

Таблицы и формулы по применению теории групп в физике

6 июня 2016 г.

1 Конечные группы

Таблица 1: Все конечные группы до порядка 12 (с точностью до изоморфизма).

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

Обозначения к таблице 1: C_n — циклическая группа порядка n , т.е. группа симметрии правильной n -угольной пирамиды, D_n — группа диэдра, т.е. группа симметрии правильной n -угольной призмы, состоящая из оси n -го порядка и перпендикулярной ей оси 2-го порядка, A_n группа четных подстановок из n объектов, Q — группа кватернионов,¹ порождаемая двумя элементами P, Q с соотношениями

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

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

W — группа, порождаемая двумя элементами P, Q с соотношениями¹

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

Знак \times означает здесь прямое произведение, т.е. $G = G_1 \times G_2$ — это совокупность упорядоченных пар $g = (p, q)$, $g \in G, p \in G_1, q \in G_2$, а операция умножения определена в каждой группе отдельно: $g_1 g_2 = (p_1, q_1) \cdot (p_2, q_2) \equiv (p_1 p_2, q_1 q_2)$.

1.1 Характеры точечных групп

Точечные группы состоят из преобразований, оставляющих неподвижную точку, и описывают симметрию молекул. Среди элементов точечной группы имеются оси C_n , а также зеркальные плоскости σ_v , проходящие через ось, и σ_h , перпендикулярные оси. Композиция поворота на угол $2\pi/n$ и отражения в горизонтальной плоскости называется зеркальным поворотом $S_n = \sigma_h C_n$. Зеркальные повороты могут быть только четного порядка. Плоскость симметрии указывается в обозначении группы, например, C_{3v} — группа, состоящая из оси третьего порядка и зеркальной плоскости, проходящей через через оси C_3 и C_2 . Зеркальная плоскость, проходящая через ось n -го порядка между осями 2-го порядка обозначается индексом d .

Обозначения: В первой строке каждой подтаблицы таблицы 2 перечислены классы сопряженных элементов σ_i . Единичный элемент обозначен буквой E , C_n означает ось n -го порядка. Числа перед символами элементов симметрии указывают число элементов в соответствующих классах, $\varepsilon = e^{2\pi i/3}$. Если в группе имеется несколько осей второго порядка, первая обозначается C_2 , вторая C'_2 и т.д.

Список конечных подгрупп собственных вращений трехмерного пространства:

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

где T — группа вращений правильного тетраэдра, O — группа вращений октаэдра или куба, а Y — группа вращений икосаэдра или додекаэдра.

1.2 Ортогональность неприводимых характеров

Разложить данное представление $D(g)$ в прямую сумму неприводимых можно с помощью соотношения ортогональности неприводимых характеров $\chi^{(\alpha)}(g)$

$$\sum_{g \in G} [\chi^{(\alpha)}(g)]^* \chi^{(\beta)}(g) = \sum_{i=1}^s h_i [\chi^{(\alpha)}(\sigma_i)]^* \chi^{(\beta)}(\sigma_i) = |G| \delta_{\alpha\beta}.$$

Здесь суммирование по элементам группы g заменяется на суммирование по классам сопряженных элементов σ_i , h_i — число элементов в соответствующих классах

Таблица 2: Таблицы неприводимых характеров.

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

D_2	E	C_2	C'_2	C''_2
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1	-1
$\chi^{(3)}$	1	1	-1	-1
$\chi^{(4)}$	1	-1	-1	1

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

D_4	E	C_4^2	$2C_4$	$2C_2$	$2C'_2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	1	-1	-1
$\chi^{(3)}$	1	1	-1	1	-1
$\chi^{(4)}$	1	1	-1	-1	1
$\chi^{(5)}$	2	-2	0	0	0

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

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

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

σ_i . Суммирование ведется по всем классам (столбцам таблицы характеров), индексы α, β нумеруют неэквивалентные неприводимые представления. Таким образом, строки таблицы характеров ортогональны, когда скалярное произведение определено с весами h_i . Столбцы таблицы ортогональны в обычном смысле (скалярное произведение определяется с единичным весом). Можно также ввести операцию усреднения по группе, тогда соотношение ортогональности запишется короче

$$\langle \dots \rangle_G \equiv \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \dots, \quad \langle [\chi^{(\alpha)}]^* \chi^{(\beta)} \rangle_G = \delta_{\alpha\beta}. \quad (1)$$

В непрерывных группах операция усреднения по группе определяется через интегрирование.

