Rozklad přímého součinu ireducibilních reprezentací

⟹ Clebschova-Gordonova řada a Clebschovy-Gordonovy koeficienty

- máme-li dvě IR Γ^μ a Γ^ν, pak jejich přímým součinem dostaneme obecně reducibilní reprezentaci s charakterem

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

a rozkladem
$$\Gamma^{\mu\otimes\nu}(g) = \sum_\sigma \oplus\, \alpha_\sigma^{\mu\nu}\Gamma^\sigma = \sum_\sigma \oplus (\mu\nu\sigma)\Gamma^\sigma$$

kterému se říká <u>Clebschova – Gordonova řada</u>.

Koeficienty $\alpha_\sigma^{\mu\nu} = (\mu\nu\sigma)$, které udávají kolikrát se IR Γ^σ vyskytuje v přímém součinu $\Gamma^{\mu\otimes\nu}$, lze určit standardním vzorcem (vidíme, že $\alpha_\sigma^{\mu\nu} = \alpha_\sigma^{\nu\mu}$, nezáleží na pořadí)

$$\alpha_\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G}\chi^\sigma(g)^*\chi^{\mu\otimes\nu}(g) = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G}\chi^\sigma(g)^*\chi^\mu(g)\chi^\nu(g)$$

Př. uvažujme grupu C_{3v} s tabulkou charakterů

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

z níž dostaneme

	C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	rozklad
	$A_1\otimes A_1$	1	1	1	$= A_1$
	$A_1\otimes A_2$	1	1	−1	$= A_2$
	$A_1\otimes E$	2	−1	0	$= E$
	$A_2\otimes A_2$	1	1	1	$= A_1$
	$A_2\otimes E$	2	−1	0	$= E$
$\chi^E(g)^2 \longrightarrow$	$E\otimes E$	4	1	0	$= A_1\oplus A_2\oplus E$
$\frac{1}{2}[\chi^E(g)^2+\chi^E(g^2)] \longrightarrow$	$[E\otimes E]$	3	0	1	$= A_1\oplus E$
$\frac{1}{2}[\chi^E(g)^2-\chi^E(g^2)] \longrightarrow$	$\{E\otimes E\}$	1	1	−1	$= A_2$

- zajímavější, ale zároveň důležité v aplikacích, je nalezení báze odpovídající rozkladu na IR, tj. symetrizované báze, kterou dostaneme z původní součinové báze, ve fyzikálním značení je tato báze $\varphi_j^\mu\varphi_\ell^\nu$, kde φ_j^μ jsou bázové funkce např. pro jednu částici a φ_ℓ^ν pro druhou, přičemž tvoří vždy bázi pro IR Γ^μ a Γ^ν, a hledáme bázi $\Psi_s^{(\sigma\lambda_\sigma)}$, $s=1,\dots,d_\sigma$, $\lambda_\sigma = 1,\dots,\alpha_\sigma^{\mu\nu}$

kde λ_σ čísluje jednotlivé ireducibilní inv. podprostory příslušející stejné IR Γ^σ.

- funkce $\Psi_s^{(\sigma\lambda_\sigma)}$ této nové báze musí být lineární kombinací původní báze, tj.

$$\Psi_s^{(\sigma\lambda_\sigma)} = \sum_{j,l} \psi_j^\mu \varphi_l^\nu \left(\mu j, \nu l \middle| \sigma\lambda_\sigma s\right)$$

kde $(\mu j, \nu l | \sigma \lambda_\sigma s)$ jsou tzv. Clebschovy-Gordonovy koeficienty a jde vlastně o prvky matice přechodu od báze $\psi_j^\mu \varphi_l^\nu$ k bázi $\Psi_s^{(\sigma\lambda_\sigma)}$ s rozměrem $d_\mu d_\nu \times d_\mu d_\nu$

- tyto koeficienty nejsou jednoznačně určené, pokud $\alpha_\sigma^{\mu\nu} = 1$ pro určité σ, pak jsou určeny až na fázový faktor $e^{i\omega}$ a pro $\alpha_\sigma^{\mu\nu} > 1$ až na unitární matici $\alpha_\sigma^{\mu\nu} \times \alpha_\sigma^{\mu\nu}$, neboť můžeme „mixovat" podprostory příslušející stejné (ekvivalentní) ireduc. reprezentaci

