Základní pojmy teorie grup

Def: Grupa je množina G s binární operací $\cdot$ (násobení, sčítání apod.), pro kterou platí: 1) G je uzavřená vůči $\cdot$, tj. $a \cdot b \in G$ pro $\forall a,b \in G$

2) asociativita: pro $\forall a,b,c \in G$: $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$

3) existuje identita $e \in G$: (též jednotkový či neutrální prvek)

$$e \cdot a = e \cdot a = a \quad \text{pro } \forall a \in G$$

4) inverzní prvek: pro $\forall a \in G \ \exists a^{-1} \in G : a^{-1} \cdot a = a a^{-1} = e$

- grupovou (binární) operaci často nijak neznačíme, tj. píšeme ab
- identita e a inverzní prvek a^{-1} jsou jednoznačné

Dk sporem: 1) nechť e_1 a e_2 jsou různé identity, pak

$$e_1 e_2 = e_1 \quad \text{a zároveň} \quad e_1 e_2 = e_2 \Rightarrow e_1 = e_2 \quad \text{spor}$$

2) nechť b_1 a b_2 jsou inverzní k a^{-1}, pak

$$b_1 a = e = b_2 a \ | \cdot a^{-1} \Rightarrow b_1 = b_2 \quad \text{spor}$$

- zřejmě $(a^{-1})^{-1} = a$ a $(ab)^{-1} = b^{-1} a^{-1}$, neboť $(ab)(ab)^{-1} = a b b^{-1} a^{-1} = e$
- pozn: v definici grupy lze zmírnit axiomy např. jen na levé násobení, ale výše uvedené je standardní def.

• počet prvků grupy = řád grupy, značení $\# G$ nebo $|G|$

- konečný nebo nekonečný – diskrétní grupy, např. krystalografické
  – spojité – především Lieovy (později)

též po částech spojité (též smíšené)

např. $O(3)$ má dvě oddělené části vlastní ($\det = 1$) a nevlastní ($\det = -1$) rotace

• mluvíme o abstraktní grupě (daná např. vztahy mezi prvky nebo multiplikativní tabulkou) a jejích realizacích, které jsou ale z matematického hlediska totéž (stejná struktura, říkáme, že jsou tyto realizace izomorfní)

Def: <u>Izomorfismus</u> dvou grup je vzájemně jednoznačné zobrazení φ z G_1 na G_2, které zachovává grupovou operaci,

tj. pokud $\varphi: a_1 \mapsto a_2$ a $\varphi: b_1 \mapsto b_2$ pak $\varphi: a_1 b_1 \mapsto a_2 b_2$

neboli $\varphi(a_1 b_1) = \varphi(a_1)\varphi(b_1)$

- značíme $G_1 \sim G_2$ (G_1 je izomorfní s G_2)

Př: Nejjednodušší (kromě triviální jednoprvkové grupy $\{e\}$) konečnou grupou je dvouprvková grupa $\{e, a\}$, pro kterou platí $a^2 = e$, což můžeme zapsat pomocí multiplikativní tabulky

$$\begin{array}{c|cc} & e & a \\ \hline e & ee & ea \\ a & ae & aa \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c|c} e & a \\ \hline a & e = a^2 \end{array}$$

má mnoho realizací:

1) $(\{1, -1\}, \cdot) = G$ (násobení 1 a −1)

2) $(\{0, 1\}, + \bmod 2) = Z_2$

3) bodové grupy

$C_s = \{E, \sigma\}$ (v pevných látkách značena m)

identita, zrcadlení

$C_i = \{E, i\}$ (též $\bar{1}$)

inverze

$C_2 = \{E, C_2\}$ (též 2)

rotace o 180°

(více o bodových grupách viz Cvičení: Bodové grupy)

4) grupa permutací 2-prvkové množiny

$S_2 = \left(\left\{\begin{pmatrix}1 2\\1 2\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 2\\2 1\end{pmatrix}\right\}, \text{ skládání permutací}\right)$

identická permutace, transpozice 1 a 2

5) maticové realizace, např.

$M = \left(\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right\}, \text{ násobení matic}\right)$

zrcadlení roviny (x, y) podél $x = y$

- ve skutečnosti mnoho dalších realizací, ale všechny izomorfní

$$G \sim Z_2 \sim C_s \sim C_i \sim C_2 \sim S_2 \sim M$$

Def: Grupa G je <u>komutativní</u> (též <u>abelovská</u>), pokud pro $\forall a, b \in G: ab = ba$.

Př: všechny tzv. <u>cyklické grupy</u> dané vztahem $a^n = e$ pro jisté n jsou komutativní. V tomto případě $n = \#G$ a $G = \{\underbrace{e, a, a^2, \ldots, a^{n-1}}_{n \text{ různých prvků}}\}$

- obvykle se vyskytují jako podgrupy větších grup, neboť každý prvek konečné grupy $g \in G$ generuje cyklickou podgrupu (viz níže), neboť $g^n = e$ pro jisté n.

Věta o přeuspořádání (rearrangement theorem)

VoP: Pro libovolný fixní prvek $g \in G$ obsahují množiny

$$L_g(G) = \{gh \mid h \in G\} \quad \text{levé posunutí}$$
$$R_g(G) = \{hg \mid h \in G\} \quad \text{pravé posunutí}$$

všechny prvky grupy G a každý právě jednou.

Dk: 1) Uvažujme lib. prvek $h' \in G$ a vynásobme ho $g^{-1}h' = h$,
(určitě $g^{-1} \in G$ a lze jím násobit)
pak ale $gh = g(g^{-1}h') = h' \in L_g(G)$
toto dle předpokladu patří do $L_g(G)$
takže každý prvek z G patří do $L_g(G)$ a obdobně pro $R_g(G)$.

2) jednoznačnost dokážeme sporem
nechť $\exists h_1 \neq h_2 : gh_1 = gh_2$, ovšem aplikací g^{-1} zleva
dostaneme $h_1 = h_2$, což je spor. c.b.d
(což bylo dokázáno)

- druhá část důkazu je důležitá v případě nekonečných grup
- z VoP plyne, že multiplikativní tabulka konečné grupy musí mít na každém řádku a v každém sloupci všechny prvky grupy, jen zpermutované, ovšem pozor! toto není dostatečná podmínka, aby určitá tabulka definovala grupu (viz protipříklad pro $\#G = 5$)

Př: 3-prvková grupa je jen jedna - cyklická $a^3 = e$

e	a	b
a	b	e
b	e	a

zde nemůže být e, ani a ⇒ jediná možnost b

$\sim C_3 = \{E, C_3, C_3^2\}$, kde C_3 je rotace o $\frac{2\pi}{3} = 120°$

4-prvkové grupy jsou dvě (přesvěčte se, že další není)

cyklická

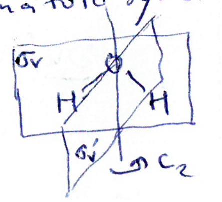
e	a	b	c
a	b	c	e
b	c	e	a
c	e	a	b

$\sim C_4 = \{E, C_4, C_2, C_4^3\}$, $C_2 = C_4^2$
otočení o $\frac{2\pi}{4} = 90°$

4-grupa (komutativní)

e	a	b	c
a	e	c	b
b	c	e	a
c	b	a	e

$\sim C_{2v} = \{E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'\}$ roviny zrcadlení
(molekula vody má tuto symetrii)



ale i $\sim D_2 \sim C_{2h}$ (později)

Př: 5-prvková pouze jedna (pro každé prvočíslo je pouze cyklická)

e	a	b	c	d
a	b	c	d	e
b	c	d	e	a
c	d	e	a	b
d	e	a	b	c

$a^5 = e$ $\sim C_5$

ovšem např.

e	a	b	c	d
a	e	c	d	b
b	d	e	a	c
c	b	d	e	a
d	c	a	b	e

není grupou neboť $(ab)d = cd = a$ ale $a(bd) = ac = d$ a není tedy splněna asociativita

---

- Podgrupy

Def: Podgrupa H grupy G (značeno $H \leq G$) je podmnožina grupy G, která je sama o sobě grupou se stejnou binární operací.

Př: cyklická grupa C_4 má podgrupy $\{E\}$ a $\{E, C_2\}$ (a C_4)

4-grupa C_{2v} má podgrupy $\{E\}$, $\{E, C_2\}$, $\{E, \sigma_v\}$ a $\{E, \sigma_v'\}$ (a C_{2v})

ovšem např. $\{E, \sigma_v, \sigma_v'\}$ není podgrupou : $\sigma_v \sigma_v' = C_2$

Věta: Neprázdná podmnožina $H \subset G$ je podgrupou G, právě když $gh^{-1} \in H$ pro všechny $g, h \in H$.

Dk: $\Rightarrow$ zřejmé ($h^{-1} \in H \Rightarrow gh^{-1} \in H$)

$\Leftarrow$ ukažme, že pak H splňuje axiomy grupy:

1) pokud $g \in H$, pak $gg^{-1} = e \in H$

2) položme $g = e \in H$, pak $eh^{-1} \in H \Rightarrow h^{-1} \in H$ pro $\forall h \in H$

3) víme, že $h^{-1} \in H \Rightarrow g(h^{-1})^{-1} = gh \in H$ pro $\forall g, h \in H$ c.b.d.

Věta: Průnik dvou podgrup H_1 a H_2 grupy G je opět podgrupou G.

Dk: plyne z předchozí věty, neboť jsou-li H_1 a H_2 podgrupy, pak $e \in H_1 \cap H_2$ (tj. jde o neprázdnou podmnožinu G) a pokud g a $h \in H_1 \cap H_2$, pak určitě (jde o podgrupy) $gh^{-1} \in H_1 \cap H_2$ c.b.d.

Věta: Pro každý prvek konečné grupy G existuje přirozené n takové, že $g^n = e$. n se nazývá <u>řád prvku</u>.

Dk: V konečné grupě musí existovat $p > q$ takové, že $g^p = g^q$.

Položme $p = q + n$, pak $g^{q+n} = g^q g^n = g^q \Rightarrow g^n = e$. c.b.d.

• Generátory grupy a podgrup (u Lieových grup budou generátory něco jiného, prvky Lieovy algebry)

(5)

- pokud je n řád prvku g, pak $\{e, g, \dots, g^{n-1}\}$ tvoří podgrupu G generovanou prvkem g, která je cyklická
- obecněji dostaneme podgrupu grupy G z více prvků $g_1, \dots, g_n \in G$ vezmeme-li všechny součiny těchto prvků a jejich inverzí (u konečných grup stačí součiny, neboť pokud $g_i^n = e$, pak $g_i^{-1} = g_i^{n-1}$, ovšem u nekonečných grup takto inverzní prvek obecně nedostaneme)

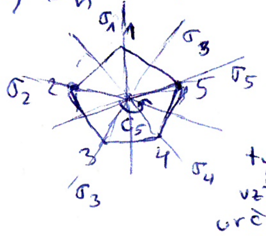
Věta: Pro libovolnou podmnožinu $X \subset G$ existuje nejmenší podgrupa G obsahující X. Její prvky tvoří všechny konečné součiny prvků z X a jejich inverzí.

Dk: Nechť $H_i \leq G$ jsou všechny podgrupy obsahující $X \subset H_i$, pro $\forall i$. Pak $S = \bigcap_i H_i \leq G$ je (dle věty o průniku dvou podgrup) též podgrupou grupy G a zřejmě nejmenší takovou.

