

Příklad: první součin vektorové reprezentace pro grupu  $D_{3h}$  a přiřazení funkcí  $x^2, y^2, z^2, xy, xz$  a  $yz$  do jejich IR 41

- již víme, že charakter vlastních rotací  $C_\varphi$  a nevlastních rotací  $S_\varphi$  ve vektorové repr. (působení na  $\mathbb{R}^3$  grupy  $O(3)$ ) jsou obecně

$$\chi^v(C_\varphi) = 1 + 2\cos\varphi \quad \text{a} \quad \chi^v(S_\varphi) = -1 + 2\cos\varphi$$

- charakter prvního součinu nějaké repr. sama se sebou je dán jednoduše

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

$$\chi^{v \otimes v}(S_\varphi) = \chi^v(S_\varphi)^2 = (-1+2\cos\varphi)^2$$

a tedy pro zrcadlení obecně  $\chi^v(\sigma = S_{2\pi}) = 1 = \chi^{v \otimes v}(\sigma)$

a dále  $\chi^v(C_3) = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = 0$ ,  $\chi^v(C_2) = 1 + 2\cos\pi = -1$

a  $\chi^v(S_3) = -1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = -2$ , z čehož určíme  $\chi^{v \otimes v}$

$D_{3h}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$T_h$	$2S_3$	$3C_2$
$\Gamma^v$	3	0	1	1	-2	-1
$\Gamma^{v \otimes v}$	9	0	1	1	4	1

na druhou

- reprezentace  $\Gamma^{v \otimes v}$  se rozpadá na symetrickou a antisymetrickou část  $\Gamma^{v \otimes v} = \Gamma^{\{v \otimes v\}} \oplus \Gamma^{\{v \otimes v\}}$ , jejichž charaktere jsou dány poloci

$$\chi^{\{v \otimes v\}}(g) = \frac{1}{2} [\chi^v(g)^2 + \chi^v(g^2)] \quad \text{a} \quad \chi^{\{v \otimes v\}}(g) = \frac{1}{2} [\chi^v(g)^2 - \chi^v(g^2)]$$

a tedy  $\chi^{\{v \otimes v\}}(C_\varphi) = \frac{1}{2} [(1+2\cos\varphi)^2 + 1+2\cos 2\varphi] = 2\cos\varphi (1+2\cos\varphi)$

$$\chi^{\{v \otimes v\}}(S_\varphi) = \frac{1}{2} [(-1+2\cos\varphi)^2 + 1+2\cos 2\varphi] = 2\cos\varphi (-1+2\cos\varphi)$$

$$\begin{aligned} \text{a} \quad \chi^{\{v \otimes v\}}(C_\varphi) &= \frac{1}{2} [(1+2\cos\varphi)^2 - (1+2\cos 2\varphi)] = \\ &= \frac{1}{2} [4\cos\varphi + 4\cos^2\varphi - 2(-1+2\cos^2\varphi)] = 1+2\cos\varphi = \chi^{pv}(C_\varphi) \end{aligned}$$

$$\chi^{\{v \otimes v\}}(S_\varphi) = \frac{1}{2} [(-1+2\cos\varphi)^2 - (1+2\cos 2\varphi)] = 1-2\cos\varphi = \chi^{pv}(S_p)$$

a tedy antisymetrická podreprezentace repr.  $\Gamma^{v \otimes v}$  je stejná jako pseudovektorová repr.

- nakonec tedy dostaneme rozklady viz dle							viz níže			
$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3S_v$	$S_h$	$2S_3$	$3C_2$	$D_{3h}$	$C_{3v}$	$D_{3h}$	$C_{3v}$
$A'_1$	1	1	1	1	1	1		$z$	$z^2, x^2+y^2$	$z^2, x^2+y^2$
$A'_2$	1	1	-1	1	1	-1	$R_z$ ( $x, y$ )	$R_z$ ( $x, y$ ), ( $R_x, R_y$ )	$(xy, x^2-y^2)$	$(x^2, y^2),$ $(xy, x^2-y^2)$
$E'$	2	-1	0	2	-1	0				
$A''_1$	1	1	-1	-1	-1	1				
$A''_2$	1	1	1	-1	-1	-1	$z$			
$E''$	2	-1	0	-2	1	0	$(R_x, R_y)$		$(xz, yz)$	

