

# Kompleksifunktioiden teoriaa

## Kompleksimuuttujan funktiot

### Kompleksitaso

Kompleksiluku määritellään lukuparina  $(x, y)$

$$z = x + iy, \quad i^2 = -1 \quad (1)$$

Kompleksikonjugaatti puolestaan määritellään

$$z^* = x - iy \quad (2)$$

ja kompleksiluvun itseisarvon neliö on

$$|z|^2 = z^*z = (x - iy)(x + iy) = x^2 + y^2. \quad (3)$$

Usein kompleksiluvut esitetään myös napakoordinaateissa

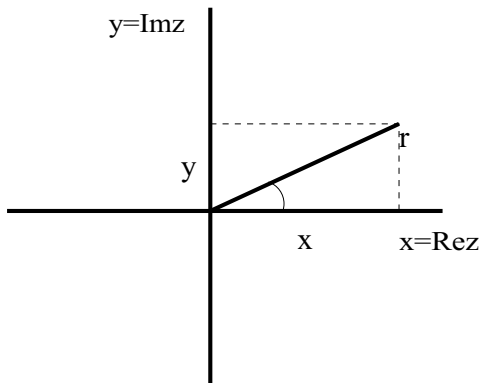
$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi \\ y &= r \sin \phi \end{aligned}$$

eli

$$z = r(\cos \phi + i \sin \phi) = r e^{i\phi}, \quad (4)$$

missä  $r$  on kompleksiluvun itseisarvo ja  $\phi = \arg(z)$  on  $z$ :n argumentti eli napakulma. Kompleksikonjugaatti napakoordinaateissa saadaan vaihtamalla napakulman merkki

$$z^* = r e^{-i\phi}. \quad (5)$$



*Kompleksilukujen esitys napakoordinaateissa*

### Funktioitaso

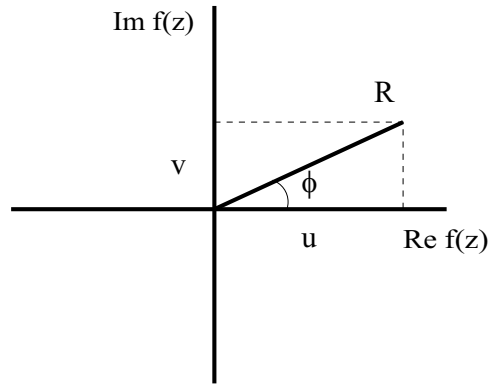
Vastaavalla tavalla kuin muuttujien tapauksessa voidaan määrittellä kompleksifunktio

$$\begin{aligned} f(z) &= u(x, y) + i v(x, y) \\ f^*(z) &= u(x, y) - i v(x, y) \end{aligned}$$

tai vastaavasti napakoordinaateissa

$$f(z) = R(x, y) e^{i\Phi(x, y)}. \quad (6)$$

Esimerkkeinä tarkastellaan myöhemmin muun muassa funktioita  $z^n$ ,  $e^z$ ,  $\log(z)$  ja  $\sin(z)$  jne.



*Kompleksifunktion esitys napakoordinaateissa*

### Säännöllinen analyyttinen funktio

#### Määritelmä 1 (Kompleksifunktion derivaatta)

*Kompleksifunktioiden derivaatta määritellään samoin kuin reaalifunktioiden raja-arvona*

$$f'(z) \equiv \frac{df}{dz} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z}. \quad (7)$$

Raja-arvo on riippumaton tiestä, jota pitkin pistettä  $z$  lähestytään. Kaikki tavalliset reaalifunktioiden derivointisäännöt ovat voimassa myös kompleksifunktiolle:

$$\frac{d}{dz} z^n = n z^{n-1}$$

$$\frac{d}{dz} [f(z)g(z)] = f'(z)g(z) + g'(z)f(z)$$

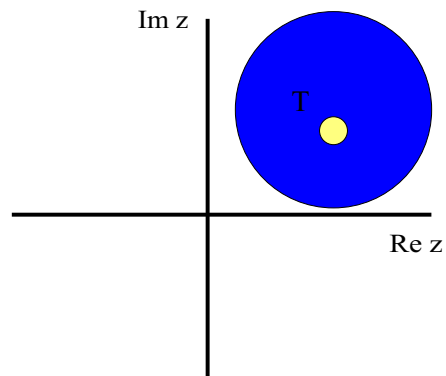
$$\frac{d}{dz} \sin(z) = \cos(z)$$

$$\frac{d}{dz} e^z = e^z$$

jne.

#### Määritelmä 2 (Säännöllinen analyyttinen funktio)

*Funktio  $f(z)$  on säännöllinen analyyttinen funktio (saf) alueessa  $T$ , jos sillä on  $T$ :n jokaisessa pisteessä määrätty derivaatta.*



*Säännöllisen analyyttisen funktion määrittelyalue*

Kahden edellä esitetyn määritelmän perusteella saf:lla on seuraavat kolme perusominaisuutta:

#### • Cauchy-Riemannin yhtälöt

Lähestytään pistettä  $z$  pitkin  $x$ -akselin suuntaista suoraa,  $\Delta z = \Delta x$ ,

$$\frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{u(x + \Delta x, y) - u(x, y)}{\Delta x}$$

$$+i \frac{v(x + \Delta x, y) - v(x, y)}{\Delta x} \quad (8)$$

Tällöin funktion derivaataksi saadaan

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + i \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} \quad (9)$$

Toisaalta lähestytään pistettä  $z$  pitkin  $y$ -akselin suuntaista suoraa,  $\Delta z = i \Delta y$ ,

$$\frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{u(x, y + \Delta y) - u(x, y)}{i \Delta y} + i \frac{v(x, y + \Delta y) - v(x, y)}{i \Delta y} \quad (10)$$

Tällöin funktion derivaataksi saadaan

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{1}{i} \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} = \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} - i \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \quad (11)$$

Koska molemmilla tavoilla laskettujen derivaattojen on oltava samoja, niin

$$f'(z) = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y} \quad (12)$$

Reaali- ja imaginaariosien on oltava erikseen yhtäsuuria, josta saadaan Cauchy-Riemannin yhtälöt (CR)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} &= -\frac{\partial u}{\partial y} \end{aligned}$$

### • Funktion reaali- ja imaginaariosa ovat harmonisia funktioita

Sekä funktion reaali-osa  $u$  että imaginaariosa  $v$  toteuttavat Laplacen yhtälön

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= 0 \\ \nabla^2 v &= 0. \end{aligned}$$

**Todistus:** Operoidaan Laplacen operaattorilla funktion reaali-osaan ja käytetään Cauchy-Riemannin ehtoja:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -\frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x} = 0. \end{aligned}$$

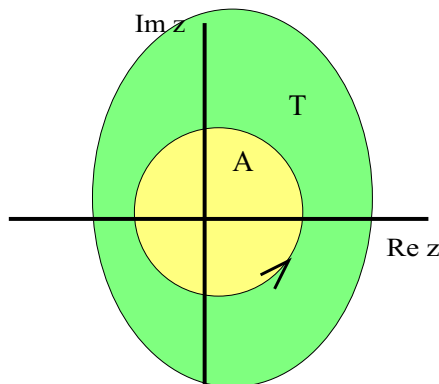
Vastaavasti voidaan osoittaa, että  $\nabla^2 v = 0$ . Reaali- ja imaginaariosat ovat siis *harmonisia* funktioita. Kaksidimensioisissa potentiaali-ongelmissa  $u$  tai  $v$  voivat esittää potentiaalia  $\Phi$  tyhjiössä. Sähkökenttä on  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ , jolloin potentiaali toteuttaa Laplacen yhtälön

$$\nabla^2 \Phi = 0. \quad (13)$$

### • Cauchyn integraaliteoreema

**Lause 1 (Cauchyn integraaliteoreema)** Jos  $f(z)$  on saf yhdesti yhtenäisessä alueessa  $T$  ja sen rajalla, niin viivaintegraali pitkin suljettua tietä  $C$  häviää

$$\oint_C f(z) dz = 0. \quad (14)$$



*Analyttisyyssalue ja integrointi Cauchyn integrointiteoreeman todistuksessa*

**Todistus:** Tarkastellaan viivaintegraalia

$$\begin{aligned} \oint_C f(z) dz &= \oint_C [u(x, y) + i v(x, y)] (dx + i dy) \\ &= \oint_C [(u dx - v dy) + i (v dx + u dy)] \\ &= \oint_C (u dx - v dy) + i \oint_C (v dx + u dy). \end{aligned}$$

Sekä reaali- että imaginaariosaan voidaan soveltaa Stokesin kaavaa

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int_A (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a}. \quad (15)$$

Kahdessa dimensiossa  $xy$ -tasossa viiva- ja pintaelementit ovat

$$\begin{aligned} d\mathbf{s} &= dx \mathbf{i} + dy \mathbf{j} \\ d\mathbf{a} &= dx dy \mathbf{k}. \end{aligned}$$

Edelleen  $xy$ -tasossa on

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} \\ \nabla \times \mathbf{A} &= \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{k}, \end{aligned}$$

joten Stokesin kaava voidaan kirjoittaa muotoon

$$\oint_C (A_x dx + A_y dy) = \int_A \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) dx dy. \quad (16)$$

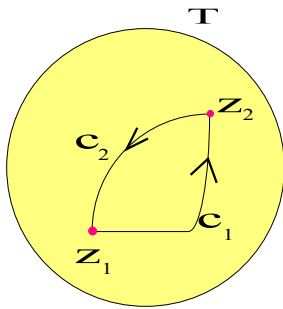
Kun asetetaan  $A_x = u$  ja  $A_y = -v$  ja käytetään Cauchy-Riemannin yhtälöitä saadaan

$$\oint_C (u dx - v dy) = \int_A \left( -\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) dx dy = 0. \quad (17)$$

Vastaavasti kun  $A_x = v$  ja  $A_y = u$  saadaan

$$\oint_C (v dx + u dy) = \int_A \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy = 0. \quad (18)$$

Tämän teoreeman perusteella kahden pisteen välinen viivaintegraali on tiestä riippumaton, kun integroimistie on analyttisyyssalueen sisäpuolella:



Viivaintegraalin tiestä riippumattomuus

$$\int_{C_1} f(z) dz = - \int_{C_2} f(z) dz = \int_{z_1}^{z_2} f(z) dz. \quad (19)$$

**Esimerkkejä analyyttisistä funktioista**

- Potenssifunktio  $f(z) = z^2$  on analyyttinen koko kompleksitasossa.

Potenssifunktio ja sen kompleksikonjugaatti voidaan esittää joko suorakulmaisessa tai napakoordinaatistossa:

$$\begin{aligned} f(z) &= (x + iy)^2 = x^2 - y^2 + i2xy = r^2 e^{2i\phi} \\ f^*(z) &= x^2 - y^2 - i2xy = r^2 e^{-2i\phi}. \end{aligned}$$

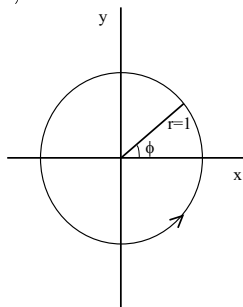
Cauchy-Riemannin ehdot toteutuvat

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} = 2x & \quad ; \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -2y \\ \frac{\partial v}{\partial x} = 2y & \quad ; \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 2x \end{aligned}$$

ja samoin Laplacen yhtälöt

$$\nabla^2 u = \nabla^2 v = 0. \quad (20)$$

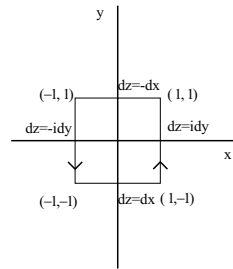
Lasketaan viivaintegraali pitkin yksikköympyrää ja pitkin neliötä ja todetaan, että saadaan sama tulos.



Viivaintegraalin laskeminen pitkin yksikköympyrää  
Yksikköympyrällä  $z = e^{i\phi}$ , jolloin saadaan

$$\begin{aligned} \oint_{r=1} z^2 dz &= \int_0^{2\pi} e^{2i\phi} i d\phi e^{i\phi} \\ &= i \int_0^{2\pi} e^{3i\phi} d\phi \\ &= \frac{i}{3i} \Big|_0^{2\pi} e^{3i\phi} = 0. \end{aligned}$$

**Harjoitustehtävä:** Laske  $z^2$ :n viivaintegraali pitkin pitkin neliötä.



Viivaintegraalin laskeminen pitkin neliön sivuja

- Eksponenttifunktio  $f(z) = e^z$  on analyyttinen koko kompleksitasossa.

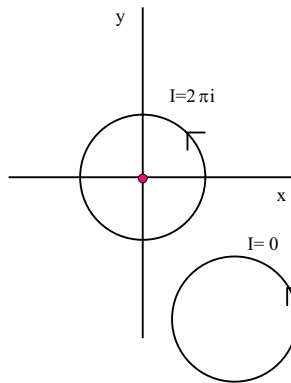
**Huom.** Cauchy-Riemannin ehtojen, harmonisuuden ja Cauchyn integraaliteoreeman toteutuminen ovat analyyttisyyden välttämättömiä ehtoja mutta eivät riittäviä. Riittävää on mm. Cauchy-Riemannin ehtojen toteutuminen ja niissä esiintyvien osittaisderivaattojen jatkuvuus.

**Esimerkkejä ei-analyyttisistä funktioista**

- Itseisarvo  $f(z) = |z| = \sqrt{x^2 + y^2}$ .  
Koska  $v(x, y) = 0$ , itseisarvofunktio ei toteuta CR-yhtälöitä vaikka viivaintegraali pitkin yksikköympyrää häviääkin

$$\oint_{r=1} |z| dz = i \int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = e^{2i\pi} - 1 = 0. \quad (21)$$

- Käänteisluku  $f(z) = 1/z$  on analyyttinen alueessa, joka ei sisällä origoa ( $z = 0$ ).

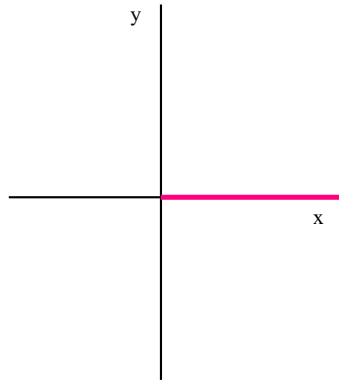


Käänteislukufunktion analyyttisyysalue

Viivaintegraali pitkin tietä, jonka sisään origo jää, on nolasta poikkeava; esimerkiksi pitkin yksikköympyrää laskettu viivaintegraali on

$$\oint_{r=1} \frac{dz}{z} = \int_0^{2\pi} \frac{i e^{i\phi}}{e^{i\phi}} d\phi = i \int_0^{2\pi} d\phi = 2i\pi \neq 0. \quad (22)$$

- Neliöjuuri  $f(z) = \sqrt{z} = \sqrt{r} e^{i\phi/2}$  on analyyttinen leikatussa tasossa. Ne viivaintegraalit, jotka lasketaan pitkin leikkauksen ylittävää tietä ovat nolasta eroavia; esimerkiksi pitkin yksikköympyrää lasketulle viivaintegraalille saadaan tulos



Neliöjuurifunktion leikkaus (branch cut)

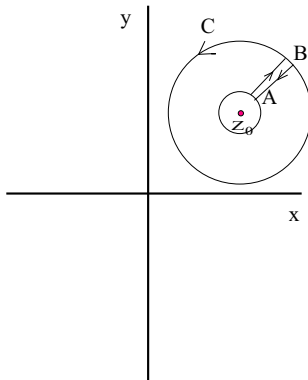
$$\begin{aligned} \oint_{r=1} e^{i\phi/2} e^{i\phi} i \, d\phi &= i \int_0^{2\pi} e^{3i\phi/2} d\phi = \frac{2}{3} (e^{3i\pi} - 1) \\ &= -\frac{4}{3} \neq 0. \end{aligned}$$

## Cauchyn integraalikaava

**Lause 2** Olkoon  $f(z)$  analyyttinen suljetulla käyrällä  $C$  ja sen sisäalueessa ja olkoon  $z_0$  sisäalueen jokin piste.

Silloin on

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz. \quad (23)$$



Integrointitie Cauchyn integraalikaavan todistuksessa

## Cauchyn integraalikaavan todistus

Valitaan  $C$ :n sisällä  $r$ -säteen ympyrä  $C_2$ , josta  $C$ :n kanssa muodostetaan kuvan mukainen suljettu tie  $C_1$ .

Cauchyn integraaliteoreeman mukaan on silloin

$$\oint_{C_1} \frac{f(z)}{z - z_0} dz = \oint_C - \oint_{C_2} + \int_A^B + \int_B^A = 0 \quad (24)$$

eli

$$\oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = \oint_{C_2} \frac{f(z)}{z - z_0} dz, \quad (25)$$

koska integraalit A:sta B:hen ja B:stä A:han kumoavat toisensa.

Tiellä  $C_2$  on

$$\begin{aligned} z &= z_0 + r e^{i\phi} \\ dz &= i r \, d\phi e^{i\phi}, \end{aligned} \quad (26)$$

jolloin saadaan

$$\begin{aligned} \oint_{C_2} \frac{f(z)}{z - z_0} dz &= \int_0^{2\pi} \frac{f(z_0 + r e^{i\phi}) i r \, d\phi e^{i\phi}}{r e^{i\phi}} \\ &= i \int_0^{2\pi} f(z_0 + r e^{i\phi}) d\phi. \end{aligned} \quad (28)$$

Kun ympyrän säde  $r$  lähestyy nollaa ( $r \rightarrow 0$ ), saadaan edelleen

$$\oint_{C_2} \frac{f(z)}{z - z_0} dz = i \int_0^{2\pi} f(z_0) d\phi = 2\pi i f(z_0), \quad (29)$$

koska  $f(z)$  on analyyttinen ja jatkuva funktio pisteessä  $z_0$ . Lopputulokseksi saadaan Cauchyn integraalikaava

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz. \quad (30)$$

## Cauchyn integraalikaavan merkitys

Jos funktion  $f(z)$  arvot tunnetaan pitkin suljettua käyrää saadaan Cauchyn integraalikaavasta laskettua sen arvot käyrän sisäalueessa. Toisin sanoen  $f(z)$  voidaan analyyttisesti jatkaa käyrältä  $C$  sen sisäalueisiin.

## Derivointi käyräintegraalilla

Säännöllisellä analyyttisellä funktiolla on Cauchyn integraalikaavan mukaan voimassa

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\xi)}{\xi - z} d\xi. \quad (31)$$

Tästä yhtälöstä saamme derivoimalla  $z$ :n suhteen

$$\begin{aligned} f'(z) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(\xi) \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\xi - z} \right) d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^2} d\xi \end{aligned} \quad (32)$$

ja derivoimalla toisen kerran

$$f''(z) = \frac{2}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^3} d\xi, \quad (33)$$

koska derivointi parametrin suhteen voidaan siirtää integraalin ulkopuolelta integraalin sisälle (edellyttäen, että integroitavat funktiot ovat jatkuvia).

Induktiolla voidaan osoittaa, että funktion  $n$ :s derivaatta voidaan laskea viivaintegraalina

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{(n+1)}} d\xi. \quad (34)$$

Jos siis  $f'(z)$  on olemassa eli funktio  $f(z)$  on saf niin silloin myös kaikki korkeammatkin derivaatat ovat olemassa kyseisessä alueessa. Reaalifunktiolle ne eivät välttämättä ole määriteltyjä vaikka esimerkiksi ensimmäinen derivaatta olisikin olemassa.

## Liouvillen teoreema

**Lause 3** Funktio, joka on analyyttinen ja rajoitettu ( $|f(z)| \leq M$ ) koko  $z$ -tasossa, surkastuu vakioksi.

**Todistus:** Osoitetaan, että funktion derivaatta

$$f'(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^2} dz; \quad |f(z)| \leq M \quad (35)$$

on nolla mielivaltaisessa tason pisteessä  $z_0$ . Valitaan integrointitie  $R$ -säteiseksi ympyräksi ja annetaan lopuksi säteen  $R$  lähestyä ääretöntä. Funktion derivaatta on silloin

$$\begin{aligned} f'(z_0) &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{f(z_0 + R e^{i\phi}) i R d\phi e^{i\phi}}{R^2 e^{2i\phi}} \quad (36) \\ &= \frac{1}{2\pi R} \int_0^{2\pi} f(z_0 + R e^{i\phi}) d\phi e^{-i\phi} \end{aligned}$$

ja saadaan epäyhtälö

$$|f'(z_0)| \leq \frac{1}{2\pi R} \int_0^{2\pi} |f(z)| d\phi \leq \frac{M}{R} \rightarrow 0 \quad (37)$$

Siten derivaatan arvo häviää kun  $R \rightarrow \infty$ ,

$$f'(z_0) = 0, \quad (38)$$

ja itse funktion on silloin oltava vakio koko tasossa. Teoreeman perusteella kaikilla ei-triviaaleilla funktioilla on singulariteetteja, jotka kuitenkin voivat olla myös äärettömyydessä (esimerkiksi  $z^n$ ,  $e^z$ ,  $\sin(z)$  ja jne). Näille funktioille  $|f(z)|$  ei ole kuitenkaan rajoitettu. Silti sanotaan, että niiden analyttisyysalueena on koko kompleksitaso, josta on singulaariset pisteet suljettu pois.

## Funktioiden singulariteetit

Pisteet, joissa  $f(z)$  ei ole analyyttinen ovat erikoispisteitä ja ne on suljettava pois analyyttisyysalueesta.

Singulaarisissa pisteissä on  $f(z) = \infty$  tai jokin sen derivaatta  $f^{(n)}(z) = \infty$ ,  $n = 1, \dots$ . Funktioilla voi olla kolmen tyyppisiä singulariteetteja: navat, oleelliset erikoispisteet ja kiertopisteet (pole, essential singularity, branch point).

### 1. n-kertainen napa:

$$f(z) = \frac{g(z)}{(z - z_0)^n}; \quad g(z_0) \neq 0 \quad (39)$$

tai

$$\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)^k f(z) \begin{cases} = \infty, & k < n \\ \neq \infty, & k = n \\ = 0, & k > n. \end{cases} \quad (40)$$

### 2. oleellinen erikoispiste:

$$\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)^k f(z) = \infty \quad (41)$$

kaikilla  $k$ :n arvoilla.

### 3. kiertopiste:

Kierretessä pisteen  $z_0$  ympäri alkaen mielivaltaisesta pisteestä  $z$ , funktion arvo muuttuu pisteessä  $z$  jokaisella kierroksella pisteen  $z_0$  ympäri.

## Esimerkkejä

- Funktiolla

$$f(z) = \frac{1}{(z^2 + 1)^2} = \frac{1}{[(z + i)(z - i)]^2} \quad (42)$$

on kaksinkertaiset navat pisteissä  $z = \pm i$ .

- Funktiolla

$$f(z) = \frac{e^{1/z}}{z^2 - 1} \quad (43)$$

piste  $z = 0$  on oleellinen erikoispiste, sillä

$$\lim_{z \rightarrow 0} z^k e^{1/z} = \lim_{z \rightarrow 0} e^{k \log(z) + 1/z} = \infty. \quad (44)$$

- Funktiolla

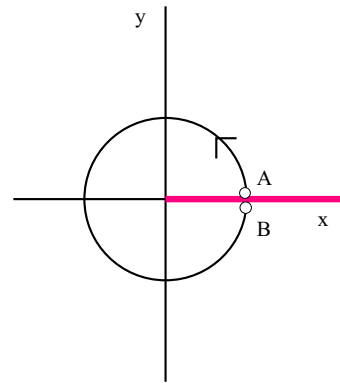
$$f(z) = z^{1/4} = r^{1/4} e^{i\phi/4} \quad (45)$$

piste  $z = 0$  on kiertopiste, sillä

$$f(A) = r^{1/4}$$

$$f(B) = r^{1/4} e^{i2\pi/4} = r^{1/4} e^{i\pi/2} = i r^{1/4}$$

eli  $f(A) \neq f(B)$ .



*Funktion  $z^{1/4}$  kiertopiste ja leikkaus (branch cut)*

Kiertopisteen tapauksessa taso on leikattava esimerkiksi pitkin suoraa siten, että mikään integrointitie ei voi mennä leikkauksen yli. Tässä tapauksessa myös  $z = \infty$  on kiertopiste, joten leikkaus on koko positiivinen reaaliakseli.

- Funktiolla

$$f(z) = \sqrt{z^2 + 1} = (z - i)^{1/2} (z + i)^{1/2} \quad (46)$$

pisteet  $z = \pm i$  ovat kiertopisteitä.

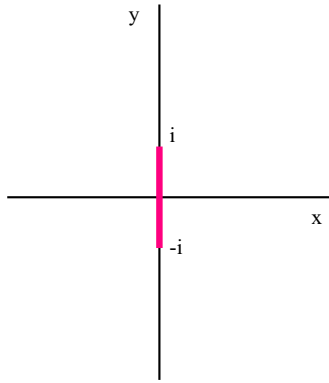
Napakoordinaatistoesityksessä

$$z = i + r_1 e^{i(\phi_1 + 2\pi k_1)}$$

kuvaa etäisyydellä  $r_1$  pisteestä  $z = i$  olevaa kompleksitason pistettä. Parametrin  $k_1 = 0, 1, \dots$  arvo kertoo, kuinka monta kertaa on kierretty pisteen  $z = i$  ympäri lähtien kulman arvosta  $\phi_1$ . Vastaavasti

$$z = -i + r_2 e^{i(\phi_2 + 2\pi k_2)}$$

kuvaa etäisyydellä  $r_2$  pisteestä  $z = -i$  olevaa kompleksitason pistettä ja parametrin  $k_2 = 0, 1, \dots$  arvo kertoo, kuinka monta kertaa on kierretty pisteen  $z = -i$  ympäri.



Neliöjuurifunktion leikkaus

Funktio  $f(z)$  voidaan silloin esittää muodossa

$$\begin{aligned} f(z) &= \sqrt{z^2 + 1} \\ &= \sqrt{r_1 r_2} e^{i(\phi_1 + 2\pi k_1)/2 + (\phi_2 + 2\pi k_2)/2} \\ &= \sqrt{r_1 r_2} e^{i((\phi_1 + \phi_2)/2 + \pi(k_1 + k_2))}. \end{aligned}$$

Jos  $k_1 + k_2$  on pariton niin funktion vaiheen merkki vaihtuu, jos taas parillinen niin merkki ei vaihdu. Tätä tilannetta voidaan kuvata siten, että pisteiden  $z = \pm i$  väliin piirretään leikaussuora (esitetty kuvassa), jolloin funktio säilyy yksikäsitteisenä, kun tätä suoraa ei ylitetä.

- Logaritmfunktiolla

$$f(z) = \log(z) = \log(|z|) + i\phi \quad (47)$$

pisteet  $z = 0$  ja  $z = \infty$  ovat kiertopisteitä.