- značíme $S = \langle X \rangle$ = podgrupa generovaná množinou X
- pokud $\langle X \rangle = G$, říkáme, že X generuje grupu G
- nejmenší množinu prvků, které generují celou grupu, nazveme generátory grupy, v reprezentaci pak stačí najít repr. generátorů, zbytek např. maticovým násobením

Př:

1) $\langle \emptyset \rangle = \{e\}$ ← nejmenší podgrupa
2) $\langle g \rangle = \{e, g, \dots, g^{n-1}\}$ – cyklická podgrupa pro prvek řádu n
3) $D_n = \langle \{C_n, \sigma_1\} \rangle$ – grupa symetrií pravidelného n-úhelníku v rovině



- stačí dva prvky a vztahy

tyto vztahy určují celou grupu D_n:

$C_n^n = E \Rightarrow C_n^{-1} = C_n^{n-1}$

$\sigma_1^2 = E \Rightarrow \sigma_1^{-1} = \sigma_1$

a $\sigma_1 C_n \sigma_1 = C_n^{-1} \Rightarrow \sigma_1 C_n = C_n^{n-1} \sigma_1$

$\Rightarrow \sigma_1 C_n^2 = C_n^{n-1} \sigma_1 C_n = C_n^{n-2} \sigma_1$ atd.

abstraktně lze grupu D_n zadat pomocí

$\langle \{r, s\} \mid r^5 = s^2 = e,\ srs = r^{-1} \rangle$ – anglicky jde o „presentation" of the group D_n

$\Updownarrow$

$(sr)^2 = e$

- Levé a pravé rozkladové třídy (left / right cosets)

Def: Je-li $H \leq G$ (podgrupou G), pak množinu $gH = \{gh \mid h \in H\}$ nazveme levou (rozkladovou) třídou příslušnou k podgrupě H.

Podobně $Hg = \{hg \mid h \in H\}$ je pravá (rozkladová) třída.

Věta: Dvě levé (nebo pravé) třídy $g_1 H$ a $g_2 H$ obsahují buď stejné prvky a nebo jsou disjunktní.

Dk: buď jsou disjunktní

anebo obsahují alespoň jeden společný prvek,

pak ale $g_1 h_k = g_2 h_\ell$ pro jisté h_k a h_ℓ z H

dle VoP

$\Rightarrow g_2^{-1} g_1 = h_\ell h_k^{-1} \in H$ a tedy $g_2^{-1} g_1 H = H \Rightarrow g_1 H = g_2 H$

c.b.d.

- každý prvek $g \in G$ patří do jisté třídy, konkrétně gH a Hg.
- pokud $g' \in gH$, pak $g'H = gH$, neboť mají alespoň jeden společný prvek g'
- pokud je H konečná podgrupa, pak $\#gH = \#H$ $\Rightarrow$

Lagrangeova věta: Pokud G je konečná grupa řádu $\#G$ a H její podgrupa řádu $\#H$, pak $\#H$ dělí $\#G$

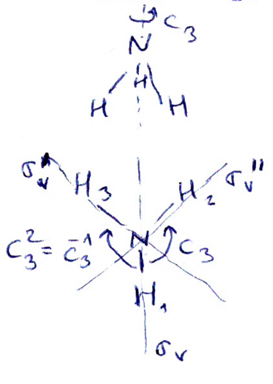
a $m = \dfrac{\#G}{\#H}$ se nazývá index podgrupy H v grupě G.

Dk: zřejmý z výše uvedeného.

- důsledek: řád prvku dělí $\#G$

$\Rightarrow$ všechny grupy, jejichž počet prvků je prvočíslo, jsou cyklické

Př: C_{3v} – jediná 6-prvková grupa různá od cyklické C_6 levé třídy



podgrupa C_3

	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v'	σ_v''	σ_v
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v''	σ_v	σ_v'
σ_v	σ_v	σ_v''	σ_v	E	C_3^2	C_3
σ_v'	σ_v'	σ_v	σ_v''	C_3	E	C_3^2
σ_v''	σ_v''	σ_v'	σ_v	C_3^2	C_3	E

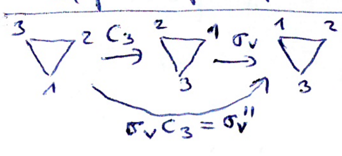
podgrupy: $C_3 \sim \{E, C_3, C_3^2\} \Rightarrow \sigma_v C_3 = \{\sigma_v, \sigma_v'', \sigma_v'\}$

$C_s \sim \{E, \sigma_v\} \Rightarrow C_3\{E, \sigma_v\} = \{C_3, \sigma_v'\}$

$C_3^2\{E, \sigma_v\} = \{C_3^2, \sigma_v''\}$

apod pro podgrupy $\{E, \sigma_v'\}$ a $\{E, \sigma_v''\}$

$\Leftarrow$



atd.

Sdružené prvky a jejich třídy (conjugacy classes)

Def: Prvek $g_1 \in G$ je sdružený s prvkem $g_2 \in G$ $(g_1 \sim g_2)$, pokud $\exists h \in G: h g_1 h^{-1} = g_2$.

- jde o relaci ekvivalence: 1) $g \sim g$ (pomocí $e \in G$)
  2) $g_1 \sim g_2 \Leftrightarrow g_2 \sim g_1$ (pomocí h^{-1})
  3) $g_1 \sim g_2$ a $g_2 \sim g_3 \Rightarrow g_1 \sim g_3$
  (díky vztahu $(h_1 h_2)^{-1} = h_2^{-1} h_1^{-1}$)

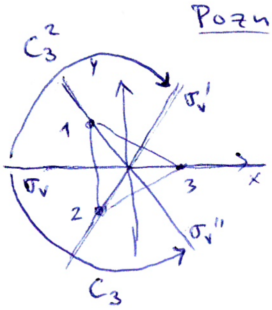
  a tedy grupa G se rozpadá na třídy ekvivalence, kterým říkáme třídy sdružených prvků, značí se C_g nebo (g), které vždy obsahují všechny prvky z G sdružené ke g
- uvidíme, že tyto třídy hrají důležitou roli v teorii reprezentací grup, u konečných grup bude počet tříd sdružených prvků roven počtu neekvivalentních ireducibilních reprezentací

Př: $C_{3v} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$

zde dostaneme 3 třídy: $(E) = \{E\}$ – identita vždy samostatně $(geg^{-1} = e)$

$(C_3) = \{C_3, C_3^2\}$ – neboť např. $\sigma_v C_3 \sigma_v = C_3^2 = \sigma_v' C_3 \sigma_v' = \sigma_v'' C_3 \sigma_v''$

$(\sigma_v) = \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ – nyní např. $C_3 \sigma_v C_3^2 = \sigma_v'' = \sigma_v' \sigma_v \sigma_v'$ atd.



Pozn: geometrická interpretace
- rotaci C_3 lze převést na $C_3^{-1} = C_3^2$ pomocí zrcadlení σ_v, ne však pomocí C_3 nebo C_3^2 $\Rightarrow$ grupa C_3 má třídy $(C_3) = \{C_3\}$, $(C_3^2) = \{C_3^2\}$
- zrcadlení σ_v lze převést na jiné zrcadlení σ_v' nebo σ_v'' buď pomocí rotací, nebo pomocí třetího zrcadlení

toto platí obecně u bodových grup: dvě operace symetrie patří do stejné třídy, pokud existuje operace (v grupě), která převede prvky těchto symetrií na sebe

- na příkladu C_{3v} vidíme, že počet prvků třídy dělí $\#G$
  to platí obecně u konečných grup, důkaz později (viz působení grupy na množině a na sobě samé)
- je-li G abelovská, pak $(g) = \{g\}$ pro $\forall g \in G$, neboť $g_1 = h g_2 h^{-1} = g_2 h h^{-1} = g_2$

Normální podgrupa a faktorová grupa

Def: Podgrupa $H \leq G$ je normální, pokud pro $\forall g \in G$ platí $gHg^{-1} \subset H$.

- někdy se jí také říká invariantní (vůči sdružení), značení $H \triangle G$
- vlastnosti, které můžou sloužit i jako ekvivalentní definice:

1) díky větě o přeuspořádání musí ve skutečnosti platit

$$gHg^{-1} = H \quad \text{a tedy } gH = Hg \quad \text{pro } \forall g \in G$$

tj. pro normální podgrupy jsou levé a pravé rozkladové třídy stejné a též obráceně

2) pro normální podgrupu je možné násobit levé (nebo pravé) třídy mezi sebou s tím, že výsledek je opět levá (pravá) třída

nebot' $(g_1H)(g_2H) = (g_1g_2)H$ díky $Hg_2 = g_2H$ a $HH = H$

- druhá vlastnost umožňuje zavést tzv. faktorovou grupu

Def: Množina $G/H = \{gH : g \in G\}$ (levý (nebo pravý) rozklad grupy G, kdy každou třídu bereme pouze jednou)

s operací násobení tříd tvoří grupu zvanou faktorová grupa nebo též faktorgrupa

- jednotkový prvek (identita) je $eH = H$ a inverzní $(gH)^{-1} = g^{-1}H$

Př: normální podgrupa grupy $C_{3v} = G$ je

$C_3 = H = \{E, C_3, C_3^2\}$ nebot' jsme viděli dříve, že $gC_3g^{-1} = C_3^2 \in H$ pro $g = \sigma_v, \sigma_v', a\ \sigma_v''$ a pro $g = C_3$ a C_3^2 je výsledek triviálně též v H

- odpovídající levé třídy jsou H a $\sigma_v H = \{\sigma_v, \sigma_v'', \sigma_v'\}$

a tedy faktorgrupa $C_{3v}/C_3 = \{H, \sigma_v H\}$, která je izomorfní s grupou $C_s = \{E, \sigma\}$

- ovšem podgrupa $\{E, \sigma_v\}$ není normální,

nebot' např. $\sigma_v' \sigma_v \sigma_v' = C_3 \sigma_v' = \sigma_v'' \notin \{E, \sigma_v\}$

- normální podgrupy jsou důležité pro rozklady grup na přímé a polopřímé součiny

Přímý (též direktní) součin grup

Def: Nechť G_1 a G_2 jsou libovolné grupy a $g_1 \in G_1$ a $g_2 \in G_2$.
Množina všech uspořádaných dvojic (g_1, g_2)
s binární operací $(g_1, g_2)(h_1, h_2) = (g_1 h_1, g_2 h_2)$ tvoří grupu,
která se nazývá přímý (direktní) součin grup G_1 a G_2 a
která se značí $G_1 \otimes G_2$ (nebo i $G_1 \times G_2$).

- identita je (e_1, e_2) a inverzní prvek $(g_1, g_2)^{-1} = (g_1^{-1}, g_2^{-1})$
- řád této grupy je $\# G_1 \otimes G_2 = \# G_1 \cdot \# G_2$ (pro konečné grupy)
- $\{(g_1, e_2) : g_1 \in G_1\}$ tvoří podgrupu (normální) izomorfní s G_1
  a podobně pro $G_2 \sim \{(e_1, g_2) : g_2 \in G_2\}$, prvky těchto
  podgrup komutují $(g_1, e_2)(e_1, g_2) = (g_1, g_2) = (e_1, g_2)(g_1, e_2)$
  a mají jediný společný prvek (e_1, e_2)
- navíc lze každý prvek $G_1 \otimes G_2$ vyjádřit jako součin
  dvou prvků z těchto podgrup $\Rightarrow$

Def: Řekneme, že určitá grupa G je přímým součinem dvou svých podgrup G_1 a G_2, pokud je izomorfní grupě $G_1 \otimes G_2$.

- výše uvedené vlastnosti jsou dostatečným kritériem:
  - pokud $G_1 \leq G$ a $G_2 \leq G$, které mají jediný společný prvek e,
    všechny prvky $g_1 \in G_1$ komutují se všemi $g_2 \in G_2$
    a každý prvek $g \in G$ lze psát jako $g = g_1 g_2$,
    pak je nutně $G \sim G_1 \otimes G_2$ a jde tedy o přímý součin G_1 a G_2.