náhradou

$$\begin{array}{l} \Gamma^V \\ \rightarrow \Gamma^{V \otimes V} \\ + \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{[V \times V]} \\ \Gamma^{\{V \times V\}} \end{array} \right\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} 3 & 0 & 1 & 1 & -2 & -1 \\ 9 & 0 & 1 & 1 & 4 & 1 \\ 6 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 0 & -1 & -1 & 2 & -1 \end{array} = E' \oplus A''_2 \rightarrow (x, y) \alpha z$$

$$= \Gamma^{[V \otimes V]} \oplus \Gamma^{\{V \otimes V\}}$$

$$= 2A'_1 \oplus E' \oplus E'' \rightarrow x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz$$

$$= A''_2 \oplus E'' \rightarrow R_x, R_y \alpha R_z$$

atdy  $\Gamma^{V \otimes V} = 2A'_2 \oplus A''_2 \oplus E' \oplus 2E''$

- přiřazení  $x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz$  do IR grupy  $D_{3h}$

- asi nejefektivnější je dívat se na tyto funkce jako na složky tensorového součinu  $\vec{x} \otimes \vec{x}$ , kde  $\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

- více totiž, jak se transformuje  $\vec{x}$  při působení bodové

grupy  $\vec{x}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = D^V(g) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ , kde  $D^V(g)$  reprezentuje g ve vektorové reprezentaci

atdy např. dostaneme

$$x'x' = x'^2 = (D^V(g)x + D^V(g)y + D^V(g)z)^2$$

a pod- pro  $x'y', x'z'$  atd. a podle výsledku pak vidíme,

které složky tensoru  $\vec{x} \otimes \vec{x}$  se nachají mezi sebou

(jde o symetrický tensor;  $x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz$  a  $xz$  tedy

budou patřit do repr.  $\Gamma^{[V \otimes V]}$ , jejíž rozklad

znamí  $(2A'_1 \oplus E' \oplus E'')$  a hledáme tedy kombinace

které jsou budou invariantní, nebo tvoří dvojice

- protože obecně  $D^V(g)$  jsou ortogonální matice pro všechny

bodové grupy, neboť se při působení  $O(3)$  a podgrup

zachovává velikost  $\vec{x}$ , bude  $x^2+y^2+z^2$  vždy patřit do

doplňk symetrické repr., u  $D_{3h}$  tedy do  $A'_1$

- pokud máme navíc bodovou grupu jedinou význačnou  
osu  $C_n$ , kterou můžeme vždy umístit do osy  $z$ ,

pak i  $z^2$  a  $x^2+y^2$  budou nezávisle invarianty  
a tedy  $x^2+y^2$  a  $z^2$  patří v  $D_{3h}$  obě do  $A'_1$ , nejen  
jejich součet

- zbyvají nám přidat  $xy, yz, xz$  a  $x^2-y^2$  (orthogonální,  
doplňek  $x^2+y^2$ )  
do  $E'$  nebo  $E''$

- protože se  $(x,y)$  transformují při působení  $D_{3h}$   
mezi sebou, ale  $z$  se transformuje nezávisle,

bude jednu dvojici tvořit  $xz$  a  $yz$ . Protože  
jsou charaktere  $E'$  a  $E''$  pro  $E$ ,  $C_3$  a  $\sigma_v$  stejné,  
musíme se podívat, jak se  $xz$  a  $yz$  transformují

např. při  $\sigma_h$ , kdy

$$\begin{array}{l} x' = x \\ y' = y \\ z' = -z \end{array} \Rightarrow \begin{array}{l} x'z' = -xz \\ y'z' = -yz \end{array} \text{neboli } \begin{pmatrix} x'z' \\ y'z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xz \\ yz \end{pmatrix} \Rightarrow \chi(\sigma_h) = -2 \Rightarrow E''$$

neboli  $(xz, yz)$  patří do  $E''$

- konečně  $xy$  a  $x^2-y^2$  se tež transformují mezi sebou,

např. při  $C_3$ , kdy

$$\begin{array}{l} x' = -\frac{1}{2}x - \frac{\sqrt{3}}{2}y \\ y' = \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \end{array} \Rightarrow \begin{pmatrix} x'y' \\ x'^2-y'^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xy \\ x^2-y^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \chi(C_3) = -1$$

z toho následuje  
zda  $E'$  nebo  $E''$

ovšem při  $\sigma_h$  bude

$$\begin{array}{l} x'y' = xy \\ x'^2-y'^2 = x^2-y^2 \end{array} \Rightarrow \chi(\sigma_h) = 2 \Rightarrow E'$$

atedy  $(xy, x^2-y^2)$  patří do IR  $E'$

- můžete si připadně ověřit, že i pro  $S_3$  a  $C_2$   
dostanete také odpovídající charaktere