Ортогональность характеров (1) позволяет найти коэффициенты k_α разложения

$$D(g) = \bigoplus_{\alpha} k_{\alpha} D^{(\alpha)}(g), \quad k_{\alpha} = \langle [\chi^{(\alpha)}]^* \chi \rangle_G. \quad (2)$$

Здесь \bigoplus здесь обозначает прямую сумму неприводимых представлений, $\chi = \text{Tr } D$ — характер исходного представления D .

2 Группы Ли

В таблице приведены как примеры многообразия нескольких групп Ли.

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

2.1 Алгебры Ли групп Ли

В таблице указаны некоторые матричные группы Ли.²

G	Группа Ли	Алгебра Ли
$GL(N, \mathbb{C})$	Невырожденные матрицы	Все матрицы
$SL(N, \mathbb{C})$	Унимодулярные матрицы	Бесследовые матрицы
$U(N, \mathbb{C})$	Унитарные матрицы	Антиэрмитовы матрицы
$SU(N, \mathbb{C})$	Унитарные унимодулярные матрицы	Антиэрмитовы бесследовые матрицы
$O(N, \mathbb{R})$	Ортогональные матрицы	Антисимметричные матрицы
$SO(N, \mathbb{R})$	Ортогональные унимодулярные матрицы	Антисимметричные матрицы

2.2 Свойства матриц Паули $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

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

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

²В кратком варианте пропускается обозначение числового поля, например, $SO(3) \equiv SO(3, \mathbb{R})$.

2.3 Алгебра угловых моментов $\mathbf{ASO}(3) \approx \mathbf{ASU}(2)$

$$[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\mathcal{J}_k,$$

$$\mathcal{J}_\pm = \mathcal{J}_1 \pm i\mathcal{J}_2, \quad \mathcal{J}_+\mathcal{J}_- = \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_3^2 + \mathcal{J}_3, \quad \mathcal{J}_-\mathcal{J}_+ = \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_3^2 - \mathcal{J}_3.$$

Базис неприводимого представления образуют общие собственные векторы оператора \mathcal{J}_3 и оператора Казимира $\mathcal{J}^2 = \mathcal{J}_1^2 + \mathcal{J}_2^2 + \mathcal{J}_3^2$ ($[\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_3] = [\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_\pm] = 0$)

$$\mathcal{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1) |J, M\rangle \quad \mathcal{J}_3 |J, M\rangle = M |J, M\rangle.$$

Матричные элементы повышающего оператора \mathcal{J}_+ и понижающего оператора \mathcal{J}_- равны, соответственно

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_+ |J, M\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} |J, M+1\rangle, \\ \mathcal{J}_- |J, M\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} |J, M-1\rangle. \end{aligned}$$

Представление конечномерно, когда J целое или полуцелое. Размерность представления равна $2J+1$, целые J отвечают представлениям $\mathbf{ASO}(3)$.

2.4 Сферические гармоники

Целым значениям $J = l, M = m$ отвечают представления группы $\mathbf{SO}(3)$. Базис представлений группы вращений образуют сферические гармоники порядка l

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \quad Y_{l-m} = (-1)^m Y_{lm}^*, \quad m \geq 0,$$

которые выражаются через присоединенные функции Лежандра

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^m P_l(\cos \theta), \quad P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\mu^l} (\mu^2 - 1)^l.$$

Нормировка дается формулой

$$C_{lm} = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}.$$

Приведем сферические гармоники при $l \leq 3$

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \cos \theta, \quad Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2 \theta, \\ Y_{30} &= \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta), \quad Y_{31} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} e^{i\varphi} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta, \\ Y_{32} &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} \cos \theta \sin^2 \theta, \quad Y_{33} = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}} e^{3i\varphi} \sin^3 \theta. \end{aligned}$$

Соотношение полноты

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{lm}^*(\mathbf{n}') = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'),$$

где $\mathbf{n} = (\theta, \varphi)$, $\mathbf{n}' = (\theta', \varphi')$ — единичные векторы.

