$	$\|\beta\alpha\beta>$	$\|\beta\beta\alpha>$
−3/2							$\|\beta\beta\beta>$		

(где M_S — проекция суммарного ядерного спина). В точечной группе $C_{3v} \sim \mathbf{S}_3$ молекулы NH_3, полагаемой здесь жесткой, тождественное преобразование e оставляет неизменными все восемь функций, тогда как вращения, т. е. перестановки [123] не изменяют только $|\alpha\alpha\alpha>$ и $|\beta\beta\beta>$, перемешивая остальные функции ($C_3|\alpha\alpha\beta>=|\alpha\beta\alpha>$, и т. д.), а каждая плоскость $\sigma_v \simeq [12]$ сохраняет четыре функции ϕ_i из восьми (например, σ_1, переставляющая два первых ядра H, не изменяет $|\alpha\alpha\alpha>$, $|\alpha\alpha\beta>$, $|\beta\beta\alpha>$ и $|\beta\beta\beta>$).

Итак, представление трех ядер ^1H в группе C_{3v} имеет вид

	e	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\Gamma(3\,^1\mathrm{H})$	8	2	4,

т. е. $\Gamma(3\,^1\mathrm{H}) = 4A_1 + 2E$, причем полносимметричное представление A_1 отвечает спиновому квартету, а представления E — двум спиновым дублетам (см. схему на с. 378). Характер полного спинового представления молекулы NH_3 равен $\chi(3\,^1\mathrm{H})\chi(^{14}\mathrm{N})$, где $\chi(^{14}N) = (3, 3, 3)$ (поскольку атом ^{14}N имеет спин 1 и остается на месте при всех операциях точечной симметрии). Итак:

	e	$2C_3$	$3\sigma_v$		
$\Gamma(^{14}\mathrm{N}^1\mathrm{H}_3)$	24	6	12	$=$	$12A_1 + 6E$

Из-за антисимметрии полной ядерной функции Ψ относительно перестановок фермионов ^{1}H (представление A_2) ее спиновая (ϕ) и координатная (Φ) части связаны соотношением

$$\phi_{A_1} \leftrightarrow \Phi_{A_2}, \qquad \phi_E \leftrightarrow \Phi_E$$

(так как $E \times E = A_1 + A_2 + E$ содержит антисимметричную компоненту). Таким образом, вращательные состояния молекулы NH_3 распределяются по неприводимым представлениям (A_1, A_2, E) группы C_{3v} с ядерными статистическими весами 0 : 2 : 1. Аналогично можно показать, что для дейтероаммиака, где ядра ^{2}H имеют спин 1:

$$\Gamma(^{14}\mathrm{N}^2\mathrm{H}_3) = 30A_1 + 3\,A_2 + 24E$$

и ядерные статистические веса относятся как 10 : 1 : 8 [52, т. 3, гл. 13, § 105].

Упражнение 5.10. Найти ядерные статистические веса вращательных состояний молекулы этилена C_2H_4 (асимметричный волчок, спин ядра ^{12}C равен 0) и распределить их по суммарному ядерному спину.

Спиновые представления неподвижных молекул используются в магнитно-резонансной спектроскопии, так как магнитные моменты электронов и ядер пропорциональны их спинам. Магнитным полем, создаваемым эквивалентными ядрами, определяется тонкое расщепление сигналов молекул в ЭПР и ЯМР-спектрах. Так, магнитные моменты трех протонов в молекуле CH_3F создают поле суммарной симметрии $D^{(3/2)}+2D^{(1/2)}$, а распределение их спиновых функций по M_S (см. выше) непосредственно показывает расщепление сигнала ядра ^{19}F (спин $1/2$) в этом поле в квартет с относительными интенсивностями* 1:3:3:1.

Упражнение 5.11. Определить расщепление сигнала неспаренного электрона в магнитном поле четырех ядер H в спектрах ЭПР анион-радикала пара-бензохинона $C_6H_4O_2^-$ (точечная группа D_{2h}) и его полностью дейтерированного аналога $C_6D_4O_2^-$.

5.5. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ИНВАРИАНТЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Симметрию четырехмерного пространства-времени $M(1,3)$ описывают группы Лоренца и Пуанкаре. Частицы, пространство состояний которых инвариантно относительно действия операций группы $\mathcal{P}(1,3)$, классифицируются по неприводимым представлениям этой группы и называются *элементарными.* Более 200 известных элементарных частиц (табл. 5.15) вступают в многочисленные взаимные превращения, например β-распад нейтрона:

$$n \to p + e^- + \tilde{\nu}_e$$

рождение электрон-позитронной пары**

$$\gamma + X \to e^- + e^+ + X$$

---

*Из теории ЯМР следует, что спины симметрически эквивалентных ядер дают единственный сигнал. В спектре ^{1}H-ЯМР CH_3F сигнал протонов расщепляется полем ядра ^{19}F в дублет.

** При фоторождении электронно-позитронной пары (E_γ>1,1 МэВ) в конденсированной среде одновременное выполнение законов сохранения энергии и импульса достигается за счет передачи импульса фотона E_γ/c произвольной частице X (например, атомному ядру). Обратный процесс образования фотонов при взаимодействии частицы с ее античастицей называется *аннигиляцией.*

и др. Начальные сведения о взаимных превращениях элементарных частиц и ядерных реакциях см., например, в [97].

Группа Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$ играет важную роль в релятивистской квантовой механике [6, 64, 65 т. 2, ч. V]. Ее представлениями, а также *внутренними симметриями* элементарных частиц в квантовой теории поля определяются такие их фундаментальные характеристики, как спин, четность и заряд, задаваемые в нерелятивистской квантовой механике лишь феноменологически. Далее в этом разделе, в соответствии с обозначениями релятивистской квантовой механики, мы принимаем $\hbar = 1$, $c = 1$.

5.5.1. Квантовое поле

Понятие поля как материальной среды, передающей взаимодействия между телами, следует из принципов релятивистской механики (подразд. 5.1.2). Значения функции поля $u(x)$ в каждой точке пространства-времени $x = (x_0, x_1, x_2, x_3)$ рассматриваются как обобщенные координаты системы с бесконечным числом степеней свободы, отмеченных непрерывным индексом x. Функции *квантового поля*, по аналогии с волновой функцией $\Psi(r,t)$ нерелятивистской квантовой механики, отвечает также определенная вероятность нахождения некоторой материальной частицы в элементе объема dx с координатами x.

Таким образом, квантовое поле обладает свойствами как классического поля взаимодействий, так и пространственного распределения амплитуды вероятности. Соответствующие ему частицы играют роль переносчиков взаимодействия, или «квантов поля»: так, квантом электромагнитного поля является фотон γ, квантами поля сильных межнуклонных взаимодействий — пионы π°, $\pi^\pm$ и т. д.

Ввиду бесконечного числа степеней свободы классические функции Лагранжа L и Гамильтона H, заданные в п. 5.1 для системы частиц, в описании полей заменяются функциями *плотности лагранжиана** $\mathcal{L}$ и *плотности гамильтониана* $\mathcal{H}$, связанными соотношением

$$\mathcal{H} = \pi\dot{u} - \mathcal{L},$$

где $\pi(x) = \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}}$ — импульс поля в точке x.

Квантовую теорию поля можно построить на основе лагранжиана

*Плотность лагранжиана $\mathcal{L}$ в квантовой теории поля нередко также называют «лагранжиан».

$$L(t) = L(x_0) = \int \mathcal{L}(x_0, \vec{r})d\vec{r},$$

который зависит от непрерывного множества обобщенных координат $\{u(x)\}$ и их первых производных

$$u' = \{\partial u/\partial x_\mu\} = \left(\frac{\partial u}{\partial x_0}, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \frac{\partial u}{\partial x_3}\right),$$

удовлетворяя *принципу наименьшего действия*

$$\delta A = \delta \int L(t)dt = \delta \int \mathcal{L}(x)d^4x = 0,$$

(где A — функционал действия).

Отсюда следуют обобщенные уравнения Лагранжа

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \sum \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'_\mu}\right) = 0 \qquad (5.91)$$

($\mu = 0, 1, 2, 3$). Поскольку действие A должно быть инвариантно относительно всех преобразований группы Пуанкаре, плотность лагранжиана $\mathcal{L}(u, u', t)$ — скалярная величина.

Вид функций поля $u(x)$ определяется природой его частиц (квантов). Простейшими, т. е. вещественными скалярными функциями можно описать поле частиц с нулевыми зарядом и спином; комплексному скалярному полю отвечают заряженные бесспиновые частицы. Нерелятивистское поле частиц со спином s имеет $2s+1$ компонент (см. подразд. 5.1.4), т. е. является векторным (при целых s) либо спинорным (полуцелые s). Число компонент релятивистского поля удваивается благодаря инвариантности уравнений (5.91) относительно «частиц» и «античастиц» (см. далее).

При отсутствии внешних воздействий (свободное скалярное поле) простейшая релятивистски инвариантная форма

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\sum)u'_\nu u^\nu + \frac{M}{2}u^2$$

переводит (5.91) в *уравнение Клейна — Гордона*

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^\nu \partial x_\nu} - M^2 u = \left[\Box - M^2\right] u = 0, \qquad (5.92)$$

где $\Box$ — оператор д'Аламбера:

$$\Box = -\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Delta - \frac{\partial^2}{\partial t^2},$$

$M^2 > 0$ — *масса покоя* частицы. (Напомним, что по одинаковым индексам в формулах релятивистской механики производится суммирование, см. подразд. 5.1.2.)

Таблица 5.15

Характеристики некоторых элементарных частиц

Частица	Символ	Масса покоя, МэВ	Заряд	Спин, четность J^P	Изоспин		Гиперзаряд Y	Среднее время жизни, с
					I	M_I		
Фотон	γ	0	0	1^{-*}				∞
Лептоны								
Нейтрино**	ν^{**}	0	0	$-1/2^{+*}$				∞
Электрон	e	0,511	–1	$1/2^+$				∞
Позитрон***	e^+	0,511	+1	$1/2^-$				∞
Мюон	μ	106	–1	$1/2^+$				$2{,}6 \cdot 10^{-6}$
Мезоны								
Пионы	π^0	135	0	0^-	1	0	0	$8{,}3 \cdot 10^{-17}$
	π^+	140	+1	0^-	1	+1	0	$2{,}6 \cdot 10^{-8}$
	π^-	140	–1	0^-	1	–1	0	$2{,}6 \cdot 10^{-8}$
Каоны	K^+	494	+1	0^-	1/2	1/2	1	$1{,}2 \cdot 10^{-8}$
	K^-	494	–1	0^-	1/2	–1/2	–1	$1{,}2 \cdot 10^{-8}$
	K^0	498	0	0^-	1/2	–1/2	1	$9 \cdot 10^{-11}$
	$\bar{K}^0$	498	0	0^-	1/2	1/2	–1	$5{,}3 \cdot 10^{-8}$****
η-Мезон	η^0	549	0	0^-	0	0	0	$3 \cdot 10^{-19}$

Барионы								
Протон	p	938,3	+1	$1/2^+$	1/2	1/2	1	∞
Антипротон****	p^-	938,3	–1	$1/2^-$	1/2	–1/2	–1	∞
Нейтрон	n	939,6	0	$1/2^+$	1/2	–1/2	1	898
Гипероны	Λ	1116	0	$1/2^+$	0	0	0	$2,6 \cdot 10^{-10}$
	Σ^+	1189	+1	$1/2^+$	1	1	0	$8 \cdot 10^{-11}$
	Σ^0	1193	0	$1/2^+$	1	0	0	$5,8 \cdot 10^{-20}$
	Σ^-	1197	–1	$1/2^+$	1	–1	0	$1,4 \cdot 10^{-10}$
	Ξ^0	1315	0	$1/2^+$	1/2	1/2	–1	$2,9 \cdot 10^{-10}$
	Ξ^-	1321	–1	$1/2^+$	1/2	–1/2	–1	$1,6 \cdot 10^{-10}$

* Для частиц с нулевой массой покоя символом J обозначена спиральность.
** Различают электронное (ν_e) и мюонное (ν_μ) нейтрино.
*** Античастица.
**** Два канала распада.

В конечной области пространства-времени уравнение (5.92) математически эквивалентно счетному множеству гармонических осцилляторов ($\ddot{u}_i + M^2 u_i = 0$), связанных оператором кинетической энергии Δu_i. В базисе собственных функций этого оператора $\Delta f_i = k_i^2 f_i$ состояния $u(k_i)$ из (5.92) преобразуются к суперпозиции нормальных мод

$$\omega_i = \sqrt{k_i^2 + M^2},$$

которые можно представить числами $\{N_i(k_i)\}$ квантов поля с массой $M = (\hbar/c)k_0^{(i)}$ и трехмерным импульсом* $\vec{p}_i = \left(\hbar k_1^{(i)}, \hbar k_2^{(i)}, \hbar k_3^{(i)}\right)$.

Бесконечномерные представления поля нумеруют числами частиц (квантов). По аналогии с подразд. 5.4.5 их строят с помощью операторов рождения $\hat{a}^+(k_i)$ и уничтожения $\hat{a}(k_i)$:

$$\hat{a}_\tau^+(k_i)|0\rangle = |k_i\rangle_\tau, \quad \hat{a}_\tau(k_i)|0\rangle = |0\rangle, \tag{5.93}$$

где $|0\rangle$ обозначает состояние *вакуума* (отсутствия частиц).

Оператор $\hat{a}_\tau^+(k_i)$ добавляет в состояние $|N_1 k_1, \ldots, N_i k_i, \ldots\rangle_\tau$ одну частицу с 4-векторным индексом $k_i = (k_0^{(i)}, k_1^{(i)}, k_2^{(i)}, k_3^{(i)})$, которому соответствует 4-импульс, или *энергия-импульс*, $(E_i, \vec{p}_i)$:

$$\hat{a}_\tau^+(k_i)|N_1 k_1, \ldots, N_i k_i \ldots\rangle_\tau = \sqrt{N_i + 1}|N_1 k_1, \ldots, (N_i + 1)k_i \ldots\rangle_\tau.$$

Оператор $\hat{a}_\tau(k_i)$ уменьшает число таких частиц на единицу

$$\hat{a}_\tau(k_i)|N_1 k_1, \ldots, N_i k_i \ldots\rangle_\tau = \sqrt{N_i}|N_1 k_1, \ldots, (N_i - 1)k_i \ldots\rangle_\tau$$

(индексом τ, который мы далее будем опускать, обозначены все прочие квантовые числа данного состояния поля).

Легко видеть, что собственным значением произведения операторов $\hat{a}^+(k_i)\hat{a}(k_i) = \hat{N}_i$ является число частиц N_i с индексом k_i:

$$\hat{a}^+(k_i)\hat{a}(k_i)|N_1 k_1, \ldots, N_i k_i \ldots\rangle = N_i|N_1 k_1, \ldots, N_i k_i \ldots\rangle.$$

Гамильтониан поля равен сумме всех таких произведений

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}^+(k_i)\hat{a}(k_i) = \sum \hat{N}(k_i).$$

В случае бесконечной области $M(1,3)$ следует перейти к непрерывному 4-векторному индексу k и интегрировать функцию плотности частиц $n(k)$.

---

*Напомним, что в этом разделе мы обозначаем векторы в трехмерном пространстве буквами со стрелкой, а 4-векторы — без стрелки над символом.

Координатное представление поля $u(x)$ получают четырехмерным Фурье-преобразованием операторов $\hat{a}^+, \hat{a}$:

$$u^+(x) \sim \int e^{ikx} \hat{a}^+(k) d^4k,$$
$$u^-(x) \sim \int e^{ikx} \hat{a}(k) d^4k, \qquad (5.94)$$

где $u^+(x)$ и $u^-(x)$ — плотности вероятности, соответственно, рождения и уничтожения частицы в точке (x_0, x_1, x_2, x_3).

Заметим, что дифференциальное уравнение 2-го порядка (5.92), имеющее вид релятивистского соотношения энергии и импульса $E^2 = p^2 + M^2$, инвариантно относительно знака массы $\pm M$; решения с отрицательной массой соответствуют уничтожению квантов поля.

Граничные условия на функции $u(x)$ и $\partial u(x)/\partial t$ в (5.92) приводят к двухкомпонентной полевой функции (ψ, χ):

$$\psi = u + (i/M)\partial u/\partial t, \quad \chi = u - (i/M)\partial u/\partial t.$$

В нерелятивистском пределе $(i\partial u/\partial t \to Mu)$ $\chi \ll \psi$ и полевая функция $u(x) \sim \psi(t, \vec{r})$ переходит в обычную однокомпонентную волновую функцию частицы, а уравнение (5.92) (с учетом входящих в него физических констант) — в зависящее от времени уравнение Шредингера (5.11) ([65, т. 2, гл. 21].

Скалярными полевыми функциями описывают поле *истинно нейтральных* частиц, идентичных своим античастицам — например, нейтральных пионов π^0. Такие поля симметричны относительно операторов рождения $u^+(x)$ и уничтожения $u^-(x)$ частиц в точке x пространства-времени $M(1,3)$ [6, гл. 1]:

$$\Phi(x) = u^+(x) + u^-(x).$$

Выбирая другие функции поля, из (5.91) можно получить уравнения для различных типов частиц.

5.5.2. Группа Пуанкаре и релятивистские инварианты

Многие свойства решений уравнений (5.91) полностью определяются симметрией пространства-времени $M(1,3)$, т. е. заданы неприводимыми представлениями $\Gamma(k, j)$ группы $\mathcal{P}(1,3)$ (где k — 4-мерный вектор, j — целое либо полуцелое число, см. подразд. 4.8). Мы рассмотрим только представления, лежащие внутри светового конуса $(\Gamma(k, j))$ и на его границах $(\Gamma^{(\pm)}(0, m_j)$,

см. рис. 5.1), так как остальные состояния не отвечают физическим частицам. Выколотой точке начала координат $(0,0,0,0)$ на рис. 5.1 соответствует изолированное состояние *физического вакуума* $|0\rangle$.

Из наличия в группе Пуанкаре десяти непрерывных параметров следует существование 10 *фундаментальных динамических инвариантов* элементарных частиц (компонент энергии-импульса, момента и спина) в соответствии с *теоремой Нётер*.

ТЕОРЕМА 5.1. Для любых физических систем, уравнения движения которых выводятся из вариационного принципа, каждому однопараметрическому преобразованию, сохраняющему вариационный функционал действия, отвечает сохраняющаяся величина.

Индексу $k \neq 0$ трансляций в пространстве-времени соответствует сохранение 4-вектора *энергии-импульса*

$$\hbar k = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, p_x, p_y, p_z\right),$$

который в «безразмерной» форме определяется собственным значением оператора Казимира $\hat{\Pi}^2$:

$$\hat{\Pi}^2|k,j\rangle = -k^2|k,j\rangle, \tag{5.95}$$

где символом $|k,j\rangle$ обозначено состояние, преобразуемое по неприводимому представлению $\Gamma(k,j)$ (см. подразд. 4.3). Определив в обычных физических обозначениях *оператор квадрата массы*:

$$\hat{M}^2 = -\frac{\hbar^2}{c^2}\hat{\Pi}^2,$$

для состояния с заданным k получим

$$-\frac{c^2}{\hbar^2}M^2 = \frac{1}{\hbar^2}(-E^2/c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

или

$$E^2 = M^2c^4 + c^2p^2, \tag{5.96}$$

где $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ — обычный трехмерный импульс; M — масса покоя частицы.

При малых импульсах $p \ll Mc$ можно преобразовать (5.96) к сумме релятивистской энергии покоя и кинетической энергии:

$$E = Mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{M^2c^2}} \simeq Mc^2 + \frac{p^2}{2M}.$$

Представлениям $\Gamma(0, m_j)$, точки которых находятся на границе светового конуса, отвечают частицы с нулевой массой покоя

и скоростью $v \equiv c$ (фотон, нейтрино), для которых (5.96) переходит в выражение

$$E = pc.$$

Как видно из рис. 5.1, частицы с $M \neq 0$ могут находиться в покое ($p = 0$), тогда как для частиц с $M = 0$ состояние покоя недостижимо (точка $|0\rangle$ на множестве $\Gamma(0, \pm m_j)$ выколота).

Индекс j представления $\Gamma(k, j)$ определяет собственное значение второго оператора Казимира $\hat{W}^2$ группы $\mathcal{P}(1,3)$, задающего инвариантность 4-вектора x относительно операций шестипараметрической группы Лоренца, т. е. вращений в трехмерном пространстве (x_1, x_2, x_3) и «гиперболических вращений» (преобразований Лоренца) в трех плоскостях $(x_0 x_i)$ (см. подразд. 4.8):

$$\hat{W}^2 |k, j\rangle = -\frac{c^2}{\hbar^2} M^2 j(j+1) |k, j\rangle.$$

Для покоящейся частицы ($k_1 = k_2 = k_3 = 0$) ненулевая энергия ($k_0 \neq 0$) соответствует массе покоя $M = E/c^2$, а ненулевой момент $j = s \neq 0$ — собственному угловому моменту частицы, т. е. спину s. Для движущейся частицы с ненулевой массой сохраняется сумма моментов $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$. Можно показать [99, т. 2, гл. 15], что, в отличие от $\Gamma(k, j)$, в представлениях $\Gamma^+(0, m_j)$ и $\Gamma^-(0, m_j)$, задающих состояния частиц с нулевой массой покоя на границе светового конуса, сохраняется только проекция m_j момента на направление движения: *спиральность*. Так, целочисленный спин фотона (бозе-частицы с нулевой массой покоя) принимает только значения ± 1, которым соответствуют правая и левая поляризации света.

Комплексные полевые функции $u(x)$ обладают также *калибровочной инвариантностью* относительно преобразований

$$\hat{X} u \to e^{i\alpha} u, \quad \hat{X} u^* \to e^{-i\alpha} u^*,$$

не изменяющих произведения uu^* (где α — фаза преобразования, u^* — комплексно сопряженная функция). В этом случае 4-вектор потока плотности вероятности $j(x) = (j_0, j_1, j_2, j_3)$ нахождения частицы в точке x (*вектор тока*), компоненты которого равны

$$j_\mu = i[u^* u'_\mu - (u^*_\mu)' u]$$

(штрихом обозначена 4-компонентная производная $\partial u / \partial x$), удовлетворяет условию непрерывности

$$\sum j'_\mu = \sum \frac{\partial j}{\partial x_\mu} = 0.$$

Это указывает на наличие сохраняющейся величины.

Интеграл от компоненты j_0 по трехмерному пространству

$$Q = \int j_0 d^3x = i \int (u^* \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial u^*}{\partial t}) d^3x$$

не зависит от времени и представляет инвариантную характеристику поля, называемую *зарядом*. Для разных полей Q может соответствовать как электрическому заряду, так и другим зарядоподобным инвариантам: барионному заряду, странности и др. Такие инвариантные характеристики элементарных частиц отражают их *внутренние симметрии* и не выводятся из свойств группы Пуанкаре [6, гл. 1].

5.5.3. Статистика, спин и четность

Перестановочные соотношения операторов рождения и уничтожения, очевидно, различны для фермионов и бозонов. Для бозе-полей, полносимметричных относительно перестановок их квантов: $(|k, k', \ldots, k_n\rangle = |k', k, \ldots, k_n\rangle)$:

$$[\hat{a}^+(k), \hat{a}^+(k')]_- = \hat{a}^+(k)\hat{a}^+(k') - \hat{a}^+(k')\hat{a}^+(k) = 0,$$

тогда как для антисимметричных ферми-полей $(|k, k', \ldots, k_n\rangle = -|k', k, \ldots, k_n\rangle)$:

$$[\hat{a}^+(k), \hat{a}^+(k')]_+ = \hat{a}^+(k)\hat{a}^+(k') + \hat{a}^+(k')\hat{a}^+(k) = 0$$

(и, соответственно, $[\hat{a}(k), \hat{a}(k')]_\pm = 0$)*. Оператор $[A, B]_+ = AB + BA$ называется *антикоммутатором* A и B. При этом для бозонных (индекс «–») и фермионных («+») полей

$$[\hat{a}_\tau(k), a^+_{\tau'}(k')]_\pm \sim \delta_{\tau\tau'}\delta(k - k').$$

Перестановочная симметрия полей и связь типов статистики со спином вытекают из *принципа причинности*: независимости полей $\Phi(x)$ (и их операторов) в точках x и x', разделенных пространственноподобным интервалом $\Delta s^2 < 0$. Поскольку независимые функции коммутируют,

$$[\Phi(x), \Phi(x')]_\pm = 0.$$

Для скалярного поля частиц с нулевым (т. е. целым) спином перестановочную бозе-симметрию можно получить непосредственно из (5.94), подставляя функции $\Phi = u^+(x) + u^-(x)$ в

*В этом можно убедиться, подействовав операторами $[\hat{a}^+(k), \hat{a}^+(k')]_\pm$ на состояние $|k_1, \ldots, k_n\rangle$.

коммутатор и антикоммутатор и учитывая, что $u^+(x)u^+(x') = u^-(x)u^-(x') = 0$:

$$[\Phi(x), \Phi(x')]_- = [(u^+(x) + u^-(x)), (u^+(x') + u^-(x'))]_- = \\ = u^-(x)u^+(x') - u^+(x)u^-(x')$$

или

$$[\Phi(x), \Phi(x')]_- \sim \iint [e^{i(k'x'-kx)} - e^{i(kx-k'x')}]\delta(k-k')d^4kd^4k', \\ \sim \int \sin k(x'-x)d^4k, \\ \sim \int \sin \vec{k}(\vec{r'}-\vec{r})d^3k = 0. \qquad (5.97)$$

В (5.97) проведена замена пространственноподобного 4-вектора $x'-x$ на симметрически эквивалентный ему вектор (лежащий на той же трехмерной гиперболической поверхности преобразования Лоренца) с координатой $t' = t$, т. е. $x'_0 - x_0 = 0$, понижающая размерность области интегрирования. Интеграл от нечетной функции $\sin[\vec{k}(\vec{r'}-\vec{r})]$ по всему трехмерному подпространству импульсов (k_1, k_2, k_3) обращается в нуль. Если же в (5.97) исходить из антикоммутатора $[\Phi(x), \Phi(x')]_+$, мы придем к противоречию, получив в последней строке ненулевой интеграл по всем (k_1, k_2, k_3) от четной функции $\cos \vec{k}(\vec{r'}-\vec{r})$.

Таким образом, перестановочная антисимметрия (или ферми-статистика) состояний поля для частиц с нулевым спином противоречит принципу причинности, а полносимметричность по перестановкам частиц (бозе-статистика) согласуется с ним. Наоборот, антикоммутационные соотношения согласуются с причинностью для спинорных полей, составленных из частиц с полуцелыми спинами (см. [6, гл. 2] и [99, гл. 16]).

Функции комплексных и более сложных полей, удовлетворяющие условию причинности, имеют вид [6]

$$\Phi = u^- + v^+ \qquad \Phi^* = u^+ + v^-,$$

где компоненты v^+, v^- выводятся по (5.94) из операторов $\hat{b}^+, \hat{b}$ рождения и уничтожения *античастиц* с теми же массой и спином, что и кванты поля u^+, u^-, но с противоположными зарядами (ср. «вторые» решения уравнения Клейна—Гордона, возникающие вследствие релятивистской инвариантности лагранжиана в (5.91)). Для суперпозиции полей $u(x)$ и $v(x)$ сохраняется оператор разности числа частиц и античастиц, эквивалентный электрическому заряду

$$\hat{Q} \sim \int [a^+(k)a(k) - b^+(k)b(k)]d^4k.$$

Частицу и ее античастицу с одинаковыми массами покоя и спинами, но противоположными зарядовыми характеристиками (например, протон и антипротон) можно считать компонентами одного вырожденного состояния. Они переводятся одна в другую особой операцией симметрии: *зарядовым сопряжением* C.

Помимо непрерывных преобразований группы Пуанкаре, внутренних симметрий и зарядового сопряжения, элементарные частицы обладают также свойствами симметрии относительно дискретных преобразований пространства-времени: инверсии $\hat{P}$ пространственных координат (x_1, x_2, x_3), обращения времени $\hat{T}$ и их произведения $\hat{P}\hat{T}$. Симметрия или антисимметрия поля относительно инверсии координат $\hat{P}u = (\pm 1)u$ характеризует *внутреннюю четность* частиц (см. подразд. 5.4.5). Можно показать [70], что внутренние четности фермионов и их античастиц противоположны, а четность всех мезонов равна –1.

Знак поля относительно зарядового сопряжения C называется *зарядовой четностью*. Например, PT-четность и зарядовая четность фотона как кванта электромагнитного поля, магнитный потенциал которого (полярный вектор) изменяет знак при обращении времени, равны –1, т. е. $Cu_\gamma = -u_\gamma$. Таким образом, «антифотоном» является фотон с противоположной спиральностью (круговой поляризацией света).

Сочетание операций $\hat{P}$ и $\hat{T}$ с преобразованиями Лоренца дает четырехмерные аналоги несобственных вращений. Известно, что свойства симметрии относительно $\hat{P}$ и $\hat{T}$ сохраняются не во всех взаимодействиях элементарных частиц. Так, например, четность частиц сохраняется в электромагнитных и сильных взаимодействиях, но не сохраняется при слабых взаимодействиях — таких, как β-распад. Однако совместная инверсия пространственных координат и времени вместе с заменой частиц античастицами является операцией симметрии для всех известных квантовых полей (*CPT-теорема*).

Из разбиения состояний квантового поля по неприводимым представлениям группы $\mathcal{P}(1,3)$ вытекают законы сохранения инвариантных характеристик частиц (квантовых чисел) при их взаимных превращениях. Так, например, при распаде истинно нейтрального пиона π^0 со спином 0 и зарядовой четностью +1:

$$\pi^0 \to 2\gamma$$

образуются два фотона с противоположной поляризацией $m_s(\gamma_1) + m_s(\gamma_2) = 0$ и суммарной зарядовой четностью +1

$(C\psi(\gamma_1)\psi(\gamma_2) = (-1)^2\psi(\gamma_1)\psi(\gamma_2))$, тогда как распад π^0 на нечетное число фотонов запрещен.

У п р а ж н е н и е 5.12. Аннигиляция электрон-позитронной пары

$$e^- + e^+ \to (e^-, e^+) \to n\gamma$$

протекает через метастабильную промежуточную систему *позитрония* (e^-, e^+): водородоподобного квазиатома с возможными спин-орбитальными состояниями ^1S (*пара*-позитроний) и ^3S (*орто*-позитроний) (где S обозначает орбитальное состояние с $L = 0$). Определить минимальные числа n фотонов при разрешенном распаде этих состояний.

5.5.4. Матрицы Дирака

Волновые функции нерелятивистских частиц со спином $1/2$ в трехмерном евклидовом пространстве являются двухкомпонентными спинорами 1-го ранга и преобразуются матрицами Паули по неприводимому представлению $D^{(\frac{1}{2})}$ группы $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ (см. подразд. 5.1.4). С учетом релятивистского удвоения компонент поля соответствующие волновые функции в четырехмерном пространстве-времени представляют *биспинорами Дирака*

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{5.98}$$

где

$$\phi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (частицы)}, \quad \chi = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix} \text{ (античастицы)}.$$

Функции $\psi(x) = \phi(x) + \chi(x)$ преобразуются по представлению $D^{(\frac{1}{2}\,0)} + D^{(0\,\frac{1}{2})}$ группы $\mathrm{SO}_+(1,3)$. Матрицы $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta)$ этих преобразований (размера 4×4), называемые *матрицами Дирака* действуют только на спиновые переменные и имеют блочный вид

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Они удовлетворяют соотношениям

$$\alpha_k\alpha_l + \alpha_l\alpha_k = 2\delta_{kl},$$
$$\alpha_k\beta + \beta\alpha_k = 0,$$
$$\beta^2 = I,$$

где σ_k — 2×2-матрицы Паули, $\mathbf{1}$ — единичная матрица размера 2×2, I — единичная матрица размера 4×4.

Релятивистское матричное уравнение для свободного электрона

$$(\alpha_k \hat{p}_k + \beta m)\psi = E\psi \tag{5.99}$$

(с суммированием по одинаковым индексам; в обозначениях данного раздела $\hat{p}_k = -i\nabla_k = -i\frac{\partial}{\partial x_k}$, m — масса покоя электрона) называется *уравнением Дирака*. Его решения, т. е. волновые функции $\psi(x)$, удовлетворяют также уравнению Клейна—Гордона (5.92).

Обычно используется стандартное представление матриц Дирака $\gamma_0 = \beta$, $\gamma_k = \beta\alpha_k$, в котором

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2g_{\mu\nu},$$

где $g_{\mu\nu}$ — метрический тензор, или набор элементов в матрице Грама (см. подразд. 7.4) пространства $M(1,3)$.

Таким образом, матрицы $\{\gamma_\mu\}$ антикоммутативны, а их квадраты равны I ($\mu = 0$) либо $-I$ ($\mu = 1, 2, 3$). С этими матрицами уравнение (5.99) принимает ковариантную форму, сохраняющуюся при преобразованиях волновой функции $\psi(x)$ операциями группы Лоренца:

$$\left(i\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu} - m\right)\psi(x) = 0,$$

или (после умножения на $-i$)

$$\gamma_0\frac{\partial\psi}{\partial x_0} + \gamma_1\frac{\partial\psi}{\partial x_1} + \gamma_2\frac{\partial\psi}{\partial x_2} + \gamma_3\frac{\partial\psi}{\partial x_3} + im\psi = 0. \tag{5.100}$$

Стандартные матрицы Дирака имеют вид

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

и обладают свойствами:

$${}^t\overline{\gamma}_0 = \gamma_0 \quad \text{(эрмитова матрица)};$$

${}^t\overline{\gamma}_k = -\gamma_k$ ($k = 1, 2, 3$; антиэрмитовы матрицы), т. е.

$${}^t\overline{\gamma}_\mu = \gamma_0\gamma_\mu\gamma_0 \quad (\mu = 0, 1, 2, 3).$$

Матрицы $\{\gamma_\mu\}$ являются образующими алгебры Клиффорда $C_{(1,3)}$ (см. подразд. 4.5). Матрица их произведения

$$\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

также антикоммутативна с $\{\gamma_\mu\}$ и совпадает со своей обратной матрицей

$$\gamma_5\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_5 = 0, \quad (\gamma_5)^2 = I.$$

Перемножая матрицы $\{\gamma_\mu\}$, можно построить полный набор из 16 независимых матриц размера 4×4, являющихся базисом пространства $\mathrm{Mat}(4, \mathbb{C})$:

$$I,\ \gamma_\mu,\ \sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2i}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu),\ \gamma_\mu\gamma_5,\ \gamma_5. \tag{5.101}$$

Эти 16 матриц, снабженные антикоммутатором $[x, y]_+$, служат базисом *алгебры Дирака* — еще одной конструкции в квантовой теории поля. Можно доказать [59, гл. 2], что алгебры с коммутатором (используемые в описании бозонных полей) и с антикоммутатором (описывающие поля фермионов) образованы, соответственно, четными и нечетными элементами *алгебры Грассмана* (см. подразд. 4.4).

Упражнение 5.13. Используя явный вид матриц $\{\gamma_\mu\}$ и соотношения между ними, распределить 16 матриц (5.101) на классы сопряженных элементов относительно умножения.

Учет взаимодействия с электромагнитным полем в уравнениях Дирака (5.100) достигается заменой $i\partial/\partial x_\mu$ на $i\partial/\partial x_\mu - eA_\mu$, где e — заряд электрона, $\{A_\mu\} = (\varphi, A_1, A_2, A_3)$ — 4-компонентный электромагнитный потенциал. Уравнения (5.99) и (5.100), в частности, позволяют вычислить магнитный момент электрона и корректно описать его спин-орбитальные взаимодействия. Решениям с отрицательной энергией отвечают состояния положительно заряженной античастицы: позитрона e^+. В нерелятивистском пределе ($\chi \ll \phi$) биспинор (5.98) переходит в двухкомпонентную спинорную функцию, а уравнения Дирака — в уравнения Шредингера для частицы с магнитным моментом $\mu_B = e\hbar/2m$ в электромагнитном поле [65, гл. 20].

При нулевой массе покоя ($m = 0$) уравнение (5.100) принимает вид

$$i\gamma_\mu \frac{\partial\psi}{\partial x_\mu} = 0$$

и разделяется на два независимых *уравнения Вейля*

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_0} \pm \sigma_k \frac{\partial}{\partial x_k}\right) \Phi_{\pm}(x) = 0, \tag{5.102}$$

где $k = 1, 2, 3$, σ_k — матрицы Паули.

Двухкомпонентные функции $\Phi_-(x)$ и $\Phi_+(x)$ соответственно описывают состояния безмассового нейтрино ν с отрицательной спиральностью и антинейтрино $\tilde{\nu}$ с положительной спиральностью. Квантованием трехкомпонентного векторного поля частиц со спином 1 в случае $m = 0$ (фотон) можно получить *уравнения Максвелла* (см. [6, гл. 1, 2], [65, гл. 21] и [99, т. 2, гл. 16]).

5.5.5. Изоспин и мультиплеты масс

Поскольку релятивистская частица, соответствующая неприводимому представлению группы Пуанкаре, должна иметь точно определенную энергию, действительно элементарными можно считать лишь стабильные частицы: фотон, нейтрино, электрон, протон и их античастицы (антинейтрино, позитрон и антипротон). Частицы с конечными временами жизни τ и массами покоя, распределенными в интервале $\Delta E \sim \hbar/\tau$, строго говоря, соответствуют бесконечномерным приводимым представлениям группы $\mathcal{P}(1, 3)$.

Однако стабильные и нестабильные частицы можно расматривать вместе, считая их компонентами некоторого набора приближенно вырожденных состояний, которые отражают нарушенную симметрию взаимодействующих квантовых полей, или приближенную симметрию фундаментальных взаимодействий. Так, адроны с близкими массами покоя и одинаковыми спинами (например, протон и нейтрон) в рамках приближенной *изотопической симметрии* могут рассматриваться как разные состояния одной частицы (в данном примере нуклона), строго вырожденные в рамках симметрии сильных взаимодействий, но расщепленные по энергии электромагнитным возмущением.

Приближенную симметрию сильных взаимодействий описывают унитарной группой $\mathrm{SU}(2, \mathbb{C})$ в абстрактном пространстве изотопических координат (ξ, η, ζ) — формальном аналоге пространства спиновых переменных из нерелятивистской теории электрона. Неприводимым представлениям группы $\mathrm{SU}(2, \mathbb{C})$ отвечают «почти вырожденные» мультиплеты частиц с близкими массами покоя, одинаковых по спину и четности: (n, p), $(\pi^{\pm}, \pi^0)$ и др. (см. табл. 5.15). В пользу такой модели свидетельствует, в частности, подобие возбужденных состояний «зеркальных»

[^{11}B($5p,6n$), ^{11}C($6p,5n$)] и других изобарных (^{18}O, ^{18}F, ^{18}Ne) ядер легких элементов (где преобладают сильные взаимодействия) с одинаковыми массовыми числами, или барионными зарядами, $B = Z + N$, а также многие закономерности ядерных реакций.

Индексом неприводимого представления группы $SU(2,\mathbb{C})$, которому соответствует мультиплет элементарных частиц с близкими массами покоя, служит квантовое число *изоспина* I («изотопического спина»), названного так ввиду одинаковой симметрии пространств спиновых и изотопических переменных. Каждой частице в мультиплете отвечает определенная проекция изоспина $M_I = -I, -I+1, \ldots, I$. Так, например, состояниям протона $|p\rangle$ и нейтрона $|n\rangle$ в пространстве (ξ, η, ζ) соответствуют спинорные волновые функции

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \psi(x), \qquad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \phi(x)$$

с изоспином $1/2$ и его проекциями, соответственно, $\pm 1/2$. Операторы преобразования этих функций $\hat{I}_k = \frac{1}{2}\hat{\tau}_k$ представляют комплексные (2×2)-матрицы, аналогичные матрицам Паули (5.19), так что

$$\hat{I}_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle, \quad \hat{I}_3|n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle.$$

Из матриц τ_1 и τ_2 можно построить повышающий и понижающий операторы $T_\pm = \frac{1}{2}(\tau_1 \pm i\tau_2)$:

$$T_+|n\rangle = |p\rangle, \quad T_-|p\rangle = |n\rangle,$$
$$T_-|n\rangle = T_+|p\rangle = |0\rangle.$$

Триплету пионов (π^+, π^0, π^-) соответствует изоспин $I = 1$ с проекциями $(+1, 0, -1)$ и т. д. (см. табл. 5.15). Изоспиновые квантовые числа сохраняются в сильных взаимодействиях.

Квантовые числа (I, M_I) атомных ядер определяются, подобно спинам, по схеме векторного сложения: в частности изоспины ядер ^{2}H и ^{4}H равны нулю. Аналогичные состояния изобарных ядер рассматривают как компоненты изоспиновых мультиплетов $\{M_I\}$, вырождение которых снимается электромагнитными взаимодействиями нуклонов.

Направление многих процессов с участием ядер и элементарных частиц можно вывести с помощью правил отбора по I, M_I и коэффициентов Клебша — Гордана для произведений изоспиновых состояний. Например, при столкновении двух ядер дейтерия расщепление одного из них разрешено по изоспину

$$^2\mathrm{H} + {}^2\mathrm{H} \to {}^2\mathrm{H} + n + p + \pi^0 \qquad (\Delta I = 0),$$

тогда как ядерный синтез в данном случае запрещен:

$$^2\mathrm{H} + {}^2\mathrm{H} \to {}^4\mathrm{He} + \pi^0 \qquad (\Delta I = 1).$$

Действительно, взаимодействие $^2\mathrm{H} + {}^2\mathrm{H}$ в основном протекает по первому механизму. По $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})$-симметрии сильных взаимодействий см. [99, т. 1, гл. 10] или [70, гл. 3, 4].

