Wykład IV

Rozkład reprezentacji redukowalnej

Reprezentacje grupy skończonej lub grupy zwartej są całkowicie redukowalne do postaci sumy prostej reprezentacji nieredukowalnych. Macierze reprezentacji mają postać bloków

$$\begin{pmatrix} \boxed{\;\;\;} & & & 0 \\ 0 & \boxed{\;\;} & & 0 \\ 0 & & \boxed{\;} & 0 \\ 0 & & & \boxed{\;\;\;} \end{pmatrix}$$

$$D = \sum_{\oplus} a_\nu D^{(\nu)}$$

$\leftarrow$ ile razy dana „repnier" pojawia się w rozkładzie na reprezentacje nieredukowalne

$$\chi(g) = \sum_\nu a_\nu \chi^{(\nu)}(g)$$

$$\chi(g)\chi^{(\mu)}(g^{-1}) = \sum_\nu a_\nu \chi^{(\nu)}(g)\chi^{(\mu)}(g^{-1})$$

$$\sum_g \chi(g)\chi^{(\mu)}(g^{-1}) = \sum_\nu a_\nu \underbrace{\sum_g \chi^{(\nu)}(g)\chi^{(\mu)}(g^{-1})}_{|G|\delta^{\mu\nu}}$$

$$\sum_g \chi(g)\chi^{\mu}(g^{-1}) = |G| a_\mu$$

$$a_\mu = \frac{1}{|G|}\sum_g \chi(g)\chi^{(\mu)}(g^{-1})$$

Sprawdzając, czy istnieją $\mu \neq \nu$, takie że $a_\mu \neq 0$ i $a_\nu \neq 0$, możemy odpowiedzieć na pytanie czy dana reprezentacja jest redukowalna

Wyprowadzimy prostszy warunek konieczny i wystarczający, by reprezentacja była nieredukowalna. Liczymy dla dowolnej reprezentacji D $\sum_i k_i |\chi_i|^2$

$$\chi_i = \sum_\mu a_\mu \chi_i^{(\mu)} = \sum_\nu a_\nu \chi_i^{(\nu)}$$

$$\sum_i k_i |\chi_i|^2 = \sum_i k_i \sum_\mu a_\mu \chi_i^{(\mu)} \sum_\nu a_\nu^* \chi_i^{(\nu)*}$$

$$= \sum_{\mu,\nu} a_\mu a_\nu^* \underbrace{\sum_i k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)*}}_{|G|\delta_{\mu\nu}} = |G| \sum_\mu |a_\mu|^2$$

D jest nieredukowalna wtedy i tylko wtedy, gdy tylko jeden $a_\mu = 1$, a pozostałe są równe zero. Dlatego mamy kryterium nieredukowalności

$$\sum_i k_i |\chi_i|^2 = |G|$$

Reprezentacja regularna

$$g g_i = \sum_{j=1}^{|G|} D_{ji}(g) g_j \qquad g \to D(g)$$

$$g_1 g_i = \sum_{j=1}^{|G|} D_{ji}(g_1) g_j \qquad g_1 \to D(g_1)$$

$$g_2 g_i = \sum_{j=1}^{|G|} D_{ji}(g_2) g_j \qquad g_2 \to D(g_2)$$

$$(g_1 g_2) g_i = \sum_{j=1}^{|G|} D_{ji}(g_1 g_2) g_j \equiv \sum_{k}^{|G|} D_{ki}(g_1 g_2) g_k$$

$$(g_1 g_2) g_i = g_1 (g_2 g_i) =$$

$$g_1 \left(\sum_{j=1}^{|G|} D_{ji}(g_2) g_j \right) \overset{!}{=}$$

$$= \sum_{j}^{|G|} D_{ji}(g_2) g_1 g_j =$$

$$= \sum_{j}^{|G|} D_{ji}(g_2) \sum_{k}^{|G|} D_{kj}(g_1) g_k =$$

$$= \sum_{k}^{|G|} \underbrace{\sum_{j}^{|G|} D_{kj}(g_1) D_{ji}(g_2)}_{(D(g_1) D(g_2))_{ki}} g_k$$

$$(D(g_1) D(g_2))_{ki}\, g_k$$

$$D(g_1 g_2) = D(g_1) D(g_2)$$

Mamy homomorfizm (w sensie macierzy), więc reprezentacja regularna jest reprezentacją.