- z podmínky $G_1 \cap G_2 = \{e\}$ plyne jednoznačnost rozkladu $g = g_1 g_2$
  neboť kdyby $g = g_1 g_2 = h_1 h_2 \Rightarrow \underset{\in G_1}{h_1^{-1} g_1} = \underset{\in G_2}{h_2 g_2^{-1}} = e$
  a tedy $h_1 = g_1$ a $h_2 = g_2$

- podmínka komutativity $\forall g_1 \in G_1$ se $\forall g_2 \in G_2$ je ekvivalentní
  podmínce, že G_1 a G_2 jsou normální podgrupy

Dk: $\Rightarrow$ nechť $g = h_1 h_2$, pak $g g_1 g^{-1} = h_1 h_2 g_1 h_2^{-1} h_1^{-1} = h_1 g_1 h_1^{-1} \in G_1$
a podobně pro G_2

$\Leftarrow$ uvažujme komutátor $\underbrace{g_1 g_2 g_1^{-1}}_{\in G_2} g_2^{-1} \in G_1 \wedge \in G_2$ a tedy $= e$
$g_1 \underbrace{g_2 g_1^{-1} g_2^{-1}}_{\in G_1}$ $\Rightarrow g_1 g_2 = g_2 g_1$

Polopřímý (též semidirektní) součin grup

- aneb, když je jen jedna z podgrup normální

Def: G je polopřímým součinem dvou svých podgrup G_1 a G_2, tj. $G = G_1 \circledS G_2$, nebo $G = G_1 \rtimes G_2$, pokud

1) G_1 a G_2 mají jediný společný prvek e
2) $\forall g \in G$ lze napsat jako $g = g_1 g_2$, kde $g_1 \in G_1$ a $g_2 \in G_2$
3) G_1 je normální podgrupou grupy G

- opět 1) implikuje jednoznačnost rozkladu $g = g_1 g_2$

Př: C_{3v} je polopřímý součin podgrup $G_1 = \{E, C_3, C_3^2\}$, která je normální, a $G_2 = \{E, \sigma_v\}$, která není normální, neboli

$$C_{3v} = \{E, C_3, C_3^2\} \rtimes \{E, \sigma_v\} = C_3 \rtimes C_s$$

neboť $\forall g \in C_{3v}$ lze zapsat jako $g_1 g_2$:

$$E = E \cdot E \ , \ C_3 = C_3 E \ , \ C_3^2 = C_3^2 E \ , \ \sigma_v = E\sigma_v \ , \ \sigma_v' = C_3 \sigma_v \ , \ \sigma_v'' = C_3^2 \sigma_v$$

- ovšem nejde o přímý součin, neboť C_3 a C_3^2 nekomutují s σ_v
- $\{E, C_3, C_3^2\} \times \{E, \sigma_v\}$ je ve skutečnosti izomorfní s cyklickou 6-prvkovou grupou, generátorem je $(C_3, \sigma_v)^6 = (E, E)$

Př: Euklidovská grupa E^3 je grupa všech lin. transformací v $\mathbb{R}^3$ zachovávajících vzdálenosti a úhly:

G_1 je nyní podgrupa všech translací (je normální)

a G_2 podgrupa všech rotací (můžou být i nevlastní)

neboť je-li $\vec{r}' = \{R, \vec{t}\}\vec{r} = R\vec{r} + \vec{t}$, tak složení – dostaneme

$$\{R_1, \vec{t}_1\}\{R_2, \vec{t}_2\} = \{R_1 R_2, R_1 \vec{t}_2 + \vec{t}_1\}$$

$$\{R, \vec{t}\}^{-1} = \{R^{-1}, -R^{-1}\vec{t}\}$$

a tedy $\underbrace{\{R, \vec{t}\}}_{\in E^3}\underbrace{\{1, \vec{a}\}}_{\in G_1}\underbrace{\{R, \vec{t}\}^{-1}}_{\in E^3} = \{1, R\vec{a}\} \in G_1$ (opět translace)

a protože $\{R, \vec{t}\} = \{1, \vec{t}\}\{R, \vec{0}\}$

musí být $E^3 = G_1 \rtimes G_2$

- podobně lze rozložit Poincaréovu grupu

Více o třídách sdružených prvků a normálních podgrupách

- Násobení tříd a tzv. konstanty tříd (toto bude důležité později při důkazu #ired. repr. = # tříd sdruž. prvků u konečných grup)
  - pokud vynásobíme dvě třídy sdružených prvků a ponecháme všechny součiny včetně opakujících se, dostaneme

$$(g_k)(g_l) = \{ g_i g_j \mid g_i \in (g_k) \text{ a } g_j \in (g_l) \} = \sum_{(g_m)} C^m_{kl} (g_m)$$

přes všechny třídy (různé)

kde $C^m_{kl} \geq 0$ jsou konstanty tříd

a protože se prvky můžou opakovat, může být $C^m_{kl} > 1$ pro jisté k, l, m

- toto plyne z obecnějšího tvrzení:

Nechť C je množina prvků G, ve které se můžou prvky opakovat, (tj. nelze psát $C \subset G$). Pak

$$\underbrace{g C g^{-1}}_{} = C \text{ pro } \forall g \in G \iff C = \sum_{(g_k)} a_k (g_k)$$

zde opět ponecháváme všechny výsledné prvky

opět suma přes všechny různé třídy

Dk: $\Rightarrow$ sporem

Nechť $g C g^{-1} = C$ pro $\forall g \in G$ a zároveň $C = \sum_{(g_k)} a_k (g_k) + Z$

zbytek, kde nejsou úplné třídy

kde Z je neprázdné a pro $a \in Z$: $(a) \not\subset Z$

Pak ale dle předpokladu $g Z g^{-1} = Z$ pro $\forall g \in G$,

toto je vlastně důkaz $\Leftarrow$ → [neboť $g (g_k) g^{-1} = (g_k)$ (dle VoP) a tedy i $g \left(\sum_{(g_k)} a_k (g_k)\right) g^{-1} = \sum_{(g_k)} a_k (g_k)$]

a tedy pokud $a \in Z$, pak i $g a g^{-1} \in Z \Rightarrow (a) \subset Z$ což je spor

Př. C_{3v} má třídy

$(E) = \{E\}$

$(C_3) = \{C_3, C_3^2\}$

$(\sigma_v) = \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$

a dostaneme

$(E)(g_k) = (g_k)$ pro g_k libovolné

$(C_3)(C_3) = \{C_3^2, E, E, C_3^{4}\} = 2(E) + (C_3)$

$(C_3)(\sigma_v) = 2(\sigma_v)$

$(\sigma_v)(C_3) = 2(\sigma_v)$

$(\sigma_v)(\sigma_v) = 3(E) + 3(C_3)$

toto jsou konstanty tříd

- Věta: $H \lhd G \iff H$ se skládá z celých tříd sdružených prvků grupy G.

Dk. zřejmý z definic a tvrzení výše o množině C: $g C g^{-1} = C \iff C = \sum_{(g_k)} a_k (g_k)$

- <u>Centrum grupy G</u> je podgrupa $Z(G)$ obsahující prvky G, které komutují se všemi $g \in G$, tj. (zřejmě jde tedy o abelovskou podgrupu)

$$Z(G) = \{ z \in G \mid zg = gz \text{ pro } \forall g \in G \}$$

- jde vskutku o podgrupu: $e \in Z(G)$ (asociativita zřejmá)

  $zg = gz \Rightarrow gz^{-1} = z^{-1}g$

  a pro $z_1 \in Z(G)$ a $z_2 \in Z(G) \Rightarrow (z_1 z_2) g = z_1 g z_2 = g z_1 z_2$

- jde o <u>normální</u> podgrupu (neboť $gzg^{-1} = zgg^{-1} = z$)

  složenou z jednoprvkových tříd $(z) = \{z\}$

- pokud je G abelovská, pak $Z(G) = G$

- <u>Grupa je prostá</u> (simple), pokud neobsahuje žádnou netriviální (tj. různou od $\{e\}$ a G) normální podgrupu

- <u>Grupa je poloprostá</u> (semi simple), pokud neobsahuje žádnou netriviální <u>abelovskou</u> normální podgrupu

  - tyto charakterizace grup hrají důležitou roli v klasifikaci konečných a Lieových grup a také v teorii reprezentací grup

Homomorfismus a izomorfismus

- umožňují vyšetřovat vztahy mezi grupami
- speciálním homomorfismem bude reprezentace grupy na vektorovém prostoru, půjde o homomorfismus z grupy do grupy všech lineárních transformací na tento prostoru

Def: Homomorfismus z grupy G do grupy H je zobrazení $\varphi: G \to H$, pro které platí $\varphi(ab) = \varphi(a)\varphi(b)$ pro $\forall a, b \in G$,
tj. φ přenáší (zachovává) grupovou operaci.
– pro $b = e_G$: $\varphi(ae_G) = \varphi(a) = \varphi(a)\cdot\varphi(e_G) \Rightarrow \varphi(e_G) = e_H$, obdobně $\varphi(a^{-1}) = \varphi(a)^{-1}$

- Izomorfismus = bijektivní (prostý a na) homomorfismus
  Monomorfismus = injektivní (prostý) homomorfismus
  Epimorfismus = surjektivní (na) homomorfismus
- Pokud jsou obě grupy stejné, tj. $G = H$, pak se homomorfismus nazývá endomorfismus a izomorfismus je automorfismus.
- Speciálně vnitřní automorfismus je $\phi_a(g) = aga^{-1}$ pro $\forall a, g \in G$
- Obdobně je to i u jiných matematických struktur, jako vektorových prostorů či Lieových algeber
  $\varphi(\alpha\vec{v} + \beta\vec{w}) = \alpha\varphi(\vec{v}) + \beta\varphi(\vec{w})$ $\quad$ $\varphi([\vec{v}, \vec{w}]) = [\varphi(\vec{v}), \varphi(\vec{w})]$

Def: Nechť $\varphi: G \to H$ je homomorfismus.
Pak $\operatorname{Ker}\varphi = \{g \in G : \varphi(g) = e_H\}$ je jádro homomorfismu
a $\operatorname{Im}\varphi = \{h \in H : h = \varphi(g)$ pro nějaké $g \in G\}$ je obraz hom.

- platí, že 1) $\operatorname{Ker}\varphi$ je normální podgrupa grupy G
  Dk: Nechť $g \in \operatorname{Ker}\varphi$ a $a \in G$, pak (že jde o podgrupu je přímočaré)
  $$\varphi(aga^{-1}) = \varphi(a)\varphi(g)\varphi(a^{-1}) = \varphi(a)e_H\varphi(a^{-1}) = e_H$$
  neboli $aga^{-1} \in \operatorname{Ker}\varphi$ pro libovolné $a \in G$

  2) $\operatorname{Im}\varphi$ je podgrupa grupy H
  Dk: $e_H \in \operatorname{Im}\varphi$ neboť $\varphi(e_G) = e_H$
  $\varphi(a)^{-1} \in \operatorname{Im}\varphi$ neboť $\varphi(a^{-1}) = \varphi(a)^{-1}$
  uzavřenost a asociativita z definice a vlastností G

- pokud je H normální podgrupa grupy G, tj. $H \triangleleft G$,

  potom zobrazení $\pi: G \to G/H$
  $\pi: g \mapsto gH$ pro $\forall g \in G$

  nazýváme <u>přirozená projekce</u> G na faktorgrupu G/H.

  – π je epimorfismus a $\operatorname{Ker} \pi = H$

  neboť pro $\forall g, h \in G$: $\pi(gh) = ghH = (gH)(hH) = \pi(g)\pi(h)$

  a navíc pro $h \in H$: $\pi(h) = hH = eH$, což je identita v G/H

  a pokud $g \notin H$: $\pi(g) = gH \neq H$

Působení grupy na množině či prostoru

- pokud je určitá abstraktní grupa realizována jako transformace nějaké množiny či prostoru, říkáme, že grupa působí na této množině či prostoru, ovšem obecně nemusí jít o realizaci grupy

Def: <u>Grupa G působí na množině M</u>, pokud existuje zobrazení

$\varphi: G \times M \to M$ takové, že pro všechny $g \in G$ a $m \in M$

je dáno $\varphi(g, m) = T(g)m \equiv g \cdot m$, kde $T(g)$ je nějaká transformace M

a platí
$$g(h \cdot m) = (gh) \cdot m \quad \text{pro } \forall g, h \in G \text{ a } m \in M$$
$$\text{a} \quad e \cdot m = m \quad \text{pro } \forall m \in M \text{ a identitu } e \in G$$

- jde tedy o <u>homomorfismus z G do</u> grupy všech transformací množiny M, tj. není nutno, aby různým prvkům $g, h \in G$ odpovídaly různé transformace $T(g)$ a $T(h)$ (může být $T(g) = T(h)$)

- uvidíme později, že reprezentace grup jsou jejich lineární působení na vektorových prostorech

Def: Orbita prvku $m \in M$ při působení grupy G je podmnožina $G \cdot m \subset M$ složená z prvků $g \cdot m \in M$ pro $\forall g \in G$, tj. $G \cdot m = \{gm, g \in G\}$

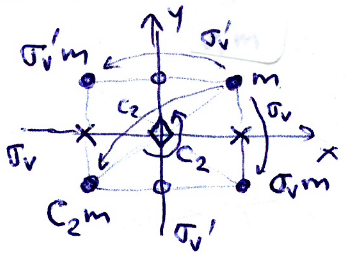
Def: Stabilizátor (též izotropní grupa) G_m příslušný prvku $m \in M$ je množina $g \in G$, pro které $g \cdot m = m$.