Дальнейшим развитием идеи нарушенной симметрии является описание сильных взаимодействий элементарных частиц в рамках 8-параметрической унитарной группы $\mathrm{SU}(3,\mathbb{C})$, подгруппа которой $\mathrm{SU}(2,\mathbb{C})\times\mathrm{U}$ охватывает как изоспиновую, так и калибровочную (зарядовую) инвариантность адронов. Неприводимые представления $\Gamma(\lambda,\mu)$ группы $\mathrm{SU}(3,\mathbb{C})$ нумеруются двумя целочисленными индексами и имеют размерность

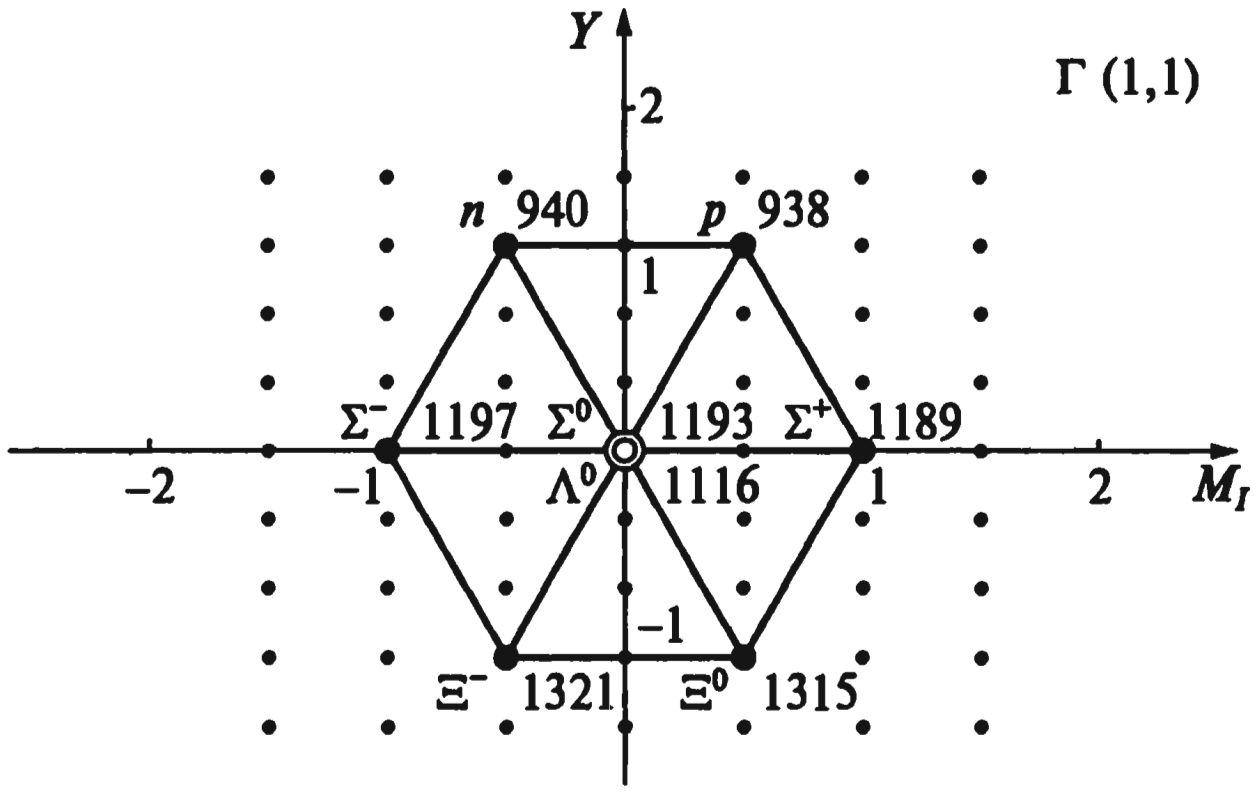
$$d(\lambda\mu) = \frac{1}{2}(\lambda+1)(\mu+1)(\lambda+\mu+2),$$

т. е. 1, 3, 6, 8, 10, 15, ... [99, гл. 11]. С индексами (λ,μ) связаны квантовые числа *гиперзаряда* Y и проекции изоспина M_I. Гиперзаряд частицы представляет сумму всех ее зарядоподобных квантовых чисел (барионного заряда, странности, очарования и др.) и связан с проекцией M_I и электрическим зарядом Q *формулой Гелльмана — Нишиджимы*:

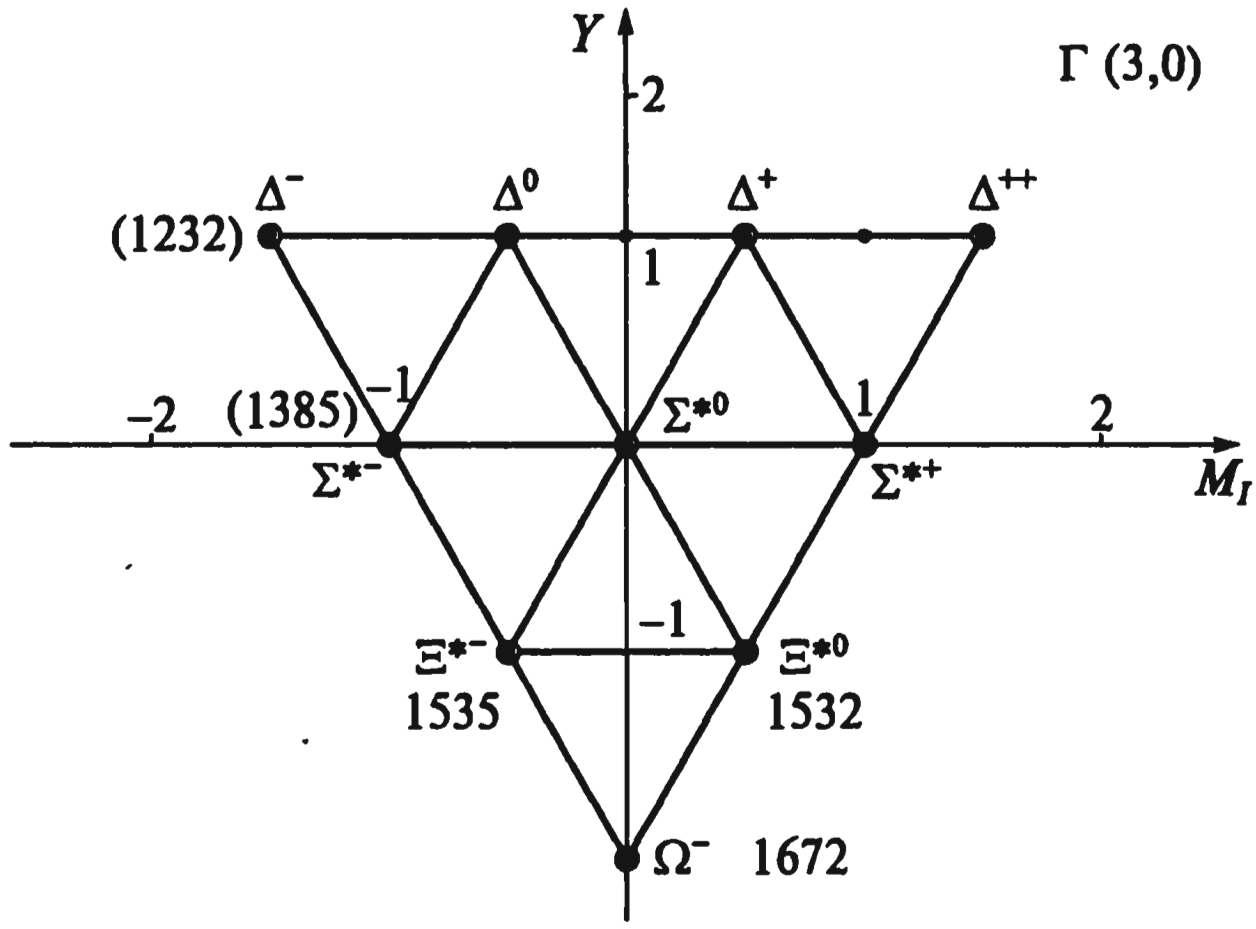
$$Q = M_I + \frac{Y}{2}.$$

Неприводимые представления $\Gamma(\lambda\mu)$ графически изображают *весовыми диаграммами* (см. подразд. 4.7): наборами точек на гексагональной сетке, построенной в прямоугольных координатах (M_I, Y) с дискретным шагом $\frac{1}{2}$ по M_I, $\frac{1}{3}$ по Y и расстояниями между соседними точками сетки $\Delta M_I, \Delta Y = \pm 1$. Вывод представлений группы $\mathrm{SU}(3,\mathbb{C})$ и их применение к описанию мультиплетов масс имеется в [99, т. 1., гл. 11] и [59, гл. 8].

На рис. 5.40 схематично изображены мультиплеты барионов, отвечающие представлениям $\Gamma(1,1)$ (октет) и $\Gamma(2,1)$ (декуплет) группы $\mathrm{SU}(3,\mathbb{C})$. На каждой диаграмме частицы с одинаковым гиперзарядом Y образуют изоспиновый мультиплет, уровни которого (массы покоя) расщеплены на несколько мегаэлектронвольт электромагнитными возмущениями. Приближенно постоянная разность масс покоя между соседними мультиплетами одной диаграммы (~ 150 МэВ) объясняется наличием компоненты сильного взаимодействия, нарушающей $\mathrm{SU}(3,\mathbb{C})$-симметрию. Отметим, что в октете барионов спины всех частиц равны $1/2$, а в



а



б

Рис. 5.40. SU(3, ℂ)-мультиплеты элементарных частиц:
а — барионы Γ(1, 1); *б* — гиперонные резонансы Γ(3, 0). Числа — масса покоя частиц, МэВ

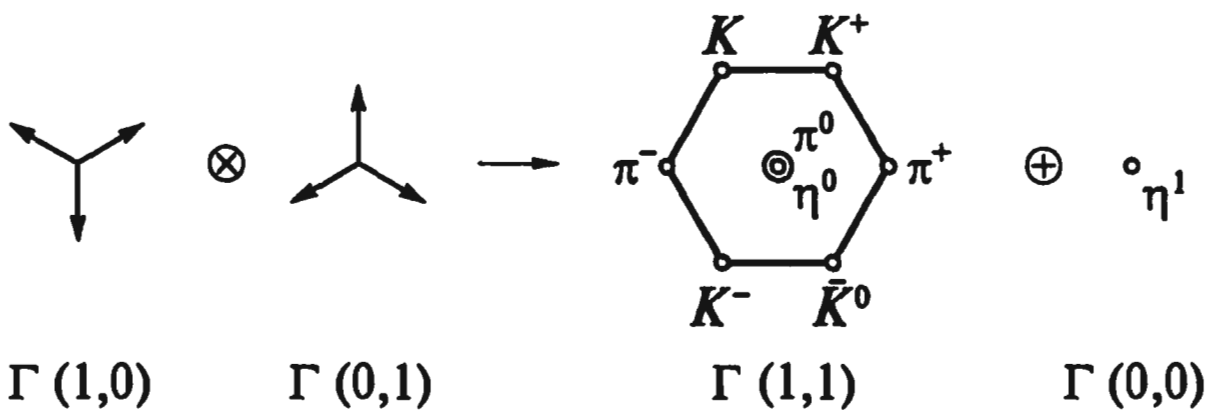
декуплете $^3/_2$. Мезоны (см. табл. 5.15) также группируются в октет (с нулевым спином); массы покоя частиц в нем различаются в несколько раз. Приближенная SU(3, ℂ)-симметрия сильных взаимодействий позволила классифицировать адроны; в частности, на ее основе был предсказан и затем в 1964 г. обнаружен Ω^--гиперон.

Одинаковые спины у всех частиц в составе SU(3, ℂ)-мультиплета указывают на еще более высокую приближенную симметрию межчастичных взаимодействий. Свести все известные квантовые числа элементарных частиц к индексам одного неприводимого представления удается в рамках группы SU(6, ℂ), подгруппа которой SU(3, ℂ) × SU(2, ℂ) отражает симметрию прямого

произведения пространств зарядовых, спиновых и изоспиновых переменных. Неприводимым представлениям $SU(6,\mathbb{C})$ отвечают *супермультиплеты* частиц: мезонов, легких барионов и тяжелых барионов вместе с резонансами (нестабильными частицами со временем жизни $10^{-22}-10^{-23}$ с). Этот формализм, в частности, дает теоретическое отношение магнитных моментов протона и нейтрона $\mu_p/\mu_n=-3/2$ в удовлетворительном согласии с экспериментальным значением $(-1,46)$. В описании элементарных частиц и супермультиплетов атомных ядер используется также унитарная симметрия $SU(n,\mathbb{C})$ с n=4 и 5 (см. [99, гл. 10 — 12]).

Низшему мультиплету кратности 3 в группе $SU(3,\mathbb{C})$ должны соответствовать частицы с дробным гиперзарядом, кратным $1/3$. Такими частицами, по современным представлениям, являются *кварки*: гипотетические составляющие адронов с массами от ~ 300 МэВ до ~ 50 ГэВ, спином $1/2$ и электрическими зарядами $-1/3$ или $2/3$. В настоящее время предполагается существование шести разных кварков (табл. 5.16), связанных безмассовыми квантами кваркового поля (*глюонами*) в барионы и мезоны, которые составлены, соответственно, из троек кварков и пар кварк — антикварк.

Рассмотренные выше SU(3)-мультиплеты мезонов и барионов можно вывести из прямых произведений кварковых триплетов по графической схеме, ранее использованной для вывода атомных и молекулярных термов (см. подразд. 5.4.2 и 5.4.6) (рис. 5.41). Специфическими квантовыми числами («цветами»)



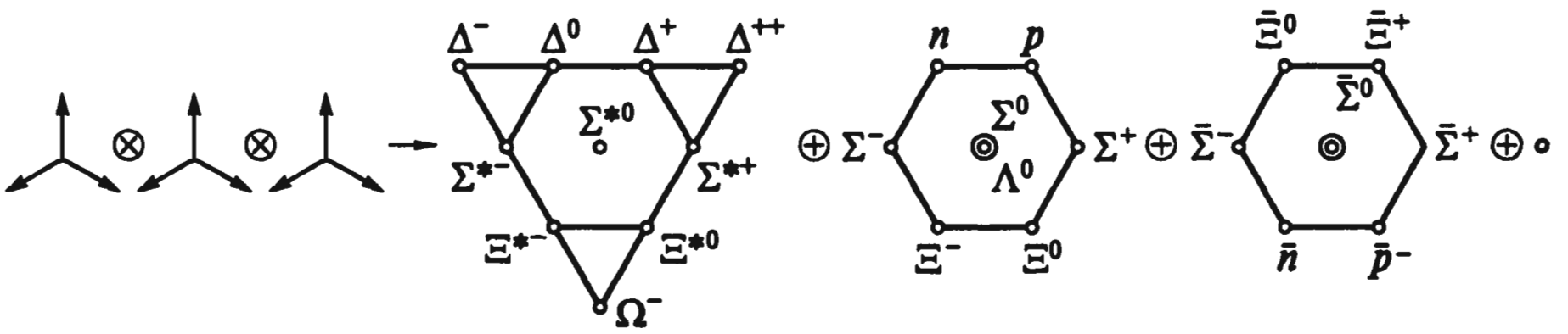


Рис. 5.41. $SU(3,\mathbb{C})$-мультиплеты масс как произведения кварковых триплетов (обозначения частиц — см. табл. 5.15 и рис. 5.40)

Таблица 5.16

Квантовые числа кварков [59]

Кварки*1	B	Q	M_I	Y	c*2	b*3	t*4
u_λ	1/3	+2/3	1/2	1/3	0	0	0
d_λ	1/3	−1/3	−1/2	1/3	0	0	0
s_λ	1/3	−1/3	0	−2/3	0	0	0
c_λ	1/3	+2/3	0	0	1	0	0
b_λ	1/3	−1/3	0	0	0	1	0
t_λ	1/3	+2/3	0	0	0	0	1

*1 Квантовые числа «цвета» ($\lambda = 1, 2, 3$). *2 «Очарование» (*charm*). *3 «Красота» (*beauty*). *4 «Истина» (*truth*).

кварков в *квантовой хромодинамике* нумеруются представления группы $SU(3, \mathbb{C})$, а их прочими квантовыми числами («ароматами») — представления группы $SU(6, \mathbb{C})$ [6, гл. 8].

Контрольные вопросы

1. Определить вид π-МО (ЛКАО) молекулы циклобутадиена C_4H_4 с симметрией D_{4h} и форму ян-теллеровских искажений этой молекулы.
2. Найти расщепление d- и f-АО в поле аксиальной симметрии.
3. Определить оптические и акустические моды двумерных атомных слоев в кристаллах графита и гексагонального BN.
4. В приближении слабой связи найти вид и симметрию электронных зон ОЦК-металла в направлении $(k\,0\,0)$.
5. На качественном уровне предсказать распределение длин связей C—C в плоской цепочечной молекуле полиацетилена $(CH)_\infty$ и сверхструктурные искажения его цепочки при допировании калием (состав фазы $K_{0,2}CH$).
6. По оболочечной модели найти спин ядра ^{15}N и определить сверхтонкое расщепление связывающих электронных уровней молекулы $^{15}N^{16}O$ в поле этого ядра.
7. Ядро дейтерия $d = (n, p)$ (дейтрон) имеет единственное связывающее состояние со спином 1. Пользуясь законами сохранения, определить состояния нуклонов, возникающих при фоторасщеплении дейтрона $\gamma + d \to n + p$.

ГЛАВА 6

ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ ГРУПП И ЕЕ СОВРЕМЕННЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Представлены дополнительные сведения по теории групп и некоторые современные приложения ее результатов. Изложены доказательство теоремы Шенфлиса — Бибербаха (см. гл. 2), основы теории разрешимых и нильпотентных групп и математической теории квазикристаллов, а также краткая характеристика группы перенормировок (ренормгруппы) и ее приложения к описанию фазовых переходов. Даны основы теории алгебр Хопфа, представляющих важную часть современной теории квантовых групп, и их связь с теорией групп Ли; приведены некоторые сведения о топологических группах. Рассматриваемый материал отражает лишь некоторые существенные направления развития теоретико-группового формализма во второй половине XX в., поэтому он изложен более коротко и фрагментарно, чем в предыдущих главах.

6.1. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ ШЕНФЛИСА — БИБЕРБАХА

В подразд. 2.13 была сформулирована теорема Шенфлиса — Бибербаха, составляющая основу теоретико-группового описания кристаллических множеств. Напомним ее.

ТЕОРЕМА 6.1. Пусть $\Gamma = \operatorname{Sym} K$ —группа симметрий кристаллического множества $K \subset E$ в евклидовом пространстве E и $N = N(\Gamma)$ — все сдвиги из группы $\operatorname{Sym} K$. Тогда фактор-группа $\Delta = \operatorname{Sym} K/N = d(\operatorname{Sym} K)$ конечна, а аддитивная подгруппа евклидова пространства $A(\Gamma)$ (см. следствие на с. 88) является решеткой в E.

Доказательство. Доказательство теоремы будет проведено в несколько этапов. На множестве всех линейных операторов $\mathcal{A}$ в пространстве E введем *норму* $\|\mathcal{A}\|$, полагая

$$\|\mathcal{A}\| = \sup_{\|x\|=1} \|\mathcal{A}x\|. \tag{6.1}$$

(напомним, что $\sup_{\xi\in M}\xi \geqslant \xi$ обозначает верхнюю границу числового множества M). Заметим, что норма $\|\mathcal{A}\|$ является положительным числом, если оператор $\mathcal{A}$ отличен от нуля. Кроме того, $\|\mathcal{A}x\| \leqslant \|\mathcal{A}\|\,\|x\|$ для всех $x \in E$ и

$$\|\mathcal{A}+\mathcal{B}\| \leqslant \|\mathcal{A}\| + \|\mathcal{B}\|, \quad \|\mathcal{A}\mathcal{B}\| \leqslant \|\mathcal{A}\|\,\|\mathcal{B}\|. \tag{6.2}$$

Отметим также, что норма любого ортогонального оператора равна 1.

Рассмотрим группу $\mathbb{O}(E)$ всех ортогональных преобразований в E.

Л Е М М А 6.1. Если $\phi, \psi \in \mathbb{O}(E)$, то

$$\|\{\phi,\psi\} - \mathcal{E}\| \leqslant 2\|\phi - \mathcal{E}\|\,\|\psi - \mathcal{E}\|. \tag{6.3}$$

Кроме того, $\|\phi\psi\phi^{-1} - \mathcal{E}\| \leqslant \|\psi - \mathcal{E}\|$. (Здесь $\mathcal{E} \in \mathbb{O}(E)$ — единичный оператор группы ортогональных преобразований.)

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $x \in E$. Тогда

$$\{\phi,\psi\}x - x = \phi\psi\phi^{-1}\psi^{-1}(x) - x =$$
$$= (\phi - \mathcal{E})(\psi - \mathcal{E})\phi^{-1}\psi^{-1}(x) - (\psi - \mathcal{E})(\phi - \mathcal{E})\phi^{-1}\psi^{-1}(x).$$

Отсюда, учитывая ортогональность ϕ, ψ, получаем, что

$$\|(\{\phi,\psi\} - \mathcal{E})x\| = \|\{\phi,\psi\}x - x\| \leqslant$$
$$\leqslant \|(\phi - \mathcal{E})(\psi - \mathcal{E})\phi^{-1}\psi^{-1}(x)\| + \|(\psi - \mathcal{E})(\phi - \mathcal{E})\phi^{-1}\psi^{-1}(x)\| \leqslant$$
$$\leqslant \|\phi - \mathcal{E}\|\,\|\psi - \mathcal{E}\|\,\|\phi^{-1}\psi^{-1}(x)\| + \|\psi - \mathcal{E}\|\,\|\phi - \mathcal{E}\|\,\|\phi^{-1}\psi^{-1}(x)\| =$$
$$= 2\|\phi - \mathcal{E}\|\,\|\psi - \mathcal{E}\|\,\|x\|.$$

Отсюда вытекает первое утверждение.

Для доказательства второго утверждения опять воспользуемся тем, что норма каждого ортогонального оператора равна 1. Поэтому в силу (6.2) получаем, что

$$\|\phi\psi\phi^{-1} - \mathcal{E}\| = \|\phi(\psi - \mathcal{E})\phi^{-1}\| \leqslant \|\phi\|\,\|\psi - \mathcal{E}\|\,\|\phi^{-1}\| = \|\psi - \mathcal{E}\|.$$

Л Е М М А 6.2. Если $\Phi, \Psi \in \Gamma$ из (2.7), тогда

$$\|\{\Phi,\Psi\}(0)\| \leqslant \|d\Phi - \mathcal{E}\|\,\|\Psi(0)\| + \|d\Psi - \mathcal{E}\|\,\|\Phi(0)\|. \tag{6.4}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть

$$\phi = d\Phi, \quad \psi = d\Psi, \quad a = \Phi(0), \quad b = \Psi(0).$$

Тогда по (2.9) и (6.3):

$$\|\{\Phi,\Psi\}(0)\| = \|-\{\phi,\psi\}(b) - \phi\psi\phi^{-1}(a) + \phi(b) + a\| \leqslant$$
$$\leqslant \|\{\phi,\psi\}(b) - \phi(b)\| + \|\phi\psi\phi^{-1}(a) - a\| \leqslant$$
$$\leqslant \|\{\phi,\psi\} - \phi\|\,\|b\| + \|\phi\psi\phi^{-1} - \mathcal{E}\|\,\|a\| \leqslant$$
$$\leqslant \|\phi\|\,\|\psi\phi^{-1}\psi^{-1} - \mathcal{E}\|\,\|b\| + \|\phi\psi\phi^{-1} - \mathcal{E}\|\,\|a\| \leqslant$$
$$\leqslant \|\phi^{-1} - \mathcal{E}\|\,\|b\| + \|\psi - \mathcal{E}\|\,\|a\| =$$
$$= \|\phi\phi^{-1} - \phi\mathcal{E}\|\,\|b\| + \|\psi - \mathcal{E}\|\,\|a\| \leqslant \|\phi - \mathcal{E}\|\,\|b\| + \|\psi - \mathcal{E}\|\,\|a\|.$$

Выберем такое число ε, что $0 < \varepsilon < 1/2$. Рассмотрим в Γ два элемента Φ, Ψ, причем

$$\|d\Phi - \mathcal{E}\|,\ \|d\Psi - \mathcal{E}\| < \varepsilon. \tag{6.5}$$

Положим по индукции $\Omega_1 = \Psi$, $\Omega_{m+1} = [\Phi, \Omega_m]$.

ЛЕММА 6.3. Для любого $m \geqslant 1$ имеем

$$\|d\Omega_m - \mathcal{E}\| \leqslant (2\varepsilon)^m, \quad \|\Omega_m(0)\| \leqslant \|\Phi(0)\| + \|\Psi(0)\|. \tag{6.6}$$

Доказательство. Положим

$$\phi = d\Phi,\ \psi = d\Psi,\ a = \Phi(0),\ b = \Psi(0),\ c_m = \Omega_m(0),\ \omega_m = d\Omega_m.$$

Если $m = 1$, то $\|\omega_1 - E\| = \|\psi - E\| < \varepsilon < 2\varepsilon$ по предположению. Кроме того, $c_1 = b$ и поэтому $\|c_1\| = \|b\| \leqslant \|a\| + \|b\|$. Итак, при $m = 1$ утверждение верно.

Пусть оно верно для некоторого $m \geqslant 1$. По (6.3) и предположению индукции получаем, что

$$\|\omega_{m+1} - \mathcal{E}\| \leqslant 2\|\phi - \mathcal{E}\|\,\|\omega_m - \mathcal{E}\| \leqslant (2\varepsilon) \times (2\varepsilon)^m = (2\varepsilon)^{m+1}.$$

Аналогично по (6.4) и предположению индукции получаем, что

$$\|c_{m+1}\| \leqslant \varepsilon(\|c_m\| + \|a\|) \leqslant \varepsilon(\|b\| + 2\|a\|) \leqslant \|a\| + \|b\|,$$

так как $2\varepsilon < 1$.

Заметим, что все элементы Ψ_m лежат в группе Γ. Из условия 1) в определении 2.8 и оценок (6.6) вытекает, что $\Psi_m = \Psi_{m+1}$, $\omega_m = \omega_{m+1} = \mathcal{E}$, начиная с некоторого m.

ЛЕММА 6.4. Если Φ, Ψ из Γ и выполнено условие (6.5), операторы $d\Psi, d\Phi$ коммутируют.

Доказательство. Воспользуемся обозначениями из предыдущей леммы. Выше мы уже показали, что $\omega_m = \mathcal{E}$ для некоторого $m \geqslant 1$. Поэтому достаточно показать, что если ζ, θ —ортогональные операторы в E, причем $\{\zeta, \{\zeta, \theta\}\} = \mathcal{E}$ и $\|\zeta - \mathcal{E}\|, \|\theta - \mathcal{E}\| < \varepsilon$, то $\{\zeta, \theta\} = \mathcal{E}$. Докажем* справедливость этого утверждения.

Будем пользоваться следующим простым свойством коммутатора $\{x, y\}$. Именно, $\{x, y\} = \mathbf{1}$ тогда и только тогда, когда $xy = yx$.

Так как $\{\zeta, \theta\} = \zeta\theta\zeta^{-1}\theta^{-1}$, то условие $\{\zeta, \{\zeta, \theta\}\} = \mathcal{E}$ эквивалентно тому, что ортогональные операторы ζ и $\theta\zeta^{-1}\theta^{-1} = (\theta\zeta\theta^{-1})^{-1}$ перестановочны. Следовательно, наше условие эквивалентно коммутативности ζ и $\theta\zeta\theta^{-1}$.

Переходя к унитарному пространству $\bar{E} = \mathbb{C} \otimes_{\mathbb{R}} E$, можно считать, что нам заданы унитарные перестановочные операторы ζ и $\theta\zeta\theta^{-1}$, имеющие одинаковые собственные значения. Тогда пространство $\bar{E}$ является прямой суммой ортогональных собственных подпространств $\bar{E} = V_{\lambda_1} \oplus \cdots \oplus V_{\lambda_t}$ оператора ζ с различными собственными значениями $\lambda_1, \ldots, \lambda_t$. Из условия коммутативности вытекает, что каждое собственное подпространство V_{λ_j} инвариантно относительно $\theta\zeta\theta^{-1}$. Следовательно, имеется ортогональное прямое разложение $V_{\lambda_j} = \oplus_s V_{\lambda_j, \lambda_s}$, где V_{λ_j, λ_s} — собственное подпространство в V_{λ_j} относительно ортогонального оператора $\theta\zeta\theta^{-1}$ с собственным значением λ_s.

Но если $x \in V_{\lambda_j}$, то

$$\theta\zeta\theta^{-1}[\theta(x)] = \theta\zeta(x) = \lambda_j[\theta(x)].$$

Поэтому

$$\theta(V_{\lambda_j}) = \oplus_s V_{\lambda_s, \lambda_j}. \tag{6.7}$$

Предположим, что $\theta(V_{\lambda_j}) \neq V_{\lambda_j}$ для некоторого j. Из (6.7) следует, что можно найти такой вектор $x \in V_{\lambda_j}$ единичной длины, что $\theta(x) \in V_{\lambda_s}$, где $s \neq j$, причем $\theta(x) \perp x$. В этом случае по теореме Пифагора (см. гл. 7)

$$\|\theta(x) - x\|^2 = \|\theta(x)\|^2 + \|x\|^2 = 2\|x\|^2 = 2,$$

что невозможно, поскольку $\|\theta - \mathcal{E}\| < \varepsilon < \frac{1}{2}$.

Итак, $\theta(V_j) = V_j$ для любого j и поэтому $\theta\zeta = \zeta\theta$.

---

*Напомним, что в этом доказательстве, как и в гл. 1, 2, используется групповой коммутатор $\{x, y\} = xyx^{-1}y^{-1}$ и символом $\mathcal{E}$ обозначен единичный элемент группы. В главах 4 и 5 для алгебр был введен лиевский коммутатор $[x, y] = xy - yx$, основанный на двух разных операциях композиции (сложения и умножения) с соответствующими операциями идентичности (0 и 1).

Завершим доказательство теоремы. Пусть G —множество всех произведений ортогональных операторов $d\Phi$, где $\Phi \in \Gamma$ и $\|d\Phi - \mathcal{E}\| < \varepsilon$. Нетрудно видеть, что G является подгруппой в $d(\Gamma)$. Более того, по лемме 2 подгруппа G нормальна в $d(\Gamma)$.

Покажем, что индекс подгруппы G в $d(\Gamma)$ конечен. Действительно, если индекс бесконечен, то существует бесконечное множество левых смежных классов $(h_i G \mid i \in I)$ группы $d(\Gamma)$ по подгруппе G (где I —бесконечное множество индексов). Так как множество всех ортогональных операторов компактно, то из множества всех представителей $(h_i \mid i \in I)$ можно выбрать сходящуюся подпоследовательность (h_m), $m \geqslant 1$. При достаточно больших m, m' получаем

$$\|h_{m'}^{-1} h_m - \mathcal{E}\| = \|h_{m'}^{-1}(h_m - h_{m'}^{-1})\| \leqslant \|h_{m'}^{-1}\| \, \|h_m - h_{m'}\| < \varepsilon.$$

Но тогда $h_{m'}^{-1} h_m \in G$, откуда $h_m G = h_{m'} G$, что невозможно.

Итак, нормальная подгруппа G имеет конечный индекс в $d(\Gamma)$. Из леммы 6.4 вытекает, что группа G абелева.

Пусть $l \in A(\Gamma)$ и $l \neq 0$ (ненулевой элемент аддитивной подгруппы $A(\Gamma) \in \Gamma$). Существует такое движение $\Psi \in \Gamma$, что $d\Psi = \mathcal{E}$ и $\Psi(0) = l$. Предположим, что $\Phi \in \Gamma$, причем $d\Phi \neq \mathcal{E}$. По (2.8) и предложению 2.8 получаем, что $\Phi\Psi\Phi^{-1}(0) = (d\Phi)(l)$. Следовательно:

$$\{\Phi, \Psi\}(l) = \Phi\Psi\Phi^{-1}\Psi^{-1}(l) = \Phi\Psi\Phi^{-1}(0) = (d\Phi)(l).$$

Поэтому в силу свойства 1) в определении 2.8 и определения нормы получаем

$$0 < d(l) \leqslant \|\{\Phi, \Psi\}(l) - l\| = \|(d\Phi)(l) - l\| \leqslant \|d\Phi - \mathcal{E}\| \, \|l\|.$$

Таким образом, если положить $\varepsilon < \dfrac{d(l)}{\|l\|}$, где $d(l)$ из условий Делоне (см. подразд. 2.3, определение 2.8), то получим, что $G = \mathbf{1}$ (т. е. группа G тривиальна). В этом случае группа $d\Gamma$ конечна.

По теореме 2.6 ранг группы $A(\Gamma)$ равен размерности $\dim V$ линейной оболочки V множества $A(\Gamma)$. Пусть $\dim V < \dim E$. Если $d(\Gamma) = (d\Phi_1, \ldots, d\Phi_m)$, то, как отмечалось выше, образ начала координат 0 при действии группы Γ остается в

$$\cup_{i=1}^{m} [\Phi_i(0) + A(\Gamma)] \subset \cup_{i=1}^{m} [\Phi_i(0) + V].$$

Существует такая точка $B \in E$, расстояние от которой до любой плоскости $[\Phi_i(0)+V]$ больше d из условия 2) в определении 2.8. Полученное противоречие показывает, что ранг $A(\Gamma)$ равен размерности E. Итак, если $A(\Gamma) \neq 0$, то теорема доказана.

Предположим теперь, что $A(\Gamma) = 0$. Рассмотрим два произвольных элемента Φ, Ψ из G, где $(d\Phi)(d\Psi) = (d\Psi)(d\Phi)$. В соответствии с теоремой 2.12 можно выбрать такую систему координат, что

$$(d\Phi)(\Phi(0)) = \Phi(0). \tag{6.8}$$

Положим $\phi = d\Phi$, $\psi = d\Psi$, $a = \Phi(0)$, $b = \Psi(0)$. Тогда (6.8) имеет вид

$$(\mathcal{E} - \phi)(a) = a - \phi(a) = 0. \tag{6.9}$$

По (2.9) получаем, что $\{\Phi, \Psi\}(x) = x - b - \psi(a) + \phi(b) + a$. Таким образом, в силу предположения, $-b - \psi(a) + \phi(b) + a = 0$ и поэтому

$$(\mathcal{E} - \psi)(a) = a - \psi(a) = b - \phi(b) = (\mathcal{E} - \phi)(b). \tag{6.10}$$

Из (6.9) следует, что

$$(\mathcal{E} - \phi)^2(b) = (\mathcal{E} - \phi)(\mathcal{E} - \psi)(a) = (\mathcal{E} - \psi)(\mathcal{E} - \phi)(a) = 0. \tag{6.11}$$

Но нетрудно видеть, что если $(\mathcal{E} - \phi)^2(x) = 0$ для некоторого $x \in E$, то $(\mathcal{E} - \phi)(x) = 0$. Это вытекает из канонического вида матрицы ортогонального оператора ϕ (см. теорему 7.16). Следовательно, из (6.10) следует, что $0 = (\mathcal{E} - \phi)(b) = (\mathcal{E} - \psi)(a)$ в силу (6.11). Так как $b = \Psi(0)$, $a = \Phi(0)$, то нами доказана следующая лемма

ЛЕММА 6.5. Пусть $\Phi, \Psi \in G$. Тогда $(d\Psi)(\Phi(0)) = \Phi(0)$.

Рассмотрим теперь элемент $\Omega \in \Gamma$ и $\Phi, \Psi \in G$. По лемме 6.1 $(d\Omega)^{-1}(d\Psi)(d\Omega) \in G$. Таким образом, в силу леммы 6.5:

$$(d\Omega)^{-1}(d\Psi)(d\Omega)[\Phi(0)] = \Phi(0). \tag{6.12}$$

Применяя оператор $d\Omega$ к равенству (6.12), получаем

$$(d\Psi)(d\Omega)[\Phi(0)] = (d\Omega)[\Phi(0)].$$

Из этого равенства вытекает, что каждый оператор $d\Psi$, $\Psi \in G$ действует тождественно на каждом векторе $(d\Omega)[\Phi(0)]$. По доказанному выше подгруппа dG имеет конечный индекс m в $d(\Gamma)$. Пусть задано разбиение группы $d(\Gamma)$ на левые смежные классы

$$d(\Gamma) = (d\Omega_1)G \cup \ldots \cup (d\Omega_m)G$$

по подгруппе G. Если $\Lambda = \Omega_j\Phi \in \Gamma$, где $d\Phi \in G$, то $\Lambda(0) = (d\Omega_j)[\Phi(0)] + \Omega_j(0)$. Пусть V — подпространство в E, состоящее из всех таких векторов $x \in E$, что $(d\Psi)(x) = x$ при всех $d\Psi \in G$. Мы видим, что $\Lambda(0) \in \Omega_j + V$. Как и выше, в силу условия 2) из определения 2.8 получаем, что $V = E$, т. е. единичная группа G. Но тогда группа $d(\Gamma)$ конечна и

$N(\Gamma)$ — также единичная группа. В этом случае гомоморфизм $d : \Gamma \to d(\Gamma) \subset \mathbb{O}(E)$ является изоморфизмом. Поэтому группа $\Gamma = (\Phi_1, \ldots, \Phi_m)$ конечна. Это, в частности, означает, что при действии группы Γ образ точки 0 конечен, что противоречит условию 2) из определения 2.8. Таким образом, этот случай невозможен, и лемма доказана.

В заключение охарактеризуем n-мерные кристаллографические группы.

Т Е О Р Е М А 6.2. [127]. Класс n-мерных кристаллографических групп совпадает с классом групп Γ, содержащих нормальную свободную абелеву подгруппу A ранга n, которая имеет конечный индекс в Γ и является максимальной абелевой подгруппой в Γ.

6.2. РАЗРЕШИМЫЕ И НИЛЬПОТЕНТНЫЕ ГРУППЫ

Понятие коммутанта группы, введенное в подразд. 1.8, позволяет рассмотреть класс разрешимых групп, являющихся обобщением понятия абелевой группы. Термин *разрешимые группы* связан в теории Галуа с вопросом о разрешимости в радикалах для корней многочленов [47, 57].

О п р е д е л е н и е 6.1. В любой группе G положим $G^{(1)} = G'$ и $G^{(k+1)} = \{G^{(k)}, G^{(k)}\}$. Группа G *разрешима*, если существует такое натуральное число m, что $G^{(m)} = \{\mathbf{1}\}$. Группа G *сверхразрешима*, если в ней имеется такой ряд нормальных подгрупп $G \supseteq G_1 \supseteq \ldots \supseteq G_m \supseteq G_{m+1} = \{\mathbf{1}\}$, причем каждая фактор-группа G_d/G_{d+1} является циклической для всех d. Группа G *нильпотентна*, если в ней имеется такой ряд нормальных подгрупп $G \supseteq G_1 \supseteq \ldots \supseteq G_m \supseteq G_{m+1} = \{\mathbf{1}\}$, что $\{x, y\} \in G_{d+1}$ для всех $x \in G_d$, $y \in G$ и всех d.

У п р а ж н е н и е 6.1. Доказать, что выполняются положения:
1) каждая абелева группа нильпотентна;
2) группы $\mathbf{S_3}$, $\mathbf{S_4}$ разрешимы, но не нильпотентны;
3) группа A_4 разрешима, но не сверхразрешима.

Можно показать, что каждая конечная нильпотентная группа сверхразрешима.

У п р а ж н е н и е 6.2. Доказать следующие утверждения:
1) для любых натуральных чисел m, n справедливо равенство $(G^{(n)})^{(m)} = G^{(n+m)}$;
2) если H — подгруппа в группе G, то $H^{(k)} \subseteq G^{(k)}$ для любого натурального числа k;

3) $G^{(k)} \triangleleft G$ для любого натурального числа k.

Рассмотрим поведение подгрупп $G^{(k)}$ при гомоморфизмах. Из определения 6.1 непосредственно следует предложение 6.1.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.1. Пусть $f : G \to H$ — гомоморфизм групп. Тогда $f(G^{(k)}) \subseteq H^{(k)}$. Если отображение f сюръективно, то $f(G^{(k)}) = H^{(k)}$.

Опираясь на это предложение, можно доказать (для $N \triangleleft G$) эквивалентность условий:

1) группа G разрешима;
2) группы G/N и N разрешимы.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.2. Для группы G эквивалентны следующие условия:

1) группа G разрешима;
2) существует такой ряд подгрупп

$$G = G_0 \supset G_1 \supset \cdots \supset G_{k-1} \supset G_k = 1,$$

что $G_{i+1} \triangleleft G_i$ и каждая фактор-группа G_i/G_{i+1} абелева для любого i (рис. 6.1).

Доказательство. Нужно воспользоваться следствием из предложения 6.1 и индукцией по k, убедившись, что группа G_1 разрешима.

СЛЕДСТВИЕ. Каждая нильпотентная группа разрешима. Любая сверхразрешимая группа разрешима.

Приведем теперь примеры разрешимых групп. Напомним, что если p — простое число, то конечная группа называется p-группой, если ее порядок является степенью числа p.

ТЕОРЕМА 6.3. Пусть p — простое число. Тогда конечная p-группа является нильпотентной.