$$g_k = g g_i = D_{1i}(g) g_1 + D_{2i}(g) g_2 + \dots +$$

$$+ D_{ii}(g) g_i + \dots + D_{|G|i} g_{|G|}$$ 53 4/

Macierze $D(g)$ zawierają zera i jedynki (*)

$$g g_i = g_i \quad / g_i^{-1}$$

$$g = e$$

Dlatego dla $g \neq e$ macierze mają zera na diagonalnej

Dla $g = e$ $\quad g g_i = g_i$, więc

$D_{ij}(e) = \delta_{ij}$, co oznacza, że macierz $D(e)$ jest macierzą identycznościową.

(*) Dlatego zapis (!) z poprzedniej strony ma sens

Rozłóżmy reprezentację regularną na reprezentacje nieredukowalne

$$D = \sum_{\oplus} a_\nu D^{(\nu)}$$

$$a_\mu = \frac{1}{|G|} \sum_g \chi(g) \chi^{(\mu)}(g^{-1}) \text{, ale}$$

$$\chi(g) = \begin{cases} 0, & g \neq e \\ |G|, & g = e \end{cases}$$

$$a_\mu = \frac{1}{|G|} |G| \underbrace{\chi^{(\mu)}(e)}_{\text{ślad macierzy identycznościowej } n_\mu \times n_\mu} = n_\mu$$

$$\chi(g) = \sum_\nu a_\nu \chi^{(\nu)}(g)$$

Dla $g = e$

$$|G| = \sum_\nu a_\nu n_\nu = \sum_\nu n_\nu n_\nu = \sum_\nu n_\nu^2$$

Dla $g \neq e$

$$0 = \sum_\nu a_\nu \chi^{(\nu)}(g) = \sum_\nu n_\nu \chi^{(\nu)}(g)$$

Oba wyniki można zapisać łącznie w postaci jednego wzoru:

$$\frac{1}{|G|} \sum \chi^{(\nu)}(e) \chi^{(\nu)}(g) = \begin{cases} 0, & g \neq e \\ 1, & g = e \end{cases}$$

Konstrukcja tabeli charakterów dla grupy skończonej

Przykład

C_3	e	c	c^2
$D^{(1)}$			
$D^{(2)}$			
$D^{(3)}$			

wiersze odpowiadają różnym reprezentacjom nieredukowalnym, a kolumny klasom sprzężenia grupy

Podstawowe narzędzia

(1) liczba niezależnych reprezentacji nieredukowalnych jest równa liczbie klas sprzężenia: $r = k$

(2) $\sum_{\mu} n_\mu^2 = |G|$

(3) $\sum_i k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)*} = |G| \delta^{\mu\nu}$

(4) Inne informacje o grupie

Uwaga:
Wszystkie reprezentacje nieredukowalne grupy abelowej są jednowymiarowe

Dowód I:

$D^{(\sigma)}(g)$ komutuje ze wszystkimi macierzami $D^{(\sigma)}(g')$ i dlatego z I Lematu Schura musi być wielokrotnością macierzy jednostkowej $D^{(\sigma)}(g) = \lambda_g^{(\sigma)} \mathbb{1}$, więc wszystkie macierze $D^{(\sigma)}(g)$ są diagonalne. Jeśli więc ich rozmiar byłby większy od 1, to byłyby redukowalne. Ten dowód jest słuszny także dla grupy nieskończonej, ale zwartej.

