PŘÍMÝ SOUČIN REPREZENTACÍ

Věta 24: Nechť ψ_j^a tvoří bázi d_a-rozměrné repre ρ^a grupy G $\left[T(g)\psi_j^a = \sum_{i=1}^{d_a}\psi_i^a D^a(g)_{ij}\right]$ a nechť φ_l^b tvoří bázi d_b-rozměrné repre ρ^b téže grupy $\left[T(g)\varphi_l^b = \sum_{k=1}^{d_b}\varphi_k^b D^b(g)_{kl}\right]$.

Potom $\psi_j^a\varphi_l^b$ tvoří bázi nové reprezentace $\rho^{(a\times b)} = \rho^a \otimes \rho^b$, kterou říkáme přímý (direktní) součin reprezentací a platí

$$T(g)\psi_j^a\varphi_l^b = \sum_{ik}\psi_i^a\varphi_k^b D^a(g)_{ij} D^b(g)_{kl} = \sum_{ik}\psi_i^a\varphi_k^b D^{(a\times b)}(g)_{ik,jl}$$

kde matice $D^{(a\times b)}(g)$ je přímým součinem matic

$$D^{(a\times b)}(g) = D^a(g)\otimes D^b(g) = \left(\begin{array}{c|c|c} D^a_{11}D^b & D^a_{12}D^b & \cdots \\ \hline D^a_{21}D^b & \ddots & \\ \vdots & & D^a_{d_a d_a}(g)D^b \end{array}\right)$$

- dimenze $\rho^{(a\times b)}$ je $d_a \times d_b$
- bázi $\rho^{(a\times b)}$ řadíme takto: $(\psi_1^a\varphi_1^b, \psi_1^a\varphi_2^b, \dots, \psi_1^a\varphi_{d_b}^b, \dots, \psi_{d_a}^a\varphi_{d_b}^b)$
- $D^{(a\times b)}(g)$ skutečně přenáší grupovou operaci:

$$(A\otimes B)(A'\otimes B') = (AA')\otimes(BB')$$

$$\Rightarrow D^{(a\times b)}_{ik,jl}(g_1 g_2) = \sum_{\alpha\beta} D^{(a\times b)}(g_1)_{ik,\alpha\beta}\, D^{(a\times b)}(g_2)_{\alpha\beta,jl}$$

- ρ^a, ρ^b jsou obvykle IR, ale ne nezbytně
- i pro ρ^a, ρ^b IR je $\rho^{(a\times b)}$ obecně reducibilní

• charakter přímého součinu reprezentací

$$\boxed{\chi^{\mu\times\nu}(g) = \sum_{ik} D^{\mu\times\nu}(g)_{ik,ik} = \sum_{ik} D^{\mu}(g)_{ii} D^{\nu}(g)_{kk} = \chi^{\mu}(g)\,\chi^{\nu}(g)}\,.$$

• zde sym/antisym. součiny – str. 60

Použití

a, tabulky charakterů – transformace kvadratických (...) funkcí

• vezměme dvě (různé) báze vektorové reprezentace $\rho^{(x,y,z)_{1,2}}$

$\Rightarrow$ rozklad reprezentace $\rho^{(x,y,z)_1} \otimes \rho^{(x,y,z)_2}$

$\Rightarrow$ adaptace báze pomocí symetrizačních operátorů

• báze dvou vec. reprezentací bereme různé a lin. nezávislé

$[x_1 y_2 - y_1 x_2 \neq 0 \; (= R_z)]$

b, mnoho-částicové systémy

Př. atom He bez spinu

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} = H_1 + H_2 + V_{int}$$

• e^- neinteragují ($V_{int} = 0$) $\Rightarrow$ vl. fce H jsou součinem vl. fcí H_1 a H_2

$\Rightarrow |\Psi(r_1, r_2)\rangle = |n_1 l_1 m_1\rangle |n_2 l_2 m_2\rangle$

$\Rightarrow$ grupa symetrie je $SO(3) \otimes SO(3)$ (r_1, r_2 se transformují nezávisle)

$\Rightarrow$ pro konkrétní $n_1 l_1, n_2 l_2$ dostáváme bázi $(2l_1+1)(2l_2+1)$-rozměrné IR grupy $SO(3) \otimes SO(3)$