### Riemannin pinnat

Esimerkiksi funktiolla

$$f(z) = z^{1/2} = r^{1/2} e^{i\phi/2} \quad (48)$$

piste  $z = 0$  on kiertopiste sillä, kun  $\phi = \phi_1 + 2n\pi$

$$f(z_0) = r^{1/2} e^{i\frac{\phi_1}{2}} \quad (49)$$

$$f(z_1) = r^{1/2} e^{i(\frac{\phi_1}{2} + \pi)} = -r^{1/2} e^{i\frac{\phi_1}{2}} \quad (50)$$

$$f(z_2) = r^{1/2} e^{i(\frac{\phi_1}{2} + 2\pi)} = +r^{1/2} e^{i\frac{\phi_1}{2}}. \quad (51)$$

Sanotaan, että kun  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  olemme moniarvoisen funktion yhdellä haaralla, kun taas  $2\pi \leq \phi \leq 4\pi$  on sen toinen haara ja positiivinen reaaliakseli on leikaussuora (branch cut).

Voidaan ajatella tässä tapauksessa, että kompleksitaso koostuu toisiinsa pitkin positiivista reaaliakselia liitetyistä lehdistä (sheet) siten, että alimman lehden alareuna liittyy ylimmän lehden yläreunaan. Jokainen Riemannin lehti (Riemann sheet) vastaa funktion haaraa, jolla se on yksikäsitteinen. Lehtien joukko muodostaa Riemannin pinnan (Riemann surface).

### Sarjat

#### Sarjan suppeneminen

#### Määritelmä 3 Kompleksijäseninen sarja

$$\sum_{k=0}^{\infty} u_k = \sum_{k=0}^{\infty} (a_k + i b_k) \quad (52)$$

suppenee, jos sekä reaali- että imaginaariosien sarjat suppenevat.

Suppenemistesteinä voi siten käyttää samoja testejä kuin reaalifunktioiden teoriassa. Esimerkiksi osamäärätesti (ratio test) on yleisimmin käytetty testi:

Jos  $\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{u_{k+1}}{u_k} \right| = L$ , niin sarja suppenee kun  $L < 1$  ja hajaantuu kun  $L > 1$ . Tapauksessa  $L = 1$  on käytettävä jotain muuta testiä.

#### Potenssisarjat

Kompleksijäseninen potenssisarja määritellään lausekkeena

$$a_0 + a_1(z - z_0) + a_2(z - z_0)^2 + \dots \quad (53)$$

**Lause 4 (suppenemisympyrä)** Jokaista potenssisarjaa (53) vastaa määrittänyt  $z_0$ -keskinen ympyrä siten, että sen sisällä sarja suppenee itseisesti ja hajaantuu sen ulkopuolella.

#### Lause 5 (potenssisarjan ja funktion vastaavuus)

Potenssisarja (53) määrittelee suppenemisympyränsä sisällä säännöllisen analyttisen funktion, jonka kaikki derivaatat voidaan laskea sarjasta derivoimalla termeittäin.

**Lause 6 (suppenemisympyrän koko)** Analyttistä funktiota kuvaavan sarjan suppenemissäde on  $|z_0 - z_k|$ , missä  $z_k$  on lähin kyseisen funktion singulaarinen piste.

Näitä lauseita ei todisteta tässä koska ne ovat melko itsestäänselviä. Lauseiden muodollinen todistus löytyy funktioteorian oppikirjoista (esimerkiksi R. Nevanlinna ja V. Paatero, Funktioteoria).

Esimerkiksi  $z_0 = 0$  ympäristössä kehitetyllä sarjalla

$$f(z) = \sqrt{1+z} = 1 + \frac{1}{2}z - \frac{1}{8}z^2 + \dots \quad (54)$$

$z = -1$  on kiertopiste. Tässä pisteessä  $f(-1) = 0$  ja  $f'(-1) = \infty$ . Sarjan suppenemisarvo on  $|z| < 1$  ja suppenemissäde  $R = 1$ .

#### Analyttinen jatkaminen

Kun funktio  $f(z)$  on saf myös  $S_1$ :n ulkoalueessa, niin analyttisellä jatkamisella voidaan sarjakehitelmän suppenemisarvoa laajentaa. Tapauksessa jossa funktiolla on vain yksittäisiä singulaarisia pisteitä (napoja), voidaan pistettä  $z_0$  vaihtamalla funktio  $f(z)$  esittää potenssisarjoilla koko tasossa, jolloin suppenemisarvo peittävät osittain toisensa.

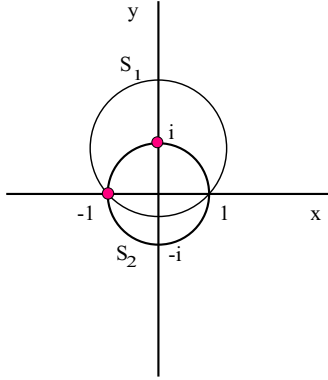
Esimerkkinä tarkastellaan funktiota

$$f(z) = \frac{1}{1+z} \quad (55)$$

jolla on napa pisteessä  $z = -1$ . Origion ympärillä kehitetty sarja

$$f(z) = \frac{1}{1+z} = 1 - z + z^2 - z^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n z^n \quad (56)$$

suppenee, kun  $|z| < 1$ . Sarjakehitelmä edustaa funktiota suppenemisympyrän sisäalueessa  $S_2$ .



*Funktion analyttinen jatkaminen*

Kehitetään nyt funktio sarjaksi pisteen  $z = i$  ympärillä

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{1+z} = \frac{1}{1+i+(z-i)} \\ &= \frac{1}{1+i} \left(1 + \frac{z-i}{1+i}\right)^{-1}, \end{aligned}$$

joka voidaan kirjoittaa potenssisarjana

$$f(z) = \frac{1}{1+i} \left[1 - \frac{z-i}{1+i} + \left(\frac{z-i}{1+i}\right)^2 - \dots\right]. \quad (57)$$

Tämä sarja konvergoi alueessa

$$|z-i| < |i+1| = \sqrt{2} \quad (58)$$

eli sarja suppenee alueella  $S_1$ . Koska sarjat  $S_1$  ja  $S_2$  edustavat yhteisellä konvergenssialueellaan  $S_1 \cap S_2$  samaa funktiota, ne ovat toistensa analyttisiä jatkeita.

Funktiota voidaan jatkaa edelleen uudella sarjakehitelmällä jonkin alueen  $S_1$  sisäpisteen ympärillä.

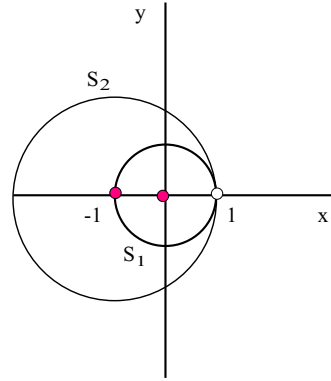
Toinen esimerkki analyttisestä jatkamisesta: Sarja

$$f(z) = \frac{1}{1-z} = 1 + z + z^2 + \dots \quad (59)$$

suppenee kun  $|z| < 1$ , koska lähin singulariteetti on pisteessä  $z = 1$ . Sama funktio voidaan kehittää pisteen  $z = -1$  suhteen, jolloin saadaan sarja

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{1-z} = \frac{1}{1-(z+1)+1} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{1-\frac{z+1}{2}} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{z+1}{2} + \frac{(z+1)^2}{4} + \dots\right) \end{aligned} \quad (60)$$

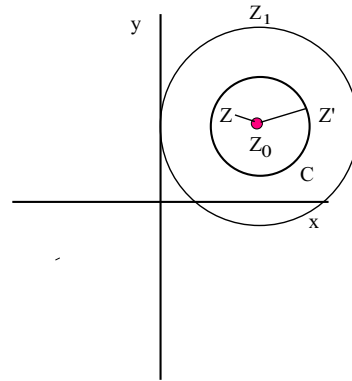
Tässä tapauksessa suppenemissäde on  $R = 2$ .



*Esimerkki funktion analyttisestä jatkamisesta*

**Taylorin sarjat**

Olkoon  $z_1$  lähinnä pistettä  $z_0$  oleva singulariteetti ja  $C$  ympyrä, jonka säde on pienempi kuin  $|z_1 - z_0|$ .



*Taylorin sarjan suppenemisympyrä*

Silloin  $C$ :n sisällä on Cauchyn integrointikaavan mukaan

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{z' - z} dz' \quad (61)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{z' - z_0 - (z - z_0)} dz' \quad (62)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0) \left(1 - \frac{z - z_0}{z' - z_0}\right)} dz' \quad (63)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{z' - z_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z - z_0}{z' - z_0}\right)^n dz' \quad (64)$$

Tämä sarja suppenee, koska  $|z - z_0| < |z' - z_0|$ . Silloin saadaan

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!}, \end{aligned}$$

koska Cauchyn integrointikaavan mukaan funktion  $n$ :s derivaatta on

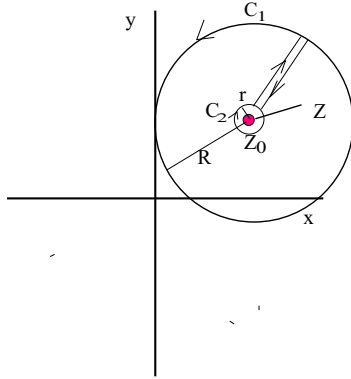
$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{(n+1)}} d\xi. \quad (65)$$

Taylorin sarja on muodoltaan sama kuin reaalialueella. Toisin kuin reaalialueella sen suppenemissäteän määrittäminen on kuitenkin helppoa. Seuraavassa luvussa

yleistetään Taylorin sarja tapauksiin, joissa  $z_0$  on singulaarinen piste (Taylorin sarjassa pisteen  $z_0$  on oltava säännöllinen piste).

### Laurentin sarjat

Oletetaan nyt, että  $z_0$  on funktion  $f(z)$  erikoispiste (napa tai oleellinen erikoispiste), eli  $f(z_0) = \infty$ .



*Integroimistie Laurentin sarjan johdossa*

Soveltamalla jälleen Cauchyn integraalikaavaa tiehen  $C_1 + C_2$  saamme

$$2\pi i f(z) = \oint_{C_1} \frac{f(z')}{z' - z} dz' - \oint_{C_2} \frac{f(z')}{z' - z} dz' \quad (66)$$

missä jälkimmäisen termin merkki johtuu siitä, että tiellä  $C_2$  on otettu negatiivinen kiertosuunta. Voimme nyt kirjoittaa

$$\frac{1}{z' - z} = \frac{1}{z' - z_0 - (z - z_0)} = \frac{1}{z' - z_0} \frac{1}{1 - \frac{z - z_0}{z' - z_0}} \quad (67)$$

Ympyrällä  $C_1$  on  $|z' - z_0| = R > |z - z_0|$ , joten sarja

$$\frac{1}{z' - z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z - z_0)^n}{(z' - z_0)^{n+1}} \quad (68)$$

suppenee. Ympyrällä  $C_2$  on  $|z' - z_0| = r < |z - z_0|$ , joten sarja

$$\frac{1}{z' - z} = -\frac{1}{z - z_0} \frac{1}{1 - \frac{z' - z_0}{z - z_0}} = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z' - z_0)^n}{(z - z_0)^{n+1}} \quad (69)$$

suppenee.

Siten kummatkin kehitelmät ovat voimassa ympyrärenkaassa  $r < |z - z_0| < R$  ja saamme tulokseksi

$$2\pi i f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' + \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^{-n-1} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{-n}} dz'$$

Vaihtamalla summausindeksiä jälkimmäisessä termissä  $\mu = -(n + 1)$  eli  $-n = \mu + 1$  saadaan

$$2\pi i f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' + \sum_{\mu=-1}^{-\infty} (z - z_0)^{\mu} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{\mu+1}} dz'$$

Siten funktio  $f(z)$  voidaan esittää sarjana

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (z - z_0)^n \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (z - z_0)^n$$

missä

$$c_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' \quad (70)$$

Jos  $z_0$  on säännöllinen piste, niin saamme takaisin Taylorin kehitelmän, sillä Cauchyn integraaliteoreeman mukaan, kun  $n = -m < 0$

$$c_{-m} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{1-m}} dz' = \frac{1}{2\pi i} \oint_C (z' - z_0)^{m-1} f(z') dz' = 0$$

koska integrandi on saf.

Käytännössä Laurentin sarja voidaan muodostaa usein Taylorin kaavan avulla. Esimerkiksi funktion

$$f(z) = \frac{e^z}{z - 1} \quad (71)$$

Laurentin sarja pisteessä  $z_0 = 1$  saadaan kehittämällä osoittaja Taylorin sarjaksi, jolloin

$$e^z = e^{z-1} e = e \sum_0^{\infty} \frac{(z - 1)^n}{n!} \quad (72)$$

ja

$$\begin{aligned} \frac{e^z}{z - 1} &= e \sum_0^{\infty} \frac{(z - 1)^{n-1}}{n!} \\ &= e \left[ \frac{1}{z - 1} + 1 + \frac{1}{2}(z - 1) + \frac{1}{6}(z - 1)^2 + \dots \right]. \end{aligned}$$

Tämä sarja suppenee koko kompleksitasossa.

Sama tulos saataisiin myös integroimalla, kun asetetaan  $z = 1 + re^{i\phi}$

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^z}{(z - 1)^{n+2}} dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{e^{re^{i\phi}}}{r^{n+2} e^{i(n+2)\phi}} i r e^{i\phi} d\phi \\ &= \frac{e}{2\pi r^{n+1}} \int_0^{2\pi} e^{re^{i\phi} - i(n+1)\phi} d\phi, \end{aligned}$$

jolloin esimerkiksi

$$\begin{aligned} c_{-1} &= \frac{e}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{re^{i\phi}} d\phi \\ &= \frac{e}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{r \cos \phi + i r \sin \phi} d\phi \\ &= \frac{e}{2\pi} 2\pi = e, \end{aligned}$$



koska  $r$  voidaan valita mielivaltaisen pieneksi ( $r \rightarrow 0$ ).  
Tapauksessa  $n \geq 0$  saadaan vastaavasti

$$c_n = \frac{e}{2\pi} \int_0^{2\pi} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{e^{re^{i\phi} - i(n+1)\phi}}{r^{n+1}} d\phi \quad (73)$$

Kun derivoidaan raja-arvolausekkeen osoittaja ja nimittäjä  $n + 1$  kertaa (L'Hospitalin sääntö), saadaan tulokseksi

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{e}{2\pi} \int_0^{2\pi} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{e^{i(n+1)\phi} e^{re^{i\phi} - i(n+1)\phi}}{(n+1)!} d\phi \\ &= \frac{e}{2\pi} \frac{2\pi}{(n+1)!} = \frac{e}{(n+1)!} \end{aligned}$$

kuten edellä.

Toisinaan Laurentin sarja voidaan johtaa kertolaskulla. Esimerkiksi funktion

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{e^z}{z^2 - 1} = \frac{e^{z-1}}{z-1} \frac{e}{z+1} \\ &= \frac{e}{z+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z-1)^{n-1}}{n!} \end{aligned}$$

Laurentin kehittelmä saadaan laskettua käyttämällä apuna geometrista sarjaa

$$\begin{aligned} \frac{1}{z+1} &= \frac{1}{z-1+2} = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + \frac{z-1}{2}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(z-1)^m}{2^m} \end{aligned}$$

jolloin tulokseksi saadaan välittömästi

$$f(z) = \frac{e^z}{z^2 - 1} = \frac{e}{2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{(z-1)^{n+m-1}}{n! (-2)^m}. \quad (74)$$

Kun  $z_0$  on oleellinen erikoispiste, Laurentin sarja sisältää äärettömän monta termiä, joilla on negatiivinen eksponentti; esimerkiksi

$$e^{1/z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{z^n}. \quad (75)$$

**Huomatus:** Laurentin sarjan tapauksessa  $z_0$  ei saa olla kiertopiste. Esimerkiksi funktiolle  $\sqrt{z-1}$  piste  $z_0 = 1$  ei käy, mutta sen sijaan  $z_0 = 0$  antaa normaalin Taylorin sarjan

$$\sqrt{z-1} = 1 - \frac{1}{2}z + \dots \quad (76)$$

## Residylaskenta

### Residylause

Olkoon  $z_0$  funktion  $f(z)$  eristetty yksittäinen erikoispiste ja olkoon sen Laurentin kehittelmä

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \quad (77)$$

Lasketaan funktion  $f(z)$  viiva-integraali pitkin  $z_0$ -keskeisen ympyrän kehää  $C$ . Summan termit voidaan integroida erikseen.

$$\begin{aligned} I_n &= a_n \oint_C (z - z_0)^n dz = a_n \int_0^{2\pi} r^n e^{in\phi} i r e^{i\phi} d\phi \\ &= i a_n r^{n+1} \int_0^{2\pi} e^{i(n+1)\phi} d\phi \\ &= \begin{cases} 2\pi i a_{-1}, & n = -1 \\ 0, & n \neq -1 \end{cases} \end{aligned}$$

Saamme siten

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i a_{-1} \quad (78)$$

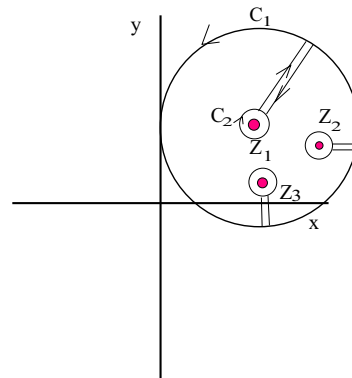
Kerrointa  $a_{-1}$  kutsutaan funktion  $f(z)$  residyksi pisteessä  $z_0$ .

$$a_{-1} = \text{Res}(z_0)$$

**Lause 7 (Residylause)** Jos funktiolla  $f(z)$  on eristetyt singulariteetit pisteissä  $z_1, z_2, \dots$ , niin integraali pitkin tietä, joka sulkee sisäänsä nämä singulariteetit saadaan laskettua singulaaristen pisteiden residyjen avulla,

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_k \text{Res}(z_k) \quad (79)$$

**Todistus:** Deformoidaan tietä  $C$  niin, että se kiertää erikoispisteet  $z_i$  (katso kuva).



Residynlauseen todistuksessa käytetty integrointie Pitkin tällaista tietä laskettu integraali häviää Cauchyn integraaliteoreeman mukaan

$$\oint_{C'} f(z) dz = 0 \quad (80)$$

Toisaalta voimme kirjoittaa

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_{C'} f(z) dz \\ &= \oint_C f(z) dz - \oint_{C_1} f(z) dz - \oint_{C_2} f(z) dz + \dots, \end{aligned}$$

koska kiertosuunta on käännetty integroitaessa teiden  $C_1, C_2, \dots$  yli. Silloin saadaan tulos

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_k \text{Res}(z_k) \quad (81)$$

soveltamalla tulosta (78) jokaiselle tielle  $C_1, C_2, \dots$  erikseen.

### Residyn laskeminen

Tarkastellaan residyn laskemista käytännössä:

#### 1. n-kertainen napa

Kun funktiolla  $f(z)$  on  $n$ :n kertaluvin napa, se voidaan kirjoittaa muotoon

$$f(z) = \frac{g(z)}{(z - z_0)^n}, \quad \text{missä } g(z_0) \neq 0 \text{ ja } \infty. \quad (82)$$

Taylorin kehitelmän mukaan

$$\begin{aligned} g(z) &= g_0 + g_1(z - z_0) + g_2(z - z_0)^2 + \dots \\ &= \sum_{\mu=0}^{\infty} g_{\mu}(z - z_0)^{\mu} \end{aligned}$$

missä

$$g_{\mu} = \left. \frac{g^{(\mu)}(z)}{\mu!} \right|_{z_0} \quad (83)$$

Silloin saadaan funktiolle  $f(z)$  kehitelmä

$$f(z) = \frac{g_0}{(z - z_0)^n} + \frac{g_1}{(z - z_0)^{n-1}} + \dots + \frac{g_{n-1}}{(z - z_0)} + \dots \quad (84)$$

Tässä tapauksessa residy on

$$a_{-1} = g_{n-1} = \frac{g^{(n-1)}(z_0)}{(n-1)!} \quad (85)$$

Ensimmäisen ja toisen kertaluvin napojen tapauksessa saadaan tulokset

$$n = 1 : \quad \text{Res}(z_0) = g_0 = g(z_0) \\ = \lim_{z \rightarrow z_0} [(z - z_0) f(z)]$$

$$n = 2 : \quad \text{Res}(z_0) = g_1 = g'(z_0)$$

### 2. Oleellinen erikoispiste:

Tarkastellaan esimerkkinä eksponenttifunktiota käänteisluvusta, jolla on oleellinen erikoispiste  $z_0 = 0$

$$e^{\frac{1}{z}} = 1 + \frac{1}{z} + \frac{1}{2z^2} + \dots, \quad a_{-1} = 1 \quad (86)$$

$$\frac{e^{\frac{1}{z}}}{z} = \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} + \dots, \quad a_{-1} = 1 \quad (87)$$

$$\frac{e^{\frac{1}{z}}}{z^2} = \frac{1}{z^2} + \frac{1}{z^3} + \dots, \quad a_{-1} = 0 \quad (88)$$

Aina residyn arvoa ei saada yksityisenä lukuna, vaan se voi olla myös sarjan summa; esimerkiksi

$$e^{z+\frac{1}{z}} = e^z e^{\frac{1}{z}} \quad (89)$$

$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{z^{\mu}}{\mu!} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{z^{\nu}} \frac{1}{\nu!} = \sum_{\mu, \nu} \frac{1}{\mu! \nu!} z^{\mu-\nu}. \quad (90)$$

Residy saadaan termin  $\mu - \nu = -1$  kertoimena, eli asetetaan kaksinkertaisessa sarjassa  $\mu = \nu - 1$  ja tulos on

$$a_{-1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{\nu! (\nu-1)!} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{12} + \dots \approx 1.59 \quad (91)$$

### Residylaskun sovelluksia: tavallisimmat integraalityypit

Tavallisimmat integraalityypit ovat

1.

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad (92)$$

2.

$$I_2 = \int_0^{2\pi} f(\cos \phi, \sin \phi) d\phi \quad (93)$$

3.

$$I_3 = \int_0^{\infty} x^{\mu} f(x) dx \quad (94)$$

### Integraalityyppi 1

Integraali

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad (95)$$

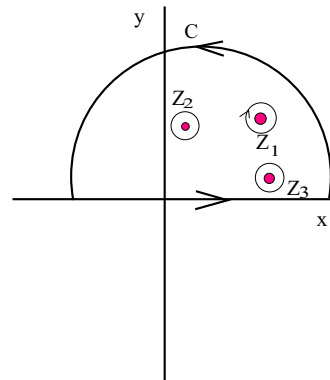
voidaan laskea viivaintegraalin

$$\oint_C f(z) dz = \int_{-R}^R f(x) dx + \int_0^{\pi} f(Re^{i\phi}) i Re^{i\phi} d\phi \quad (96)$$

avulla, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \\ &= 2\pi i \sum \text{Res}(z_i) - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\pi} f(Re^{i\phi}) i Re^{i\phi} d\phi \\ &= 2\pi i \sum \text{Res}(z_i), \end{aligned}$$

koska tavallisesti integraali puoliympyrän yli häviää kun mennään rajalle  $R \rightarrow \infty$ , mutta tämä raja-arvo on huolella tutkittava kussakin tapauksessa.



Integroimistie tyypin 1 integraaleissa

#### Esimerkki 1

Funktiolla  $f(z) = (z^2 + 1)^{-1}$  on yksinkertainen napa positiivisella imaginaariakselilla pisteessä  $z_0 = +i$ , jossa laskettu residy on

$$\text{Res}(i) = \lim_{z \rightarrow i} (z - i) f(z) = \lim_{z \rightarrow i} (z + i)^{-1} = \frac{1}{2i}. \quad (97)$$

Silloin saadaan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + 1} = 2\pi i \frac{1}{2i} = \pi. \quad (98)$$

**Esimerkki 2**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2ix} (e^{ix} - e^{-ix}) dx \quad (99)$$

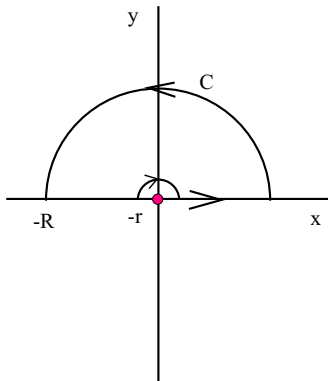
Lasketaan funktion

$$f(z) = \frac{e^{iz}}{z} \quad (100)$$

viivaintegraali pitkin kuvassa esitettyä suljettua tietä, jolloin saadaan

$$0 = \oint_C \frac{e^{iz}}{z} dz \quad (101)$$

$$= \int_{-R}^{-r} \frac{e^{ix}}{x} dx + \int_r^R \frac{e^{ix}}{x} dx - i \int_0^\pi e^{ir e^{i\phi}} d\phi + i \int_0^\pi e^{iR e^{i\phi}} d\phi. \quad (102)$$



*Esimerkki integraalityypistä 1*

Tekemällä ensimmäisessä integraalissa muuttujan vaihto  $x \rightarrow -x$  saadaan edelleen

$$\int_r^R \left( \frac{e^{ix}}{x} dx - \frac{e^{-ix}}{x} dx \right) = i \int_0^\pi e^{ir(\cos \phi + i \sin \phi)} d\phi - i \int_0^\pi e^{ix} e^{-R \sin \phi} d\phi.$$

Lopuksi otetaan raja-arvot  $R \rightarrow \infty$  ja  $r \rightarrow 0$ , jolloin integraalista pienen puoliympyrän yli saadaan  $i\pi$  ja integraali ison puoliympyrän yli häviää ja lopputulos on

$$2i \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = i\pi \quad (103)$$

eli

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \pi. \quad (104)$$

**Integraalityyppi 2**

Lasketaan tyyppiä

$$I_2 = \int_0^{2\pi} f(\cos \phi, \sin \phi) d\phi \quad (105)$$

oleva integraali.

Tehdään sijoitus

$$z = e^{i\phi} \quad (106)$$

$$\cos \phi = \frac{1}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) = \frac{1}{2} \left( z + \frac{1}{z} \right) \quad (107)$$

$$\sin \phi = \frac{1}{2i} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) = \frac{1}{2i} \left( z - \frac{1}{z} \right) \quad (108)$$

$$dz = i d\phi e^{i\phi} \Rightarrow d\phi = \frac{dz}{iz} \quad (109)$$

ja lasketaan integraali

$$I_2 = \int_0^{2\pi} f(\cos \phi, \sin \phi) d\phi = \oint_C f\left(\frac{1}{2}\left(z + \frac{1}{z}\right), \frac{1}{2i}\left(z - \frac{1}{z}\right)\right) \frac{dz}{iz}$$

pitkin yksikköympyrää.

