SYMETRICKÁ (permutační) grupa S_n

<u>Věta:</u> (Cayleyův teorém)
Každá konečná grupa řádu n je izomorfní nějaké podgrupě S_n.

<u>Pozn:</u> $\Leftrightarrow$ každý řádek multiplikativní tabulky odpovídá nějakému prvku S_n

- $(O(N))$, $U(N)$ ... úzký vztah s S_n $\Rightarrow$ reprezentace $U(N)$ s využitím vlastností S_n:
  - uvažme n-částicový systém, kde se každá částice může nacházet v N stavech
  - $\Rightarrow$ dovolené transformace jsou permutace n částic a unitární transformace na N-dim prostoru stavů pro každou částici

---

- <u>elementy grupy permutací, skládání permutací</u>

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ s_1 & s_2 & \dots & s_n \end{pmatrix} = \text{/na pořadí sloupců nezáleží/} = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ s_{p_1} & s_{p_2} & \dots & s_{p_n} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow SP = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ s_{p_1} & s_{p_2} & \dots & s_{p_n} \end{pmatrix} \in S_n$$

- obecně není komutativní

$$\Rightarrow P^{-1} = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix} \qquad E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ S_n je grupa, $\# S_n = n!$

$\Rightarrow$ $S_m \subset S_n \quad \forall m < n$

- <u>cyklus</u> délky l
  - permutace, která zachovává $n-l$ objektů invariantních a l jich posouvá při zachování pořadí

$$\Rightarrow P = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_{l-1} & p_l & p_{l+1} & \dots & p_n \\ p_2 & p_3 & \dots & p_l & p_1 & p_{l+1} & \dots & p_n \end{pmatrix} \equiv (p_1 \, p_2 \dots p_l)$$

- libovolnou permutaci lze rozložit na cykly:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 6 & 5 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} = (1\,3\,5)(2\,6\,4)$$

- délka cyklu l je nejmenší číslo takové, že $P^l = E$
  $\Rightarrow$ je to řád cyklu

- transpozice ... cyklus délky 2

- nezávislé cykly
  - nemají spol. prvek, jejich skládání je komutativní

$\Rightarrow$ rozklad permutace na nez. cykly je jednoznačný až na pořadí: vezmu $a_1 \to a_2 \to \dots$ v kon. množině nutně $\exists a_e \to a_1$:= cyklus A_e; vezmu $b_1 \notin A_e$, stejný argument $\Rightarrow$ takto rozdělím $\forall$ prvky do nez. cyklů

- násobení cyklů se společným prvkem (skládání)

$$(abcd)(def) = \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ b & c & d & a & e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ a & b & c & e & f & d \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a & b & c & e & f & d \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ a & b & c & e & f & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{(abcd)(def) = (abcdef)} \quad \circledast$$

(bude užitečné na obě strany)

- násobení cyklů s více společnými prvky

$$(a_1 \dots a_i\, c\, a_{i+1} \dots a_j\, d)(d\, b_1 \dots b_r\, c\, b_{r+1} \dots b_s)$$

$$\overset{\circledast}{=} (a_1 \dots a_i\, c)(c\, a_{i+1} \dots a_j\, d)(d\, b_1 \dots b_r\, c)(c\, b_{r+1} \dots b_s)$$

$$= (a_1 \dots a_i\, c)(a_{i+1} \dots a_j\, d\, c)(c\, d\, b_1 \dots b_r)(c\, b_{r+1} \dots b_s)$$

$$= (a_1 \dots a_i\, c\, b_{r+1} \dots b_s)(a_{i+1} \dots a_j\, d)\underbrace{(dc)(cd)}_{E}(d\, b_1 \dots b_r)$$

$$= (a_1 \dots a_i\, c\, b_{r+1} \dots b_s)(a_{i+1} \dots a_j\, d\, b_1 \dots b_r)$$

Třídy sdružených prvků

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ s_1 & s_2 & \cdots & s_n \end{pmatrix} \Rightarrow S^{-1} = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \cdots & s_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow SP = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ s_{p_1} & s_{p_2} & \cdots & s_{p_n} \end{pmatrix}$ $\Leftrightarrow$ 2. řádek P je S-permutován