Dowód II:

Dowód dla grupy skończonej opiera się na fakcie, że klasy sprzężenia są jednoelementowe. W takim razie $k = |G| = r$, więc $\sum_\mu n_\mu^2 = |G| \rightarrow \sum_{\mu=1}^{|G|} n_\mu^2 = |G|$

$$\sum_{\mu=1}^{|G|} n_\mu^2 = |G|$$

a to jest możliwe tylko wtedy, gdy $n_\mu = 1$ dla wszystkich n_μ

str 69

Rozważamy tabelę charakterów abelowej grupy $C_3 = \{e, c, c^2\}$, $c^3 = e$

Charaktery jednowymiarowych reprezentacji muszą naśladować mnożenia grupowe

$(\chi(c))^3 = \chi(c^3) = \chi(e) = 1$

$\chi(c)$ musi być pierwiastkiem trzeciego stopnia z jedynki: $1, e^{i\frac{2\pi}{3}}, e^{i\frac{4\pi}{3}}$

C_3	e	c	c^2
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	ω	ω^2
$D^{(3)}$	1	ω^2	ω

$\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$

$\omega^2 = e^{i\frac{4\pi}{3}}$

$\omega^* = e^{-i\frac{2\pi}{3}} = e^{-i\frac{2\pi}{3} + i\frac{6\pi}{3}} = e^{i\frac{4\pi}{3}} = \omega^2$

$(\omega^*)^2 = e^{-\frac{i4\pi}{3} + \frac{6\pi i}{3}} = e^{i\frac{2\pi}{3}} = \omega$

$D^{(1)}$ reprezentacja trywialna w krystalograficznej notacji oznaczana literą A

$D^{(2)} = (D^{(3)})^*$ i są wspólnie oznaczane literą E.

ortogonalność charakterów

$\langle \chi^{(1)}, \chi^{(2)} \rangle = \frac{1}{3}(1 + \omega + \omega^2) = 0$, bo

$z^3 - 1 = (z-1)(z^2 + z + 1)$

$\langle \chi^{(1)}, \chi^{(3)} \rangle = \frac{1}{3}(1 + \omega + \omega^2) = 0$

$\langle \chi^{(2)}, \chi^{(3)} \rangle = \frac{1}{3}(1 + \omega^2\omega^* + \omega(\omega^*)^2) =$

$= \frac{1}{3}(1 + \omega^4 + \omega^2) = \frac{1}{3}(1 + \omega + \omega^2) = 0$

Reprezentacja "wektorowa" grupy C_3, χ^V

$$D(e)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad D(c)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

58

$$D(c^2)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$\chi^V(e)=3,\quad \chi^V(c)=\chi^V(c^2)=0$$

$$\chi^V=a_1\chi^{(1)}+a_2\chi^{(2)}+a_3\chi^{(3)}$$

$$a_\nu=\langle\chi^V,\chi^{(\nu)}\rangle=\frac{1}{3}\left(3\chi^{(\nu)}(e)\right)=1$$

$$D^V=D^{(1)}\oplus D^{(2)}\oplus D^{(3)}$$

Kombinacje współrzędnych, przy których D^V działa nieprzywiedlnie:

z, $x+iy$, $x-iy$

Inny przykład (zadanie 5 z zestawu 3) 58/

$U_1 = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix}$, $U_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, $U_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

stanowią redukowalną reprezentację C_3

$D(e) = U_1$, $D(c) = U_2$, $D(c^2) = U_3$

$\chi = (3, 0, 0) \equiv (Tr(U_1), Tr(U_2), Tr(U_3))$

$\chi^{(1)} = (1, 1, 1)$

$\chi^{(2)} = (1, \omega, \omega^2)$ $\qquad \omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$