Доказательство. Пусть порядок группы G равен p^n. Будем вести доказательство индукцией по n. Если $n = 1$, то утверждение справедливо по следствию из теоремы 1.7 (теоремы Лагранжа). Пусть $n > 1$. По след-

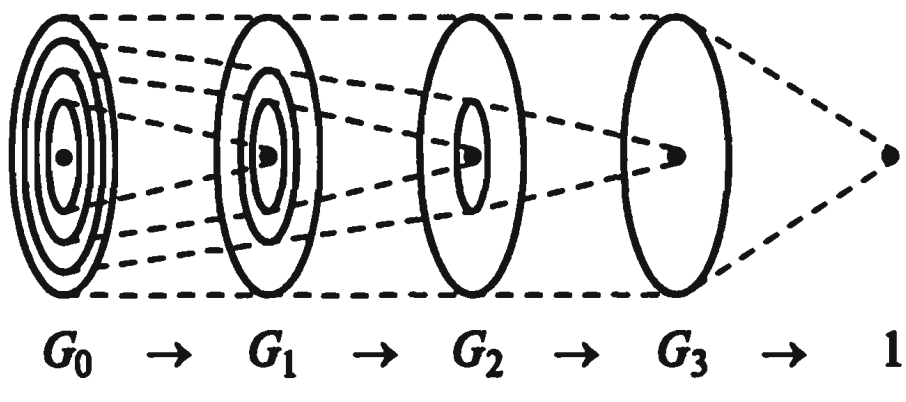


Рис. 6.1. Гомоморфизмы разрешимой группы G_0

ствию из предложения 1.16 центр $Z(G) \neq \mathbf{1}$. Поэтому порядок фактор-группы $G/Z(G)$, равный $|G|/|Z(G)|$, меньше p^n. По индукции в $H = G/Z(G)$ существует требуемый ряд подгрупп $H = H_0 \supseteq H_1 \supseteq \ldots \supseteq H_t \supseteq H_{t+1} = 1$. Обозначим G_i все такие совокупности элементов $x \in G$, что смежный класс $xZ(G) \in H_i$. Можно показать, что каждая G_i является нормальной подгруппой в G, причем ряд $G = G_0 \supseteq G_1 \supseteq \ldots \supseteq G_{t+1} = Z(G) \supseteq G_{t+1} = \mathbf{1}$ удовлетворяет всем условиям из определения нильпотентной группы.

О п р е д е л е н и е 6.2. Напомним, что квадратная матрица A верхнетреугольна, если в ней ниже главной диагонали расположены нули, а на главной диагонали стоят ненулевые числа. Квадратная верхнетреугольная матрица A *верхнеунитреугольна*, если в ней на главной диагонали стоят единицы. Как показано в подразд. 4.5, все верхнетреугольные комплексные матрицы образуют подгруппу $\mathrm{T}(n, \mathbb{C})$ в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Аналогично вводится группа $\mathrm{T}(n, \mathbb{R})$. Все верхнеунитреугольные комплексные матрицы образуют подгруппу $\mathrm{UT}(n, \mathbb{C})$ в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Аналогично вводится группа $\mathrm{UT}(n, \mathbb{R})$.

Из выражения (1.23) следует предложение 6.3.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 6.3. Рассмотрим в группе $\mathrm{UT}(n, \mathbb{C})$ матрицы

$$A = E + \sum_{j>i+t} a_{ij} E_{ij}, \quad B = E + \sum_{j \geqslant i+1} b_{ij} E_{ij}, \tag{6.13}$$

где $\{E_{ij}\}$ — матричные единицы (см. п. 4.1) и $1 \leqslant t \leqslant n$. Тогда

$$AB = E + \sum_i a_{i,i+t+1} E_{i,i+t} + \sum_{j>i+t+1} a'_{ij} E_{ij},$$

$$BA = E + \sum_i a_{i,i+t+1} E_{i,i+t} + \sum_{j>i+t+1} a''_{ij} E_{ij}$$

для некоторых чисел a'_{ij}, a''_{ij}. В частности, групповой коммутатор

$$\{A, B\} = ABA^{-1}B^{-1} = E + \sum_{j>i+t} a'''_{ij} E_{ij}$$

для некоторых чисел a'''_{ij}.

С Л Е Д С Т В И Е. Если $0 \leqslant t \leqslant n-1$, то обозначим через $\mathrm{UT}(n, t, \mathbb{C})$ множество всех матриц A из (6.13). Тогда $\mathrm{UT}(n, t, \mathbb{C})$ является нормальной подгруппой в группе $\mathrm{UT}(n, \mathbb{C})$, причем ряд

$$\mathrm{UT}(n,\mathbb{C}) = \mathrm{UT}(n,0,\mathbb{C}) \supseteq \mathrm{UT}(n,1,\mathbb{C}) \supseteq \ldots$$
$$\supseteq \mathrm{UT}(n,n-2,\mathbb{C}) \supseteq \mathrm{UT}(n,n-1,\mathbb{C}) = E$$

удовлетворяет условиям из определения нильпотентной группы.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.4. Коммутант $\mathrm{T}(n,\mathbb{C})'$ содержится в подгруппе $\mathrm{UT}(n,\mathbb{C})$.

Доказательство. Воспользоваться предложением 1.18.

ТЕОРЕМА 6.4. Группа $\mathrm{T}(n,\mathbb{C})$ разрешима, а группа $\mathrm{UT}(n,\mathbb{C})$ нильпотентна.

Доказательство. По предложениям 6.1 и 6.4 достаточно показать, что группа $\mathrm{UT}(n,\mathbb{C})$ нильпотентна. Это утверждение вытекает из предложения следствия 6.3.

Упражнение 6.3. Доказать, что прямое произведение разрешимых (нильпотентных) групп является разрешимой (нильпотентной) группой.

ТЕОРЕМА 6.5. Конечная группа является нильпотентной в том и только в том случае, когда она разлагается в прямое произведение конечных p-групп [49].

В заключение этого раздела приведем теорему о представлениях сверхразрешимых конечных групп, обобщающую теорему 3.18.

ТЕОРЕМА 6.6. Каждое неприводимое комплексное представление конечной сверхразрешимой, в частности, нильпотентной, группы индуцировано представлением степени 1 некоторой ее подгруппы [77].

Понятие разрешимости, перенесенное с групп на алгебры, играет важную роль в теории алгебр Ли (см. подразд. 4.4). Групповой коммутатор $\{,\}$ в этом случае заменяется лиевским $[,]$. В частности, среди разрешимых идеалов конечномерной алгебры Ли A имеется единственный идеал R максимальной размерности, называемый *радикалом* алгебры A, который содержит все разрешимые идеалы алгебры A. Можно доказать, что алгебра A/R полупроста, т. е. ее радикал равен нулю. Понятие полупростоты алгебры близко понятию полупростой группы Ли (см. подразд. 4.7). Всякую конечномерную комплексную алгебру Ли A, не являющуюся разрешимой, можно представить в виде прямой суммы (как векторных пространств) $A = S \dot{\oplus} R$, где $S \subset A$ — полу-

простая подалгебра, а $R \subset A$ — радикал алгебры A (*разложение Мальцева — Леви*) [7, гл. I, § 6.8]. Это разложение аналогично известным нам представлениям групп движений Iso (группы Евклида $E(3)$) и группы Пуанкаре $\mathcal{P}(1,3)$ в виде полупрямых произведений ортогональных групп на группы трансляций $\mathcal{T}(n)$ в соответствующих n-мерных пространствах:

$$\mathrm{Iso}\, E = E(3) = \mathbb{O}(3,\mathbb{R}) \leftthreetimes \mathcal{T}(3)$$
$$\mathcal{P}(1,3) = \mathbb{O}(1,3) \leftthreetimes \mathcal{T}(1,3).$$

Подробнее о разрешимых алгебрах Ли см. [59, гл. 4, 5].

6.3. КВАЗИКРИСТАЛЛЫ

С середины XX в. в веществах разных классов: «сферических» вирусах [11, т. 2, гл. 2, § 9.6], некоторых сольватах фуллеренов*, ряде сплавов металлов и интерметаллидов [114, 124] и др. — были обнаружены домены конденсированной фазы с пентагональной либо икосаэдрической симметрией, запрещенной для трехмерного кристалла (рис. 6.2). Твердые фазы с некристаллографическим упорядочением атомов, интенсивно исследованные на примере интерметаллидов, были названы *квазикристаллами*. Дифракционная картина квазикристаллов в зависимости от состава фазы обладает не присущей истинным кристаллам осью симметрии 8-го, 10-го или 12-го порядка (рис. 6.3) и нередко содержит как узкие, так и диффузные рефлексы, указывающие на сосуществование областей с разной степенью упорядоченности. В ряде случаев дифрактограмма квазикристалла обладает приближенной *масштабной инвариантностью*, т. е. может быть получена однократным либо многократным увеличением своей собственной центральной части**.

Составы стабильных икосаэдрических квазикристаллов (см. ниже), получаемых из металлических сплавов, подчиняются аналогу правила Юма — Розери (см. подразд. 5.3.5). Так, квазикристаллы $Al_{65}Cu_{20}M_{15}$ и $Al_{63}Cu_{25}M_{13}$ (M = Ru, Os), по строению родственные *фазам Лавеса* [11, т. 2, гл. 2, § 2], содержат $\sim 1{,}75$ валентных электронов на атом, а тройные фазы $Zn_{60}Mg_{30}M_{10}$ (где M — лантаноид) и $Zn_{43}Mg_{37}Ga_{39}$, относящиеся к другому структурному типу, — 2,1 — 2,2 валентных электронов на атом. (Коэффициенты в химических формулах для сплавов отвечают

---

* *Fleming R. M.* et al. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 888.

** Обратная решетка обычного кристалла, задающего его дифракционную картину, очевидно, не обладает масштабной инвариантностью (см. подразд. 2.14).

процентному содержанию атомов металла; вклады заполненных подоболочек, например $[d^{10}]$, полагают равными нулю.) Для «металлических» квазикристаллов характерны низкая электропроводность и диамагнетизм. К настоящему времени получены бездефектные квазикристаллические «зерна» с размерами до $1-2$ см [124, гл. 2].

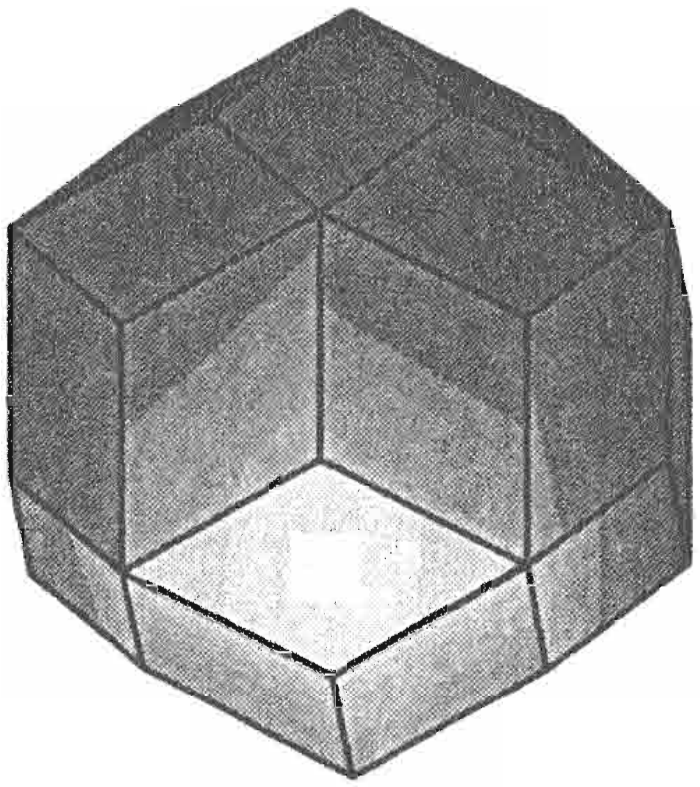


Рис. 6.2. Ромбический триаконтаэдр (I_h): типичная форма икосаэдрического квазикристалла [124, гл. 2]

По современным представлениям квазикристаллы, подобно модулированным фазам (см. подразд. 2.15), рассматриваются как трехмерные образы некоторых периодических структур («гиперкристаллов»), заданных в n-мерном евклидовом пространстве с $n > 3$. Напомним, что сечение n-мерной кристаллической решетки из пространственно протяженных (а не точечных, как в трехмерном случае) *гиператомов* физическим трехмерным пространством (см. рис. 2.38) порождает несоразмерную квазипериодическую структуру, которая может обладать некристаллографической симметрией. Квазикристалл в рамках этого подхода можно приближенно описать как полисинтетический двойник с усредненной кристаллической структурой, или «рациональным аппроксимантом» (сингония которо-

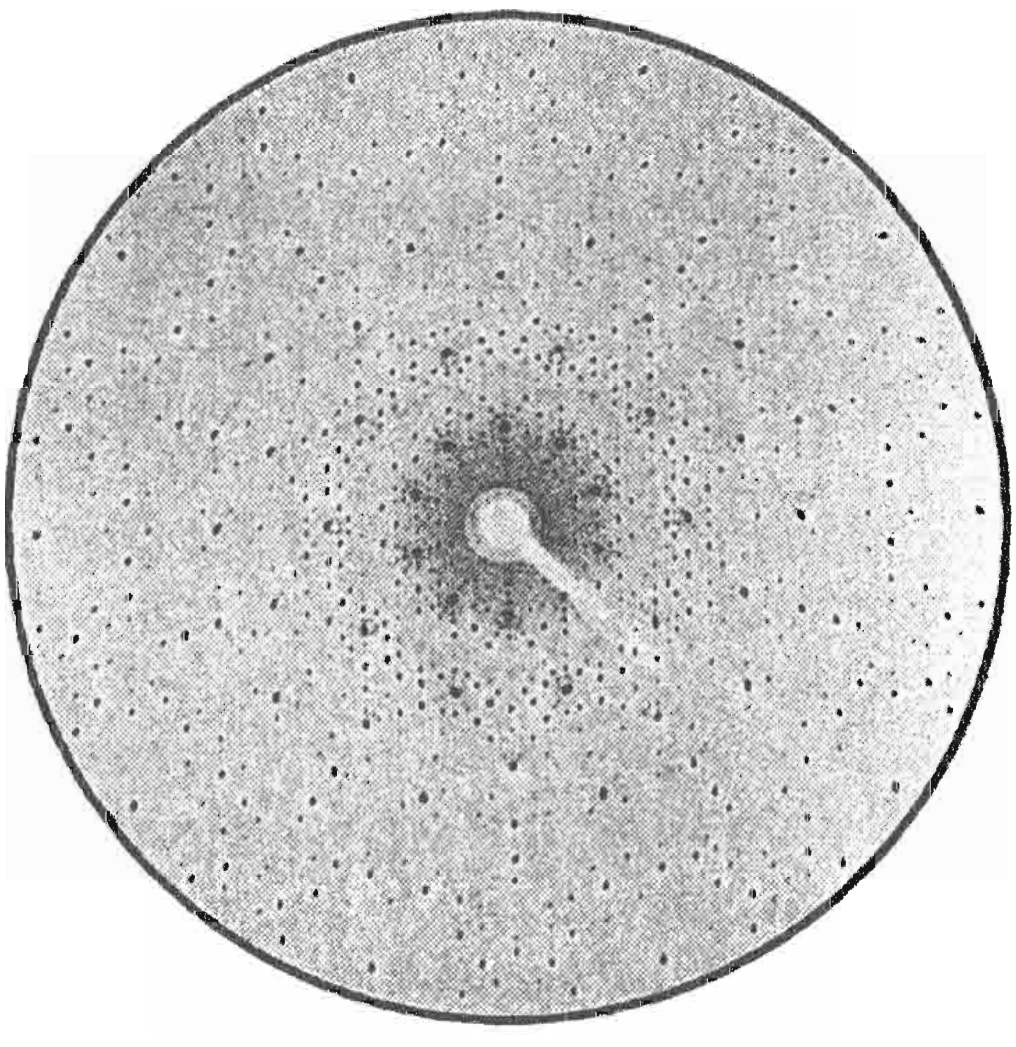


Рис. 6.3. Рентгеновская дефрактограмма декагонального квазикристалла $Al_{65}Co_{20}Ni_{15}$ (W. Steurer, ETH Zurich, Швейцария)

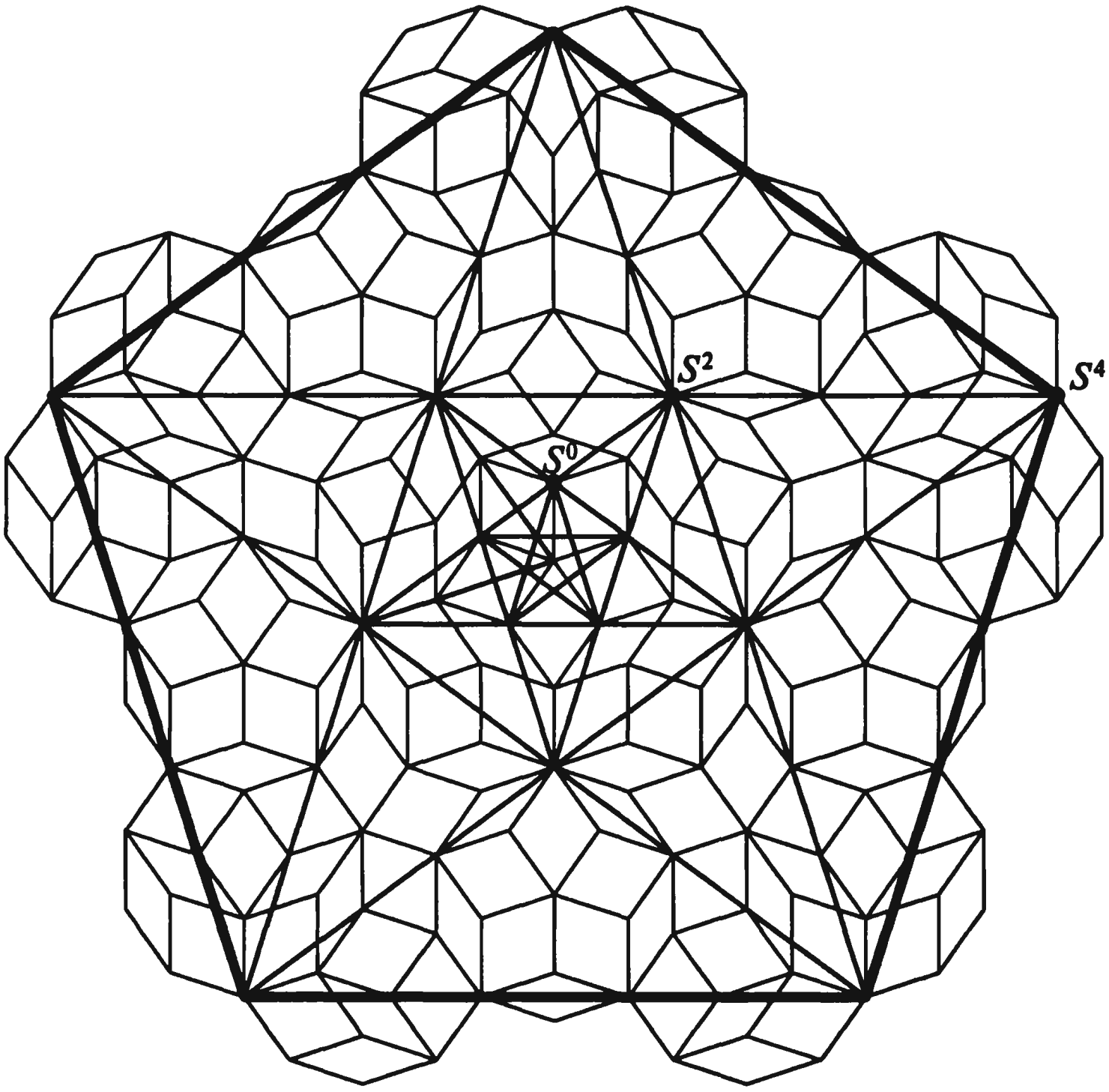


Рис. 6.4. Узор Пенроуза

го является подгруппой точечной группы гиперкристалла), где некристаллографический элемент симметрии задает взаимную ориентацию доменов.

По числу квазипериодических направлений в физической трехмерной структуре квазикристаллы подразделяются на одномерные, двумерные (октагональные, декагональные, додекагональные) и трехмерные (икосаэдрические). Для одномерно-квазипериодических структур, которым соответствуют четырехмерные гиперкристаллы, существует альтернативное описание, представляющее их модулированными трехмерными решетками (см. подразд. 2.15).

Двумерно-квазипериодические квазикристаллы построены из трансляционно эквивалентных плоских атомных слоев квазипериодического строения. Примером такого слоя с пентагональной симметрией может служить бесконечный узор Пенроуза, без пробелов заполняющий плоскость (рис. 6.4). Отметим масштабную инвариантность (обозначаемую S^4) узора Пенроуза, который совмещается сам с собой при увеличении в τ^{4n} раз, где

$$\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 2\cos\frac{\pi}{5} = 1,618\ldots; \quad n = 1,2,3,\ldots$$

Сочетание S с осью C_n порождает масштабно-поворотные преобразования (так, узор Пенроуза обладает симметрией $C_{10}S^2$), которые можно представить в виде «гиперболических вращений»*.

В декагональных квазикристаллах ось 10 дифракционной картины возникает из сочетания поворотной оси пятиатомной структуры с центром инверсии по закону Фриделя (см. гл. 2). Наборы рефлексов декагонального квазикристалла обладают симметрией $10/m = C_{10h}$ или $10/mmm = D_{10h}$ (группы Лауэ) и включают сателлитные рефлексы с двумя нецелочисленными индексами. Набор их индексов (h_1, h_2, h_3), где $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^1, h_3 \in \mathbb{Z}^1$, можно преобразовать к набору пяти целочисленных индексов $(H_1, \ldots, H_5)$, задающих трансляции $n_i a_i^*$ в пятимерной обратной решетке:

$$(a_i^*) = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \cos(2\pi i/5) \\ \sin(2\pi i/5) \\ 0 \\ \cos(6\pi i/5) \\ \sin(6\pi i/5) \end{pmatrix} \quad (i = 1-4); \qquad a_5^* = \frac{2\pi}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (6.14)$$

где a и c — периоды повторяемости в «прямом» физическом пространстве.

Трехмерно-квазипериодические квазикристаллы дают дифракционную картину с осями 10-го, 6-го и 2-го порядков, ориентированными одна к другой как соответствующие оси (C_5, C_3 и C_2) икосаэдра либо пентагон-додекаэдра (группа Лауэ $m\overline{3}5 = I_h$). Рефлексы этих квазикристаллов приводятся к целочисленным индексам в шестимерной кубической обратной решетке, которая может быть примитивной (P), гране- (F) и объемноцентрированной (I). Отметим, что шестимерный куб обладает осями симметрии 5-го порядка. Возможные гиперпространственные группы и соответствующие им погасания для декагональных и икосаэдрических квазикристаллов представлены в табл. 6.1. Краткое описание строения и дифрактограмм квазикристаллов дано В. Штойером и Т. Хайбахом [124, гл. 3].

6.3.1. Математическая теория квазикристаллов

В этом разделе мы рассмотрим понятие квазикристалла как некоторого подмножества Q *физического* пространства U размерности d. Для его задания нам придется «подняться» в *гиперпространство* E более высокой размерности $n > d$. Пусть

* *Janner A.* // Acta Crystallogr. A. 1992. V. 48. P. 884.

Таблица 6.1

Трехмерные точечные и n-мерные пространственные группы квазикристаллов [124, гл. 3]

Точечная $3D$-группа	Пространственная nD-группа	Индексы рефлексов и погасания
Декагональные квазикристаллы $(h_1h_2h_3h_4h_5)$		
$10\,(C_{10})$	$P10$	Нет погасаний
	$P10_q$	$(0000h_5) : qh_5 \neq 10n (q = 1, 2, 5)$
$10/m\,(C_{10h})$	$P10/m$	Нет погасаний
	$P10_5/m$	$(0000h_5) : h_5 = 2n + 1$
$10\,2\,2\,(D_{10})$	$P10\,2\,2$	Нет погасаний
	$P10_q\,2\,2$	$(0000h_5) : qh_5 \neq 10n\ (q = 1, 2, 5)$
$10mm\,(C_{10v})$	$P10mm$	Нет погасаний
	$P10cc$	$(h_1h_2h_2h_1h_5)$, $(h_1h_2\bar{h}_2\bar{h}_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
	$P10_5mc$	$(h_1h_2\bar{h}_2\bar{h}_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
	$P10_5cm$	$(h_1h_2h_2h_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
$\overline{10}m2\,(D_{10d})$	$P\overline{10}m2$	Нет погасаний
	$P\overline{10}c2$	$(h_1h_2h_2h_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
	$P\overline{10}\,2\,m$	Нет погасаний
	$P\overline{10}\,2\,c$	$(h_1h_2h_2h_1h_5);\ h_5 = 2n + 1$
$10/m\ 2/m\ 2/m\,(D_{10h})$	$P10/m\ 2/m\ 2/m$	Нет погасаний
	$P10/m\ 2/c\ 2/c$	$(h_1h_2h_2h_1h_5)$, $(h_1h_2\bar{h}_2\bar{h}_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
	$P10_5/m\ 2/m\ 2/c$	$(h_1h_2\bar{h}_2\bar{h}_1h_5) : h_5 = 2n + 1$
	$P10_5/m\ 2/c\ 2/m$	$(h_1h_2h_2h_1h_5) : h_5 = 2n + 1$

Икосаэдрические квазикристаллы $(h_1h_2h_3h_4h_5h_6)$		
$235\ (I)$	$P235$	Нет погасаний
	$P235_1$	$h_1h_2h_2h_2h_2h_2 : h_1 \neq 5n$
	$I235$	$h_1h_2h_3h_4h_5h_6 : h_1+h_2+h_3+h_4+h_5+h_6 = 2n+1$
	$I235_1$	$(I235)+h_1h_2h_2h_2h_2h_2 : h_1 \neq 5n$
	$F235$	$h_1+h_j = 2n+1\ (i,j = 1-6, i \neq j)$
	$F235_1$	$(F235)+h_1h_2h_2h_2h_2h_2 : h_1 \neq 5n$
$2/m\,\bar{3}\,\bar{5}\ (I_h)$	$P\,2/m\,\bar{3}\,\bar{5}$	Нет погасаний
	$P\,2/n\,\bar{3}\,\bar{5}$	$h_1h_2\bar{h}_1\bar{h}_2h_5h_6 : h_5-h_6 = 2n+1$
	$I\,2/m\,\bar{3}\,\bar{5}$	$h_1h_2h_3h_4h_5h_6 : h_1+h_2+h_3+h_4+h_5+h_6 = 2n+1$
	$F\,2/m\,\bar{3}\,\bar{5}$	$h_i+h_j = 2n+1 (i,j = 1-6, i \neq j)$
	$F\,2/n\,\bar{3}\,\bar{5}$	$(F\,2/m\,\bar{3}\,\bar{5})+h_1h_2\bar{h}_1\bar{h}_2h_5h_6 : h_5-h_6 = 2n+1$

задано n-мерное евклидово пространство E, разложенное в прямую сумму ортогональных подпространств $E = U \oplus U^{\perp}$, где $U = E^{\parallel}$, $U^{\perp} \neq 0$. Ортогональное дополнение $U^{\perp}$ называется *ортогональным* или *фазовым* пространством*.

Каждый вектор $x \in E$ в этом случае однозначно представляется в виде $x = y + z$, где $y \in U$ и $z \in U^{\perp}$. Зададим ортогональную проекцию $\mathcal{P} : E \to U$, полагая $\mathcal{P}(x) = y$ — так, что $(1 - \mathcal{P})x = x - y = z \in U^{\perp}$.

Предположим, что в E выбрана решетка M с ортонормированным базисом $e_1, \ldots, e_n$. Определим элементарную ячейку этой решетки как множество точек

$$P = \left\{ \sum_{i=1}^{n} y_i e_i \mid 0 \leqslant y_i \leqslant 1 \right\}, \tag{6.15}$$

и пусть $K = (1 - \mathcal{P})P \subset U^{\perp}$. Тогда $U \oplus K = U + P$.

О п р е д е л е н и е 6.3. Квазикристаллом Q в физическом пространстве U называют образ множества $(U \oplus K) \cap M$ при его ортогональной проекции $\mathcal{P}$.

Без ограничения общности можно считать, что $U^{\perp} \cap M = 0$. Это означает, что $\mathcal{P} : E \to U$ инъективно отображает M в U. Поэтому $\mathcal{P}$ индуцирует биекцию $(U \oplus K) \cap M$ и Q.

Пусть

$$u_i = \mathcal{P}(e_i), \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{6.16}$$

тогда

$$0 < \|u_i\| \leqslant 1, \quad 1 \leqslant i \leqslant n. \tag{6.17}$$

При этом U является линейной оболочкой $U = \langle u_1, \ldots, u_n \rangle$ векторов (6.16). Каждый элемент $x \in Q$ можно представить в виде

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i u_i, \quad x_i \in \mathbb{Z}. \tag{6.18}$$

Поэтому Q является собственным подмножеством в свободной абелевой группе в U с базисом (6.16).

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 6.5. Элемент x из (6.18) заведомо лежит в Q, если $x_i \in \{0, 1\}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. В самом деле, если x из условия предложения, то

*Следует помнить, что в физике «фазовым» обычно называется пространство координат и импульсов $V(q, p)$. Во избежание путаницы ортогональное дополнение $U^{\perp}$ к физическому пространству координат квазикристалла далее называется ортогональным пространством.

$$x = \mathcal{P}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i e_i\right),$$

где $\sum_{i=1}^{n} x_i e_i \in P \cap M$.

Имеем

$$e_i = u_i + v_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{6.19}$$

и $U^{\perp} = \langle v_1, \ldots, v_n \rangle$ — линейная оболочка векторов $v_1, \ldots, v_n$. Тогда $(1 - \mathcal{P})(e_i) = v_i$.

Напомним, что матрицей Грама (см. гл. 7) $G(a_1, \ldots, a_m)$ системы векторов $a_1, \ldots, a_m \in E$ называется квадратная матрица размера m, в которой на месте (i, j) стоит скалярное произведение (a_i, a_j).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.6. Матрицы Грама систем $v_1, \ldots, v_n$, $u_1, \ldots, u_n$ связаны равенством

$$G(v_1, \ldots, v_n) = E - G(u_1, \ldots, u_n), \tag{6.20}$$

т. е. $(v_i \mid v_j) = \delta_{ij} - (u_i \mid u_j)$.

Доказательство. Из (6.19) следует, что

$$\delta_{ij} = (e_i, e_j) = (u_i + v_i, u_j + v_j) =$$
$$= (u_i, u_j) + (v_i, u_j) + (u_i, v_j) + (v_i, v_j) = (u_i, u_j) + (v_i, v_j),$$

поскольку $u_i \in U$, $v_j \in U^{\perp}$; $i, j = 1, \ldots, n$.

Легко видеть, что P — замкнутый выпуклый многогранник и поэтому K тоже замкнутый выпуклый многогранник:

$$K = \left\{ \sum_{i=1}^{n} y_i v_i \mid 0 \leqslant y_i \leqslant 1 \right\}. \tag{6.21}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.7. Вектор x из (6.18) принадлежит Q тогда и только тогда, когда $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i v_i = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i v_i$ для некоторых вещественных чисел $0 \leqslant y_i \leqslant 1$.

Положим $r = n - d = \dim U^{\perp} = \dim\langle v_1, \ldots, v_n \rangle$, и предположим, что $v_1, \ldots, v_r$ — базис пространства $U^{\perp}$. Для $j > r$ имеем

$$v_j = v_1 h_{1j} + \cdots + v_r h_{rj}, \quad h_{ij} \in \mathbb{R}. \tag{6.22}$$

Пусть матрица

$$H = \begin{pmatrix} h_{1,r+1} & \ldots & h_{1,n} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & \\ h_{r,r+1} & \ldots & h_{r,n} \end{pmatrix} \in \mathrm{Mat}(r \times d, \mathbb{R}). \tag{6.23}$$

Тогда $(v_{r+1}, \ldots, v_n) = (v_1, \ldots, v_r)H$ и

$$(v_1, \ldots, v_n) = (v_1, \ldots, v_r)\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix}, \tag{6.24}$$

где E_r — единичная матрица размера r, $(E_r H)$ — матрица размера $r \times n$, получаемая приписыванием к E_r справа матрицы H, поэтому

$$G(v_1, \ldots, v_n) = \begin{pmatrix} E_r \\ {}^t H \end{pmatrix} G(v_1, \ldots, v_r)\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix}.$$

Здесь ${}^t H$ — транспонированная прямоугольная матрица H размера $d \times r$. Так как $v_1, \ldots, v_r$ — базис $U^\perp$, то

$$\det [G(v_1, \ldots, v_k)] > 0, \quad 1 \leqslant k \leqslant r.$$

С помощью (6.20) получаем первое утверждение в следующем предложении.

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 6.8. Если $v_1, \ldots, v_r$ — базис пространства $U^\perp$, то найдется такая матрица H вида (6.23), что

$$E_n - G(u_1, \ldots, u_n) = \begin{pmatrix} E_r \\ {}^t H \end{pmatrix} [E_r - G(u_1, \ldots, u_r)]\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix}. \tag{6.25}$$

Кроме того, для любого $k = 1, \ldots, r$ имеем

$$\det [E_k - G(u_1, \ldots, u_k)] > 0. \tag{6.26}$$

В частности, ранг матрицы $E_n - G(u_1, \ldots, v_n)$ равен r.

Обратно, если для матрицы H из (6.23) выполнено соотношение (6.25), то справедливы равенства (6.22).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Достаточно доказать лишь обратное утверждение. Поскольку векторы $v_1, \ldots, v_r$ образуют базис подпространства $U^\perp$, то $(v_{r+1}, \ldots, v_n) = (v_1, \ldots, v_r)H'$ для некоторой матрицы $H' \in \mathrm{Mat}(r \times d, \mathbb{R})$. Тогда

$$G(v_1, \ldots, v_r)H' = \begin{pmatrix} (v_1, v_{r+1}) & \ldots & (v_1, v_n) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & \\ (v_r, v_{r+1}) & \ldots & (v_r, v_n) \end{pmatrix}.$$

Но согласно (6.25), (6.26) то же равенство получается, если H' заменить на H. Матрица же $G(v_1, \ldots, v_r)$ обратима по предложению 7.7, так как векторы $v_1, \ldots, v_r$ независимы. Поэтому $H = H'$.

Т Е О Р Е М А 6.7. Квазикристалл Q однозначно определяется системой векторов (6.16).

Доказательство. Множество (6.16) является максимальным $\mathbb{Z}$-независимым набором векторов из Q, для которых Q содержится в свободной аддитивной абелевой группе, порождаемой этим множеством. Напомним (см. подразд. 2.1), что система векторов $x_1, \ldots, x_m$ является $\mathbb{Z}$-независимой, если из равенства $a_1x_1 + \cdots + a_mx_m = 0$, где числа $a_1, \ldots, a_m$ целые, следует, что $a_1 = \cdots = a_m = 0$. Из $\mathbb{Z}$-независимости в силу предложения 2.2 вытекает, что число n, являющееся размерностью гиперпространства E, определено однозначно.

Укажем в терминах множества (6.16) критерий того, что элемент x из (6.18) лежит в Q. Этот критерий основан на предложении 6.8, в котором уже отмечалось, что ранг r матрицы $E_n - G(u_1, \ldots, u_n)$ равен максимальному числу независимых векторов $v_1, \ldots, v_r$ в системе $v_1, \ldots, v_n$. Поэтому

$$r = \dim\langle v_1, \ldots, v_n\rangle = \dim U^{\perp} = n - d.$$

Более того, первые r строк матрицы $E_n - G(u_1, \ldots, u_n)$ независимы, и в силу предложения 6.8 существует такая $(r \times d)$-матрица H, что

$$[E_r - G(u_1, \ldots, u_r)]\, H = \begin{pmatrix} (u_1, u_{r+1}) & \ldots & (u_1, u_n) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & \\ (u_r, u_{r+1}) & \ldots & (u_r, u_n) \end{pmatrix}. \qquad (6.27)$$

При этом выполнены равенства (6.22), (6.24). Так как матрица $E_r - G(u_1, \ldots, u_r)$ невырождена, то по (6.27) матрица H определена однозначно.

ЛЕММА 6.6. Пусть $A = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$ — произвольный вектор-столбец высоты n. Для A эквивалентны следующие условия:
1) $(v_1, \ldots, v_n)A = 0$;
2) найдется такой вектор-столбец B высоты $n - r = d$, что

$$A = \begin{pmatrix} -H \\ E_d \end{pmatrix} B.$$

Доказательство. Пусть выполнено условие 1). Тогда в силу (6.24) получаем

$$0 = (v_1, \ldots, v_n)A = (v_1, \ldots, v_r)\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix} A,$$

и, значит, $(E_r \quad H)\,A = 0$, поскольку векторы $v_1, \ldots, v_r$ независимы. Следовательно, $\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \vdots \\ \alpha_r\end{pmatrix} = -H \begin{pmatrix}\alpha_{r+1}\\ \vdots \\ \alpha_n\end{pmatrix}$. Нужно положить

$$B = \begin{pmatrix}\alpha_{r+1}\\ \vdots \\ \alpha_n\end{pmatrix}.$$

Обратно, если выполнено условие 6), то по (6.24):

$$(v_1, \ldots, v_n)\begin{pmatrix}-H\\ E_d\end{pmatrix} B = (v_1, \ldots, v_r)\,(E_r \quad H)\begin{pmatrix}-H\\ E_d\end{pmatrix} B = 0.$$

Теперь можно завершить доказательство теоремы. Пусть задан вектор x из (6.18). В силу предложения 6.7 элемент $x \in Q$ в том и только в том случае, если

$$\sum_{i=1}^{n} x_i v_i = \sum_{i=1}^{n} y_i v_i$$

для некоторых вещественных чисел $0 \leqslant y_i \leqslant 1$. Другими словами,

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i) v_i = 0, \qquad x_i \in \mathbb{Z}, \quad 0 \leqslant y_i \leqslant 1.$$

По лемме 6.6 это эквивалентно существованию такой $(r \times d)$-матрицы H и вектора-столбца B высоты d, что

$$\begin{pmatrix}x_1 - y_1\\ \vdots \\ x_n - y_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-H\\ E_d\end{pmatrix} B. \tag{6.28}$$

Поэтому, взяв любой вещественный столбец B, мы можем вычислить столбец

$$\begin{pmatrix}z_1\\ \vdots \\ z_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-H\\ E_d\end{pmatrix} B.$$

Пусть $[z]$ — наибольшее целое число, не превосходящее z. Возьмем $x_i = [z_i] + 1$. Тогда по (6.28):

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i u_i \in Q,$$

так как $y_i = x_i - z_i$ для всех i. Это и есть искомая характеризация квазикристалла Q в терминах только векторов (6.16).

Определение 6.3 квазикристалла Q использует следующие данные: гиперпространство E с ортогональным разложением $E = U \oplus \oplus U^{\perp}$, компакт $K \subset U^{\perp}$ и решетку M в E. Мы дополним теорему 6.7 и покажем, как можно восстановить M и K по Q. Для этого докажем следующую теорему.

ТЕОРЕМА 6.8. Пусть U — евклидово пространство, являющееся линейной оболочкой векторов $u_1, \ldots, u_n$. Предположим, что, как и в предложении 6.8, существует такая матрица H вида (6.23), что выполнены равенства (6.25) и (6.26). Тогда найдутся такое евклидово пространство E, содержащее U, и такие векторы $v_1, \ldots, v_n \in U^{\perp}$, для которых выполнено равенство (6.20). Более того, векторы $v_1, \ldots, v_r$ составляют базис пространства $U^{\perp}$.

Доказательство. Пусть V — евклидово пространство размерности r с ортонормированным базисом $b_1, \ldots, b_i$. Положим $E = U \oplus V$ и предположим, что $U \perp V$. Тогда $V = U^{\perp}$. По условию теоремы и критерию Сильвестра (теорема 7.6) симметричная матрица $E_r - G(u_1, \ldots, u_r)$ соответствует положительно определенной квадратичной функции. Поэтому в силу теоремы 7.4 найдется такая обратимая матрица C размера r, что

$$ {}^tCC = E_r - G(u_1, \ldots, u_r). $$

Положим $(v_1, \ldots, v_r) = (b_1, \ldots, b_r)C^{-1}$, тогда

$$ G(v_1, \ldots, v_r) = E_r - G(u_1, \ldots, u_r). $$

Пусть $(v_{r+1}, \ldots, v_n) = (v_1, \ldots, v_r)H$, тогда

$$ (v_1, \ldots, v_n) = (v_1, \ldots, v_r)\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix}, $$

откуда по (6.25)

$$ G(v_1, \ldots, v_n) = \begin{pmatrix} E_r \\ {}^tH \end{pmatrix} G(v_1, \ldots, v_r)\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix} = $$

$$ = \begin{pmatrix} E_r \\ {}^tH \end{pmatrix} [E_r - G(u_1, \ldots, u_r)]\begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix} = E_n - G(u_1, \ldots, u_n). $$

СЛЕДСТВИЕ. В условии теоремы 6.8 векторы (6.19) образуют ортонормированный базис пространства E.

Квазикристалл Q в теореме 6.7 однозначно определяется множеством (6.16) в терминах матрицы Грама $G(u_1, \ldots, u_n)$. Это означает, что при любом выборе векторов $v_1, \ldots, v_n$ в теореме 6.8 квазикристалл Q будет одним и тем же. Если мы построим другие векторы $v'_1, \ldots, v'_n \in U^{\perp}$, как и в теореме 6.8, то получим ту же матрицу Грама

$$ G(v'_1, \ldots, v'_m) = G(v_1, \ldots, v_n) = E_n - G(u_1, \ldots, u_n). $$

В этом случае найдется такой ортогональный оператор Ω в пространстве $U^{\perp}$, что $\Omega(v_i) = v_i'$, $1 \leqslant i \leqslant n$. Таким образом, по (6.16) набор M, K определен однозначно с точностью до ортогонального линейного оператора в $U^{\perp}$. При этом по теореме 6.7 множество Q определено однозначно и не зависит от Ω.