$\Rightarrow PS = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ p_{s_1} & p_{s_2} & \cdots & p_{s_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S^{-1}(1) & S^{-1}(2) & \cdots & S^{-1}(n) \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$ $\Leftrightarrow$ 1. řádek P je S^{-1} permutován

$[p_{s_i} = p_j$ pro $S(i) = j \Rightarrow i = S^{-1}(j)]$

$$\boxed{SPS^{-1} = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \cdots & s_n \\ s_{p_1} & s_{p_2} & \cdots & s_{p_n} \end{pmatrix}}$$

$\Rightarrow SPS^{-1}$ odpovídá permutaci obou řádků P podle S

$\Rightarrow$ v notaci cyklů to znamená

$$S(a\ b\ c \cdots d)S^{-1} = (s_a\ s_b\ s_c \cdots s_d) = \begin{pmatrix} s_a & s_b & s_c & \cdots & s_d \\ s_b & s_c & \cdots & s_d & s_a \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ <u>permutace jsou sdružené právě tehdy, když mají stejnou strukturu cyklů</u>

- součin nezávislých cyklů je konjugací převeden opět na součin nezávislých cyklů

Př: $P = (1\,3\,5)(2\,6\,4)$ $\quad S = (1\,2\,3) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$

$$S^{-1} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}\right]^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = (1\,3\,2)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow SPS^{-1} &= (1\,2\,3)(1\,3\,5)(2\,6\,4)(1\,3\,2) \\ &= (2\,3)\cancel{(3\,1)}\cancel{(1\,3)}(3\,5)(6\,4\,2\,1\,3) \\ &= (2\,3\,5)(2\,1\,3\,6\,4) = (5\,2)(2\,3)(2\,1\,3)(3\,6\,4) \\ &= (5\,2)\cancel{(2\,3)}\cancel{(3\,2)}(2\,1)(3\,6\,4) = (5\,2\,1)(3\,6\,4) \end{aligned}$$

$$\left(\Rightarrow S\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 3 & 5 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 6 & 4 \\ 6 & 4 & 2 \end{pmatrix}S^{-1} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 6 & 4 \\ 6 & 4 & 3 \end{pmatrix} \right.$$

$\downarrow$ permutují oba řádky $\downarrow$

$$\left. \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 1 & 5 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 6 & 4 \\ 6 & 4 & 3 \end{pmatrix} \quad /\!/ \ \checkmark \right)$$

4

$$SPS^{-1} = S(135)S^{-1}S(264)S^{-1} = \underbrace{(123)(135)(132)}(123)(264)(132)$$

$$(123)(135)(132) = (23)\cancel{(31)}\cancel{(15)}(35)(132) = (235)(321)$$
$$= (523)(321) = (52)\cancel{(23)}\cancel{(32)}(21) = (521) \checkmark$$

- počet prvků ve třídě (ν) v S_n
  - třída charakterizována jako $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \ldots, n^{\nu_n})$

    ν_i … počet cyklů délky i

$$\Rightarrow \#(\nu) = \frac{n!}{1^{\nu_1}\nu_1!\, 2^{\nu_2}\nu_2! \ldots n^{\nu_n}\nu_n!}$$

$\nu_i!$ … cykly mohou být permutovány $\Rightarrow$ stejný prvek S_n

i^{ν_i} … prvky v rámci cyklu mohou cyklicky zaměňovat $\Rightarrow$ stejný prvek S_n

Př: S_4

$(1^4) \Rightarrow \#(1^4) = \frac{4!}{1\,4!} = 1$ $\quad (1)(2)(3)(4) = E$

$(1^2 2^1) \Rightarrow \#(\ ) = \frac{4!}{2!\,2} = 6$ $\quad (12),(13),(14),(23),(24),(34)$

$(1^1 3^1) \Rightarrow \#(\ ) = \frac{24}{1 \cdot 3} = 8$ $\quad (123),(124),(134),(213),(214),(234),(314),(324)$

$(2^2) \Rightarrow \#(\ ) = \frac{24}{2^2 \cdot 2!} = 3$ $\quad (12)(34),(13)(24),(14)(23)$