Операторы углового момента на базисе из сферических гармоник реализуется как

$$\mathcal{J}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \mathcal{J}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad -\mathcal{J}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

2.5 Характер неприводимого представления $\mathrm{SO}(3)$ (или $\mathrm{SU}(2)$)

Характер представления размерности $2j + 1$ зависит исключительно от угла поворота и не зависит от оси вращения. Параметризация выбрана так, чтобы поворот происходил на угол α вокруг оси z . Поэтому характер равен следу D -матрицы $\chi^j = \operatorname{Tr} D_{m' m}^j(0, 0, \alpha)$

$$\chi^j = \sum_{m=-j}^j e^{im\alpha} = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\alpha}{\sin \frac{1}{2}\alpha}.$$

Соотношение ортогональности (1) в непрерывной группе в качестве усреднения вместо суммирования содержит интегрирование

$$\langle \chi^i \chi^j \rangle_G = \int_0^{2\pi} \chi^i(\alpha) \chi^j(\alpha) (1 - \cos \alpha) d\alpha = \delta_{ij}.$$

Из ортогональности характеров получается разложение Клебша — Гордана тензорного произведения неприводимых представлений

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}.$$

Пользуясь ассоциативностью, можно разложить в прямую сумму произведение любого конечного количества представлений.

3 Приложения

3.1 Колебания молекул

Таблица характеров исходного представления и колебательного представления для N -атомной молекулы.³

³Третий столбец таблицы не относится к молекулам типа ротатора.

$g \in G$	Исходное предст.	Колебательное предст.
E	$3N$	$3N - 6$
C_n	$N_A(1 + 2 \cos \theta)$	$(N_A - 2)(1 + 2 \cos \theta)$
S_n	$N_S(-1 + 2 \cos \theta)$	$N_S(-1 + 2 \cos \theta)$
σ	N_P	N_P

Обозначения: S_n — зеркально-поворотная ось порядка n , σ — зеркальная плоскость, $\theta = 2\pi/n$, N_A число атомов на оси вращения, N_S — число атомов на зеркально-поворотной оси, N_P — число атомов в зеркальной плоскости. Коэффициенты разложения на неприводимые представления находятся по формуле (2). Кратность вырождения классических колебаний молекулы равна размерности неприводимого представления.

3.2 Собственные векторы и собственные значения матрицы

Иногда удается найти собственные векторы и собственные значения матрицы V порядка r

$$V a_n = \lambda a_n,$$

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

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

Задачи такого типа возникают, например, в классической механике при расчете собственных колебаний симметричной системы грузиков с пружинами или молекулярных колебаний. Если в результате разложения (2) исходного представления на неприводимые оказалось, что все $k_\alpha = 0$ или 1, представление называется *просто приводимым*. Для таких представлений теорема Вигнера гарантирует возможность построить проектор на подпространство неприводимого представления $D^{(\alpha)}$:

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

где $\chi^{(\alpha)}$ характер неприводимого представления α , n_α — его размерность, а $D(g)$ — матрицы исходного r -мерного представления. Когда известен проектор, можно найти и собственные векторы, отвечающие данному собственному значению. Для этого надо подействовать на какие-нибудь векторы проектором \mathcal{P}_α . Зная собственные векторы и оператор \mathcal{V} , можно также найти собственные значения. При этом не приходится решать секулярное уравнение степени r .

3.3 Правила отбора

Матричный элемент $O_{fi} = \langle f | \mathcal{O} | i \rangle$ обращается в нуль, если в разложении Клебша — Гордана исходного представления

$$D = D_f^* \otimes D_O \otimes D_i$$

на неприводимые не содержится единичное представление. Здесь $D_{i,f}$ — представления, по которым преобразуются начальное и конечное состояние, D — представление, по которому преобразуется оператор \mathcal{O} , * означает сопряженное представление.

3.4 Инвариантные тензоры

Тензор ранга n относительно группы $G < \mathbf{GL}(N, \mathbb{R})$ преобразуется под действием элементов группы как тензорное произведение n экземпляров представления группы $D(g)$, $\dim D = N$:

$$D_T(g) = \bigotimes_{i=1}^n D(g).$$

Если под действием преобразований группы тензор не меняется, его называют инвариантным тензором. Тензор T , инвариантный относительно группы G , имеет столько независимых компонент, сколько раз единичное представление входит в его разложение Клебша — Гордана. Чем выше симметрия, тем меньше независимых компонент у инвариантного тензора.