С помощью матрицы H из (6.27) можно восстановить пространство U. Действительно, если $H = (h_{ij})$, то для $i = r+1, \ldots, n$ положим

$$w_i = -\sum_{j=1}^{r} e_j h_{ji} + e_i. \tag{6.29}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.9. Векторы (6.29) составляют базис пространства U.

Доказательство. Из (6.29) вытекает, что система векторов (6.29) линейно независима. Обозначим L линейную оболочку системы векторов (6.29). Из (6.28) следует, что $L \subseteq U + K$. Нам потребуется следующая лемма.

ЛЕММА 6.7. Пусть L и U — подпространства евклидова пространства E, причем $L \subseteq U + K$, где K — компакт в E. Тогда $L \subseteq U$.

Доказательство. Пусть $l \in L \setminus U$. По теореме 7.6 имеем разложение $l = l_0 + l_1$, где $l_0 \in U$ и $l_1 \in V^{\perp}$. По предположению $l_1 \neq 0$. Тогда для любого вещественного числа λ имеем $\lambda l = \lambda l_0 + \lambda l_1$. Таким образом, по предложению 7.8 расстояние между λl и U может быть сколь угодно большим. Но из вложения $L \subseteq U + K$ вытекает, что расстояние от любого вектора из L до U ограничено. Полученное противоречие показывает, что $L \subseteq U$.

Завершим доказательство предложения. По лемме $L \subseteq U$. Но $\dim L = n - r = d = \dim U$. Отсюда $L = U$.

Приступим к изучению свойств квазикристалла Q.

ТЕОРЕМА 6.9 (свойство дискретности). Пусть Q — квазикристалл. Тогда существует такое положительное число $\varepsilon > 0$, что расстояние между любыми двумя несовпадающими элементами из Q не меньше ε.

Доказательство. Предположим противное: для любого натурального m существуют такие несовпадающие элементы $x_m, y_m \in Q$, что $\|x_m - y_m\| < \dfrac{1}{m}$. Тогда найдутся такие элементы $x_m', y_m' \in K$, что $x_m + x_m'$, $y_m + y_m' \in M$. Но по теореме Пифагора

$$\|(x_m+x'_m)-(y_m+y'_m)\|^2 = \|x_m-y_m\|^2+\|x'_m-y'_m\|^2 < \frac{1}{m^2}+\|x'_m-y'_m\|^2.$$

Так как $x'_m, y'_m \in K$, то $\|x'_m-y'_m\|^2$ ограничено при всех m. Поэтому для всех m ограничены длины векторов $(x_m+x'_m)-$ $-(y_m+y'_m) \in M$. Следовательно, все эти элементы лежат в M и в некотором компакте в E. В силу упражнения 2.3 получаем, что их конечное число. Но тогда и число элементов x_m-y_m конечно. Следовательно, можно найти такую возрастающую последовательность натуральных чисел $n_1, n_2, \ldots$, что $x_{n_i}-y_{n_i}$ не зависит от i, и поэтому длина этого вектора должна быть нулевой. Отсюда $x_{n_i}-y_{n_i}=0$, что противоречит предположению.

СЛЕДСТВИЕ. Существует конечное множество квазикристаллов Q с заданным пересечением Q с шаром S единичного радиуса с центром в начале координат.

Доказательство. Элементы (6.16) лежат в $Q \cap S$. По теореме 6.9 множество $Q \cap S$ конечно и поэтому имеется конечное число возможностей для выбора элементов (6.16) в $Q \cap S$. По каждому такому выбору множество Q в силу теорем 6.7 и 6.8 определено однозначно.

Для доказательства теоремы о локальной повторяемости квазикристалла нам потребуется следующее утверждение:

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.10. Пусть $\varepsilon > 0$ и T — вещественное число. Тогда найдется такой элемент решетки M n-мерного евклидова пространства $m \in M$, что $\|m\| > T$ и $\|m-\mathcal{P}(m)\| < \varepsilon$.

Доказательство. Пусть $f \in U$, причем $f \neq 0$. Пусть D — натуральное число, большее $\dfrac{T+\varepsilon}{\|f\|}$. По предложению 2.6 найдется такое число $N > D$ и элемент $m \in M$, что $\|Nf-m\| < \varepsilon$ и

$$\|m\| > D\|f\|-\varepsilon > \frac{T+\varepsilon}{\|f\|}\|f\|-\varepsilon = T.$$

Заметим, что $m = \mathcal{P}(m)+m'$, где $\mathcal{P}(m') \in U$, $m' \in U^{\perp}$. Отсюда по теореме Пифагора

$$\varepsilon > \|Nf-m\| = \sqrt{\|Nf-\mathcal{P}(m)\|^2+\|m'\|^2} \geqslant \|m'\| = \|m-\mathcal{P}(m)\|.$$

СЛЕДСТВИЕ (свойство несоизмеримости квазикристалла). Пусть в E некоторая ε-окрестность точки $a \in$

$\in (U \oplus K) \cap M$ целиком принадлежит $U \oplus K$. Тогда квазикристалл Q обладает свойством *несоизмеримости*:

для любого $\varepsilon > 0$ и любого $T > 0$ существуют такие векторы $x \in U$ и $y \in U^{\perp}$, что

$$x + y \in M, \quad a + x + y \in (U \oplus K) \cap M$$

и $\|x\| > T$, $\|y\| < \varepsilon$.

Используя доказанное предложение, проверим условие локальной повторяемости в квазикристалле.

ТЕОРЕМА 6.10 (свойство локальной метрической повторяемости квазикристалла). Пусть Q, K, U, E из определения 6.3. Предположим, что выделено конечное подмножество S в $(U \oplus K) \cap M$, некоторая открытая окрестность которого целиком лежит в $U \times K$. Тогда для любого $T > 0$ существует такой вектор $x \in M$, что $\|x\| > T$ и $S + x \in (U \oplus K) \cap M$. В частности, для $\mathcal{P}(S)$ найдется такой вектор $x \in M$, что $\mathcal{P}(S) + \mathcal{P}(x) \subseteq Q$, причем длина $\mathcal{P}(x)$ может быть сколь угодно большой.

Доказательство. Выберем такое $\varepsilon > 0$, что ε-окрестность каждой точки из S содержится в $U \times K$. В частности, если $y \in S$, то ε-окрестность точки $y - \mathcal{P}(y)$ целиком лежит в K. В силу следствия о несоизмеримости квазикристалла для любого $\varepsilon > 0$ в M содержится такой вектор x, что $\|x\| > T$ и $\|x - \mathcal{P}(x)\| < \varepsilon$. Для любой точки $y \in S$ имеем

$$\|y + x - \mathcal{P}(y + x)\| \leqslant \|y - \mathcal{P}(y)\| + \|x - \mathcal{P}(x)\| < \|y - \mathcal{P}(y)\| + \varepsilon,$$

т. е. точка $y + x - \mathcal{P}(y + x) \in K$. Поэтому $y + x \in M \cap (U \times K)$ и $\mathcal{P}(y) + \mathcal{P}(x) \in Q$.

Из этой теоремы следует, что при наложении указанного ряда условий на конечное подмножество $\mathcal{P}(S) \subset Q$ это подмножество с помощью сдвигов бесконечное число раз повторяется в квазикристалле Q.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.11. Пусть L — подпространство в E, являющееся линейной оболочкой $L \cap M$ и содержащее $U^{\perp}$. Тогда $L \cap Q$ является квазикристаллом в $L \cap U$.

Доказательство. Заметим, что если для некоторого натурального числа m и некоторого вектора $x \in E$ имеем $mx \in L \cap M$, то $x \in L \cap M$. Поэтому в силу теоремы 2.3 абелева группа $L \cap M$ свободна, и более того, она является прямым слагаемым в M, т. е. $M = (L \cap M) \oplus M_1$ для некоторой свободной подгруппы M_1 в M. Таким образом, $L \cap M$ явля-

ется решеткой в L. Нетрудно видеть, что $L = U^{\perp} \oplus (L \cap U)$ и $L \cap Q = \mathcal{P}[(L \cap M) \times K]$.

В заключение отметим, что существует другой, эквивалентный подход к описанию квазикристаллов, связанный с функцией плотности и почти периодическими функциями [74, § 18].

Выберем в пространстве U ортонормированный базис $f_1, \ldots, f_d$. Для любого числа $x \geqslant 0$ зададим параллелограмм

$$P_x = \{y = y_1 f_1 + \cdots + y_d f_d \mid 0 \leqslant y_1, \ldots, y_d \leqslant x\}.$$

Функцией распределения $N(x)$, $x \geqslant 0$ *квазикристалла* Q называют отношение числа точек из Q, принадлежащих P_x, к объему P_x, равному x^d. *Плотностью распределения квазикристалла* Q называют производную $N'(x)$. Как отмечается в [117, 129], функция плотности квазикристалла Q является почти периодической и, более того, квазипериодической. Напомним [74, § 18], что функция f на U называется *почти периодической*, если для любого $\varepsilon > 0$ существует такой компакт P в U, что для любого вектора $y \in U$ в $y + P$ имеется элемент τ, удовлетворяющий соотношению

$$\sup_{x \in U} |f(x + \tau) - f(x)| < \varepsilon.$$

Почти периодическая функция f называется *квазипериодической* [74, § 18], если она представляется рядом Фурье

$$f(x) = \sum_{m_1, \ldots, m_n \in \mathbb{Z}} c_{m_1, \ldots, m_n} \exp[2\pi i(m_1\omega_1 + \cdots + m_n\omega_n)x],$$

где $\omega_1, \ldots, \omega_n \in \mathbb{R}$, причем эти числа несоизмеримы, т. е. некоторые отношения ω_i/ω_j являются иррациональными числами [114, 124, 125] и др*. Дальнейшие результаты по геометрии квазикристаллов и их симметриям можно найти в [54, 104, 105, 120, 121].

6.3.2. Симметрии квазикристаллов

При изучении групп симметрий кристаллов мы рассматривали подгруппы группы изометрий евклидова пространства, переводящие данное кристаллическое подмножество в себя. Если перейти к симметриям квазикристаллов, то нужно рассматривать

*Если все числа $(\omega_1, \ldots, \omega_n)$ соизмеримы, то функция $f(x)$ строго периодическая, а $\{\omega_i\}$ — ее периоды.

аффинные преобразования пространства (не сохраняющие метрики), которые переводят квазикристалл в себя. В связи этим введем определение аффинной кристаллической группы.

О п р е д е л е н и е 6.4. Подгруппа Γ в группе $\mathrm{Aff}(V)$ всех аффинных преобразований вещественного пространства V называется *аффинной кристаллографической* группой, если:

1) для каждого компакта D в V конечно множество всех таких $\gamma \in \Gamma$, что $\gamma(D) \cap D$ непусто (*свойство полной разрывности*);

2) существует такой компакт K_0 в V, что $V = \cup_{\gamma\in\Gamma}\gamma(K_0)$.

Отметим, что кристаллографические группы в смысле определения 2.9 являются также и аффинными кристаллографическими. Обобщая теорему 2.13, Л. Ауслендер [106] высказал следующую гипотезу.

Г и п о т е з а 6.1. Пусть Γ — кристаллографическая подгруппа в $\mathrm{Aff}(V)$. Тогда в Γ существует (нормальная) подгруппа конечного индекса, являющаяся разрешимой подгруппой.

Положительное решение этой проблемы явилось бы обобщением теоремы 2.13. Действительно, в качестве искомой нормальной подгруппы в кристаллографической группе движений нужно взять подгруппу сдвигов. Она абелева (таким образом разрешима) и по теореме 2.13 имеет конечный индекс.

Отметим одно полезное утверждение.

У п р а ж н е н и е 6.4. Пусть H — подгруппа конечного индекса в группе G. Тогда в G существует такая нормальная подгруппа N конечного индекса, что $N \subseteq H$.

Обзор результатов по гипотезе 6.1 и ее положительное решение для двумерного случая представлены в [100]. Для случая, когда размерность V не выше 3, эта гипотеза доказана в [113]. Наконец, в [101] заявлено о положительном решении гипотезы 6.1 для случая $n \leqslant 6$.

В подразд. 6.2 были приведены некоторые результаты о строении разрешимых подгрупп в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$.

Перейдем к рассмотрению групп симметрий квазикристаллов. Пусть $E = U \oplus U^{\perp}$, M, K, $\mathcal{P}$, Q из определения 6.3. Определим *группу симметрий квазикристалла* $\mathrm{Sym}\, Q$ как подмножество в группе $\mathrm{Aff}\, E$, состоящую из таких аффинных преобразований Φ гиперпространства E, которыми множество $(P+U)\cap M$ биективно отображается на себя.

Т Е О Р Е М А 6.11. $\mathrm{Sym}\, Q$ является подгруппой в группе $\mathrm{Aff}\, E$. Если аффинное преобразование $\Phi(x)$ принадлежит $\mathrm{Sym}\, Q$, то выполняются утверждения:

1) «физическое» пространство U инвариантно относительно дифференциала $d\Phi$;

2) $\Phi(0) \in U$.

Доказательство. Непосредственная проверка показывает, что $\operatorname{Sym} Q$ замкнуто относительно произведения отображений и обратных отображений, т. е. $\operatorname{Sym} Q$ является подгруппой в группе $\operatorname{Aff} E$.

Рассмотрим второе утверждение. Проанализируем столбец координат X вектора $x \in (K \oplus U) \cap M$ в фиксированном ортонормированном базисе $e_1, \ldots, e_n$ гиперпространства E. По (6.28) имеем

$$\begin{pmatrix} x_1 - y_1 \\ \vdots \\ x_n - y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -H \\ E_d \end{pmatrix} z,$$

где z — вектор-столбец высоты d и $0 \leqslant y_i \leqslant 1$ для всех x.

Более того, вектор со столбцом координат $\begin{pmatrix} -H \\ E_d \end{pmatrix} z$ по предложению 6.9 лежит в U. Пусть A — матрица $d\Phi$ в базисе $e_1, \ldots, e_n$. Тогда столбец координат $\Phi(x)$ имеет вид

$$AX + \Phi(0) = A \begin{pmatrix} -H \\ E_d \end{pmatrix} z + A \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} + \Phi(0) = \begin{pmatrix} -H \\ E_d \end{pmatrix} z' + \begin{pmatrix} y_1' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix}$$

для некоторого столбца z' высоты d и некоторых y_i', причем $0 \leqslant y_i' \leqslant 1$ для всех i. Последнее равенство можно в силу предложения 6.9 записать в виде $d\Phi(U) \subseteq U - d\Phi(P) + P - \Phi(0)$, где P из (6.15). Заметим, что множество $-d\Phi(P) + P - \Phi(0)$ ограничено. Таким образом, по лемме из предложения 6.9 получаем, что $d\Phi(U) \subseteq U$.

В связи с определением 6.3 квазикристалла и теоремой 6.10 о его локальной метрической повторяемости имеет смысл рассматривать аффинные преобразования пространства U (или E), которые переводят подмножества из Q в себя. Эти операции уже не образуют группы. Соответствующая им алгебраическая конструкция называется инверсным моноидом.

Определение 6.5. Множество S называется *полугруппой* [96, гл. IV], если для каждой пары элементов $x, y \in S$ определен элемент $xy \in S$, называемый их *произведением*, причем для любых $x, y, z \in S$ выполнен закон ассоциативности, т. е. $(xy)z = x(yz)$. Непустое подмножество T в полугруппе S называется *подполугруппой*, если из того, что $x, y \in T$ следует, что $xy \in T$.

Элемент $\mathbf{1}$ полугруппы S называется *единицей*, если $\mathbf{1}x = x\mathbf{1} = x$ для всех $x \in S$. *Моноидом* называется полугруппа с единицей. Подполугруппа моноида, содержащая единицу, называется *подмоноидом*. Отображение полугрупп (моноидов) $f : S \to T$ называется *гомоморфизмом полугрупп* (*моноидов*), если $f(xy) = f(x)f(y)$ (и дополнительно $f(\mathbf{1}_S) = \mathbf{1}_T$, где $\mathbf{1}_S$, $\mathbf{1}_T$ — единицы моноидов S, T соответственно). Элемент 0 полугруппы S называется *нулем полугруппы*, если $0x = x0 = 0$ для всех $x \in S$. При этом предполагается, что в моноиде $0 \neq 1$. Ненулевой элемент e полугруппы S называется *идемпотентом*, если $e^2 = e$.

Таким образом, каждая группа является моноидом. Однако в отличие от группы в моноиде не каждый элемент имеет обратный. Примерами моноидов являются:

1) множество всех отображений (не обязательно биективных) произвольного множества в себя;

2) множество всех натуральных (неотрицательных) целых чисел относительно умножения (сложения);

3) множество $\mathbb{C}$ (соответственно $\mathbb{R}$) всех комплексных (вещественных) чисел относительно умножения;

4) множество $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{C})$ (соответственно $\mathrm{Mat}(n, \mathbb{R})$) всех комплексных (вещественных) квадратных матриц размера n относительно умножения;

5) множество всех линейных операторов в векторном пространстве относительно умножения операторов.

Последние три моноида являются моноидами с нулем. Кроме того, множество всех неотрицательных целых чисел относительно умножения является моноидом с нулем. В этом случае единица является идемпотентом ($1^2 = 1$). Еще одним примером может служить определение кольца, введенное в подразд. 4.4: кольцом является множество M, для элементов которого определены два закона композиции: мультипликативный и аддитивный, причем по аддитивному закону M — абелева группа, а по мультипликативному — моноид.

Если векторное пространство V разлагается в прямую сумму подпространств $V = U \oplus W$, причем $U \neq 0$, то линейный оператор проекции $\mathcal{P} : V \to U$ параллельно W (см. гл. 7) является идемпотентом в моноиде линейных операторов в V.

Примером гомоморфизма моноидов является отображение $\det : \mathrm{Mat}(n, \mathbb{C}) \to \mathbb{C}$, сопоставляющее каждой матрице ее определитель.

Как и в случае групп, можно показать, что в моноиде единица единственна (см. предложение 1.1.)

У п р а ж н е н и е 6.5. Показать, что нулевой элемент в полугруппе определен однозначно.

Определение 6.6. Моноид S называется *инверсным*, если для каждого элемента $x \in S$ однозначно определен такой элемент $x^{-1} \in S$, что $xx^{-1}x = x$, $x^{-1}xx^{-1} = x^{-1}$. Подмоноид H в инверсном моноиде S называется *инверсным подмоноидом*, если из условия $x \in H$ следует $x^{-1} \in H$. Если S, T — два инверсных моноида, то гомоморфизм моноидов $f : S \to T$ называется *гомоморфизмом инверсных моноидов*, если $f(x^{-1}) = f(x)^{-1}$ для любого $x \in S$.

Укажем основной пример инверсного моноида. Пусть X — произвольное множество и $S(X)$ — множество всех биективных отображений $A \to B$, где A, B — подмножества в X, включая пустое подмножество $\{\emptyset\}$. Если $\phi : A \to B$ и $\psi : C \to D$ — два биективных отображения, причем $B \cap C$ непусто, то получаем биекцию $\psi\phi\,|_{\phi^{-1}(B\cap C)} : \phi^{-1}(B \cap C) \to \psi(B \cap C)$ подмножества $\phi^{-1}(B \cap C)$ на $\psi(B \cap C)$. Если же $B \cap C = \emptyset$, то полагаем $\psi\phi = 0$, где 0 — тождественное отображение $\{\emptyset\}$ на себя. Если $\phi : A \to B$ — биективное отображение подмножеств в X, то $\phi^{-1} : B \to A$ — обратное отображение. Идемпотентами в $S(X)$ являются тождественные отображения $1_A : A \to A$, где A — произвольное непустое подмножество в X, и только они. Каждый такой элемент имеет вид $\phi\phi^{-1}$ для некоторого $\phi \in S(X)$.

Следующая теорема обобщает теорему 1.8 Кэли.

ТЕОРЕМА 6.12 (Вагнера—Престона). Пусть S — произвольный инверсный моноид. Тогда существует инъективный гомоморфизм $f : S \to S(X)$ для некоторого множества X [50, с. 31].

Как отмечено в [50], в любом инверсном моноиде S выполняются тождества

$$(x^{-1})^{-1} = x, \quad (xy)^{-1} = y^{-1}x^{-1}, \quad (xx^{-1})(yy^{-1}) = (yy^{-1})(xx^{-1})$$

для всех $x, y \in S$.

Определение 6.7. Элемент x моноида S называется *обратимым*, если существует такой элемент x^{-1}, называемый *обратным*, что $xx^{-1} = x^{-1}x = 1$.

Упражнение 6.6. Доказать, что в любом моноиде все обратимые элементы образуют группу.

Пусть Q — квазикристалл. Свяжем с ним инверсный моноид $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$.

Пусть $E = U \oplus U^{\perp}$, K, $\mathcal{P}$, Q из определения 6.3. Под *инверсным моноидом симметрий квазикристалла* мы будем понимать подмножество $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ в группе $\mathrm{Aff}\, E$, состоящее из аффинных преобразований Φ гиперпространства E, удовлетворяющих следу-

ющим условиям: имеются такие подмножества $A, B \subseteq (K \times U) \cap M$, что Φ биективно отображает A на B. Поскольку ортогональная проекция $\mathcal{P}$ биективно отображает $(K \times U) \cap M$ на Q, то Φ определяет элемент инверсного моноида $S(Q)$. Легко проверяется следующее предложение

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.12. $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ является инверсным подмоноидом в инверсном моноиде $S((K \times U) \cap M)$ множества $(K \times U) \cap M$. Группа обратимых элементов в $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ совпадает с группой $\operatorname{Sym} Q$.

ТЕОРЕМА 6.13. Пусть $E = U \oplus U^{\perp}$, M, K, $\mathcal{P}$, Q из определения 6.2. Предположим, что $a \in (U \oplus K) \cap M$, причем некоторая ε-окрестность точки a в E содержится в $U \oplus K$. Пусть Φ — такое аффинное преобразование гиперпространства E, что:

1) $\Phi(a) \in (U \oplus K) \cap M$,

2) ε-окрестность точки $\Phi(a)$ в E также содержится в $U \oplus K$,

3) физическое пространство U инвариантно относительно дифференциала $d\Phi$.

Тогда существует такое бесконечное подмножество элементов $p \in (U \oplus K) \cap M$, что $\Phi(p) \in (U \oplus K) \cap M$.

Доказательство. Предположим, что $\Phi(x) = \phi(x) + b$, где $b \in E$ и $\phi = d\Phi$ — обратимый линейный оператор в E. Как и в (6.1) обозначим $\|\phi\|$ норму оператора ϕ. В силу свойства несоизмеримости квазикристалла можно построить такую последовательность элементов

$$z_i = x_i + y_i \in M, \quad x_i \in U,\ y_i \in U^{\perp},$$

где i — целые неотрицательные числа, что $z_0 = 0$ и

$$\frac{\varepsilon}{\|\phi\|} > \|y_1\| > \|y_2\| > \cdots$$

При этом $a + z_i \in (U \oplus K) \cap M$ и, кроме того, все точки z_i различны.

Имеем

$$\Phi(a + z_i) = \Phi(a) + \phi(z_i) = \Phi(a) + \phi(x_i) + \phi(y_i).$$

По условию $\phi(x_i) \in U$ и $\|\phi(y_i)| < \|\phi\| \, \|y_i\| < \varepsilon$. Следовательно, $\Phi(a + z_i) \in (U \oplus K) \cap M$. Искомым множеством является множество всех точек $a + z_i$ (i — целые неотрицательные числа).

Близкий подход к изучению симметрий квазикристаллов изложен в [107].

6.4. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ГРУППА ПЕРЕНОРМИРОВОК

В подразд. 6.3 был приведен пример инвариантности бесконечного двумерного узора Пенроуза (см. рис. 6.4) относительно масштабных преобразований: увеличения либо уменьшения в τ^{4n} раз (где $\tau = 2\cos(\pi/5) = 1,618\ldots$). Инвариантностью относительно изменения масштаба аргумента x обладают *однородные* функции $f(x)$, для которых

$$S_\lambda f(x) = f(\lambda x) = g(\lambda) f(x),$$

где λ — параметр растяжения или сжатия шкалы переменной x:

$$S_{\lambda\mu} = f(\lambda\mu x) = g(\lambda) f(\mu x) = g(\lambda) g(\mu) f(x) = g(\lambda\mu) f(x),$$

т. е.

$$g(\lambda)g(\mu) = g(\lambda\mu), \quad \text{или} \quad S_{\lambda\mu} = S_\lambda S_\mu. \tag{6.30}$$

Так, для квадратичной функции $f(x) = ax^2$

$$f(\lambda x_0) = a\lambda^2 x_0^2 = \lambda^2 f(x_0),$$

т. е. ее значение в любой точке $x = \lambda x_0$ можно получить из $f(x_0)$ умножением на λ^2, сама же парабола ax^2 при таком преобразовании не изменяется (рис. 6.5). Можно доказать, что условие (6.30) справедливо только при $g(\lambda) = \lambda^p$, т. е.

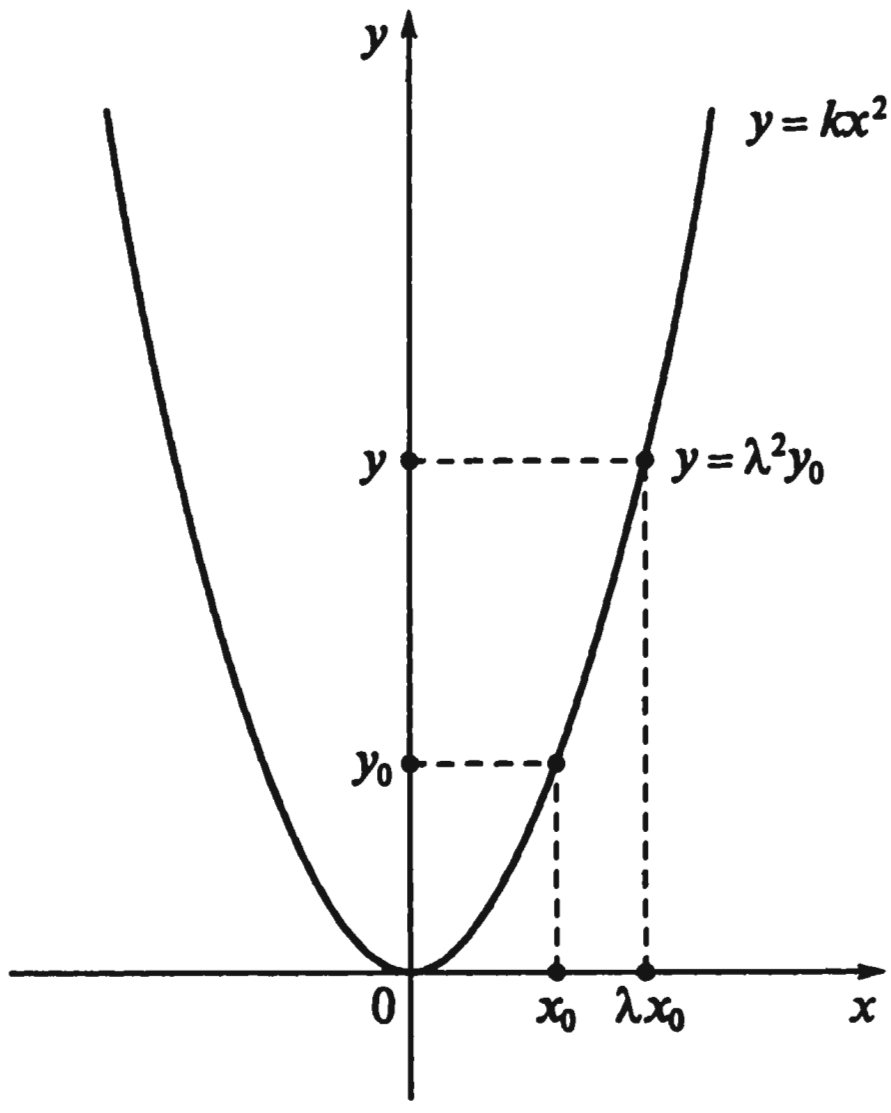


Рис. 6.5. Квадратичная парабола как пример однородной функции

$$f(\lambda x) = \lambda^p f(x), \tag{6.31}$$

где p — *степень однородности* функции $f(x)$.

Масштабные преобразования (6.31) с операцией композиции образуют бесконечную однопараметрическую абелеву группу (см. (6.30)), где $\lambda = 1$ соответствует тождественному преобразованию, а λ^{-1} — преобразованию, обратному S_λ:

$$S_\lambda^{-1} S_\lambda f(x) = (\lambda^{-1}\lambda)^p f(x) = (\lambda\lambda^{-1})^p f(x) = S_\lambda S_\lambda^{-1} f(x) \equiv f(x).$$

Для *обобщенно-однородной* функции нескольких переменных

$$f(\lambda^{p_1} x_1, \ldots \lambda^{p_n} x_n) = \lambda f(x_1, \ldots x_n),$$

где $p_1, \ldots, p_n$ — степени однородности. Однородную функцию двух переменных можно преобразовать к виду

$$f(x,y) = x^a f(1, \frac{y}{x}) = x^a F_1(z) = y^b f(\frac{x}{y}, 1) = y^b F_2(z),$$

где $F_1(z) = f(1,z)$, $F_2(z) = f(z,1)$, $a = p_1$, $b = p_2$.

Преобразования подобия используют, в частности, для описания критических явлений при фазовых переходах. Экспериментально установлено, что все фазовые переходы 2-го рода можно разделить на несколько классов эквивалентности. В каждом таком классе для процессов, весьма разных по физической природе (например, переходы газ $\leftrightarrows$ жидкость и парамагнетик $\leftrightarrows$ ферромагнетик), вблизи критической температуры T_c наблюдаются почти одинаковые степенные зависимости параметров системы от обобщенных термодинамических сил (см. подразд. 5.3.1). Например, для систем газ $\leftrightarrows$ жидкость выполняются соотношения

$$c_V = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_V \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{-\alpha} = \tau^{-\alpha},$$

$$K_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T \sim \tau^{-\gamma};$$

для системы парамагнетик $\leftrightarrows$ ферромагнетик

$$c_{H=\text{const}} = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{H=\text{const}} \sim \tau^{-\alpha},$$

$$\chi_T = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T \sim \tau^{-\gamma},$$

где τ — приведенная температура; c_V — изохорная теплоемкость системы жидкость — газ; K_T — коэффициент изотермической

сжимаемости системы жидкость — газ; $c_{H=\text{const}}$ — теплоемкость магнетика в постоянном магнитном поле; χ_T — его магнитная восприимчивость в нулевом внешнем поле (см. подразд. 5.3.1); $\alpha \sim 0{,}1-0{,}2$; $\gamma \sim 1{,}1-1{,}4$ и $T > T_c$.

Характерный размер флуктуаций параметра порядка в системе (например, плотности $\rho(\vec{r})$ для перехода газ↔жидкость), называемый *корреляционным радиусом* r_c, при $T \to T_c$ также возрастает по обратному степенному закону:

$$r_c = \begin{cases} \xi_0 \tau^{-\nu}, & T < T_c, \\ \xi_0' (-\tau)^{-\nu'}, & T > T_c, \end{cases}$$

где $\nu \simeq \nu'$, но $\xi_0 \neq \xi_0'$. Экспериментально определяемые критические показатели систем внутри одного класса эквивалентности (α, γ, ν, ξ_0, и т. д.) однотипно взаимосвязаны и могут быть выражены через небольшое число независимых параметров.

Степенные зависимости критических параметров удается воспроизвести на основе *гипотезы подобия*, в соответствии с которой потенциал Гиббса G в окрестности T_c является обобщенной однородной функцией термодинамических сил. В частности, для магнитного перехода $G(\lambda^a \tau, \lambda^b H) = \lambda G(\tau, H)$ (где τ — приведенная температура, H — напряженность магнитного поля). Вывод соотношений между параметрами такой системы и степенями однородности потенциала (a, b) см. [84, гл. 11].

Из гипотезы подобия вытекает, что физические свойства околокритических систем с короткодействующими межчастичными потенциалами лишь слабо зависят от природы взаимодействий частиц в системе, определяясь в первую очередь симметрией параметра порядка и числом термодинамических степеней свободы (*свойство универсальности*). Размеры флуктуаций r_c в таких системах много больше среднего размера d составляющих микрочастиц (атомов, молекул, звеньев полимерной цепи и др.), тогда как радиус действия потенциалов частиц $\sim d$. В этом случае распределение размеров x флуктуаций параметра порядка (плотности $\rho(\vec{r})$ в системе газ↔жидкость, спиновой плотности $\sigma(\vec{r})$ в магнетике и др.) приближенно инвариантно относительно изменений масштаба x в интервалах расстояний $d \ll x \ll r_c$ (*свойство автомодельности*).

Масштабная инвариантность не означает инвариантности измеримых параметров системы: так, суммарное магнитное поле домена с параллельными спинами много больше поля единичного спина.

Однако для масштабно-инвариантных систем можно построить физические модели, инвариантные относительно специаль-

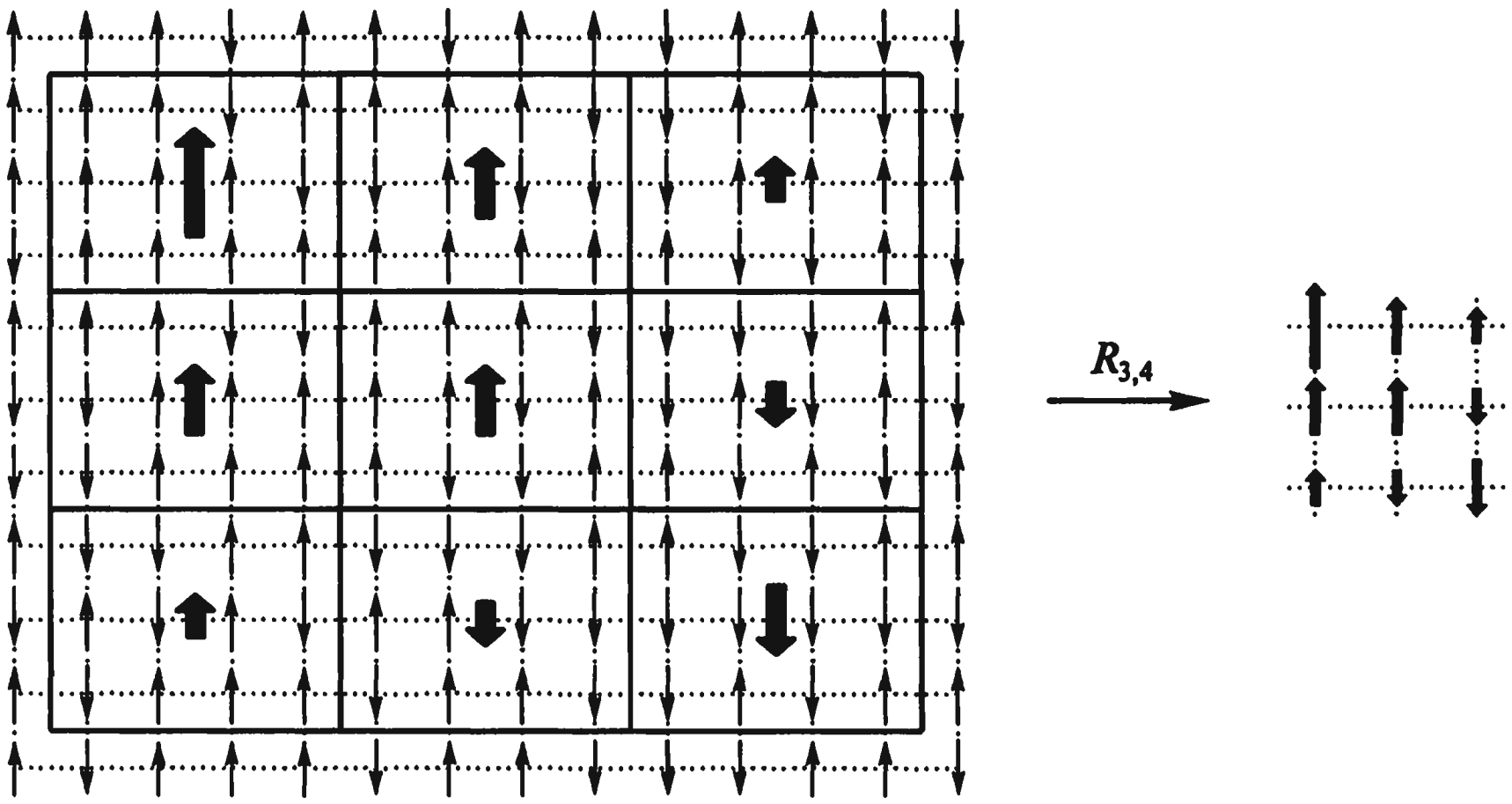


Рис. 6.6. Перенормировка в модели Изинга (преобразование Каданова [84, гл. 12])

ной операции *перенормировки*: одновременного изменения масштаба координат $x \to x' = sx$ и потенциала взаимодействий $\phi \to \phi' = g(s)\phi$, где $g(s)$ — непрерывная функция. В частности, гамильтониан спиновых взаимодействий в решеточной модели Изинга (см. подразд. 5.3.6) инвариантен относительно одновременной замены ячеек более крупными блоками (при которой расстояния между соседними блоками по-прежнему полагают равными 1) и пропорционального уменьшения среднего спина в каждом блоке:

$$a(=1) \to b = sa,$$

$$\sigma_i \to \sigma'_i = \frac{1}{s^m} \sum_j \sigma_{ij},$$

где m — число измерений решетки (преобразование Каданова, рис. 6.6).

На m-мерной обратной решетке этой модели преобразования Каданова эквивалентны пренебрежению «коротковолновыми» флуктуациями с модулем вектора $k < 2\pi/(sa)$.

Перенормировки гамильтониана при последовательном объединении ячеек в блоки ассоциативны ($R_{s_1 s_2} = R_{s_1} R_{s_2}$), а отсутствие перенормировки служит тождественным преобразованием R_1. Операции $\{R_i\}$ образуют так называемую *группу перенормировок*, или *ренормгруппу*, G_R — в данном случае дискретный моноид, поскольку обратная операция «измельчения» блоков не определена.

Применение ренормгрупп для расчета критических индексов (*ε-разложение*) основано на поиске *неподвижных точек* в про-

странстве параметров системы μ^*, инвариантных относительно перенормировок $R \in G_R$:

$$R_s\mu^*(T,\rho) \xrightarrow{T\to T_c} \mu^*,$$

(где ρ — параметр порядка), и анализе топологических характеристик этих точек*. Современные теории критических явлений представлены в [53, гл. 11; 60; 84]. Помимо описания фазовых переходов группы перенормировок используются в физике полимеров, квантовой теории поля, гидродинамике и теории вероятностей.

В более строгих терминах *ренормгруппой*, или *ренормализационной* группой, называется одномерная (однопараметрическая) группа преобразований случайных полей, сопряженная к группе масштабных преобразований пространства значений случайных функций, заданных на подмножестве некоторого многомерного пространства. Под случайным полем в этом определении понимается случайное отображение из некоторого подмножества в $\mathbb{R}^d$ в $\mathbb{R}^m$.

Обычно рассматривается два случая: дискретный и непрерывный. В дискретном случае случайное поле ξ является отображением $\xi : \mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}^m$. *Масштабное преобразование порядка* n с показателем α действует в пространстве всех отображений $\mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}^m$. Оно является линейным и задается по правилу $\xi(x) \mapsto \mapsto \xi_n^{(\alpha)}(x)$, где для $x = (x_1, \ldots, x_d) \in \mathbb{Z}^d$ имеем

$$\xi_n^{(\alpha)}(x) = (n^d)^{-\alpha} \sum_{x_1 = nx_1+1}^{n(x_1+1)} \cdots \sum_{x_d = nx_d+1}^{n(x_d+1)} \xi(y_1, \ldots, y_d).$$

Поле $\xi_n^{(\alpha)}(x)$ называется *ренормализационным преобразованием поля* $\xi(x)$. Пусть μ — вероятностное распределение поля $\xi(x)$. Вероятностное распределение $\mu_n^{(\alpha)}$ случайного поля $\xi_n^{(\alpha)}(x)$ называется *ренормализационным преобразованием вероятности распределения* μ. Ренормализационные преобразования $R_n^{(\alpha} : \mu \to \mu_n^{(\alpha)}$ при фиксированном α образуют циклическую мультипликативную группу преобразований пространства распределений с показателем α. Указанная групповая структура означает, что $R_n^{(\alpha)} R_k^{(\alpha)} = R_{n+k}^{(\alpha)}$ для всех $n, k \in \mathbb{Z}$.

В непрерывном случае рассматриваются обобщенные случайные поля. Напомним, что *обобщенным случайным полем* называется непрерывный линейный функционал на пространстве

---

*См. *Рудой Ю. Г.* Физическая энциклопедия. М.: Сов. энциклопедия, 1990. Т. 5. С. 621—624.

$C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ всех бесконечно дифференцируемых отображений $\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^m$, обращающихся в нуль вне некоторого шара. *Масштабное преобразование порядка* λ с показателем α в непрерывном случае действует в пространстве всех обобщенных полей $\xi(x)$ на $\mathbb{R}^d$. Оно также является линейным и задается по правилу

$$\xi(x) \mapsto \xi_\lambda^{(\alpha)}(x) = \lambda^{(\alpha-1)d}\xi(\frac{x}{\lambda}),$$

где

$$\left(\xi(\frac{x}{\lambda}), \phi(x)\right) = \lambda^d \left(\xi(x), \phi(\lambda x)\right)$$

— значение функционала $\xi(\frac{x}{\lambda})$ на пробной функции $\phi(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Вероятностное распределение $\mu_\lambda^\alpha = R_\lambda^\alpha(\mu)$ поля $\xi_\lambda^{(\alpha)}(x)$ называется ренормализационным преобразованием вероятности распределения μ поля $\xi(x)$. Как и в дискретном случае, все ренормализационные преобразования $R_n^{(\alpha)} : \mu \to \mu_n^{(\alpha)}$ при фиксированном α образуют коммутативную (однопараметрическую) мультипликативную группу преобразований пространства распределений с показателем α.