- jde o podgrupu $G_m \leq G$, neboť $e \in G_m$ (z definice)

  a pokud $g \in G_m$, pak $m = e \cdot m = (g^{-1}g)m = g^{-1}(g \cdot m) = g^{-1} \cdot m$

  a navic pokud $g \cdot m = m$ a $h \cdot m = m$, pak $(g \cdot h)m = g(hm) = m$

Př: působení C_{2v} (grupa symetrie H_2O) v rovině (x,y)



obecný bod • má 4-prvkovou orbitu a $G_\bullet = \{E\}$
bod na ose x × má 2-prvkovou orbitu a $G_x = \{E, \sigma_v\}$
bod na ose y ∘ má 2-prvkovou orbitu a $G_\circ = \{E, \sigma_v'\}$
a počátek ◊ má 1-prvkovou orbitu a $G_\diamond = C_{2v}$

Věta: Pro konečnou grupu platí obecně $\#G = \#G_m \cdot \#(G \cdot m)$

Dk: G_m je podgrupou G a tedy dle Lagrangeovy věty $\#G_m$ dělí $\#G$. Navíc máme rozklad G na levé třídy $g \cdot G_m$, pro které platí $(gG_m) \cdot m = g \cdot m = n$, tj. všechny prvky jedné levé třídy převádí m na stejný bod n.

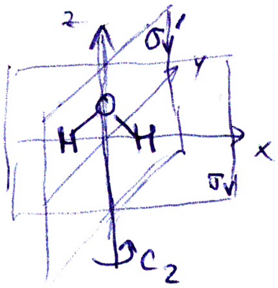
A protože nemůže pro dvě různé levé třídy platit, že $(g_1 G_m) m = (g_2 G_m) m = n$, neboť pak by platilo

$$g_1 m = g_2 m \Rightarrow (g_1^{-1} g_2) m = m \Rightarrow g_1^{-1} g_2 \in G_m$$

$$\Rightarrow g_2 = g_1 (g_1^{-1} g_2) \in g_1 G_m \text{ a zároveň } \in g_2 G_m, \text{ což je spor,}$$

dostáváme tolik různých bodů orbity, kolik je levých tříd gG_m, a tedy $\#G = \#G_m \cdot \#(G \cdot m)$.

Př: působení $C_{2v} = \{E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'\}$ v prostoru $\mathbb{R}^3$



	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	E	σ_v'	σ_v	
σ_v	σ_v'	E	C_2	
σ_v'	σ_v	C_2	E	

- zobrazení φ je dáno maticemi 3x3 odpovídajícími příslušným transformacím: $D(g)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$

kde $D(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $D(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $D(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $D(\sigma_v') = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

- tyto čtyři matice tvoří grupu s bin. operací maticové násobení

  která je samozřejmě izomorfní s C_{2v}, jde o tzv.

  <u>věrnou</u> maticovou reprezentaci grupy C_{2v}

  a jde o podgrupu $O(3)$ (= grupa všech matic s $\det = \pm 1$)

  a máme tedy homomorfismus z C_{2v} do $O(3)$ (transformace na prostoru $\mathbb{R}^3$)

- v tomto případě lze ale působit zvlášť na x, y a z:

  např. pro x: $D_x(E) = (1)$, $D_x(C_2) = (-1)$, $D_x(\sigma_v) = (1)$ a $D_x(\sigma_v') = (-1)$

  přičemž platí $D_x(g)(x) = (x')$

  nyní jde o homomorfismus (dokonce epimorfismus)

  z C_{2v} na $G \cdot (\{1,-1\}, \cdot) =$ „$O(1)$"

  obdobně pro y, avšak pro působení na z bude (avšak jiná repr.)

  $D_z(E) = D_z(C_2) = D_z(\sigma_v) = D_z(\sigma_v') = (1)$

  a jde o tzv. triviální reprezentaci z C_{2v} na $G = (\{1\}, \cdot)$

- $D(g)$ tvoří trojrozměrnou reprezentaci a $\mathrm{Ker}\, D = \{E\}$

- $D_x(g)$ a $D_y(g)$ tvoří různé jednorozměrné reprezentace,

  které jsou netriviální s $\mathrm{Ker}\, D_x = \{E, \sigma_v\}$ a $\mathrm{Ker}\, D_y = \{E, \sigma_v'\}$

  a konečně $D_z(g)$ je triviální s $\mathrm{Ker}\, D_z = C_{2v}$

Působení grupy G na sobě

- pokud $M = G$, působí grupa G na sobě samé
- je několik možností, jak může působit, např.

1) levé a pravé posunutí:

pro $\forall g \in G$ definujeme zobrazení

$L_g : G \to G$ neboli $L_g : h \mapsto gh$

$R_g : G \to G$ neboli $R_g : h \mapsto hg$

- jde o bijektivní zobrazení (viz VoP)

a navíc o tzv. tranzitivní působení G na sobě,

neboť G tvoří jedinou orbitu a vždy $G_g = \{e\}$ pro $\forall g \in G$.

2) G působí na sobě přes sdružení (tzv. vnitřní automorfismus)

kdy $T(g) \cdot h = g h g^{-1}$ pro $\forall g, h \in G$

neboť platí $T(e) \cdot h = e h e^{-1} = h$

a $T(g_1 g_2) h = (g_1 g_2) h (g_1 g_2)^{-1} = g_1 (g_2 h g_2^{-1}) g_1^{-1} =$

$= T(g_1) T(g_2) \cdot h$

- nyní jsou orbitami třídy sdružených prvků

a stabilizátory jsou podgrupy G složené

z prvků $g \in G$, pro které $g h g^{-1} = h$

- opět musí platit $\#(G \cdot g) \cdot \# G_g = \# G$

a tedy počet prvků třídy složených prvků $\#(g) = \#(G \cdot g)$

musí dělit $\# G$.

Př. vnitřní automorfismus C_{3v}

třídy	stabilizátory	
$(E) = \{E\}$	$G_E = C_{3v}$	
$(C_3) = \{C_3, C_3^2\}$	$G_{C_3} = \{E, C_3, C_3^2\}$	neboť $C_3 C_3 C_3^{-1} = C_3$, $\sigma_v C_3 \sigma_v = C_3^2$ atd.
$(\sigma_v) = \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$	$G_{\sigma_v} = \{E, \sigma_v\}$	neboť $\sigma_v \sigma_v \sigma_v^{-1} = \sigma_v$

ale $C_3 \sigma_v C_3^{-1} = \sigma_v'' = \sigma_v' \sigma_v \sigma_v'^{-1}$

apod.

Reprezentace grup a algeber

- obecně jde o působení jisté matem. struktury na vektorovém prostoru pomocí lineárních operátorů → někdy se upřesňuje, že jde o *lineární reprezentace*, když je třeba je odlišit od nelineárních působení

- mějme tedy lib. vekt. prostor V (reálný, komplexní atd.), pak

  End(V) značí množinu všech lineárních operátorů na V (včetně nulového $0: \vec{v} \to \vec{0}$)

  Aut(V) značí množinu všech lin. op. na V, ke kterým existuje inverzní operátor (tj. jde o lineární transformace na V)

- z End(V) (= endomorfismy na V) lze vytvořit buď

  1) tzv. asociativní algebru (= vekt. prostor s asociativním součinem, přičemž $(f \cdot g)\vec{v} = f(g\vec{v})$)

  nebo

  2) tzv. Lieovu algebru s komutátorem $[f,g]\vec{v} = (f\cdot g - g\cdot f)\vec{v}$ splňujícím axiomy pro Lieovu alg.

- Aut(V) (= automorfismy V) $\sim GL(V)$

  tvoří grupu díky asociativitě a existenci inverzního $f^{-1} \in \mathrm{Aut}(V)$ pro $\forall f \in \mathrm{Aut}(V)$

⇒ na V lze působit grupami, asoc. a Lieový-mi algebrami a tato působení nazýváme reprezentace

Def: *Reprezentace grupy G na V* je homomorfismus $\varrho: G \xrightarrow{do} \mathrm{Aut}(V)$

identita na V

tj. pro $\forall g_1, g_2 \in G$ platí $\varrho(g_1 g_2) = \varrho(g_1)\varrho(g_2)$, $\varrho(e) = E$, $\varrho(g^{-1}) = \varrho(g)^{-1}$

Reprezentace Lieovy algebry $\mathcal{L}$ na V je homomorfismus $\phi: \mathcal{L} \xrightarrow{do} \mathrm{End}(V)$

tj. pro $\forall a, b \in \mathcal{L}$ platí $\phi(\alpha a + \beta b) = \alpha\phi(a) + \beta\phi(b)$, $\phi([a,b]) = [\phi(a), \phi(b)]$

(obdobně pro asoc. algebry, kterými se však dále nebudeme zabývat, i když mají velký význam i v matem. teorii reprezentací grup)

Rozměr reprezentace = dimenze vekt. prostoru V

Triviální reprezentace = repr. kdy $\forall g \in G$ přiřadíme identitu na V (též jednotková) nebo kdy $\forall a \in \mathcal{L}$ přiřadíme nulový operátor na V (nulová)

(speciálně každá grupa má jednorozměrnou ($\dim V = 1$) ireducibilní repr. (viz později) tvořenou 1 pro $\forall g \in G$, někdy se jí říká totálně symetrická repr.)

Věrná reprezentace, pokud jde o monomorfismus (každému $g \in G$ přiřadíme různý operátor na V)

Značení: dvojice (ϱ, V) jako označení repr. se používá, když je třeba zdůraznit jak zobr. ϱ, tak prostor V. Ve fyzice je často V znám z kontextu takže se používá Γ pro obecné označení repr. a speciální symboly pro ireducibilní repr. (viz později)

$T(g)$ pro repr. operátory

$D(g)$ pro repr. maticemi

- reprezentací je nekonečně mnoho na různě rozměrných prostorech a i na jednom V můžou být různé reprezentace (triviální a další netriviální repr.) avšak mnohé lze převádět mezi sebou (pojem ekvivalence) a nebo rozložit na méně rozměrné (pojem reducibility a ireducibility)

Def: Nechť V_1 a V_2 jsou vekt. prostory a $\phi: V_1 \to V_2$ je izomorfismus mezi nimi (tj. $\exists \phi^{-1}$ a $\dim V_1 = \dim V_2$). Pak repr. $(\phi \circ \varsigma \circ \phi^{-1}, V_2)$ je ekvivalentní repr. (ς, V_1).
Neboli (ς, V_1) a (σ, V_2) jsou ekvivalentní repr. grupy G (příp. algebry), pokud $\exists \phi: V_1 \overset{na}{\to} V_2$ takové, že $\sigma = \phi \circ \varsigma \circ \phi^{-1}$.

