Vztah reprezentací grup a jejich podgrup

1) **od grupy G k její podgrupě H** – **subdukce** (subdukované repr.)

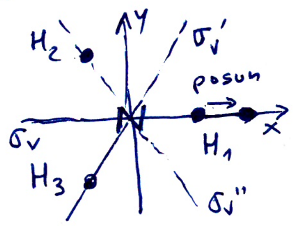
- omezíme-li se v jisté reprezentaci Γ grupy G pouze na prvky její podgrupy H, dostaneme opět reprezentaci, které se říká subdukovaná repr. $\Gamma\downarrow H$ z grupy G na podgrupu H
- pokud bude Γ některou z IR grupy G, např. Γ_G^μ s charakterem $\chi_G^\mu(g)$, pak $\Gamma_G^\mu\downarrow H$ bude obecně reducibilní reprezentace s charakterem $\chi_H^{\mu\downarrow H}(h)=\chi_G^\mu(h)$ pro $\forall h\in H$ a můžeme ji rozložit na IR podgrupy H pomocí

$$\alpha_\nu^{\mu\downarrow H} = \frac{1}{\# H}\sum_{h\in H}\chi_H^\nu(h)^*\,\chi_G^\mu(h)$$

kde $\alpha_\nu^{\mu\downarrow H}$ vyjadřuje, kolikrát se IR Γ_H^ν vyskytuje v subdukované repr. z IR Γ_G^μ grupy G.

Příklady: a) subdukce z C_{3v} na podgrupu $H=\{E,\sigma_v\}\sim C_s$ při narušení symetrie tím, že prodloužíme jednu vazbu N-H v molekule NH_3 (σ_v je stále symetrií)

pohled shora



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

$H\sim C_s$	E	σ_v
A'	1	1
A''	1	−1
$A'=A_1\downarrow H$	1	1
$A''=A_2\downarrow H$	1	−1
$A'\oplus A''=E\downarrow H$	2	0

charaktery IR podgrupy H (řádky A', A'')

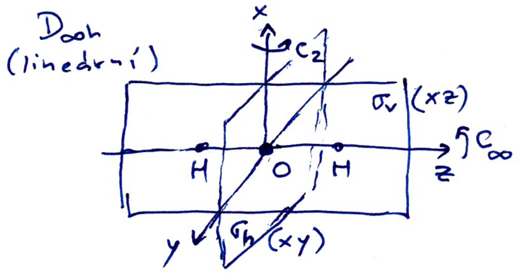
charaktery subdukovaných repr. z IR grupy C_{3v} (řádky $A_1\downarrow H$, $A_2\downarrow H$, $E\downarrow H$)

neboť $\alpha_{A'}^{E\downarrow H}=\frac{1}{2}(1\cdot 2+1\cdot 0)=1$ apod.

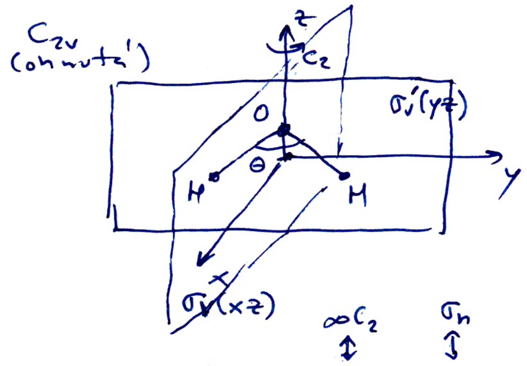
- vidíme tedy, že se při narušení symetrie rozštěpí dvojnásobně degenerovaná hladina příslušející IR E grupy C_{3v} na nedegenerované hladiny příslušející IR A' a A'' podgrupy H

b) subdukce z $D_{\infty h}$ (lineární geometrie) na C_{2v} (ohnutá geom.) pro H_2O^-

- je nutné dát pozor na orientaci souřadného systému
- obvyklá orientace – osa z je hlavní rotační osou symetrie



vs.