$\chi^{(3)} = (1, \omega^2, \omega)$

χ można po prostu zapisać w postaci $\chi = \chi^{(1)} + \chi^{(2)} + \chi^{(3)}$, bo zachodzi

$$(3, 1+\omega+\omega^2, 1+\omega^2+\omega) = (3, 0, 0)$$

Dlatego $D = D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(3)}$

Tabela charakterów dla grupy D_3

$D_3 = \{e, c, c^2, b, bc, bc^2\}$, $|D_3| = |G| = 6$

$c^3 = b^2 = (bc)^2 = e$

Klasy sprzężenia

(e), (c, c^2), $(b, bc\, bc^2)$

K_1 K_2 K_3

Mamy trzy klasy, a więc trzy nierównoważne reprezentacje nieredukowalne. Zachodzi

$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$

$n_1 = 1$ dla reprezentacji trywialnej $D^{(1)}$

$n_2^2 + n_3^2 = 5$

$n_2 = 1, n_3 = 2$ (albo vice versa)

D_3	K_1	K_2	K_3
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1		
$D^{(3)}$	2		

$\chi^{(\mu)}(e) = n_\mu$

Dla reprezentacji jednowymiarowej charaktery naśladują mnożenie grupowe

$\chi(bc) = \chi(b)\,\chi(c)$ } Najpierw reprezentacje jednowymiarowe 60

$\chi(b) = \chi(bc) = \chi_3$ } $\Rightarrow \chi_c = \chi_2 = 1$ dla $D^{(1)}$ i $D^{(2)}$

$(\chi(b))^2 = \chi(b^2) = \chi(e) = 1 \Rightarrow \chi_3 = \pm 1$

Znak "+" daje reprezentację trywialną, więc musimy wybrać -1 w $D^{(2)}$

$$\sum_i k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)*} = |G|\delta^{\mu\nu}$$

Mamy więc

D_3	K_1 ($k_1=1$)	K_2 ($k_2=2$)	K_3 ($k_3=3$)
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	-1
$D^{(3)}$	2	α -1	β 0

$K_1 = (e)$, $K_2 = (c, c^2)$
$K_3 = (b, bc, bc^2)$

$$\begin{cases} 2 + 2\alpha + 3\beta = 0 \\ 2 + 2\alpha - 3\beta = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \beta = 0 \\ \alpha = -1 \end{cases}$$

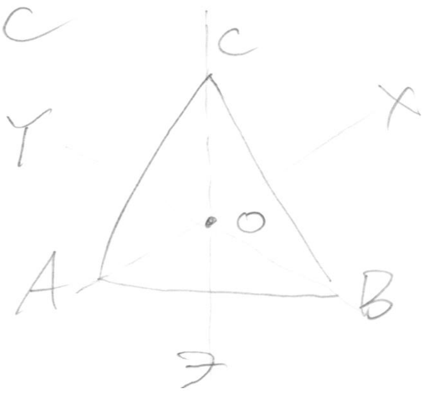
Rozkład reprezentacji wektorowej grupy D_3 na reprezentacje nieredukowalne

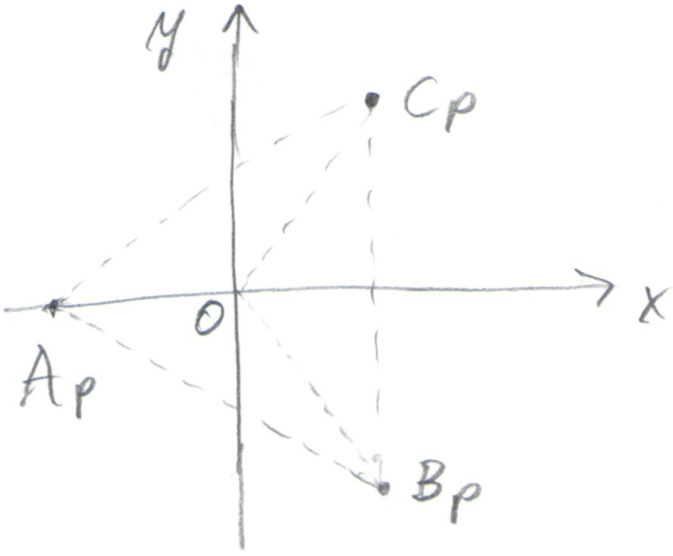
Rotacje o $180°$ OX $b_1 = b$

OY $b_2 = bc$

OZ $b_3 = bc^2$

Rotacja o $120°$ wokół punktu O w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara : c