**Esimerkki 1**

Integraali

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2 + \sin^2 \phi} \quad (110)$$

voidaan kirjoittaa ensin muotoon

$$I = \oint_C \frac{dz}{iz} \frac{1}{2 - \frac{1}{4}(z - 1/z)^2} = \frac{4}{i} \oint_C \frac{z dz}{8z^2 - (z^2 - 1)^2} = 4i \oint_C \frac{z dz}{[(z^2 - 1) - 2\sqrt{2}z][(z^2 - 1) + 2\sqrt{2}z]}.$$

Yksikköympyrän sisällä sijaitsevat nimittäjän nollakohdat ovat

$$z_1 = -\sqrt{2} + \sqrt{3} \approx +0.32$$

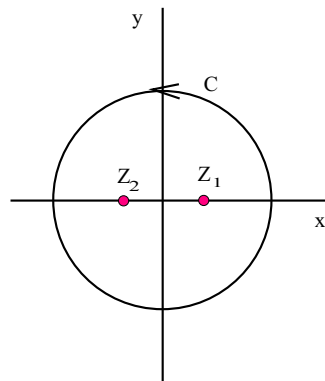
$$z_2 = +\sqrt{2} - \sqrt{3} \approx -0.32$$

ja residyt näissä pisteissä ovat yhtäsuuret

$$\text{Res}(z_1) = \text{Res}(z_2) = \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{8(2\sqrt{3} - 3\sqrt{2})} = -\frac{1}{8\sqrt{6}}. \quad (111)$$

Laskemalla residyjen summa saadaan tulokseksi

$$I = -4i \cdot 2\pi i \cdot \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{6}} = \frac{2\pi}{\sqrt{6}} = 2.56. \quad (112)$$



*Integroimistie tyypin 2 integraaleissa*

**Integraalityyppi 3**

Lasketaan tyyppiä

$$I_3 = \int_0^\infty x^\mu f(x) dx \quad (113)$$

oleva integraali.

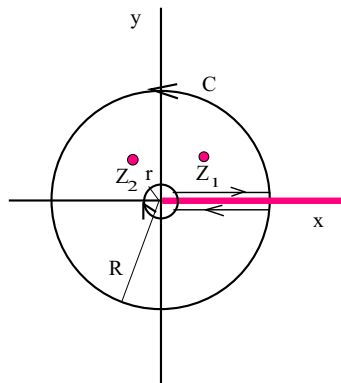
Tällä tyyppillä on kiertopiste origossa (kun  $\mu$  ei ole kokonaisluku), jolloin on leikattava reaaliakselia pitkin sekä valittava oheisen kuvan mukainen tie  $C$ .

Residylauseen perusteella on nyt

$$\oint_C z^\mu f(z) dz = \sum_{\nu=1}^N 2\pi i \text{Res}(z_\nu). \quad (114)$$

Toisaalta on

$$\begin{aligned} \oint_C z^\mu f(z) dz &= \oint_{C_R} z^\mu f(z) dz - \oint_{C_r} z^\mu f(z) dz \\ &+ \int_r^R z^\mu f(z) dz + \int_R^r z^\mu f(z) dz. \end{aligned}$$



Integroimistie tyyppi 3 integraaleissa

Edelleen integroimalla pitkin isoa ja pientä ympyrää saadaan

$$\begin{aligned} \oint_{C_R} z^\mu f(z) dz &= \int_0^{2\pi} R^\mu f(Re^{i\phi}) iRe^{i\phi} e^{i\mu\phi} d\phi \\ &= iR^{1+\mu} \int_0^{2\pi} e^{i(1+\mu)\phi} f(Re^{i\phi}) d\phi \\ \oint_{C_r} z^\mu f(z) dz &= ir^{1+\mu} \int_0^{2\pi} e^{i(1+\mu)\phi} f(re^{i\phi}) d\phi. \end{aligned}$$

Tavallisesti funktio  $f(z)$  on sellainen, että integraalit häviävät, kun lasketaan raja-arvot  $R \rightarrow \infty$  ja  $r \rightarrow 0$ . Kun otetaan raja-arvot, integrointi pitkin reaaliakselia antaa tulokseksi

$$\begin{aligned} \int_r^R z^\mu f(z) dz &\rightarrow \int_0^\infty x^\mu f(x) dx \\ \int_R^r z^\mu f(z) dz &\rightarrow \int_\infty^0 e^{2\pi\mu i} x^\mu f(x) dx \\ &= - \int_0^\infty x^\mu f(x) e^{2\pi\mu i} dx. \end{aligned}$$

Jälkimmäistä tulosta laskettaessa täytyy muistaa ottaa huomioon  $2\pi$ :n kierron antama vaihetekijä:

$$g(A) = x^\mu f(x) \quad ; \quad \phi = 0 \quad (115)$$

$$g(B) = x^\mu e^{2\pi\mu i} f(x) \quad ; \quad \phi = 2\pi. \quad (116)$$

Saamme näin tuloksen

$$(1 - e^{2\pi\mu i}) \int_0^\infty x^\mu f(x) dx = 2\pi i \sum_{\nu=1}^N \text{Res}(z_\nu) \quad (117)$$

eli

$$\int_0^\infty x^\mu f(x) dx = \frac{2\pi i}{1 - e^{2\pi\mu i}} \sum_{\nu=1}^N \text{Res}(z_\nu). \quad (118)$$

### Esimerkki 1

Lasketaan integraali

$$I = \int_0^\infty \frac{x^{\beta-1}}{x+1} dx \quad (119)$$

kun  $0 < \beta < 1$ . Integrandin leikkaus on positiivinen reaaliakseli.

Viivaintegraalit pitkin ison ja pienen ympyrän kaaria häviävät.

$$\oint_{C_R} \frac{z^{\beta-1}}{z+1} dz = i R^\beta \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\beta\phi}}{1 + R e^{i\phi}} d\phi \quad (120)$$

jolloin saadaan raja-arvot

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \oint_{C_R} \rightarrow 0 \quad (121)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \oint_{C_r} \rightarrow 0. \quad (122)$$

Integrandilla on napa pisteessä  $z = -1$ , jonka residyksi saadaan

$$\begin{aligned} \text{Res}(-1) &= (1+z) z^{\beta-1} \frac{1}{1+z} \Big|_{z=-1} \\ &= (-1)^{\beta-1} = (e^{i\pi})^{\beta-1} = e^{i(\beta-1)\pi}. \end{aligned}$$

Integraalin arvo on silloin

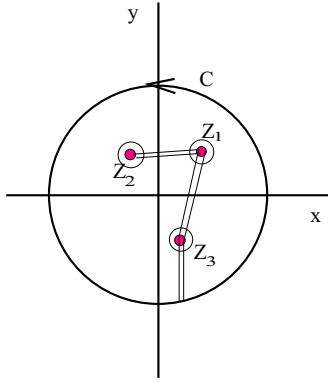
$$\begin{aligned} I &= \frac{2\pi i e^{i(\beta-1)\pi}}{1 - e^{2\pi i(\beta-1)}} = \frac{2\pi i}{e^{-i(\beta-1)\pi} - e^{i(\beta-1)\pi}} \\ &= -\frac{\pi}{\sin(\beta-1)\pi} = \frac{\pi}{\sin \beta\pi}. \end{aligned}$$

## Funktion tuloesitys

### Mittag-Lefflerin kehitelmä

Olkoon  $f(z)$  funktio, jolla on yksinkertaiset navat pisteissä  $z_1, z_2, \dots$  ja  $z_N$ . Cauchyn integraalikaavan ja residylauseen perusteella saadaan yleinen muoto

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = f(z_0) + \sum_{k=1}^N \text{Res}(z_k). \quad (123)$$



*Integroitie Mittag-Lefflerin kehittelmää johdottaessa*  
Lasketaan integrandin residyt pisteissä  $z_k$ . Olkoon  $b_{-1}$  funktion  $f(z)$  residy pisteessä  $z_k$ ; silloin integrandin residyksi saadaan

$$a_{-1} = \lim_{z \rightarrow z_k} \frac{(z - z_k)f(z)}{z - z_0} = \frac{b_{-1}}{z_k - z_0}. \quad (124)$$

Valitaan nyt  $z_0 = 0$ , jolloin saadaan

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z} dz = f(0) + \sum_{k=1}^N \frac{b_{-1}}{z_k}. \quad (125)$$

Käytetään hyväksi identiteettiä

$$\frac{1}{z - z_0} = \frac{1}{z} + \frac{z_0}{z(z - z_0)},$$

jolloin

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z} dz + I_m \\ I_m &= \frac{z_0}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z(z - z_0)} dz. \end{aligned}$$

Seuraavaksi oletamme, että

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} \left| \frac{f(z)}{z} \right| \rightarrow 0. \quad (126)$$

Kun ympyrän  $C$  säde lähestyy ääretöntä, niin integraali  $I_m$  on pieni verrattuna ensimmäiseen integraaliin.

Yhtälöistä (126) ja (125) saadaan

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z} dz &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz - I_m \\ &= f(0) + \sum_k \frac{b_{-1}}{z_k}. \end{aligned}$$

Edelleen yhtälöstä (123) saadaan, kun  $z_0 \neq 0$

$$\begin{aligned} f(z_0) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz + \sum_k \frac{b_{-1}}{z_0 - z_k} \\ &= f(0) + \sum_k b_{-1} \left( \frac{1}{z_k} + \frac{1}{z_0 - z_k} \right) + I_m. \end{aligned}$$

Kirjoitetaan  $z_0 = z$  ja annetaan lopuksi ympyrän  $C$  säteen  $R \rightarrow \infty$ , jolloin  $I_m \rightarrow 0$ .

Lopputuloksena saadaan Mittag-Lefflerin kehittelmä

$$f(z) = f(0) + \sum_{k=1}^N b_{-1} \left( \frac{1}{z_k} + \frac{1}{z - z_k} \right). \quad (127)$$

### Weierstrassin tuloesitys

Olkoon  $g(z)$  funktio, joka on analyyttinen koko kompleksitasossa, jossa sillä on yksinkertaiset nollakohdat pisteissä  $z_k$ ;  $k = 1, 2, \dots, N$  siten, että  $|z_1| \leq |z_2| \leq \dots \leq |z_N|$ . Silloin funktiolla  $f(z)$ ,

$$f(z) = \frac{g'(z)}{g(z)}, \quad (128)$$

on yksinkertaiset navat pisteissä  $z_k$ .

Esimerkkinä olkoon

$$g(z) = (z - z_1)u(z), \quad u(z_1) \neq 0 \text{ ja } \neq \infty$$

$$f(z) = \frac{u'(z) + (z - z_1)u''(z)}{(z - z_1)u(z)} = \frac{1}{z - z_1} + \frac{u'(z)}{u(z)}.$$

Viimeisissä termisissä on

$$\left. \frac{u'(z)}{u(z)} \right|_{z=z_1} \neq \infty.$$

Edellisessä luvussa olemme saaneet funktion  $f(z)$  osamurtokehittelmän, joka suppenee koko kompleksitasossa. Funktion  $g(z)$  kehittelmä voidaan nyt johtaa lausekkeesta

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{g'(z)}{g(z)} = \frac{g'(0)}{g(0)} \\ &+ \sum_{k=1}^N b_{-1} \left( \frac{1}{z_k} + \frac{1}{z - z_k} \right). \end{aligned}$$

Kirjoitetaan tämä logaritmien avulla

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \log g(z) &= \frac{d}{dz} \log g(z) \Big|_{z=0} \\ &+ \sum_{k=1}^N b_{-1} \left( \frac{1}{z_k} + \frac{1}{z - z_k} \right). \end{aligned} \quad (129)$$

Koska funktiolla  $g(z)$  on yksinkertaiset nollakohdat pisteissä  $z_1, \dots, z_N$ , se voidaan kirjoittaa muotoon

$$g(z) = \prod_1^N (z - z_k)u(z),$$

missä  $u(z_k) \neq 0$ . Tällöin funktio  $f(z)$ , jolla on yksinkertaisia napoja, voidaan esittää muodossa

$$f(z) = \frac{g'(z)}{g(z)} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{z - z_k} + \frac{u'(z)}{u(z)} \quad (130)$$

ja sen residyiksi  $b_{-1}$  kaikissa pisteissä  $z_k$  saadaan

$$\begin{aligned} b_{-1} &= \lim_{z \rightarrow z_k} (z - z_k)f(z) \\ &= 1 + \lim_{z \rightarrow z_k} (z - z_k) \frac{u'(z)}{u(z)} = 1. \end{aligned} \quad (131)$$

Kun integroidaan yhtälö (129) 0:sta  $z$ :aan, saadaan tulokseksi

$$\begin{aligned} \log g(z) - \log g(0) &= \frac{g'(0)}{g(0)} z \\ &+ \sum_{k=1}^N \left[ \frac{z}{z_k} + \log \left( 1 - \frac{z}{z_k} \right) \right] \end{aligned}$$

eli

$$\begin{aligned} \log g(z) &= \log g(0) + \log e^{\frac{g'(0)}{g(0)} z} + \sum_{k=1}^N \log \left[ e^{\frac{z}{z_k}} \left( 1 - \frac{z}{z_k} \right) \right] \\ &= \log \left[ g(0) e^{\frac{g'(0)}{g(0)} z} \right] + \log \prod_{k=1}^N e^{\frac{z}{z_k}} \left( 1 - \frac{z}{z_k} \right). \end{aligned}$$

Lopputulokseksi saamme Weierstrassin tuloesityksen

$$g(z) = g(0) e^{\frac{g'(0)}{g(0)} z} \prod_{k=1}^N e^{\frac{z}{z_k}} \left( 1 - \frac{z}{z_k} \right). \quad (132)$$

### Esimerkki

Tulokehitelmä sinille

$$g(z) = \frac{\sin z}{z} \quad (133)$$

Tällöin

$$\begin{aligned} g(0) &= 1 \\ g'(z) &= \frac{\cos z}{z} - \frac{\sin z}{z^2} = \frac{z \cos z - \sin z}{z^2} \\ g'(0) &= 0 \\ z_k &= \pm k\pi, \quad \text{kun } k = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Tuloesitykseksi saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\sin z}{z} &= \prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{z}{k\pi} \right) e^{\frac{z}{k\pi}} \left( 1 + \frac{z}{k\pi} \right) e^{-\frac{z}{k\pi}} \\ &= \prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right) \end{aligned}$$

eli

$$\sin z = z \prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right). \quad (134)$$

Vastaavasti kosinille saadaan tuloesitys

$$\cos z = \prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{4z^2}{(2k-1)^2 \pi^2} \right). \quad (135)$$

### Dispersiorelaatiot

Tarkastellaan funktiota  $f(z)$ , jonka oletetaan

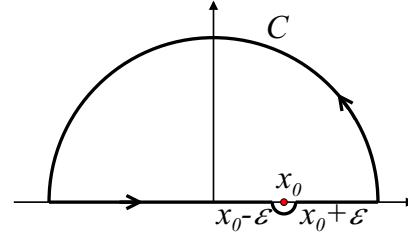
- olevan saf ylempällä puolitasolla ja reaaliakselilla ja
- toteuttavan ehdon

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} f(z) = 0, \quad \text{kun } 0 \leq \arg z \leq \pi.$$

Olkoon  $x_0$  jokin piste reaaliakselilla. Cauchyn integraalikaavan mukaan on nyt

$$f(x_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - x_0} dz,$$

missä integrointitie  $C$  kiertää pisteen  $x_0$  alapuolelta  $\epsilon$ -säteistä puoliympyrää myöten.



*Integrointitie dispersiorelaation johdossa*

Funktion  $f(z)$  ominaisuuksista johtuen viivaintegraali pitkin isoa ympyrää häviää säteen lähestyessä ääretöntä, joten

$$\begin{aligned} f(x_0) &= \frac{1}{2\pi i} \left[ \int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} \frac{f(x)}{x - x_0} dx + \int_{x_0 + \epsilon}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx \right] \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_{\pi}^{2\pi} f(x_0 + \epsilon e^{i\phi}) d\phi. \end{aligned}$$

Koska alkuperäisen integraalin arvo ei Cauchyn lauseen mukaan riipu lainkaan säteestä  $\epsilon$ , annamme sen lähestyä nollaa. Tällöin

$$f(x_0) = \frac{1}{2\pi i} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx + \frac{1}{2} f(x_0).$$

Tässä merkintä  $\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx$  tarkoittaa *Cauchyn pääarvointegraalia*

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} g(x) dx + \int_{x_0 + \epsilon}^{\infty} g(x) dx \right],$$

missä (yleensä) integrandilla on integrointitien pisteessä  $x_0$  singulariteetti. Saamme siis

$$f(x_0) = \frac{1}{\pi i} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx.$$

Monesti tämä kirjoitetaan myös muotoon

$$\mathcal{P} \frac{f(x)}{x - x_0} = \pi i \delta(x - x_0).$$

Tässä  $\delta(x)$  on *Diracin  $\delta$ -funktio*, jolla on mm. ominaisuudet

$$\int f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0)$$

$$\int \delta(x) dx = 1$$

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{kun } x \neq 0 \\ \infty, & \text{kun } x = 0. \end{cases}$$

Hajoitetaan nyt funktio  $f(x)$  reaali- ja imaginääriosiinsa, kuten

$$f(x) = u(x) + iv(x).$$

Voimme siis kirjoittaa

$$\begin{aligned} f(x_0) &= u(x_0) + iv(x_0) \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v(x)}{x - x_0} dx - \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x)}{x - x_0} dx. \end{aligned}$$

Samaistamalla oikean ja vasemman puolen reaali- ja imaginääriosat keskenään saamme *dispersiorelaatiot*

$$\begin{aligned} u(x_0) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v(x)}{x - x_0} dx \\ v(x_0) &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x)}{x - x_0} dx. \end{aligned}$$

Tuntien pelkästään funktion imaginääriosan reaaliakselilla voimme siis määrittää myös sen imaginääriosan reaaliakselilla. Edelleen, käyttäen Cauchyn integraalikaavaa, voimme jatkaa funktion analyttisesti koko ylempään puolitasoon. Samoin voidaan menetellä, jos tunnetaan funktion reaali- ja imaginääriosat reaaliakselilla.

**Huom.** Dispersiorelaatioiden voimassaolo edellytti, että funktio oli analyttinen koko ylempässä puolitasossa ja että funktio lähestyi nollaa ääretöntä lähestyttäessä. Hieman modifioiden johtoa saadaan relaatiot myös siinä tapauksessa, että ko. funktio on analyttinen ja lähestyy nollaa alemmassa puolitasossa.

### Symmetriarelaatiot

Fysikaalisiin ominaisuuksiin liittyvät kompleksiarvoiset funktiot toteuttavat usein symmetriarelaation

$$f(-x) = f^*(x),$$

tai reaali- ja imaginääriosien avulla ilmaistuna

$$u(-x) + iv(-x) = u(x) - iv(x).$$

Tällöin siis reaali- ja imaginääriosat ovat pariton ja imaginääriosat pariton. Dispersiorelaatio

$$u(x_0) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v(x)}{x - x_0} dx$$

voidaan nyt kirjoittaa muotoon

$$\begin{aligned} u(x_0) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^0 \frac{v(x)}{x - x_0} dx + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{v(x)}{x - x_0} dx \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} v(x) \left\{ \frac{1}{x + x_0} + \frac{1}{x - x_0} \right\} dx \\ &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{xv(x)}{x^2 - x_0^2} dx. \end{aligned}$$

Samoin toiseksi dispersiorelaatioksi saadaan

$$v(x_0) = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{x_0 u(x)}{x^2 - x_0^2} dx.$$

### Optinen dispersio

Funktio

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

kuvaava pitkin  $x$ -akselia positiiviseen suuntaan etenevää aaltoa, jonka

- nopeus on  $v = \omega/k$ ,
- kulmanopeus  $\omega$ ,
- aaltovektori  $k$  ja
- taitekerroin  $n = ck/\omega$ .

Maxwellin yhtälöistä, sähköisen permittiivisyyden  $\epsilon$  määritelmästä ja Ohmin laista johtavuuden ollessa  $\sigma$  on johdettavissa relaatio

$$k^2 = \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \left( 1 + i \frac{4\pi\sigma}{\omega\epsilon} \right).$$

Johtavuudesta johtuen  $k^2$  (kuten myös  $k$  ja  $n$ ) on kompleksinen, mikä puolestaan tarkoittaa absorptiota, ts. aalto vaimenee edetessään. Tarkastellaan esimerkkinä huonosti johtavaa väliainetta ( $4\pi\sigma/\omega\epsilon \ll 1$ ). Tällöin

$$k \approx \sqrt{\epsilon} \frac{\omega}{c} + i \frac{2\pi\sigma}{c\sqrt{\epsilon}}$$

ja

$$\psi(x, t) \approx e^{i\omega(\sqrt{\epsilon}/c-t)} e^{-2\pi\sigma x/c\sqrt{\epsilon}},$$

mistä selvästi nähdään aallon vaimeminen.

Taitekertoimen neliö voidaan kirjoittaa muotoon

$$n^2 = \frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \epsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}.$$

Ajatellaan nyt suure  $n^2$  kompleksimuuttujan  $\omega$  funktioksi. Optiikasta tiedämme, että taajuuden  $\omega$  kasvaessa taitekerroin lähenee arvoa 1, ts. funktio  $f(\omega) = n^2(\omega) - 1$  lähestyy arvoa 0 suurilla taajuuksilla. Sovelletaan tähän funktioon dispersiorelaatioita, jolloin saadaan

$$\operatorname{Re} [n^2(\omega_0) - 1] = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\omega \operatorname{Im} [n^2(\omega) - 1]}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

$$\operatorname{Im} [n^2(\omega_0) - 1] = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\omega_0 \operatorname{Re} [n^2(\omega) - 1]}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega.$$

Nämä yhtälöt tunnetaan *Kramers-Kronigin*

*dispersiorelaatioina*. Absorptiokertoimen

( $\propto \sigma \propto \operatorname{Im} n^2(\omega)$ ) tuntemus kaikilla taajuuksilla riittää siis määräämään täydellisesti myös taitekertoimen reaali- ja imaginääriosat (ja päinvastoin).

### Satulapistemenetelmä

#### Satulapistemenetelmän johto

Matemaattisessa fysiikassa tarvitaan usein funktion asympotoottista käyttäytymistä suurilla muuttujan arvoilla.

Tarkastellaan reaalisen muuttujan  $s$  kompleksista funktiota

$$I(s) = \int_C g(z) e^{sf(z)} dz = \int_C g(z) e^{su(x,y)} e^{isv(x,y)} dz \quad (136)$$

ja oletetaan, että funktio  $g(z)$  on hitaasti muuttuva. Integrointitie  $C$  on sellainen, että funktion  $f(z)$  reaaliosa lähestyy miinus äärettömyyttä molemmilla rajoilla ja integrandi häviää molemmilla rajoilla tai integrointitie on suljettu reitti.

Integraalin suuruus riippuu voimakkaasti reaaliosan suuruudesta ja merkistä. Kun parametri  $s$  on suuri ja positiivinen, niin integraalin arvo on suuri, jos reaaliosa on positiivinen ja pieni jos reaaliosa on negatiivinen. Suurin osuus integraaliin saadaan alueelta, missä  $u(z)$ :llä on maksimi integrointitietä pitkin edettäessä. Olkoon se pisteessä  $z = z_0$ . Tässä ääriarvopisteessä on voimassa

$$\nabla u(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (137)$$

eli

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} = 0. \quad (138)$$

Ääriarvoehto on myös kirjoitettavissa muotoon

$$\frac{du(x, y)}{dz} = 0$$

sillä kahden muuttujan funktiolle  $u(x, y)$  on voimassa

$$\frac{du(x, y)}{dz} = \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{i}{2} \frac{\partial u}{\partial y}$$

kun  $z = x + iy$ .

Cauchy-Riemannin ehtojen vuoksi myös imaginaariosan osittaisderivaatat häviävät, koska

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (139)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (140)$$

joten myös kokonaisderivaatta häviää

$$\frac{df}{dz} = 0. \quad (141)$$

Piste  $z_0$  ei kuitenkaan voi olla absoluuttinen maksimi tai minimi, koska

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (142)$$

Jos  $u_{xx} > 0$ , niin  $u_{yy} < 0$ , joten  $u(x, y)$  on  $z_0$ :n ympäristössä satulapinta. Jollekin tielle  $z_0$  antaa minimin, kun taas toiselle se antaa maksimin.

Kehitetään funktion  $f(z)$  Taylorin sarjaksi pisteen  $z_0$  ympäristössä

$$f(z) = f(z_0) + \frac{1}{2} f''(z_0) \frac{1}{2} (z - z_0)^2 \dots \quad (143)$$

Valitaan integrointitie kulkemaan pisteen  $z_0$  kautta pitkin nopeimmin laskevaa jyrkännettä pinnalla  $u(x, y)$ . Tällä

tiellä  $v(x, y)$  on vakio, sillä analytyttisen funktion tasa-arvokäyrät

$$\begin{aligned} u(x, y) &= C_1 \\ v(x, y) &= C_2 \end{aligned}$$

ovat kohtisuorassa toisiaan vastaan. Tässä  $C_1$  ja  $C_2$  ovat vakioita.

Koska  $v(x, y)$  on vakio, niin

$$f(z) - f(z_0) = \frac{1}{2} f''(z_0) (z - z_0)^2 = -\frac{1}{2s} t^2. \quad (144)$$

on reaalinen ja lisäksi negatiivinen, koska maksimista  $f(z_0)$  laskeudutaan alas. Yhtälön jälkimmäisestä osasta saadaan  $t$ :n ja  $z$ :n välinen yhteys.

Otetaan käyttöön napakoordinaattiesitykset

$$\begin{aligned} z - z_0 &= \delta e^{i\alpha} \\ f''(z_0) &= \rho e^{i\phi}, \end{aligned}$$

jolloin

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} f''(z_0) (z - z_0)^2 &= \frac{\delta^2}{2} \rho e^{i(\phi+2\alpha)} = -\frac{1}{2s} t^2 \\ \phi + 2\alpha &= \pi \\ t^2 &= \delta^2 \rho s. \end{aligned} \quad (145)$$

Täten

$$t = \pm \delta \sqrt{\rho s} \quad (146)$$

ja vaihe  $\alpha = (\pi - \phi)/2$  on vakio, eli pistettä  $z_0$  lähestytään siten, että vain etäisyys  $\delta$  muuttuu. Integraali voidaan nyt laskea seuraavasti

$$I(s) \simeq g(z_0) \int_A^B e^{s[f(z_0) - \frac{1}{2s} t^2]} dz, \quad (147)$$

kun oletetaan, että  $g(z)$  on hitaasti muuttuva funktio.