- standardní tabulky charakterů

$D_{\infty h}$	E	$2C_\infty^\varphi(z)$ ... $C_2(z)$	$\infty\sigma_v$	$\sigma_h(xy)$	$2S_\infty^\varphi(z)$ ... i	∞C_2
Σ_g^+	1	1 ... 1	1	1	1 ... 1	1
$R_z \to \Sigma_g^-$	1	1 ... 1	−1	1	1 ... 1	−1
$(R_x,R_y) \to \Pi_g$	2	$2\cos\varphi$ ... −2	0	−2	$-2\cos\varphi$ ... 2	0
Δ_g	2	$2\cos2\varphi$ ... 2	0	2	$2\cos2\varphi$ ... 2	0
⋮	⋮	⋮ ⋮	⋮	⋮	⋮ ⋮	⋮
$z \to \Sigma_u^+$	1	1 ... 1	1	−1	−1 ... −1	−1
Σ_u^-	1	1 ... 1	−1	1	1 ... 1	−1
$(x,y) \to \Pi_u$	2	$2\cos\varphi$ ... −2	0	2	$2\cos\varphi$ ... −2	0
Δ_u	2	$2\cos2\varphi$ ... 2	0	−2	$-2\cos2\varphi$ ... −2	0
⋮						

		∞C_2 ↕	σ_h ↕	$\infty\sigma_v$ ↕	
C_{2v}	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$	
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	−1	−1	R_z
B_1	1	−1	1	−1	x, R_y
B_2	1	−1	−1	1	y, R_x
$\Sigma_g^- \downarrow C_{2v}$	1	−1	1	−1	$= B_1$
$\Pi_g \downarrow C_{2v}$	2	0	−2	0	$= A_2 \oplus B_2$
$\Sigma_u^+ \downarrow C_{2v}$	1	−1	−1	1	$= B_2$
$\Pi_u \downarrow C_{2v}$	2	0	2	0	$= A_1 \oplus B_1$
⋮					

- pozor: přiřazení x, y, z a R_x, R_y, R_z do IR grup $D_{\infty h}$ a C_{2v} je zavádějící, neplatí např. že by se $\underset{(x,y)}{\Pi_u}$ rozložilo na $\underset{x}{B_1}$ a $\underset{y}{B_2}$

- je nutné použít korespondenci

$$\left.\begin{array}{l} x\,(D_{\infty h}) \leftrightarrow z\,(C_{2v}) \\ y \leftrightarrow x \end{array}\right\} \Rightarrow \underset{(x,y)}{\Pi_u} = \underset{(z)}{A_1} \oplus \underset{(x)}{B_1}$$

$$z \leftrightarrow y \quad \Rightarrow \underset{(z)}{\Sigma_u^+} = \underset{(y)}{B_2}$$

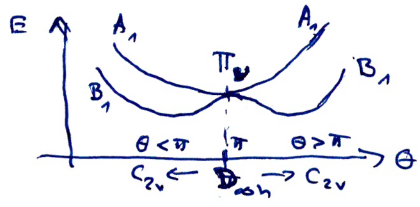
$$\left.\begin{array}{l} R_x \leftrightarrow R_z \\ R_y \leftrightarrow R_x \end{array}\right\} \Rightarrow \underset{(R_x,R_y)}{\Pi_g} = \underset{(R_z)}{A_2} \oplus \underset{(R_x)}{B_2}$$

$$R_z \leftrightarrow R_y \quad \Rightarrow \underset{(R_z)}{\Sigma_g^-} = \underset{(R_y)}{B_1}$$

přesněji $\Pi_u \downarrow C_{2v} = A_1 \oplus B_1$ atd.

což souhlasí z rozklady charakterů subdukovaných repr. $\Sigma_g^- \downarrow C_{2v}$, $\Pi_g \downarrow C_{2v}$ atd. výše v tabulce, použijeme-li korespondenci $E \leftrightarrow E$, $\infty C_2 \leftrightarrow C_2$, $\sigma_h \leftrightarrow \sigma_v$, $\infty\sigma_v \leftrightarrow \sigma_v'$