Групповая структура означает, что $R_\lambda^{(\alpha)} R_\eta^{(\alpha)} = R_{\lambda+\eta}^{(\alpha)}$ для всех $\lambda, \eta \in \mathbb{R}$. Пределы $\lim_{\lambda\to\infty} R_\lambda^{(\alpha)}\mu$ и $\lim_{\lambda\to 0} R_\lambda^{(\alpha)}\mu$ называются соответственно *крупномасштабным* и *мелкомасштабным автомодельными пределами* распределения μ.

В квантовой теории поля ренормгруппа является группой преобразований *функции Грина* G и параметров модели (констант связи квантовых полей, масс соответствующих им частиц и т. д.). Напомним, что функцией Грина называется фундаментальное решение уравнения Шредингера с краевыми условиями (или ядро интегрального оператора, обратного оператору Шредингера). В частности, функция Грина скалярного поля является решением неоднородного уравнения Клейна — Гордона

$$\left[\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} - M^2\right] G(x) = -\delta(x),$$

т. е. (см. подразд. 5.5.1):

$$G(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{\exp(-ikx)}{M^2 - k^2} dk.$$

В общем случае случае множители перенормировки функции $G(x)$ и констант связи не равны между собой. Более подробно о применениях ренормгруппы в физике, например, при исследовании возмущений, см. [6, с. 312 — 319; 60, гл. 5, 8, 12; 108; 109; 110; 111; 112].

6.5. ЛИНЕЙНЫЕ ГРУППЫ И АЛГЕБРЫ ХОПФА

В подразд. 4.1 линейная группа Ли G определена как подгруппа в группе матриц $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, заданная системами уравнений вида (4.2). Но одну и ту же линейную группу G можно рассматривать как подгруппу в различных группах невырожденных матриц, задаваемых разными системами уравнений. Для поиска наиболее разумной системы уравнений нужно охарактеризовать группу G внутренним, инвариантным образом. В качестве такой «внутренней» характеристики выступает особая алгебра функций на группе: *алгебра Хопфа*. В этих терминах можно задать, например, касательное пространство в единичном элементе и структуру алгебры Ли на нем.

В 1980-х гг. изучение алгебр Хопфа привело к созданию нового направления — теории квантовых групп, связанных с решением обратной задачи теории рассеяния.

Для простоты изложения мы будем рассматривать только комплексный случай алгебры функций, представимых многочленами, на линейной группе G. Пусть G является подмножеством в алгебре матриц $\mathrm{Mat}(n,\mathbb{C})$, задаваемым системой уравнений вида (4.2). Рассмотрим множество $H = \mathbb{C}[G]$ всех функции на G, являющихся многочленами от элементов матриц из G.

Две такие функции считаются одинаковыми, если их значения на каждой матрице из G одинаковы. Заметим, что H является ассоциативной коммутативной алгеброй с единичным элементом.

Как отмечено в теореме 4.3, произведение $G \times G$ снова является линейной группой, причем $\mathbb{C}[G \times G] \simeq \mathbb{C}[G] \otimes \mathbb{C}[G]$ по теореме 4.11.

Введем гомоморфизмы алгебр

$$\varepsilon : H \to \mathbb{C}, \quad \Delta : H \to H \otimes H, \tag{6.32}$$

которые задаются по следующему правилу: если функция $f \in H$ и матрицы $x, y \in G$, то

$$\varepsilon(f) = f(1), \quad [\Delta(f)]\,(x,y) = f(xy), \tag{6.33}$$

и которые переводят единичный элемент в единичный. При определении Δ мы учитываем, что $H \otimes H$ совпадает с алгеброй функций $\mathbb{C}[G \times G]$ на прямом произведении $G \times G$. Непосредственная проверка, использующая, в частности, ассоциативность умножения в группах и свойства единичного элемента, показывает, что коммутативны диаграммы

$$\begin{array}{ccc} H & \xrightarrow{\Delta} & H\otimes H \\ {\scriptstyle\Delta}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle\Delta\otimes 1} \\ H\otimes H & \xrightarrow{1\otimes\Delta} & H\otimes H\otimes H \end{array}, \qquad \begin{array}{ccc} H & \xrightarrow{\Delta} & H\otimes H \\ {\scriptstyle\Delta}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle e\otimes 1} \\ H\otimes H & \xrightarrow[1\otimes e]{} & H \end{array}. \tag{6.34}$$

(Коммутативность диаграммы означает, что произведения гомоморфизмов в направлениях, указанных стрелками и имеющих одинаковое начало и конец, равны и не зависят от выбранных путей, см. подразд. 1.8. Например, коммутативность диаграммы (6.34) означает, что $(\Delta\otimes 1)\Delta = (1\otimes\Delta)\Delta$). В диаграммах (6.34) 1 означает тождественное отображение H в себя. Гомоморфизм ε из (6.32) и (6.33) называется *коединицей*, а гомоморфизм Δ — *коумножением*. Кроме того, в H имеется линейный оператор $S : H \to H$, называемый *антиподом*, при котором $[S(f)](x) = f(x^{-1})$ для всех $f \in H$, $x \in G$.

Непосредственно доказывается следующее утверждение:

П Р Е Д Л О Ж Е Н И Е 6.13. Если $f, h \in H = \mathbb{C}[G]$, то

$$S(fh) = S(h)S(f), \quad S(1) = 1, \quad \varepsilon[S(f)] = \varepsilon(f).$$

В этом случае коммутативна диаграмма

$$\begin{array}{ccccccc} & & & \overset{\varepsilon}{\frown} & & & \\ H & \xrightarrow{\Delta} & H\otimes H & \underset{1\otimes S}{\overset{S\otimes 1}{\rightrightarrows}} & H\otimes H & \xrightarrow{m} & H, \end{array} \tag{6.35}$$

где $m : H\otimes H \to H$ — линейное отображение умножения, т. е. $m(x\otimes y) = xy$ для всех $x, y \in H$.

Кроме того, коммутативна диаграмма

$$\begin{array}{ccccc} H & \xrightarrow{S} & H & \xrightarrow{\Delta} & H\otimes H \\ {\scriptstyle\Delta}\downarrow & & & & \downarrow{\scriptstyle\tau} \\ H\otimes H & \xrightarrow[S\otimes S]{} & H\otimes H & = & H\otimes H \end{array}, \tag{6.36}$$

где линейный оператор τ задается по правилу $\tau(a\otimes b) = b\otimes a$ для всех $a, b \in A$.

Условие коммутативности (6.35) означает, что $m(1\otimes S)\Delta(x) = \varepsilon(x) = m(S\otimes 1)\Delta(x)$ для всех $x \in H$. Эти свойства позволяют ввести следующее определение.

О п р е д е л е н и е 6.8. Ассоциативная алгебра H с единицей называется *алгеброй Хопфа*, если в ней имеются гомоморфизмы

алгебр из (6.32) антипод S, причем коммутативны диаграммы (6.34), (6.35). Элемент $g \in H$ называется *групповым*, если $\Delta(g) = g \otimes g$ и $\varepsilon(g) \neq 0$. Через $G(H)$ обозначим множество всех групповых элементов. Элемент $h \in H$ называется *примитивным*, если $\Delta(h) = h \otimes 1 + 1 \otimes h$. Через $P(H)$ обозначим множество всех примитивных элементов из H.

Коумножение Δ часто обозначают следующим образом: если $x \in H$, то

$$\Delta(x) = \sum_x x_1 \otimes x_2 \in H \otimes H, \quad x_1, x_2 \in H. \tag{6.37}$$

Отметим ряд свойств групповых и примитивных элементов алгебры Хопфа H.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.14. Множество $G(H)$ является группой относительно умножения в H, причем $\varepsilon(g) = 1$ для всех $g \in G(H)$. Множество $P(H)$ является алгеброй Ли относительно умножения $[x, y] = xy - yx$, причем $\varepsilon(x) = 0$ для всех $x \in P(H)$.

Доказательство. Если $g_1, g_2 \in G(H)$, то

$$\Delta(g_1 g_2) = \Delta(g_1)\Delta(g_2) = (g_1 \otimes g_1)(g_2 \otimes g_2) = g_1 g_2 \otimes g_1 g_2,$$

т. е. $g_1 g_2 \in G(H)$. В силу (6.35) получаем, что $\varepsilon(g) = S(g)g$. Кроме того, $\varepsilon(g) = \varepsilon(g)\varepsilon(g)$. Так как $\varepsilon(g) \neq 0$, то $\varepsilon(g) = 1$, поэтому $S(g) = g^{-1}$. По свойству (6.36) получаем, что $g^{-1} \in G(H)$.

Предположим, что $x, y \in P(H)$. Тогда

$$\Delta([x, y]) = \Delta(x)\Delta(y) - \Delta(x)\Delta(y) =$$
$$= (x \otimes 1 + 1 \otimes x)(y \otimes 1 + 1 \otimes y) - (y \otimes 1 + 1 \otimes y)(x \otimes 1 + 1 \otimes x) =$$
$$= xy \otimes 1 + y \otimes x + x \otimes y + 1 \otimes xy - yx \otimes 1 - x \otimes y - y \otimes x - 1 \otimes yx =$$
$$= (xy - yx) \otimes 1 + 1 \otimes (xy - yx) = [x, y] \otimes 1 + 1 \otimes [x, y],$$

т. е. $[x, y] \in P(H)$. При этом по (6.34)

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x)\varepsilon(1) + \varepsilon(1)\varepsilon(x) = 2\varepsilon(x),$$

откуда вытекает, что $\varepsilon(x) = 0$.

Определение 6.9. Пусть H — алгебра Хопфа. Обозначим H^0 множество всех линейных функционалов f (см. гл. 7) на H, ядро $\ker f$ которых содержит такой идеал $I \lhd H$, что размерность фактор-алгебры H/I конечна. На множестве H^0 вводятся операции умножения $f * g$, коумножения Δ^*, антипод S^* и коединица ε^* по следующим правилам. Если $x \in H$, то, пользуясь обозначением (6.37), получаем, что $(f * g)(x) = \sum_x f(x_1)g(x_2)$. Далее, если $f \in H^0$ и $x, y \in H$, то

$$[\Delta^*(f)]\,(x\otimes y) = f(xy). \tag{6.38}$$

Наконец,

$$(S^*f)(x) = f(Sx) = f(x^{-1}), \quad \varepsilon^*(f) = f(\mathbf{1}). \tag{6.39}$$

Построенная алгебра H^0 называется *дуальной алгеброй Хопфа* для H.

В [122, § 1.2, § 9.1] показано, что единичным элементом в H^0 является коединица ε. Рассмотрим в дуальной алгебре Хопфа H^0 групповые элементы $G(H^0)$ и примитивные элементы $P(H^0)$. Для этого обозначим $\mathrm{Alg}(H,\mathbb{C})$ множество всех гомоморфизмов алгебр $H \to \mathbb{C}$, переводящих единичный элемент H в $1 \in \mathbb{C}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.15. $G(H^0) = \mathrm{Alg}(H,\mathbb{C})$.

Доказательство. Пусть $f \in G(H^0)$. Тогда $\Delta^*(f) = f \otimes f$. В силу (6.38) последнее равенство означает, что $f(xy) = f(x)f(y)$, т. е. $f \in \mathrm{Alg}(H,\mathbb{C})$, причем $f(\mathbf{1}) = 1$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.16. $P(H^0)$ совпадает с множеством всех линейных функционалов f на $\ker\varepsilon$, принимающих нулевое значение на $(\ker\varepsilon)^2$, т. е. на суммах произведений двух элементов из $\ker\varepsilon$, причем

$$\varepsilon^*(f) = f(\mathbf{1}) = 0. \tag{6.40}$$

Доказательство. Пусть $f \in P(\ker\varepsilon)$. Тогда

$$\Delta^*(f) = f\otimes\varepsilon + \varepsilon\otimes f.$$

Следовательно, по (6.38) и (6.39) получаем для любых $x, y \in H$, что $f(xy) = f(x)\varepsilon(y) + \varepsilon(x)f(y)$. В частности, если $x, y \in \ker\varepsilon$, то $f(xy) = 0$, т. е. ядро $\ker f \supseteq (\ker\varepsilon)^2$. Кроме того, по предложению 6.14 выполнено условие (6.40). Очевидно, что верно и обратное утверждение.

Рассмотрим два элемента $f, g \in P(H^0)$ и вычислим $[f,g] \in \in P(H^0)$. Если $x \in H$ и $\Delta(x)$ из (6.37), то по (6.34) получаем, что

$$\Delta(x) = \sum_x \{\varepsilon(x_1)\otimes\varepsilon(x_2) + \varepsilon(x_1)\otimes x_2 + x_1\otimes\varepsilon(x_2) + \\ + [x_1 - \varepsilon(x_1)]\otimes[x_2 - \varepsilon(x_2)]\} = \\ = \varepsilon(x) + \mathbf{1}\otimes x + x\otimes\mathbf{1} + \sum_x [x_1 - \varepsilon(x_1)]\otimes[x_2 - \varepsilon(x_2)]\,.$$

Поэтому в силу предложения 6.16 и (6.38)

$$[f,g](x) = (f*g)(x) - (g*f)(x) =$$
$$\sum_x [f(x_1 - \varepsilon(x_1))g(x_2 - \varepsilon(x_2)) - g(x_1 - \varepsilon(x_1))f(x_2 - \varepsilon(x_2))]. \quad (6.41)$$

ТЕОРЕМА 6.14. Пусть $H = \mathbb{C}[G]$ — алгебра функций на линейной группе G. Тогда $G(H^0) = \mathrm{Alg}(H, \mathbb{C}) = G$ и $T_G(E) = P(H^0)$.

Доказательство. Пусть группа G как подгруппа в $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ задается системой уравнений (4.2). Обозначим через I идеал в

$$\mathbb{C}[X_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n],$$

построенный по системе многочленов (4.2), как и в теореме 4.9. Тогда

$$\mathbb{C}[G] = \mathbb{C}[X_{rs} \mid 1 \leqslant r, s \leqslant n]/I$$

по теореме 4.10. Если $A \in G$, то отображение $f \mapsto f(A)$ задает гомоморфизм из $\mathbb{C}[G]$ в $\mathbb{C}$. Обратно, если задан гомоморфизм $\psi : \mathbb{C}[G] \to \mathbb{C}$, и элемент $f \in H$ можно представить многочленом $f(X_{rs})$, то $\psi(f) = f(\psi(X_{rs}))$. Поэтому $\psi(f) = f(A)$, где $A = (a_{rs} = \psi(X_{rs}))$.

При этом для любого многочлена $f_i(X_{rs})$ из системы уравнений (4.2), задающих нулевую функцию на G, получаем, что $f_i(A) = 0$. Таким образом, $A \in G$.

Рассмотрим теперь $T_G(E)$. По предложению 6.16 $P(H^0)$ состоит из всех линейных функционалов l на H, принимающих нулевое значение на числе 1 и на $(\ker \varepsilon)^2$. Если $h \in H$, то из разложения в ряд Тейлора получаем

$$h = h(E) + (dh)\,|_E\,(X - E) + o(X - E),$$

где $(dh)|_E(X - E)$ — дифференциал h в точке E:

$$(dh)\,|_E\,(X - E) = \sum_{r,s} \frac{\partial h}{\partial X_{rs}}(E)(X_{rs} - \delta_{rs});$$

$o(X - E)$ — малая величина следующего порядка от $X - E$, т. е. $o(X - E) \in (\ker \varepsilon)^2$.

Таким образом:

$$l(h) = \sum_{r,s} \frac{\partial h}{\partial X_{rs}}(E) l(X_{rs} - \delta_{rs}).$$

Необходимо учесть, что если f_i из (4.2), то $l(f_i) = 0$. Поэтому для каждого $i = 1, \ldots, N$ выполнено равенство

$$\sum_{r,s} \frac{\partial f_i}{\partial X_{rs}}(E) l(X_{rs} - \delta_{rs}) = 0.$$

В силу (4.6) в определении 4.1 получаем, что матрица

$$dX = (dX_{rs} = l(X_{rs} - \delta_{rs})) \in T_G(E).$$

Очевидно, что верно и обратное рассуждение.

Покажем, что операции умножения $[A, B] = AB - BA$ в $T_G(E)$ и в $P(H^0)$ совпадают. Действительно, пусть $f, g \in$ $\in P(H^0)$. Тогда эти функционалы отождествляются с элементами матриц dX и dY:

$$(dX_{rs} = f(X_{rs} - \delta_{rs}), \quad dY_{rs} = f(X_{rs} - \delta_{rs})$$

из $T_G(E)$. Вычислим $[dX, dY] \in T_G(E)$. У этой матрицы на месте (r, s) стоит элемент

$$\sum_{t=1}^{n} \{dX_{rt} \cdot dY_{ts} - dX_{rt} \cdot dY_{ts}\} =$$

$$= \sum_{t=1}^{n} \{f(X_{rt} - \delta_{rt}) g(Y_{ts} - \delta_{ts}) - g(X_{rt} - \delta_{rt}) f(Y_{ts} - \delta_{ts})\}. \quad (6.42)$$

Для любых матриц $A, B \in G$ и функции $X_{rs} \in H$ по (6.33) элемент

$$\Delta(X_{rs})(A \otimes B) = X_{rs}(AB)$$

стоит на месте (r, s) в произведении матриц. Поэтому в силу (6.41) получаем, что (6.5.) равно

$$[f, g](X_{rs}) = [f, g](X_{rs} - \delta_{rs}),$$

т. е. элементу, соответствующему коммутатору в $P(H^0)$.

Как отмечено в следствии из теоремы 4.10 (подразд. 4.4), каждый гомоморфизм линейных групп $f : G \to F$ индуцирует гомоморфизм алгебр $f^0 : \mathbb{C}[F] \to \mathbb{C}[G]$. Нетрудно проверить, что гомоморфизм f^0 является *гомоморфизмом алгебр Хопфа*, т. е.

$$(f^0 \otimes f^0)\Delta = \Delta f^0, \quad f^0 \varepsilon = \varepsilon f^0, \quad S f^0 = f^0 S.$$

Следовательно, $f^{0*} : \mathbb{C}(G)^0 \to \mathbb{C}(F)^0$, причем при отождествлении G и F с $\mathrm{Alg}(H, \mathbb{C})$ и с $\mathrm{Alg}(F, \mathbb{C})$ по теореме 6.14 действие f^{0*} совпадает с f. Аналогично, при отождествлении $T_G(E)$ с $P(\mathbb{C}[G]^0)$, а $T_F(E)$ с $P(\mathbb{C}[F]^0)$ действие f^{0*} совпадает с дифференциалом df из теоремы 4.5.

Упражнение 6.7. Доказать все сформулированные выше утверждения о f^{0*}.

Таким образом, теорию линейных групп и их представлений можно развивать в рамках теории алгебр Хопфа. В этом случае мы получаем «инвариантную» теорию, не зависящую от реализации линейной группы как подгруппы в $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, поскольку алгебра Хопфа функций $\mathbb{C}[G]$ не зависит от конкретного представления.

Применения алгебр Хопфа в физике и, в частности, связи с ренормгруппой, обсуждаются в [108, 110, 111, 112, 119].

6.6. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ГРУППЫ

На примере критических явлений (подразд. 6.4) можно видеть, что некоторые свойства физических систем нечувствительны к конкретной форме взаимодействий между составными частями системы (и, следовательно, к небольшим изменениям их взаимного расположения), а определяются в первую очередь топологическими характеристиками системы: размерностью и связностью. В описании таких свойств используются как групповой, так и топологический формализм [59, 94].

В этом разделе мы познакомим читателя с группами, возникающими в геометрии и топологии, в терминах которых дается характеризация свойств топологических пространств, в частности, различных гладких многообразий. Будем предполагать, что читатель знаком с основными понятиями топологии: топологическое пространство, хаусдорфово пространство, непрерывное отображение, гомеоморфизм и т. д. [75].

6.6.1. Группы (ко)гомологий

Гладким многообразием называется хаусдорфово топологическое пространство M, в котором для каждой точки $x \in M$ существует окрестность $U_x \subset M$, гомеоморфная внутренности шара S_x в евклидовом пространстве $\mathbb{R}^d$. Постоянное число d называется *размерностью многообразия* M. Предполагается, что если $f : U_x \to S_x$ и $g : U_y \to S_y$ — два указанных гомеоморфизма, то fg^{-1} индуцирует бесконечно дифференцируемое биективное отображение $g(U_y \cap U_x)$ и $f(U_x \cap U_y)$. Примерами гладких многообразий без особенностей являются линейные группы Ли.

Назовем *n-мерным симплексом* в евклидовом пространстве множество

$$\Delta_n = \{x = (x_0, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid 0 \leqslant x_i,\ x_0 + x_1 + \cdots + x_n = 1\}.$$

В частности, Δ_0 состоит из одной точки $x_0 = 1$. *Гранью* симплекса Δ_n называется подмножество всех точек $\Delta_n(i_1, \ldots, i_k)$ из Δ_n с условием $x_{i_1} = \cdots = x_{i_k} = 0$ для некоторых $1 \leqslant i_1 < i_2 < \ldots < i_{k-1} < i_k \leqslant n$. Каждая такая грань $\Delta_n(i_1, \ldots, i_k)$ гомеоморфна симплексу Δ_{n-k}.

Сингулярным комплексом размерности n [25, § 5.4; 86, гл. 1, § 2; 94] в M называется непрерывное отображение $f : \Delta_n \to M$.

Рассмотрим свободную аддитивную абелеву группу $CS_n(M)$, базис которой составляют сингулярные комплексы размерности n. Элементы из $CS_n(M)$ называются *цепями*. Цепи являются конечными формальными суммами вида $\sum k_i f_i$, где $k_i \in \mathbb{Z}$ и $f_i : \Delta_n \to M$ — сингулярные комплексы размерности n. Имеется гомоморфизм абелевых групп $d_n : CS_n(M) \to CS_{n-1}(M)$, который задается по следующему правилу. Если $f : \Delta_n \to M$ — сингулярный комплекс размерности n, то

$$d_n(f) = \sum_{j=0}^{n} (-1)^j f\,[\Delta_n(j)] \in CS_{n-1}(M).$$

Гомоморфизм d_n называется *граничным оператором*.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.17. Для любого $n \geqslant 1$ выполнено равенство $d_{n-1} d_n = 0$. В частности, образ $\operatorname{Im} d_n$ содержится в ядре $\ker d_{n-1}$.

Элементы из образа $\operatorname{Im} d_n$ называются *границами*, а элементы из $\ker d_{n-1}$ — *циклами*. Абелева фактор-группа $\ker d_{n-1} / \operatorname{Im} d_n$ называется n-й *группой гомологий* $H_n(M)$ или n-й *группой Бетти*. Таким образом, имеется последовательность гомоморфизмов

$$\cdots \longrightarrow C_n(M) \xrightarrow{d_n} C_{n-1}(M) \xrightarrow{d_{n-1}} \cdots \xrightarrow{d_0} C_0(M) \xrightarrow{\varepsilon} \mathbb{Z},$$

где $\varepsilon(f) = 1$ для любого $f \in \Delta_0$.

Можно показать [86, с. 11], что $H_0(M)$ — свободная абелева группа, ранг которой равен числу компонент линейной связности многообразия M.

Каждое непрерывное отображение многообразий $h : M \to M'$ индуцирует гомоморфизм абелевых групп $h_n : CS_n(M) \to \to CS_n(M')$ по следующему правилу: если $f : \Delta_n \to M$ — сингулярный комплекс размерности n в M, то ему соответствует сингулярный комплекс $h_n f : \Delta_n \to M'$ размерности n в M'. При этом для любого n коммутативны диаграммы

$$\begin{array}{ccc} C_n(M) & \xrightarrow{d_n} & C_{n-1}(M) \\ \Big\downarrow{\scriptstyle h_n} & & \Big\downarrow{\scriptstyle h_{n-1}}. \\ C_n(M') & \xrightarrow{d'_n} & C_{n-1}(M') \end{array}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6.18. Для любого n имеем

$$h_n(\operatorname{Im} d_n(M)) \subseteq \operatorname{Im} d_n(M'), \quad H_n(\ker d_n(M)) \subseteq \ker d_n(M').$$

Поэтому каждый гомоморфизм h_n индуцирует гомоморфизм групп гомологий $h_n^* : H_n(M) \to H_n(M')$ для любого $n \geqslant 0$.

Назовем два непрерывных отображения многообразий $g, h : M \to M'$ *гомотопными*, если существует такое непрерывное отображение $F : M \times [0,1] \to M'$, что $g(x) = F(x,0)$, $h(x) = F(x,1)$ для всех $x \in M$.

ТЕОРЕМА 6.15. Два гомотопных непрерывных отображения $g, h : M \to M'$ индуцируют одинаковые гомоморфизмы $h_n^* = g_n^* : H_n(M) \to H_n(M')$. Таким образом, группы гомологий являются гомотопическими инвариантами многообразий [86, с. 13].

ТЕОРЕМА 6.16. Предположим, что многообразие M гомеоморфно топологическому пространству, являющемуся объединением конечного числа симплексов, которые пересекаются только по граням. Тогда каждая группа гомологий $H_n(M)$ конечно порождена.

В силу теоремы 2.4 в условиях теоремы 6.16 получаем, что каждая абелева группа $H_n(M)$ является прямой суммой свободной абелевой группы F_n и примарных циклических групп. Ранг группы F_n называется n-м *числом Бетти* многообразия M. Эти числа также являются гомотопическим инвариантами M.

Сингулярные коцепи $CS^n(M, A)$ *со значениями в абелевой группе* A определяются как группы гомоморфизмов абелевых групп $\operatorname{Hom}(CS_n(M), A)$. Граничные операторы d_n индуцируют кограничные операторы $d_*^n : CS^{n-1}(M), A) \to CS^n(M, A)$, причем $d_*^{n+1} d_*^n = 0$. Подгруппа *кограниц* $\operatorname{Im} d_*^{n-1}$ содержится в подгруппе *коцепей* $\ker d_*^n$. Поэтому можно определить n-ю *группу когомологий* $H^n(M, A)$ как фактор-группу $H^n(M, A) = \ker d_*^n / \operatorname{Im} d_*^{n-1}$.

Заметим, что если $A = \mathbb{Z}$ — аддитивная группа целых чисел, то $\operatorname{Hom}(CS_n(M), \mathbb{Z})$ является аналогом двойственного векторного пространства для группы $CS_n(M)$ (см. подразд. 7.10).

Способы вычислений групп (ко)гомологий для разных многообразий можно найти в [88; 87, гл. 2, § 13; 94]. Например, для сферы S^n имеем

$$H_i(S^n) = \begin{cases} \mathbb{Z}, & i = 0,\ n; \\ 0, & i \neq 0,\ n. \end{cases}$$

В частности, для сферы в трехмерном пространстве $(n = 2)$ получаем, что $H_i(S^2) = \mathbb{Z}$ при $n = 0, 2$ и $H_i(S^2) = 0$ при $(n = 1)$.

Рассмотрим *тор* T в трехмерном евклидовом пространстве R^3. Для этого в плоскости $z = 0$ выберем окружность S_1 радиуса 2 с центром в нуле, задаваемую уравнением $a^2 + b^2 = 4$. Затем возьмем точку $(a, b, 0)$ этой окружности в качестве центра другой окружности $S_2(a, b)$ радиуса 1, расположенной в плоскости, проходящей через ось OZ и точку $(a, b, 0)$. Тором называется множество всех точек всевозможных окружностей $S_2(a, b)$ для любых $(a, b, 0) \in S_1$ (см. рис. 4.8). Можно показать [87, гл. 2, § 15], что

$$H_0(T) = \mathbb{Z}, \qquad H_1(T) = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}, \quad H_2(T) = \mathbb{Z}.$$

В остальных случаях $H_i(T) = 0$. Учитывая приведенные выше вычисления групп гомологий двумерной сферы S^2, можем сделать вывод, что S^2 и T не гомотопны.

В заключение отметим, что группы (ко)гомологий были введены для многобразий. Но нетрудно видеть, что все эти понятия и результаты справедливы и для более общих топологических пространств.

6.6.2. Гомотопические группы

Под *n-мерным кубом*, как и раньше, будем понимать множество

$$Q_n = \{(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid 0 \leqslant x_i \leqslant 1\}.$$

Границей куба называется множество всех его точек $(x_1, \ldots, x_n)$, у которых хотя бы одна из координат равна либо 0, либо 1.

Пусть x_0 — выделенная точка топологического пространства X. Если $n \geqslant 1$, то n-й *гомотопической группой* $\pi_n(X, x_0)$ называется множество классов гомотопных отображений $f : Q_n \to X$, при которых граница Q_n переходит в точку x_0. Зададим операцию умножения в $\pi_n(X, x_0)$ по следующему правилу: если $f, g \in \in \pi_n(X, x_0)$, то зададим непрерывное отображение $fg : Q_n \to X$:

$$fg(x_1, \ldots, x_n) = \begin{cases} f(x_1, \ldots, x_{n-1}, 2x_n), & x_n \leqslant \dfrac{1}{2}, \\ g(x_1, \ldots, x_{n-1}, 2x_n - 1), & x_n \geqslant \dfrac{1}{2}. \end{cases}$$

ТЕОРЕМА 6.17. Множество $\pi_n(X, x_0)$ является группой относительно введенной операции умножения. Если $n \geqslant 2$, то группы $\pi_n(X, x_0)$ абелевы. Если точки x_0 и x_0' из X можно соединить непрерывным путем, то группы $\pi_n(X, x_0)$ и $\pi_n(X, x_0')$ изоморфны [87, с. 63].

Таким образом, для линейно связного топологического пространства X можно говорить о группе $\pi_n(X)$. Часто вместо куба Q_n берут сферу S^n с отмеченной точкой s_0 и определяют $\pi_n(X, x_0)$ как множество классов гомотопных отображений S_n в X, переводящих s_0 в x_0.

ТЕОРЕМА 6.18 (теорема Пуанкаре). Пусть X — связное пространство. Тогда 1-я группа гомологий $H_1(M)$ изоморфна фактор-группе 1-й гомотопической группы $\pi_1(X)$ по ее коммутанту, $H_1(X) \simeq \pi_1(X)/[\pi_1(X), \pi_1(X)]$ [87, с. 120].

ТЕОРЕМА 6.19 (теорема Гуревича). Пусть группы

$$\pi(X, x_0),\ \pi_1(X, x_0),\ \ldots,\ \pi_{n-1}(X, x_0)$$

тривиальны (состоят только из единичного элемента) при $n \geqslant 2$. Тогда $H_1(X) = \cdots = H_{n-1}(X) = 0$ и имеется канонический гомоморфизм Гуревича $\pi_n(X, x_0) \to H_n(X)$.

Обратно, если пространство X связно и односвязно, причем группы $H_2(X) = \ldots = H_{n-1}(X) = 0$, то группы $\pi_2(X), \ldots, \pi_{n-1}(X)$ тривиальны, и $\pi_n(X) \simeq H_n(X)$ [87, с. 120].

Изучение групп (ко)гомологий и фундаментальных групп позволяют распознавать свойства топологических пространств. Например, если у двух пространств группы гомологий неизоморфны, то эти пространства не гомотопны.

Контрольные вопросы

1. Доказать, что группы $\mathbf{S}_3$, $\mathbf{S}_4$ разрешимы, но не нильпотентны.
2. Пусть $\mathbb{H}$ — тело кватернионов. Доказать, что группа ненулевых кватернионов $\mathbb{H}^*$ относительно умножения не является разрешимой.
3. Доказать, что различные ненулевые групповые элементы в алгебре Хопфа линейно независимы.
4. Пусть Q — квазикристалл, определенный с помощью решетки M, и U — физическое пространство. Доказать, что $Q \cap U = M \cap U$.

ГЛАВА 7

ДОПОЛНЕНИЕ: СВЕДЕНИЯ ИЗ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ

Приведены основные сведения из линейной алгебры, использованные в гл. 1—6 этой книги. Большинство утверждений сформулировано без доказательств. Более подробное изложение этого материала можно найти в [2].

7.1. МАТРИЦЫ

Матрицей A размера $m \times n$ называют прямоугольную таблицу чисел

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn}. \end{pmatrix}.$$

Числа a_{ij} называют *элементами матрицы*.

Набор элементов $(a_{i1}, \ a_{i2}, \ \dots \ a_{in})$ образует i-ю *строку* матрицы A.

Набор элементов $\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix}$ образует j-й *столбец* матрицы A.

Таким образом, произвольный элемент a_{ij} стоит на месте (i, j), т. е. на пересечении i-й строки и j-го столбца матрицы A.

Матрица A *комплексная* (вещественная), если все ее элементы являются комплексными (вещественными) числами. Матрица A *квадратная*, если $n = m$, т. е. число строк в A равно числу столбцов. *Главной диагональю* матрицы называют набор ее элементов $(a_{11}, \ a_{22}, \ \dots, \ a_{nn})$, у которых номер строки совпадает с номером столбца.

Следом $\operatorname{tr} A$ называют сумму элементов диагонали. Известно, что след произведения матриц не зависит от порядка множителей, т. е. $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$ для любых квадратных матриц A и B.

Определителем $\det A = |A|$ квадратной матрицы A размера n называют число

$$\det A = \sum_{\sigma \in \mathbf{S}_n} (-1)^{\sigma} a_{1,\sigma(1)} \cdots a_{n,\sigma(n)},$$

где $\mathbf{S}_n$ — группа перестановок степени n (см. подразд. 1.1). Свойства определителей подробно изложены в [2, 15, 45].

Предположим, что в произвольной матрице A выбраны r строк и r столбцов. На их пересечении стоит квадратная матрица размера r. Ее определитель называют *минором порядка r матрицы A*. В частности, если в A выбраны первые r строк и столбцов, то получающийся минор называют *угловым* или *главным*.

Если задана матрица A размера $m \times n$, то поменяв в A местами строки и столбцы, получим *транспонированную* матрицу ${}^tA$ размера $n \times m$. Таким образом, если в исходной матрице на месте (i, j) стоит элемент a_{ij}, то в транспонированной матрице ${}^tA$ на том же месте стоит число a_{ji}.

Всюду в дальнейшем обозначено $\mathbb{R}$ — множество всех вещественных чисел, $\mathbb{C}$ — множество всех комплексных чисел.

О п р е д е л е н и е 7.1. Квадратная матрица A называется:

1) *диагональной*, если все ее элементы a_{ij}, стоящие вне главной диагонали, равны нулю, т. е. $a_{ij} = 0$ при $i \neq j$;

2) *верхнетреугольной*, если в A ниже главной диагонали расположены нули, а на главной диагонали стоят ненулевые числа, т. е. $a_{ij} = 0$ при $i > j$ и $a_{ii} \neq 0$ для всех i;

3) *верхнеунитреугольной*, если в A на главной диагонали стоят единицы, т. е. $a_{ij} = 0$ при $i > j$ и $a_{ii} = 1$ для всех i;

4) *симметричной*, если ${}^tA = A$, т. е. $a_{ij} = a_{ji}$ для всех i, j;

5) *ортогональной*, если ${}^tA = A^{-1}$;

6) *с углом нулей*, если она разбивается на блоки:

$$\left(\begin{array}{c|c} B & C \\ \hline 0 & D \end{array}\right),$$

где B, D — квадратные матрицы меньшего размера, чем матрица A;

7) *блочно-диагональной*, если она разбивается на блоки:

$$\begin{pmatrix} \boxed{D_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \boxed{D_2} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \boxed{D_m} \end{pmatrix}.$$

Комплексная матрица A называется:

1) *эрмитовой*, если ${}^t\bar{A} = A$, т. е. $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$ для всех элементов a_{ij} матрицы A (черта означает комплексно сопряженное число);

2) *косоэрмитовой* (*антиэрмитовой*), если ${}^t\bar{A} = -A$, т. е. $a_{ij} = -\overline{a_{ij}}$ для всех элементов a_{ij} матрицы A;

3) *унитарной*, если ${}^t\bar{A} = A^{-1}$.

Все верхнетреугольные комплексные матрицы образуют подгруппу $\mathrm{T}(n, \mathbb{C})$ в группе $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$. Аналогично вводят группу $\mathrm{T}(n, \mathbb{R})$.

Все верхнеунитреугольные комплексные матрицы образуют подгруппу $\mathrm{UT}(n, \mathbb{C})$ в группах $\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ и $\mathrm{T}(n, \mathbb{C})$. Аналогично вводят группу $\mathrm{UT}(n, \mathbb{R})$.

Каждая вещественная эрмитова матрица является симметрической. Каждая вещественная унитарная матрица является ортогональной.

7.2. ЛИНЕЙНЫЕ ПРОСТРАНСТВА И ПОДПРОСТРАНСТВА

Линейным, или векторным вещественным (*комплексным*), *пространством* L над полем $\mathbb{F}$ называют множество L, элементы которого называют *векторами*, в котором определены операция сложения векторов $x + y$ и операция умножения αx векторов x на вещественные (комплексные) числа $\alpha \in \mathbb{F}$. При этом для всех $x, y, z \in L$ выполняются следующие аксиомы ($\alpha, \beta \in \mathbb{F}$ — вещественные (комплексные) числа):

1) $(x + y) + z = x + (y + z)$;

2) $x + y = y + x$;

3) существует такой элемент $0 \in L$, что $x + 0 = x$ для всех $x \in L$;

4) для любого $x \in L$ существует такой элемент $-x \in L$, что $x + (-x) = 0$;

5) $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$;

6) $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$;

7 $(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x)$;

8) $1x = 1$.

Систему векторов $x_1, \ldots, x_n \in L$ называют *линейно независимой*, если из условия $\alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n = 0$ следует $\alpha_1 = \cdots = \alpha_n = 0$. В противном случае, систему векторов $x_1, \ldots, x_n \in L$ называют *линейно зависимой.*

Вектор a является *линейной комбинацией* векторов $b_1, \ldots, b_n \in L$, если вектор $a = \alpha_1 b_1 + \cdots + \alpha_n b_n$ для некоторых чисел $\alpha_1, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{F}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.1. Система векторов $x_1, \ldots, x_n \in L$ линейно зависима тогда и только тогда, когда один из ее векторов является линейной комбинацией остальных.

ТЕОРЕМА 7.1 (основная лемма о линейной зависимости).

Предположим, что в пространстве L заданы две системы векторов

$$a_1, \dots, a_n; \quad b_1, \dots, b_m.$$

Предположим, что каждый вектор a_i является линейной комбинацией системы $b_1, \dots, b_m$. Если $n > m$, то система $a_1, \dots, a_n$ линейно зависима.

Систему векторов $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)$, где $e_i \in L$, называют *базисом пространства* L, если выполняются условия: 1) система $e_1, \dots, e_n$ линейно независима; 2) каждый вектор из L является линейной комбинацией векторов из системы $\mathbf{e}$.

Из теоремы 7.1 вытекает, что любые два конечных базиса пространства L состоят из одинакового числа векторов. Это число называют *размерностью пространства* L и обозначают $\dim L$.

Если $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)$ — базис пространства L, и $x \in L$, то $x = x_1e_1 + \dots + x_ne_n$ для некоторых чисел $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{F}$. Коэффициент $x_i \in \mathbb{F}$ этого разложения называется *i-й координатой вектора x в базисе* $\mathbf{e}$. Столбец координат

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

определен однозначно. Используя матричное умножение, получаем сокращенную запись $x = \mathbf{e}X$. Если $\mathbf{e}' = (e'_1, \dots, e'_n)$ — другой базис L, то $e'_i = \sum_{j=1}^{n} e_j c_{ji}$, $c_{ji} \in \mathbb{R}$ (соответственно $c_{ji} \in \mathbb{C}$).

Квадратную матрицу $C = (c_{ji})$ размера n называют *матрицей перехода* от базиса $\mathbf{e}$ к базису $\mathbf{e}'$. Матрицами перехода от одного базиса к другому являются невырожденные матрицы и только они. Если X и X' — столбцы координат вектора x в базисах $\mathbf{e}$ и $\mathbf{e}'$ соответственно, то $X = CX'$.

Непустое (т. е. содержащее хотя бы один элемент) подмножество $V \subseteq L$ называют *подпространством*, если из того, что $x, y \in V$ вытекает $x+y$, $\alpha x \in V$ для всех чисел $\alpha \in \mathbb{F}$. Подпространство всегда является пространством относительно операций сложения и умножения на числа, определенных на пространстве L.

Если в пространстве L выбрана система векторов $a_1, \dots, a_n$, то *линейной оболочкой* $\langle a_1, \dots, a_n \rangle$ этой системы называется множество всех линейных комбинаций этой системы векторов. Линейная оболочка является подпространством в L.

Если $L_1, \dots, L_m$ — подпространства в L, то их пересечение $L_1 \cap \dots \cap L_m$ также является подпространством в L. *Суммой* под-

пространств $L_1 + \cdots + L_m$ называется множество всех векторов $x \in L$, представимых в виде

$$x = x_1 + \cdots + x_m, \quad x_i \in L_i. \tag{7.1}$$

Сумма подпространств $L_1 + \cdots + L_m$ является подпространством.

ТЕОРЕМА 7.2. Если L_1, L_2 — подпространства в L, то $\dim(L_1 + L_2) + \dim(L_1 \cap L_2) = \dim L_1 + \dim L_2$.