$|A_pB_p| = |B_pC_p| = |C_pA_p| = 1$

h – wysokość trójkąta $A_pB_pC_p$

$$h = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$A_p = \left(-\tfrac{2}{3}h, 0, 0\right)$$

$$B_p = \left(\tfrac{1}{3}h, -\tfrac{1}{2}, 0\right)$$

$$C_p = \left(\tfrac{1}{3}h, \tfrac{1}{2}, 0\right)$$

c – obrót o 120° wokół osi z

$$c = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Tr(c) = 0$$

$$c(B_p) = C_p, \quad c(C_p) = A_p, \quad c(A_p) = B_p$$

b – obrót o 180° wokół osi z

$$b(B_p) = C_p, \quad b(C_p) = B_p, \quad b(A_p) = A_p$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad Tr(b) = -1$$

$$e = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Tr(e) = 3$$

W takim razie wektor charakterów reprezentacji D^V ma postać

$$\chi^V = \underset{e}{(3}, \underset{c}{0}, \underset{b}{-1})$$

$$\chi^V = \chi^{(2)} + \chi^{(3)} = (1,1,-1) + (2,-1,0)$$

$$D^V = D^{(2)} \oplus D^{(3)}$$

W notacji krystalograficznej

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	−1
E	2	−1	0

Iloczyn prosty reprezentacji

Rozważamy układ dwóch cząstek, na przykład elektronów w atomie, opisywany przez przestrzenne funkcje falowe $\varphi_a(\vec{x}), \varphi_b(\vec{x})$, które transformują się zgodnie z nieredukowalnymi reprezentacjami $D^{(\mu)}$ i $D^{(\nu)}$ pewnej grupy G.

Zmiana funkcji falowej indukowana transformacją $g \in G$

$$\psi'_a(\vec{x}) = D^{(\mu)}_{ba}(g)\,\psi_b(\vec{x})$$

$$\varphi'_c(\vec{x}) = D^{(\nu)}_{dc}(g)\,\varphi_d(\vec{x})$$

Funkcja falowa iloczynu $\Psi_{ac}(\vec{x}) = \psi_a(\vec{x})\,\varphi_c(\vec{x})$ transformuje się tak

$$\Psi'_{ac}(\vec{x}) = \underbrace{D^{(\mu)}_{ba}(g)\,D^{(\nu)}_{dc}}(g)\,\Psi_{bd}(\vec{x})$$

To możemy potraktować jako pojedynczą macierz, której pierwszym indeksem jest para $(bd) := B$, a drugim para $(ac) := A$ i w ten sposób powstaje macierz iloczynu reprezentacji

$$D^{(\mu\times\nu)}_{bd,ac}(g) = D^{(\mu)}_{ba}(g)\,D^{(\nu)}_{dc}(g)$$

$$\Psi'_A(\vec{x}) = D^{(\mu\times\nu)}_{BA}(g)\,\Psi_B(\vec{x})$$

Można pokazać, że zachodzi warunek podstawowy:

$$D^{(\mu\times\nu)}(g_1 g_2) = D^{(\mu\times\nu)}(g_1)\,D^{(\mu\times\nu)}(g_2)$$

$$\psi'_a(\vec{x}) = D^{\mu}_{ba}(g_1 g_2)\,\psi_b(\vec{x})$$

$$\varphi'_c(\vec{x}) = D^{\nu}_{dc}(g_1 g_2)\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$\psi'_a(\vec{x}) = D^{\mu}_{ba'}(g_1)\,D^{\mu}_{a'a}(g_2)\,\psi_b(\vec{x})$$