- dochází tedy k rozštěpení degenerovaných hladin



2) Indukované reprezentace pro konečné grupy aneb od podgrupy ke grupě

- mějme grupu G a její podgrupu H, G lze tedy rozložit na levé třídy $G = g_1 H + g_2 H + \ldots + g_M H$, kde g_i lze volit libovolně z daných tříd,

avšak položíme $g_1 = e$ (tedy první třída je H)

index podgrupy H v G je $M = \frac{\# G}{\# H}$

- nechť $D_H(h)$ je lib. maticová repr. podgrupy H a nechť $\phi_1, \ldots, \phi_d$ je báze této reprezentace (která je tedy d-rozměrná) - jde o bázi určitého invariantního ireduc. podprostoru při působení H, ne však obecně při působení G

tj. $$T(h)\phi_i = \sum_j \phi_j D_H(h)_{ji} \quad \text{pro } \forall h \in H$$

- definujme formálně (tj. nebudeme zkoumat konkrétní případ, předpokládejme, že takto dostaneme lineárně nezávislé fce)

$$\phi_{ti} = T(g_t)\phi_i$$, kde g_t definují levé třídy H v G, $t = 1, \ldots, M$, $i = 1, \ldots, d$

ukažme, že tyto fce tvoří bázi Md-rozměrné repr. grupy G, tj. že platí

$$T(g)\phi_{ti} = \sum_{sj} \phi_{sj} D_G(g)_{sj,ti}$$

- působením g postupně dostáváme

$$T(g)\phi_{ti} = T(g g_t)\phi_i = T(g_s) T(g_s^{-1} g g_t)\phi_i =$$ - neboť $g g_t$ určitě náleží do nějaké levé třídy, řekněme $g_s H \Rightarrow g_s^{-1} g g_t \in H$

$$= T(g_s) \sum_j \phi_j D_H(g_s^{-1} g g_t)_{ji}$$

$$= \sum_j \phi_{sj} D_H(g_s^{-1} g g_t)_{ji}$$

a tedy $T(g)\phi_{ti}$ je lin. kombinací ϕ_{sj} a dokonce pouze pro taková s, pro něž platí $g g_t \in g_s H$ $\Rightarrow$ matici $D_G(g)$ dostaneme přidáním
$$\delta_{st}(g) \begin{cases} 1 & \text{pro } g g_t \in g_s H \\ 0 & \text{jindy} \end{cases}$$

neboli
$$\boxed{D_G(g)_{sj,ti} = \delta_{st}(g) D_H(g_s^{-1} g g_t)_{ji}}$$
- toto je <u>indukovaná repr.</u> grupy G z repr. $D_H(h)$ podgrupy H, $D_G = D_H \uparrow G$

- snadno ověříme, že jde vskutku o reprezentaci grupy G

neboť 1) pro $g = e$ dostaneme $g_t = g_s$ $\Rightarrow$ $D_G(e) = \mathbb{1}_{Md \times Md}$

2) mělo by též platit $D_G(g)\,D_G(g') = D_G(gg')$

rozepsáním dostaneme

$$\sum_{rk} D_G(g)_{sj,rk}\, D_G(g')_{rk,ti} = \sum_{rk} \underbrace{\delta_{sr}(g)\,\delta_{rt}(g')}_{=1} D_H(g_s^{-1} g g_r)_{jk}\, D_H(g_r^{-1} g' g_t)_{ki} =$$

1 pokud $g g_r = g_s h$ pro $h \in H$, $g' g_t = g_r h'$ pro $h' \in H$ $\Big\}$ $g g' g_t = g_s \underbrace{h h'}_{\in H}$

$$= \delta_{st}(gg')\, D_H(g_s^{-1} g g' g_t)_{ji}$$

$$= D_G(gg')_{sj,ti}$$

- pokud je $D_H(h)$ unitární, pak též $D_G(g)$ je unitární, neboť

$$\left[D_G(g)^{-1}\right]_{sj,ti} = \delta_{st}(g^{-1})\, D_H(g_s^{-1} g^{-1} g_t)_{ji} = \delta_{ts}(g)\, D_H\big((g_t^{-1} g g_s)^{-1}\big)_{ji} =$$