Pozn: V matematice se často používá tzv. splétající (intertwining) zobrazení, což je v tomto případě lin. zobrazení $S: V_1 \to V_2$ mezi vekt. prostory, které splňuje pro 2 repr. (ς, V_1) a (σ, V_2) vztah

$$S \circ \varsigma(g)\vec{v} = \sigma(g) \circ S\vec{v} \quad \text{pro } \forall g \in G \text{ a } \forall \vec{v} \in V_1$$

$$\begin{array}{ccc} V_1 & \xrightarrow{S} & V_2 \\ \varsigma(g)\downarrow & & \downarrow\sigma(g) \\ V_1 & \xrightarrow[S]{} & V_2 \end{array}$$

neboli (ς, V_1) a (σ, V_2) jsou ekvivalentní (někdy též izomorfní), pokud $\exists$ splétají izomorfismus V_1 a V_2 (tj. $\exists S^{-1}$)

- aby (ς, V_1) a (σ, V_2) byly ekvivalentní, musí být $\dim V_1 = \dim V_2$, ale není to postačující podmínka

Př. $V = \mathbb{R}$, $G = \{\overset{\text{identita}}{E}, i = \text{inverze}\}$

na V existují 2 neekvivalentní repr.
1) (ς, V), kde $\varsigma(E) = 1$, $\varsigma(i) = 1$ (triviální, symetrická repr.)
2) (σ, V), kde $\sigma(E) = 1$, $\sigma(i) = -1$, (antisymetrická repr.)

(Pozn. ve fyzice jde o paritu – chování vlnové fce při inverzi, buď se mění, nebo nemění znaménko)

Př. Ekvivalentní maticové reprezentace při změně báze

Nechť (ς, V) je repr. grupy G na V ($\dim V = n$) a zvolme ve V bázi e_i, tj. $\forall x \in V$ lze psát jako $x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i$. Působení grupy G na V můžeme v této bázi vyjádřit takto:

$\forall g \in G$ přiřadíme $T(g)$, operátor na V, ~~který~~ po zapůsobení na prvek báze dá jistou lin. kombinaci prvků báze, neboli

$$T(g)e_i = \sum_{k=1}^{n} D(g)_{ki} e_k \quad \text{(tj. dostaneme matici } D(g))$$

a pro změnu obecného vektoru dostaneme

$$x' = T(g)x \underset{\text{díky linearitě } T(g)}{=} \sum_{i=1}^{n} x_i T(g) e_i = \sum_{i,k=1}^{n} x_i D(g)_{ki} e_k = \sum_{k=1}^{n} x'_k e_k$$

neboli

$$x'_k = \sum_{i=1}^{n} D(g)_{ki} x_i$$

(zde již standardní násobení matice krát vektor, na rozdíl od $T(g)e_i = \sum_{k=1}^{n} e_k D(g)_{ki}$)

matice $D(g)$ tvoří tzv. maticovou reprezentaci grupy G (kdy není obecně třeba mluvit o V)

jde opravdu o reprezentaci nebot' $D(e) = 1\!\!1_{n\times n}$

a $T(g_1)T(g_2)\,x = \sum_{i,k=1}^{n} x_i\, D(g_2)_{ki} T(g_1) e_k =$

$$= \sum_{i,k,\ell=1}^{n} x_i\, D(g_2)_{ki} D(g_1)_{\ell k}\, e_\ell = \sum_{i,k,\ell} x_i\, \underbrace{D(g_1)_{\ell k} D(g_2)_{ki}}_{[D(g_1)D(g_2)]_{\ell i}}\, e_\ell$$

ale zároveň $= T(g_1 g_2)\,x = \sum_{i,\ell} x_i\, D(g_1 g_2)_{\ell i}\, e_\ell$

a tedy $D(g_1 g_2) = D(g_1) D(g_2)$ jde tedy o homomorfismus z grupy G do grupy matic $n\times n$

zvolme nyní jinou bázi na V $\tilde{e}_i = \sum_{j=1}^{n} e_j A_{ji}$, kde A je matice přechodu definující jisté zobrazení z V na V (složky vektoru $x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i$ se transformují pomocí inverzní matice, neboť $x = \sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_i \tilde{e}_i = \sum_{i,j} x_j (A^{-1})_{ij} \tilde{e}_i$ a tedy $\tilde{x}_i = \sum_{j=1}^{n} (A^{-1})_{ij} x_j$)

Působení G na V lze tedy vyjádřit též jako $T(g)\tilde{e}_i = \sum_{\ell=1}^{n} \tilde{D}(g)_{\ell i}\, \tilde{e}_\ell$, kde $\tilde{D}(g)$ bude obecně jiná matice než $D(g)$

a dále $= \sum_j A_{ji} T(g) e_j = \sum_{j,k} A_{ji} D(g)_{kj} e_k = \sum_{j,k,\ell} A_{ji} D(g)_{kj} (A^{-1})_{\ell k} \tilde{e}_\ell$

neboli $\tilde{D}(g)_{\ell i} = \sum_{k,j} (A^{-1})_{\ell k} D(g)_{kj} A_{ji} = \sum_{kj} B_{\ell k} D(g)_{kj} (B^{-1})_{ji}$

kde jsme označili $A^{-1} = B$

maticově $\tilde{D}(g) = B D(g) B^{-1}$

tj. $\tilde{D}(g)$ a $D(g)$ jsou svázány podobnostní transformací a říkáme, že v tomto případě jsou $\tilde{D}(g)$ a $D(g)$ ekvivalentní maticové repr.

[totéž dostaneme „souřadnicově"
$\tilde{x} = Bx$, $x' = D(g)x$
$\tilde{x}' = \tilde{D}(g)\tilde{x} = Bx' \overset{\downarrow}{=} BD(g)x = BD(g)B^{-1}\tilde{x}$
neboli opět $\tilde{D}(g) = BD(g)B^{-1}$]

Reducibilní a ireducibilní reprezentace

- při působení grupy či algebry na V se může stát, že určitý netriviální ($\neq 0, V$) podprostor $W \subset V$ zůstává nezměněn, tj. např. pro grupu G platí $\varrho(g)\vec{w} \in W$ pro určitou repr. (ϱ, V) a $\forall g \in G$, $\forall \vec{w} \in W$

Def: Podprostor $W \subset V$, který se nemění při působení G na V, se nazývá invariantní podprostor a pokud neobsahuje žádný další netriviální ($\neq 0, W$) invariantní podprostor, pak jde o ireducibilní invariantní podprostor.

- stručně lze psát $G \cdot W \subset W$

Def: Pokud V obsahuje při působení G pomocí repr. (ϱ, V) netriviální invariantní podprostor, říkáme, že jde o reducibilní prostor a že (ϱ, V) je reducibilní reprezentace. V opačném případě jde o ireducibilní reprezentaci.

Def: Podreprezentace repr. (ϱ, V) grupy G je repr. $(\varrho_{\restriction W}, W)$, kde W je invariantní podprostor V při působení G.

- Co to znamená pro maticové reprezentace?
  - pokud zvolíme bázi tak, že $e_1, \dots, e_r \in W$ $(\dim W = r)$ a $e_{r+1}, \dots, e_d \in V$, ale $\notin W$ $(\dim V = d)$

pak dostaneme

$$D(g) = \begin{array}{cc} \left(\begin{array}{c|c} D^{W}(g) & D^{WW'}(g) \\ \hline 0 & D^{W'}(g) \end{array}\right) & \begin{array}{l} \}\, r \\ \}\, d-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} \underbrace{\quad}_{r} & \underbrace{\quad\quad}_{d-r} \end{array} & \end{array}$$

kde W' značí lineární obal $W' = \mathcal{L}(e_{r+1}, \dots, e_d)$

tj.
$$T(g)\, e_i = \sum_{k=1}^{r} e_k\, D(g)_{ki} \quad \text{pro } i = 1, \dots, r$$

a matice $D^W(g)$ tvoří podreprezentaci repr. $D(g)$, neboť

$$D(g_1)D(g_2) = \left(\begin{array}{c|c} D^W(g_1)D^W(g_2) & D^W(g_1)D^{WW'}(g_2) + D^{WW'}(g_1)D^{W'}(g_2) \\ \hline 0 & \underbrace{D^{W'}(g_1)D^{W'}(g_2)} \end{array}\right)$$

Tyto matice též tvoří repr. grupy G ale nejde obecně o podrepрез. repr. D(g) protože W' nemusí být invariantní podprostor

- vektorům $e_1, \dots, e_d$ se říká báze reprezentace (ϱ, V) a $e_1, \dots, e_r$ tvoří bázi podrepr. $(\varrho_{\restriction W}, W)$

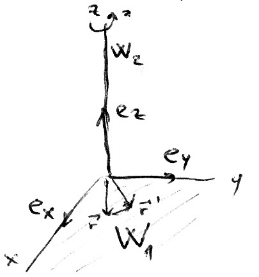
- v obecné bázi prostoru V by matice D(g) neměly tvar $\left(\begin{array}{c|c} * & * \\ \hline 0 & * \end{array}\right)$, ale byly by plné, ale existovala by podobnostní transformace, která by všechny matice pro $\forall g \in G$ převedla na tento tvar $\Rightarrow$ někdy, když se pracuje pouze s maticovými reprezentacemi, je definice reducibility zavedena pomocí existence takové podobnostní transformace, tj.

maticová reprezentace je reducibilní, pokud je ekvivalentní repr. $D(g)$, kde $\forall D(g)$ jsou matice typu $\left(\begin{array}{c|c} * & * \\ \hline 0 & * \end{array}\right)$, tj. $\exists A$ takové, že
$$D'(g) = A\, D(g)\, A^{-1} \quad \text{pro } \forall g \in G$$

Věta: Každá ireducibilní repr. konečné grupy je konečně dimenziolní.

Dk: Nechť (ϱ, V) je ired. repr. G (konečné) a $x \in V$. Pak $\varrho(g)x$ pro $\forall g \in G$ je konečná množina vektorů, jejíž lin. obal je konečně rozm. podprostor V, který je ale navíc invariantní vůči ϱ a tedy celé V musí být tento podprostor, protože ϱ je ireducibilní dle předpokladu. $\Rightarrow$ V je konečně-rozměrný.

Př. Uvažujme působení $SO(2)$ na $\mathbb{R}^3 = V$, přičemž $\forall g \in SO(2)$ přiřadíme rotaci R^z_φ kolem osy z



- vidíme, že se při všech těchto rotacích nemění $\vec{r} = z e_z$ a vektory $\vec{r} = x e_x + y e_y$ jsou opět lin. kombinací e_x a e_y

$\Rightarrow$ podprostory $W_1 = \mathcal{L}(\{e_x, e_y\})$, $W_2 = \mathcal{L}(\{e_z\})$ jsou invariantní při <u>tomto</u> působení $SO(2)$ a jde tedy o reducibilní reprezentaci $SO(2)$

- pokud se omezíme na W_1 a W_2, už nenajdeme další netriviální inv. podpr.

$\Rightarrow$ podrepr. na W_1 a W_2 už jsou ireducibilní

- maticově

$$R^z_\varphi = \left(\begin{array}{cc|c} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \nearrow R^z_\varphi\downarrow_{W_1} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \leftarrow \text{ireducibilní } \underline{\text{reálná}} \text{ repr. } SO(2) \\ \searrow R^z_\varphi\downarrow_{W_2} = (1) \end{array}$$

- uvidíme později, že všechny ired. repr. Abelových grup na komplexních prostorech jsou nutně jednodimenzionální, zde však máme reálnou repr.

→ pokud bychom např. uvažovali působení $SO(2)$ na 3rozměrném podprostoru p-orbitalů Hilb. prostoru elektronu v centrálním poli, který je komplexní, tam bychom našli další netriviální inv. podprostory

→ připustíme tedy komplexní kombinace $\vec{z} = c^x e_x + c^y e_y$, kde $c^x, c^y \in \mathbb{C}$

psk $z_1 = e_x + i e_y$
a $z_2 = e_x - i e_y$ generují jednorozměrné inv. podpr. „zkomplexifikovaného" $W_1^{\mathbb{C}}$, který je pak reducibilní

neboť např. $\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = e^{-i\varphi}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

$\Rightarrow R^z_\varphi\downarrow_{W_1^{\mathbb{C}}}$ lze zdiagonalizovat pomocí podobnostní transformace

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}}_{A^\dagger = A^{-1}} \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}}_{A \text{ tvořené normalizovanými vektory } z_1 \text{ a } z_2} = \left(\begin{array}{c|c} e^{-i\varphi} & 0 \\ \hline 0 & e^{i\varphi} \end{array}\right)$$

nové ireducibilní repr. $SO(2)$ (komplexní) které nejsou ekvivalentní triviální repr.