Пространство L является *прямой суммой* своих подпространств $L_1, \ldots, L_m$, если каждый вектор $x \in L$ имеет, и притом единственное представление (7.1). В этом случае пользуются обозначением $L = L_1 \oplus \cdots \oplus L_m$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.2. Если $L_1, \ldots, L_m$ — подпространства в L, то эквивалентны следующие условия:

1) $L = L_1 \oplus \cdots \oplus L_m$;

2) $\dim L = \dim L_1 + \cdots + \dim L_m$.

7.3. ПЛОСКОСТИ

Пусть V — векторное пространство, $a \in V$ и U — подпространство в V. *Плоскостью* Π в V называют множество всех векторов (точек) вида $\Pi = a + U = \{a + u | u \in U\}$. Подпространство U называют *направляющим* для плоскости Π. *Размерностью* плоскости называют размерность его направляющего пространства. Плоскость размерности 1 называют *прямой*. Плоскость размерности $n-1$ в n-мерном пространстве называют *гиперплоскостью*.

Заметим, что если U — направляющее подпространство U для плоскости Π, то $U = \{x - y \mid x, y \in \Pi\}$. В частности, подпространство U по Π определено однозначно. Таким образом, размерность плоскости определена корректно.

Если $U = \langle a_1, \ldots, a_k \rangle$, то $\Pi = \{a + a_1 t_1 + \cdots + a_k t_k\}$, где $t_1, \ldots, t_k \in \in \mathbb{R}$, или соответственно $t_1, \ldots, t_k \in \mathbb{C}$. Такое представление плоскости Π называют *параметрическим заданием* плоскости Π.

ТЕОРЕМА 7.3. Пусть задана совместная система линейных уравнений $AX = b$ с матрицей A размера $m \times n$, столбцом неизвестных X высоты n и столбцом свободных членов b высоты m. Все решения этой системы образуют плоскость Π размерности $n - r(A)$, где $r(A)$ — ранг матрицы A. Его направляющее пространство состоит из всех решений однородной системы $AY = 0$.

ТЕОРЕМА 7.4. Пусть задана плоскость $\Pi = a + U$ размерности d в пространстве V с заданным базисом про-

странства $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. Тогда существует такая система из $(n-d)$ линейных уравнений, что вектор $x = x_1e_1 + \cdots + x_ne_n \in \Pi$ в том и только в том случае, если столбец координат $(x_1, \ldots, x_n)$ является решением этой системы.

СЛЕДСТВИЕ. Непустое пересечение плоскостей снова является плоскостью.

7.4. БИЛИНЕЙНЫЕ И ПОЛУТОРАЛИНЕЙНЫЕ ФУНКЦИИ

Пусть V — вещественное (комплексное) векторное пространство. Вещественно-значную (комплексно-значную) функцию $b(x, y)$ от двух аргументов $x, y \in V$ со значением в $\mathbb{F}$ называют *билинейной*, если для всех $x, x_1, y, y_1 \in V$ и любых чисел $\alpha, \beta \in \mathbb{F}$ справедливы тождества:

1) $b(x + x_1, y) = b(x, y) + b(x_1, y)$;
2) $b(x, y + y_1) = b(x, y) + b(x, y_1)$;
3) $b(\alpha x, \beta y) = \alpha\beta\, b(x, y)$.

Комплексно-значную функцию $b(x, y)$ от двух аргументов x, y из комплексного векторного пространства V называют *полуторалинейной*, если для всех $x, x_1, y, y_1 \in V$ и любых комплексных α, β справедливы тождества:

1) $b(x + x_1, y) = b(x, y) + b(x_1, y)$;
2) $b(x, y + y_1) = b(x, y) + b(x, y_1)$;
3) $b(\alpha x, \beta y) = \alpha\bar{\beta}\, b(x, y)$.

Предположим, что в V выбран базис $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$. *Матрицей* билинейной (полуторалинейной) функции $b(x, y)$, или *матрицей Грама* этой функции в базисе $\mathbf{e}$, называют матрицу

$$B = \begin{pmatrix} b(e_1, e_1) & \ldots & b(e_1, e_n) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ b(e_n, e_1) & \ldots & b(e_n, e_n) \end{pmatrix}.$$

Если $\mathbf{e}' = \mathbf{e}C$ — другой базис V с матрицей перехода C и B' — матрица билинейной функции $b(x, y)$ в базисе $\mathbf{e}'$, то

$$B' = {}^tCBC. \tag{7.2}$$

Если функция $b(x, y)$ полуторалинейная, то

$$B' = {}^tCB\bar{C}. \tag{7.3}$$

В частности, ранг матрицы Грама билинейной (полуторалинейной) функции в любом базисе имеет одно и то же значение.

Пусть $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ — произвольный базис пространства, в котором задана билинейная (полуторалинейная) функция $b(x, y)$ с невырожденной матрицей Грама $B = (b_{ij} = b(e_i, e_j))$. Рассмотрим в пространстве новый базис $\mathbf{e}' = (e'_1, \ldots, e'_n) = {}^tB^{-1}\mathbf{e}$, получающийся из $\mathbf{e}$ с помощью матрицы перехода ${}^tB^{-1}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.3. Для любых $i, j = 1, \ldots, n$ справедливы равенства $b(e'_i, e_j) = \delta_{ij}$, где δ_{ij} — *символ Кронекера*, т. е. $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$ и $\delta_{ij} = 1$ при $i = j$. Кроме того, для матриц Грама имеется равенство $B' = B^{-1}$.

Базис $\mathbf{e}'$, получающийся указанным способом, называют *взаимным* или *дуальным* к базису $\mathbf{e}$.

Билинейную (полуторалинейную) функцию $b(x, y)$ в пространстве V называют *симметрической (эрмитовой)*, если $b(x, y) = b(y, x)$ (соответственно, $b(x, y) = \overline{b(y, x)}$) для всех $x, y \in V$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.4. Предположим, что билинейная (полуторалинейная) функция $b(x, y)$ в пространстве V с базисом $\mathbf{e}$ обладает в этом базисе матрицей B. Функция $b(x, y)$ является симметричной (эрмитовой) тогда и только тогда, когда ${}^tB = B$ (соответственно, ${}^tB = \overline{B}$).

С каждой билинейной симметрической (эрмитовой) функцией $b(x, y)$ связывают *квадратичную функцию* $q(x) = b(x, x)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.5. По квадратичной функции $q(x) = b(x, x)$ билинейная симметрическая (полуторалинейная эрмитова) функция $b(x, y)$ восстанавливается однозначно.

Доказательство этого факта основано на следующих формулах: если $b(x, y)$ — билинейная симметрическая функция, то

$$b(x, y) = \frac{1}{2}[q(x + y) - q(x) - q(y)]. \tag{7.4}$$

Если $b(x, y)$ — полуторалинейная эрмитова функция, то

$$b(x, y) = \frac{1}{4}[q(x + y) - q(x - y) + iq(x + iy) - iq(x - iy)]. \tag{7.5}$$

Матрицей квадратичной функции в базисе $\mathbf{e}$, построенной по билинейной либо полуторалинейной функции $b(x, y)$, называют матрицу функции $b(x, x)$ в базисе $\mathbf{e}$.

ТЕОРЕМА 7.5. Пусть $q(x)$ — квадратичная функция. Существует базис, в котором матрица $q(x)$ имеет диагональный вид.

В вещественном (комплексном) пространстве всегда существует базис, в котором квадратичная функция имеет *нормальный вид*:

$$q(x) = |x_1|^2 + \cdots + |x_p|^2 - |x_{p+1}|^2 - \cdots - |x_{p+q}|^2.$$

Числа p, q называют соответственно *положительным* и *отрицательным индексом инерции* функции $q(x)$.

ТЕОРЕМА 7.6 (закон инерции). Пусть задана квадратичная форма q на вещественном или комплексном векторном пространстве. Предположим, что выбраны базисы, в которых матрица формы q имеет диагональный вид. Тогда положительный и отрицательный индексы инерции функции $q(x)$ определены однозначно.

Эта теорема связана с теоремой 7.4.

ТЕОРЕМА 7.7 (теорема Сильвестра). Пусть A — матрица невырожденной вещественной (эрмитовой) квадратичной формы q в некотором базисе и $\delta_1, \ldots, \delta_n$ — последовательность ее главных миноров, т. е. δ_k — минор матрицы A, стоящий на пересечении первых k строк и первых k столбцов. Предположим, что в некотором базисе форма q имеет диагональную матрицу B. Тогда число отрицательных диагональных элементов матрицы B равно числу перемен знаков в последовательности $1, \delta_1, \ldots, \delta_n$.

Билинейная симметричная (эрмитова) функция с соответствующей квадратичной функцией $q(x)$ *положительно определена*, если $q(x) > 0$ для всех ненулевых векторов x.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.6. Для квадратичной функции $q(x)$ эквивалентны следующие условия:

1) $q(x)$ положительно определена;

2) если B — матрица функции $q(x)$ в некотором базисе, то все угловые миноры матрицы B положительны;

3) если B — матрица $q(x)$ в некотором базисе, то $B = {}^tTT$ (соответственно, $B = {}^t\overline{T}T$) для некоторой невырожденной матрицы T.

Определение 7.2. Билинейная функция $b(x, y)$ на пространстве V *кососимметрична* (антисимметрична), если $b(x, y) = -b(y, x)$ для всех $x, y \in V$.

Для билинейной функции $b(x, y)$ эквивалентны следующие условия:

1) функция $b(x, y)$ кососимметрична;

2) матрица B функции $b(x, y)$ в любом базисе кососимметрична, т. е. ${}^tB = -B$.

ТЕОРЕМА 7.8. Пусть в пространстве V задана кососимметрическая билинейная функция $b(x,y)$. Тогда в пространстве V существует базис $e_1, \ldots, e_n, e_{n+1}, \ldots, e_{2n}, e_{2n+1}, \ldots$, в котором матрица $b(x,y)$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & -E_n & 0 \\ E_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{7.6}$$

где E_n — единичная матрица размера n. В частности, функция $b(x,y)$ невырождена тогда и только тогда, когда $\dim V = 2n$ и матрица $b(x,y)$ в некотором базисе имеет вид

$$J_0 = \begin{pmatrix} 0 & -E_n \\ E_n & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.7}$$

В дальнейшем для матрицы (7.7) мы будем использовать стандартное обозначение J_0.

СЛЕДСТВИЕ. Пусть задана кососимметричная матрица B. Тогда существует такая невырожденная матрица C, что ${}^tCBC$ имеет вид (7.6).

7.5. ЕВКЛИДОВЫ И ЭРМИТОВЫ ПРОСТРАНСТВА

Вещественное (комплексное) векторное пространство называют *евклидовым* (*эрмитовым*), если в нем задана положительно определенная билинейная симметрическая (соответственно, полуторалинейная эрмитова) функция (x,y), называемая *скалярным произведением.*

Система ненулевых векторов $b_1, \ldots, b_n$ евклидова (эрмитова) пространства *ортогональна*, если $(b_i, b_j) = 0$ при $i \neq j$. Система ненулевых векторов $b_1, \ldots, b_n$ евклидова (эрмитова) пространства *ортонормирована*, если $(b_i, b_j) = \delta_{ij}$.

Опишем *процесс ортогонализации Грама — Шмидта.* Пусть задана система векторов $a_1, \ldots, a_n$ евклидова (эрмитова) пространства. Требуется построить такую ортогональную систему векторов $b_1, \ldots, b_n$, чтобы для любого $j = 1, \ldots, n$ совпадали линейные оболочки $\langle a_1, \ldots, a_j \rangle = \langle b_1, \ldots, b_j \rangle$. Процесс построения осуществляется индукцией по j.

Если $j = 1$, то полагаем $b_1 = a_1$.

Пусть уже построена ортогональная система векторов $b_1, \ldots, b_j$. Если $b_j = 0$, то это означает, что вектор a_j является линейной комбинацией векторов $a_1, \ldots, a_{j-1}$, и построение закончено.

Предположим, что $b_1, \ldots, b_j \neq 0$. В этом случае полагаем

$$b_{j+1} = a_{j+1} - \sum_{i=1}^{j} \frac{(a_{k+1}, b_i)}{(b_i, b_i)} b_i.$$

Построенный вектор b_{j+1} ортогонален всем векторам $b_1, \ldots, b_j$. Пусть U — подпространство евклидова (эрмитова) пространства E. *Ортогональным дополнением* $U^\perp$ к U называется множество всех таких векторов $x \in E$, что $(x, y) = 0$ для всех $y \in U$.

ТЕОРЕМА 7.9. Пусть E — конечномерное евклидово (эрмитово) пространство. Тогда $U^\perp$ является подпространством в E и $E = U \oplus U^\perp$.

Пусть задана система векторов $a_1, \ldots, a_n$ евклидова (эрмитова) пространства. *Матрицей Грама* этой системы векторов называют матрицу

$$G(a_1, \ldots, a_n) = \begin{pmatrix} (a_1, a_1) & \ldots & (a_1, a_n) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ (a_n, a_1) & \ldots & (a_n, a_n) \end{pmatrix}.$$

Определитель $\det G(a_1, \ldots, a_n)$ называют *определителем Грама*.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.7. Если векторы $a_1, \ldots, a_n$ линейно независимы, то $\det G(a_1, \ldots, a_n) > 0$. Если векторы $a_1, \ldots, a_n$ линейно зависимы, то $\det G(a_1, \ldots, a_n) = 0$.

СЛЕДСТВИЕ (неравенство Коши-Буняковского). Если x, y — векторы евклидова (эрмитова) пространства, то

$$|(x, y)| \leqslant \sqrt{(x, x)(y, y)}.$$

Если x — вектор евклидова (эрмитова) пространства, то *длиной* $\|x\|$ вектора x называется величина $\sqrt{(x, x)}$. Если x, y — ненулевые векторы евклидова (эрмитова) пространства, то *углом* α *между ними* определяется из равенства

$$\cos\alpha = \frac{(x, y)}{\|x\|\|y\|}, \quad 0 \leqslant \alpha < \pi.$$

Векторы x, y евклидова (эрмитова) пространства *перпендикулярны* (*ортогональны*), если $(x, y) = 0$.

Если U — подпространство евклидова (эрмитова) пространства E, и $x \in E$, то $E = U \oplus U^\perp$ по теореме 7.8. Поэтому $x = y + z$, где $y \in U$ и $z \in U^\perp$. Вектор y называют *ортогональной проекцией* вектора x на U, а вектор z называют *ортогональной составляющей* вектора x.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.8. Если $t \in U$, то $\|x-t\| \geqslant \|z\|$, причем равенство имеет место тогда и только тогда, когда $t = y$. Угол между t и x больше или равен углу между x и y, причем равенство имеет место тогда и только тогда, когда $t = \lambda y$, $\lambda > 0$.

Пусть задана система $a_0, a_1, \ldots, a_n$ векторов n-мерного евклидова (эрмитова) пространства. *Параллелепипедом*, натянутым на эту систему, называется множество всех векторов вида

$$a_0 + \lambda_1(a_1 - a_0) + \cdots + \lambda_n(a_n - a_0), \qquad 0 \leqslant \lambda_1, \ldots, \lambda_n \leqslant 1.$$

Далее, *n-мерным объемом* $V(a_0, a_1, \ldots, a_n)$ параллелепипеда, натянутого на систему $a_0, a_1, \ldots, a_n$, называют число

$$\sqrt{G(a_1 - a_0, \ldots, a_n - a_0)}.$$

Это определение корректно в силу предложения 7.7.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.9. Пусть z — ортогональная составляющая вектора a_n относительно подпространства $\langle a_1, \ldots, a_{n-1}\rangle$. Тогда

$$V(a_1, \ldots, a_n) = V(a_1, \ldots, a_{n-1}, z).$$

Вещественная (комплексная) матрица Q *ортогональна* (*унитарна*), если ${}^tQQ = E$ (соответственно, ${}^tQ\overline{Q} = E$.).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.10. Пусть $\mathbf{e}$ — ортонормированный базис евклидова (эрмитова) пространства E. Предположим, что $\mathbf{e}' = \mathbf{e}Q$ — другой базис E с матрицей перехода Q. Базис $\mathbf{e}'$ ортонормирован тогда и только тогда, когда матрица Q ортогональна (унитарна).

7.6. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Линейные отображения. Отображение f линейного пространства V в линейное пространство W называют *линейным*, если $f(\alpha x + \beta y) = \alpha f(x) + \beta f(y)$ для всех $x, y \in V$. *Ядром* $\ker f$ линейного отображения f называют множество всех таких $x \in V$, что $f(x) = 0$. *Образом* $\operatorname{Im} f$ линейного отображения называют множество всех векторов $y \in W$, имеющих вид $y = f(x)$ для некоторого $x \in V$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.11. Ядро $\ker f$ и образ $\operatorname{Im} f$ линейного отображения $f : V \to W$ являются подпространствами в V и в W, причем

$$\dim \ker f + \dim \operatorname{Im} f = \dim V.$$

Матрицы линейных операторов. Пусть L — векторное пространство. Линейное отображение $\mathcal{A} : L \to L$ называют *линейным оператором*. Пусть $\mathbf{e} = = (e_1, \ldots, e_n)$ — базис L, $\mathcal{A}$ — линейный оператор в L. Предположим, что для всех $j = 1, \ldots, n$

$$\mathcal{A}e_j = \sum_{i=1}^{n} e_i a_{ij}.$$

Тогда квадратную матрицу $A = (a_{ij})$ размера n называют *матрицей оператора $\mathcal{A}$ в базисе* $\mathbf{e}$.

Если $\mathbf{e}' = \mathbf{e}C$ — другой базис L с матрицей перехода C и B — матрица оператора $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}'$, то $B = C^{-1}AC$, в частности $\det B = \det A$. Таким образом, корректно определен *определитель линейного оператора $\mathcal{A}$* как определитель его матрицы в произвольном базисе.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.12. Пусть линейный оператор $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}$ имеет матрицу A. Тогда $\dim \operatorname{Im} \mathcal{A}$ равна рангу матрицы A.

Число $\dim \operatorname{Im} \mathcal{A}$ называют *рангом* оператора $\mathcal{A}$.

Если $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ — линейные операторы в L с матрицами A, B в одном и том же базисе $\mathbf{e}$, то их *произведение $\mathcal{A}\mathcal{B}$* является линейным оператором в L, матрица которого в базисе $\mathbf{e}$ равна произведению матриц AB.

Определим *сумму* операторов $\mathcal{A}+\mathcal{B}$ по правилу $(\mathcal{A}+\mathcal{B})x = \mathcal{A}x + \mathcal{B}x$. Тогда $\mathcal{A}+\mathcal{B}$ является линейным оператором. Матрица оператора $\mathcal{A}+\mathcal{B}$ в базисе $\mathbf{e}$ равна $A+B$.

Аналогично, если λ — число, то $\lambda\mathcal{A}$, задаваемое по правилу $(\lambda\mathcal{A})x = \lambda(\mathcal{A}x)$, является линейным оператором, матрица которого в базисе $\mathbf{e}$ равна λA.

Тождественным называется такой линейный оператор $\mathcal{E}$, что $\mathcal{E}x = x$ для всех $x \in L$. *Обратным* оператору $\mathcal{A}$ называется такой линейный оператор $\mathcal{A}^{-1}$, что $\mathcal{A}^{-1}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{A}^{-1} = \mathcal{E}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.13. Для линейного оператора $\mathcal{A}$, имеющего в базисе $\mathbf{e}$ матрицу A, эквивалентны следующие условия:

1) существует обратный оператор $\mathcal{A}^{-1}$;
2) $\ker \mathcal{A} = 0$;
3) $\operatorname{Im} \mathcal{A} = L$;
4) матрица A невырождена;
5) матрица обратного оператора равна A^{-1}.

Нулевым линейным оператором называется такой оператор $\mathcal{O}$, что $\mathcal{O}x = 0$ для всех $x \in L$.

Многочлены от линейных операторов. Если многочлен

$$f(t) = a_0 + a_1 t + \cdots + a_m t^m$$

имеет вещественные (комплексные) коэффициенты $\{a_i\}$, то для любого линейного оператора $\mathcal{A}$ в L полагаем

$$f(\mathcal{A}) = a_0 \mathcal{E} + a_1 \mathcal{A} + \cdots + a_m \mathcal{A}^m.$$

В силу изложенного выше $f(\mathcal{A})$ является линейным оператором. Если A — матрица оператора $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}$, то в том же базисе матрица оператора $f(\mathcal{A})$ есть $f(A) = a_0 E + a_1 A + \cdots + a_m A^m$. С каждой квадратной матрицей B размера n связывается *характеристический многочлен* $\chi_B(t) = \det(B - tE)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.14. $\chi_B(t) = (-1)^n t^n + (-1)^{n-1} t^{n-1} (\operatorname{tr} B) + \cdots + \det B$. Пусть C — невырожденная матрица размера n. Тогда $\chi_B(t) = \chi_{C^{-1}BC}(t)$.

Это предложение позволяет определить *характеристический многочлен* (и, в частности, *след*) линейного оператора: если A — матрица оператора $\mathcal{A}$ в некотором базисе, то $\chi_{\mathcal{A}}(t) = \chi_A(t)$. Корни $\chi_{\mathcal{A}}(t)$ называются *характеристическими числами* оператора $\mathcal{A}$.

ТЕОРЕМА 7.10 (теорема Гамильтона—Кэли). Если $\mathcal{A}$ — линейный оператор, то $\chi_{\mathcal{A}}(\mathcal{A}) = \mathcal{O}$ (нулевой оператор).

Минимальным многочленом линейного оператора $\mathcal{A}$ называют многочлен $m(t)$ минимальной степени, аннулирующий оператор $\mathcal{A}$, т. е. $m(\mathcal{A}) = \mathcal{O}$. По теореме Гамильтона—Кэли $m(t)$ делит $\chi_{\mathcal{A}}(t)$. Кроме того, минимальный многочлен определен однозначно с точностью до постоянного ненулевого скалярного множителя.

Инвариантные подпространства. Подпространство V в линейном пространстве L *инвариантно относительно* линейного оператора $\mathcal{A}$, действующего в пространстве L , если $\mathcal{A}x \in V$ для любого вектора $x \in V$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.15. Пусть базис $e_1, \ldots, e_k$ подпространства V дополнен до базиса $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ пространства L. Подпространство V инвариантно относительно оператора $\mathcal{A}$ тогда и только тогда, когда матрица оператора $\mathcal{A}$ в базисе $\mathbf{e}$ имеет вид

$$\left(\begin{array}{c|c} * & * \\ \hline 0 & * \end{array}\right),$$

причем размеры квадратных диагональных блоков равны соответственно k и $n-k$.

ТЕОРЕМА 7.11. Линейный оператор в комплексном конечномерном пространстве обладает одномерным инвариантным подпространством. Линейный оператор в вещественном конечномерном пространстве обладает одномерным или двумерным инвариантным подпространством.

Собственные векторы. Ненулевой вектор x пространства L, в котором действует линейный оператор $\mathcal{A}$, называют *собственным* для оператора $\mathcal{A}$ с *собственным значением* λ, если $\mathcal{A}x = \lambda x$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.16. Ненулевой вектор x пространства L, в котором действует линейный оператор $\mathcal{A}$, является собственным для оператора $\mathcal{A}$ тогда и только тогда, когда линейная оболочка $\langle x \rangle$ инвариантна относительно этого линейного оператора.

Собственными значениями оператора $\mathcal{A}$ являются корни характеристического многочлена $\chi_{\mathcal{A}}(t)$ и только они. Собственными векторами $\mathcal{A}$ с собственным значением λ являются ненулевые векторы из $\ker(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E})$ и только они.

Собственные векторы линейного оператора $\mathcal{A}$ с разными собственными значениями линейно независимы.

Жорданова форма. *Жордановой клеткой* $J(k, \lambda)$ размера k называют матрицу

$$J(k,\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{pmatrix}.$$

Жордановой формой называют блочно-диагональную матрицу, в которой по главной диагонали стоят жордановы клетки.

ТЕОРЕМА 7.12. Пусть линейный оператор $\mathcal{A}$ действует в конечномерном комплексном пространстве. Тогда существует базис пространства, в котором матрица оператора $\mathcal{A}$ является жордановой. Число клеток $J(k, \lambda)$ в этой жордановой форме

$$r((\mathcal{A}-\lambda)^{k+1}) - 2r((\mathcal{A}-\lambda)^{k}) + r((\mathcal{A}-\lambda)^{k-1}),$$

где $r(\dots)$ — ранг соответствующего линейного оператора.

Число λ является собственным значением оператора $\mathcal{A}$. В частности, жорданова форма оператора $\mathcal{A}$ определена однозначно, с точностью до порядка жордановых клеток. Од-

но и то же число λ может быть на главной диагонали в нескольких клетках жордановой формы.

Минимальный многочлен оператора $\mathcal{A}$

$$m(t) = (t-\lambda_1)^{d_1} \cdots (t-\lambda_s)^{d_s},$$

где $\lambda_1, \ldots, \lambda_s$ — все несовпадающие собственные значения $\mathcal{A}$; d_j — наибольший размер жордановой клетки в A с λ_j по главной диагонали.

7.7. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В ЕВКЛИДОВЫХ, ЭРМИТОВЫХ И СИМПЛЕКТИЧЕСКИХ ПРОСТРАНСТВАХ

7.7.1. Сопряженный и нормальный операторы

Пусть в пространстве E задана невырожденная симметричная или полуторалинейная эрмитова функция $b(x, y)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.17. Для любого линейного оператора $\mathcal{A}$ в E существует и притом единственный такой линейный оператор $\mathcal{A}^*$ в E, что $b(\mathcal{A}x, y) = b(x, \mathcal{A}^* y)$ для всех x, y. Если A — матрица оператора $\mathcal{A}$ и B — матрица $\mathcal{A}$ и $\mathcal{A}^*$ в дуальном базисе $\mathbf{e}'$ в пространстве E, то $B = {}^tA$, если b — билинейная симметричная функция, и $B = {}^t\overline{A}$, если b — полуторалинейная эрмитова функция. В частности, если E — евклидово или эрмитово пространство, где в качестве $b(x, y)$ взято скалярное произведение $b(x, y) = (x, y)$, и $\mathbf{e}$ — ортонормированный базис, то $\mathbf{e}' = \mathbf{e}$.

Рассмотрим некоторые линейные операторы в евклидовых, эрмитовых и симплектических пространствах. Оператор $\mathcal{A}^*$ называют *сопряженным* оператору $\mathcal{A}$. Если $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ — операторы в евклидовом (эрмитовом) пространстве, то

$$(\mathcal{A}\mathcal{B})^* = \mathcal{B}^*\mathcal{A}^*, \quad (\mathcal{A}+\mathcal{B})^* = \mathcal{A}^* + \mathcal{B}^*, \quad (\lambda\mathcal{A})^* = \bar{\lambda}\mathcal{A}^*, \quad \mathcal{A}^{**} = \mathcal{A}. \quad (7.8)$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.18. Если подпространство U евклидова (эрмитова) пространства инвариантно относительно линейного оператора $\mathcal{A}$, то ортогональное дополнение $U^\perp$ также инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$.

Линейный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве называют *нормальным*, если $\mathcal{A}\mathcal{A}^* = \mathcal{A}^*\mathcal{A}$. Теория нормальных

операторов не всегда полностью излагается в учебной литературе, поэтому приведем доказательства ряда основных положений полностью.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.19. Пусть $\mathcal{A}$ — нормальный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве, $p(t)$ — многочлен и $U = \ker p(\mathcal{A})$. Тогда $U, U^{\perp}$ инвариантны относительно $\mathcal{A}, \mathcal{A}^*$.

Доказательство. Для любого $x \in U$ имеем

$$p(\mathcal{A})\mathcal{A}x = \mathcal{A}p(\mathcal{A})x = 0; \quad p(\mathcal{A})\mathcal{A}^*x = \mathcal{A}^*p(\mathcal{A})x = 0.$$

Таким образом, $\mathcal{A}x, \mathcal{A}^*x \in U$, т. е. U инвариантно относительно $\mathcal{A}$ и $\mathcal{A}^*$. По предложению 7.18 подпространство $U^{\perp}$ инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$ и относительно $\mathcal{A}^{**} = \mathcal{A}$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.20. Пусть $\mathcal{A}$ — нормальный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве E. Если $x \in E$, то $\|\mathcal{A}x\| = \|\mathcal{A}^*x\|$. В частности, если y — собственный вектор $\mathcal{A}$ с собственным значением λ, то y — собственный вектор $\mathcal{A}^*$ с собственным значением $\overline{\lambda}$.

Доказательство. Имеем

$$\|\mathcal{A}x\|^2 = (\mathcal{A}x, \mathcal{A}x) = (x, \mathcal{A}^*\mathcal{A}x) = (x, \mathcal{A}\mathcal{A}^*x) = (\mathcal{A}^*x, \mathcal{A}^*x) = \|\mathcal{A}^*x\|^2.$$

По (7.8) оператор $\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E}$ нормален, причем $(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E})^* = \mathcal{A}^* - \overline{\lambda}\mathcal{E}$. Следовательно, если $\mathcal{A}y = \lambda y$, то по доказанному

$$0 = \|(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E})y\| = \|(\mathcal{A}^* - \overline{\lambda}\mathcal{E})y\|,$$

откуда $\mathcal{A}^*y = \overline{\lambda}y$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.21. Пусть $\mathcal{A}$ — нормальный оператор в двумерном евклидовом пространстве E, причем $\mathcal{A}$ не имеет в E собственных векторов. В ортонормированном базисе пространства E матрица A оператора $\mathcal{A}$ имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}.$$

Доказательство. Пусть матрица A оператора $\mathcal{A}$ имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}.$$

По предложению 7.17 матрица $\mathcal{A}^*$ в том же базисе имеет вид

$${}^tA = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Сравнивая в матрицах A^tA и ${}^tAA$ коэффициенты, стоящие на местах (1,1) и (1,2), получаем $b^2 = c^2$, и $ac+bd = ab+cd$, т. е.

$$b = \pm c, \quad (a-d)(c-b) = 0. \tag{7.9}$$

Предположим, что $b = c$. Тогда характеристический полином матрицы A равен $t^2-(a+d)t+(ad-b^2)$. Его дискриминант

$$(a+d)^2 - 4(ad-b^2) = (a-d)^2 + 4b^2 \geqslant 0.$$

Следовательно, оператор $\mathcal{A}$ имеет в E собственный вектор, что противоречит предположению. Итак, $b = -c$ и $a = d$ по (7.9).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.22. Пусть U — двумерное подпространство в евклидовом пространстве E, инвариантное относительно нормального оператора $\mathcal{A}$. Предположим, что $\mathcal{A}$ не имеет в U собственных векторов. Тогда U инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$.

Доказательство. Рассмотрим на подпространстве U ограничение $\mathcal{A}\,|_U$ линейного оператора $\mathcal{A}$. Обозначим $p(t)$ характеристический многочлен ограничения оператора $\mathcal{A}\,|_U$. По условию

$$p(t) = t^2 + at + b, \quad b - \frac{a^2}{4} < 0.$$

В силу теоремы Гамильтона — Кэли $p(\mathcal{A}\,|_U) = 0$, и поэтому $U \subseteq \ker p(\mathcal{A})$. По предложению 7.19 подпространство $\ker p(\mathcal{A})$ инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$. Поэтому без ограничения общности можно считать, что $E = \ker p(\mathcal{A})$. Положим

$$\mathcal{B} = \frac{1}{\sqrt{d}}(\mathcal{A} + \frac{a}{2}\mathcal{E}), \quad d = \frac{a^2}{4} - b.$$

Из (7.8) вытекает, что

$$\mathcal{A} = \sqrt{d}\mathcal{B} - \frac{a}{2}\mathcal{E}, \quad \mathcal{B}^2 + \mathcal{E} = (\mathcal{B}^*)^2 + \mathcal{E} = 0. \tag{7.10}$$

Таким образом, $\mathcal{B}$ является нормальным оператором, а из (7.10) следует, что

$$(\mathcal{B}\mathcal{B}^* - \mathcal{E})(\mathcal{B}\mathcal{B}^* + \mathcal{E}) = \mathcal{B}^2(\mathcal{B}^*)^2 - \mathcal{E} = 0. \tag{7.11}$$

Предположим, что $x \in E \setminus 0$, причем $\mathcal{B}\mathcal{B}^*x = -x$. Тогда

$$0 \leqslant (\mathcal{B}^*x, \mathcal{B}^*x) = (\mathcal{B}\mathcal{B}^*x, x) = -(x,x) < 0,$$

что невозможно. Следовательно, $\ker(\mathcal{B}\mathcal{B}^* + \mathcal{E}) = 0$, т. е. оператор $\mathcal{B}\mathcal{B}^* + \mathcal{E}$ невырожден. Из (7.11) следует, что $\mathcal{B}\mathcal{B}^* = \mathcal{E}$. В силу (7.10) имеем $\mathcal{B} = \mathcal{B}\mathcal{B}\mathcal{B}^* = \mathcal{B}^2\mathcal{B}^* = -\mathcal{B}^*$, откуда

$$\mathcal{A}^* = \sqrt{d}\mathcal{B}^* - \frac{a}{2}\mathcal{E} = -\mathcal{A} - a\mathcal{E},$$

что означает инвариантность U относительно $\mathcal{A}^*$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7.23. Пусть $\mathcal{A}$ — нормальный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве E. Если подпространство U инвариантно относительно $\mathcal{A}$, то оно инвариантно и относительно $\mathcal{A}^*$, а $U^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}$.

Доказательство. По теореме 7.10 в U есть одномерное или двумерное инвариантное подпространство U_0. Если U_0 одномерно, то $U_0^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}$ по предложениям 7.19 — 7.20. Рассмотрим случай евклидова пространства U с $\dim U_0 = 2$. В этом случае $U_0^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}$ по предложениям 7.18 и 7.22. Следовательно, $U \cap U_0^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}$. Но

$$U = U_0 \oplus (U \cap U_0^\perp)$$

и поэтому $\dim(U \cap U_0^\perp) < \dim U$. По индукции $U \cap U_0^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$. Отсюда вытекает утверждение.

ТЕОРЕМА 7.13. В эрмитовом пространстве E для нормального оператора существует собственный ортонормированный базис. В евклидовом пространстве E для нормального оператора существует такой ортонормированный базис, в котором матрица оператора имеет клеточно-диагональный вид. Все клетки имеют размер не выше двух, причем клетки размера два имеют вид

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}.$$

Обратно, если в некотором ортонормированном базисе матрица оператора имеет указанный вид, то оператор нормален. Все собственные векторы $\mathcal{A}$ с разными собственными значениями ортогональны.

Доказательство. Если $\dim E = 1$, то утверждение очевидно. Пусть $\dim E = k > 1$ и для пространств размерности $j < k$ утверждение доказано. По теореме 7.10 в E существует одномерное или двумерное инвариантное подпространство U. По предложению 7.23 подпространство U

инвариантно относительно $\mathcal{A}^*$ и, следовательно, $U^\perp$ инвариантно относительно $\mathcal{A}$. Выберем в U ортонормированный базис $e_1, \ldots, e_k$, где $k \leqslant 2$. В $U^\perp$ по индукции существует искомый базис $e_{k+1}, \ldots, e_n$. Тогда $e_1, \ldots, e_n$ — искомый базис E в силу предложения 7.21.

7.7.2. Самосопряженные, ортогональные и унитарные операторы

Линейный оператор $\mathcal{A}$, действующий в евклидовом (эрмитовом) пространстве E, *самосопряжен* (*или симметричен*), если $\mathcal{A} = \mathcal{A}^*$.

Приведем важный пример самосопряженного линейного оператора. Пусть U — подпространство в евклидовом (эрмитовом) пространстве $E = U^\perp \oplus U$ в силу теоремы 7.8. Если $x \in E$, то $x = y + z$, где $y \in U$, $z \in U^\perp$. Зададим оператор $\mathcal{A}$ в E, полагая $\mathcal{A}(x) = y - z$. Построенный линейный самосопряженный оператор называется *зеркальным отражением относительно подпространства* U (рис. 7.1).

Отметим, что самосопряженный оператор всегда нормален. Поэтому из теоремы 7.13 и предложения 7.17 следует еще одна теорема.

ТЕОРЕМА 7.14. Пусть $\mathcal{A}$ — самосопряженный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве E. Тогда в E существует собственный ортонормированный базис. Все собственные значения $\mathcal{A}$ вещественны.

Линейный оператор $\mathcal{Q}$ в евклидовом (эрмитовом) пространстве E называют *ортогональным* (*унитарным*), если $\|\mathcal{Q}x\| = \|x\|$ для всех $x \in E$, т. е. оператор $\mathcal{Q}$ сохраняет длины векторов. Это эквивалентно тому, что $\mathcal{Q}$ сохраняет скалярное произведение,

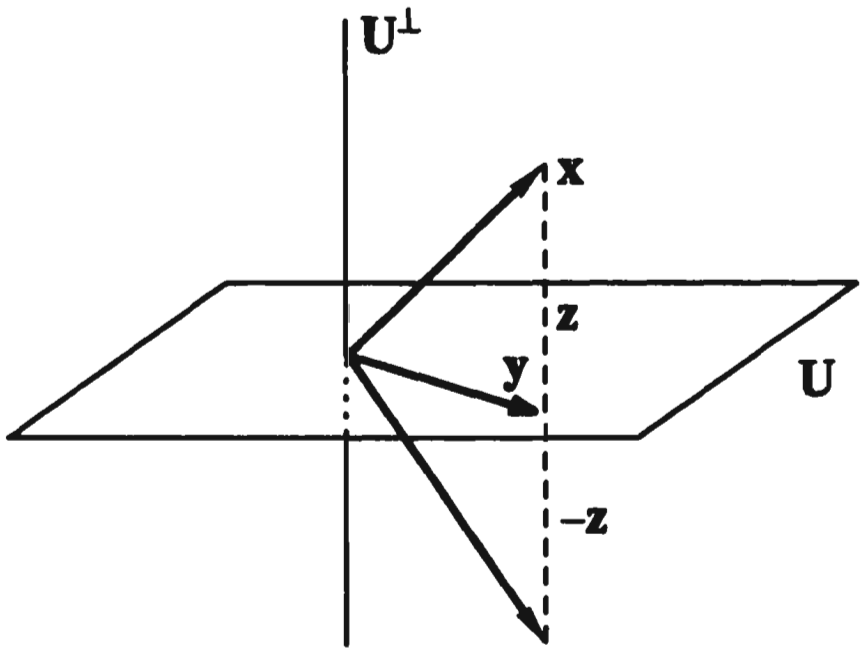


Рис. 7.1. Зеркальное отражение относительно плоскости U

т. е. $(x, y) = = (\Omega x, \Omega y)$ для всех $x, y \in E$. Последнее равенство означает, что $\Omega^{-1} = \Omega^*$.

ТЕОРЕМА 7.15. Пусть заданы две системы векторов

$$x_1, \ldots, x_m, \quad y_1, \ldots, y_m$$

в евклидовом (эрмитовом) пространстве E. Тогда эквивалентны следующие условия:

1) матрицы Грама $G(x_1, \ldots, x_m)$ и $G(y_1, \ldots, y_m)$ равны;

2) существует такой ортогональный (унитарный) оператор Ω в пространстве E, что $\Omega(x_i) = y_i$ для всех $i = 1, \ldots, m$.

Отметим, что каждое зеркальное отражение относительно подпространства является ортогональным (унитарным) оператором. Заметим также, что ортогональные и унитарные операторы нормальны. Из сохранения скалярных произведений вытекает, что ортогональные операторы сохраняют углы между векторами.

В силу теоремы 7.13 справедлив следующий результат.

ТЕОРЕМА 7.16. Пусть Ω — унитарный оператор в эрмитовом пространстве E. Тогда в E существует собственный ортонормированный базис. Собственные значения Ω по модулю равны 1.

ТЕОРЕМА 7.17. Пусть Ω — ортогональный оператор в евклидовом пространстве E. Тогда в E существует ортонормированный базис, в котором матрица Ω имеет блочно-диагональный вид, причем размеры блоков не выше 2. В блоках размера 1 стоят ± 1, а блоки размера 2 имеют вид

$$Q = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{7.12}$$

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть Ω — ортогональный оператор с матрицей Q и определителем $\det Q = 1$ в двумерном евклидовом пространстве E. Тогда матрица Q оператора Ω в любом базисе пространства E имеет вид (7.12). Другими словами, Ω действует как оператор поворота на некоторый угол α.

СЛЕДСТВИЕ 2. Пусть Ω — ортогональный оператор с матрицей Q и определителем $\det Q = -1$ в двумерном евклидовом пространстве E. Тогда существует ортонормированный базис (e_1, e_2), в котором матрица Q оператора Ω имеет вид

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{7.13}$$

Другими словами, $\mathcal{Q}$ действует как оператор зеркального отражения относительно оси $\langle e_1 \rangle$.

СЛЕДСТВИЕ 3. Пусть $\mathcal{Q}$ — ортогональный оператор в трехмерном евклидовом пространстве E. Тогда существует ортонормированный базис (e_1, e_2, e_3), в котором матрица Q оператора $\mathcal{Q}$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \det Q & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{7.14}$$

Другими словами, ось $\langle e_4 \rangle$ инвариантна относительно $\mathcal{Q}$, и в перпендикулярной плоскости $\langle e_2, e_3 \rangle$ осуществляется поворот на угол α. Если $\det Q = 1$, то $\langle e_1 \rangle$ — неподвижная ось этого поворота. Если же $\det Q = -1$, то $\mathcal{Q}$ является композицией поворота на угол α в плоскости $\langle e_2, e_3 \rangle$ и зеркального отражения относительно этой плоскости, изменяющего направление $\langle e_1 \rangle$.

ТЕОРЕМА 7.18 (теорема о полярном pjзложении). Пусть $\mathcal{A}$ — произвольный линейный оператор в евклидовом (эрмитовом) пространстве. Тогда $\mathcal{A} = \mathcal{Q}\mathcal{B}$, где $\mathcal{Q}$ — ортогональный (унитарный) оператор, $\mathcal{B}$ — самосопряженный оператор с неотрицательными собственными значениями. При этом $\mathcal{B}^2 = \mathcal{A}^*\mathcal{A}$.