$g^{-1} g_t = g_s h \Rightarrow g g_s = g_t \underbrace{h^{-1}}_{\in H}$

unitarita D_H

$$= \delta_{ts}(g)\, D_H(g_t^{-1} g g_s)^*_{ij} = D_G(g)^*_{ti,sj} = \left[D_G(g)^\dagger\right]_{sj,ti}$$

- pro charakter indukované repr. dostaneme

$$\chi_G(g) = \sum_{sj} \delta_{ss}(g)\, D_H(g_s^{-1} g g_s)_{jj} = \sum_s \delta_{ss}(g)\, \chi_H(g_s^{-1} g g_s)$$

- indukovaná repr. je obecně reducibilní, i když začínáme s ireducibilní repr. Γ_H^ν podgrupy H, dostáváme rozklad

$$\chi^{\nu\uparrow G}(g) = \sum_\mu a_\mu^{\nu\uparrow G}\, \chi_G^\mu(g)$$

charakter indukované repr. z IR Γ_H^ν

charaktery IR Γ_G^μ grupy G

což můžeme též vyjádřit jako

nahradíme sumu přes H prvků g_s sumou přes prvky G s podmínkou $g'^{-1} g g' \in H$

$$\chi^{\nu\uparrow G}(g) = \sum_s \delta_{ss}(g)\, \chi_H^\nu(g_s^{-1} g g_s) = \frac{1}{\#H} \sum_{\substack{g' \in G \\ g'^{-1} g g' \in H}} \chi_H^\nu(g'^{-1} g g')$$

musíme dělit #H, neboť tolik různých g_s bychom mohli zvolit

buď g není sdružené s žádným prvkem z H

pak $\chi(g) = 0$, nebo je, a pak $g g_s \in g_s H$

a též $g a_s \in a_s H$ pro $\forall a_s \in g_s H = a_s H$, neboť $a_s = g_s h$ pro jisté h, a tedy $g g_s h = g_s h' h \in g_s H$

- tedy $a_\mu^{\nu\uparrow G}$ nám říká, kolikrát se IR Γ_G^μ grupy G vyskytuje v indukované repr., kterou dostaneme z IR Γ_H^ν podgrupy H

- $a_\mu^{\nu\uparrow G}$ úzce souvisí s $a_\nu^{\mu\downarrow H}$, které jsme měli u rozkladu subdukované repr. podgrupy H, když jsme startovali s IR Γ_G^μ grupy G

viz Frobeniův reciproční teorém

Frobeniův reciproční teorém

- pokud jak při subdukci, tak při indukci začínáme s ireducibilními repr. G, resp. H a rozložíme-li subduk. a indukované repr. do IR H, resp. G, tj. máme

$$\chi_G^{\nu\uparrow G}(g) = \sum_\mu a_\mu^{\nu\uparrow G} \chi_G^\mu(g) \quad \text{a} \quad \chi_H^{\mu\downarrow H}(h) = \sum_\nu a_\nu^{\mu\downarrow H} \chi_H^\nu(h)$$

pak Frobeniův reciproční teorém říká, že

$$\boxed{a_\mu^{\nu\uparrow G} = a_\nu^{\mu\downarrow H}}$$

neboli kolikrát se IR Γ_G^μ grupy G vyskytuje v rozkladu repr. $\Gamma_G^{\nu\uparrow G}$, která je indukovanou repr. grupy G z IR Γ_H^ν podgrupy H, tolikrát se vyskytuje IR Γ_H^ν v rozkladu repr. $\Gamma^{\mu\downarrow H}$, která je subdukovanou repr. z IR Γ_G^μ grupy G.