- obecně lze ukázat, že $\forall$ IR (komplexní) grupy $SO(2)$ jsou $e^{\pm i n \varphi}$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Úplná reducibilita

- v příkladu jsme viděli, že repr. SO(2) na $\mathbb{R}^3$ byla tvořena dvěmi podreprezentacemi $R^2_{\varphi\downarrow W_1}$ a $R^2_{\varphi\downarrow W_2}$, přičemž $W_1 \perp W_2$ a R^2_φ byla blokově diagonální $\left(\begin{array}{c|c} \cancel{\ast} & 0 \\ \hline 0 & \ast \end{array}\right)$ (tj. matice $D^{WW'}(g)$ z předchozího výkladu reducibility byla nulová)

$\Longrightarrow$ zavádí se pojem úplné reducibility a bude nás zajímat, zda je to obecná vlastnost reducibilních reprezentací.

Def: Reprezentace (g, V) grupy G (či algebry $\mathcal{L}$) je úplně reducibilní (též rozložitelná), pokud existuje rozklad $V = \sum_{j\in J} \oplus V_j$, kde V_j jsou ireducibilní invariantní podprostory V při působení G.

- J je obecně množina indexů, která je pro konečně rozměrné prostory konečná, tedy $J = (1, 2, \dots, p)$ a volbou vhodné báze

$$\underbrace{e_{11}, \dots, e_{1d_1}}_{\in V_1}, \underbrace{e_{21}, \dots e_{2d_2}}_{\in V_2}, \dots, \underbrace{e_{p1}, \dots, e_{pd_p}}_{\in V_p}$$

dostaneme maticovou reprezentaci ve tvaru $D(g) = \left(\begin{array}{c|c|c|c} D^1(g) & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & D^2(g) & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & D^p(g) \end{array}\right)$

tj. $D(g) = D^1(g) \oplus D^2(g) \oplus \dots \oplus D^p(g)$

kde $D^1(g), \dots D^p(g)$ jsou již ireducibilní matic. repr.

(Ve fyzikálních aplikacích se často používá značení $\Gamma = \underbrace{\Gamma^1 \oplus \dots \oplus \Gamma^p}_{\text{ireducibilní repr. grupy } G}$)

Pro maticové reprezentace $D'(g)$ grupy G lze opět definovat úplnou reducibilitu tak, že musí existovat matice A, že $D'(g) = A D(g) A^{-1}$, kde $D(g)$ je v blokově diag. tvaru

- Kdy je reducibilní repr. úplně reducibilní?

- obecně ne vždy: uvažujme $G = (\mathbb{R}^*, +)$ a její dvourozm. repr. $D(x) = \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

[jde o repr., neboť $D(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ a $D(x)D(y) = \begin{pmatrix} 1 & x+y \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = D(x+y)$]

$\forall$ vektory $\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$ tvoří ired. inv. podprostor, avšak vektory $\begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}$, které jsou kolmé na $\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$, netvoří inv. podprostor, neboť

$$D(x)\begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta x \\ \beta \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad D(x) \text{ je reducibilní}$$

avšak není úplně reducibilní, protože neexistuje matice S taková, aby $D'(y) = S \begin{pmatrix} 1 & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S^{-1} = \begin{pmatrix} f(y) & 0 \\ 0 & g(y) \end{pmatrix}$, kde $f(y), g(y)$ jsou nějaké fce y

protože by muselo být $\det D(y) = \det D'(y) \Rightarrow 1 = f(y) g(y)$
$\operatorname{Tr} D(y) = \operatorname{Tr} D'(y) \Rightarrow 2 = f(y) + g(y)$

a tedy $f(y) = g(y) = 1$, což nelze, repr. $D(x)$ není ekvivalentní triviální repr.

- ukazuje se, že význačné jsou tzv. unitární repr., které jsou důležité pro aplikaci ve fyzice a pro které reducibilita již znamená úplnou reducibilitu

Def: Unitární reprezentace grupy G je repr. na vektor. prostoru $\mathcal{H}$ se skalárním součinem $\langle\psi|\varphi\rangle$ (budeme se držet obvyklého fyzikálního značení $\mathcal{H}$ - Hilbertův prostor)

přičemž $\forall g \in G$ je reprezentován unitárním operátorem $U(g)$ pro který platí $U(g)U(g)^\dagger = U(g)^\dagger U(g) = 1$ (kde $U(g)^\dagger$ je hermitovsky sdruž. op.)

neboli platí $\langle U(g)\psi|U(g)\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$ pro $\forall g \in G$ a $\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

(pro ∞-rozměrné $\mathcal{H}$ se navíc požaduje omezenost $U(g)$: $\|U(g)\psi\| \leq M\|\psi\|$ pro $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$)

Maticová unitární repr. je matic. repr. $D(g)$, kde $\forall$ matice jsou unitární, tj. $D(g)^{-1} = D(g)^\dagger$

Věta: Každá konečně-rozměrná unitární reducibilní repr. grupy G na $\mathcal{H}$ je úplně reducibilní.

Dk: Nechť $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$ je netriviální inv. podprostor při působení G (je takový, neboť jde o reducibilní repr.). Stačí ukázat, že $\mathcal{H}_1^\perp$ (ortogon. doplněk $\mathcal{H}_1$ v $\mathcal{H}$) je invariantní podpr. To je ale přímým důsledkem invariance skalárního součinu při působení G v $\mathcal{H}$ (jde o unit. repr.), neboť je-li $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1^\perp$, tj. $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$ pro $\forall \varphi \in \mathcal{H}_1$, pak

$$\langle U(g)\psi|\varphi\rangle = \langle U(g)\psi|U(g)U(g)^{-1}\varphi\rangle = \langle\psi|\overbrace{U(g^{-1})\varphi}^{\in \mathcal{H}_1 \text{ díky invarianci } \mathcal{H}_1}\rangle = 0$$

a tedy $\mathcal{H}_1^\perp$ je také invariantní podpr., protože $U(g)\psi \in \mathcal{H}_1^\perp$ pro $\forall g \in G$.

Pokud $\mathcal{H}_1$, či $\mathcal{H}_1^\perp$ jsou stále reducibilní, pokračujeme v rozkládání.

- na příkladu reduc. repr., která není úplně reduc., jsme viděli, že šlo o neunitární repr. a ani tuto repr. není možné převést podobnostní transf. na unit. (kdyby to šlo, byla by úplně reduc.)
- otázkou je, kdy je neunit. repr. ekvivalentní nějaké unit. repr. a tedy úplně reduc. repr.

ukazuje se, že tomu tak je vždy pro jisté třídy grup, a to především pro konečné a tzv. kompaktní Lieovy grupy (těmi se budeme blíže zabývat později)

Věta: Každá konečně-rozměrná reducibilní repr. konečné (kompaktní Lieovy) grupy je již nutně úplně reducibilní. (Maschkeův teorém)

Dk: Základní myšlenka: Nechť $T(g)$ není unit. vůči $\langle|\rangle$ na $\mathcal{H}$, pak zkonstruujeme nový skal. součin $\langle\psi|\varphi\rangle' = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G}\langle T(g)\psi|T(g)\varphi\rangle$, vůči němuž už $T(g)$ je unitární (díky větě o přeuspořádání) a který je ekvivalentní s původním $\langle|\rangle$. (U Lieových grup nutná integrace přes celou grupu $\Rightarrow$ kompaktnost, aby byl integrál konečný)

Schurova lemmata

- někdy se uvádí pouze jedno, druhé je důsledkem pro komplexní konečně-rozměrné reprezentace
- jsou platná nejen pro reprezentace grup, ale též pro repr. Lieových algeber

1. Lemma

Nechť (ϱ_1, V_1) a (ϱ_2, V_2) jsou ireducibilní reprezentace grupy G.
Nechť S je splétající operátor mezi těmito reprezentacemi, tj.

$$S: V_1 \to V_2 \quad , \quad S\varrho_1(g)\vec{v}_1 = \varrho_2(g) S \vec{v}_1 \quad \text{pro } \forall g \in G$$

Pak je buď $S = 0$ (nulové zobrazení, $S\vec{v} = 0$ pro $\forall \vec{v} \in V_1$)
nebo je S izomorfismus a tedy ϱ_1 a ϱ_2 jsou ekvivalentní repr.

Důkaz: • Jádro $\mathrm{Ker}\, S$ a obraz $\mathrm{Im}\, S$ jsou invariantní podprostory při působení G díky tomu, že jde o splétající operátor, neboť

a) je-li $\vec{v} \in \mathrm{Ker}\, S$ (tj. $S\vec{v} = 0$), pak $S\varrho_1(g)\vec{v} = \varrho_2(g) S\vec{v} = 0$, a tedy $\varrho_1(g)\vec{v} \in \mathrm{Ker}\, S$ pro $\forall g \in G$

b) je-li $\vec{w} \in \mathrm{Im}\, S$, pak $\exists \vec{v} \in V_1 : S\vec{v} = \vec{w}$
a tedy $\varrho_2(g)\vec{w} = \varrho_2(g) S\vec{v} = S\varrho_1(g)\vec{v} = S\vec{v}'$, kde $\vec{v}' \in V_1$
$\Rightarrow \quad \varrho_2(g)\vec{w} \in \mathrm{Im}\, S$ pro $\forall g \in G$

• Protože V_1 a V_2 jsou ireducibilní $\Rightarrow$ $\mathrm{Ker}\, S = 0$ nebo $\mathrm{Ker}\, S = V_1$
a dále $\mathrm{Im}\, S = 0$ nebo $\mathrm{Im}\, S = V_2$

Pokud $\mathrm{Im}\, S = 0 \Rightarrow S = 0$.
Pokud $\mathrm{Ker}\, S = V_1 \Rightarrow S = 0$.
Pokud $\mathrm{Ker}\, S = 0$ a $\mathrm{Im}\, S = V_2$, pak S je izomorfismus a tedy $(\varrho_1, V_1) \simeq (\varrho_2, V_2)$ (jsou ekvivalentní).

2. Lemma:

Nechť (ϱ, V) je ireducibilní komplexní konečně-rozměrná repr. grupy G a S je splétající operátor na V, tj. $S: V \to V$, který komutuje se všemi $\varrho(g)$, $g \in G$.
Pak $S = \lambda \mathbb{1}$, kde $\lambda \in \mathbb{C}$, tj. S je násobkem identity.

Důkaz: Nechť $A = S - \lambda\mathbb{1}$, kde λ je řešením $\det(S - \lambda\mathbb{1}) = 0$ (proto potřebujeme komplexní repr a $\dim < \infty$)
pak A je též splétající, ale není invertibilní
$\Rightarrow$ z 1. lemmatu plyne, že $A = 0$, a tedy $S = \lambda\mathbb{1}$.

Důsledky Schurových lemmat

1) Kritérium iredukibility konečně-rozm. repr. konečných (a komp. Lieových) grup
- pro tyto grupy je každá konečně-rozm. repr. úplně reducibilní nebo ireduc, pokud je reducibilní, pak každá matice lze převést na tvar $\left(\begin{array}{c|c} \epsilon_1 & 0 \\ \hline 0 & \epsilon_2 \end{array}\right)$ a komutuje s maticemi $\left(\begin{array}{c|c} \lambda_1 \mathbb{1} & 0 \\ \hline 0 & \lambda_2 \mathbb{1} \end{array}\right)$, kde $\lambda_1 \neq \lambda_2$ $\Rightarrow$ Pokud je jedinou maticí, která komutuje se $\forall$ maticemi dané repr., násobkem jednotkové matice, pak jde nutně o ireducibilní reprezentaci.