Ниже приведены разложения по инвариантным тензорам при $n \leq 3$ для групп $\mathbf{SO}(3)$, $\mathbf{O}(2)$:

$$\begin{aligned} P_i &= 0, & Q_{ij} &= A\delta_{ij}, & R_{ijk} &= B\epsilon_{ijk}. \\ P_i &= An_i, & Q_{ij} &= A\delta_{ij} + Bn_in_j + C\epsilon_{ijk}n_k, \\ R_{ijk} &= A_1\delta_{ij}n_k + A_2\delta_{ik}n_j + A_3\delta_{jk}n_i \\ &+ B_1\epsilon_{ijl}n_l n_k + B_2\epsilon_{ikl}n_j n_l + B_3\epsilon_{jkl}n_i n_l + Cn_in_j n_k, \end{aligned}$$

где n_i единичный вектор вдоль оси вращения в группе $\mathbf{O}(2)$, буквы A, B, C обозначают произвольные независимые константы.

3.5 Симметричные тензоры

Действие подстановки $\sigma \in P_n$ на тензоре ранга n относительно вещественной группы $G < \mathbf{GL}(N, \mathbb{R})$ определено как перестановка индексов

$$\sigma T_{i_1 i_2 \dots i_n} = T_{\sigma(i_1 i_2 \dots i_n)}.$$

Тензор общего вида не меняется каким-то определенным образом при перестановке индексов. С помощью специальных операторов Юнга можно сделать тензор симметричным или антисимметричными относительно перестановки индексов. Когда ранг тензора $n = 2$ имеются два оператора Юнга: симметризатор и антисимметризатор.

Симметризатор

$$\mathfrak{s} = \frac{1}{|G|} \sum_{\sigma \in P_n} \sigma$$

выделяет полностью симметричную часть тензора

$$\mathfrak{s}T_{i_1 i_2 \dots i_n} = S_{i_1 i_2 \dots i_n}, \quad \sigma_0 S = S,$$

где σ_0 — транспозиция произвольной пары индексов.

Антисимметризатор

$$\mathfrak{a} = \frac{1}{|G|} \sum_{\sigma \in P_n} P_\sigma \sigma,$$

где $P_\sigma = \pm 1$ — четность подстановки σ , выделяет полностью антисимметричную часть тензора

$$\mathfrak{a}T_{i_1 i_2 \dots i_n} = A_{i_1 i_2 \dots i_n}, \quad \sigma_0 A = -A.$$

При $n > 2$, помимо симметризатора и антисимметризатора, имеются еще и частичные симметризаторы. Полное число различных симметризаторов совпадает с количеством неприводимых представлений группы подстановок P_n . Так, при $n = 3$ имеется один дополнительный частичный симметризатор \mathfrak{b}

$$\mathfrak{b}T_{ijk} = \frac{1}{3}(2T_{ijk} - T_{jik} - T_{kji}) \equiv B_{ijk}.$$

Получившийся тензор обладает следующей симметрией по отношению к циклической перестановке индексов

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

Симметризованные тензоры образуют инвариантное подпространство относительно действия группы G , а следовательно разлагаются на меньшее количество неприводимых представлений.

Тензор ранга n в пространстве \mathbb{C}^N преобразуется как тензорное произведение n экземпляров представления $D(g)$ группы G . Разложение Клебша — Гордана тензорного представления в прямую сумму неприводимых представлений

$$T(g) = \bigotimes_{i=1}^n D(g) = \bigoplus_j k_j D^{(j)}(g)$$

производится с помощью соотношения ортогональности характеров (1), (2), причем характер тензорного представления равен $\chi_T(g) = \chi^n(g)$, где $\chi(g)$ — характер представления $D(g)$.

Если тензор обладает некоторой симметрией по перестановкам индексов, то характер тензорного представления вычисляется по более сложной формуле, которая выводится с помощью симметризации базиса. Здесь приведены формулы для тензоров 2-го

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

и 3-го ранга

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