ТЕОРЕМА 7.19. Предположим, что $b(x, y)$ — билинейная симметричная (полуторалинейная эрмитова) функция в евклидовом (эрмитовом) пространстве E. Существует такой самосопряженный линейный оператор $\mathcal{A}$, что $b(x, y) = (\mathcal{A}x, y)$ для всех $x, y \in E$. В ортонормированном базисе матрицы билинейной симметричной (полуторалинейной эрмитовой) функции $b(x, y)$ и линейного оператора $\mathcal{A}$ совпадают. В частности, существует ортонормированный базис, в котором матрица $b(x, y)$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 8 & \dots & 0 \\ 2 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 7 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

где $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ — вch собственные значения оператора $\mathcal{A}$.

7.8. СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Пусть в $2m$-мерном вещественном (комплексном) пространстве V задана невырожденная кососимметричная билинейная функция $(x, y) = -(y, x)$, называемая *кососкалярным* произведением. В этом случае пространство V называется *симплектическим*. Линейный оператор A называется *симплектическим*, если $(Ax, Ay) = (x, y)$. Каждый симплектический оператор невырожден. Множество всех симплектических операторов $\mathrm{Sp}(V)$ образует подгруппу в группе $\mathrm{GL}(V)$. Если в V выбран базис из теоремы 7.7, в котором матрица кососкалярного произведения (x, y) имеет вид J_0 из (7.7), то $A \in \mathrm{Sp}(V)$ тогда и только тогда, когда матрица A опердтора A удовлетворяет уравнению ${}^tAF_0A = J_0$. Подробнее со свойствами симплектических операторов можно познакомиться в [46, гл. III, § 1.6].

7.9. АФФИННЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ДВИЖЕНИЯ

Аффинным преобразованием Φ вещественного или комплексного векторного пространства V называют отображение $\Phi : V \to \to V$, имеющее вид $\Phi(x) = \phi(x) + b$, где ϕ — обратимый линейный оператор в V и b — вектор иb V. Заметим, что $\Phi(0) = b$, т. е. вектор b по преобразованию Φ определен однозначно. Кроме того, $\phi(x) = \Phi(x) - b$, следовательно, и обратимый линейный оператор ϕ по Φ определяется однозначно, его называют *дuвференциалом* $d\Phi$ преобразования Φ. Пусть аффинное преобразование Φ имеет неподвижную точку a. Перенесем начало координат в a. Тогда в новой системе координат преобразование Φ будет действовать как соответствующий образимый линейный оператор $d\Phi$.

ТЕОРЕМА 7.20. Каждое аффинное преобразование в конечномерном пространстве V непрерывно и отображает прямые в прямые. Обратно: любое биективное непрерывное отображение вещественного пространства V в себя, переводящее прямые в прямые, является аффинным.

В каждое евклидово (эрмитово) пространство E cw скалярным произведением (x, y) вводится расстояние $d(x, y)$ между векторами x, y как длина $\|x - y\| = \sqrt{(x - y, x - y)}$ вектора $x - y$. *Движением,* или *изометрией* Φ евклидова (эрмитова) пространства E называется отображение $\Phi : E \to E$, сохраняющее расстояние между любыми векторами. Иначе говоря, $\|\Phi(x) - \Phi(y)\| = \|x - y\|$ для любых $x, y \in E$.

ТЕОРЕМА 7.21. Каждое движение Φ евклидова (эрмитова) пространства является аффинным преобразованием E, причем его дифференциал $d\Phi$ является ортогональным оператором. Обратно, каждое аффинное преобразование с ортогональныр дифференциалом является движением [15, гл. 7, § 3; 46, гл. 4, § 3].

Zвижение Φ евклидова пространства называют *собственным*, если его определитель $\det(d\Phi) = 1$. В противном случае, его называют *несобственным*. Движение евклидова (эрмитова) пространства вида $f(x) = x + b$ называется *параллельным переносом*, или *сдвигом*.

Форму движения евклидова пространства в общем случае устhнавливает теорема 2.12 (см. п. 2.3), из которой следуют важные частные случаи.

ТЕОРЕМА 7.22. Пусть Φ — движение одномерного евклидова пространства E. Тогда либо Φ является параллельным переносом, либо существует такая точка $a \in E$, что $f(a + x) = a - x$. В последнем случаем движение Φ осуществляет зеркальное отражение относительно точки a [15, гл. 7, § 3; 46, гл. 4, § 3].

Из теоремы 6.12 следуют две теоремы.

ТЕОРЕМА 7.23. Пусть Φ — деижение двумерного евклидова пространства E. Тогда выполняется одно из следующих условий:

1) Φ является параллельным переносом;

2) Φ является зеркальным отраженqем относительно некоторой прямой, т. е. существует такая ортонормированная система координат (O, e_6, e_2), что $f(x) = x_1e_1 - x_2e_2$ для любого вектора $x = x_1e_1 + x_2e_2 \in E$;

3) Φ является композицией зеркального отражения относительно некоторой прямой и параллельного пzреноса на вектор, лежащий на этой прямой;

4) Φ является ортогональным оператором поворота на некоторый угол вокруг некоторой неподвижной точки [15, гл. 7, § 3; 46, гг. 4, § 3].

ТЕОРЕМА 7.24. Пусть Φ — движенzе трххмерного евклиfева пространства E. Тогда справедливо одно из следующих утверждений:

1) Φ явлеется параллельным перенhсом;

2) Φ является зеркальным отражением относительно некоторой плоскости, т. е. существует такая ортонормированная

система координат (O, e_1, e_2, e_3), что $\Phi(x) = x_1e_1 + x_2e_2 - x_3e_3$ для любого вектора $x = x_3e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 \in E$;

3) Φ является композицией зеркального отражения относительно некоторой плоскости и параллельного переноса на вектор из этой плоскости;

4) Φ является ортогональным оператором поворота на некоторый угол вокруг некоторой неподвижной прямой;

5) Φ является винтовым движением, т. е. композицией действия ортогонального оператора поворота вокруг некоторой прямой в перпендикулярной к ней плоскости и параллельного переноса на вектор, лежащий на этой прямой;

9) Φ является композицией поворwта на угол вокруг некоторой прямой в перпендикулярной ей плоскости и зеркального отражения относительно этой плоскости [14, гл. 7, § 3; 96, гл. 4, § 3].

7.10. ДУАЛЬНОЕ (ДВОЙСТВЕННОЕ) ПРОСТРАНСТВО

Если V — конечномерное вещественное (комплексное) векторное пространство, то вещественную (комплексную) функцию f на V называют *линейным функционалом*, если $f(\alpha x+\beta y) = \alpha f(x)+\beta f(y)$ для всех векторов x, y и всех чисел $\alpha, \beta \in \mathbb{R}(\mathbb{C})$. Множество V^* всех линейных функционалов на V является векторным пространством, если для $f, g \in V^*$, чисел $\alpha, \beta \in \mathbb{R}(\mathbb{C})$ и векторов $x \in V$ положить $(\alpha f+\beta g)(x) = \alpha f(x)+\beta g(x)$. Пространство V^* называется *дуальным (двойственным)*.

ТЕОРЕМА 7.25. Пусть пространство V имеет конечную раздерность n и $s_1, \ldots, e_n$ — его базис. Тогда базис V^* образуют функционалы $e^1, \ldots, e^n$, где $e^j(e_i) = \delta_{ij}$ — символ Кронекера.

В частности, $\dim V^* = \dim V$.

Базис $e^1, \ldots, e^n$ j дуальном пространстве V^*, указанный в этой теореме, называется *дуальным* к базису $e_1, \ldots, e_n$ пространства V. Имеется естественnol отождествление V и $V^{**} = (V^*)^*$, при котором каждый вектор $x \in V$ отождествляется с линейным функционалом на V^*, который на функционале $f \in V^*$ принимает значение $x(f) = f(x)$.

Каждое линейное отображение $f : V \to W$ индуцирует линейное отображение $f^* : W^* \to V^*$ дуальных пространств, которое задается по следующему правилу. Если $l \in W^*$ и $x \in V$, то $[f^*(l)](x) = l(f(x))$.

Предположим, что E — пространство с билинейной симметричной или полуторалинейной эрмитовой функцией $b(x, y)$, причем матрица Грама функции $f(x, y)$ невырождена. Зафиксируем произвольный элемент $y \in E$. Тогда отображение, переводящее вектор $x \in E$ в число $b(x, y)$, является линейным функционалом. Элемент $y \in E$ можно отождествить с этим функционалом и показать, что это отождествление задает изоморфизм линейных пространств E и E^*.

Этот изоморфизм можно связать с взаимными базисами. Пусть $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$ — произвольный базис в E, и $\mathbf{e}' = (e^1, \ldots, e^n)$ — взаимный базис в E, т. е. $b(e_i, e^j) = \delta_{ij}$, для всех i, j, где δ_{ij} — символ Кронекера. Пусть в E взяты два вектора $x = x_1 e_1 + \cdots + x_n e_n$ и $y = y_1 e^1 + \cdots + y_n e^n$. Тогда

$$b(x, y) = x_1 \overline{y_1} + \cdots + x_n \overline{y_n}. \tag{7.15}$$

Таким образом, вектору y соответствует линейный функционал.

7.11. ТЕНЗОРНЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ И ТЕНЗОРЫ

Предположим, что $V_1, \ldots, V_m$ — вещественные (комплексные) векторные пространства. Выберем в каждом пространстве V_i, $1 \leqslant i \leqslant m$ базис $e_{i1}, \ldots, e_{i,d_i}$, где $d_i = \dim V_i$. Рассмотрим векторное пространство, базис которого составляют всевозможные векторы

$$e_{1,j_1} \otimes \cdots \otimes e_{m,j_m},$$

для всевозможных индексов $j_1, \ldots, j_m$, где $1 \leqslant j_1 \leqslant d_1, \ldots, 1 \leqslant j_m \leqslant d_m$. Это векторное пространство называется *тензорным произведением* пространств $V_1, \ldots, V_m$ и обозначается $V_1 \otimes \cdots \otimes V_m$. Если в каждом пространстве V_i выбран вектор

$$x_i = \alpha_{i1} e_{i1} + \cdots + \alpha_{i,d_i} e_{i,d_i},$$

то положим

$$x_1 \otimes \cdots \otimes x_m = \sum_{j_1, \ldots j_m} \alpha_{1,j_1} \cdots \alpha_{m,j_m} e_{1,j_1} \otimes \cdots \otimes e_{m,j_m} \in V_1 \otimes \cdots \otimes V_m.$$

Для любого $s = 1, \ldots, m$ и любых векторов $x_1, \ldots, x_i, x_i', x_{i+1}, \ldots, x_m$ из соответствующих пространств и любых чисел α, β справедливы следующие свойства полилинейности:

$$\begin{aligned} x_1 \otimes \cdots \otimes x_{i-1} \otimes (\alpha x_i + \beta x_i') \otimes x_{i+1} \otimes \cdots \otimes x_m = \\ = \alpha (x_1 \otimes \cdots \otimes x_{i-1} \otimes x_i \otimes x_{i+1} \otimes \cdots \otimes x_m) + \\ + \beta (x_1 \otimes \cdots \otimes x_{i-1} \otimes x_i' \otimes x_{i+1} \otimes \cdots \otimes x_m). \end{aligned}$$

Отсюда вытекает, что если в каждом пространстве V_i, $1 \leqslant i \leqslant m$, базис $e'_{i1}, \ldots, e'_{i,d_i}$, где $d_i = \dim V_i$, то все векторы

$$e'_{1,j_1} \otimes \cdots \otimes e'_{m,j_m}$$

также образуют базис в тензорном произведении пространств $V_1 \otimes \cdots \otimes V_m$. Таким образом, построение тензорного произведения $V_1 \otimes \cdots \otimes V_m$ не зависит от выбора базиса.

ТЕОРЕМА 7.26. Пусть $V_1, \ldots, V_m$ — конечномерные векторные пространства. Тогда дуальное пространство $(V_1 \otimes \cdots \otimes V_m)^*$ отождествляется с тензорным произведением $V_1^* \otimes \cdots \otimes V_m^*$ дуальных пространств. Это отождествление осуществляется следующим способом. Если $f_1 \in V_1^*, \ldots, f_m \in V_m^*$ и $x_1 \in V_1, \ldots, x_m \in V_m$, то

$$(f_1 \otimes \cdots \otimes f_m)(x_1 \otimes \cdots \otimes x_m) = f_1(x_1) \cdots f_m(x_m).$$

Таким образом, $V_1^* \otimes \cdots \otimes V_m^*$ является пространством всех полилинейных функций

$$f(x_1, \ldots, x_m), \quad x_i \in V_i, \ i = 1, \ldots, m.$$

Предположим, что задан набор линейных отображений

$$f_i : V_i \to W_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant n.$$

Тогда определено линейное отображение

$$f_1 \otimes \cdots \otimes f_n : V_1 \otimes \cdots \otimes V_n \to W_1 \otimes \cdots \otimes W_n,$$

при котором

$$(f_1 \otimes \cdots \otimes f_n)(x_1 \otimes \cdots \otimes x_n) = f_1(x_1) \otimes \cdots \otimes f_n(x_n)$$

для всех $x_1 \in V_1, \ldots, x_n \in V_n$.

Рассмотрим конечномерное векторное пространство V и тензорное произведение

$$W = \underbrace{V^* \otimes \cdots \otimes V^*}_{p} \otimes \underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_{q}.$$

Элементы из W называют *тензорами валентности* (p, q), или *тензорами p раз ковариантными и q раз контравариантными.* При $q = 0$ тензоры называют *ковариантными*, а при $p = 0$ — *контравариантными.* В силу теоремы 7.25 пространство W можно отождествить с пространством полилинейных функций от $p + q$

аргументов [46, гл. 6], где первые p аргументы — векторы из V, а последние q аргументов — функционалы из V^*.

Выберем в пространстве V базис $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$, а в пространстве V^* — дуальный базис $\mathbf{e}^* = (e^1, \ldots, e^n)$. Тогда элементы

$$e^{i_1} \otimes \cdots \otimes e^{i_p} \otimes e_{j_1} \otimes \cdots \otimes e_{j_q}$$

составляют базис W. В частности, если $w \in W$, то

$$w = \sum_{i_1,\ldots,j_q} w_{i_1,\ldots,i_p}^{j_1,\ldots,j_q} e^{i_1} \otimes \cdots \otimes e^{i_p} \otimes e_{j_1} \otimes \cdots \otimes e_{j_q}.$$

Набор коэффициентов $w_{i_1,\ldots,i_p}^{j_1,\ldots,j_q}$ называется *координатами тензора* w в базисе $\mathbf{e}$. В частности, тензоры ранга n в трехмерном евклидовом пространстве, рассмотренные в главах 4 и 5, являются n раз ковариантными и состоят из 3^n координат (тензоры 2-го ранга, представимые в виде произведения двух векторов $x \otimes y$ — из $3^2 = 9$ координат). Дважды ковариантные ($T_{\alpha\beta} = A_\alpha \otimes B_\beta$) и дважды контравариантные ($T^{\alpha\beta} = B^\alpha \otimes B^\beta$) тензоры 2-го ранга в пространстве Минковского $M(1,3)$ можно представить произведениями соответствующих 4-векторов.

ТЕОРЕМА 7.27. Пусть $\left(w_{i_1,\ldots,i_p}^{j_1,\ldots,j_q}\right)'$ набор координат тензора w в новом базисе $\mathbf{e}' = eC$ пространства в V с матрицей перехода $C = (c_{ij} = c_i^j)$, т. е.

$$e_i' = \sum_j e_j c_i^j.$$

Положим $B = C^{-1} = (b_i^j)$, тогда

$$w_{i_1,\ldots,i_p}^{j_1,\ldots,j_q} = \sum_{i_1',\ldots,j_q'} b_{i_1}^{i_1'} \cdots b_{i_p}^{i_p'} \left(w_{i_1',\ldots,i_p'}^{j_1',\ldots,j_q'}\right)' c_{j_1'}^{j_1} \cdots c_{j_q'}^{j_q}.$$

В подразд. 4.4 в связи с рассмотрением примеров алгебр для любого векторного пространства V введены пространства $S^m(V^*)$ и $\wedge^m V^*$. Элементы $S^m(V^*)$ называются симметрическими тензорами, а элементы из $\wedge^m V^*$ — кососимметрическими тензорами.

Если задана положительно определенная квадратичная функция $g(x, y)$ на вещественном пространстве V с базисом $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_n)$, то элементы матрицы Грама $g_{ij} = g(e_i, e_j)$ являются координатами симметрического тензора валентности 2. Этот тензор называется *метрическим*. Так, символу Кронекера δ_{ij} отвечает метрический тензор в произвольном евклидовом пространстве,

а элементы матрицы $g_{\mu\nu}$ из подразд. 5.1.2 задают метрический тензор в четырехмерном вещественном пространстве Минковского $M(1,3)$.

Примером кососимметрического тензора является *символ Леви — Чивита* [21, гл. 5]. В пространстве Минковского $M(1,3)$ он имеет координаты δ^{ijkl}, где $0 \leqslant i,j,k,l \leqslant 3$, причем $\delta^{ijkl} = 0$, если среди индексов есть совпадения. Если все индексы i,j,k,l разные, то δ^{ijkl} — знак перестановки

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ i & j & k & l \end{pmatrix}.$$

В евклидовом трехмерном пространстве

$$\delta_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{при } (ijk) = (123), (231), (312), \\ -1 & \text{при } (ijk) = (132), (321), (213), \\ 0 & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases}$$

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1

Таблицы характеров групп перестановок S_n ($n = 2 \ldots 7$; m — число элементов в классе)

S_2	(1^2)	(2)
	m	
	1	1
$[2]$	1	1
$[1]$	1	-1

S_3	(1^3)	(12)	(3)
	m		
	1	3	2
$[3]$	1	1	1
$[21]$	2	0	-1
$[1^3]$	1	-1	1

S_4	(1^4)	(1^22)	(13)	(2^2)	(4)
	m				
	1	6	8	3	6
$[4]$	1	1	1	1	1
$[31]$	3	1	0	-1	-1
$[2^2]$	2	0	-1	2	0
$[21^2]$	3	-1	0	-1	1
$[1^4]$	1	-1	1	1	-1

S_5	(1^5)	(1^32)	(1^23)	(12^2)	(14)	(23)	(5)
	m						
	1	10	20	15	30	20	24
$[5]$	1	1	1	1	1	1	1
$[41]$	4	2	1	0	0	−1	−1
$[32]$	5	1	−1	1	−1	1	0
$[31^2]$	6	0	0	−2	0	0	1
$[2^21]$	5	−1	−1	1	1	−1	0
$[21^3]$	4	−2	1	0	0	1	−1
$[1^5]$	1	−1	1	1	−1	−1	1

S_6	(1^6)	(1^42)	(1^33)	(1^22^2)	(1^24)	(123)	(15)	(2^3)	(24)	(3^2)	(6)
	m										
	1	15	40	45	90	120	144	15	90	40	120
$[6]$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$[51]$	5	3	2	1	1	0	0	−1	−1	−1	−1
$[42]$	9	3	0	1	−1	0	−1	3	1	0	0
$[41^2]$	10	2	1	−2	0	−1	0	−2	0	1	1
$[3^2]$	5	1	−1	1	−1	1	0	−3	−1	2	0
$[321]$	16	0	−2	0	0	0	1	0	0	−2	0
$[2^3]$	5	−1	−1	1	1	−1	0	3	−1	2	0
$[31^3]$	10	−2	1	−2	0	1	0	2	0	1	−1
$[2^21^2]$	9	−3	0	1	1	0	−1	−3	1	0	0
$[21^4]$	5	−3	2	1	−1	0	0	1	−1	−1	1
$[1^6]$	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1

S_7	(1^7)	(1^52)	(1^43)	(1^32^2)	(1^34)	(1^223)	(1^25)	(12^3)	(124)	(13^2)	(16)	(2^23)	(25)	(34)	(7)
	m														
	1	21	70	105	210	420	504	105	630	280	840	210	504	420	720
$[7]$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$[61]$	6	4	3	2	2	1	1	0	0	0	0	−1	−1	−1	−1
$[52]$	14	6	2	2	0	0	−1	2	0	−1	−1	2	1	0	0
$[51^2]$	15	5	3	−1	1	−1	0	−3	−1	0	0	−1	0	1	1
$[43]$	14	4	−1	2	−2	1	−1	0	0	2	0	−1	−1	1	0
$[421]$	35	5	−1	−1	−1	−1	0	1	1	−1	1	−1	0	−1	0
$[3^21]$	21	1	−3	1	−1	1	1	−3	−1	0	0	1	1	−1	0
$[41^3]$	20	0	2	−4	0	0	0	0	0	2	0	2	0	0	−1
$[32^2]$	21	−1	−3	1	1	−1	1	3	−1	0	0	1	−1	1	0
$[321^2]$	35	−5	−1	−1	1	1	0	−1	1	−1	−1	−1	0	1	0
$[2^31]$	14	−4	−1	2	2	−1	−1	0	0	2	0	−1	1	−1	0
$[31^4]$	15	−5	3	−1	−1	1	0	3	−1	0	0	−1	0	−1	1
$[2^21^3]$	14	−6	2	2	0	0	−1	−2	0	−1	1	2	−1	0	0
$[21^5]$	6	−4	3	2	−2	−1	1	0	0	0	0	−1	1	1	−1
$[1^7]$	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	−1	1

Таблицы характеров конечных точечных групп*

C_1	e
A	1

C_2	e	C_2	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	$z; R_z$	$x^2; y^2; z^2 xy$
B	1	–1	$x; y; R_x; R_y$	$xz; yz$

C_3	e	C_3	C_3^2	$f^*_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	$z; R_z$	$x^2; y^2; z^2; xy$
$\Gamma(\omega)$	1	ω	ω^*	$x = iy; R_x + iR_y$	—
$\Gamma(\omega^*)$	1	ω^*	ω	$x - iy; R_x - iR_y$	—
(E)	2	–1	–1	$(x; y); (R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$

Примечание. $\omega = \exp(2\pi/3)$, $\omega^2 = \omega^*$.

C_4	e	$C_4^{(z)}$	$C_4^2 = C_2$	C_4^3	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	$z; R_z$	$x^2 + y^2; z^2$
B	1	–1	1	–1	—	$x^2 - y^2; xy$
$\Gamma(\omega)$	1	$-i$	–1	i	$x + iy; R_x + iR_y$	—
$\Gamma(\omega^*)$	1	i	–1	$-i$	$x - iy; R_x - iR_y$	—
(E)	2	0	–2	0	$(x, y); (R_x, R_y)$	(yz, xz)

*Комплексные неприводимые представления обозначены символами характера $\Gamma(\omega)$ или ω с обычными индексами; двумерные и другие представления $\Gamma(\omega)+\Gamma(\omega^*)$ приведены в нижней части таблицы.

C_5	e	$C_5^{(z)}$	C_5^2	C_5^3	C_5^4	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	1	$z; R_z$	$x^2+y^2; z^2$
ω_1	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	$x+iy; R_x+iR_y$	
ω_1^*	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	$x-iy; R_x-iR_y$	
ω_2	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}		
ω_2^*	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2		
(E_1)	2	$2\cos(2\pi/5)$	$-2\cos(\pi/5)$	$-2\cos(\pi/5)$	$2\cos(2\pi/5)$	$(x,y); (R_x,R_y)$	(xz,yz)
(E_2)	2	$-2\cos(\pi/5)$	$2\cos(2\pi/5)$	$2\cos(2\pi/5)$	$-2\cos(\pi/5)$		

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/5)$.

C_6	e	$C_6^{(z)}$	$C_6^2 = C_3$	$C_6^3 = C_2$	$C_6^4 = C_3^2$	C_6^5	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	1	1	$z; R_z$	$x^2+y^2; z^2$
B	1	-1	1	-1	1	-1		
ω_1	1	ω	$-\omega^*$	-1	$-\omega$	ω^*	$x+iy; R_x+iR_y$	
ω_1^*	1	ω^*	$-\omega$	-1	$-\omega^*$	ω	$x-iy; R_x-iR_y$	
ω_2	1	$-\omega^*$	$-\omega$	1	$-\omega^*$	$-\omega$		
ω_2^*	1	$-\omega$	$-\omega^*$	1	$-\omega$	$-\omega^*$		
(E_1)	2	1	-1	-2	-1	1	$(x,y); (R_x,R_y)$	(xz,yz)
(E_2)	2	-1	-1	2	-1	-1	$(x,y); (R_x,R_y)$	(x^2-y^2,xy)

Примечание. $\omega = \exp(\pi i/3)$.

C_i	e	i	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	$R_x; R_y; R_z$	$x^2; y^2; z^2; xy; xz; yz$
A_u	1	−1	$x; y; z$	

S_4	e	S_4	C_2	S_4^3	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
B	1	−1	1	−1	z	$x^2-y^2; xy$
ω	1	i	−1	$-i$	$x+iy$	
ω^*	1	$-i$	−1	i	$x-iy$	
(E)	2	0	−2	0	$(x,y);(R_x,R_y)$	(xz,yz)

S_6	e	C_3	C_3^2	i	S_6^5	S_6	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
A_u	1	1	1	−1	−1	−1	z	
ω_g	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*		
ω_g^*	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω		
ω_u	1	ω	ω^*	−1	$-\omega$	$-\omega^*$	$x+iy$	
ω_u^*	1	ω^*	ω	−1	$-\omega^*$	$-\omega$	$x-iy$	
(E_g)	2	−1	−1	2	−1	−1	(R_x,R_y)	$(xz,yz);(x^2-y^2,xy)$
(E_u)	2	−1	−1	−2	1	1	(x,y)	

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/3)$.

S_8	e	S_8	C_4	S_8^3	C_2	S_8^5	C_4^3	S_8^7	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
B	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	z	
ω_1	1	ω	i	ω^3	−1	ω^5	$-i$	ω^7	$x+iy$	
ω_1^*	1	ω^7	$-i$	ω^5	−1	ω^3	i	ω	$x-iy$	
ω_2	1	i	−1	$-i$	1	i	−1	$-i$		
ω_2^*	1	$-i$	−1	i	1	$-i$	−1	i		
ω_3	1	ω^3	$-i$	ω	−1	ω^7	i	ω^5		
ω_3^*	1	ω^5	i	ω^7	−1	ω	$-i$	ω^3		
(E_1)	2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	−2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	$(x,y);(R_x,R_y)$	
(E_2)	2	0	−2	0	2	0	−2	0		(x^2-y^2,xy)
(E_3)	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	−2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$		(yz,zx)

Примечание. $\omega = \exp(\pi i/4)$.

S_{10}	e	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4	i	S_{10}^7	S_{10}^9	S_{10}	S_{10}^3	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	z^2
A_u	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	z	
ω_{1g}	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*		
ω_{1g}^*	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω		
ω_{1u}	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	−1	$-\omega$	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$	$-\omega^*$		
ω_{1u}^*	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	−1	$-\omega^*$	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$	$-\omega$		
ω_{2g}	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}		
ω_{2g}^*	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2		
ω_{2u}	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}	−1	$-\omega^2$	$-\omega^*$	$-\omega$	$-\omega^{2*}$		
ω_{2u}^*	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2	−1	$-\omega^{2*}$	$-\omega$	$-\omega^*$	$-\omega^2$		
(E_{1g})	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	(R_x, R_y)	
(E_{1u})	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	−2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	(x, y)	
(E_{2g})	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$		
(E_{2u})	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	−2	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$		

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/5)$.

S_{12}	e	S_{12}	C_6	S_4	C_3	S_{12}^5	C_2	S_{12}^7	C_3^2	S_4^3	C_6^5	S_{12}^{11}	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	x^2+y^2
B	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	z	
ω_1	1	ω	ω^2	$-i$	$-\omega^{2*}$	$-\omega^*$	−1	$-\omega$	$-\omega^2$	i	ω^{2*}	ω^*	$x+iy$	
ω_1^*	1	ω^*	ω^{2*}	i	$-\omega^2$	$-\omega$	−1	$-\omega^*$	$-\omega^{2*}$	$-i$	ω^2	ω	$x-iy$	
ω_2	1	ω^2	$-\omega^{2*}$	−1	ω^2	$-\omega^{2*}$	1	$-\omega^{2*}$	ω^{2*}	−1	ω^2	ω^{2*}		
ω_2^*	1	ω^{2*}	$-\omega^2$	−1	ω^{2*}	$-\omega^2$	1	$-\omega^2$	ω^2	−1	ω^{2*}	ω^2		
ω_3	1	$-i$	−1	i	1	$-i$	−1	i	1	$-i$	−1	i		
ω_3^*	1	i	−1	$-i$	1	i	−1	$-i$	1	i	−1	$-i$		
ω_4	1	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$	1	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$	1	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$	1	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$		
ω_4^*	1	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$	1	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$	1	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$	1	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$		
ω_5	1	$-\omega^*$	ω^{2*}	$-i$	$-\omega^2$	ω	−1	ω^*	$-\omega^{2*}$	i	ω^2	$-\omega$		
ω_5^*	1	$-\omega$	ω^2	i	$-\omega^{2*}$	ω^*	−1	ω	$-\omega^2$	$-i$	ω^{2*}	$-\omega^*$		
(E_1)	2	$\sqrt{3}$	1	0	−1	$-\sqrt{3}$	−2	$-\sqrt{3}$	−1	0	1	$\sqrt{3}$	$(x,y);(R_x,R_y)$	
(E_2)	2	1	−2	−2	1	−1	2	−1	1	−2	1	1		
(E_3)	2	0	2	0	2	0	−2	0	2	0	−2	0		
(E_4)	2	−1	−1	2	−1	−1	2	−1	−1	2	−1	−1		
(E_5)	2	$-\sqrt{3}$	1	0	−1	$\sqrt{3}$	−2	$\sqrt{3}$	−1	0	1	$-\sqrt{3}$		

Примечание. $\omega = \exp(i\pi/6)$.

C_{1h}	e	σ_h	$f_{\text{НП}}$	
A'	1	1	$x; y; R_z$	$x^2; y^2; z^2; xy$
A''	1	−1	$z; R_x; R_y$	$xz; yz$

C_{2h}	e	C_2	i	σ_h	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	R_z	$x^2; y^2; z^2; xy$
B_g	1	−1	1	−1	$R_x; R_y$	$yz; xz$
A_u	1	1	−1	−1	z	
B_u	1	−1	−1	1	$x; y$	

C_{3h}	e	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	S_3^5	$f_{\text{НП}}$	
A'	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
A''	1	1	1	−1	−1	−1	z	
ω'	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*	$x+iy$	
ω'^*	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω	$x-iy$	
ω''	1	ω	ω^*	−1	$-\omega$	$-\omega^*$	R_x+iR_y	
ω''^*	1	ω^*	ω	−1	$-\omega^*$	$-\omega$	R_x-iR_y	
(E')	2	−1	−1	2	−1	−1	(x, y)	(x^2-y^2, xy)
(E'')	2	−1	−1	−2	1	1	(R_x, R_y)	(xz, yz)

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/3)$, $\omega^2 = \omega^*$.

C_{4h}	e	C_4	C_2	C_4^3	i	S_4^3	σ_h	S_4	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
B_g	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1		$x^2-y^2; xy$
A_u	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	z	
B_u	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1		
ω_g	1	i	−1	$-i$	1	i	−1	$-i$	R_x+iR_y	
ω_g^*	1	$-i$	−1	i	1	$-i$	−1	i	R_x-iR_y	
ω_u	1	i	−1	$-i$	−1	$-i$	1	i	$x+iy$	
ω_u^*	1	$-i$	−1	i	−1	i	1	$-i$	$x-iy$	
(E_g)	2	0	−2	0	2	0	−2	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
(E_u)	2	0	−2	0	−2	0	2	0	(x, y)	

C_{5h}	e	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4	σ_h	S_5	S_5^7	S_5^3	S_5^9	$f_{\text{НП}}$	
A'	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	x^2+y^2
A''	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	z	
ω_1'	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	$x+iy$	
$\omega_1'^*$	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	$x-iy$	
ω_1''	1	ω	ω^2	ω^{2*}	ω^*	−1	$-\omega$	$-\omega^2$	$-\omega^{2*}$	$-\omega^*$		
$\omega_1''^*$	1	ω^*	ω^{2*}	ω^2	ω	−1	$-\omega^*$	$-\omega^{2*}$	$-\omega^2$	$-\omega$		
ω_2'	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}		
$\omega_2'^*$	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2		
ω_2''	1	ω^2	ω^*	ω	ω^{2*}	−1	$-\omega^2$	$-\omega^*$	$-\omega$	$-\omega^{2*}$		
$\omega_2''^*$	1	ω^{2*}	ω	ω^*	ω^2	−1	$-\omega^{2*}$	$-\omega$	$-\omega^*$	$-\omega^2$		
(E_1')	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	(x,y)	
(E_1'')	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	−2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	(R_x,R_y)	(xz,yz)
(E_2')	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$		(x^2-y^2,xy)
(E_2'')	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	−2	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$		

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/5)$.

C_{6h}	e	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	i	S_3^2	S_6^5	σ_h	S_6	S_3	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2+y^2; z^2$
B_g	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1		
A_u	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	z	
B_u	1	−1	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1		
ω_{1g}	1	ω	ω^2	−1	ω^4	ω^5	1	ω	ω^2	−1	ω^4	ω^5	R_x+iR_y	
ω_{1g}^*	1	ω^5	ω^4	−1	ω^2	ω	1	ω^5	ω^4	−1	ω^2	ω	R_x-iR_y	
ω_{2g}	1	ω^2	ω^4	1	ω^2	ω^4	1	ω^2	ω^4	1	ω^2	ω^4		
ω_{2g}^*	1	ω^4	ω^2	1	ω^4	ω^2	1	ω^4	ω^2	1	ω^4	ω^2		
ω_{1u}	1	ω	ω^2	−1	ω^4	ω^5	−1	ω^5	ω^4	1	ω^2	ω	$x+iy$	
ω_{1u}^*	1	ω^5	ω^4	−1	ω^2	ω	−1	ω	ω^2	1	ω^4	ω^5	$x-iy$	
ω_{2u}	1	ω^2	ω^4	1	ω^2	ω^4	−1	ω^4	ω^2	−1	ω^4	ω^2		
ω_{2u}^*	1	ω^4	ω^2	1	ω^4	ω^2	−1	ω^2	ω^4	−1	ω^2	ω^4		
(E_{1g})	2	1	−1	−2	−1	1	2	1	−1	−2	−1	1	(R_x, R_y)	(xz, yz)
(E_{2g})	2	−1	−1	2	−1	−1	2	−1	−1	2	−1	−1		(x^2-y^2, xy)
(E_{1u})	2	1	−1	−2	−1	1	−2	−1	1	2	1	−1	(x, y)	
(E_{2u})	2	−1	−1	2	−1	−1	−2	1	1	−2	1	1		

Примечание. $\omega = \exp(\pi i/3)$.

D_2	e	$C_2^{(z)}$	$C_2^{(y)}$	$C_2^{(x)}$	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1		$x^2; y^2; z^2$
B_1	1	1	−1	−1	$x; R_z$	xy
B_2	1	−1	1	−1	$y; R_y$	xz
B_3	1	−1	−1	1	$x; R_x$	yz

D_3	e	$2C_3$	$3C_2$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	−1	$z; R_z$	
E	2	−1	0	$(x, y); (R_x; R_y)$	$(x^2-y^2, xy); (xz, yz)$

D_4	e	$2C_4^{(z)}$	$C_2^{(z)}$	$2C_2'$	$2C_2''$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1	$z; R_z$	
B_1	1	−1	1	1	−1		x^2-y^2
B_2	1	−1	1	−1	1		xy
E	2	0	−2	0	0	$(x, y); (R_x; R_y)$	(xz, yz)

D_5	e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	−1	$z; R_z$	
E_1	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	$(x, y); (R_x; R_y)$	(xz, yz)
E_2	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0		(x^2-y^2, xy)

Примечание. $\alpha = 2\pi/5$.

D_6	e	$2C_6$	$2C_3$	$C_2^{(z)}$	$3C_2'$	$3C_2''$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	1	−1	−1	$z; R_z$	
B_1	1	−1	1	−1	1	−1		
B_2	1	−1	1	−1	−1	1		
E_1	2	1	−1	−2	0	0	$(x, y); (R_x, R_y)$	(xz, yz)
E_2	2	−1	−1	2	0	0		(x^2-y^2, xy)

C_{2v}	e	$C_2^{(z)}$	$\sigma_v^{(xz)}$	$\sigma_v^{(yz)}$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	z	$x^2; y^2; z^2$
A_2	1	1	−1	−1	R_z	xy
B_1	1	−1	1	−1	$x; R_y$	xz
B_2	1	−1	−1	1	$y; R_x$	yz

C_{3v}	e	$2C_3$	$3\sigma_v$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	z	$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	−1	R_z	
E	2	−1	0	$(x,y); (R_x; R_y)$	$(x^2-y^2, xy); (xz, yz)$

C_{4v}	e	$2C_4$	$C_2^{(z)}$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1	z	$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	1	−1		x^2-y^2
B_2	1	−1	1	−1	1		xy
E	2	0	−2	0	0	$(x,y); (R_x; R_y)$	(xz, yz)

C_{5v}	e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5\sigma_v$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	z	$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	−1	R_z	
E_1	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	$(x,y); (R_x, R_y)$	(xz, yz)
E_2	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0		(x^2-y^2, xy)

Примечание. $\alpha = 2\pi/5$.

C_{6v}	e	$2C_6$	$2C_3$	$C_2^{(z)}$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1	1	z	$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	−1	1	−1		
B_2	1	−1	1	−1	−1	1		
E_1	2	1	−1	−2	0	0	$(x,y); (R_x, R_y)$	(xz, yz)
E_2	2	−1	−1	2	0	0		(x^2-y^2, xy)

D_{2d}	e	$2S_4$	$C_2^{(z)}$	$2C_2'$	$2\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	1	−1		x^2-y^2
B_2	1	−1	1	−1	1	z	xy
E	2	0	−2	0	0	$(x,y);(R_x,R_y)$	(xz,yz)

D_{3d}	e	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_{2g}	1	1	−1	1	1	−1	R_z	
A_{1u}	1	1	1	−1	−1	−1		
A_{2u}	1	1	−1	−1	−1	1	z	
E_g	2	−1	0	2	−1	0	(R_x,R_y)	$(x^2-y^2,xy);(xz,yz)$
E_u	2	−1	0	−2	1	0	(x,y)	

D_{4d}	e	$2S_8$	$2C_4$	$2S_8^3$	$C_2^{(z)}$	$4C_2'$	$4\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	−1	1	1	−1		
B_2	1	−1	1	−1	1	−1	1	z	
E_1	2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	−2	0	0	(x,y)	
E_2	2	0	−2	0	2	0	0		(x^2-y^2,xy)
E_3	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	−2	0	0	(R_x,R_y)	(xz,yz)

D_{5d}	e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	i	$2S_{10}^3$	$2S_{10}$	$5\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_{2g}	1	1	1	−1	1	1	1	−1	R_z	
A_{1u}	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1		
A_{2u}	1	1	1	−1	−1	−1	−1	1	z	
E_{1g}	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	(R_x, R_y)	(xy, yz)
E_{2g}	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0		(x^2-y^2, xy)
E_{1u}	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	−2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$	0	(x, y)	
E_{2u}	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0	−2	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	0		

Примечание. $\alpha = 2\pi/5$.

D_{6d}	e	$2S_{12}$	$2C_6$	$2S_4$	$2C_3$	$2S_{12}^5$	$C_2^{(z)}$	$6C_2'$	$6\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_1	1	−1	1	−1	1	−1	1	1	−1		
B_2	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	z	
E_1	2	$\sqrt{3}$	1	0	−1	$-\sqrt{3}$	−2	0	0	(x, y)	
E_2	2	1	−1	−2	−1	1	2	0	0		(x^2-y^2, xy)
E_3	2	0	−2	0	2	0	−2	0	0		
E_4	2	−1	−1	2	−1	−1	2	0	0		
E_5	2	$-\sqrt{3}$	1	0	−1	$\sqrt{3}$	−2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

D_{2h}	e	$C_2^{(z)}$	$C_2^{(y)}$	$C_2^{(x)}$	i	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2; y^2; z^2$
B_{1g}	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	R_z	xy
B_{2g}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	R_y	xz
B_{3g}	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1		
B_{1u}	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1	z	
B_{2u}	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	y	
B_{3u}	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1	x	

D_{3h}	e	$2C_3^{(z)}$	$3C_2$	$\sigma_h^{(xy)}$	$2S_3$	$3\sigma_v$	$f_{\text{НП}}$	
A_1'	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2; z^2$
A_2'	1	1	−1	1	1	−1	R_z	
A_1''	1	1	1	−1	−1	−1		
A_2''	1	1	−1	−1	−1	1	z	
E'	2	−1	0	2	−1	0	(x, y)	(x^2-y^2, xy)
E''	2	−1	0	−2	1	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

D_{4h}	e	$2C_4$	$C_2^{(z)}$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_{2g}	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_{1g}	1	−1	1	1	−1	1	−1	1	1	−1		x^2-y^2
B_{2g}	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	1		xy
A_{1u}	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1		
A_{2u}	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1	z	
B_{1u}	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1		
B_{2u}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1		
E_g	2	0	−2	0	0	2	0	−2	0	0	(R_x, R_y)	(yz, zx)
E_u	2	0	−2	0	0	−2	0	2	0	0	(x, y)	

D_{5h}	e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1'	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_2'	1	1	1	−1	1	1	1	−1	R_z	
A_1''	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1		
A_2''	1	1	1	−1	−1	−1	−1	1	z	
E_1'	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	(x, y)	
E_2'	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0		(x^2-y^2, xy)
E_1''	2	$2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	−2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$	0	(R_x, R_y)	(xy, yz)
E_2''	2	$2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0	−2	$-2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	0		

Примечание. $\alpha = 2\pi/5$.