neboť

$$a_\mu^{\nu\uparrow G} = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G} \chi_G^\mu(g)^* \chi^{\nu\uparrow G}(g) = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G} \chi_G^\mu(g)^* \frac{1}{\#H} \sum_{\substack{g'\in G \\ g'^{-1}gg'\in H}} \chi_H^\nu(g'^{-1}gg') =$$

substituce $h = g'^{-1} g g' \in H$

tj. $g = g' h g'^{-1}$

$$= \frac{1}{\#G}\frac{1}{\#H}\sum_{h\in H}\sum_{g'\in G} \chi_G^\mu(\underbrace{g'hg'^{-1}}_{})^* \chi_H^\nu(h)$$

sdružený prvek k h, charakter stejný -> lze nahradit h

$$= \cancel{\frac{\overbrace{\sum_{g'\in G} 1}^{\#G}}{\#G}} \frac{1}{\#H}\sum_{h\in H} \chi_G^\mu(h)^* \chi_H^\nu(h) = a_\nu^{\mu\downarrow H} = \frac{1}{\#H}\sum_{h\in H} \chi_H^\nu(h)^* \chi_G^\mu(h)$$

neboť $a_\nu^{\mu\downarrow H}$ je celé číslo, takže na poloze * nezáleží

Př. Pro triviální podgrupy dostaneme

1) pokud $H = G$, je $M=1$, $g_1 = e$ a tedy $D_H\uparrow G = D_H$, tedy jde o stejnou reprezentaci

2) pokud $H = \{e\}$, pak $M = \#G$, $gH = \{g\}$ a navíc H má jedinou IR, a sice triviální $D_H(e) = 1$

odtud $D_G(g)_{st} = \delta_{st}(g) \begin{cases} 1 & \text{pro } gg_t = g_s \\ 0 & \text{jindy} \end{cases}$

jde tedy o <u>regulární reprezentaci</u>

Př. indukce, viz indukované repr. grupy $S_4 \sim T_d$ z IR grupy $S_3 \sim C_{3v}$

Pozn: Každá IR grupy G je obsažena v některé indukované repr. z IR podgrupy H a naopak, každá IR podgrupy H je obsažena v některém z rozkladů subduk. repr. z IR grupy G.

Neboť z každé IR podgrupy H lze vyrobit repr. grupy G a tu rozložit na IR grupy G $\Rightarrow$ každá ~~repr.~~ IR podgrupy H musí být v nějakém rozkladu IR grupy G kvůli Frobeniovu recipr. teorému

A obráceně každou IR grupy G lze rozložit na IR podgrupy H a z nich pak udělat indukované repr., které obsahují danou IR grupy G.

3) ireducibilní reprezentace grupy $G = H_1 \times H_2$, tj. přímého součinu dvou podgrup

- pokud je grupa přímým součinem dvou svých podgrup a lze tedy každý prvek $g \in G$ napsat jednoznačně jako $g = h_1 h_2$, $h_1 \in H_1$ a $h_2 \in H_2$, pak z libovolných dvou IR $\Gamma^{\mu}_{H_1}$ a $\Gamma^{\nu}_{H_2}$ podgrup H_1 a H_2 dostaneme IR grupy G pomocí přímého součinu matic $D^{\mu}(h_1)$ a $D^{\nu}(h_2)$, tj.

$$D^{\mu\times\nu}_{k\ell,ij}(h_1 h_2) = D^{\mu}_{ki}(h_1)\, D^{\nu}_{\ell j}(h_2)$$

s charakterem $\chi^{\mu\times\nu}(h_1 h_2) = \chi^{\mu}(h_1)\,\chi^{\nu}(h_2)$

- že jde vskutku o IR lze vidět z Frobeniova kritéria ireducibility, neboť

$$\sum_{g\in G} \chi^{\mu\times\nu}(g)^* \chi^{\mu\times\nu}(g) \underset{g=h_1h_2}{=} \sum_{h_1\in H_1} \chi^{\mu}(h_1)^* \chi^{\mu}(h_1) \cdot \sum_{h_2\in H_2} \chi^{\nu}(h_2)^* \chi^{\nu}(h_2) \underset{\Gamma^{\mu}_{H_1} \text{ a } \Gamma^{\nu}_{H_2} \text{ jsou IR}}{=} \# H_1 \cdot \# H_2 = \# G$$