$(4^1) \Rightarrow \#(\ ) = \frac{24}{4} = 6$ $\quad (1234),(2134),(2314),(1243),(3214),(2143)$

Rozklad cyklu na transpozice

$$(abc\cdots pq) \overset{(*)}{=} (ab)(bc)(c\cdot)\cdots(pq)$$

- tento rozklad není jednoznačný, jednoznačná je ale sudost/lichost počtu transpozic

Dk: (Ma, str. 236) Vandermondův determinant

$$D(x_1,\ldots,x_n) = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & \cdots & & \cdots & x_n^{n-1} \end{vmatrix}$$

a) při $\{x_i\} \to P\{x_i\}$ D buď mění nebo nemění znaménko

b) P rozložíme na transpozice a aplikujeme postupně $\Rightarrow$ mění znaménko při každé z nich $\Rightarrow$ sudost nebo lichost permutace musí být určena už z a)

• množina sudých permutací je normální podgrupa S_n: (5)
(alternating group A_n)

– je to jádro zobrazení

$\sigma : S_n \to (\{1,-1\},\cdot)$

– index podgrupy A_n v S_n je 2; $S_n/A_n \simeq (\{+1,-1\},\cdot)$

– liché permutace jsou (jedinou) rozkladovou třídou podle A_n

– $S_n = A_n \circledS S_2$

Rozklad cyklu na sousední transpozice $P_i = (i\ i+1)$

• $P_iP_j = P_jP_i \quad \forall |i-j| \geq 2$

• $P_iP_{i+1}P_i = P_{i+1}P_iP_{i+1} = (i\ i+2)$:

$(12)(23)(12) = (123)(12) = (312)(12) = (31)(12)(12) = (31)$

$(23)(12)(23) = (23)(123) = (23)(231) = (23)(23)(31) = (31)$

není třeba

• chci ukázat $(i\ i+k) = \prod_{l=i}^{i+k-1} P_l$ pro $k>1$ & $i+k \leq n$

– platí $(i\ i+k) = (i\ i+k-1)(i+k-1\ i+k)(i\ i+k-1)$

(RHS je sdružení = záměna $i \leftrightarrow i+k-1$)

RHS $= (i\ i+k-1\ i+k)(i+k-1\ i) = (i+k\ i\ i+k-1)(i+k-1\ i)$

$= (i+k\ i)(i\ i+k-1)(i+k-1\ i) = (i\ i+k)$ ☒

⇓ pokračuji v rozkladu

$(i\ i+k) = (i\ i+k-2)(i+k-2\ i+k-1)\underline{(i\ i+k-2)}\,\underline{(i+k-1\ i+k)}\,\underline{(i\ i+k-2)}\cdot$

$\cdot(i+k-2\ i+k-1)(i\ i+k-2)$ = /... a – komutují ⇒ se zruší/

⇒ rozklad „naruší" jen na okrajích ⇒

$(i\ i+k) = \underbrace{(i\ i+1)(i+1\ i+2)\cdots(i+k-1\ i+k)}\underbrace{(i+k-2\ i+k-1)\cdots(i\ i+1)}$

$= (i\ i+1\ \ldots\ i+k)(i+k-1\ \ldots\ i+1\ i)$

• Generátory S_n: $P_1 = (12)$ a $W = (1\,2 \cdots n)$ generují celou S_n:

• chci ukázat $P_{a+1} = WP_aW^{-1}$ ⇒ opakovaným sdružením pomocí W vygeneruji z (12) libovolnou sousední transpozici a z nich složím libovolný prvek

- $W^n = 1 \Rightarrow W W^{n-1} = 1 \Rightarrow W^{n-1} = W^{-1}$
- W je posunutí # prvků o 1 doprava

$$W(i\ i+1)W^{-1} = W(i\ i+1)W^{n-1} = (i+1\ \ i+2) \quad \boxtimes$$

- explicitně:

$$W = (1\ 2\ \dots\ n) = \begin{pmatrix}1 & 2 & \dots & n-1 & n\\ 2 & 3 & \dots & n & 1\end{pmatrix}$$

$$W^{-1} = \begin{pmatrix}2 & 3 & \dots & n & 1\\ 1 & 2 & \dots & n-1 & n\end{pmatrix} = (1\ n\ n-1\ \dots\ 3\ 2)$$