- mají-li být funkce $\Psi_s^{(\sigma\lambda_\sigma)}$ normalizované, pak požadujeme, aby byla matice přechodu unitární, z čehož dostáváme podmínku na Clebschovy-Gordonovy koeficienty

$$\sum_{j,l} \left|(\mu j, \nu l | \sigma\lambda_\sigma s)\right|^2 = 1$$

a inverzní transformace pak je

$$\psi_j^\mu \varphi_l^\nu = \sum_{\sigma,\lambda_\sigma,s} \Psi_s^{\sigma\lambda_\sigma} \underbrace{(\mu j\, \nu l | \sigma\lambda_\sigma s)^*}_{\text{neboť toto je } (\sigma\lambda_\sigma s | \mu j\, \nu l)}$$

- z unitarity ještě plynou relace ortogonality

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

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

Příklad na určení Clebschových-Gordonových koeficientů

- uvažujme dvě báze IR E grupy C_{3v}, první označme $\{\psi_1, \psi_2\}$ a druhou $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ (můžeme si např. představit, že jde o symetrizované 1s orbitaly pro H_3^+ : $\psi_1^E = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\phi_1 - \phi_2 - \phi_3)$
$\psi_2^E = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 - \phi_3)$
a obsazujeme je 2 elektrony,
funkce $\{\psi_1, \psi_2\}$ pak jsou z Hilbertova prostoru prvního elektronu a $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ z Hilb. prostoru druhého elektronu)

- jako bázi přímého součinu $E \otimes E$ tak vezme součiny $\{\psi_1\varphi_1, \psi_1\varphi_2, \psi_2\varphi_1, \psi_2\varphi_2\}$ ze kterých chceme vytvořit lineární kombinace, které by se transformovali podle IR v rozkladu $E \otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E$ (viz výše)

- protože již víme, že antisymetrická část $\{E \otimes E\} = A_2$ můžeme psát přímo (po normalizaci)

$$\Psi_1^{A_2 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\varphi_2 - \psi_2\varphi_1) = \sum_{i,j=1}^{2} \psi_i\varphi_j \, (E\, i\, E\, j \,|\, A_2 1 1)$$

a tedy nenulové jsou $(E 1 E 2 | A_2 1 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$
a $(E 2 E 1 | A_2 1 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

- do symetrické části patří $\psi_1\varphi_1$, $\psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1$ a $\psi_2\varphi_2$
  - protože jsou matice $D(g)$ pro bodové grupy ortogonální tj. $D^T(g)D(g) = D(g)D^T(g) = \mathbb{1}$, platí obecně, že do úplně symetrické reprezentace (zde A_1) patří symetrické kombinace $\sum_{i=1}^{d} \psi_i \varphi_i$, neboť

$$U(g) \sum_i \psi_i\varphi_i = \sum_i \sum_{k,l} \psi_k\varphi_l D_{ki}(g) D_{li}(g) =$$

$$= \sum_{k,l} \psi_k\varphi_l \underbrace{\sum_i D_{ki}(g) D^T_{il}(g)}_{\delta_{kl}} = \sum_k \psi_k\varphi_k$$

bude tedy $\Psi_1^{A_1 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\varphi_1 + \psi_2\varphi_2) \Rightarrow$ nenulové $(E 1 E 1 | A_1 1 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$
$(E 2 E 2 | A_1 1 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

– zbývající „ortogonální doplňky" k $\Psi_1^{A_1 1}$ a $\Psi_1^{A_2 1}$ budou patřit do E a po normalizaci máme např.

$$\Psi_1^{E1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\varphi_1 - \psi_2\varphi_2) \Rightarrow \quad \begin{aligned}(E1\,E1|E11) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\\ (E2\,E2|E11) &= -\tfrac{1}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

$$\Psi_2^{E1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1) \qquad \begin{aligned}(E1\,E2|E12) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\\ (E2\,E1|E12) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

ostatní C-G koeficienty jsou nulové

(Pozn.: pokud se jednotlivé IR v C-G řadě vyskytují každá jen jednou (velmi častý případ včetně SO(3)) pak se index λ_σ obvykle vynechává a psali bychom jen např. $(E1\,E1|E1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ atd.)