Yhtälöstä (146) saadaan

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial z}{\partial \delta} \frac{d\delta}{dt} = e^{i\alpha} \frac{1}{\sqrt{\rho s}} = \frac{e^{i\alpha}}{|f''(z_0) s|^{1/2}}, \quad (148)$$

jolloin integraali  $I(s)$  on

$$I(s) = \frac{g(z_0) e^{i\alpha}}{|f''(z_0) s|^{1/2}} e^{sf(z_0)} \int_A^B e^{-\frac{1}{2} t^2} dt. \quad (149)$$

Kun  $A \rightarrow -\infty$  ja  $B \rightarrow \infty$ , viimeinen termi on Gaussin integraali, jonka arvo on  $\sqrt{2\pi}$  ja integraalille saadaan asymptootinen lauseke

$$I(s) \approx \sqrt{2\pi} \frac{g(z_0) e^{sf(z_0)}}{\sqrt{|s f''(z_0)|}} e^{i\alpha}. \quad (150)$$

### Stirlingin kaava

Stirlingin kaavalla voidaan laskea suurten kokoalaislukujen kertomafunktio. Gamma-funktio

$$\Gamma(s + 1) = s! = \int_0^\infty \rho^s e^{-\rho} d\rho \quad (151)$$



voidaan kirjoittaa muotoon

$$\Gamma(s+1) = s^{s+1} \int_0^\infty e^{s(\log z - z)} dz, \quad (152)$$

missä on määritelty

$$\begin{aligned} \rho &= zs \\ e^{-\rho} &= e^{-sz} \\ \rho^s &= z^s s^s = e^{s \log z} s^s \\ d\rho &= s dz. \end{aligned}$$

Etsitään ääriarvo funktiolle

$$f(z) = \log z - z \quad (153)$$

Tällöin

$$f'(z) = \frac{1}{z} - 1 = 0. \quad (154)$$

joten ääriarvo saadaan pisteessä  $z_0 = x_0 + iy_0 = 1$  eli  $x_0 = 1$  ja  $y_0 = 0$ .

$$\begin{aligned} f''(z) &= -\frac{1}{z^2} \\ f''(z=1) &= -1 = e^{i\pi}. \end{aligned}$$

Sijoitetaan nämä kertoman lausekkeeseen

$$s! = \frac{\sqrt{2\pi} e^{-s} s^{s+1}}{\sqrt{s}} e^{i\alpha}. \quad (155)$$

Vaihe  $\alpha = (\pi - \pi)/2 = 0$  ja kertoma on reaalinen. Kertomalle saadaan siten asymptootin lauseke

$$s! \approx \sqrt{\frac{2\pi}{s}} e^{-s} s^{s+1} = \sqrt{2\pi s} e^{-s} s^s, \quad (156)$$

joka pitää paikkansa suurilla  $s$ :n arvoilla.

## Ryhmäteoriaa

Fysikaalisten systeemien kvanttimekaanisessa käsittelyssä joudutaan usein turvautumaan approksimatiiviseen ratkaisuun, joka saadaan esitettyä sopivan funktiojoukon 0-kertaluvun approksimaativisen ratkaisun avulla sarjana.

- Tutkimalla systeemin symmetriaa ryhmäteoreettisesti voidaan valita oikeaa symmetriaa vastaavat 0-kertaluvun funktiot ja päästään eroon useimmista Hamiltonin operaattorin ei-diagonaalisista matriisielementeistä.
- Valintasäännöt saadaan ryhmäteoreettisesti laskematta eksplisiittisesti matriisielementejä.
- Kvalitatiivisiä tuloksia saadaan vähällä vaivalla.

### Esimerkki

Tarkastellaan systeemin stationaarisia tiloja kvanttimekaniikassa. Etsitään siis ratkaisuja ajasta riippumattomalle Schrödingerin yhtälölle

$$H\psi_n = E_n \psi_n, \quad (157)$$

missä  $H$  on Hamiltonin operaattori,  $E_n$  ovat  $H$ :n ominaisarvot (energiatasot) ja  $\psi_n$  ovat  $H$ :n ominaisfunktiot. Jos samaan ominaisarvoon liittyy useita ominaisfunktioita  $\psi_n$  sanotaan, että ominaisarvo on degeneroitunut. Koska ominaisarvot kvanttimekaniikassa ovat ainoat mahdolliset tulokset fysikaalisesta mittauksesta, niiden täytyy olla reaalisia. Tämä ehto toteutuu kun vaaditaan, että operaattorit, jotka yhdistetään fysikaalisiin havaintoihin ovat hermiittisiä. Schrödingerin yhtälön ratkaiseminen on usein vaikeaa mutta käyttämällä hyväksi Hamiltonin operaattorin symmetriaa ongelman ratkaisu helpottuu. Hamiltonin operaattori on symmetrinen operaatioissa  $R$ , jos

$$RH = HR \Rightarrow H = R^{-1}HR \quad (158)$$

eli  $R$  ja  $H$  kommutoivat. Jos kaksi operaattoria kommutoi on olemassa ainakin yksi kanta, missä funktiot  $\psi_n$  ovat samanaikaisesti kummankin operaattorin ominaisfunktioita.

Usein  $R$  on yksinkertaisempi operaattori kuin  $H$ . Kun nyt otetaan käyttöön kanta järjestelmä, jossa  $R$  on diagonaalinen saadaan

$$\langle i | RH | j \rangle = \langle i | HR | j \rangle \quad (159)$$

eli käyttämällä yksikköoperaattoria

$$I = \sum_k |k\rangle \langle k|$$

edelleen

$$\sum_k \langle i | R | k \rangle \langle k | H | j \rangle = \sum_k \langle i | H | k \rangle \langle k | R | j \rangle. \quad (160)$$

Kun  $R$  on diagonaalinen ( $\langle i | R | j \rangle = R_{ii} \delta_{ij}$ ) saadaan edelleen

$$R_{ii} \langle i | H | j \rangle = R_{jj} \langle i | H | j \rangle \quad (161)$$

$$(R_{ii} - R_{jj}) \langle i | H | j \rangle = 0. \quad (162)$$

Jos  $\langle i |$  ja  $| j \rangle$  ovat degeneroitumattomia operaattorin  $R$  ominaistiloja ( $R_{ii} \neq R_{jj}$ ), on silloin oltava

$$H_{ij} = 0. \quad (163)$$

Toisin sanoen  $H$  ei voi sekoittaa kahta symmetriatilaa keskenään.

Esimerkiksi jos  $H_0$  ja  $H_1$  ovat pallosymmetrisiä ja

$$\psi_{nl} = R_{nl}(r)Y_m^l \quad ; \quad H_0\psi_{nl}^0 = E_{nl}^0\psi_{nl}^0 \quad (164)$$

ja

$$H\psi_{nl} = (H_0 + H_1)\psi_{nl} = E_{nl}\psi_{nl} \quad (165)$$

niin Schrödingerin yhtälön ratkaisua voidaan nyt etsiä kehittelmänä

$$\psi_{nl} = \sum_n c_n \psi_{nl}^0, \quad (166)$$

jolloin vain saman kulumaliikemäärän tilat esiintyvät kehittelmässä. Symmetrian huomioiminen yksinkertaistaa siten ongelmaa huomattavasti: etsittäessä ominaisfunktioita, jotka diagonalisoivat Hamiltonin operaattorin, haku voidaan nyt tehdä erikseen niiden ominaisfunktioiden joukossa, jotka kuuluvat symmetriaoperaattorin erilaisiin ominaisarvoihin, koska  $H$ :n mikään ei-diagonaalinen matriiselementti ei sekoita erilaisen symmetrian omaavia funktioita. Matemaattisesti symmetriaa voidaan kuvata transformaatioilla, joissa  $H$  säilyy invariantteina ja jotka muodostavat ryhmän. Tavallisimpia symmetriaryhmiä ovat rotaatiot, permutaatiot, heijastukset tasossa, pariteettitransformaatiot ja jne. Yleensä näiden ryhmien alkioita voidaan esittää matriiseilla.

## Ryhmäteorian perusteet

### Ryhmän perusaksioomat

Ryhmäksi sanotaan alkiojoukkoa (elements)  $G = \{E, A, B, C, \dots\}$ , jossa on määritelty **kertolasku** (eli **ryhmätoimitus**) siten, että kahteen annettuun alkioon  $A$  ja  $B$  liittyy kolmas alkio  $C$ , joka kuuluu myös joukkoon  $G$ . Kertolaskulle on voimassa ryhmäaksioomat

1. sulkeutuvuus (closure):  $AB = C, C \in G$
2. assosiativisuus:  $A(BC) = (AB)C = ABC$
3. yksikköalkio: on olemassa alkio  $E \in G$ , siten että kaikille alkioille  $A$  on voimassa  $AE = EA = A$
4. käänteisalkio:  $A^{-1}A = AA^{-1} = E$ .

### Muutamia määritelmiä:

- **Äärellinen ryhmä:** alkioden lukumäärä on äärellinen ( $h < \infty$ ).
- **Ääretön ryhmä:** alkioden jono voi olla joko numeroituva tai numeroitumaton (ns. Lie'n ryhmä).
- **Abelin ryhmä:**  $AB = BA$  kaikille ryhmän alkioille.

Ryhmän  $G$  kertaluku  $h$  on sen elementtien lukumäärä. Kertaluku  $h$  on positiivinen kokonaisluku äärellisille ryhmille. Jos taas  $h$  on ääretön mutta numeroituva (esimerkiksi kokonaislukujen ryhmä) niin kyseessä on diskreetti ääretön (infiniittinen) ryhmä. Esimerkki äärettömästä ei-numeroituvasta ryhmästä on rotaatiot tasossa mielivaltaisen kulman  $\phi$  verran.

### Esimerkkejä ryhmistä:

**Esimerkki 1:** Syklinen ryhmä,  $C_4 = \{1, i, -i, -1\}$  Alkiot ovat  $E = 1, A = i, B = -i, C = -1$ , kertolasku on tavallinen kertolasku ja lisäksi ryhmä on Abelin ryhmä. Ryhmätaulu on:

	$E$	$A$	$B$	$C$
$E$	$E$	$A$	$B$	$C$
$A$	$A$	$C$	$E$	$B$
$B$	$B$	$E$	$C$	$A$
$C$	$C$	$B$	$A$	$E$

Kullakin vaaka- tai pystyrivillä kukin alkio esiintyy vain kerran. Käänteisalkiot ovat  $A^{-1} = 1/i = -i = B$ ,  $B^{-1} = 1/(-i) = -(-i) = A$ ,  $C^{-1} = 1/(-1) = -1 = C$  ja neliöt ovat  $A^2 = -1 = C$ ,  $B^2 = -1 = C$  ja  $C^2 = 1$ .

**Esimerkki 2:** Neliryhmä (Vierergruppe, dihedraaliryhmä) muodostuu 2-ulotteisen  $(x, y)$ -tason kierroista kulman  $\pi$  verran akselien  $y, x$  ja  $z$ -suhteen,  $D_2 = \{E, A, B, C\}$ .

Ryhmän alkioita ovat

$$E\mathbf{r} = \mathbf{r} = (x, y) \quad (167)$$

$$A\mathbf{r} = (-x, y) \quad (168)$$

$$B\mathbf{r} = (x, -y) \quad (169)$$

$$C\mathbf{r} = (-x, -y) = -\mathbf{r} \quad (170)$$

ja jokaisen transformaation neliö on yksikköalkio  $A^2 = B^2 = C^2 = E$ . Ryhmän kertotaulu on

	$E$	$A$	$B$	$C$
$E$	$E$	$A$	$B$	$C$
$A$	$A$	$E$	$C$	$B$
$B$	$B$	$C$	$E$	$A$
$C$	$C$	$B$	$A$	$E$

Huomaa, että ryhmät  $C_4$  ja  $D_2$  eivät ole identtisiä.

**Esimerkki 3:** Ortogonaaliset  $n \times n$ -matriisit, ts.  $n \times n$ -matriisit  $A$ , joille on voimassa

$$A^T A = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

muodostavat ryhmän. Geometrisesti ne voidaan tulkita kierroiksi, esim.  $xy$ -tasossa:

$$A(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (171)$$

Nämä alkioita muodostavat jatkuvan ryhmän matriisien kertolaskun suhteen.

**Esimerkki 4:** Kolmioryhmä matriiseille

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Geometrisesti ryhmän alkiot esittävät tasasivuisen kolmion rotaatioita:

- $A$ ,  $B$  ja  $C$  ovat kierrot symmetria-akselien  $A$ ,  $B$  ja  $C$  ympäri kulman  $\pi$  verran.
- $D$  ja  $F$  ovat kierrot painopisteen  $O$  ympäri kulmien  $2\pi/3$  ja  $4\pi/3$  verran.

Symmetria-akselien  $A$ ,  $B$  ja  $C$  yhtälöt muodostuvat niiden pisteiden urasta, jotka eivät muutu symmetriaoperaatioissa  $O$ , ts.

$$O \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Esimerkiksi yhtälön

$$\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

ratkaisuna on symmetria-akselin  $B$  yhtälö

$$y = \sqrt{3}x.$$

Vastaavasti saadaan symmetria-akselin  $A$  yhtälö

$$y = 0$$

ja symmetria-akselin  $C$  yhtälö

$$y = -\sqrt{3}x.$$

Kertotaulu saadaan joko geometrisilla tarkasteluilla tai suorittamalla matriisikertolaskut

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$E$	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$A$	$A$	$E$	$D$	$F$	$B$	$C$
$B$	$B$	$F$	$E$	$D$	$C$	$A$
$C$	$C$	$D$	$F$	$E$	$A$	$B$
$D$	$D$	$C$	$A$	$B$	$F$	$E$
$F$	$F$	$B$	$C$	$A$	$E$	$D$

Huomaa, että tässä ryhmässä operaattorien  $E$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$  neliö on yksikköalkio ja  $D^2 = F$  sekä  $F^2 = D$ .

**Lause 8** Ryhmätaulun kullakin vaaka- tai pystyriivillä kukin alkio esiintyy kerran ja vain kerran.

**Todistus:** Olkoon ryhmässä  $G = \{E, A_2, A_3, \dots, A_h\}$   $h$  kappaletta alkioita, silloin myös jonossa

$$A_k E, A_k A_2, \dots, A_k A_h \quad (172)$$

on  $h$  kappaletta alkioita.

**Väite 1:** Kaikki jonon (172) alkiot ovat erillisiä. Jos tehdään vasta oletus, että esiintyy kaksi samaa alkioita, niin

$$A_k A_s = A_k A_l \Rightarrow A_s = A_k^{-1} A_k A_l = A_l \quad (173)$$

Saadaan tulos, että ryhmässä olisi kaksi samaa alkioita  $A_s = A_l$ , mikä on vastoin olettamusta. Siten kukin alkio esiintyy vain kerran.

**Väite 2:** Kukin ryhmän alkio  $A_r$  esiintyy rivillä kerran. Koska

$$A_k A_s = A_r \in G \quad (174)$$

ja indeksi  $s$  käy läpi kaikki ryhmän alkiot ja kaikki tulona muodostetut alkiot  $A_r$  ovat eri alkioita, niin indeksi  $r$  käy myös läpi kaikki ryhmän alkiot.

**Sykliset ryhmät  $C_n$ :**

Jokaisella ryhmäalkiolla  $X$  on olemassa jono

$$C_n = \{X, X^2, X^3, \dots, X^{n-1}, X^n = E\} \quad (175)$$

joka on myös ryhmä. Tällöin sanotaan, että

1.  $n$  on alkion  $X$  kertaluku,
2.  $C_n$  on syklinen aliryhmä.

Esimerkiksi kolmioryhmän  $S_3$  tapauksessa on  $A^2 = E$ ,  $B^2 = E$ ,  $C^2 = E$  ja  $D^2 = F$ ,  $D^3 = FD = E$  eli

- operaattorit  $D, D^2 = F, D^3 = E$  muodostavat syklisen ryhmän  $C_3$ ,
- operaattorit  $A, A^2 = E$  muodostavat syklisen ryhmän  $C_2$ ,
- operaattorit  $B, B^2 = E$  muodostavat syklisen ryhmän  $C_2$ ,
- operaattorit  $C, C^2 = E$  muodostavat syklisen ryhmän  $C_2$ .

Vastaavasti ryhmä  $C_4$  (esimerkissä 1) on syklinen ryhmä, koska  $A^2 = C, A^3 = AC = B, A^4 = AB = E$ .

**Oikean- ja vasemmapuoleiset sivujoukot**

Olkoon  $S = \{E, S_2, S_3, \dots, S_g\}$  (kertaluku  $g$ ) ryhmän  $G$  (kertaluku  $h$ ) aliryhmä  $S \subset G$  ja olkoon  $X$  jokin  $G$ :n alkio, joka ei kuulu aliryhmään  $S$ . Silloin määritellään

- $XS$  on vasemmanpuoleinen sivujoukko  
 $XS = \{X, XS_2, \dots, XS_g\}$ ,
- $SX$  on oikeanpuoleinen sivujoukko  
 $SX = \{X, S_2X, \dots, S_gX\}$ .

**Lause 9** Oikean- ja vasemmanpuoleiset sivujoukot  $XS$  ja  $SX$  eivät sisällä samoja alkioita kuin aliryhmä  $S$ .

**Todistus:** Tehdään vasta oletus

$$S_k X = S_l \in S \Rightarrow X = S_k^{-1} S_l \in S, \quad (176)$$

mikä on vastoin oikeanpuoleisen sivujoukon määritelmää ( $X$  ei ole  $G$ :n alkio).

**Lause 10 ("Rearrangement theorem")** Jos kahdella sivujoukolla  $SX$  ja  $SY$  on yhteinen alkio, niin ne ovat identtiset.

**Todistus:** Oletetaan, että

$$S_k X = S_l Y \quad (177)$$

ja väitetään, että  $SX = SY$ .

Tällöin

$$S_k X = S_l Y \Rightarrow S_l^{-1} S_k = Y X^{-1} \Rightarrow Y X^{-1} \in S \quad (178)$$

Alkio  $Y X^{-1}$  on siis jokin ryhmän  $S$  alkio. Symbolisessa muodossa kirjoitettuna saadaan:  $SY X^{-1} = S$  eli  $SY = SX$ .

**Lause 11 (Lagrangen teoreema)** Ryhmän  $G$  kertaluvun  $h$  täytyy olla jaollinen aliryhmän  $S$  kertaluvulla  $g$  siten, että  $l = h/g$  on kokonaisluku. Silloin sanotaan, että luku  $l$  on  $S$ :n indeksi  $G$ :ssä.

**Todistus:** Jokainen  $G$ :n  $h$ :sta alkioista esiintyy joko  $S$ :ssä tai jossakin sen sivujoukoista  $SX_i$ , missä alkio  $X_i$  ei kuulu aliryhmään  $S$ . Saamme silloin

$$\{S, SX_2, SX_3, \dots, SX_l\} = G \quad (179)$$

missä kussakin sivujoukossa on  $g$  alkioita ja sivujoukkoja on  $l$  kappaletta. Nyt edellisen lauseen mukaan mikään näistä joukoista ei sisällä samaa alkioita, joten  $l \times g = h$ .

### Konjugaattialkiot ja luokat

**Määritelmä 4 (konjugaattialkiot)** Alkiot  $A$  ja  $B$  ovat toistensa konjugaattialkioita, jos  $\exists X \in G$  siten, että

$$B = XAX^{-1} \text{ tai } A = X^{-1}BX \quad (180)$$

**Määritelmä 5 (luokka)** Konjugaattialkiot muodostavat luokan (kun  $X$  käy läpi kaikki alkiot). Toisin sanoen  $G$ :n osajoukko, joka sisältää kaikki  $A$ :n konjugaattialkiot, on  $A$ :n luokka  $G$ :ssä.

**Lause 12** Jos  $B$  ja  $C$  ovat  $A$ :n konjugaattialkioita, niin ne ovat myös konjugaattialkioita keskenään.

**Todistus:**

$$\begin{aligned} C &= YAY^{-1} = Y(X^{-1}BX)Y^{-1} \\ &= YX^{-1}BXY^{-1} = (YX^{-1})B(YX^{-1})^{-1}. \end{aligned}$$

Nyt  $Z = YX^{-1}$  on myös ryhmän alkio, joten  $C = ZBZ^{-1}$ .

**Määritelmä 6 (jälki)** Neliömatriisin jälki (trace) on sen diagonaalelementtien summa:

$$\text{tr}(A) = \sum_k A_{kk}. \quad (181)$$

**Lause 13**

$$\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA). \quad (182)$$

**Todistus:**

$$\begin{aligned} \text{tr}(AB) &= \sum_k (AB)_{kk} = \sum_{k,l} A_{kl} B_{lk} \\ &= \sum_l \sum_k B_{lk} A_{kl} = \sum_l (BA)_{ll} = \text{tr}(BA). \end{aligned}$$

**Lause 14** Matriisien muodostamassa ryhmässä samaan luokkaan kuuluvilla matriiseilla on sama jälki.

**Todistus:**

$$\text{tr}(B) = \text{tr}(XAX^{-1}) = \text{tr}(X^{-1}XA) = \text{tr}(A). \quad (183)$$

Esimerkiksi kolmioryhmässä saadaan kolme luokkaa, joiden jäljet ovat  $2, 0, -1$ :

- $E$ , jälki =  $2$ ,
- $A, B, C$ , jälki =  $0$ ,
- $F, D$ , jälki =  $-1$ .

Fysikaalisesti tämä tarkoittaa sitä, että kierrot akselien  $A, B$ , ja  $C$  ympäri kuuluvat samaan luokkaan, samoin  $D$  ja  $F$ . Yleisestikin kierrot saman kulman verran kuuluvat samaan luokkaan.

Permutaatioryhmissä samaan luokkaan kuuluvat ne alkiot, joilla on sama sykliarakenne.

### Invariantit aliryhmät ja faktoriryhmät

**Määritelmä 7** Olkoon  $S$   $G$ :n aliryhmä,  $S \subset G$ . Jos  $S$  koostuu täydellisistä luokista, sanotaan  $S$ :ää invariantiksi aliryhmäksi eli normaalijakajaksi. Nyt

$$G = \{E, S_2, S_3, \dots, S_g, X_1, X_2, \dots, X_n\} \quad (184)$$

missä  $g + n = h$ . Toisaalta ryhmän kertaluku  $h$  on jaollinen  $g$ :llä eli  $l = h/g$ , joten  $n/g = l - 1$ .

Sanonnalla  $S$  koostuu täydellisistä luokista tarkoitetaan seuraavaa: jos  $A \in S$  niin kaikki alkiot  $X_i^{-1}AX_i$  kuuluvat aliryhmään  $S$ . Yleisesti merkitään silloin  $X^{-1}SX = S$ .

Esimerkiksi kolmioryhmälle  $S_3$  on:

- aliryhmät ovat  $\{A, E\}, \{B, E\}, \{C, E\}, \{D, F, E\}$
- luokat ovat  $\{E\}, \{A, B, C\}, \{D, F\}$
- Invariantti aliryhmä on silloin  $\{D, F, E\}$ .

**Lause 15** Invariantilla aliryhmällä ovat oikean- ja vasemmanpuoleiset sivujoukot identtiset.

**Todistus:** Invariantille aliryhmälle on

$$X_i^{-1}S_k X_i = S_l \Rightarrow X_i S_l = S_k X_i \quad (185)$$

eli  $X^{-1}SX = S \Rightarrow SX = XS$ .

**Määritelmä 8 (Faktoriryhmä)** Kompleksit  $S, X_1 S, X_2 S, \dots$  muodostavat ryhmän  $F$ , jonka kertaluku on  $l = h/g$ , kun  $S$  on  $G$ :n invariantti aliryhmä. Ryhmätoimitus on kertolasku.

**Todistus:**

### 1. Ryhmätoimitus

$$\begin{aligned}(X_i S)(X_j S) &= S X_i X_j S = S X_k S \\ &= S^2 X_k = S X_k = X_k S \in F.\end{aligned}$$

### 2. Liitännäisyys

$$\begin{aligned}(X_i S)(X_j S)(X_k S) &= ((X_i S)(X_j S^2 X_k)) \\ &= X_i S X_j S X_k = X_i S^2 X_j X_k = S X_i X_j X_k.\end{aligned}$$

### 3. Yksikköalkio

$$S(X_i S) = X_i S^2 = X_i S \quad (186)$$

eli

$$E = S \Leftrightarrow S^2 = S. \quad (187)$$

### 4. Käänteisalkio

$$(X_i S)^{-1} = S^{-1} X_i^{-1} = S X_i^{-1} = S X_k \in F. \quad (188)$$

## Homomorfia ja isomorfia

Kaksi ryhmää  $G = \{E, A, B, C, \dots\}$  ja  $G' = \{E', A', B', C', \dots\}$  ovat isomorfisia, jos niiden välillä vallitsee kääntäen yksikäsitteinen vastaavuus  $G \leftrightarrow G'$ , joka säilyttää ryhmätoimituksen, ts. jos  $AB = C$  ja  $A \rightarrow A', B \rightarrow B'$  sekä  $C \rightarrow C'$  niin  $A'B' = C'$  ja päinvastoin. Jos vastavuus on vain yhteen suuntaan puhutaan homomorfiasta.

Äärettömien ryhmien tapauksessa myös aliryhmä voi olla isomorfinen alkuperäisen ryhmän kanssa.

**Esimerkki 1:** Permutaatioryhmä  $S_3$  ja kolmioryhmä ovat isomorfisia, samoin suorakulmion symmetriaryhmä ja vierergruppe ovat isomorfisia (harjoitustehtävä).

**Esimerkki 2:** Ryhmät  $G$  ja  $G'$  ovat homomorfisia jos niiden alkioiden välillä on vastaavuus

$$G \quad G' \quad (189)$$

$$A \leftarrow A'_1, A'_2, A'_3, \dots \quad (190)$$

$$B \leftarrow B'_1, B'_2, B'_3, \dots \quad (191)$$

$$C \leftarrow C'_1, C'_2, C'_3, \dots \quad (192)$$

Lisäksi vaaditaan että jos  $A'_i B'_j = C'_k$  niin myös  $AB = C$  kaikille pareille  $i$  ja  $j$ .

**Esimerkki 3:** Ryhmän ja sen faktoriryhmän välillä on homomorfia

$$\begin{array}{ccccccc} S, & X_1 S, & X_2 S, & \dots, & X_{l-1} S & = & F \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow & & \\ S, & \bar{X}_1, & \bar{X}_2, & \dots, & \bar{X}_{l-1} & = & G. \end{array} \quad (193)$$

Merkintä  $\bar{X}_i$  tarkoittaa kaikkia sivujoukon  $X_i S$  alkioita.

## Luokkakertolasku

**Lause 16** Jos ryhmän  $G$  alkioiden joukko  $S$  toteuttaa ehdon

$$X^{-1} S X = S \text{ kaikille } X \in G, \quad (194)$$

niin se sisältää vain täysiä luokkia ja kääntäen.