$$W(i\ i+1)W^{-1} = (1\ 2\ \dots\ i-1\ i\ i+1\ i+2 \dots n)(i\ i+1)(1\ n\ n-1\ \dots\ 3\ 2)$$

$$= (i+2 \dots n\ 1\ 2 \dots i-1\ i)\cancel{(i\ i+1)}\cancel{(i\ i+1)}(1\ n\ n-1\ \dots\ 3\ 2)$$

$$= (i+2 \dots n\ 1\ 2 \dots i-1\ i)(i\ i-1 \dots 1\ n\ n-1 \dots i+2)(i+2\ i+1)$$

$$= (1\ 2 \dots i-1\ i\ i+2 \dots n)(i\ i-1 \dots 1\ n\ n-1 \dots i+2)(i+2\ i+1)$$

$$= (1\ 2 \dots i-1\ i\ i+2 \dots n)(1\ n\ n-1 \dots i+2\ i\ i-1 \dots 2\ 1)(i+2\ i+1)$$

$$= (1\ 2 \dots i-1\ i\ i+2 \dots n)$$

$$= (i+1\ \ i+2) \quad \boxtimes$$

Reprezentace symetrické grupy

[A. J. Coleman, The Symmetric Group Made Easy, Adv Q. Chem 4, 83 (1968)]

- třídy (ν) charakterizovány rozkladem $n = \sum_{i=1}^{n} i\nu_i$
- #IR je stejný $\Rightarrow$ mohu je také charakterizovat rozkladem

$$n = \sum_i \lambda_i\ , \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \Rightarrow \text{IR } [\lambda] = [\lambda_1, \dots, \lambda_n]$$

(– takto odpovídá přiřazení $(\nu) \to [\lambda]$: $\lambda_k = \sum_{j=k}^{n} \nu_j \quad k = 1, \dots, n$

$\Rightarrow \nu_i = \lambda_i - \lambda_{i+1} \qquad \nu_n = \lambda_n$

– IR $[\lambda]$ a "odpovídající" (ν) ovšem nejsou v žádném přímém vztahu)

Youngovo schéma: – grafické znázornění rozkladů $[\lambda]$ odpovídajícím IR $[\lambda]$ a třídám (ν):

- n buněk uspořádaných do řádků o délkách $\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_n$
- celkem n boxů
- spodní řádek má vždy méně nebo stejně boxů
- pravý sloupec stejně nebo méně boxů než levý

S_3: $[3] \leftrightarrow$  $\leftrightarrow (1^3)$ $(\nu_1 = 3)$

$[2\,1] \leftrightarrow$  $\leftrightarrow (1^1 2^1)$ $(\nu_1 = 1, \nu_2 = 1)$

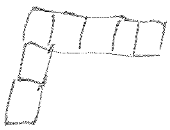
$[1^3] \leftrightarrow$  $\leftrightarrow (3^1) \geq \{ [1^3] = [1\,1\,1] \Rightarrow \nu_3 = 1,\ \nu_2 = \nu_1 = 0 \}$

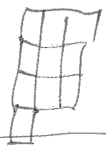
• standardní uspořádání:

$[\lambda] > [\lambda']$: $\exists j : \lambda_i = \lambda_i' \ \forall 1 \le i < j$ & $\lambda_j > \lambda_j'$

Př: S_7

[7], [6,1], [5,2], [5,1,1](*), [4,3], [4,2,1], [4,1,1,1],
[3,2,2], [3,2,1,1], [3,1,1,1,1], [2,2,2,1](**), [2,2,1,1,1],
[2,1,1,1,1,1], [1,1,1,1,1,1,1]

(*) [5,1,1] =  $\leftrightarrow (1^4 3^1)$

(**) [2 2 2 1] =  $\leftrightarrow (1^0 2^0 3^1 4^1) = (3^1 4^1)$

• $\boxed{\nexists \text{ vzorec pro počet IR } S_n}$!

Přiřazení YS k IR:

> NB: • $\delta : S_n \to (\{1,-1\},\cdot)$
> • sdružené ne ekvivalentní!