– ke stejnému výsledku bychom dospěli obecnějším postupem pomocí symetrizačních operátorů, kde však potřebujeme znát výsledky působení $U(g)$ na jednotlivé bázové funkce

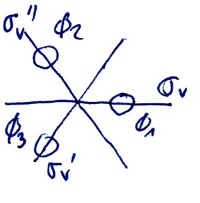
tj. $\quad U(g)\psi_i = \sum_j \psi_j D_{ji}(g) \quad$ a $\quad U(g)\varphi_k = \sum_\ell \varphi_\ell D_{\ell k}(g)$

a tedy matice reprezentující $g \in G$

– v případě symetrizovaných 1s orbitalů, tj.

$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\phi_1 - \phi_2 - \phi_3)$
$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 - \phi_3)$

jsou transformační matice stejné jako pro (x,y), když působíme C_{3v} v $\mathbb{R}^3$:



$\Rightarrow$

tj. $\quad D^E(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^E(C_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D^E(C_3^2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

$$D^E(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad D^E(\underset{\sigma_v C_3^2}{\overset{}{\sigma_v'}}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D^E(\underset{\sigma_v C_3}{\sigma_v''}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

($\sigma_v' = \sigma_v C_3^2$, $\sigma_v'' = \sigma_v C_3$)

a např. symetrickou kombinaci $\Psi_1^{A_1 1}$ bychom měli dostat pomocí

$$P^{A_1}\psi_1\varphi_1 = \frac{1}{\#C_{3v}} \sum_{g \in C_{3v}} \chi^{A_1}(g)^* \, U(g)\, \psi_1\varphi_1 \Rightarrow$$

$$P^{A_1}\psi_1\varphi_1 = \frac{1}{6}\sum_{g\in C_{3v}}\sum_{j,l}\psi_j\varphi_l \underbrace{D^{E}_{j1}(g)\,D^{E}_{l1}(g)}_{} = \frac{1}{6}\left(6\times 2\times 2 \text{ členů}\right)$$

čtyři součiny, které se opakují i u P^{A_2} a P^{E}

- lze uspořádat do tabulky

	C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''	Σ_{A_1}	Σ_{A_2}	Σ_E
$D_{11}\cdot D_{11}$ →	$\psi_1\varphi_1$	1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	3	0	$\frac{3}{2}$
stejné $D_{11}\cdot D_{21}$ →	$\left\{\begin{array}{l}\psi_1\varphi_2\\ \psi_2\varphi_1\end{array}\right\}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	0	0	0
$D_{21}\cdot D_{21}$	$\psi_2\varphi_2$	0	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	0	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	3	0	$-\frac{3}{2}$
	A_1	1	1	1	1	1	1			
	A_2	1	1	1	-1	-1	-1			
	E	2	-1	-1	0	0	0			

↑ skalární součin řádku A_1 a příslušného řádku $\psi_i\varphi_j$ apod. pro Σ_{A_2} a Σ_E

a tedy
$$P^{A_1}\psi_1\varphi_1 = \frac{1}{6}\left(3\psi_1\varphi_1 + 3\psi_2\varphi_2\right) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1\varphi_1 + \psi_2\varphi_2\right) = \Psi^{A_1 1}_{1}$$
$$P^{A_2}\psi_1\varphi_1 = 0$$
$$P^{E}\psi_1\varphi_1 = \frac{1}{6}\left(\frac{3}{2}\psi_1\varphi_1 - \frac{3}{2}\psi_2\varphi_2\right) \Rightarrow \Psi^{E1}_{1}$$

- obdobně bychom mohli spočítat např.

$$P^{A_1}\psi_1\varphi_2 = 0$$
$$\Psi^{A_2 1}_{1} \Leftarrow P^{A_2}\psi_1\varphi_2 = \frac{1}{3}\left(\psi_1\varphi_2 - \psi_2\varphi_1\right)$$
$$\Psi^{E1}_{2} \Leftarrow P^{E}\psi_1\varphi_2 = \frac{1}{2}\left(\psi_1\varphi_2 + \psi_2\varphi_1\right)$$

zde je třeba mít všechny čtyři řádky, neboť $D_{11}\cdot D_{22} \neq D_{21}\cdot D_{12}$