**Todistus:** Jaetaan  $S$  täysiin luokkiin  $S_1, S_2, \dots$

( $S_i \cap S_j = \emptyset$ , kun  $i \neq j$ ) ja jäännökseen  $R$  ( $R \cap S_i = \emptyset$ ).

Koska  $X^{-1} S X = S$  kaikille luokan  $G$  alkioille  $X$ , saadaan

$$\begin{aligned}X^{-1} S X &= S \Rightarrow \\ X^{-1} S_1 X \cup \dots \cup X^{-1} S_k X \cup X^{-1} R X &= \\ S_1 \cup \dots \cup S_k \cup X^{-1} R X &= \\ S_1 \cup \dots \cup S_k \cup R &\end{aligned}$$

eli  $X^{-1} R X = R$  ja  $R$  on täysi luokka (tai tyhjä).

**Kääntäen:** Oletetaan että

$$S = S_1 \cup S_2 \cup \dots \cup S_k$$

muodostuu täysistä luokista ja väitetään että silloin on  $X^{-1} S X = S$ . Tämä on helppo osoittaa koska

$$\begin{aligned}X^{-1} S X &= \\ X^{-1} S_1 X \cup X^{-1} S_2 X \cup \dots \cup X^{-1} S_k X &= \\ S_1 \cup S_2 \cup \dots \cup S_k &= S.\end{aligned}$$

Sovelletaan lausetta kahden luokan tuloon

$$S_i S_j = X^{-1} S_i X X^{-1} S_j X = X^{-1} S_i S_j X. \quad (195)$$

Silloin yllä esitetyn lauseen mukaan  $S_i S_j$  sisältää täydet luokat, mikä voidaan ilmaista kirjoittamalla

$$S_i S_j = \sum_k C_{ijk} S_k = C_{ij1} S_1 + \dots + C_{ijl} S_l \quad (196)$$

missä kokonaisluku  $C_{ijk}$  ilmoittaa, montako kertaa täysi luokka  $S_k$  esiintyy tulossa  $S_i S_j$ . Esitysteorian kannalta on tärkeää tietää kuinka monta kertaa kukin luokka esiintyy.

**Esimerkki:**

Kolmioryhmässä  $D_3 = \{E, A, B, C, D, F\}$  luokat ovat  $S_1 = \{E\}$ ,  $S_2 = \{A, B, C\}$ ,  $S_3 = \{D, F\}$ . Suorittamalla kertolaskut saadaan

$$\begin{aligned}S_2^2 &= (A + B + C)(A + B + C) \\ &= E + E + E + D + F + F + D + D + F \\ &= 3S_1 + 3S_3\end{aligned}$$

ja vastaavasti  $S_3^2 = S_3 + 2S_1$  sekä  $S_2 S_3 = 2S_2$ .

## Tavallisimmat ryhmät

1. kertalukua  $h = 1$  oleva ryhmä: ainoa mahdollinen ryhmä on  $G = \{E\}$ .
2. kertalukua  $h = 2$  oleva ryhmä: ainoa mahdollinen ryhmä on toisen kertaluvun syklinen ryhmä  $C_2 = \{A, A^2 = E\}$ .
3. kertalukua  $h = 3$  oleva ryhmä: syklinen ryhmä  $C_3 = \{A, A^2, A^3 = E\}$
4. kertalukua  $h = 4$  olevat ryhmät:

- syklinen ryhmä  $C_4$

- vierergruppe  $D_2$

5. ryhmät joiden kertaluku  $h$  on alkuluku ( $h = 1, 2, 3, 5, 7, 11, 13, \dots$ ) ovat kaikki syklisiä, koska

muussa tapauksessa olisi olemassa alkio, jonka periodi olisi pienempi kuin  $h$  ja joka muodostaisi aliryhmän. 6. permutaatioryhmät  $S_n$  (ns. symmetrinen ryhmä):  $n:n$  objektin permutaatiot, joita on  $h = n!$  kappaletta muodostavat ryhmän. Kukin permutaatio voidaan esittää symbolilla

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (197)$$

Voimme ajatella, että ylärivillä on lueteltu numeroidut laatikot  $1, 2, \dots, n$  ja alarivillä ilmoitetaan laatikko, johon ylärivin ilmoittamassa laatikossa ollut pallo pannaan. Usein yläriivi jätetään myös kirjoittamatta

$$A = (\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \cdots \quad \alpha_n) \quad (198)$$

Pystyriivejä voidaan permutoida mielivaltaisesti, ilman että symbolin informaatio sisältö muuttuu. Käänteisalkio on

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}. \quad (199)$$

**Esimerkki:** Esimerkkinä käsittelemme tarkemmin permutaatioryhmää  $S_3$  joka on isomorfinen kolmion symmetriaryhmän kanssa. Ryhmän  $S_3$  alkio ovat

$$\begin{aligned} E &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & A &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \\ B &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} & C &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \\ D &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} & F &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Kertolasku saadaan suoritettua helpoimmin järjestelmällä ensimmäisen symbolin yläriivi ja toisen alarivi samaan järjestykseen; esimerkiksi

$$\begin{aligned} AB &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = D. \end{aligned}$$

**Huom.** Symmetriaryhmien yhteydessä on joskus tapana määritellä operaatiojärjestys vasemmalta oikealle, ts. operaatio  $AB$  tarkoittaa, että ensin tehdään permutaatio  $A$  ja sitten permutaatio  $B$ . Tällöin kertolasku kannattaa tehdä siten, että ensimmäisen symbolin alarivi ja toisen yläriivi pannaan samaan järjestykseen. Voimme muodostaa nyt ryhmän  $S_3$  kertotaulun:

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$E$	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$A$	$A$	$E$	$D$	$F$	$B$	$C$
$B$	$B$	$F$	$E$	$D$	$C$	$A$
$C$	$C$	$D$	$F$	$E$	$A$	$B$
$D$	$C$	$C$	$A$	$B$	$F$	$E$
$F$	$C$	$B$	$C$	$A$	$E$	$D$

## Ryhmien esitysteoria

### Ryhmien esitykset

Ryhmän  $G$  esityksellä  $\Gamma$  tarkoitetaan matriisien muodostamaa ryhmää, joka on homomorfinen ryhmän  $G$  kanssa. Esityksen dimensioluku on matriisien dimensio  $n$  ja matriisit voidaan valita unitaariksi. Ryhmäaksioomat ovat voimassa myös esitysmatriisien ryhmälle:

Ryhmä $G$	Esitys $\Gamma$
$AB$	$\Gamma(AB) = \Gamma(A) \Gamma(B)$
$A(BC) = (AB)C$	$\Gamma(A) (\Gamma(B) \Gamma(C)) = (\Gamma(A) \Gamma(B)) \Gamma(C)$
$E$	$I$
$A^{-1}A = E$	$\Gamma(A^{-1}) \Gamma(A) = I$ $\Rightarrow \Gamma(A^{-1}) = [\Gamma(A)]^{-1}$

Matriisit ovat ei-singulaarisia, toisin sanoen niiden determinantit eivät ole nolliä, koska käänteismatriisin  $\Gamma^{-1}$  on oltava olemassa. Yksikkömatriisia merkitään kirjaimella  $I$ .

Jos relaatio  $G \rightarrow \Gamma$  on isomorfinen kutsutaan esitystä *todelliseksi esitykseksi* (faithfull). Tässä tapauksessa kaikki esityksen matriisit ovat erilaisia.

Usein kuitenkin monta alkioita kuvautuu samaksi matriisiksi, jolloin kuvaus on homomorfinen.

**Lause 17** *Esityksen  $\Gamma$  yksikkömatriisiksi kuvautuvat elementit muodostavat invariantin aliryhmän. Vastaavasti kaikki samaksi matriisiksi kuvautuvat elementit muodostavat sivujoukon.*

**Todistus:** Olkoon  $S \subset G$  joukko, jonka alkioit kuvautuvat yksikkömatriisiksi, ts.

$$\Gamma(S_i) = I \Leftrightarrow S_i \in S.$$

Aivan ilmeisesti joukon  $S$  alkioit ovat assosiativisia ryhmäoperaation suhteen. Jos nyt  $S_i, S_j \in S$ , niin

$$\Gamma(S_i S_j) = \Gamma(S_i) \Gamma(S_j) = I,$$

eli  $S_i S_j \in S$ . Koska  $\Gamma$  on ryhmän  $G$  esitys, täytyy olla  $\Gamma(E) = I$ , joten  $E \in S$ . Edelleen, olkoon  $S_i$  joukon  $S$  mielivaltainen alkio. Nyt  $S_i^{-1} \in G$  ( $G$  on ryhmä), joten

$$\begin{aligned} \Gamma(S_i^{-1} S_i) &= \Gamma(S_i^{-1}) \Gamma(S_i) = \Gamma(S_i^{-1}) \\ &= \Gamma(E) = I, \end{aligned}$$

ja myöskin  $S_i^{-1} \in S$ . Joukko  $S$  on siten ryhmä. Olkoon nyt  $X \in G$  mielivaltainen. Tällöin

$$\begin{aligned} \Gamma(X^{-1} S_i X) &= \Gamma(X^{-1}) \Gamma(S_i) \Gamma(X) \\ &= \Gamma(X)^{-1} I \Gamma(X) = I \end{aligned}$$

aina kun  $S_i \in S$ . Nähdään siis, että  $X^{-1} S X = S$  eli  $S$  on invariantti aliryhmä.

Olkoon nyt  $X \in G$  sellainen, että  $\Gamma(X) = C \neq I$ . Tällöin sivujoukon  $X S$  kaikki alkioit kuvautuvat myös matriisiksi  $C$ , sillä

$$\Gamma(X S_i) = \Gamma(X) \Gamma(S_i) = \Gamma(X) = C.$$

Olkoon nyt  $\Gamma(Y) = C$ , jolloin

$$\Gamma(X^{-1} Y) = \Gamma(X)^{-1} \Gamma(Y) = C^{-1} C = I,$$

eli  $X^{-1} Y \in S$  tai  $Y \in X S$ , eli jokainen samaksi matriisiksi kuvautuva alkio kuuluu samaan sivujoukkoon.

**Lause 18** *Ei-todellinen esitys kuvaa jonkin invariantin aliryhmän kaikki alkioit yksikkömatriisiksi.*

**Todistus:** (Harjoitustehtävä)

**Lause 19** *Esityksen  $\Gamma$  matriisit muodostavat todellisen esityksen faktoriryhmälle*

$$\begin{array}{ccccccc} S, & X_1 S, & X_2 S, & \cdots, & X_{l-1} S & & \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \cdots & \uparrow & & \\ I, & \Gamma(X_1), & \Gamma(X_2), & \cdots, & \Gamma(X_{l-1}) & & \end{array} \quad (200)$$

**Todistus:** Tulos  $\Gamma(S) = I$  on selvä edellisen lauseen perusteella. Jos  $S_k$  on aliryhmän  $S$  mielivaltainen alkio on

$$\Gamma(X_1 S_k) = \Gamma(X_1) \Gamma(S_k) = \Gamma(X_1) I = \Gamma(X_1). \quad (201)$$

**Lause 20 (Ekvivalenssi)** *Jos matriisiryhmä  $\Gamma$  muodostaa  $n$ -dimensioisen esityksen ja  $C$  on ei-singulaarinen  $n \times n$ -matriisi, muodostavat myös matriisit  $\Gamma' = C^{-1} \Gamma C$   $G$ :n  $n$ -dimensioisen esityksen, joka on ekvivalentti  $\Gamma$ :n kanssa.*

**Todistus:** Oletetaan, että

$$\Gamma(A) \Gamma(B) = \Gamma(AB) \quad (202)$$

Silloin on

$$\begin{aligned} \Gamma'(AB) &= C^{-1} \Gamma(AB) C \\ &= C^{-1} \Gamma(A) \Gamma(B) C \\ &= C^{-1} \Gamma(A) C C^{-1} \Gamma(B) C \\ &= \Gamma'(A) \Gamma'(B) \end{aligned}$$

eli  $\Gamma'(A) \Gamma'(B) = \Gamma'(AB)$ .

Siten kannan muutos esitysavaruuksessa johtaa vain triviaalisti erilaiseen esitykseen.

Kannan vaihto esitysavaruuksessa tapahtuu operaattorilla  $C$

$$\begin{aligned} x &= C y \\ x' &= C y'. \end{aligned}$$

Esitysmatriisi  $\Gamma$  tekee transformaation

$$\Gamma(A) x = x', \quad (203)$$

jolloin uudeksi ekvivalentiksi esitysmatriisiksi saadaan

$$\begin{aligned} \Gamma(A) C y &= x' = C y' \\ \Rightarrow (C^{-1} \Gamma(A) C) y &= y'. \end{aligned}$$

Saamme siis similariteettimuunnoksella

$$C^{-1} \Gamma(A) C \equiv \Gamma'(A)$$

esitysmatriisin muunnatussa kannassa  $y$ , sillä muunnosta  $\Gamma(A)$  vastaava muunnos tapahtuu siellä muunnoksella

$$\Gamma'(A) y = y'.$$

Kannan vaihto johtaa siis triviaalisti erilaiseen esitykseen.

**Redusoituvat ja redusoitumattomat esitykset**

On mahdollista, että  $n \times n$ -esitysmatriisit säilyttävät alempiulotteisia aliavaruuksia:

- on olemassa  $n_1$ - ja  $n_2$ -ulotteiset aliavaruudet  $L_1$  ja  $L_2$  siten, että  $n = n_1 + n_2$  ja  $n_i > 0$ ,

- kirjoitetaan mielivaltainen esitysavaruuksien vektori  $x$  superpositiolla

$$x = x_1 + x_2, \quad x_i \in L_i,$$

- jokaiselle esitysmatriisille  $\Gamma(A)$  on voimassa

$$\Gamma(A)x = \Gamma(A)x_1 + \Gamma(A)x_2, \quad \Gamma(A)x_i \in L_i.$$

Tällöin sanotaan esityksen  $\Gamma$  olevan *redusoituvaa*. Jos esitysmatriisi on vietävissä lohkomuotoon, ts.

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

niin esitys on aivan ilmeisesti redusoituvaa. Kääntäen, redusoituvia esityksiä on helppo konstruoida, sillä

**Lause 21** *Olkkoot  $\Gamma^{(1)}$  ja  $\Gamma^{(2)}$  kaksi esitystä, joiden dimensiot ovat  $n_1$  ja  $n_2$ . Silloin matriisit*

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)} & (0) \\ (0) & \Gamma^{(2)} \end{pmatrix} \quad (204)$$

*muodostavat  $n_1 + n_2$ -dimensioisen esityksen.*

**Todistus:** Oletetaan, että

$$\Gamma^{(1)}(AB) = \Gamma^{(1)}(A) \Gamma^{(1)}(B) \quad (205)$$

$$\Gamma^{(2)}(AB) = \Gamma^{(2)}(A) \Gamma^{(2)}(B). \quad (206)$$

Silloin saamme

$$\Gamma(A) \Gamma(B) =$$

$$\begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(A) & (0) \\ (0) & \Gamma^{(2)}(A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(B) & (0) \\ (0) & \Gamma^{(2)}(B) \end{pmatrix}$$

eli

$$\Gamma(A) \Gamma(B) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(A) \Gamma^{(1)}(B) & (0) \\ (0) & \Gamma^{(2)}(A) \Gamma^{(2)}(B) \end{pmatrix},$$

joten  $\Gamma(AB) = \Gamma(A) \Gamma(B)$ .

Esitys on siten redusoitavissa ja voidaan kirjoittaa suorana summana

$$\Gamma = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)}. \quad (207)$$

Jos matriiseihin  $\Gamma$  kohdistetaan ekvivalenssimuunnos  $C$ , ei redusoituvuutta ole yleensä helppo nähdä, mutta esimerkiksi

**Lause 22** *Olkkoon  $\Gamma$  ryhmän  $G$  esitys. Jos on olemassa indeksit  $\mu$  ja  $\nu$  siten, että  $\Gamma(R)_{\mu\nu} = 0$  kaikille  $R \in G$ , niin esitys on redusoituvaa.*

**Todistus:** Olkkoon  $e$  vektori, jonka komponentit ovat  $e_k = \delta_{k\nu}$  ja olkkoon  $L_e$  vektoreiden  $\Gamma(R)e$  virittämä lineaarinen avaruus, ts.

$$L_e = \text{span}\{\Gamma(R)e | R \in G\}.$$

On helppo nähdä (harjoitustehtävä), että avaruuden  $L_e$  dimensio on pienempi kuin esitysavaruu- den dimensio ja että  $L_e$  säilyy esityksessä  $\Gamma$ . Edellisen perusteella jokainen esitys voidaan kirjoittaa muotoon

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)} & & & & \\ & \Gamma^{(1)} & & & \\ & & \Gamma^{(2)} & & \\ & & & \Gamma^{(3)} & \\ & & & & \dots \end{pmatrix} = \sum_k n_k \Gamma^{(k)}, \quad (208)$$

missä  $n_k$  ilmoittaa kuinka monta kertaa kukin redusoitumaton esitys esiintyy. Nähdään, että mitkä hyvänsä dimensioluvut eivät ole mahdollisia esityksille. Hyvin usein kvanttimekaniikassa tasojen degeneraatiot ovat samat kuin redusoitumattomien esitysten dimensioluvut.

Kvanttimekaniikassa esitysavaruu- s on Hilbertin avaruus, jossa symmetriaryhmän on jätettävä skalaaritulot invarianteiksi:

$$\langle x' | y' \rangle = \langle x | U^\dagger U | y \rangle = \langle x | y \rangle. \quad (209)$$

Siten symmetriaryhmän esitysmatriiseilla on oltava unitaarisuusominaisuus  $U^\dagger U = I$  ja ryhmä  $G$  on voitava esittää kvanttimekaniikassa unitaarisilla esityksillä. Todistetaan seuraavaksi, että jokainen äärellisen ryhmän  $G$  esitys voidaan transformoida similaarisuusmuunnoksilla unitaariseksi esitykseksi.

**Lause 23 (unitaariset esitykset)** *Jokainen matriisiesitys, jonka matriisien determinantti  $\det(\Gamma_i) \neq 0$ , on ekvivalentti unitaarisen matriisiesityksen kanssa.*

**Todistus:** Merkitään alkioon  $A_i$  liittyvää matriisia myös  $A_i$ :llä. Osoitamme, että on olemassa unitaarinen matriisiryhmä, joka on ekvivalentti matriisiryhmän  $A_i$  kanssa, kun  $\det(A_i) \neq 0$ .

1. Muodostetaan Hermiten matriisi  $H = H^\dagger$

$$H = \sum_{i=1}^h A_i A_i^\dagger, \quad (210)$$

missä summa on ryhmän kaikkien alkioiden yli.

2. Jokainen Hermiten matriisi voidaan diagonalisoida unitaarisella muunnoksella, joka on muodostettu sekulaariyhtälön ratkaisuna löytyvistä ortonormitetuista ominaisvektoreista. Diagonalisoidaan  $H$  nyt unitaarisella muunnoksella  $U$ :

$$\begin{aligned} d &= U^{-1} H U = \sum_i (U^{-1} A_i U) (U^{-1} A_i^\dagger U) \\ &= \sum_i A'_i A_i'^\dagger. \end{aligned}$$

3. Lasketaan seuraavaksi positiivisesta diagonaalimatriisista  $d$  matriisit  $d^{1/2}$  ja  $d^{-1/2}$ . Matriisin  $d$  alkiot ovat ei-negatiivisia ja reaalisia, koska

$$d_{\mu\mu} = \sum_{i,\nu} A'_{i(\mu\nu)} A'_{i(\nu\mu)}^\dagger$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i,\nu} A'_{i(\mu\nu)} A'_{i(\mu\nu)}^* \\ &= \sum_{i,\nu} \left| A'_{i(\mu\nu)} \right|^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Jos nyt olisi  $d_{\mu\mu} = 0$ , täytyisi olla  $A'_{i(\mu\nu)} = 0$ ,  $\forall i$  ja  $\nu$ , jolloin olisi  $\det A'_i = \det A_i = 0$ ,  $\forall i$ . Täytyy siis olla  $d_{\mu\mu} > 0$ .  $d^{\pm 1/2}$  on diagonaalimatriisi, jonka alkiot ovat  $(d_{\mu\mu})^{\pm 1/2}$ . Edelleen, koska diagonaalimatriisit kommutoivat (todistus harjoitustehtävänä) saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} I &= d^{-1} d = d^{-1/2} d d^{-1/2} \\ &= d^{-1/2} \sum_i A'_i A_i'^\dagger d^{-1/2}. \end{aligned} \quad (211)$$

4. Määritellään uusi esitys

$$A''_i = d^{-1/2} A'_i d^{1/2} \quad (212)$$

$$A''_i{}^\dagger = d^{1/2} A_i'^\dagger d^{-1/2}. \quad (213)$$

Silloin matriisit  $A''_i$  muodostavat alkuperäisen esityksen kanssa ekvivalentin esityksen

$$\begin{aligned} A''_i &= d^{-1/2} U^{-1} A_i U d^{1/2} \\ &= \left( U d^{1/2} \right)^{-1} A_i \left( U d^{1/2} \right). \end{aligned}$$

5. Todistetaan lopuksi, että matriisi  $A''_i$  on unitaarinen, toisin sanoen  $A''_i{}^{-1} = A''_i{}^\dagger$ . Matriisien tulo voidaan kirjoittaa muotoon

$$\begin{aligned} A''_j A_j''^\dagger &= d^{-1/2} A'_j d^{1/2} \\ &\times \left[ d^{-1/2} \sum_i A'_i A_i'^\dagger d^{-1/2} \right] \\ &\times d^{1/2} A_j'^\dagger d^{-1/2}, \end{aligned}$$

koska hakasuluissa oleva lauseke on yksikkömatriisi yhtälön (211) mukaan. Sieventämällä lauseketta saadaan

$$\begin{aligned} A''_j A_j''^\dagger &= d^{-1/2} \sum_i A'_j A'_i A_i'^\dagger A_j'^\dagger d^{-1/2} \\ &= d^{-1/2} \sum_i (A'_j A'_i) \left( A'_i A_i'^\dagger \right)^\dagger d^{-1/2} \\ &= d^{-1/2} \left( \sum_k A'_k A_k'^\dagger \right) d^{-1/2} \\ &= d^{-1/2} d d^{-1/2} = I, \end{aligned}$$

koska ryhmäkertolaskussa  $A'_j A'_i = A'_k$  summausindeksi  $k$  käy läpi käy arvot  $1, \dots, h$  samalla tavoin kuin summausindeksi  $i$ .

**Schurin lemma**

**Lause 24 (Schurin lemma)** *Ainoa matriisi  $M$ , joka kommutoi redusoitumattoman esityksen kaikkien matriisien kanssa, on vakio kertaa yksikkömatriisi. Jos ei-vakio, kommutoiva matriisi on olemassa, on esitys silloin redusoituva.*



**Todistus:** Edellisen lauseen perusteella tarkastelu voidaan rajoittaa unitaarisii esitysmatriiseihin  $A_i$ . Olkoon  $M$  kommutoiva matriisi

$$A_i M = M A_i \quad , \quad i = 1, \dots, h. \quad (214)$$

Koska esitysmatriisit ovat unitaarisia saadaan edelleen seuraavat ehdot

$$\begin{aligned} M^\dagger A_i^\dagger &= A_i^\dagger M^\dagger \\ M^\dagger A_i^{-1} &= A_i^{-1} M^\dagger \\ A_i M^\dagger &= M^\dagger A_i \quad , \end{aligned} \quad (215)$$

joten myös  $M^\dagger$  kommutoi kaikkien ryhmän matriisien kanssa.

Tämän perusteella voidaan muodostaa hermiittiset matriisit

$$\begin{aligned} H_1 &= M + M^\dagger \\ H_2 &= i(M - M^\dagger), \end{aligned} \quad (216)$$

jotka myös kommutoivat ryhmän esitysmatriisien kanssa. Osoitetaan ensin, että kommutoiva hermiittinen matriisi on vakio kertaa yksikkömatriisi, jolloin myös  $M = \frac{1}{2}(H_1 - iH_2)$  on vakio kertaa yksikkömatriisi. Olkoon  $H$  mielivaltainen kommutoiva hermiittinen matriisi. Diagonalisoidaan  $H$  unitaarisella muunnoksella  $U$

$$d = U^{-1} H U. \quad (217)$$

Lisäksi meillä on transformaatiot

$$\begin{aligned} A_i' &= U^{-1} A_i U \\ \Rightarrow A_i' d &= d A_i' \quad , \end{aligned}$$

koska

$$\begin{aligned} A_i' d &= U^{-1} A_i U U^{-1} H U \\ &= U^{-1} A_i H U = U^{-1} H A_i U \\ &= U^{-1} H U U^{-1} A_i U = d A_i' \quad . \end{aligned} \quad (218)$$

Saamme silloin matriisin alkioille  $\mu\nu$  ehdon

$$\begin{aligned} (A_i' d)_{\mu\nu} &= (d A_i')_{\mu\nu} \\ \Rightarrow \sum_k (A_i')_{\mu k} d_{k\nu} &= \sum_k d_{\mu k} (A_i')_{k\nu} \quad . \end{aligned} \quad (219)$$

Koska  $d$  on diagonaalinen matriisi, summaus yli indeksin  $k$  antaa tulokseksi

$$\begin{aligned} (A_i')_{\mu\nu} d_{\nu\nu} &= d_{\mu\mu} (A_i')_{\mu\nu} \\ \Rightarrow (A_i')_{\mu\nu} (d_{\nu\nu} - d_{\mu\mu}) &= 0. \end{aligned} \quad (220)$$

Todistetaan lopuksi, että mikäli  $d$  ei ole vakiomatriisi, on esityksen oltava redusoituva.

1. Jos  $d$  ei ole vakio kertaa yksikkömatriisi, niin  $\exists \mu, \nu, \mu \neq \nu$  siten, että  $d_{\nu\nu} \neq d_{\mu\mu}$ . Edellisen perusteella on silloin  $(A_i')_{\mu\nu} = 0$  kaikilla  $i$ :n arvoilla ja matriisi  $A$  on siten redusoituva esitysmatriisi.

2. Jos  $A$  on redusoitumaton esitysmatriisi, on silloin välttämättä oltava  $d_{\nu\nu} = d_{\mu\mu}$  ( $\mu \neq \nu$ ) eli  $d$  on vakio kertaa yksikkömatriisi,  $d = cI$ .

**Lause 25** Olkoot  $\Gamma^{(1)}(A)$  ja  $\Gamma^{(2)}(A)$  kaksi saman ryhmän redusoitumatonta esitystä, joiden dimensiot ovat  $l_1$  ja  $l_2$ . Jos on olemassa suorakulmainen matriisi  $M$  (dimensio  $l_2 \times l_1$ ) siten, että

$$M \Gamma^{(1)}(A_i) = \Gamma^{(2)}(A_i) M, \quad (221)$$

niin

1. jos  $l_1 = l_2$ , niin joko  $M = 0$  tai esitykset ovat ekvivalentteja ja
2. jos  $l_1 \neq l_2$ , niin  $M = 0$ .