• sdružené reprezentace ρ a $\tilde\rho$:

$\rho : P \mapsto D(P)$ $\qquad \tilde\rho : P \mapsto \delta(P) D(P)$

- je-li ρ ireducibilní, potom i $\tilde\rho$ je ireducibilní
- speciálně je-li ρ triviální repre, je $\tilde\rho$ tzv. alternující reprezentace
- $\tilde\chi(P) = \delta(P)\chi(P) \Rightarrow \frac{1}{\# S_n}\sum_P |\chi(P)|^2 = 1 \Rightarrow \frac{1}{\# S_n}\sum_P |\tilde\chi(P)|^2 = 1$
- $\frac{1}{S_n}\sum_P \chi^*(P)\delta(P)\chi(P) \le 1 \Rightarrow$ $\tilde\rho$ není ekviv. s ρ až na případ, že $\chi(P) = 0$ pro $\forall$ liché permutace (potom $\tilde\rho = \rho$)
- jsou-li ρ a $\tilde\rho$ ekvivalentní, potom je ρ samosdružená

• YS sdružených reprezentací: transpozice YS (prohodíme řádky a sloupce

• .... odpovídá triv. repre, $\vdots$ je alternující

• $\vdots\cdot \xrightarrow{\text{sdružení}} \vdots\cdot \Rightarrow \vdots\cdot$ je samosdružená $\Rightarrow$ liché permutace mají nulový charakter

Youngovy tabulky

- standardní YT: boxy YS vyplníme čísly $1, \dots, n$ tak, že v každém řádku čísla rostou zleva doprava a v každém sloupci shora dolů
- počet std. YT pro dané YS určuje dimenzi příslušné IR $\Rightarrow$ std YT indexují bázové vektory příslušné IR

Př: S_3 $\qquad\sim\quad C_{3v}$

$D^{[3]}$: $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline\end{array}$ $\Rightarrow d_{[3]} = 1$ $\qquad A_1$

$D^{[2,1]}$: $\begin{array}{|c|c|}\hline &\\\hline \\\cline{1-1}\end{array}$ $\Rightarrow \begin{matrix}1&2\\3&\end{matrix}$ & $\begin{matrix}1&3\\2&\end{matrix}$ $\Rightarrow d_{[2,1]} = 2$ $\qquad E$

$D^{[1^3]}$: $\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}$ $\Rightarrow d_{[1^3]} = 1$ $\qquad A_2$

- standardní řazení YT:
  - porovnáváme čísla v prvním řádku zleva doprava, potom v druhém ř. zleva doprava, …

  $\Rightarrow$ první nalezené odlišné číslo určuje pořadí (menší číslo odpovídá „menší" YT:

$$\begin{matrix}1&2\\3&\end{matrix} < \begin{matrix}1&3\\2&\end{matrix}$$

- hákové pravidlo:
  - hákové číslo pole (ij) YS: $h_{ij} = 1 +$ počet polí v i-tém řádku vpravo $+$ počet polí ve j-tém sloupci dolů (od pole ij) $=$ délka „háku" s vrcholem (ij)
  - háková tabulka: YS vyplněný hákovými čísly

  $\Downarrow$

Př: S^4, $D^{[2,1,1]}$:

$\begin{array}{|c|c|}\hline 4&1\\\hline 2\\\cline{1-1} 1\\\cline{1-1}\end{array}$ $\Rightarrow d_{[2,1,1]} = \dfrac{4!}{4.2.1.1} = 3$