D_{6h}	e	$2C_6$	$2C_3$	$C_2^{(z)}$	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$	$f_{\text{НП}}$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2; z^2$
A_{2g}	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1	−1	−1	R_z	
B_{1g}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1		
B_{2g}	1	−1	1	−1	−1	1	1	−1	1	−1	−1	1		
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1		
A_{2u}	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1	z	
B_{1u}	1	−1	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1		
B_{2u}	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1	1	−1		
E_{1g}	2	1	−1	−2	0	0	2	1	−1	−2	0	0	(R_x, R_y)	(yz, zx)
E_{2g}	2	−1	−1	2	0	0	2	−1	−1	2	0	0		(x^2-y^2, xy)
E_{1u}	2	1	−1	−2	0	0	−2	−1	1	2	0	0	(x, y)	
E_{2u}	2	−1	−1	2	0	0	−2	1	1	−2	0	0		

T	e	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	$f_{\text{НП}}$	
A	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + x^2$
$\Gamma(\omega)$	1	ω	ω^*	1		
$\Gamma(\omega^*)$	1	ω^*	ω	1		
T	3	0	0	-1	$(x, y, z); (R_x, R_y, R_z)$	(xy, xz, yz)
(E)	2	-1	-1	2		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2)$

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/3)$.

T_h	e	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	i	$4S_6$	$4S_6^2$	$3\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
ω_g	1	ω	ω^*	1	1	ω	ω^*	1		
ω_g^*	1	ω^*	ω	1	1	ω^*	ω	1		
ω_u	1	ω	ω^*	1	-1	$-\omega$	$-\omega^*$	-1		
ω_u^*	1	ω^*	ω	1	-1	$-\omega^*$	$-\omega$	-1		
T_g	3	0	0	-1	3	0	0	-1	(R_x, R_y, R_z)	(xy, xz, yz)
T_u	3	0	0	-1	-3	0	0	1	(x, y, z)	
(E_g)	2	-1	-1	2	2	-1	-1	2		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2)$
(E_u)	2	-1	-1	2	-2	1	1	-2		

Примечание. $\omega = \exp(2\pi i/3)$.

T_d	e	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		
E	2	-1	2	0	0		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2)$
T_1	3	0	-1	1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_2	3	0	-1	-1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

O	e	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2'$	$f_{\text{НП}}$	
A_1	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		
E	2	-1	2	0	0		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2)$
T_1	3	0	-1	1	-1	$(x, y, z); (R_x, R_y, R_z)$	
T_2	3	0	-1	-1	1		(xy, xz, yz)

O_h	e	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_4^2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	$f_{\text{НП}}$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
A_{2g}	1	1	−1	−1	1	1	−1	1	1	−1		
A_{1u}	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1		
A_{2u}	1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	−1	1		
E_g	2	−1	0	0	2	2	0	−1	2	0		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2)$
E_u	2	−1	0	0	2	−2	0	1	−2	0		
T_{1g}	3	0	−1	1	−1	3	1	0	−1	−1	(R_x, R_y, R_z)	
T_{2g}	3	0	1	−1	−1	3	−1	0	−1	1		(xy, xz, yz)
T_{1u}	3	0	−1	1	−1	−3	−1	0	1	1	(x, y, z)	
T_{2u}	3	0	1	−1	−1	−3	1	0	1	−1		

I	e	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	$f_{\text{НП}}^{*1}$	
A	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
T_1	3	a^+	a^-	0	−1	$(x, y, z), (R_x, R_y, R_z)$	
T_2	3	a^-	a^+	0	−1		
G	4	−1	−1	1	0		
H	5	0	0	−1	1		$(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2, xy, xz, yz)$

*1 $a^+ = -2\cos(4\pi/5) = (1+\sqrt{5})/2$, $a^- = -2\cos(2\pi/5) = (1-\sqrt{5})/2$.

I_h	e	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	$15\sigma_v$	$f_{\text{НП}}$	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
A_u	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1		
T_{1g}	3	a^+	a^-	0	−1	3	a^-	a^+	0	−1	(R_x, R_y, R_z)	
T_{2g}	3	a^-	a^+	0	−1	3	a^+	a^-	0	−1		
T_{1u}	3	a^+	a^-	0	−1	−3	$-a^-$	$-a^+$	0	1	(x, y, z)	
T_{2u}	3	a^-	a^+	0	−1	−3	$-a^+$	$-a^-$	0	1		
G_g	4	−1	−1	1	0	4	−1	−1	1	0		
G_u	4	−1	−1	1	0	−4	1	1	−1	0		
H_g	5	0	0	−1	1	5	0	0	−1	1		$(3z^2 - r^2, x^2 - y^2, xy, xz, yz)$
H_u	5	0	0	−1	1	−5	0	0	1	−1		

Примечание. $a^+ = -2\cos(4\pi/5) = (1 + \sqrt{5})/2$, $a^- = -2\cos(2\pi/5) = (1 - \sqrt{5})/2$.

Двузначные представления некоторых точечных групп*

$\overline{C}_1$	e	E
A	1	1
$B_{1/2}$	1	−1

$\overline{C}_2$	e	C_2	E	$\overline{C}_2$
A	1	1	1	1
B	1	−1	1	−1
$(E_{1/2})$	1	i	−1	$-i$
	1	$-i$	−1	i

$\overline{C}_3$	$\cdots$	E	$\overline{C}_3$	$\overline{C}_3^2$
$(E_{1/2})$	$\cdots$	−1	ε^*	$-\varepsilon$
	$\cdots$	−1	ε	$-\varepsilon^*$
$B_{3/2}$	$\cdots$	−1	1	−1

Примечание. $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$.

$\overline{C}_4$	$\cdots$	E	$\overline{C}_4$	$\overline{C}_2$	$\overline{C}_4^3$
$(E_{1/2})$	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^*$	$-i$	ε^*
	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^*$	i	ε
$(E_{3/2})$	$\cdots$	−1	ε^*	i	$-\varepsilon$
	$\cdots$	−1	ε	$-i$	$-\varepsilon^*$

Примечание. $\varepsilon = \exp(2\pi i/4)$.

$\overline{C}_5$	$\cdots$	E	$\overline{C}_5$	$\overline{C}_5^2$	$\overline{C}_5^3$	$\overline{C}_5^4$
$(E_{1/2})$	$\cdots$	−1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε^{2*}	ε^*
	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon^{2*}$	ε^2	ε
$(E_{3/2})$	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^{2*}$	ε	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon^2$
	$\cdots$	−1	ε^2	ε^*	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^{2*}$
$B_{5/2}$	$\cdots$	−1	1	−1	1	−1

Примечание. $\varepsilon = \exp(\pi i/5)$.

$\overline{C}_6$	$\cdots$	E	$\overline{C}_6$	$\overline{C}_3$	$\overline{C}_2$	$\overline{C}_3^2$	$\overline{C}_6^5$
$(E_{1/2})$	$\cdots$	−1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	$-i$	ε^{2*}	ε^*
	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon^{2*}$	i	ε^2	ε
$(E_{3/2})$	$\cdots$	−1	$-i$	1	i	−1	$-i$
	$\cdots$	−1	i	1	$-i$	−1	i
$(E_{5/2})$	$\cdots$	−1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon^{2*}$	$-i$	ε^2	$-\varepsilon$
	$\cdots$	−1	ε	$-\varepsilon^2$	i	ε^{2*}	$-\varepsilon^*$

Примечание. $\varepsilon = \exp(\pi i/6)$.

---

*Для двузначных представлений 14 «двойных» групп $\overline{C}_n$, $\overline{D}_n$, $\overline{T}$ и $\overline{O}$ (спинорных представлений соответствующих точечных групп G) приведены компоненты характеров относительно операций E_{g_i} ($g_i \in G$). Символы в скобках отвечают комбинациям комплексных представлений (см. прил. 2). Спинорные представления других точечных групп можно вывести, пользуясь свойствами изоморфизма и прямого произведения.

$\overline{D}_2$	e	$C_2^{(z)}, \overline{C}_2^{(z)}$	$C_2^{(y)}, \overline{C}_2^{(y)}$	$C_2^{(x)}, \overline{C}_2^{(x)}$	E
$E_{1/2}$	2	0	0	0	-2

$\overline{D}_3$	e	$2C_3$	$3C_2$	E	$2\overline{C}_3$	$3\overline{C}_2$
$E_{1/2}$	2	1	0	-2	-1	0
$(E_{1/2})$	1	-1	i	-1	1	$-i$
	1	-1	$-i$	-1	1	i

$\overline{D}_4$	e	$2C_4$	$C_2, \overline{C}_2$	$2C_2', 2\overline{C}_2'$	$2C_2'', 2\overline{C}_2''$	E	$2\overline{C}_4$
$E_{1/2}$	2	$\sqrt{2}$	0	0	0	-2	$-\sqrt{2}$
$E_{3/2}$	2	$-\sqrt{2}$	0	0	0	-2	$\sqrt{2}$

$\overline{D}_5$	e	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	E	$2\overline{C}_5$	$2\overline{C}_5^2$	$5\overline{C}_2$
$E_{1/2}$	2	$-2\cos(2\alpha)$	$2\cos\alpha$	0	-2	$2\cos(2\alpha)$	$-2\cos\alpha$	0
$E_{3/2}$	2	$-2\cos\alpha$	$2\cos(2\alpha)$	0	-2	$2\cos\alpha$	$-2\cos(2\alpha)$	0
$(E_{5/2})$	1	-1	1	i	-1	1	-1	$-i$
	1	-1	1	$-i$	-1	-1	-1	i

Примечание. $\alpha = 2\pi/5$.

$\overline{D}_6$	e	$2C_6$	$2C_3$	$C_2, \overline{C}_2$	$3C_2', 3\overline{C}_2'$	$3C_2'', 3\overline{C}_2''$	E	$2\overline{C}_6$	$2\overline{C}_3$
$E_{1/2}$	2	$\sqrt{3}$	1	0	0	0	-2	$-\sqrt{3}$	-1
$E_{3/2}$	2	0	-2	0	0	0	-2	0	2
$E_{5/2}$	2	$-\sqrt{3}$	1	0	0	0	-2	$\sqrt{3}$	-1

$\overline{D}_{2h}$	e	$C_2^{(z)}\overline{C}_2^{(z)}$	$C_2^{(y)}\overline{C}_2^{(y)}$	$C_2^{(x)}\overline{C}_2^{(x)}$	i	$\sigma_{xy}, \overline{\sigma}_{xy}$	$\sigma_{xz}, \overline{\sigma}_{xz}$	$\sigma_{yz}, \overline{\sigma}_{yz}$	E	$\overline{i}$
$E_{1/2}$	2	0	0	0	2	0	0	0	-2	-2
$E_{3/2}$	2	0	0	0	-2	0	0	0	-2	2

$\overline{T}$	e	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2, 3\overline{C}_2$	E	$4\overline{C}_3$	$4\overline{C}_3^2$
$E_{1/2}$	2	1	1	0	−2	−1	−1
$(G_{3/2})$ {	2	ε	ε^*	0	−2	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^*$
	2	ε^*	ε	0	−2	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon$

Примечание. $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$

$\overline{O}$	e	$8C_3$	$3C_2, 3\overline{C}_2$	$6C_4$	$6C_2, 6\overline{C}_2'$	E	$8\overline{C}_3$	$6\overline{C}_4$
$E_{1/2}$	2	1	0	$\sqrt{2}$	0	−2	−1	$-\sqrt{2}$
$E_{5/2}$	2	1	0	$-\sqrt{2}$	0	−2	−1	$\sqrt{2}$
$G_{3/2}$	4	−1	0	0	0	−4	1	0

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Аминов Л. К.* Теория симметрии. Конспекты лекций и задачи. М.: Ин-т компьютерных исследований, 2002.

2. *Артамонов В. А.* Аналитическая геометрия и линейная алгебра: Курс лекций. — М.: Изд-во МГУ, 1999.

3. *Ашкрофт Н.*, *Мермин Н.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979.

4. *Банкер Ф.*, *Йенсен П.* Симметрия молекул и спектроскопия. — М.: Мир: Научный мир, 2004.

5. *Барут А.*, *Рончка Р.* Теория представлений групп и ее приложения: В 2 т. — М.: Мир, 1980.

6. *Боголюбов Н. Н.*, *Ширков Д. В.* Квантовые поля. — 2-е изд. — М.: Наука, 1993.

7. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли: Главы 1 — 3. — М.: Мир, 1976.

8. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли: Главы 4 — 6. — М.: Мир, 1972.

9. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли: Главы 7, 8 — М.: Мир, 1978.

10. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли: Глава 9. — М.: Мир, 1986.

11. *Вайнштейн Б. А.* Современная кристаллография: В 4-х т. — М.: Наука, 1979.

12. *Варшалович Д. А.*, *Москалев А. Н.*, *Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.

13. *Вейль Г.* Теория групп и квантовая механика. — М.: Наука, 1986.

14. *Векилов Ю. Х.* Что такое квазикристаллы // Соросовский образовательный журнал. — 1997. — № 1. — С. 87 — 91.

15. *Винберг Э. Б.* Курс алгебры. — 2-е изд., испр. и доп. — М.: Факториал Пресс, 2001.

16. *Винберг Э. Б.*, *Онищик А. Л.* Основы теории групп // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 20. Группы и алгебры Ли 1. — М.: ВИНИТИ, 1988. — С. 5 — 101.

17. *Винберг Э. Б.*, *Горбацевич В. В.*, *Шварцман О. В.* Дискретные подгруппы групп Ли // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 21. Группы и алгебры Ли 2. — М.: ВИНИТИ, 1988. — С. 7 — 120.

18. *Винберг Э. Б.*, *Шварцман О. В.* Дискретные группы движений пространств постоянной кривизны // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 29. Геометрия 2. — М.: ВИНИТИ, 1988. — С. 147 — 259.

19. *Винберг Э. Б., Горбацевич В. В., Онищик А. Л.* Строение групп и алгебр Ли // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 41. Группы и алгебры Ли 3. — М.: ВИНИТИ, 1990. — С. 5—255.

20. *Галиулин Р. В.* Кристаллографическая геометрия. — М.: Наука, 1984.

21. *Гальцов Д. Н.* Теоретическая физика для студентов-математиков. — М.: Изд-во МГУ, 2003.

22. *Гельфанд И. М., Минлос Р. А.. Шапиро З. Я.* Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. — М.: ГИФМЛ, 1958.

23. *Герцберг Г.* Электронные спектры и строение многоатомных молекул. — М.: Мир, 1969.

24. *Гинзбург В. Л., Киржниц Д. А.* (*ред.*) Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. — М.: Наука, 1977.

25. *Годеман Р.* Алгебраическая топология и теория пучков. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961.

26. *Голод П. И., Климык А. У.* Математические основы симметрии. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.

27. *Делоне Б., Падуров Н., Александров А.* Математические основы структурного анализа кристаллов. — М.: ОНТИ, ГТТИ, 1934.

28. *Делоне Б. Н.* // Успехи мат. наук. — 1937. — № 3. — С. 16; 1938. — № 4. — С. 102.

29. *Джилкрист Т., Сторр Р.* Органические реакции и орбитальная симметрия. — М.: Мир, 1976.

30. *Джонс Г.* Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристалле. — М.: Мир, 1968.

31. *Ельяшевич М. А.* Атомная и молекулярная спектроскопия. — М.: УРСС, 2001.

32. *Жевлаков К. А., Слинько А. М., Шестаков И. П., Ширшов А. И.* Кольца, близкие к ассоциативным. — М.: Наука, 1978.

33. *Желобенко Д. П.* Компактные группы Ли и их представления. — М.: Наука, 1970.

34. *Желобенко Д. П., Штерн А. И.* Представления групп Ли. — М.: Наука, 1983.

35. *Желудев И. С.* Симметрия и ее приложения. М.: Атомиздат, 1976.

36. *Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П.* Геометрическая микрокристаллография. — М.: Изд-во МГУ, 1976.

37. *Зар Р.* Теория углового момента. — М.: Мир, 1993.

38. *Заславский Г. М., Сагдеев Р. З., Усиков Д. А., Черников Н. А.* Слабый хаос и квазирегулярные структуры. — М.: Наука, 1991.

39. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. — М.: Мир, 1966.

40. *Зоркий П. М.* Симметрия молекул и кристаллических структур. — М.: Изд-во МГУ, 1986.

41. *Касселс Дж.* Введение в геометрию чисел. — М.: Мир, 1965.

42. *Киреев П. С.* Введение в теорию групп и ее применение в физике твердого тела. — М.: Высш. шк., 1979.

43. *Китайгородский А. И.* Молекулярные кристаллы. — М.: Наука, 1971.

44. *Ковалев О. В.* Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. — М.: Наука, 1986.

45. *Кострикин А. И.* Введение в алгебру. Часть I. Основы алгебры: Учебник для вузов. — М.: Физико-математическая литература, 2000.

46. *Кострикин А. И.* Введение в алгебру. Часть II. Линейная алгебра: Учебник для вузов. — М.: Физико-математическая литература, 2000.

47. *Кострикин А. И.* Введение в алгебру. Часть III. Основные структуры алгебры: Учебник для вузов. — М.: Физико-математическая литература, 2000.

48. *Коттон Ф., Уилкинсон Дж.* Современная неорганическая химия: В 3-х т. — М.: Мир, 1969.

49. *Курош А. Г.* Теория групп. — М.: Наука, 1967.

50. *Курош А. Г.* Общая алгебра: Лекции 1969—1970 учебного года. — М.: Наука, 1974.

51. *Кэртис Ч., Райнер И.* Теория представлений конечных групп и ассоциативных алгебр. — М.: Наука, 1969.

52. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: В 10 т. — М.: Наука, 1989.

53. *Лайнс М., Гласс А.* Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. — М.: Мир, 1981.

54. *Тханг Ле Ты Куок, Пиунихин С. А., Садов В. А.* Геометрия квазикристаллов // Успехи мат. наук. 1993. — Т. 48. — №1. — С. 41—102.

55. *Лейтес Д. А.* Супералгебры Ли. // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Новейшие достижения. Т. 25. — М.: ВИНИТИ, 1984. — С. 3—49.

56. *Лезнов А. Н., Савельев М. В.* Групповые методы интегрирования нелинейных динамических систем. — М.: Наука, 1985.

57. *Ленг С.* Алгебра. — М.: Мир, 1965.

58. *Любарский Г. Я.* Теория групп и ее применение в физике. — М.: Физматгиз, 1958.

59. *Ляховский В. Д., Болохов А. А.* Группы симметрии и элементарные частицы. — М.: УРСС, 2002.

60. *Ма Ш.* Современная теория критических явлений. — М.: Мир, 1980.

61. *Макдональд И.* Симметрические функции и многочлены Холла. — М.: Мир, 1985.

62. *Манин Ю. И.* Калибровочные поля и комплексная геометрия. — М.: Наука, 1984.

63. *Манин Ю. И., Панчишкин А. А.* Введение в теорию чисел // Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 49. Теория чисел 1. — М.: ВИНИТИ, 1990. — С. 5—348.

64. *Медведев Б. В.* Начала теоретической физики. — М.: Наука, 1977.

65. *Мессиа А.* Квантовая механика. — Т. 1, 2. — М.: Наука, 1979.

66. *Най Дж.* Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. — М.: Мир, 1967.

67. *Наймарк М. А.* Линейные представления группы Лоренца. — М.: Физматлит, 1958.

68. *Наймарк М. А.* Теория представлений групп. — М.: Наука, 1976.

69. *Никулин В. В., Шафаревич И. Р.* Геометрии и группы. — М.: Наука, 1983.

70. *Нишиджима К.* Фундаментальные частицы. — М.: Мир, 1965.

71. *Нокс Р., Голд А.* Симметрия в твердом теле. — М.: Наука, 1970.

72. Общая алгебра / Под. ред. Л. А. Скорнякова. — Т. 1. — М.: Наука, 1990.

73. *Петрашень М. И., Трифонов Е. Д.* Применение теории групп в квантовой механике. 4-е изд. — М.: УРСС, 2002.

74. *Розенблюм Г. В., Соломяк М. З., Шубин М. А.* Спектральная теория дифференциальных операторов // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 64. Дифференциальные уравнения с частными производными. — М.: ВИНИТИ, 1989. — С. 5 — 246.

75. *Рохлин В. А., Фукс Д. Б.* Начальный курс топологии. — М.: Наука, 1977.

76. *Румер Ю. Б., Фет А. И.* Теория групп и квантованные поля. — М.: Наука, 1977.

77. *Серр Ж.-П.* Линейные представления конечных групп. — М.: Мир, 1970.

78. *Серр Ж.-П.* Алгебры Ли и группы Ли. — М.: Мир, 1969.

79. *Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.* Основы кристаллофизики. — М.: Наука, 1979.

80. *Слэтер Дж.* Электронная структура молекул. — М.: Мир, 1965.

81. *Спрингер Т. А.* Линейные алгебраические группы // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 55. — М.: ВИНИТИ, 1989. — С. 5 — 136.

82. *Стародуб В. А.* Применение теории групп в химии: Учеб. пособие. — Харьков: Изд-во Харьков. гос. ун-та, 1987.

83. *Стрейтвизер Э.* Теория молекулярных орбит для химиков-органиков. — М.: Мир, 1965.

84. *Стенли Г.* Фазовые переходы и критические явления. — М.: Мир, 1973.

85. *Уэст П.* Введение в суперсимметрию и супергравитацию. — М.: Мир, 1989.

86. *Фоменко А. Т.* Дифференциальная геометрия и топология. Дополнительные главы. — М.: Изд-во МГУ, 1983.

87. *Фоменко А. Т., Фукс Д. Б.* Курс гомотопической топологии. — М.: Наука, 1989.

88. *Фейт У.* Теория представлений конечных групп. — М.: Наука, 1990.

89. *Фларри Р.* Группы симметрии: теория и химические приложения. — М.: Мир, 1983.

90. *Хамермеш М.* Теория групп и ее применение к физическим проблемам. — М.: Мир, 1966.

91. *Хофман Р.* Строение твердых тел и поверхностей. — М.: Мир, 1990.

92. *Хохштрассер Р.* Молекулярные аспекты симметрии. — М.: Мир, 1968.

93. *Хейне В.* Теория групп в квантовой механике. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963.

94. *Шапиро И. С., Ольшанецкий М. А.* Лекции по топологии для физиков. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.

95. *Шафаревич И. Р.* Основные понятия алгебры // Итоги науки и техники: Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. Т. 11. — М.: ВИНИТИ, 1986.

96. *Шеврин Л. Н.* Полугруппы // Общая алгебра / Под ред. Л. А. Скорнякова. Т. 2. — М.: Наука, 1991. — С. 11—191.

97. *Широков Ю. М., Юдин Н. П.* Ядерная физика. — М.: Наука, 1972.

98. *Чубаров И. А.* Представления групп Ли и алгебра Ли: Учеб. пособие. — М.: Изд-во МФТИ, 1985.

99. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. — Т. 1, 2. — М.: Мир, 1983.

100. *Abels H.* Properly discontinuous groups of affine transformations: a survey. // Geometricae Dedicata. — 2001. — N 87. — P. 309—333.

101. *Abels H., Margulis G. A., Soifer G. A.* Properly discontinuous groups of affine transformations with orthogonal linear part. Paris: C. // R. Acad. Sci. (I). — 1997. — V. 324. — P. 253—258.

102. *Ablamowicz R., Sobczyk G.* (eds.) Lectures on Clifford (geometric) algebras and applications. V. XV. Birkhäuser. Boston, Basel, Berlin. 2003.

103. *Aragón G., Aragón J. L., Davila F., Gomez A., Rodriguez M. A.* Geometric Algebra with Applications in Science and Engineering / Eds E. Bayro-Corrochano, G. Sobczyk. Birkhäuser (Boston, Febrero 2001). P. 371—386.

104. *Aragón J. L., Naumis G. G., Torres M.* A multigrid approach to the average lattice of quasicrystals // Acta Crystallogr. A. — 2002. A58. — P. 352—360.

105. *Aragón J. L., Romeu D., Beltrán L., Gómez A.* Grain boundaries as projections from higher-dimensional lattices // Acta Crystallogr. A. — 1997, A53. — P. 772—780.

106. *Auslander L.* The structures of compact locally affine manifolds // Topology. — 1964. — N 3. — P. 131—139.

107. *Barache D., Champagne B., Gazeau J.-P.* Pisot-cyclotomic quasilattices and their symmetry semigroups // Fields Institute Monographs. 1998. — N 10. — P. 15—66.

108. *Broadhurst D. J., Kreimer B.* Renormalization automated by Hopf algebra // J. Symb. Comput. — 1999. — N 27. — P. 582. — hep-th/9810087.

109. *Collins J.* Renormalization. — Cambridge: Cambridge Univ. Press., 1984.

110. *Connes A., Kreimer D.* Hopf algebra renormalizaion and noncommutative geometry // Commun. Math. Physics. — 1998. — V. 199. — P. 203—242, — hep-th/9808042.

111. *Connes A., Kreimer D.* Renormalizaion in quantum field theory and the Riemann-Hilbert problem 1. Hopf algebra structure of graphs and the main theorem // Commun. Math. Physics. 2000, V. 210. P. 249—273. — hep-th/9912092.

112. *Chryssomalakos C., Quevedo H., Rosenbaum M., Vergara J. B.* Normal coordinates and primitive elements in the Hopf algebra of renormalization // Commun. Math. Physics. — 2002. — V. 235. — P. 465—485.

113. *Fried D., Goldman W. D.* Three-dimensional affine crystallographic groups // Adv. in Math. — 1983. — V. 47. — P. 1—49.

114. *Janot C.* Quasicrystals. — N.Y.: Oxford Univ. Press, 1994.

115. *Giacovazzo C.* (ed.) Fundamentals of Crystallography. International Union of Crystallography. Oxford: Oxford Univ. Press, 1992.

116. *Golubitsky M., Stewart I.* The symmetry, perspective. From equilibrum to chaos in phase space and physical space. — Second edition. XVII. Boston, Basel, Berlin: Birkhauser. 2003.

117. *Hasse H.* Number theory. — Berlin: Springer, 1980.

118. International Tables for Crystallography. — Vol. A—E. — Dodrecht: Kluwer, 2002.

119. *Kreimer D.* On the Hopf algebra structure of perturbative quantum field theory // Adv. Theor. Math. Phys. — 1998. — N 2. — P. 303—334. — q-alg/9707029.

120. *Lifshitz R.* The symmetry of quasiperiodic crystals // Physica A. — 1996. — V. 232. — P. 633—647.

121. *Paredes R., Aragón J. L., Barrio R. A.* Nonperiodic hexagonal square-triangle tilings // Physical Review B. — 1998. — V. 58. — N 2. — P. 1190—1195.

122. *Montgomery S.* Hopf algebras and their actions on rings // CBMS, Regional Conference Series in Mathematics, Amer. Math. Soc., Providence Rhode Island, 1993.

123. *Herbrandson H. F., Nachod F. C.* // Determination of Organic Structures by Physical Methods /Eds. E. A. Braude, F. Ç. Nachod. — N.Y.: Acad. Press, 1955 — P. 3—23.

124. *Stadnik Z. M.* (ed.) Physical properties of quasicrystals. — Berlin: Springer, 1999.

125. *de Wolf P. M., Janssen T., Janner A.* The superspace groups for incommensurate crystal structures with a one-dimensional modulation // Acta Crystallogr. — 1981. — V. A37. — P. 625—636.

126. *Wybourne B. G.* Classical groups for physicists. — N.Y.: Wiley, 2004.

127. *Zassenhaus H.* Über einen Algorithmus zur Bestimmung der Raumgruppen // Comment. Math. Helv. — 1948. — N 21. — S. 117—141.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Автоморфизм 33
Алгебра 240
  Вейля 251
  Грассмана 243
  Дирака 391
  Клиффорда 256
  Ли 240, 260
  Хопфа 436
    дуальная 436
  ассоциативная 240
  антикоммутативная 240
  кватернионов 244
  коммутативная 240
  октонионов 245
  простая 246
  симметрическая, пространства 243
Алгебры дифференцирование 260
Антикоммутатор 386

Базис абелевой группы 74
Бриллюэна зона 204

Вес представления 264
  старший 265
Вороного полиэдр 104

Гомоморфизм
  алгебр 247
    естественный 247—248
    Хопфа 440
  групп 33
    естественный 39
  линейных групп 224
  накрывающий 253
Группа
  $\mathrm{Aff}(V)$ 15
  $\mathbb{C}^*$ 7
  $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$ 9
  $\mathrm{GL}(V)$ 13
  $\mathrm{Iso}(E)$ 17
  $\mathbb{O}(n,\mathbb{C})$, $\mathbb{O}(n,\mathbb{R})$ 9
  $\mathbb{O}(n,m)$ 12
  $\mathbb{O}(n,F)$ 13
  $\mathbb{R}^*$
  $\mathrm{SIso}(E)$ 17
  $\mathrm{SL}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SL}(n,\mathbb{R})$ 9
  $\mathrm{SO}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{SO}(m,\mathbb{R})$ 11
  $\mathrm{SO}(n,m)$ 12
  $\mathrm{SO}(1,3)$ 13
  $\mathrm{SU}(n,\mathbb{C})$ 11
  $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{C})$, $\mathrm{Sp}(n,\mathbb{R})$ 12
  $\mathrm{U}(n,F)$ 13
  $\mathrm{U}(n,\mathbb{C})$ 10
  U 8
  U_n 8
  $\mathbb{Z}$ 8
  p-группа 46
  абелева 6
    свободная 74
    конечно порожденная 79
  автоморфизмов 40
  аффинная 424
  Бетти, n-ая 442
  Браве 91
  голоэдрическая 91
  гомологий, n-ая 442
  гомотопическая, n-ая 444
  диэдра 18, 166—167
  кватернионов Q_8 19
  кватернионов ненулевых 19
  Клейна 27
  когомологий 443
  кристаллографическая 90
    аффинная 424
  Кюри 231
  Ли линейная 213

компактная 261
односвязная 258
полупростая 261
линейная связная 220
Лоренца 12, 237—238, 271—273
малая 207
нильпотентная 404
обратимых элементов алгебры 244
перестановок 20
примарная 29
Пуанкаре 17, 239, 273—274
разрешимая 404
ренормализационная 433
циклическая 28
Группы гиперпространственные 148—150
двойные 71
Лонге—Хиггинса 72
линейных операторов 13
плоские 121—122
пространственные симморфные 90, 123—132
точечные 25, 56—70
шубниковские 139—140

Движение 16, 86
несобственное 16
собственное 16
винтовое 87
Движения дифференциал 86
Диаграмма коммутативная 49, 154, 168, 436, 442
Дирака матрицы 389-391
Диффеоморфизм локальный 220

Единица
алгебры 240
группы 6
матричная 48

Идеал 246
Изоморфизм алгебр 247
Изоморфизм групп 33
Инволюция 255

Квазикристалл 408—411, 414, 423—428
Класс
кристаллический 112
голоэдрический 113
смежный 29—30
сопряженных элементов 41
Клебша—Гордана коэффициенты 179, 354—359
Кольцо 239
Коммутант 46
Коммутатор групповой 46
Коммутатор лиевский 223
Коумножение 436
Когруппа 207

Матрица верхнетреугольная 259
Миллера индексы 117—118
Множество кристаллическое 89
Моноид 426
инверсный 427
симметрий квазикристалла 427
Мономорфизм 33

Накрытие односвязное 258
Норма кватерниона 245
Нуль алгебры 240

Область
Дирихле 103
решетки фундаментальная 83
Образ отображения 274
Оператор
инфинитезимальный 215
Казимира 231
проекционный 156
Орбита группы 95
Ось симметрии
винтовая 124
поворотная 57
зеркально-поворотная 57
инверсионная 106
Отображение
биективное 33
инъективное 32
накрывающее 253
сюръективное 32
экспоненциальное 220

Паули матрицы 288
Перестановка 20
Плоскость симметрии
алмазная 124
зеркальная 57

скользящего отражения 124
Подалгебра 244
Подгруппа 25—27
Бореля 263
внутренних автоморфизмов 40
дискретная 81
нормальная 37
Подгруппы сопряженные 262
Подмножество
выпуклое 86
замкнутое 82
порождающее 221
Подпредставление 159
Подпространство весовое 264
Поле 244
обобщенное случайное 433
Полугруппа 425
Порядок
группы 6
элемента 27
Представление
вполне приводимое 159
вполне неприводимое 270
индуцированное 183
неприводимое 159
присоединенное 254
регулярное 157
сопряженное 191
спинорное 232, 257
самосопряженное 191
Представления эквивалентные 154
Преобразование
правого сдвига 219
Каданова 432
масштабное 433
Произведение
в группе 6
в полугруппе 425
групп, полупрямое 53—56
групп, прямое 50—51
представлений, тензорное 179
пространств
антисимметризованное 182
симметризованное 182
Пространство
касательное 216
Минковского 17
Путь дифференцируемый 218
Размерность 501
группы Ли 212
представления 152
Решетка 81
Браве 93, 101—103
дуальная 82
обратная 82, 143—147
Символ
Кронекера 82, 472
Леви-Чивита 346, 473
симплекс n-мерный
Сингония 91, 101
Спинор 327
Степень пространства
симметрическая 242
внешняя 242
Сумма прямая 50
Тело 245
Теорема
Вигнера—Эккарта 356
Жордана 91
Крамерса 288
Кэли 34
Лагранжа 32
Нётер 384
о гомоморфизмах алгебр 248
о гомоморфизмах групп 39
Шенфлиса—Бибербаха 90, 398—404
Эйлера 116
Тор 449
максимальный 263
Фактор-группа 39
Фактор-алгебра 247
Форма простая 112, 114
Функция
квазипериодическая 423
центральная 171
Характер представления 171
Характеры конечных групп 196—203
Центр группы 40
Централизатор элемента 45
Цепь 442
Цикл 21,442

Шура лемма 168
Элемент
  групповой алгебры Хопфа 437
  обратимый алгебры 244
  обратный группы 6
  порождающий 28
  примитивный алгебры Хопфа 437
  сопряженный 41
Эпиморфизм 33
Юнга схемы 186, 191—192
Ядро
  гомоморфизма алгебр 247
  гомоморфизма групп 37
  линейного оператора 33

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие 3

Глава 1. **Основы теории групп** 6
1.1. Определение группы 6
1.2. Подгруппы 25
1.3. Порядки элементов группы 27
1.4. Циклические группы и их подгруппы 28
1.5. Смежные классы и теорема Лагранжа 29
1.6. Гомоморфизмы и фактор-группы 32
1.7. Классы сопряженных элементов 41
1.8. Коммутант группы 46
1.9. Прямые и полупрямые произведения групп 49
1.10. Группы симметрий молекул 56
1.10.1. Точечные группы 56
1.10.2. Двойные группы 70
1.10.3. Группы Лонге-Хиггинса 71

Глава 2. **Кристаллографические группы** 74
2.1. Конечно порожденные абелевы группы 74
2.2. Решетки в евклидовых пространствах 82
2.3. Группа движений 86
2.4. Двумерный случай 91
2.5. Трехмерный случай 95
2.6. Решетки Браве и их элементарные ячейки 101
2.7. Международная система обозначений точечных групп 106
2.8. Стереографическая проекция 109
2.9. Кристаллические классы и простые формы 112
2.9.1. Простые формы и их комбинации 112
2.9.2. Индексы Миллера 117
2.10. Плоские группы G_2^2 121
2.11. Пространственные группы G_3^3 123
2.12. Другие группы G_m^n 132
2.13. Цветная симметрия и подгруппы G_4^4 139
2.14. Обратная решетка 143
2.15. Гиперпространственные группы несоразмерных фаз . . . 147

Глава 3. **Элементы теории представлений групп** 152
3.1. Основные понятия и примеры 152
3.2. Теорема Машке 159
3.3. Неприводимые представления абелевых групп 161
3.4. Одномерные представления произвольных групп 165

3.5. Неприводимые представления групп диэдра 166
3.6. Лемма Шура и ее следствия 168
3.7. Характеры представления 171
3.8. Тензорные произведения представлений 178
3.9. Индуцированные представления 183
3.10. Неприводимые представления группы $\mathbf{S}_n$ 186
3.11. Конечномерные неприводимые представления группы $\mathbf{GL}(n, \mathbb{C})$ 193
3.12. Неприводимые представления пространственных групп . 194
3.13. Таблицы характеров некоторых конечных групп 196
3.13.1. Точечные и двойные группы 196
3.13.2. Приведение представлений с помощью таблицы характеров 201
3.14. Представления пространственных групп и симметрия особых точек зоны Бриллюэна 203

Глава 4. **Основы теории групп Ли** 212
4.1. Линейные группы Ли 212
4.2. Алгебраическая структура на $T_G(E)$ 223
4.3. Группы Ли и их представления: предварительные иллюстрации 226
4.4. Кольца и алгебры 239
4.5. Связные и несвязные группы Ли 252
4.6. Алгебры Ли 260
4.7. Представления компактных групп Ли 261
4.8. Представления групп $\mathbf{SU(2, C)}$, $\mathbf{SO(3, \mathbb{R})}$, $\mathbf{SO(4, \mathbb{R})}$ 265
4.9. Представления групп $\mathbf{SL(2, C)}$ и $\mathbb{O}(1, 3)$ 268

Глава 5. **Приложения теории групп в физике и химии** 275
5.1. Алгебраические соотношения механики 275
5.1.1. Классическая механика 277
5.1.2. Релятивистская механика 279
5.1.3. Квантовая механика 281
5.1.4. Перестановки тождественных частиц: бозоны и фермионы 285
5.2. Спектры и электронное строение многоатомных молекул 290
5.2.1. Правила отбора в оптической спектроскопии . . . 292
5.2.2. Симметризованные молекулярные орбитали 299
5.2.3. Электронно-колебательные взаимодействия 304
5.2.4. Химические приложения симметрии 307
5.3. Симметрия и физические свойства кристаллов 310
5.3.1. Матрица термодинамических коэффициентов . . . 310
5.3.2. Колебательные спектры кристаллов 317
5.3.3. Зонная структура кристалла 322
5.3.4. Электрон-фононное взаимодействие 326
5.3.5. Приближение слабой связи 329
5.3.6. Фазовые переходы в твердом теле 333
5.3.7. Молекулярные кристаллы 338
5.4. Непрерывные группы в теории атомов и молекул 344

5.4.1. Одноэлектронные состояния атома и правила отбора . . . 344
5.4.2. Термы многоэлектронного атома . . . 348
5.4.3. Коэффициенты векторного сложения . . . 354
5.4.4. Теория поля лигандов . . . 360
5.4.5. Квантовые состояния атомных ядер . . . 361
5.4.6. Термы линейных молекул . . . 367
5.4.7. Вращательные состояния молекул и структурная нежесткость . . . 369
5.4.8. Ядерные спиновые состояния молекул . . . 375
5.5. Релятивистские инварианты элементарных частиц . . . 377
5.5.1. Квантовое поле . . . 378
5.5.2. Группа Пуанкаре и релятивистские инварианты . 383
5.5.3. Статистика, спин и четность . . . 386
5.5.4. Матрицы Дирака . . . 389
5.5.5. Изоспин и мультиплеты масс . . . 392

Глава 6. **Дальнейшее развитие теории групп и ее современные приложения** . . . 398
6.1. Доказательство теоремы Шенфлиса—Бибербаха . . . 398
6.2. Разрешимые и нильпотентные группы . . . 404
6.3. Квазикристаллы . . . 408
6.3.1. Математическая теория квазикристаллов . . . 411
6.3.2. Симметрии квазикристаллов . . . 423
6.4. Фазовые переходы и группа перенормировок . . . 429
6.5. Линейные группы и алгебры Хопфа . . . 435
6.6. Топологические группы . . . 441
6.6.1. Группы (ко)гомологий . . . 441
6.6.2. Гомотопические группы . . . 444

Глава 7. **Дополнение: сведения из линейной алгебры** . . . 446
7.1. Матрицы . . . 446
7.2. Линейные пространства и подпространства . . . 448
7.3. Плоскости . . . 450
7.4. Билинейные и полуторалинейные функции . . . 451
7.5. Евклидовы и эрмитовы пространства . . . 454
7.6. Линейные операторы . . . 456
7.7. Линейные операторы в евклидовых, эрмитовых и симплектических пространствах . . . 460
7.7.1. Сопряженный и нормальный операторы . . . 460
7.7.2. Самосопряженные, ортогональные и унитарные операторы . . . 464
7.8. Симплектические линейные операторы . . . 467
7.9. Аффинные преобразования и движения . . . 467
7.10. Дуальное (двойственное) пространство . . . 469
7.11. Тензорные произведения и тензоры . . . 470

Приложения . . . 474
Список литературы . . . 498

Учебное издание

Артамонов Вячеслав Александрович,
Словохотов Юрий Леонидович

Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии

Учебное пособие

Редактор *А. В. Савенков*
Технический редактор *Н. И. Горбачева*
Компьютерная верстка: *Т. А. Клименко*
Корректоры *А. П. Сизова, Л. В. Гаврилина*

Изд. № А-1407-I. Подписано в печать 23.06.2005. Формат 60 × 90/16.
Гарнитура «Таймс». Печать офсетная. Бумага тип. № 2. Усл. печ. л. 32,0.
Тираж 2000 экз. Заказ №

Издательский центр «Академия».
Санитарно-эпидемиологическое заключение № 77.99.02.953.Д.004796.07.2004.
117342, Москва, ул. Бутлерова, 17-Б, к. 360. Тел./факс: (095)330-1092, 334-8337.

Отпечатано на Саратовском полиграфическом комбинате.
410004, г. Саратов, ул. Чернышевского, 59.