2) Komplexní konečně-rozm. ireduc. repr. komutativní (abelovské) grupy G jsou jednorozměrné

Dk: Nechť $T(g)$ tvoří repr. abelovské grupy G na prostoru V.
Pak
$$T(g_1)T(g_2) = T(g_2)T(g_1) \quad \text{pro } \forall g_1, g_2 \in G$$
$\Rightarrow$ $T(g_1)$ komutuje se $\forall T(g_2)$ a tedy jde-li o ired. repr., pak dle 2. Schur. lemmatu je $T(g_1) = \lambda(g_1)\mathbb{1}$ pro $\forall g_1 \in G$
$\Rightarrow$ $T(g)$ je reducibilní, ledaže $\dim V = 1$.

Pozn. požadavek komplexnosti je důležitý, jak jsme viděli v Př. působení $SO(2)$ na $\mathbb{R}^3$

3) Relace ortogonality pro maticové ireducibilní komplexní repr.

Nechť $D^\mu(g)$ a $D^\nu(g)$ jsou dvě komplexní ired. matic. repr. konečné (resp. kompaktní Lieovy) grupy. Pak

1) pokud jsou tyto repr. neekvivalentní, pak
$$\sum_{g\in G} D^\mu_{ij}(g^{-1}) D^\nu_{kl}(g) = 0 \qquad \Big(\text{resp. } \int_G D^\mu_{ij}(g^{-1})\, D^\nu_{kl}(g)\, \underbrace{dg}_{\text{levoinvariantní míra na } G} = 0 \Big)$$

2) pokud jsou ekvivalentní, pak $\exists S$ taková, že $D^\mu(g) = S^{-1} D^\nu(g) S$
a platí
$$\sum_{g\in G} D^\mu_{ij}(g^{-1}) D^\nu_{kl}(g) = \frac{\#G}{d_\mu} S_{kj} (S^{-1})_{il}$$
(resp. obdobně pro komp. Lieovy grupy, $\sum \leftrightarrow \int$ a $\#G \leftrightarrow V_G$)

a speciálně pro $\mu = \nu$ máme $S = \mathbb{1}$
a tedy
$$\sum_{g\in G} D^\mu_{ij}(g^{-1}) D^\nu_{kl}(g) = \frac{\#G}{d_\mu} \delta_{kj}\, \delta_{il}\, \delta_{\mu\nu}$$

3) pokud jsou tyto repr. unitární, pak $D^\mu_{ij}(g^{-1}) = D^\mu_{ji}(g)^*$
a dostaneme pro neekvivalentní, nebo identické ired. repr. vztah
$$\boxed{\sum_{g\in G} D^\mu_{ji}(g)^* D^\nu_{kl}(g) = \frac{\#G}{d_\mu} \delta_{\mu\nu}\delta_{jk}\delta_{il}}$$

Dk. Relace ortogonality pro konečné grupy (u kompaktních Lieových grup je pouze nutné použít levoinv. integraci místo sumy přes ∀ prvky grupy)

Nechť B je libovolná matice $d_\mu \times d_\nu$ kde d_μ, resp. d_ν jsou dimenze ired. repr.

Pak matice $A = \sum_g D^\mu(g^{-1})\, B\, D^\nu(g)$ splňuje $D^\mu(h) A = A D^\nu(h)$ pro $\forall h \in G$

neboť
$$D^\mu(h)A = \sum_g D^\mu(h) D^\mu(g^{-1}) B D^\nu(g) \underset{\uparrow}{=} \sum_{g'} D^\mu(g'^{-1}) B D^\nu(g'h) = A D^\nu(h)$$

substituce $g'^{-1} = hg^{-1}$, neboli $g = g'h$
a využití věty o přeuspořádání (při násobení jedním prvkem $h \in G$ všechny prvky grupy G dostaneme opět všechny prvky grupy)

Dále
1) pokud D^μ není ekvivalentní D^ν, pak dle 1. Schurova lemmatu musí být $A = 0$ a vezmeme-li jako B matici, jejíž jediný nenulový prvek je $b_{rs} = 1$, pak
$$0 = \sum_{j,k} \sum_g D^\mu_{ij}(g^{-1}) \underset{\delta_{jr}\delta_{ks}}{\underset{\uparrow}{B_{jk}}} D^\nu_{kl}(g) = \sum_g D^\mu_{ir}(g^{-1}) D^\nu_{sl}(g) = 0$$

2) pokud $D^\mu = S^{-1} D^\nu S$ (tj. D^μ a D^ν jsou ekvivalentní), pak
$$D^\mu(h) A = A S D^\mu(h) S^{-1}, \text{ neboli } D^\mu(h) AS = AS D^\mu(h) \quad \text{pro } \forall h \in G$$
a tedy dle 2. Schurova lemmatu $AS = \lambda \mathbb{1}$, neboli $A = \lambda S^{-1}$

Hodnotu λ určíme pomocí stopy výrazu $\lambda \mathbb{1} = AS = \sum_g D^\mu(g^{-1}) B S D^\mu(g) \cancel{S^{-1} S}$, dostaneme
$$d_\mu \lambda = \mathrm{Tr}\, \lambda \mathbb{1} = \sum_g \mathrm{Tr}\left[\cancel{D^\mu(g^{-1})} BS \cancel{D^\mu(g)}\right] = \sum_g \mathrm{Tr}\, BS = \#G \sum_{i,j} B_{ij} S_{ji}$$

a opět volbou $B_{ij} = \delta_{ir}\delta_{js}$ nakonec $d_\mu \lambda = \#G\, S_{sr}$

a tedy nakonec
$$\lambda (S^{-1})_{il} = A_{il} = \sum_{j,k} \sum_g D^\mu_{ij}(g^{-1}) \underset{\delta_{jr}\delta_{ks}}{\underset{\uparrow}{B_{jk}}} D^\nu_{kl}(g) = \sum_g D^\mu_{ir}(g^{-1}) D_{sl}(g) = \frac{\#G}{d_\mu} S_{sr} (S^{-1})_{il}$$

což jsme měli dokázat.

Další vztahy jsou již přímočaré dosazení

- Co je vlastně v relacích ortogonality na sebe ortogonální?
  Pokud bychom nalezli maticové vyjádření všech neekvivalentních ired. repr. dané grupy a sestavili vektory typu $(D^\mu_{ij}(g_1), D^\mu_{ij}(g_2), \dots, D^\mu_{ij}(g_{\#G}))$ byly by právě tyto vekt. na sebe kolmé, tj. každý vektor je určen třemi parametry (μ - čísluje repr., i,j - určují pozici prvku matice D^μ) a složky těchto vektorů jsou číslovány prvky grupy. Jde tedy o #G-rozměrný prostor, kde máme $\sum_\mu d_\mu^2$ ortogonálních vektorů, musí tedy být $\sum_\mu d_\mu^2 \leq \#G$
  suma přes ∀ neekv. ired. repr. (později si ukážeme, že platí =)

Ireducibilní reprezentace cyklických grup

- pokud je grupa generovaná jediným prvkem $g \in G$, pro který platí $g^n = e$ (např. v C_n jde o prvek $C_n = R_z(\frac{2\pi}{n})$), pak všechny komplexní IR musí být jednorozměrné (komutativní grupa)

  tj. $D^\mu(g)$ jsou čísla splňující $D^\mu(g)^n = 1 = D^\mu(e)$ pro $\forall \mu$

  a protože ostatní prvky G jsou násobky g, budou ostatní prvky reprezentovány násobky $D^\mu(g)$
- dostáváme tak n různých komplexních IR, pro každý kořen $z^n = 1$ jednu. Označíme-li $\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}}$, pak

C_n	e	g	g^2	$\dots$	g^{n-1}
$\Gamma^1 = A$	1	1	1	$\dots$	1
Γ^2	1	ε	ε^2	$\dots$	$\varepsilon^{n-1} = \varepsilon^*$
Γ^3	1	ε^2	ε^4	$\dots$	$\varepsilon^{2(n-1)} = (\varepsilon^*)^2$
$\vdots$					$\vdots$
Γ^{n-1}	1	ε^{n-2}	$\varepsilon^{2(n-2)}$	$\dots$	
Γ^n	1	$\varepsilon^{n-1} = \varepsilon^*$	$\varepsilon^{2(n-1)} = (\varepsilon^*)^2$	$\dots$	$\varepsilon^{(n-1)(n-1)} = (\varepsilon^*)^{n-1} = \varepsilon$

(*) $\Gamma^2,\dots,\Gamma^n$; E_2, E_1

← totálně symetrická IR

ortogonální řádky a také sloupce

(*) pro n liché bude $\frac{n-1}{2}$ dvojic IR, které budou tvořit 2-rozm. reálné IR

pro n sudé bude $\frac{n-2}{2}$ dvojic a navíc ještě jedna antisymetrická IR gener. $D(g) = -1$, kdy $D(g^{2k}) = 1$ a $D(g^{2k+1}) = -1$

která se obvykle značí u bod. grup B

- speciálně pro C_4

C_4	E	C_4	C_2	C_4^3
A	1	1	1	1
B	1	−1	1	−1
E	1	i	−1	−i
	1	−i	−1	i

- ovšem pro komutativní 4-grupu ~ např. $C_{2v} = \{E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'\}$ musí platit $D^\mu(g)^2 = 1$ pro všechny $g \in C_{2v}$, neboli $D^\mu(g) = \pm 1$

E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v	C_2	E

opět pouze 4 možnosti ⇒ 4 jednorozm. IR

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	−1
B_2	1	−1	−1	1

← neboť $D(\sigma_v') = D(C_2)D(\sigma_v)$

opět ortogonální řádky i sloupce

Charakter reprezentace

- protože mnoho reprezentací je ekvivalentních (především u maticových reprezentací, které dostáváme volbou různých bazí), je vhodné mít nějakou „charakteristiku" těchto tříd ekvivalentních reprezentací
- zavádí se pojem charakter reprezentace

  pomocí stopy matic, které vyjadřují v určité bázi konečně-rozměrnou repr. grupy G na prostoru V

$$\boxed{\chi(g) = \mathrm{Tr}\, D(g)} = \sum_{i=1}^{d \,\swarrow \dim V} D_{ii}(g)$$

- $\chi(g)$ se nazývá charakter prvku $g \in G$ v reprezentaci $D(g)$ (nebo obecně $(g, V) \leftrightarrow D(g)$)

- díky cykličnosti stopy matic, mají ekvivalentní reprezentace stejný charakter, a tedy definice nezávisí na volbě báze

  pro $D'(g) = A^{-1} D(g) A$ máme
$$\chi'(g) = \mathrm{Tr}\, D'(g) = \mathrm{Tr}\,(A^{-1} D(g) A) = \mathrm{Tr}\, D(g) = \chi(g)$$

- pozor: stejný charakter dvou reprezentací ještě neznamená ekvivalenci těchto repr.

  (později uvidíme, že to platí pro repr. konečných a kompaktních Lieových grup)

  Př. $G = (\mathbb{R}, +)$, repr. $D(x) = \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ má stejný charakter jako triviální repr. $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, ale nejsou ekvivalentní

- vlastnosti:
  1) pro $g = e$ máme $D(e) = \mathbb{1}_{d \times d}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\chi(e) = d = \dim V}$

  2) charaktery sdružených prvků jsou stejné, pro $g_2 \sim g_1$ bude $\mathrm{Tr}\, D(g_2) = \mathrm{Tr}\, D(h^{-1} g_1 h) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{cykličnost stopy}}}{=} \mathrm{Tr}\, D(g_1) = \chi(g_1)$

     $\Rightarrow$ tabelují se pouze charaktery tříd sdružených prvků

  3) je-li $D(g) = D_1(g) \oplus D_2(g) \oplus \dots \oplus D_r(g)$, pak $\chi(g) = \sum_{i=1}^{r} \chi_i(g)$

     (rozklad úplně reduc. repr.)