dimenze $D^{[\lambda]}$

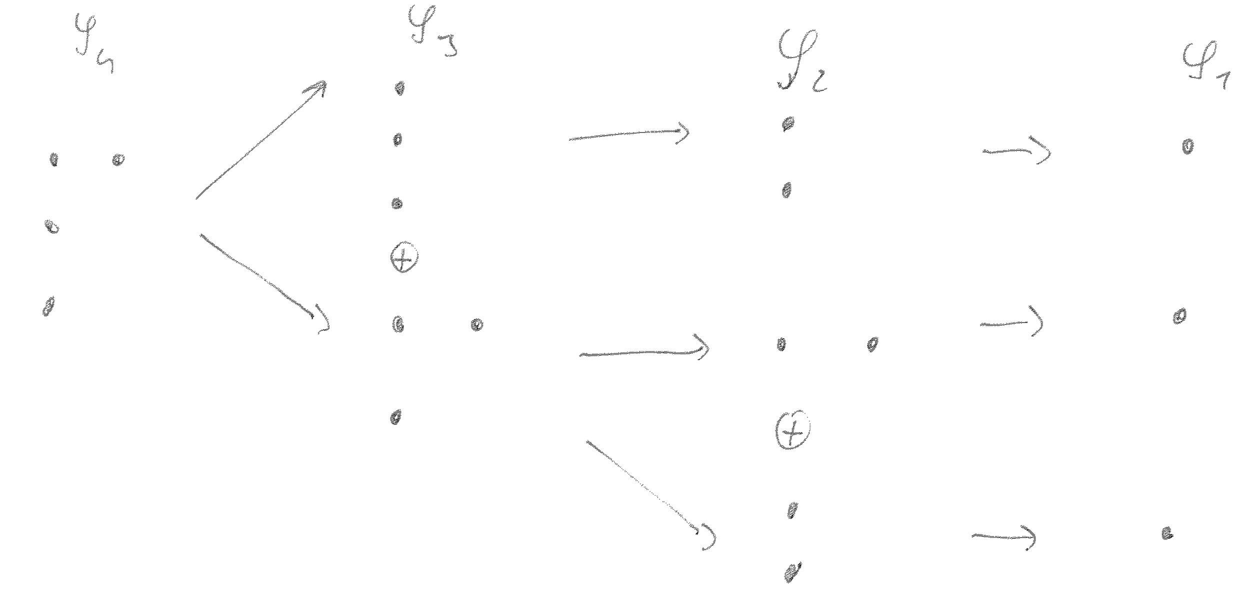
$$d_{[\lambda]} = \frac{n!}{\prod_{ij} h_{ij}}$$

$\Rightarrow$ počet std. YT bez jejich explicitního zápisu

- výpočet dimenze IR a indexace báze pomocí YT vychází z rozkladu reprezentací subdukovaných v hierarchii
  $\mathcal{S}_n \downarrow \mathcal{S}_{n-1} \downarrow \dots \downarrow \mathcal{S}_1$:

Tvrzení: Reprezentace $\mathcal{S}_{n-1}$ subdukovaná z IR $\mathcal{S}_n$ odpovídající YS $[\lambda]$ je direktním součtem IR $\mathcal{S}_{n-1}$ odpovídajících Y. schématům, které získáme z $[\lambda]$ oddělením jednoho pole tak, aby výsledné schéma bylo opět YS.

Př: $\mathcal{S}_4$, $[2,1,1]$



$\Rightarrow d_{[2,1,1]} = 3$ ✓

Y. tabulky:

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1} \end{array} \;>\; \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1} \end{array} \;>\; \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1} \end{array}$$

$\Rightarrow$ v první subdukci výše oddělujeme $\forall$ možné výskyty čísla n $(=4)$, v druhé $\forall$ výskyty $n-1$ $(=3)$ ... až dostaneme triviální reprezentace $\mathcal{S}_1$

$\Rightarrow$ YT odpovídají $\forall$ větvím vzniklého stromu

Charaktery IR S_n

(praktický výpočet pomocí hákové tabulky)

- první sloupec hákové tabulky – délky hlavních háků $h_{i1} = h_i$
- zavedeme symbol $D = |h_{11}\ h_{21} \dots h_{r1}| = |h_1\ h_2 \dots h_r|$
- pravidla pro výpočet D:

  1, $D = 0$ pokud $\exists i : h_i < 0$ nebo pokud $\exists i \neq j : h_i = h_j$

  2, D mění znaménko při prohození h_i a h_j

  3, $D_0 \equiv |r-1\ \ r-2 \dots 1\ \ 0| = 1$

  4, násobení číslem:

  $$\mu D = |h_1-\mu\ \ h_2\ \ h_3 \dots h_r| + |h_1\ \ h_2-\mu\ \ h_3 \dots h_r| + \dots + |h_1 h_2 \dots h_r-\mu|$$