**Todistus:** Edellisten lauseiden perustella esitykset voidaan olettaa unitaariseksi, jolloin ehto (221) voidaan kirjoittaa muotoon

$$[\Gamma^{(1)}(A_i)]^{-1} M^\dagger = M^\dagger [\Gamma^{(2)}(A_i)]^{-1} \quad (222)$$

$$\Gamma^{(1)}(A_i^{-1}) M^\dagger = M^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i^{-1}), \quad (223)$$

eli

$$\Gamma^{(1)}(A_i) M^\dagger = M^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i). \quad (224)$$

Kerrotaan yhtälö (221) puolittain  $M^\dagger$ :lla ja yhtälö (224) puolittain  $M$ :lla, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} M \Gamma^{(1)}(A_i) M^\dagger &= \Gamma^{(2)}(A_i) M M^\dagger \\ &= M M^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i). \end{aligned} \quad (225)$$

Nähdään, että  $M M^\dagger$  on  $l_2 \times l_2$  neliömatriisi, joka kommutoi kaikkien esityksen  $\Gamma^{(2)}$ -matriisien kanssa. Silloin Schurin lemmän mukaan on

$$M M^\dagger = cI. \quad (226)$$

1. Olkoon  $l_1 = l_2$ . Tällöin  $\det(M^\dagger M) = c^{l_1} = |\det(M)|^2$ . Jos edelleen  $c \neq 0$ , niin matriisin  $M$  käänteismatriisi on olemassa ja

$$\Gamma^{(1)}(A_i) = M^{-1} \Gamma^{(2)}(A_i) M. \quad (227)$$

Siten esitys  $\Gamma^{(2)}$  on ekvivalentti esityksen  $\Gamma^{(1)}$  kanssa, koska se saadaan similaarisuusmuunnoksella matriisista  $\Gamma^{(2)}$ .

Jos taas  $c = 0$ , niin  $M M^\dagger = 0$ . Nyt

$$(M M^\dagger)_{\mu\mu} = \sum_\lambda M_{\mu\lambda} M_{\lambda\mu}^\dagger = \sum_\lambda M_{\mu\lambda} M_{\mu\lambda}^*, \quad (228)$$

joten

$$\sum_\lambda |M_{\mu\lambda}|^2 = 0. \quad (229)$$

Silloin kaikkien  $M_{\mu\lambda} = 0$ , eli  $M = 0$ .

2. Tapauksessa  $l_1 \neq l_2$  voidaan valita yleisyyttä rikkomatta  $l_1 < l_2$ . Täydennetään  $(l_2 \times l_1)$ -matriisi  $M$  neliömatriisiksi  $N$  lisäämällä  $l_2 - l_1$  saraketta nollia. Tällöin on  $N N^\dagger = M M^\dagger$  ja

$$N N^\dagger \Gamma^{(2)}(A_i) = \Gamma^{(2)}(A_i) N N^\dagger, \quad (230)$$

jolloin Schurin lemmän mukaan on  $NN^\dagger = cI$ . Koska  $\det(N) = 0$ , saadaan silloin

$$\begin{aligned} \det(MM^\dagger) &= c^2 = \det(NN^\dagger) = 0 \\ \Rightarrow c &= 0. \end{aligned} \quad (231)$$

Kun  $c = 0$ , niin  $MM^\dagger = NN^\dagger = cI = 0$ . Kuten edellisessä kohdassa osoitettiin, niin tästä seuraa, että myös  $M = 0$ .

### Suuri ortogonaalisuusteoreema

**Lause 26 (Suuri ortogonaalisuusteoreema)** *Olko*  $\Gamma^{(i)}$ ,  $i = 1, 2$ , *kaksi ei-ekvivalenttia ryhmän*  $G$  *reduisoitumatonta unitaarista esitystä. Silloin on*

$$\sum_R [\Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(R)]^* \Gamma_{\alpha\beta}^{(j)}(R) = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} \quad (232)$$

*missä summausindeksi*  $R$  *käy läpi ryhmän*  $G = \{E, A_2, \dots, A_h\}$  *alkiot ja*  $l_i$  *on esityksen*  $\Gamma^{(i)}$  *dimensio.*

**Todistus:** Olkoon  $X$  toistaiseksi mielivaltainen  $l_2 \times l_1$ -matriisi. Konstruoidaan  $l_2 \times l_1$ -matriisi  $M$  seuraavasti:

$$M = \sum_R \Gamma^{(2)}(R) X \Gamma^{(1)}(R^{-1}). \quad (233)$$

Voimme nyt todistaa, että  $M$  toteuttaa ehdon

$$M\Gamma^{(1)}(A_i) = \Gamma^{(2)}(A_i)M; \quad i = 1, \dots, h. \quad (234)$$

Olkoon  $S$  mielivaltainen ryhmän alkio. Tällöin alkio  $T = RS$  käy läpi kaikki ryhmän alkiot alkion  $R$  käydessä ryhmän läpi. Saadaan

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(S)M &= \\ &= \sum_R \Gamma^{(2)}(S)\Gamma^{(2)}(R)X\Gamma^{(1)}(R^{-1}) \\ &\quad \Gamma^{(1)}(S^{-1})\Gamma^{(1)}(S) \\ &= \sum_R \Gamma^{(2)}(SR)X\Gamma^{(1)}((SR)^{-1})\Gamma^{(1)}(S) \\ &= \sum_T \Gamma^{(2)}(T)X\Gamma^{(1)}(T^{-1})\Gamma^{(1)}(S) = M\Gamma^{(1)}(S). \end{aligned}$$

Koska esitykset  $\Gamma^{(1)}$  ja  $\Gamma^{(2)}$  eivät ole ekvivalentteja, on edellisen lauseen perusteella  $M = 0$ . Toisin sanoen

$$M_{\alpha\mu} = \sum_R \sum_{k,l} \Gamma_{\alpha k}^{(2)}(R) X_{kl} \Gamma_{l\mu}^{(1)}(R^{-1}) = 0. \quad (235)$$

Valitaan  $X_{kl} = \delta_{k\beta} \delta_{l\nu}$  eli  $X_{\beta\nu} = 1$  ja  $X_{kl} = 0$  muulloin. Saamme siten ehdon

$$\sum_R \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(R) \Gamma_{\nu\mu}^{(1)}(R^{-1}) = 0 \quad (236)$$

eli

$$\sum_R [\Gamma_{\mu\nu}^{(1)}(R)]^* \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(R) = 0, \quad (237)$$

koska  $\Gamma_{\nu\mu}^{(1)}(R^{-1}) = \Gamma_{\nu\mu}^{(1)}(R)^\dagger = \Gamma_{\mu\nu}^{(1)}(R)^*$ . Tällöin on saatu todistetuksi, että jos  $i \neq j$ , niin edellä oleva summa on nolla.

Seuraavaksi tarkastellaan tapausta  $i = j = 1$ . Samoin kuin edellä nähdään, että matriisi

$$M = \sum_R \Gamma^{(1)}(R) X \Gamma^{(1)}(R^{-1})$$

kommutoi kaikkien esitysmatriisien kanssa. Schurin lemmän perusteella  $M = cI$ , eli

$$c\delta_{\mu\mu'} = \sum_R \sum_{kl} \Gamma_{\mu k}^{(1)}(R) X_{kl} \Gamma_{l\mu'}^{(1)}(R^{-1}) \quad (238)$$

Valitaan tällä kertaa

$$X_{kl} = \delta_{k\nu} \delta_{l\nu'} \quad (239)$$

ja merkitään kutakin indeksiparia  $(\nu, \nu')$  vastaavaa vakiota  $c$  kuten  $c = c_{\nu\nu'}$ . Tällöin

$$c_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'} = \sum_R \Gamma_{\mu\nu}^{(1)}(R) \Gamma_{\nu'\mu'}^{(1)}(R^{-1}). \quad (240)$$

Asetetaan nyt  $\mu = \mu'$  ja summataan yli indeksin  $\mu$ , jolloin saadaan

$$\begin{aligned} \sum_R \sum_{\mu} \Gamma_{\nu'\mu}^{(1)}(R^{-1}) \Gamma_{\mu\nu}^{(1)}(R) &= \sum_R \Gamma_{\nu'\nu}^{(1)}(R^{-1}R) \\ &= h\Gamma_{\nu\nu'}^{(1)}(E) = h\delta_{\nu\nu'} = \sum_{\mu} c_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu} = c_{\nu\nu'} l_1 \end{aligned}$$

eli

$$c_{\nu\nu'} = \frac{h}{l_1} \delta_{\nu\nu'}. \quad (241)$$

Saamme näin lopputulokseksi

$$\sum_R [\Gamma_{\nu'\mu'}^{(1)}(R)]^* \Gamma_{\mu\nu}^{(1)}(R) = \frac{h}{l_1} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (242)$$

m. o. t.

### Karakterit

Seuraavassa pyritään käyttämään hyväksi invariansseja ts. suureita, jotka ovat samoja ekvivalenteille esityksille. Yksinkertaisin invariantti on esitysmatriisin jälki. Olkoon  $\Gamma^{(j)}(A_k)$ ,  $k = 1, 2, \dots, h$  ryhmän  $G$   $l_j$ - dimensioinen esitys. Jokaiseen ryhmän alkioon liittyy *karakterit*

$$\chi^{(j)}(A_k) = \text{Tr} \Gamma^{(j)}(A_k) = \sum_{\mu=1}^{l_j} \Gamma_{\mu\mu}^{(j)}(A_k). \quad (243)$$

Aikaisemman perusteella samaan luokkaan kuuluvien esitysmatriisien karakterit ovat samat

$$\begin{aligned} \Gamma(A_t) &= \Gamma(A_k^{-1} A_s A_k) \\ &= [\Gamma(A_k)]^{-1} \Gamma(A_s) \Gamma(A_k); \quad t = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

eli

$$\chi(A_t) = \chi(A_s). \quad (244)$$

## Ensimmäinen ortogonaalisuusrelaatio ja sen geometrinen tulkinta

Lähtemällä suuresta ortogonaalisuusteoreemasta

$$\sum_R [\Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(R)]^* \Gamma_{\alpha\beta}^{(j)}(R) = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} \quad (245)$$

ja asettamalla  $\nu = \mu$  sekä  $\alpha = \beta$  ja summaamalla sen jälkeen yli indeksien  $\mu$  ja  $\alpha$ , saamme ortogonaalisuusehdon

$$\sum_R \sum_{\mu} \sum_{\alpha} [\Gamma_{\mu\mu}^{(i)}(R)]^* \Gamma_{\alpha\alpha}^{(j)}(R) = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\mu\alpha} \quad (246)$$

eli karakterit toteuttavat ortogonaalisuusrelaation

$$\sum_R [\chi^{(i)}(R)]^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{ij}. \quad (247)$$

Suuri ortogonaaliteoreema voidaan kuvata ryhmäalkioavaruudessa vektorien

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{(i)} = \{\gamma_{\alpha\beta}^{(i)}(E), \gamma_{\alpha\beta}^{(i)}(A_2), \dots, \gamma_{\alpha\beta}^{(i)}(A_h)\}. \quad (248)$$

ortogonaalisuusrelaationa. Silloin  $h$ -ulotteisen vektoriarvuuden akselit ovat  $\{E, A_2, \dots, A_h\}$  ja vektorit indeksoidaan esitysindeksillä  $(i)$  ja esitysmatriisien  $\Gamma_{\alpha\beta}$  vaaka- ja pystyrivi-indeksillä  $\alpha$  ja  $\beta$ . Kaikki nämä vektorit ovat keskenään ortogonaalisia  $h$ -ulotteisessa avaruudessa.

Koska  $l_i$ -dimensioisella matriisilla  $\Gamma^{(i)}$  on  $l_i^2$  elementtiä, näiden ortogonaalisten vektorien lukumäärä on  $\sum l_i^2$ , missä summaus on yli kaikkien eri esitysten. Koska  $h$ -ulotteisessa avaruudessa voi olla korkeintaan  $h$  kappaletta keskenään ortogonaalista vektoria, on oltava  $\sum l_i^2 \leq h$ . Myöhemmin osoitetaan, että

$$\sum l_i^2 = h. \quad (249)$$

Samalla tavoin karakterit muodostavat vektorit  $h$ -ulotteisessa alkioavaruudessa, jolloin vektorien komponentit ovat

$$\chi^{(i)} = \{\chi^{(i)}(E), \chi^{(i)}(A_2), \dots, \chi^{(i)}(A_h)\}. \quad (250)$$

Tällöin eri esityksiin kuuluvat vektorit ovat ortogonaalisia

$$\sum_R [\chi^{(i)}(R)]^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{ij}. \quad (251)$$

Merkitään luokkia  $C_k$  ja niiden vastaavia karaktereja  $\chi^{(i)}(C_k)$ . Samaan luokkaan kuuluvien alkioiden karakterit ovat samat, joten termit voidaan ryhmittää luokittain. Jos  $N_k$  on ns. *luokkaluku*, joka ilmoittaa montako alkioita kuhunkin luokkaan kuuluu, voidaan ortogonaalisuusehto kirjoittaa muotoon

$$\sum_k [\chi^{(i)}(C_k)]^* \chi^{(j)}(C_k) N_k = h \delta_{ij}, \quad (252)$$

missä summaus kulkee nyt luokkien yli. Tulos osoittaa, että eri redusoitumattomien esitysten karakterit

muodostavat ortogonaalisen vektorisysteemin luokka-avaruudessa. Luokka-avaruuden dimensio on  $N$  (luokkien lukumäärä), jolloin redusoitumattomia esityksiä voi olla korkeintaan  $N$  kappaletta. Voidaan todistaa, että redusoitumattomia esityksiä on itseasiassa täsmälleen yhtä paljon kuin ryhmässä luokkia.

**Esimerkki:** Kolmioryhmän  $S_3$  tai  $D_3$  redusoitumattomien esityksien lukumäärä on siten kolme, koska ryhmässä on kolme luokkaa  $\{E\}$ ,  $\{A, B, C\}$  ja  $\{D, F\}$ . Jos esitysten dimensiot ovat  $l_1, l_2$  ja  $l_3$ , on voimassa ehto

$$l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 6. \quad (253)$$

Tämä on mahdollista vain kun  $l_1 = l_2 = 1$  ja  $l_3 = 2$ . Esitykset ovat

1. 1-d:  $E, A, B, C, D, F \rightarrow 1$
2. 1-d: 2-d esityksen determinatit
3. 2-d: aikaisempi 2-dimensioinen matriisiesitys.

Jokainen esitys, jonka dimensio on kuusi tai suurempi voidaan redusoida suoraksi summaksi näistä kolmesta esityksestä.

### Esitysten redusointi karakterien avulla

Olkoon  $\Gamma^{(\nu)}$  ryhmän  $G = \{A_1, \dots, A_h\}$  esitys, joka on redusoitumaton. **Huomaa**, että seuraavassa redusoitumattomille esityksille käytetään merkintää  $\Gamma^{(\mu)}$  ja redusoituville esityksille ei käytetä yläindeksiä  $\mu$ . Mielivaltainen esitys voidaan nyt kehittää suoraksi summaksi redusoitumattomien esitysten avulla

$$\Gamma(A_i) = \sum_{\nu} a_{\nu} \Gamma^{(\nu)}(A_i) \quad (254)$$

missä vakio  $a_{\nu}$  ilmoittaa kuinka monta kertaa esitys  $\Gamma^{(\nu)}$  esiintyy esityksessä  $\Gamma$ . Suoran summan jäljelle on silloin voimassa yhtälö

$$\chi(C_i) = \text{Tr}[\Gamma(C_i)] = \sum_{\nu} a_{\nu} \chi^{(\nu)}(C_i), \quad (255)$$

kun alkio  $A_i$  kuuluu luokkaan  $C_i$ .

Kun kerrotaan yhtälö tekijällä  $\chi^{(\mu)}(C_k) N_k$  ja summataan luokkaindeksin yli, niin saadaan ensimmäisen ortogonaalisuuslauseen perusteella

$$\begin{aligned} & \sum_k [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* \chi(C_k) N_k \\ &= \sum_{\nu} \sum_k [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* a_{\nu} \chi^{(\nu)}(C_k) N_k \\ &= \sum_{\nu} a_{\nu} h \delta_{\mu\nu} = h a_{\mu}, \end{aligned}$$

toisen sanoen

$$a_{\mu} = \frac{1}{h} \sum_k N_k [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* \chi(C_k). \quad (256)$$

Tämä pelkästään karaktereista riippuva lauseke osoittaa, kuinka monta kertaa  $\Gamma^{(\mu)}$  esiintyy esityksessä  $\Gamma$ . Karakterit

riittävät esityksen spesifointiin, sillä jos kahdella esityksellä on samat karakterit, kertoimet  $a_\mu$  ovat yhtälön mukaan samat molemmissa esityksissä ja esitykset niin ollen ekvivalentteja.

### Säännöllinen esitys

**Määritelmä 9 (säännöllinen esitys)** Säännöllinen esitys määritellään kertotaulun  $A_k^{-1}A_j$  avulla seuraavasti

$$\Gamma(B)_{kj} = \begin{cases} 1, & A_k^{-1}A_j = B \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \quad (257)$$

Säännöllisen esityksen matriisit saadaan muodostettua laskemalla kertotaulut  $A_k^{-1}A_j$ . Indeksit  $k$  on vaaka- ja indeksi  $j$  pystyriivi-indeksi. Näin muodostetusta matriisista saadaan esimerkiksi alkioita  $B$  vastaava säännöllinen esitysmatriisi asettamalla kuhunkin kohtaan missä  $B$  esiintyy 1 ja muualle 0. Esimerkiksi lasketaan ryhmän  $S_3$  alkioita  $A$  vastaava säännöllinen esitys.

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$E^{-1}$	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$A^{-1}$	$A$	$E$	$D$	$F$	$B$	$C$
$B^{-1}$	$B$	$F$	$E$	$D$	$C$	$A$
$C^{-1}$	$C$	$D$	$F$	$E$	$A$	$B$
$D^{-1}$	$F$	$B$	$C$	$A$	$E$	$D$
$F^{-1}$	$D$	$C$	$A$	$B$	$F$	$E$

Alkion  $A$  säännöllinen esitys on

$$\Gamma^{\text{reg}}(A) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (258)$$

Säännöllinen esitys toteuttaa ryhmäaksioomat. Todistetaan sulkeutuvuusaksiooma

$$\Gamma(BC) = \Gamma(B)\Gamma(C). \quad (259)$$

Säännöllisen esityksen määritelmän mukaan on

$$\Gamma(BC)_{ki} = \begin{cases} 1, & A_k^{-1}A_i = BC \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases}$$

Samoin saadaan

$$\sum_j \Gamma(B)_{kj}\Gamma(C)_{ji} = \sum_j \delta_{B, A_k^{-1}A_j} \delta_{C, A_j^{-1}A_i}.$$

Oikean puolen summassa ainoa nollasta poikkeava termi ( $= 1$ ) saadaan kun  $B = A_k^{-1}A_j$  ja  $C = A_j^{-1}A_i$ , jolloin

$$BC = A_k^{-1}A_jA_j^{-1}A_i = A_k^{-1}A_i.$$

Nähdään siis, että

$$\Gamma(BC)_{ki} = \sum_j \Gamma(B)_{kj}\Gamma(C)_{ji}.$$

Kerrotaan  $\chi(C_k)$  tekijällä  $N_k\chi^*(C_k)$ , summataan yli luokkaindeksin ja käytetään hyväksi yhtälöä

$$a_\mu = \frac{1}{h} \sum_k N_k [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* \chi(C_k)$$

ja yhtälöä (255) kompleksikonjugoituna. Tällöin

$$\begin{aligned} \sum_k N_k \chi^*(C_k) \chi(C_k) &= \sum_{k, \mu} N_k a_\mu [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* \chi(C_k) \\ &= h \sum_\mu a_\mu^2, \end{aligned}$$

Erikoisesti, jos esitys on redusoitumaton ovat kaikki vakiot  $a_\mu = 0$  paitsi yksi, joka on 1. Silloin redusoitumattoman esityksen kriteeriksi saadaan

$$\frac{1}{h} \sum_k N_k |\chi(C_k)|^2 = 1. \quad (260)$$

Säännöllisen esityksen karakterit ovat

$$N_1 = 1 \quad (261)$$

$$\chi(C_1) = \chi(E) = h \quad (262)$$

$$\chi(C_k) = 0, \quad C_k \neq E, \quad (263)$$

jolloin saadaan

$$\begin{aligned} a_\mu &= \frac{1}{h} \sum_k N_k [\chi^{(\mu)}(C_k)]^* \chi(C_k) \\ &= \frac{1}{h} [\chi^{(\mu)}(E)]^* \chi(E) = \frac{1}{h} [\chi^{(\mu)}(E)]^* h = l_\mu. \end{aligned} \quad (264)$$

**Lause 27 (kuuluu teoreema)** Säännöllisessä esityksessä jokainen redusoitumaton esitys esiintyy  $l_i$  kertaa, missä  $l_i$  on redusoitumattoman esityksen dimensio. Ja lisäksi

$$\sum_j l_j^2 = h. \quad (265)$$

**Todistus:** Säännöllinen esitys sisältää redusoitumattoman esityksen  $a_j = l_j$  kertaa, missä  $l_j$  on esityksen dimensio kuten yhtälössä (264) on näytetty. Säännöllisen esityksen konstruoinnista johtuen sen dimensio on ryhmän kertaluku  $h$ . Toisaalta sen dimensio on sama kuin kaikkien sen sisältämien redusoitumattomien esitysten dimensioiden summa. Saadaan siis

$$h = \sum_j a_j l_j = \sum_j l_j^2. \quad (266)$$

### Ryhmäalgebraa

Edellä näimme, että luokan karakteri säännöllisessä esityksessä on kirjoitettavissa redusoitumattomien esitysten karakterien avulla muodossa

$$\chi(C_i) = \sum_\nu a_\nu \chi^{(\nu)}(C_i) = \sum_\nu l_\nu \chi^{(\nu)}(C_i).$$

Jos nyt  $i = 1$  (identiteetin  $E$  luokka), niin  $\chi(E) = h$  ja  $\chi(C_i) = 0$  kaikissa muissa tapauksissa säännöllisen

esityksen konstruoinnin perusteella. Koska  $\chi^{(\nu)}(C_1) = I_\nu$ , saamme siis

$$\sum_{\nu} \chi^{(\nu)}(C_1) \chi^{(\nu)}(C_i) = \begin{cases} 0, & \text{kun } i \neq 1 \\ h, & \text{kun } i = 1. \end{cases}$$

Näytetään, että tämä ortogonaalisuusehto on voimassa yleisesti luokkien välillä. Todistusta varten otamme käyttöön algebran käsitteen.

Ryhmän algebran muodostavat suuret

$$\sum_R a_R R,$$

missä luvut  $a_R$  ovat mielivaltaisia kompleksilukuja.

Kahden suureen summalla tarkoitetaan kombinaatiota

$$\sum_R a_R R + \sum_R b_R R = \sum_R (a_R + b_R) R$$

ja tulolla lauseketta

$$\begin{aligned} \sum_R a_R R \sum_S b_S S &= \sum_{R,S} a_R b_S R S = \sum_{T,S} a_{TS^{-1}} b_S T \\ &= \sum_{T,Q} a_{TQ} b_{Q^{-1}T}. \end{aligned}$$

Olkoon esimerkkinä ryhmä  $C_2 = \{E, A\}$ , jolloin algebra muodostuu kombinaatioista

$$a_1 E + a_2 A.$$

Nyt esimerkiksi

$$(2E + 4A) + (E - 6A) = (3E - 2A)$$

ja

$$\begin{aligned} (2E + 4A)(E - 6A) &= 2E^2 - 12EA + 4AE - 24A^2 \\ &= 2E - 12A + 4A - 24E \\ &= -22E - 8A. \end{aligned}$$

Olkoot ryhmän  $G$  luokan  $C_i$  elementit  $A_1^{(i)}, A_2^{(i)}, \dots, A_{N_i}^{(i)}$ . Konstruoidaan algebrallinen suure

$$C_i = \sum_{l=1}^{N_i} A_l^{(i)}.$$

Helposti nähdään (harjoitus), että tulon

$$C_i C_j = \sum_{l=1}^{N_i} \sum_{m=1}^{N_j} A_l^{(i)} A_m^{(j)}$$

oikea puoli koostuu kokonaisista luokista. Voimme siis kirjoittaa

$$C_i C_j = \sum_l c_{ijl} C_l,$$

missä kertoimet  $c_{ijl}$  ovat ei-negatiivisia kokonaislukuja. Tarkastellaan ryhmän  $G$  mielivaltaista redusoitumatonta

esitystä  $\Gamma$ . Muodostetaan kutakin luokkaa  $C_i$  kohti matriisi

$$\Gamma_i = \sum_{R \in C_i} \Gamma(R).$$

On jälleen helppo nähdä (harjoitus), että  $\Gamma_i$  kommutoi kaikkien esitysmatriisien kanssa, joten Schurin lemmän perusteella on

$$\Gamma_i = \lambda_i I.$$

Laskemalla jäljet molemmin puolin saadaan

$$\lambda_i n = \lambda_i \chi(E) = N_i \chi(C_i),$$

missä  $n$  on redusoitumattoman esityksen dimensio. Siis

$$\lambda_i = \frac{N_i \chi(C_i)}{\chi(E)}.$$

Matriisit  $\Gamma_i$  toteuttavat kertolaskurelaation

$$\Gamma_i \Gamma_j = \sum_l c_{ijl} \Gamma_l,$$

eli

$$\lambda_i \lambda_j = \sum_l c_{ijl} \lambda_l.$$

Sijoittamalla tähän äskenen suureen  $\lambda$  lauseke saadaan

$$\frac{N_i \chi(C_i)}{\chi(E)} \frac{N_j \chi(C_j)}{\chi(E)} = \sum_l c_{ijl} \frac{N_l \chi(C_l)}{\chi(E)}$$

eli

$$N_i N_j \chi(C_i) \chi(C_j) = \chi(E) \sum_l c_{ijl} N_l \chi(C_l).$$

On helppo todeta, että jokaista luokkaa  $C_i$  kohti on olemassa luokka  $C_{i'}$ , joka koostuu luokan  $C_i$  alkioiden käänteisalkioista. Molemmissa luokissa on aivan ilmeisesti sama määrä alkioita, ts.  $N_i = N_{i'}$ . Luokkakertolaskun  $C_i C_{i'}$  tuloksena saatavassa joukossa esiintyy siten identiteettialkio täsmälleen  $N_i$  kertaa. Toisaalta, kun  $j \neq i'$ , identiteetti ei esiinny kertaakaan tulossa  $C_i C_j$ . Saamme siis

$$c_{ijl} = \begin{cases} 0, & \text{kun } j \neq i' \\ N_i, & \text{kun } j = i'. \end{cases}$$

**Huom.** Luokan elementtien lukumäärät  $N_i$  ja kertoimet  $c_{ijl}$  riippuvat ryhmästä mutta eivät esityksestä.

### Toinen ortogonaalisuusrelaatio ja karakteritaulukko

Olemme tarkastelleet yllä mielivaltaista redusoitumatonta esitystä. Merkitään tästä lähtien ko. esitys eksplisiittisesti; mm.

$$N_i N_j \chi^{(\nu)}(C_i) \chi^{(\nu)}(C_j) = \sum_l c_{ijl} N_l \chi^{(\nu)}(E) \chi^{(\nu)}(C_l).$$

Summataan yo. yhtälö yli esitysten, jolloin saadaan

$$N_i N_j \sum_{\nu=1}^r \chi^{(\nu)}(C_i) \chi^{(\nu)}(C_j)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_l c_{ijl} N_l \sum_{\nu=1}^r \chi^{(\nu)}(E) \chi^{(\nu)}(C_l) \\
&= \sum_l c_{ijl} N_l h \delta_{1l} \\
&= c_{ij1} N_1 h = c_{ij1} h,
\end{aligned}$$

missä olemme käyttäneet aikaisemmin johtamaamme relaatiota

$$\sum_{\nu} \chi^{(\nu)}(C_1) \chi^{(\nu)}(C_i) = \begin{cases} 0, & \text{kun } i \neq 1 \\ h, & \text{kun } i = 1. \end{cases}$$

Sijoitetaan yo. yhtälöön kertoimien  $c_{ij1}$  lauseke, jolloin

$$N_i N_j \sum_{\nu=1}^r \chi^{(\nu)}(C_i) \chi^{(\nu)}(C_j) = \begin{cases} 0, & \text{kun } j \neq i' \\ h N_i, & \text{kun } j = i' \end{cases}$$

eli

$$\sum_{\nu=1}^r \chi^{(\nu)}(C_i) \chi^{(\nu)}(C_j) = \frac{h}{N_j} \delta_{ji'}.$$

Koska esityksemme ovat unitaarisia, on  $\chi(C_i) = \chi^*(C_{i'})$ . Saamme toisen ortogonaaliteoreeman nimellä tunnetun lauseen

**Lause 28** Ryhmän redusoitumattomien esitysten karakterit toteuttavat ortogonaalisuusehdon

$$\sum_{\nu=1}^r \chi^{(\nu)*}(C_i) \chi^{(\nu)}(C_j) = \frac{h}{N_j} \delta_{ij}.$$

Toisen ortogonaaliteoreeman suorana seurauksena saadaan

**Lause 29** Redusoitumattomien esitysten lukumäärä on sama kuin luokkien lukumäärä.

**Todistus:** Harjoitustehtävä.

### Karakteritaulukon konstruointi

Karakteritaulukko muodostetaan seuraavasti:

1. Vaakarivit numeroidaan redusoitumattomien esitysten  $\Gamma^{(i)}$  mukaan.
2. Pystyivät numeroidaan luokkien  $C_k$  mukaan ja alkioiden lukumäärät (luokkaluvut  $N_k$ ) merkitään näkyviin.
3. Itse taulukkoon kirjoitetaan karakterien arvot  $\chi^{(i)}(C_k)$ .

