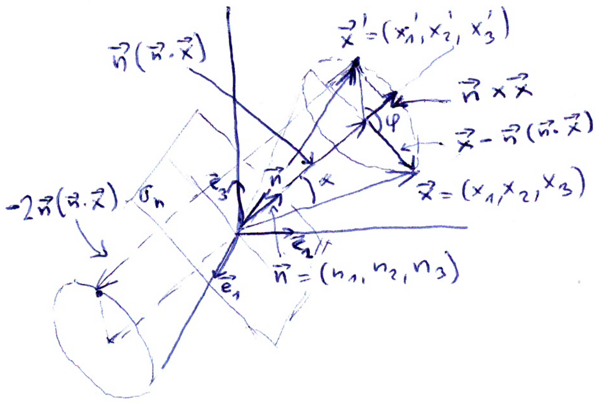
Vektorová a pseudovektorová reprezentace bodových grup

- vektorová repr. V – působení bodové grupy na $\mathbb{R}^3$



– obecně uvažujme vektor a grupu G

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^{3} x_i \vec{e}_i \xmapsto{g\in G} \vec{x}' = \sum_{i=1}^{3} x_i' \vec{e}_i$$

působením prvku g (rotace či nevlastní rotace) přejde $\vec{x}$ na $\vec{x}'$

kde $$x_i' = \sum_{k=1}^{3} \underbrace{D_{ij}(g)}_{\text{3-rozměrná maticová reprezentace grupy } G} x_j$$

- z obrázku vidíme, že lze výsledný vektor $\vec{x}'$ při rotaci kolem osy $\vec{n}$ o úhel φ vyjádřit jako

$$\vec{x}' = \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{x}) + \sin\varphi\,(\vec{n}\times\vec{x}) + \cos\varphi\,[\vec{x}-\vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{x})]$$

neboť $\vec{n}\times\vec{x}$ má směr kolmý na $\vec{n}$ a $\vec{x}$ a velikost $|\vec{n}\times\vec{x}| = |\vec{x}|\sin\alpha$ stejnou jako $|\vec{x}-\vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{x})| = |\vec{x}|\sin\alpha$ kde α je úhel mezi $\vec{n}$ a $\vec{x}$.

a tedy
$$D_{ij}(C_\varphi^{\vec{n}}) = \delta_{ij}\cos\varphi + (1-\cos\varphi)\,n_i n_j + \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ikj} n_k \sin\varphi$$
neboť $\vec{n}\times\vec{x}$ lze psát pomocí $(\vec{n}\times\vec{x})_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} n_j x_k$

- odečteme-li $2\vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{x})$ od $\vec{x}'$ pro rotaci, dostaneme obraz vektoru $\vec{x}$ pro nevlastní rotaci okolo $\vec{n}$ o úhel φ.

tj. bude (zde se změní znaménko)
$$D_{ij}(S_\varphi^{\vec{n}}) = \delta_{ij}\cos\varphi + (-1-\cos\varphi)\,n_i n_j + \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ikj} n_k \sin\varphi$$

- pro charaktery této reprezentace dostaneme

$$\chi(C_\varphi^{\vec{n}}) = \mathrm{Tr}\, D(C_\varphi^{\vec{n}}) = 3\cos\varphi + (1-\cos\varphi)(n_1^2+n_2^2+n_3^2) = 1 + 2\cos\varphi$$

$$\chi(S_\varphi^{\vec{n}}) = \mathrm{Tr}\, D(S_\varphi^{\vec{n}}) = 3\cos\varphi + (-1-\cos\varphi)\,|\vec{n}|^2 = -1 + 2\cos\varphi$$

- nezávisí na směru $\vec{n}$, neboť všechny vlastní rotace kolem lib. osy o stejný úhel tvoří třídu sdružených prvků v grupě $O(3)$

a podobně všechny nevlastní rotace o stejný úhel

- charakter lib. rotace o úhel φ lze proto snadno určit pomocí rotace okolo osy z:

$$D(C^z_\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \chi(\varphi) = 1 + 2\cos\varphi$$

nebo nevlastní rotace okolo z:

$$D(S^z_\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \chi(S_\varphi) = -1 + 2\cos\varphi$$

- pro grupu $O(3)$ a její podgrupy $SO(3)$, T, T_d, T_h, O, O_h, I a I_h (omezíme-li se vždy jen na příslušné prvky dané podgrupy) je tato reprezentace ireducibilní, pro ostatní podgrupy je reducibilní a hlavní osu rotace obvykle volíme ve směru osy z, takže všechny matice pak mají tvar $\begin{pmatrix} & & 0 \\ & & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$ a z tvoří 1-rozm. IR a (x,y) buď 2-rozm. IR nebo se ještě rozpadá na 2 1-rozm.

- <u>pseudovektorová reprezentace pV</u>
  - uvažujme nyní dva vektory $\vec{x}$ a $\vec{y}$, které se při působení grupy G transformují jako $x'_i = \sum_{k=1}^{3} D_{ik}(g)\, x_k$ a $y'_j = \sum_{\ell=1}^{3} D_{j\ell}(g)\, y_\ell$ a určeme, jak se transformuje jejich vektorový součin

$$\vec{R} = \vec{x} \times \vec{y}, \quad \text{tj.} \quad R_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk}\, x_j y_k$$

- dostaneme např.

$$R'_1 = x'_2 y'_3 - x'_3 y'_2 = \sum_{k,\ell} D_{2k}(g) D_{3\ell}(g)\,(x_k y_\ell - x_\ell y_k) =$$

Kramerův vzorec pro inverzi matice →

$$= \underbrace{(D_{22}D_{33} - D_{23}D_{32})}_{(\det D)\cdot(D^{-1})_{11}} R_1 + \underbrace{(D_{23}D_{31} - D_{21}D_{33})}_{(\det D)\cdot(D^{-1})_{21}} R_2 + \underbrace{(D_{21}D_{32} - D_{22}D_{31})}_{(\det D)\,(D^{-1})_{31}} R_3$$

$$= (\det D)\,(D_{11}R_1 + D_{12}R_2 + D_{13}R_3) = \det D \sum_{k=1}^{3} D_{1k} R_k$$

ortogonalita matic $D(g)$ dává $(D(g)^{-1})_{ki} = D_{ik}(g)$ (zachovává se velikost vektorů)

a obdobně pro R'_2 a R'_3,

maticově $\vec{R}' = [\det D(g)]\, \underbrace{D(g)}_{\text{vekt. repr.}} \vec{R}$

$$\vec{R}' = D^{pV}(g)\, \vec{R}$$

tyto matice tvoří pseudovekt. reprezentaci

$\chi^{pV}(C_\varphi) = 1 + 2\cos\varphi$

$\chi^{pV}(S_\varphi) = 1 - 2\cos\varphi$ ⇐

- má oproti vekt. repr. $D(g)$ pouze otočené znaménko u nevlastních rotací