- $\chi^{[\lambda]}(\nu) = \chi^{[\lambda_1,\dots,\lambda_n]}(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \dots, n^{\nu_n})$ dostaneme tak, že $D[\lambda]$ násobíme postupně ν^n-krát n, ν^{n-1} krát $(n-1)$, … až ν^1-krát 1 a upravujeme na D_0:

Př:

S_4	S $1(1^4)$	L $6(1^2,2)$	S $8(1,3)$	S $3(2^2)$	L $6(4)$	
$[4]$	1	1	1	1	1	(triv)
$[3,1]$	3	1	0	−1	−1	
$[2,2]$	2	0	−1	2	0	
$[2,1,1]$	3	−1	0	−1	1	
$[1^4]$	1	−1	1	1	−1	$\widetilde{[4]}$

$[4]$: $\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 4&3&2&1\\\hline\end{array}$ $\Rightarrow d = \frac{4!}{4!} = 1$

$[3,1]$: $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 4&2&1\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array}$ $\Rightarrow d = \frac{4!}{4.2} = 3$

$[2,2]$: $\begin{array}{|c|c|}\hline 3&2\\\hline 2&1\\\hline\end{array}$ $\Rightarrow d = \frac{4!}{3.2^2} = 2$

$[2,1,1]$: $\begin{array}{|c|c|}\hline 4&1\\\hline 2\\\cline{1-1} 1\\\cline{1-1}\end{array}$ $\Rightarrow d = \frac{4!}{4.2} = 3$

$[1^4]$: $\begin{array}{|c|}\hline 4\\\hline 3\\\hline 2\\\hline 1\\\hline\end{array}$ $\Rightarrow d = 1$

$\chi_{[3,1]}(1^2, 2)$: $D = |4\ 1|$

- $2D = |2\ 1| + |4\ -1| = |2\ 1|$
- $1|2\ 1| = |1\ 1| + |2\ 0|$
- $1|1\ 1| + 1|2\ 0| = |0\ 1| + |1\ 0|$
  $+ |1\ 0| + |2\ -1|$
  $= -|1\ 0| + |1\ 0| + |1\ 0| = \underline{1}$

$\chi_{[2,2]}(2^2) = (\text{otoč}) =$

(Ortogonální) Maticové reprezentace S_n

$D^{[\lambda]}(i\ i{+}1)$ lze zkonstruovat následovně:

1, stand. YT pro $[\lambda]$ ve vzestupném pořadí

Př: S_4, $[\lambda]=[3,1]$, $d_{[\lambda]}=3$

(1) $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}$ (2) $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (3) $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$

- $i, j=i+1$ najdu v každé tabulce:
  - a, ve stejném řádku
  - b, ve stejném sloupci
  - c, v různých řádcích a sloupcích, ale prohozením $i \leftrightarrow j$ dostaneme opět YT

2, řádky a sloupce matic D číslujeme Y tabulkami (vzestupně) a maticové elementy určíme následovně:

i, pro YT typu (a) napíšeme 1 na diag. pozici a 0 jinde v příslušném řádku a sloupci

ii, pro YT (b) -1 na diag. pozici, 0 jinde

iii, elementy odpovídající dvěma YT typu (c) vyplníme blokem
$$\begin{pmatrix} -\rho & \sqrt{1-\rho^2} \\ \sqrt{1-\rho^2} & \rho \end{pmatrix}$$
a nulami jinde v odp. řádcích a sloupcích

- ρ^{-1} je počet kroků podél „háku" $i \to j$

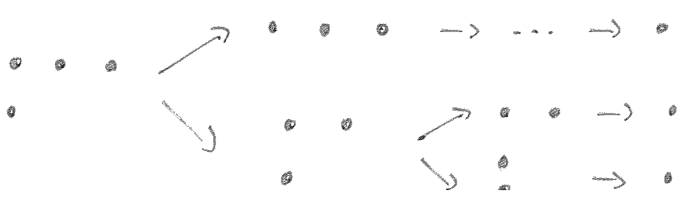
$$D^{[3,1]}(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad D^{[3,1]}(23) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$D^{[3,1]}(34) = \begin{pmatrix} -1/3 & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- ostatní permutace násobením těchto základních transpozic