**Esimerkki:** Määrätään  $S_3$  (tai  $D_3$ ) ryhmän karakteritaulukko laskemalla esitysmatriisien jäljet

	$C_1$	$3 C_2$	$2 C_3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

Tutkimalla taulukkoa todetaan, että vaakarivit ovat ortogonaalisia painokertoimilla  $N_k$ :

$$\begin{aligned}
1 \times 1 \times 2 + 3 \times 1 \times 0 - 2 \times 1 \times 1 &= 0 \\
1 \times 1 \times 1 - 3 \times 1 \times 1 + 2 \times 1 \times 1 &= 0.
\end{aligned}$$

Samoin todetaan helposti, että myös pystyivät muodostavat ortogonaalivektorit.

Esitysmatriisien muodostaminen on usein työlästä ja sovelluksissa riittää usein, jos karakteritaulukko saadaan muodostettua ilman eksplisiittisiä matriiseja. Taulukko voidaan konstruoida seuraavassa järjestyksessä:

1. Redusoitumattomien esitysten lukumäärä on sama kuin luokkien lukumäärä. Luokat saadaan kertotauluista.
2. Redusoitumattomien esitysten dimensiot toteuttavat ehdon  $\sum l_i^2 = h$ . Usein näillä kahdella ehdolla saadaan määräätyä  $l_i$ -luvut. Koska  $\chi^{(i)}(E) = l_i$  saadaan karakteritaulun ensimmäinen pystyivi, joka suoraan ilmoittaa dimensiot. Toisaalta jokaisella ryhmällä on 1-dimensioinen esitys  $A_k \rightarrow 1$ , joten ensimmäinen vaakarivi määrääytyy myös.
3. Vaakarivit muodostavat kohtisuorat vektorit painokertoimin  $N_k$ , jolloin saadaan yhtälöryhmä

$$\sum_k [\chi^{(i)}(C_k)]^* \chi^{(i)}(C_k) N_k = h \delta_{ij}. \quad (267)$$

4. Samoin pystyivät muodostavat kohtisuorat vektorit, jolloin saadaan toinen yhtälöryhmä

$$\sum_r [\chi^{(r)}(C_k)]^* \chi^{(r)}(C_l) = \frac{h}{N_k} \delta_{kl}. \quad (268)$$

5. Lisäksi  $i$ :nen vaakarivin alkioit toteuttavat ehdon

$$N_j N_k \chi^{(i)}(C_j) \chi^{(i)}(C_k) = l_i \sum_l c_{jkl} N_l \chi^{(i)}(C_l) \quad (269)$$

missä luvut  $c_{jkl}$  saadaan algebrasta

$$C_j C_k = \sum_l c_{jkl} C_l \quad (270)$$

ja ne voidaan määrätä kertotaulusta.

Kolme ensimmäistä ehtoa yleensä riittävät karakteritaulukon määrittämiseen ja kahta muuta voidaan käyttää karakterien tarkistukseen.

**Esimerkki:** Määrätään  $S_3$  (tai  $D_3$ ) ryhmän karakteritaulukko. Kahdesta ensimmäisestä ehdosta saadaan taulukko

	$C_1$	$3 C_2$	$2 C_3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	$x_1$	$y_1$
$\Gamma^{(3)}$	2	$x_2$	$y_2$

jolloin jää 8 tuntematonta määrättäväksi. Ehdosta kolme saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{aligned}
1 + 3|x_1|^2 + 2|y_1|^2 &= 6 \\
1 + 3|x_2|^2 + 2|y_2|^2 &= 6 \\
1 + 3x_1 + 2y_1 &= 0 \\
2 + 3x_2 + 2y_2 &= 0 \\
2 + 3x_1^* x_2 + 2y_1^* y_2 &= 0
\end{aligned}$$

ja ehdosta neljä puolestaan yhtälöryhmä

$$1 + x_1 + 2x_2 = 0$$

$$\begin{aligned}
1 + y_1 + 2y_2 &= 0 \\
1 + x_1^* y_1 + x_2^* y_2 &= 0 \\
1 + |x_1|^2 + |x_2|^2 &= \frac{6}{3} = 2 \\
1 + |y_1|^2 + 2|y_2|^2 &= \frac{6}{2} = 3.
\end{aligned}$$

## Ryhmien esitysteoria kvanttimekaniikassa

### Esitysteoria ja kvanttimekaniikka

Olkoon  $G$  symmetriaryhmä, jonka transformaatioissa Hamiltonin operaattori säilyy invarianttina. Symmetriaryhmä voidaan useimmiten määrittellä koordinaattimuunnoksena

$$\mathbf{x}' = R\mathbf{x} \quad (271)$$

missä  $R^\dagger = R^T = R^{-1}$  on reaalin ortogonaalinen  $3 \times 3$ -matriisi:

$$x'_i = \sum_j R_{ij} x_j. \quad (272)$$

Käänteismuunnos on vastaavasti

$$\mathbf{x} = R^{-1} \mathbf{x}' = R^T \mathbf{x}', \quad (273)$$

joka komponenttimuodossa esitettynä on

$$x_i = \sum_j R_{ij}^T x'_j = \sum_j R_{ji} x'_j. \quad (274)$$

**Määritelmä 10 (esitysvaruus)** *Olkoon nyt  $f(\mathbf{x})$  mielivaltainen skaalarifunktio. Sen avulla voidaan määrittellä homomorfia  $R \rightarrow P_R$  siten, että*

$$P_R f(R\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \quad (275)$$

*tai*

$$P_R f(\mathbf{x}) = f(R^{-1} \mathbf{x}). \quad (276)$$

Jälkimmäinen muoto saadaan, jos kirjoitetaan

$$\begin{aligned}
P_R^{-1} f(R^{-1} \mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) \Rightarrow \\
P_R P_R^{-1} f(R^{-1} \mathbf{x}) &= I f(R^{-1} \mathbf{x}) = P_R f(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

**Esimerkki 1:** Olkoon  $R$  rotaatio 90 astetta  $x$ -akselin suhteen eli

$$x' = x \quad (277)$$

$$y' = z \quad (278)$$

$$z' = -y. \quad (279)$$

Matriisimuodossa  $R$  on silloin

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (280)$$

ja kääntematriisi on

$$R^T = R^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (281)$$

Silloin on

$$P_R f(x, y, z) = f(R^{-1} \mathbf{x}) = f(x, -z, y). \quad (282)$$

**Esimerkki 2:** Vetyatomien  $p$ -tyyppiset aaltofunktiot

$$\Psi_{1m} = \Phi(r) Y_m^1(\hat{r}). \quad (283)$$

Aaltofunktioina voidaan käyttää myös funktioita  $x\Phi$ ,  $y\Phi$  ja  $z\Phi$ , jolloin

$$P_R(x\Phi(r)) = x\Phi(r) \quad (284)$$

$$P_R(y\Phi(r)) = -z\Phi(r) \quad (285)$$

$$P_R(z\Phi(r)) = y\Phi(r). \quad (286)$$

$$(287)$$

**Lause 30 :** *Operaattorit  $P_R$  muodostavat ryhmän, joka on homomorfinen symmetriaryhmän kanssa.*

**Todistus:** Symmetriaoperaatiot muodostavat ryhmän, joten  $SR = T$ . Merkitään esitysvaruudessa

$$P_R f(\mathbf{x}) = f(R^{-1} \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}). \quad (288)$$

Nyt väitetään, että  $P_S P_R = P_T$ , mikä on helppo todeta:

$$\begin{aligned}
P_S P_R f &= P_S g = g(S^{-1} \mathbf{x}) = f(R^{-1}(S^{-1} \mathbf{x})) \\
&= f((SR)^{-1} \mathbf{x}) = f(T^{-1} \mathbf{x}) = P_T f(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

### Schrödingerin yhtälön ryhmä

Samalla tavoin kuin Hamiltonin operaattori  $H$  myös operaattorit  $P_R$  operoivat aaltofunktiovaruudessa. Jos operaattorit  $P_R$  kommutoivat  $H$ :n kanssa,

$$P_R H = H P_R, \quad (289)$$

sanotaan, että ne muodostavat Schrödingerin yhtälön ryhmän. Silloin Schrödingerin yhtälö

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (290)$$

on voimassa myös ominaisfunktiolle  $P_R \Psi$ :

$$P_R H \Psi_n = E_n (P_R \Psi_n) \Rightarrow \quad (291)$$

$$H P_R \Psi_n = P_R (H \Psi_n) = E_n (P_R \Psi_n). \quad (292)$$

Nähdään, että energian ominaisarvo on degeneroitunut. Degeneraatiota voi olla kahta erilaista tyyppiä.

- Normaali degeneraatio, joka liittyy systeemin symmetriaan, esimerkiksi vetyatomien  $p$ -tilan aaltofunktiosta voidaan generoida rotaatioilla kaksi muuta samaan energiaan liittyvää aaltofunktiota.
- Satunnainen degeneraatio, joka ei liity systeemin symmetriaan (harjoituksissa esimerkkinä vetyatomien energiatilat).

**Esimerkki:** Vetyatomissa Coulombin potentiaali

$$\hat{V}(r) = -e^2/r = -e^2/(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \quad (293)$$

säilyy invarianttina rotaatioissa ja samoin kineettinen energia

$$\hat{T}(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \quad (294)$$

Jos energitaso  $E_n$  on  $l$ -kertaisesti degeneroitunut,

$$H \Psi_\mu = E_n \Psi_\mu, \quad \mu = 1, \dots, l \quad (295)$$

voidaan degeneroituneista tiloista muodostaa lineaarikombinaatiot, jotka edelleen ovat samaan ominaisarvoon liittyviä ortonormaaleja aaltofunktioita

$$\begin{aligned} \Psi'_\mu &= \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu c_{\nu\mu}, \quad \mu = 1, \dots, l \\ \sum_{\nu} |c_{\nu\mu}|^2 &= 1. \end{aligned}$$

**Lause 31** : Jos  $P_R H = H P_R$ , niin transformatio-opeaattorien  $P_R$  vaikutusta esitysavaruuden aaltofunktioihin  $\Psi_n$  voidaan kuvata yhtälöllä

$$P_R \Psi_n = \sum_{\mu=1}^l \Psi_\mu \Gamma(R)_{\mu n}, \quad (296)$$

missä matriisit  $\Gamma(R)$  muodostavat Schrödingerin yhtälön ryhmän  $l$ -dimensioisen esityksen. Esitys on unitaarinen.

**Todistus:**

1. Kuten edellä todettiin kommutaatio säännöstä seuraa, että

$$H(P_R \Psi_\mu) = E_n(P_R \Psi_\mu). \quad (297)$$

2. Lineaarisesti riippumattomat tilat  $\Psi_\mu$  muodostavat täydellisen järjestelmän funktioita, joiden energia on  $E_n$  (Hilbertin avaruuksien teoria). Silloin jokainen aaltofunktio, jonka energia on  $E_n$ , erikoisesti  $P_R \Psi_\mu$ , voidaan kehittää näiden funktioiden muodostamassa kannassa:

$$P_R \Psi_\mu = \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu \Gamma(R)_{\nu\mu}. \quad (298)$$

3. Osoitetaan, että  $\Gamma$  on esitys. Aikaisemmin saatiin

$$P_S P_R = P_{SR}, \quad (299)$$

joten

$$P_{SR} \Psi_\mu = \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu \Gamma(SR)_{\nu\mu}. \quad (300)$$

Samoin saadaan

$$\begin{aligned} P_S P_R \Psi_\mu &= P_S \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu \Gamma(R)_{\nu\mu} \\ &= \sum_{\nu\nu'} \Psi_{\nu'} \Gamma(S)_{\nu'\nu} \Gamma(R)_{\nu\mu} \\ &= \sum_{\nu'} \Psi_{\nu'} [\Gamma(S)\Gamma(R)]_{\nu'\mu}. \end{aligned}$$

Koska funktiot  $\Psi_\mu$  ovat lineaarisesti riippumattomia, täytyy olla

$$\Gamma(SR)_{\nu\mu} = [\Gamma(S)\Gamma(R)]_{\nu\mu},$$

joten matriisiesitys on sulkeutuva, eli

$$\Gamma(SR) = \Gamma(S)\Gamma(R). \quad (301)$$

Muut aksioomat seuraavat välittömästi.

4. Koska tilojen ortonormitus (esim. Gram-Schmidt) ei edellä esitettyjä ominaisuuksia muuta, voimme olettaa tilat  $\Psi_\mu$  ortonormaaleiksi, ts.

$$\langle \Psi_\nu | \Psi_\mu \rangle = \delta_{\nu\mu}. \quad (302)$$

Merkinnällä tarkoitetaan integraalia

$$\langle \Psi_\nu | \Psi_\mu \rangle \equiv \int d\tau \Psi_\nu^*(\mathbf{r}) \Psi_\mu(\mathbf{r}). \quad (303)$$

Osoitetaan, että transformaation  $R$  esitys tässä kantavektori-järjestelmässä on unitaarinen. Ensinnäkin, tekemällä integrointimuuttujan vaihdoksen  $\mathbf{r} \rightarrow R\mathbf{r}$  ja huomioimalla että tässä muunnoksessa tilavuuselementti  $d\tau$  on vakio (ortogonaalimatriiseille on  $|\det R| = 1$ ), nähdään että

$$\delta_{\nu\mu} = \langle \Psi_\nu | \Psi_\mu \rangle = \int d\tau \Psi_\nu^*(R^{-1}\mathbf{r}) \Psi_\mu(R^{-1}\mathbf{r}).$$

Edelleen saadaan

$$\begin{aligned} \delta_{\nu\mu} &= \int d\tau \Psi_\nu^*(R^{-1}\mathbf{r}) \Psi_\mu(R^{-1}\mathbf{r}) = \langle P_R \Psi_\nu | P_R \Psi_\mu \rangle \\ &= \left\langle \sum_{\lambda} \Psi_\lambda \Gamma(R)_{\lambda\nu} \middle| \sum_{\eta} \Psi_\eta \Gamma(R)_{\eta\mu} \right\rangle \\ &= \sum_{\lambda\eta} \langle \Psi_\lambda | \Psi_\eta \rangle \Gamma^*(R)_{\lambda\nu} \Gamma(R)_{\eta\mu} \\ &= \sum_{\lambda} \Gamma^*(R)_{\lambda\nu} \Gamma(R)_{\lambda\mu} \\ &= \sum_{\lambda} \Gamma^\dagger(R)_{\nu\lambda} \Gamma(R)_{\lambda\mu} \\ &= [\Gamma^\dagger(R) \Gamma(R)]_{\nu\mu}. \end{aligned}$$

Saamme siten esitysmatriiseille unitaarisuusehdon

$$\Gamma^\dagger(R) \Gamma(R) = I. \quad (304)$$

Näin on osoitettu, että energian ominaisarvoon  $E_n$  liittyvät  $l$  kappaletta degeneroituneita aaltofunktioita  $\Psi_\mu$  muodostavat  $l$ -dimensioisen redusoitumattoman esityksen  $\Gamma$  Schrödingerin yhtälön ryhmälle.

**Lause 32** : Hamiltonin opeaattorin kutakin ominaisarvoa vastaa similaarisuusmuunnoksen puiteissa yksikäsitteinen Schrödingerin yhtälön ryhmän esitys.

**Todistus:** Tarkastellaan energiaominaisarvoon  $E_n$  liittyvää uutta lineaarisesti riippumattomien kantavektorien joukkoa  $\Psi'_\mu$ , joka saadaan kantavektorien  $\Psi_\nu$  lineaarikombinaationa.

$$\Psi'_\mu = \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu C_{\nu\mu}, \quad \text{tai} \quad (305)$$

$$\Psi_\kappa = \sum_{\lambda=1}^l \Psi'_\lambda C_{\lambda\kappa}^{-1}. \quad (306)$$



Silloin

$$\begin{aligned} P_R \Psi'_\mu &= P_R \sum_{\nu=1}^l \Psi_\nu C_{\nu\mu} = \sum_{\kappa\nu} \Psi_\kappa \Gamma(R)_{\kappa\nu} C_{\nu\mu} \\ &= \sum_{\lambda\kappa\nu} \Psi'_\lambda C_{\lambda\kappa}^{-1} \Gamma(R)_{\kappa\nu} C_{\nu\mu} \\ &= \sum_{\lambda} \Psi'_\lambda [ C^{-1} \Gamma(R) C ]_{\lambda\mu}. \end{aligned}$$

Toisaalta

$$P_R \Psi'_\mu = \sum_{\lambda} \Psi'_\lambda \Gamma'(R)_{\lambda\mu}, \quad (307)$$

joten saamme

$$\Gamma'(R) = C^{-1} \Gamma(R) C. \quad (308)$$

### Abelin ryhmien esityksiä

Abelin ryhmälle on voimassa kommutaatiorelaatio

$$AB = BA \Rightarrow A = B^{-1}AB. \quad (309)$$

Siten Abelin ryhmän jokainen alkio muodostaa yksinään luokan. Koska redusoitumattomien esitysten lukumäärä on sama kuin luokkien lukumäärä, seuraava lause on välittömästi voimassa.

**Lause 33 :** *Kertalukua  $h$  olevalle Abelin ryhmälle on olemassa  $h$  kappaletta 1-dimensioisia esityksiä eikä mitään muita redusoitumattomia esityksiä.*

**Todistus:** Koska

$$\sum_{i=1}^h l_i^2 = h, \quad (310)$$

ainoa mahdollisuus on, että  $l_1 = \dots = l_h = 1$  ja esitysmatriisit ovat kompleksilukuja.

Tämän lauseen perusteella saadaan seuraava tulos: Jos Hamiltonin operaattorin symmetriaryhmä on Abelin ryhmä, niin Hamiltonin operaattori ei ole degeneroitunut.

### Syklisten ryhmien esityksiä

Alkiot  $\{A_1 = A, A_2 = A^2, \dots, A_h = E\}$  muodostavat syklisen ryhmän, joka on Abelin ryhmä. Jos alkion  $A$  esitys on kompleksiluku  $z$ ,

$$\Gamma(A) = z, \quad (311)$$

on

$$\Gamma(A_n) = \Gamma(A^n) = [ \Gamma(A) ]^n = z^n. \quad (312)$$

Toisaalta

$$\Gamma(E) = 1 \Rightarrow [ \Gamma(A) ]^h = z^h = 1, \quad (313)$$

joten

$$z = \exp[ 2\pi ip/h ], \text{ missä } p = 0, 1, 2, \dots \quad (314)$$

Silloin olemme löytäneet  $h$  kappaletta redusoitumattomia esityksiä

$$\Gamma(A) = \exp[ 2\pi ip/h ]; \quad p = 1, 2, \dots, h. \quad (315)$$

### Bloch'n teoreema

Syklisen ryhmä on sellaisen Hamiltonin operaattorin symmetriaryhmä, jonka potentiaalilla on esimerkiksi

- $h$  periodia ympyrän kehällä
- periodiset reunaehdot.

Ryhmän alkio  $A$  esittää silloin koordinaatiston siirtoa yhden periodin verran,

$$P_A \Psi(x) = \Psi(x + a).$$

Edellisen perusteella siis kaikkien Hamiltonin operaattorin ominaisfunktioiden, joilla on yo. symmetria täytyy transformoitua jonkin syklisen ryhmän esityksen  $p$  mukaisesti. Kaikkien esitykseen  $p$  liittyvien aaltofunktioiden täytyy siten toteuttaa seuraava ehto

$$\begin{aligned} P_A \Psi_p(x) &= \Psi_p(x + a) = \Gamma^{(p)}(A) \Psi_p(x) \\ &= \exp[ 2\pi ip/h ] \Psi_p(x). \end{aligned}$$

Jos tarkasteltavan systeemin kokonaispituus on  $L = ah$ , saamme kvantisoiomisehdon

$$\Psi_p(x + a) = \exp[ 2\pi ipa/L ] \Psi_p(x) = e^{ika} \Psi_p(x),$$

missä

$$k = \frac{2\pi p}{L}. \quad (316)$$

Nimetään alaindeksi uudelleen  $p \rightarrow k$ , joten yhtälö

$$\Psi_k(x + a) = e^{ika} \Psi_k(x) \quad (317)$$

esittää transformaatiota, joka saadaan translaatiosymmetriaryhmästä ja  $k$  on symmetriaan liittyvä kvanttiluku.

**Lause 34 (Bloch'n teoreema) :** *Periodisessa potentiaalissa hiukkasen aaltofunktio toteuttaa ehdon*

$$\Psi_k(x + a) = e^{ika} \Psi_k(x),$$

missä  $a$  on potentiaalın periodi ja aaltoluku

$$k = \frac{2\pi p}{L}, \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

*Mikä tahansa funktio, joka toteuttaa yo. yhtälön voidaan kirjoittaa muotoon*

$$\Psi_k(x) = u_k(x) e^{ikx}, \quad (318)$$

missä  $u_k(x)$  on periodinen funktio, jonka periodi on  $a$ .

### Rotaatioryhmä ja kulmaliikemäärä

Tarkastellaan rotaatioita kiinteän akselin ympäri (tavallisesti valitaan  $z$ -akseli). Tällaiset 2-dimensioiset rotaatiot muodostavat (Lie'n) ryhmän (harjoitustehtävä)

$$R(\phi_1) R(\phi_2) = R(\phi_2) R(\phi_1) = R(\phi_1 + \phi_2). \quad (319)$$

Koska ryhmä on Abelin ryhmä, esitykset ovat 1-dimensioisia ja  $\Gamma^{(m)}(\phi)$  on silloin kompleksifunktio, jonka on toteutettava ehto

$$\Gamma(\phi_1) \Gamma(\phi_2) = \Gamma(\phi_1 + \phi_2). \quad (320)$$

Täytyy siis olla

$$\Gamma(\phi) = e^{im\phi}. \quad (321)$$

Koska  $\Gamma(E) = \Gamma(2\pi) = 1$ , ainoa mahdollisuus on, että  $m$  on kokonaisluku  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Funktioihin  $f(\phi)$  vaikuttavat operaattorit  $P_R$  toteuttavat nyt vastaavasti ehdot

•  $P_R$  on unitaarinen eli jos  $P_R = \exp[iJ(\phi)]$  on  $J^\dagger = J$ , tai kiinteän koordinaatiston suhteen

• funktionaaliyhtälö  $P_{R(\phi_1)} P_{R(\phi_2)} = P_{R(\phi_1+\phi_2)}$  on voimassa.

Nämä molemmat yhtälöt toteuttava ratkaisu on

$$P_{R(\alpha)} = e^{i\alpha J_z}, \quad J_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (322)$$

Silloin saamme

$$J_z e^{im\phi} = m e^{im\phi} \quad (323)$$

ja

$$\begin{aligned} P_{R(\alpha)} e^{im\phi} &= e^{i\alpha J_z} e^{im\phi} \\ &= \left[ 1 + (-i\alpha) J_z + \frac{(-i\alpha)^2}{2!} J_z^2 + \dots \right] e^{im\phi} \\ &= \left[ 1 + (-i\alpha) m + \frac{(-i\alpha)^2}{2!} m^2 + \dots \right] e^{im\phi} \\ &= e^{-i\alpha m} e^{im\phi} = e^{im(\phi-\alpha)}. \end{aligned}$$

Funktioita

$$\Psi_m(\phi) = e^{im\phi}$$

voidaan siten pitää yksiulotteisten esitysten kantavektoreina, sillä rotaatiot  $P_R$  yksinkertaisesti kertovat nämä funktiot skalaarilla.