- navíc takto dostaneme všechny IR grupy G, neboť $\sum_{\mu,\nu} (d_\mu d_\nu)^2 = \# H_1 \cdot \# H_2 = \# G$

- příklady viz tabulky charakterů, např. pro $D_{3h} = C_{3v} \times C_s$

Pozn: pro polopřímý součin $G = H_1 \rtimes H_2$ lze také konstruovat IR přímo z repr. podgrupy H_1 a z repr. tzv. malých podgrup, ale zde již není prostor jít do podrobností,
(viz např. S. Sternberg: Group theory and physics, kap. 3.8)

Cvičení: indukované reprezentace grupy C_{3v} z IR podgrupy $H=\{E,\sigma_v\}$

- grupa C_{3v} není přímým součinem dvou svých podgrup, ale jen polopřímým součinem, je ovšem možné získat IR této grupy z IR podgrupy $H=\{E,\sigma_v\}$ pomocí indukce, využijeme-li toho, že každá grupa má triviální IR

- podgrupa H má dvě IR

H	E	σ_v
A'	1	1
A''	1	−1

a grupu C_{3v} lze rozložit na levé třídy pomocí

$$C_{3v} = \underset{\underset{g_1}{\shortparallel}}{E}H + \underset{\underset{g_2}{\shortparallel}}{C_3}H + \underset{\underset{g_3}{\shortparallel}}{C_3^2}H = \{E,\sigma_v\} + \{C_3,\sigma_v''\} + \{C_3^2,\sigma_v'\}$$

- pro získání charakterů indukovaných reprezentací $A'\uparrow C_{3v}$ a $A''\uparrow C_{3v}$ není třeba konstruovat matice těchto repr., ale použijeme přímo vzorec

$$\chi^{M\uparrow G}(g) = \sum_{s=1}^{M} \delta_{ss}(g)\, \chi_H^M(g_s^{-1} g g_s)$$

kde $M = \frac{\#G}{\#H} = 3$, $g_1=E$, $g_2=C_3$, $g_3=C_3^2$ a $\delta_{ss}(g)=1$ pro $g_s^{-1} g g_s \in H$
$= 0$ jindy

- pro $g=C_3$ nemůžeme sdružením dostat E, nebo σ_v a tedy charaktery pro C_3 budou nulové

- pro $g=E$ dostaneme dimenzi indukované repr., zde $3=M$, neboť A' i A'' jsou jednorozměrné

- pro $g=\sigma_v$ máme $E\sigma_v E=\sigma_v$, $C_3^2\sigma_v C_3 = \sigma_v'' \notin H$, $C_3\sigma_v C_3^2 = \sigma_v' \notin H$
takže $\chi^{A'\uparrow C_{3v}}(\sigma_v) = \chi_H^{A'}(\sigma_v) = 1$, $\chi^{A''\uparrow C_{3v}}(\sigma_v) = \chi_H^{A''}(\sigma_v) = -1$

- celkem

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
$A'\uparrow C_{3v}$	3	0	1	$= A_1 \oplus E$
$A''\uparrow C_{3v}$	3	0	−1	$= A_2 \oplus E$
A_1	1	1	1	$\Rightarrow \alpha_{A_1}^{A'\uparrow C_{3v}} = \frac{1}{6}(3+3) = 1 \Rightarrow$
E	2	−1	0	$= \chi^{A'\uparrow C_{3v}} - \chi^{A_1}$ $\Rightarrow \alpha_E^{A''\uparrow C_{3v}} = 1$
A_2	1	1	−1	$= \chi^{A''\uparrow C_{3v}} - \chi^E$

tyto dvě IR (E, A_2) plynou z výše uvedených

- výsledek je v souladu s Frobeniovým recipročním teorémem, neb jsme u subdukce z C_{3v} na H měli $A_1\downarrow H = A'$, $A_2 \downarrow H = A''$, $E\downarrow H = A'\oplus A''$