NB: Subdukce $S_n \to S_{n-1}$ $\Leftrightarrow$ vynechání $(n{-}1\ n)$

$\Rightarrow$ vidíme, že dostáváme přímo reducibilitu $[3] \oplus [2,1]$



Pozn: • <u>Yamanouchiho symboly</u> – alternativa YT

$\{r\} = \{r_n, r_{n-1}, \ldots, r_2, r_1\}$

– r_i je číslo řádku, ve kterém se nachází číslo i

$\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 4 & & \end{array} \leftrightarrow \{2,1,1,1\}$

$\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 4 \\ 3 & & \end{array} \leftrightarrow \{1,2,1,1\}$

$\begin{array}{ccc} 1 & 3 & 4 \\ 2 & & \end{array} \leftrightarrow \{1,1,2,1\}$

⇒ sestupné řazení Yam. symbolů dává vzestupné řazení YT

• legální Yam. symboly: počítáno zprava doleva, počet dvojek je ≤ počet jedniček, počet 3jek ≤ #2jek ...

• <u>lattice permutations</u> – Yamanouchiho symboly psané pozpátku

Dodatky: symetrie vlnové funkce tří elektronů

Eliot, Dawber sec. 8.6.4

$\Psi(\vec r_i, \sigma_i) = \phi(\vec r_i)\cdot \chi(\sigma_i)$

- celkem musí být úplně antisymetrická $\Leftrightarrow \Psi \sim a$
- $S_3 \sim D_3$

S_3	E	(123), (132)	(12), (23), (13)	
s	1	1	1	(sym)
a	1	1	−1	(anti-sym)
m	2	−1	0	(mixed)
$s\otimes s$	1	1	+1	= s
$s\otimes a$	1	1	−1	= a
$a\otimes a$	1	1	1	= s
$m\otimes a$	2	−1	0	= m
$m\otimes s$	2	−1	0	= m
$m\otimes m$	4	1	0	$= m\oplus s\oplus a$

$\Rightarrow$ povolené symetrie $\phi\cdot\chi$ jsou $s\otimes a$, $a\otimes s$ a $m\otimes m$

- spinová část: $(s=1/2)\otimes(1/2)\otimes(1/2) = (1)\otimes(1/2) \oplus (0)\times(1/2)$
  $= (3/2)\ \&\ (1/2)_1\ \&\ (1/2)_0$

  $J_1 \pm i J_2$, $J_1 = \Sigma s_1$, $J_2 = \Sigma s_2$

- $(3/2)$ jsou sym, neboť $(j=3/2, m=3/2)$ je symetrický a $J_\pm$ je symetrický operátor
  - ~~tato~~ jsou 4 symetrické spinové stavy
- antisym. stavy nejsou: 3 částice rozmísťujeme do dvou jednočást. stavů $\Rightarrow$ min. dvě musí být ve stejném

$\Rightarrow$ oba $(1/2)_1$ a $(1/2)_0$ stavy jsou smíšené

Spin: 4s, 4m
orb: 1a, 10s, 16m
$(s)\times(a) \to 4\ (a)$ stavy ^4S
$(m)\times(m) = 4\times 16$ stavů, z toho 16 (a) $\Rightarrow$ ^2P, ^2D ✓

- Př: N $\Rightarrow$ 3 valenční elektrony jsou 2p $\Leftrightarrow l=1$
  $\Rightarrow$ celkem $(l=1)^3 = 27$ stavů $= \underset{0}{S} + 3\underset{1}{P} + 2\underset{2}{D} + \underset{3}{F}$
  - $(l=3, m=3)$ je sym $\Rightarrow$ F dává 7 sym. stavů
  - celkem je $\frac{1}{6}n(n+1)(n+2) = 10$ sym. stavů $(n=3)$ $\Rightarrow$ jeden z P musí být také sym.
  - S je antisym(*), celkem je $\frac{1}{6}n(n-1)(n-2) = 1$ antisym. stav $\Rightarrow$ ^2P, ^2D je mix
  $\Rightarrow$ dovolené stavy jsou ^4S, ^2P, ^2D. (# = 20)

(*) je to $|\phi_1(m=-1)\,\phi_2(m=0)\,\phi_3(m=1)|$ determinant