Kolmidimensioiselle aaltofunktiolle on silloin voimassa

$$P_R(\alpha) f(r, \theta, \phi) = P_R(\alpha) e^{im\phi} g(r, \theta) = f(r, \theta, \phi - \alpha),$$

mikä on sopuinnussa operaattorin  $P_R$  määritelmän

$$P_R f(\mathbf{x}) = f(R^{-1}\mathbf{x}) \Rightarrow P_{R(\alpha)} f(r, \theta, \phi) = f(r, \theta, \phi - \alpha)$$

kanssa. Rotaatioryhmän esitysmatriisit ovat vastaavasti

$$\Gamma_{\alpha'\alpha} = \langle \Psi_{\alpha'} | P_R | \Psi_\alpha \rangle = e^{im\alpha} \delta_{\alpha'\alpha}. \quad (324)$$

Operaattori  $J_z$  on kulmaliikemääräoperaattorin  $z$ -komponentti ja saamme tunnetut kvanttimekaaniset tulokset

- Rotaatiosymmetrisen Hamiltonin operaattorin ominaisfunktiot ovat  $\Psi_m(r, \theta, \phi) = f(r, \theta) e^{im\phi}$ , kun  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$
- Symmetria-akselin suuntainen kulmaliikemäärä säilyy ja siihen liittyy kvanttiluku  $m$ .

Yleinen 3-dimensioinen rotaatio määritellään kolmen Eulerin kulman  $\alpha$ ,  $\beta$  ja  $\gamma$  avulla. Eulerin kulmien määrittelyyn on kaksi mahdollisuutta: joko vaihtuvien akselien suhteen

1. kierto  $z$ -akselin ympäri kulman  $\alpha$  verran  
 $P_{R(\alpha)} = e^{-i\alpha J_z}$
2. kierto  $y'$ -akselin ympäri kulman  $\beta$  verran  
 $P_{R(\beta)} = e^{-i\beta J_{y'}}$
3. kierto  $z''$ -akselin ympäri kulman  $\gamma$  verran  
 $P_{R(\gamma)} = e^{-i\gamma J_{z''}}$

1. kierto  $z$ -akselin ympäri kulman  $\gamma$  verran  
 $P_{R(\gamma)} = e^{-i\gamma J_z}$

2. kierto  $y$ -akselin ympäri kulman  $\beta$  verran  
 $P_{R(\beta)} = e^{-i\beta J_y}$

3. kierto  $z$ -akselin ympäri kulman  $\alpha$  verran  
 $P_{R(\alpha)} = e^{-i\alpha J_z}$ .

Käytetään jälkimmäistä määritelmää, jolloin 3-dimensioinen rotaatio-operaattori  $P_R$  on

$$P_{R(\alpha,\beta,\gamma)} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}. \quad (325)$$

Aaltofunktiot voivat olla yhtäaikaan sekä kulmaliikemäärän neliön  $J^2$  että sen  $z$ -komponentin  $J_z$  ominaistiloja

$$\begin{aligned} J^2 \Psi_{jm} &= j(j+1) \Psi_{jm}, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ J_z \Psi_{jm} &= m \Psi_{jm}, \quad m = 0, \dots, \pm j. \end{aligned}$$

Rotaatio-operaattorin  $P_R$  matriisielementit  $J^2$ :n ja  $J_z$ :n yhteisten ominaisfunktioiden muodostamassa kannassa  $\{\Psi_{jm}\}$  ovat

$$\begin{aligned} D_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle \Psi_{jm} | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | \Psi_{jm'} \rangle \\ &= e^{-im\alpha} \langle \Psi_{jm} | e^{-i\beta J_y} | \Psi_{jm'} \rangle e^{-im'\gamma} \\ &= e^{-im\alpha - im'\gamma} d_{mm'}^{(j)}(\beta). \end{aligned}$$

Silloin saamme

$$P_{R(\alpha,\beta,\gamma)} \Psi_{jm} = \sum_{m'} D_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \Psi_{jm'}. \quad (326)$$

Tapauksessa  $j = \frac{1}{2}$   $D$ -matriisi on

$$D_{mm'}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{+i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{+i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

ja tapauksessa  $j = 1$

$$D_{mm'}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma) \frac{1+\cos\beta}{2}} & -e^{-i\alpha} \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & e^{-i(\alpha-\gamma) \frac{1-\cos\beta}{2}} \\ e^{-i\gamma} \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & \cos\beta & -e^{+i\gamma} \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} \\ e^{+i(\alpha-\gamma) \frac{1-\cos\beta}{2}} & e^{+i\alpha} \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & e^{+i(\alpha+\gamma) \frac{1+\cos\beta}{2}} \end{pmatrix}.$$

**Redusoitumattomien esitysten kantavektorit**

Jos symmetriaryhmän alkioit eivät kommutoi, niin sen redusoitumattomiin esityksiin kuuluu muitakin kuin

yksidimensioisia esityksiä. Tällöin kantafunktioiden  $\phi_\kappa^{(j)}$  luokitteluun tarvitaan kaksi indeksiä. Indeksillä  $j$  viitataan esitykseen ja  $\kappa$  redusoitumattoman esityksen riviin tai sarakkeeseen.

Kutsutaan muita kantafunktioita  $\phi_\lambda^{(j)}$ , jotka tarvitaan täydellisen kannan muodostamiseen, *partnereiksi*. Tällöin määritelmän mukaan

$$P_R \phi_\kappa^{(j)} = \sum_{\lambda=1}^{l_j} \phi_\lambda^{(j)} \Gamma^{(j)}(R)_{\lambda\kappa},$$

missä  $l_j$  on esityksen dimensio.

Kerrotaan yhtälö matriisielementillä  $\Gamma^{(i)*}(R)_{\lambda'\kappa'}$  ja summataan yli operaatioiden  $R$  sekä käytetään suurta ortogonaalisuusteoremaa. Silloin

$$\begin{aligned} & \sum_R \Gamma^{(i)*}(R)_{\lambda'\kappa'} P_R \phi_\kappa^{(j)} \\ &= \sum_{\lambda=1}^{l_j} \phi_\lambda^{(j)} \sum_R \Gamma^{(i)*}(R)_{\lambda'\kappa'} \Gamma^{(j)}(R)_{\lambda\kappa} \\ &= \frac{h}{l_j} \delta_{ij} \delta_{\kappa\kappa'} \phi_{\lambda'}^{(j)}. \end{aligned}$$

Täten operaattori

$$\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \Gamma^{(j)*}(R)_{\lambda\kappa} P_R \quad (327)$$

toteuttaa relaation

$$\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} \phi_\nu^{(i)} = \delta_{ij} \delta_{\kappa\nu} \phi_\lambda^{(j)}$$

ja generoi kaikki kantavektorin  $\phi_\kappa^{(j)}$  partnerit  $\phi_\lambda^{(j)}$  kuten

$$\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} \phi_\kappa^{(j)} = \phi_\lambda^{(j)}.$$

Jos  $\lambda = \kappa$ , niin

$$\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} \phi_\kappa^{(j)} = \phi_\kappa^{(j)},$$

joten  $\phi_\kappa^{(j)}$  on operaattorin  $\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$  ominaisfunktio, jonka ominaisarvo on yksi.

Tätä ominaisuutta käyttäen saadaan kantafunktioiden indeksit määrättyä yksikäsitteisesti.

**Lause 35 :** Jos  $\Gamma^{(1)}, \Gamma^{(2)}, \dots, \Gamma^{(c)}$  edustavat kaikkia operaattoreiden  $P_R$  muodostaman ryhmän redusoitumattomia esityksiä (esityksiä  $c$  kpl) niin silloin, mikä tahansa funktio  $F$   $P_R$ :n operaatioavaruudessa voidaan hajottaa funktioiden  $f_\kappa^{(j)}$  summaksi,

$$F = \sum_{j=1}^c \sum_{\kappa=1}^{l_j} f_\kappa^{(j)}, \quad (328)$$

missä  $f_\kappa^{(j)}$  kuuluu  $j$ :n redusoitumattoman esityksen  $\kappa$ :n riville ja  $l_j$  on esityksen  $j$  dimensio.

**Todistus:** Tarkastellaan funktiota  $F, F_2, \dots, F_h$ , jotka on saatu operoimalla  $P_E, P_{A_2}, \dots, P_{A_h}$ :lla funktioon  $F$ . Jätetään kaikki lineaarisesti riippuvat funktiot pois ja ortonormitetaan loput. Tuloksena saadaan funktiot

$F, F_2, \dots, F_n$ . Nämä funktiot muodostavat ryhmän unitaarisen esityksen kannan, koska peräkkäisten operaatioiden tulos voidaan esittää aina yo. funktioiden lineaarisena kombinaationa. Tämä taas johtuu siitä, että funktio  $P_S P_R F = P_S R F$  on funktioiden  $F, F_2, \dots, F_n$  virittämässä avaruudessa johtuen muodostamistavasta. Olkoon  $\Gamma$  tällainen  $n$ -dimensioinen ryhmän esitys siten, että

$$P_R F_k = \sum_{i=1}^n F_i \Gamma(R)_{ik}$$

Esitys on joko

1. redusoitumaton, jolloin  $F_i$  kuuluu selvästikin tämän esityksen riviin  $i$ , tai
2. redusoituva, jolloin se voidaan saattaa blokkimuotoon similariteettimuunnoksella

$$\alpha^{-1} \Gamma(R) \alpha = \begin{pmatrix} \Gamma^{(i)}(R) & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma^{(j)}(R) & 0 \\ 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}.$$

Matriisi  $\alpha$  määrittelee nyt funktiot  $F_k''$ , jotka transformoituvat yo. yhtälön mukaan ja täten ovat funktioita  $f_\kappa^{(j)}$  eri  $j$ :n ja  $\kappa$ :n arvoilla. Käyttäen käänteismuunnosta  $\alpha^{-1}$  voimme esittää  $F_k$ :n ja erityisesti  $F$ :n  $F_k''$ :n tai  $f_\kappa^{(j)}$ :n lineaarikombinaationa.

Operaattoria  $\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$  voidaan nyt käyttää poimimaan summasta (328) yksityiset termit

$$\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} f_{\kappa'}^{(j')} = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{jj'} f_\kappa^{(j)}$$

Täten

$$\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} F = f_\kappa^{(j)}$$

ja operaattori  $\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$  on projektioperaattori, joka projisioi erilleen sen osa funktiosta, mikä kuuluu  $j$ :n esityksen  $\kappa$ :n riville. Tällaisella operaattorilla on ominaisuus

$$\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} \mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} = \mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)}$$

eli kaikki potenssit ovat yhtäsuuria.

Esityksen kantafunktioiden muodostaminen tapahtuu seuraavasti:

1. Mielivaltaisesta funktiosta  $F$  projisioidaan funktio  $f_\kappa^{(j)}$  ja normitetaan, jolloin saadaan kantafunktio  $\phi_\kappa^{(j)}$
2. Operointi  $\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)}$  antaa partnerit

$$\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} \phi_\kappa^{(j)} = \phi_\lambda^{(j)}.$$

**Lause 36 :** Kaksi funktiota, jotka kuuluvat eri redusoitumattomiin esityksiin tai saman unitaarisen esityksen eri riveille ovat ortogonaalisia.

**Todistus:** Tarkastellaan skalaarituloa

$$\begin{aligned} & \langle \phi_\kappa^{(j)} | \psi_{\kappa'}^{(j')} \rangle = \langle P_R \phi_\kappa^{(j)} | P_R \psi_{\kappa'}^{(j')} \rangle \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \Gamma^{(j)*}(R)_{\lambda\kappa} \Gamma^{(j')}(R)_{\lambda'\kappa'} \langle \phi_\lambda^{(j)} | \psi_{\lambda'}^{(j')} \rangle. \end{aligned}$$

Skalaaritulo on riippumaton summauksesta yli ryhmän alkioiden, joten

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\kappa}^{(j)} | \psi_{\kappa'}^{(j')} \rangle &= \frac{1}{h} \sum_R \langle \phi_{\kappa}^{(j)} | \psi_{\kappa'}^{(j')} \rangle \\ &= \frac{1}{h} \sum_R \sum_{\lambda \lambda'} \Gamma^{(j)*}(R)_{\lambda \kappa} \Gamma^{(j')}(R)_{\lambda' \kappa'} \langle \phi_{\lambda}^{(j)} | \psi_{\lambda'}^{(j')} \rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{\kappa \kappa'} \frac{1}{l_j} \sum_{\lambda=1}^{l_j} \langle \phi_{\lambda}^{(j)} | \psi_{\lambda}^{(j)} \rangle. \end{aligned}$$

Lisäksi huomataan, että skalaaritulo on riippumaton  $\kappa$ :sta.

Edellä esitettyssä todistuksessa on tarvittu esitysmatriisien  $\Gamma^{(j)}(R)$  tuntemista, mutta usein riittää, jos tunnetaan esitysmatriisien diagonaalelementit, jolloin voidaan käyttää karaktereja.

Asetetaan määritelmässä

$$\mathcal{P}_{\lambda \kappa}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \Gamma^{(j)*}(R)_{\lambda \kappa} P_R$$

$\lambda = \kappa$  ja summataan yli  $\kappa$ :n,

$$\mathcal{P}^{(j)} = \sum_{\kappa} \mathcal{P}_{\kappa \kappa}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \chi^{(j)*}(R) P_R$$

Edellä esitetyn perusteella on voimassa

$$\mathcal{P}^{(j)} f^{(j)} = f^{(j)}$$

missä

$$f^{(j)} = \sum_{\kappa=1}^{l_j} f_{\kappa}^{(j)}$$

ja edelleen  $\mathcal{P}^{(j)} F = f^{(j)}$ . Täten  $\mathcal{P}^{(j)}$  projisioi mielivaltaisesta funktiosta esitykseen  $j$  kuuluvan osan. (Huom. Similariteettimuunnos ei vaikuta saatuun tulokseen)

**Esimerkki:** Tarkastellaan ryhmää, johon kuuluvat identiteettioperaatio ja heijastusoperaatio  $\sigma$ .

$$P_{\sigma} x = -x$$

Ryhmässä on kaksi luokkaa ja siten myös kaksi yksidimensioista esitystä. Karakteritaulukko on yksinkertainen

	$E$	$\sigma$
$\Gamma^{(1)}$	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1

Projektio-operaattorit ovat

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1)} &\rightarrow \mathcal{P}^{(1)} = \frac{1}{2}(P_E + P_{\sigma}) \\ \Gamma^{(2)} &\rightarrow \mathcal{P}^{(2)} = \frac{1}{2}(P_E - P_{\sigma}). \end{aligned}$$

Operoidaan mielivaltaiseen funktioon  $F(x)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(1)} F(x) &= \frac{1}{2}[F(x) + F(-x)] \\ \mathcal{P}^{(2)} F(x) &= \frac{1}{2}[F(x) - F(-x)]. \end{aligned}$$

Tuloksena saadaan parillinen ja pariton funktio. Mielivaltainen funktio voidaan siis aina esittää parillisen ja parittoman osansa summana. Lisäksi todetaan, että parilliset ja parittomat osat ovat ortogonaalisia.

### Suoratuloryhmä ja sen esitykset

Kahden ryhmän

$$\begin{aligned} G_a &= \{E_a, A_2, \dots, A_{h_a}\} \\ G_b &= \{E_b, B_2, \dots, B_{h_b}\} \\ A_k B_l &= B_l A_k \end{aligned}$$

tuloryhmä, jonka kertaluku on  $h_a h_b$  saadaan kertomalla kaikki ryhmien alkiot keskenään

$$G_a \otimes G_b = \{E = E_a E_b, A_2, \dots, A_{h_a}, B_2, A_2 B_2, \dots\}.$$

Ryhmätulo on

$$(A_k B_s) (A_t B_l) = (A_k A_t) (B_s B_l) = A_{\alpha} B_{\gamma}.$$

**Määritelmä 11 (Matriisien suora tulo)** *Matriisien  $A$  ja  $B$  suora tulo  $A \otimes B$ , missä*

$$\begin{aligned} A & \quad l \times l \text{ matriisi} \\ B & \quad m \times m \text{ matriisi} \\ (A \otimes B) & \quad lm \times lm \text{ matriisi} \end{aligned} \quad (329)$$

määritellään yhtälöllä

$$(A \otimes B)_{ik, jl} = A_{ij} B_{kl}. \quad (330)$$

**Lause 37 :** *Tuloryhmän redusoitumattomien esitysten matriisit  $\Gamma^{(a \otimes b)}(A_k B_l)$  saadaan muodostamalla  $A_k$ :n ja  $B_l$ :n redusoitumattomien esitysmatriisien  $\Gamma^{(a)}(A_k)$ :n ja  $\Gamma^{(b)}(B_l)$ :n suorat tulot*

$$\Gamma^{(a \otimes b)}(A_k B_l) = \Gamma^{(a)}(A_k) \otimes \Gamma^{(b)}(B_l). \quad (331)$$

*Nämä esitysmatriisit muodostavat ryhmän.*

**Todistus:** Koska matriisien kertolasku ja suoratulo-operaatio kommutoiivat (harjoitus), niin

$$\begin{aligned} & \Gamma^{(a \otimes b)}(A_k B_l) \Gamma^{(a \otimes b)}(A_{k'} B_{l'}) \\ &= [\Gamma^{(a)}(A_k) \otimes \Gamma^{(b)}(B_l)] [\Gamma^{(a)}(A_{k'}) \otimes \Gamma^{(b)}(B_{l'})] \\ &= [\Gamma^{(a)}(A_k) \Gamma^{(a)}(A_{k'})] \otimes [\Gamma^{(b)}(B_l) \Gamma^{(b)}(B_{l'})] \\ &= \Gamma^{(a)}(A_k A_{k'}) \otimes \Gamma^{(b)}(B_l B_{l'}) \\ &= \Gamma^{(a \otimes b)}(A_k A_{k'} B_l B_{l'}) \end{aligned}$$

Esityksen redusoitumattomuus voidaan todistaa Shurin lemmän avulla (harjoitus).

Tarkistetaan seuraavaksi esitysmatriisien dimensiot

$$\sum_i (l_i^a)^2 = h_a$$

$$\sum_j (l_j^b)^2 = h_b.$$

Suoratuloryhmän esitysmatriisien dimensiot ovat  $l_{ij}^{a \otimes b} = l_i^a l_j^b$ , joten

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_j (l_{ij}^{a \otimes b})^2 &= \sum_i (l_i^a)^2 \sum_j (l_j^b)^2 \\ &= h_a h_b = h^{a \otimes b}. \end{aligned}$$

missä  $h^{a \otimes b}$  on suoratuloryhmän alkioiden määrä. Näin ollen muita redusoitumattomia esityksiä ei voi olla. Kvanttimekaniikassa kumpaankin symmetriaryhmään liittyy kvanttiluku, joten suoratuloryhmään liittyvä symmetria esitetään kahdella kvanttiluvulla.

### Suoratuloryhmän luokkarakenne ja karakterit

Ryhmän  $G_a$  alkiot kommutoivat ryhmän  $G_b$  alkioiden kanssa, joten suoratuloryhmän  $G_a \otimes G_b$  luokkien lukumäärä on  $G_a$  ja  $G_b$  luokkien lukumäärien tulo.

**Lause 38** : Suoratuloryhmän esityksen karakteri on komponenttiesitysten karakterien tulo.

**Todistus**: Määritelmän perusteella

$$\begin{aligned} \chi^{a \otimes b}(A_k B_l) &= \sum_{i,j} \Gamma^{a \otimes b}(A_k B_l)_{ij,ij} \\ &= \sum_{i,j} \Gamma^a(A_k)_{ii} \Gamma^b(B_l)_{jj} \\ &= \left[ \sum_i \Gamma^a(A_k)_{ii} \right] \left[ \sum_j \Gamma^b(B_l)_{jj} \right] \\ &= \chi^a(A_k) \chi^b(B_l). \end{aligned}$$

**Esimerkki**: Tasasivuisen kolmion rotaatioryhmän  $D_3$  ja ryhmän  $\mathcal{S} = (E, \sigma_h)$  suora tulo. Operaatio  $\sigma_h$  on heijastus kolmion tasossa. Tämä suoratuloryhmä,  $D_{3h} = D_3 \otimes \mathcal{S}$ , on äärellisen paksuuden omaavan tasasivuisen kolmion symmetriaryhmä. Alkuperäisen kuuden alkion asemasta siinä on kaksitoista alkioita johtuen heijastuksesta. Ryhmien  $D_3$  ja  $\mathcal{S}$  alkiot kommutoivat, koska on samantekevää suoritetaanko rotaatio ensin ja heijastus sitten tai päinvastoin. Ryhmä  $\mathcal{S}$  on Abelin ryhmä, joten sillä on kaksi yksidimensioista esitystä. Sen karakteritaulu on muotoa

$\mathcal{S}$	$E$	$\sigma_h$
$\Gamma^+$	1	1
$\Gamma^-$	1	-1

Suoratuloryhmän karakteritaulu sisältää 36 alkioita:

$D_{3h}$	$E$	$A, B, C$	$D, F$	$\sigma_h$	$\sigma_h(A, B, C)$	$\sigma_h(D, F)$
$\Gamma^{(1+)}$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2+)}$	1	-1	1	1	-1	1
$\Gamma^{(3+)}$	2	0	1	2	0	-1
$\Gamma^{(1-)}$	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma^{(2-)}$	1	-1	1	-1	1	-1
$\Gamma^{(3-)}$	2	0	-1	-2	0	1

### Suoratuloryhmän esitykset ryhmän sisällä

Suoraa tuloa voidaan käyttää myös ryhmän sisällä uusien esitysten muodostamiseen.

Muodostetaan esitys  $\Gamma$  ryhmän  $G$  esityksistä  $\Gamma^1$  ja  $\Gamma^2$ . Tämä tehdään käyttämällä kantafunktioina esitysten  $\Gamma^1$  ja  $\Gamma^2$  kantafunktioiden

$$\phi_1, \dots, \phi_n \text{ ja } \psi_1, \dots, \psi_m$$

kaikkia mahdollisia tuloja. Esitysten dimensiot ovat  $n$  ja  $m$ . Silloin funktiot  $\phi_\kappa \psi_\lambda$  muodostavat esityksen  $\Gamma$   $nm$ -dimensioisen kannan.

Tämän voi todeta operoimalla  $P_R$  operaattorilla kantaan

$$\begin{aligned} P_R(\phi_\kappa \psi_\lambda) &= \sum_{\kappa'} \phi_{\kappa'} \Gamma^1(R)_{\kappa' \kappa} \sum_{\lambda'} \psi_{\lambda'} \Gamma^2(R)_{\lambda' \lambda} \\ &= \sum_{\kappa' \lambda'} \phi_{\kappa'} \psi_{\lambda'} [\Gamma^1(R)_{\kappa' \kappa} \Gamma^2(R)_{\lambda' \lambda}] \\ &= \sum_{\kappa' \lambda'} \phi_{\kappa'} \psi_{\lambda'} \Gamma(R)_{\kappa' \lambda', \kappa \lambda} \end{aligned}$$

missä  $\Gamma(R) = \Gamma^1(R) \otimes \Gamma^2(R)$ .

Kuten edellä uuden esityksen karakterit saadaan entisten karakterien tulona

$$\chi(R) = \chi^1(R) \chi^2(R).$$

Tärkeä ero aikaisempaan on, että esitys  $\Gamma$  on redusoituva, eli

$$\Gamma^i(R) \otimes \Gamma^j(R) = \sum_k a_{ijk} \Gamma^k(R)$$

Tämä merkintä tarkoittaa sitä, että suoratuloesitys  $\Gamma^i(R) \otimes \Gamma^j(R)$  redusoidaan blokkimuotoon ja kukin esitys  $\Gamma^k(R)$  esiintyy siinä  $a_{ijk}$  kertaa.

Kertoimet  $a_{ijk}$  saadaan laskettua, kuten aikaisemminkin, karakterien avulla. Koska

$$\chi(R) = \chi^i(R) \chi^j(R) = \sum_k a_{ijk} \chi^k(R)$$

niin

$$\begin{aligned} a_{ijk} &= \frac{1}{h} \sum_R \chi^i(R) \chi^j(R) \chi^{k*}(R) \\ &= \frac{1}{h} \sum_l N_l \chi^i(C_l) \chi^j(C_l) \chi^{k*}(C_l), \end{aligned}$$

missä summaus käy yli luokkien  $C_l$  ja  $N_l$  on luokkaluku. Yleensä karakterit ovat reaalisia ja silloin kertoimet  $a_{ijk}$  ovat riippumattomia indeksien järjestyksestä.

**Esimerkki:** Tarkastellaan paikkoihin  $x_1$  ja  $x_2$  sijoitettuihin hiukkasiin kohdistuvaa kolmidimensioista rotaatiota  $P_R$ :

$$\begin{aligned}
 P_R \Psi_\lambda^{(i)}(\mathbf{x}_1) &= \sum_{\mu=1}^{l_i} D_{\mu\lambda}^{(i)}(R) \Psi_\mu^{(i)}(\mathbf{x}_1) \\
 P_R \Psi_\kappa^{(j)}(\mathbf{x}_2) &= \sum_{\nu=1}^{l_j} D_{\nu\kappa}^{(j)}(R) \Psi_\nu^{(j)}(\mathbf{x}_2) \quad (332)
 \end{aligned}$$

Kun operaattorilla  $P_R$  operoidaan kantafunktioiden tuloon, niin saadaan suoratuloryhmän esitysmatriisi

$$\begin{aligned}
 &P_R \left( \Psi_\lambda^{(i)}(\mathbf{x}_1) \Psi_\kappa^{(j)}(\mathbf{x}_2) \right) \\
 &= (P_R \Psi_\lambda^{(i)}(\mathbf{x}_1)) (P_R \Psi_\kappa^{(j)}(\mathbf{x}_2)) \\
 &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} D_{\mu\lambda}^{(i)}(R) D_{\nu\kappa}^{(j)}(R) \left( \Psi_\mu^{(i)}(\mathbf{x}_1) \Psi_\nu^{(j)}(\mathbf{x}_2) \right) \\
 &= \sum_{\mu\nu} \left( D^{(i)} \otimes D^{(j)} \right)_{\mu\nu, \lambda\kappa} \left( \Psi_\mu^{(i)}(\mathbf{x}_1) \Psi_\nu^{(j)}(\mathbf{x}_2) \right).
 \end{aligned}$$

Aaltofunktioiden

$$\Psi^{(k)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu}^{ijk} \left( \Psi_\mu^{(i)}(\mathbf{x}_1) \Psi_\nu^{(j)}(\mathbf{x}_2) \right) \quad (333)$$

muodostamassa kannassa suora tulo  $D^{(i)}(R) \otimes D^{(j)}(R)$  on redusoidussa blokkimuodossa

$$D^{(i)}(R) \otimes D^{(j)}(R) = \sum_k a_{ijk} D^{(k)}(R). \quad (334)$$

Kertoimet  $C^{ijk}$  ovat kvanttimekaniikasta tuttuja Clebsch-Gordanin kertoimia.