• e^- interagují ($V_{int} \neq 0$)

$\Rightarrow$ grupa symetrie je jen $SO(3)$ $\Rightarrow$ reprezentace definovaná bází $|n_1 l_1 m_1\rangle |n_2 l_2 m_2\rangle$ je reducibilní a rozkládá se na IR definované celkovým impulsmomentem L

c, výběrová pravidla pro maticové elementy tenzorových operátorů

– Wignerův - Eckartův teorém

Symetrické a anti-symetrické součiny dvou stejných reprezentací:

- ψ_j, φ_ℓ dvě různé báze téže maticové reprezentace $D(g) \Rightarrow$

$$\left.\begin{aligned} T(g)(\psi_j \varphi_\ell) &= \sum_{ik} \psi_i \varphi_k D(g)_{ij} D(g)_{k\ell} \\ T(g)(\psi_\ell \varphi_j) &= \sum_{ik} \psi_i \varphi_k D(g)_{i\ell} D(g)_{kj} \end{aligned}\right\} +,-$$

$\Downarrow$

$$T(g)(\psi_j \varphi_\ell + \psi_\ell \varphi_j) = \sum_{ik} \psi_i \varphi_k \left(D(g)_{ij} D(g)_{k\ell} + D(g)_{i\ell} D(g)_{kj}\right) \underset{\text{sym v } i \leftrightarrow k}{=}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ik} (\psi_i \varphi_k + \psi_k \varphi_i)(D(g)_{ij} D(g)_{k\ell} + D(g)_{i\ell} D(g)_{kj})$$

$$T(g)(\psi_j \varphi_\ell - \psi_\ell \varphi_j) = \frac{1}{2} \sum_{ik} (\psi_i \varphi_k - \psi_k \varphi_i)(D(g)_{ij} D(g)_{k\ell} - D(g)_{i\ell} D(g)_{kj})$$

$\Rightarrow$ symetrické a anti-sym. součiny bázových vektorů se transformují na sebe $\Rightarrow$ generují invariantní podprostory

$$\rho \otimes \rho = \{\rho \otimes \rho\} \oplus [\rho \otimes \rho]$$

- symetrický součin $\{\ \}$: $\{j\ell \mid j \le \ell\} \Rightarrow \dim = \frac{1}{2} d(d+1)$
- antisym. – " – $[\ ]$: $\{j,\ell \mid j < \ell\} \Rightarrow \dim = \frac{1}{2} d(d-1)$

- charaktery (D.cv):

$$\chi^{\{\rho\otimes\rho\}}(g) = \frac{1}{2}\left[\chi(g)^2 + \chi(g^2)\right]$$

$$\chi^{[\rho\otimes\rho]}(g) = \frac{1}{2}\left(\chi(g)^2 - \chi(g^2)\right)$$

Př: ρ je vektorová repre $O(3) \Rightarrow d = 3$

$\{\rho\otimes\rho\}$ je 6-dim reducibilní repre $\rho^s \oplus \rho^d$

$[\rho\otimes\rho]$ je 3-dim pseudovec. repre $\rho^{\vec{R}}$

- pro $SO(3)$ je $[\rho\otimes\rho]$ opět vektorová repre

Rozklad přímého součinu:

Clebschova-Gordanova řada, C-G koeficienty

$$\Gamma^{(\mu\times\nu)} = \sum_\sigma \oplus n_\sigma^{\mu\times\nu}\, \Gamma^\sigma \qquad \Rightarrow n_\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{\#G}\sum_g \chi^\sigma(g)^* \chi^\mu(g)\chi^\nu(g) \equiv (\mu\nu\sigma)$$

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

$\Rightarrow$ Clebsch-Gordan řada $\qquad \Gamma^{(\mu\times\nu)} = \bigoplus_\sigma (\mu\nu\sigma)\,\Gamma^\sigma$

- koeficienty ~~(kg)~~ $(\mu\nu\sigma)$ jsou jednoznačně určeny pro lib. konečnou nebo komp. Lieovu G ($\sum_g \to \int dg$)
- $(\nu\mu\sigma) = (\mu\nu\sigma)$