$$\varphi'_c(\vec{x}) = D^{\nu}_{dc'}(g_1)\,D^{\nu}_{c'c}(g_2)\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$\psi'_a(\vec{x})\,\varphi'_c(\vec{x}) = D^{\mu}_{ba'}(g_1)\,D^{\nu}_{dc'}(g_1)\,D^{\mu}_{a'a}(g_2)\,D^{\nu}_{c'c}(g_2)\,\psi_b(\vec{x})\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$= D^{(\mu\times\nu)}_{bd,a'c'}(g_1)\,D^{(\mu\times\nu)}_{a'c',ac}(g_2)\,\psi_b(\vec{x})\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$= D^{\mu}_{ba}(g_1 g_2)\,D^{\nu}_{dc}(g_1 g_2)\,\psi_b(\vec{x})\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$\equiv D^{(\mu\times\nu)}_{bd,ac}(g_1 g_2)\,\psi_b(\vec{x})\,\varphi_d(\vec{x})$$

$$D^{(\mu\times\nu)}_{bd,ac}(g_1 g_2) = \sum_{a',c'} D^{(\mu\times\nu)}_{bd,a'c'}(g_1)\,D^{(\mu\times\nu)}_{a'c'}(g_2)$$

Przy zaniedbaniu oddziaływania między elektronami mamy symetrię $G \times G$; system jest niezmienniczy względem niezależnych rotacji g_1, g_2 dwóch elektronów.

Macierz, która daje taką transformację ma postać

$$D^{(\mu \times \nu)}_{bd,ac}\big((g_1, g_2)\big) := D^{(\mu)}_{ba}(g_1) D^{(\nu)}_{dc}(g_2)$$

Wtedy $D^{(\mu)} \otimes D^{(\nu)}$ zdefiniowana powyżej jest nieredukowalną reprezentacją grupy iloczynowej $G \times G$.

Kiedy jednak bierzemy pod uwagę oddziaływanie między elektronami, symetria jest zredukowana do samej grupy G, gdzie ta sama rotacja jest zastosowana do obu elektronów: $g_1 = g_2 = g$.
W takim przypadku reprezentacja iloczynowa w ogólnym przypadku jest redukowalna!

$$D^{(\mu)} \otimes D^{(\nu)} = \sum_{\oplus} a_\sigma D^{(\sigma)}$$

Ten rozkład nazywamy szeregiem Clebscha-Gordana.

Znowu używamy charakterów

$$\chi^{(\mu\times\nu)}(g) = \sum_A D^{(\mu\times\nu)}_{AA}(g) = \sum_{a,c} D^{(\mu\times\nu)}_{ac,ac}(g)$$

$$= \sum_a \sum_c D^{(\mu)}_{aa}(g)\, D^{(\nu)}_{cc}(g) =$$

$$= \left(\sum_a D^{(\mu)}_{aa}(g)\right)\left(\sum_c D^{(\nu)}_{cc}(g)\right) =$$

$$= \chi^{(\mu)}(g)\,\chi^{(\nu)}(g)$$

$$a_\sigma = \langle \chi^{(\sigma)}, \chi^{(\mu)}\chi^{(\nu)} \rangle$$ iloczyn skalarny charakterów

Przykład

$E \otimes E$ w D_3, $E \equiv D^{(3)}$

$\chi^E = (2, -1, 0)$

$\chi^{E\times E} = (4, 1, 0)$

$a_1 = \frac{1}{6}(1\cdot 1\cdot 4 + 2\cdot 1\cdot 1 + 3\cdot 1\cdot 0) = 1$

$a_2 = \frac{1}{6}(1\cdot 1\cdot 4 + 2\cdot 1\cdot 1 + 3(-1)\cdot 0) = 1$

$a_3 = \frac{1}{6}(1\cdot 2\cdot 4 + 2(-1)\cdot 1 + 3\cdot 0\cdot 0) = 1$

$\chi^{E\otimes E} = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 \Rightarrow E\otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E$