Представления групп. Каждая группа G характеризуется таблицей умножения своих элементов g_i. Если элементы представлены какими-то числами, символами, функциями и т. п., имеющими такую же таблицу умножения, то это есть точное (изоморфное) представление группы G. При гомоморфном отображении $G \to H$ порядок группы представления H меньше порядка G и является его делителем. В теории групп вообще и групп симметрии в частности основную роль играют представления Γ групп G квадратными матрицами $M(G)$:

$$M(G)=\begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{Vmatrix} = (a_{ij}), \tag{44}$$

где a_{ij} — действительные или комплексные числа. Умножению элементов G соответствует умножение матриц, выполняемое по правилам умножения матриц:

$$\sum_j a_{ij} a_{jk} = c_{ik}. \tag{45}$$

Умножение матриц подчиняется групповым аксиомам. В единичной матрице $a_{ij} = 0$, $a_{ii} = 1$. Тривиальным представлением любой группы может служить представление всех ее элементов единицей, т. е. матрицей первого порядка $M = a_{11} = 1$. Возможны гомоморфные отображения $G \rightarrow H$, когда порядок группы H, представленной Γ, меньше порядка группы G, наконец, возможно точное представление, когда $G \leftrightarrow H$.

Так, точечную группу можно представить совокупностью трехмерных матриц $D_k = (a_{ij})_k$ (6) преобразований координат на базисе (X_1, X_2, X_3); каждая из матриц D_k соответствует определенной операции g_k этой группы (так называемое векторное представление, размерности три):

$$g_k \leftrightarrow (a_{ij})_k, \qquad G = \{g_1, g_2, \ldots\} \leftrightarrow \{D_1, D_2, \ldots\} = D. \tag{46}$$

Таблица умножения этих матриц по правилам матричного умножения соответствует таблице умножения элементов g_k. Можно получать разные представления той же группы G, выбрав некоторую матрицу S и образуя с исходным представлением произведения SDS^{-1}. При этом если для двух представлений Γ_a $(D_1, D_2, \ldots)$ и Γ_b $(D_1', D_2', \ldots)$ оказывается, что

$$SD_kS^{-1} = D_k', \tag{47}$$

то два этих представления называются эквивалентными, а S в этом случае определяет линейное преобразование базиса.

Любую квадратную матрицу можно представить в виде

$$\begin{array}{c:c} A_1 & B_2 \\ \hdashline B_1 & A_2 \end{array} \tag{48}$$

где A_1 и A_2 — квадратные матрицы. В результате преобразования S могут получиться такие матрицы, в которых B_1, $B_2 = 0$, а блок-диагональные матрицы A_1 и A_2 имеют меньшую размерность. Такое представление называется приводимым.

Если никаким преобразованием S этого добиться нельзя, т. е. $B_1 \neq 0$ или $B_2 \neq 0$, то представление называется неприводимым.

Если можно свести таким путем трехмерные матрицы к матрицам, составленным из дву- или одномерных неприводимых блоков A, то группа будет представлена более экономно. Так, например, для группы 32 (21), (30) имеется следующее точное двумерное неприводимое унитарное представление:

$$\overset{g_0}{\begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{Vmatrix}} \quad \overset{g_1}{\begin{Vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{Vmatrix}} \quad \overset{g_2}{\begin{Vmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{Vmatrix}} \quad \overset{g_3}{\begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{Vmatrix}}$$

$$\overset{g_4}{\begin{Vmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 1 \end{Vmatrix}} \quad \overset{g_5}{\begin{Vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Vmatrix}}, \tag{49}$$

и одномерное, но уже неточное (гомоморфный образ группы)

$$\begin{array}{cccccc} g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & g_4 & g_5 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \end{array} \tag{50}$$

Сумма диагональных элементов (шпур, или след) матрицы представления

$$\Sigma a_{ii} = \chi\,(g) \tag{51}$$

называется характером представления элемента группы. Нетрудно видеть, что $\chi\,(g_0)$ определяет размерность представления. Характеры всех эквивалентных представлений одинаковы. Одна и та же группа может иметь несколько неприводимых представлений, для конечных групп их число равно числу классов сопряженных элементов в группе.

Анализ представлений групп симметрии позволяет делать ряд заключений об их связи между собой. Одновременно он дает возможность вскрыть и более глубокий смысл и закономерности самого понятия симметрии. Так, группа преобразований (1), подчиняющаяся групповым аксиомам (22) — (25), была введена нами применительно к условию симметрии (2) совпадения функции с собой после преобразования. Однако можно подвергнуть групповым преобразованиям любые, в общем случае асимметричные объекты и функции и проанализировать, какие симметрические свойства в них содержатся (мы вернемся к этому в § 9).

Поскольку представления групп содержат в компактном виде всю информацию об их свойствах, они служат важным инструментом исследования свойств симметричных физических систем: атомов, молекул, кристаллов, и пространств физических величин как при классическом, так и при квантовомеханическом рассмотрении. При этом оказывается возможным анализировать не только «статическую» симметрию этих систем или пространств, но и исследовать возможные их изменения в динамике или при наложении внешних воздействий. В § 6 мы специально рассмотрим представления точечных групп симметрии.