Př:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	−1
E	2	−1	0

$\Rightarrow$

$\Gamma^{(\mu\times\nu)}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A_1\otimes A_1$	1	1	1	$= A_1$
$A_1\otimes A_2$	1	1	−1	$\Rightarrow A_2$
$A_1\otimes E$	2	−1	0	$\Rightarrow E$
$A_2\otimes A_2$	1	1	1	$\Rightarrow A_1$
$A_2\otimes E$	2	−1	0	$\Rightarrow E$
$E\otimes E$	4	1	0	$\Rightarrow E+A_1+A_2$
$[E\otimes E]$	3	0	1	$\Rightarrow E+A_1$
$\{E\otimes E\}$	1	1	−1	$\Rightarrow A_2$

g^2	E	C_3	$E=\sigma_v^2$
E	2	−1	2

např.:
$(E\,E\,A_1) = 1$ resp.
$(E\,E\,\cdot) = 1$; $(A_2\,E\,E) = 1$
a $(A_2\,E\,\cdot) = 0$ jinak

M ✓

- báze ~~respektující~~ invariantních podprostorů:

$$\{\varphi_j^\mu \varphi_l^\nu\} \to \{\Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma};\ s = 1,\dots,d_\sigma;\ \lambda_\sigma = 1,\dots,(\mu\nu\sigma)\}$$

chci LN báze pro jednotlivé výskyty Γ^σ v $\Gamma^\mu\otimes\Gamma^\nu$

$\Rightarrow$ Clebschovy-Gordanovy koeficienty

$$\Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma} = \sum_{jl} \varphi_j^\mu \varphi_l^\nu\, (\mu j, \nu l\,|\,\sigma\lambda_\sigma s) \quad \dots \text{(1) je matice } d_\mu d_\nu \times d_\mu d_\nu$$

- nejsou určeny jednoznačně: pro $(\mu\nu\sigma) = 1$ až na fázi $e^{i\omega}$,
pro $(\mu\nu\sigma) > 1$ až na unit. (transformaci) matici $(\mu\nu\sigma)\times(\mu\nu\sigma)$

Normalizace C-G koeficientů

- obvykle $\sum_{jl} |(\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)|^2 = 1$ ⊛

$$\Rightarrow (\Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma} | \Psi_{s'}^{\sigma',\lambda'_\sigma}) = \delta_{ss'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\lambda_\sigma\lambda'_\sigma} \quad \text{pro} \quad (\psi_j^\mu \varphi_l^\nu | \psi_{j'}^{\mu'} \varphi_{l'}^{\nu'}) = \delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \times \delta_{jj'}\delta_{ll'}$$

- zde předpokládáme ON $\psi_j^\mu, \varphi_l^\nu$; nemusí být splněno (např. pro fce z $L^2(\mathbb{R}^3)$ - gauss. báze v Qchem a podobně)

- pro ⊛ je $\Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma} = \sum_{jl} \psi_j^\mu \varphi_l^\nu (\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)$ unitární transformace

$\Rightarrow$ inverzní transformace

$$\psi_j^\mu \psi_l^\nu = \sum_{\sigma,\lambda_\sigma,s} (\sigma \lambda_\sigma s | \mu j, \nu l)\, \Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma} = \sum_{\sigma,\lambda_\sigma,s} (\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)^* \, \Psi_s^{\sigma,\lambda_\sigma}$$

Podmínky unitarity

$$\sum_{jl} (\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)^* (\mu j, \nu l | \sigma' \lambda'_\sigma s') = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\lambda_\sigma\lambda'_\sigma}\delta_{ss'}$$

$$\sum_{\sigma,\lambda_\sigma,s} (\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)^* (\mu j', \nu l' | \sigma \lambda_\sigma s) = \delta_{jj'}\delta_{ll'}$$

Pozn: (terminologie) C-G koeficienty pro O(3) ~ Wignerovy koef.

pro konečné G lze najít např. aplikací symetrizačních operátorů (pomocí $T(g)(\psi_i^{\alpha}\varphi_l^{\nu}) = \sum_{jk} \psi_j^{\alpha}\varphi_k^{\nu} D_{ji}^{\alpha} D_{kl}^{\nu}$)

Př: H_3^{+}, C_{3v}, $\underset{(1s)}{E} \otimes \underset{(2s)}{E} = A_1 \oplus A_2 \oplus E$

$$\psi_1^{E} = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\phi_1^{1s} - \phi_2^{1s} - \phi_3^{1s}\right) \qquad \varphi_1^{E} = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\phi_1^{2s} - \phi_2^{1s} - \phi_3^{1s}\right)$$

$$\psi_2^{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_2^{1s} - \phi_3^{1s}\right) \qquad \varphi_2^{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_2^{2s} - \phi_3^{2s}\right)$$

$D^{E}(g)$ viz str ~~51~~ 2 cvič. MO-LCAO (ψ, φ jsem konstruoval pomocí těchto matic $\Rightarrow$ je to báze právě těchto mat. repre)

- báze $E \otimes E$: $\{\psi_1^{E}, \psi_2^{E}\} \otimes \{\varphi_1^{E}, \varphi_2^{E}\}$ (4×4)

$$E \otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E \quad \Leftrightarrow \quad (EEA_1) = (EEA_2) = (EEE) = 1 \quad \text{- CG řada}$$

- báze A_1: $P^{A_1}\psi_1^{E}\varphi_1^{E} = \frac{1}{\#G}\sum_g \overset{1}{\chi^{A_1}(g)^{*}}\, T(g)(\psi_1^{E}\varphi_1^{E})$

$$= \frac{1}{6}\sum_g \sum_{jl=1}^{2} \psi_j^{E}\varphi_l^{E} D_{j1}^{E}(g) D_{l1}^{E}(g) = \frac{1}{6}\left(\cancel{\psi_1\varphi_1 \ldots}\right) \quad (6 \times 2 \times 2 \text{ členů})$$

$$= \frac{1}{6}\left(3\psi_1\varphi_1 + 3\psi_2\varphi_2\right) \Rightarrow \boxed{\psi^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^{E}\varphi_1^{E} + \psi_2^{E}\varphi_2^{E}\right)}$$

$$\Leftrightarrow (E1, E1 | A_1 11) = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad (E2, E2 | A_1 11) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(E1, E2 | A_1 11) = (E2, E1 | A_1 11) = 0$$

$$\boxed{\begin{aligned} \psi^{A_2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^{E}\varphi_2^{E} - \psi_2^{E}\varphi_1^{E}\right) \\ \psi_1^{E} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1\varphi_1 - \psi_2\varphi_2\right) \\ \psi_2^{E} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1\right) \end{aligned}}$$

← jediný antisym. součin (víme, že je to IR)

- ~~symetrické~~ a anti-sym. součiny: (alt. postup)

$\to [\psi_1\varphi_2 - \psi_2\varphi_1] \Rightarrow$ vím, že tohle je IR $\Rightarrow$ zbývá normalizace

$\to$ ~~sy~~ sym:
$$\left.\begin{matrix} \psi_1\varphi_1 \\ \psi_2\varphi_2 \\ \psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1 \end{matrix}\right\}$$ báze 3-dim. repre

- $C_{3v} \subset O(3)$, D jsou OG matice $\Rightarrow \sum_i \psi_i\varphi_i$ je invar. podprostor A_1:

$$T(g)\sum_i \psi_i\varphi_i = \sum_i \sum_{kl} \psi_k\varphi_l D_{ki} D_{li} = / D^T D = 1 / = \sum_{kl} \psi_k\varphi_l \sum_i D_{ki} (D^T)_{il}$$

$$= \sum_{kl} \psi_k\varphi_l \delta_{kl} = \sum_k \psi_k\varphi_k \Rightarrow$$ stopa tenzoru se zachovává

a $\psi_1\varphi_1 + \psi_2\varphi_2$ generuje invar. podprostor ~~s~~ úplně sym. repre $\Rightarrow A_1$

$\Rightarrow \psi_1\varphi_2 - \psi_2\varphi_1$ je A_2

- E je generována OG doplňkem:

$$\psi_1\varphi_1 - \psi_2\varphi_2$$
$$\psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1$$

$\boxtimes$