Relace ortogonality pro charaktery konečných grup

- nechť $\chi^\mu(g)$ a $\chi^\nu(g)$ jsou charaktery dvou ireducibilních reprezentací na komplexních konečně-rozměrných prostorech pro grupu G a nechť jsou neekvivalentní, pokud $\mu \neq \nu$, pak z relací ortogonality

$$\sum_{g\in G} D^\mu_{ij}(g^{-1}) D^\nu_{k\ell}(g) = \frac{\# G}{d_\mu} \delta_{kj}\delta_{i\ell}\delta_{\mu\nu}$$

dostaneme položením $i=j$ a $k=\ell$ a sumací přes i a k

$$\sum_{i,k}\sum_{g\in G} D^\mu_{ii}(g^{-1}) D^\nu_{kk}(g) = \sum_{g\in G} \chi^\mu(g^{-1})\chi^\nu(g) =$$

$$= \sum_{i,k} \frac{\# G}{d_\mu} \delta_{ki}\delta_{ik}\delta_{\mu\nu} = \frac{\# G}{d_\mu}\sum_i \delta_{ii}\,\delta_{\mu\nu} = \# G\, \delta_{\mu\nu}$$

a protože je pro konečnou grupu každá reprezentace ekvivalentní nějaké unitární repr., platí

$$\chi(g^{-1}) = \mathrm{Tr}\, D(g^{-1}) = \mathrm{Tr}\, A \underbrace{D^U}_{\text{unitární}}(g^{-1}) A^{-1} = \mathrm{Tr}\, D^U(g)^\dagger = \chi^U(g)^* = \chi(g)^*$$

a tedy
$$\boxed{\sum \chi^\mu(g)^* \chi^\nu(g) = \# G\, \delta_{\mu\nu}}$$

(obdobně pro kompaktní Lieovy grupy: $\int_G \chi^\mu(g)^*\chi^\nu(g)\, d\mu(g) = V_G\, \delta_{\mu\nu}$)

- protože pro třídy sdružených prvků C_k, $k=1,\dots,N_c$ jsou vždy charaktery stejné, $\chi(C_k) = \chi(g)$ pro lib. $g\in C_k$ můžeme též psát
$$\boxed{\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^\mu(C_k)^* \chi^\nu(C_k) = \# G\, \delta_{\mu\nu}}$$

kde $n_k = \# C_k$ je počet prvků grupy G ve třídě C_k

$\Rightarrow$ charaktery neekvivalentních IR tvoří ortogonální systém vektorů v N_c-rozměrném vektorovém prostoru,

a tedy $\#$ neekvivalentních IR $\leq N_c$

(později ukážeme $=$)

Rozklad reducibilních reprezentací na ireducibilní

- pro konečné grupy (a kompaktní LG) je každá konečně-rozměrná repr. úplně reducibilní a ve vhodné bázi bude

$$D(g) = \begin{pmatrix} \left.\begin{matrix} D^1(g) & 0 \\ 0 & D^1(g) \end{matrix}\right\} \alpha_1 & & & 0 \\ & \left. D^2(g) \right\} \alpha_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \left. D^{N_r}(g) \right\} \alpha_{N_r} \end{pmatrix}$$

podreprezentace na invariantních ireducibilních podprostorech už musí být ekvivalentní IR dané grupy

kde α_μ značí, kolikrát je v repr. $D(g)$ obsažena IR $D^\mu(g)$

a dostáváme $\quad \chi(g) = \sum_{\mu=1}^{N_r} \alpha_\mu \chi^\mu(g)$ $\quad$ N_r ← počet IR (neekvivalentních)

a pomocí relací ortogonality dostaneme

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

a tedy

$$\boxed{\alpha_\mu = \frac{1}{\# G} \sum_{g\in G} \chi^\mu(g)^* \chi(g) = \frac{1}{\# G} \sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^\mu(C_k)^* \chi(C_k)}$$

- stačí tedy znát charaktery tříd sdružených prvků
- α_μ může být nulové, pokud v dané reduc. repr. není repr. $D^\mu(g)$ obsažena
- rozklad reduc. repr. na IR je jednoznačný (až na přeuspořádání)

Frobeniovo kritérium ireducibility

- spočtěme $\quad \sum_{g\in G} \chi(g)^* \chi(g) = \sum_{g\in G} \sum_{\mu,\nu} \alpha_\mu \alpha_\nu \chi^\mu(g)^* \chi^\nu(g) = \# G \sum_\mu \alpha_\mu^2$
- pokud je $D(g)$ ireducibilní, pak $\chi(g) = 1 \cdot \chi^\mu(g)$ pro určité μ $\quad \left(\begin{matrix} \alpha_\mu = 1 \\ \alpha_\nu = 0,\ \nu \neq \mu \end{matrix}\right)$

  a tedy $\quad \sum_\mu \alpha_\mu^2 = 1$

  ovšem pro reducibilní repr. budou alespoň dvě α_μ nenulové

  a tedy $\quad \sum_\mu \alpha_\mu^2 > 1$,
- dostáváme $\quad \boxed{\sum_{g\in G} \chi(g)^* \chi(g) = \# G \iff D(g) \text{ je ireducibilní}}$

Ekvivalence reprezentací, právě když mají stejný charakter

pro konečné a kompaktní Lieovy grupy

Dk: $\Rightarrow$ triviální (viz výše)

$\Leftarrow$ Nechť $\chi(g)$ a $\chi'(g)$ jsou charaktery dvou repr.

a nechť $\chi(g) = \chi'(g)$, pak

1) pokud jsou ireducibilní a nebyly by ekvivalentní

pak by platilo

$$\sum_{g\in G} \chi'(g)^* \chi(g) = 0 \quad \text{, ale zároveň } \sum_{g\in G} \chi(g)^* \chi(g) = \#G$$

což je spor pro $\chi(g) = \chi'(g)$

2) pokud jsou reducibilní, pak jsou úplně reducibilní

a dostaneme pro $\forall g \in G$ z rovnosti $\chi(g)$ a $\chi'(g)$

$$\left.\begin{aligned} \chi(g) &= \sum_{\mu=1}^{N_r} \alpha_\mu \chi^\mu(g) \\ \chi'(g) &= \sum_{\mu=1}^{N_r} \alpha'_\mu \chi^\mu(g) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \sum_{\mu=1}^{N_r} (\alpha_\mu - \alpha'_\mu) \chi^\mu(g) = 0$$

a pomocí relací ortogonality

$$0 = \sum_{\mu=1}^{N_r} (\alpha_\mu - \alpha'_\mu) \sum_{g\in G} \chi^\nu(g)^* \chi^\mu(g) = \#G \sum_{\mu=1}^{N_r} (\alpha_\mu - \alpha'_\mu)\, \delta_{\mu\nu} =$$

$$= \#G\, (\alpha_\nu - \alpha'_\nu)$$

a tedy $\alpha_\nu = \alpha'_\nu$

- oba rozklady obsahují stejné IR (až na ekvivalenci)

a jsou tedy ekvivalentní

Ireducibilní reprezentace konečných grup

Přehled výsledků:

1) počet IR (neekvivalentních) $\rightarrow \boxed{N_r = N_c} \leftarrow$ počet tříd sdružených prvků $\left(\begin{array}{c}\text{zatím ukázáno} \\ N_r \leq N_c\end{array}\right)$

2) dimenze IR: $\boxed{\sum d_\mu^2 = \#G} \leftarrow$ počet prvků grupy $\left(\begin{array}{c}\text{zatím} \\ \leq\end{array}\right)$

relace ortogonality:

3) suma přes třídy $\rightarrow \displaystyle\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^\mu(C_k)^* \chi^\nu(C_k) = \#G\, \delta_{\mu\nu}$ (již dokázáno)

4) suma přes IR $\rightarrow \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N_r} \chi^\alpha(C_i)^* \chi^\alpha(C_j) = \frac{\#G}{n_i}\delta_{ij}$ (zatím nedokázáno)

Důkaz 1) z 4): N_c kolmých vektorů v N_r-rozměrném prostoru $\Rightarrow N_c \leq N_r$

Důkaz 2): Pomocí regulární reprezentace grupy G

- označme $n = \#G$ a prvky $g_1, \dots, g_n \in G$
- matice $n\times n$
$$D^{reg}(g_s)_{kl} = \begin{cases} 1 & \text{pokud } g_s g_l = g_k \\ 0 & \text{pokud } g_s g_l \neq g_k \end{cases}$$

tvoří regulární repr.

Př.:

	e	a	b
$g_1 = e$	e	a	b
$g_2 = a$	a	b	e
$g_3 = b$	b	e	a

$$\Rightarrow D^{reg}(e) = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ D^{reg}(a) = \begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\ D^{reg}(b) = \begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}$$

- jde vskutku o reprezentaci:

$$D^{reg}(e) = \mathbb{1}_{n\times n} \quad \text{neboť} \quad D^{reg}(g_s)_{kk} = \begin{cases} 1 & \text{pro } g_s g_k = g_k \Rightarrow g_s = e \\ 0 & \text{pro } g_s \neq e \end{cases}$$

$$\sum_{l=1}^{n} \underbrace{D^{reg}(g_r)_{kl}}_{\text{je 1 pro } g_r g_l = g_k} \underbrace{D^{reg}(g_s)_{lm}}_{\text{je 1 pro } g_s g_m = g_l} \stackrel{?}{=} D^{reg}(g_r g_s)_{km}$$

$\Rightarrow$ je 1 pro $g_r(g_s g_m) = g_k$ což odpovídá definici

- charakter: $\chi^{reg}(g_s) = \begin{cases} \#G & \text{pro } g_s = e \\ 0 & \text{pro } g_s \neq e \end{cases}$

- kolikrát je IR Γ^μ obsažena v této reducibilní repr.?

$$\alpha_\mu^{reg} = \frac{1}{\#G}\sum_{g\in G} \chi^{reg}(g)^* \chi^\mu(g) = \frac{1}{\#G}\chi^{reg}(e)^*\chi^\mu(e) = d_\mu$$

a tedy $\quad \dim D^{reg} = \boxed{\#G = \sum_\mu d_\mu^2}$

Důkaz 4): pomocí násobení tříd $C_i C_j = \sum_{k=1}^{N_c} c_{ij}^k C_k$

kde c_{ij}^k jsou konstanty tříd (viz poznámky ke grupám)

a z toho plynoucího vztahu

(*) $$n_i n_j \chi^\alpha(C_i)\chi^\alpha(C_j) = d_\alpha \sum_{k=1}^{N_c} c_{ij}^k n_k \chi^\alpha(C_k) \quad \text{pro lib. IR } \Gamma^\alpha$$

který lze dokázat následovně:

1) protože platí $gC_k = C_k g$ pro $\forall g \in G$

pak zavedením $A_k = \sum_{h \in C_k} D^\alpha(h)$ suma matic, které reprezentují prvky $h \in C_k$

dostaneme $$D^\alpha(g) A_k = A_k D^\alpha(g) \quad \text{pro } \forall g \in G$$

(neplatí však obecně $D^\alpha(g) D^\alpha(h) = D^\alpha(h) D^\alpha(g)$ pro $h \in C_k$)

a z 2. Schurova lemmatu plyne, že (D^α je IR)

$$A_k = \lambda_k \mathbb{1}$$

a λ_k se určí pomocí stopy

$$\mathrm{Tr}\, A_k \underset{\substack{\uparrow \\ \text{z definice } A_k}}{=} n_k \chi^\alpha(C_k) = \lambda_k \mathrm{Tr}\,\mathbb{1} = \lambda_k d_\alpha \Rightarrow \lambda_k = \frac{n_k \chi^\alpha(C_k)}{d_\alpha}$$

2) z $C_i C_j = \sum_{k=1}^{N_c} c_{ij}^k C_k$ plyne $A_i A_j = \sum_{k=1}^{N_c} c_{ij}^k A_k$

a dosazením za $A_k = \lambda_k \mathbb{1}$ dostaneme (*).

- nyní sumou (*) přes všechny IR dostaneme

$$n_i n_j \sum_{\alpha=1}^{N_r} \chi^\alpha(C_i)\chi^\alpha(C_j) = \sum_{k=1}^{N_c} c_{ij}^k n_k \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N_r} d_\alpha \chi^\alpha(C_k)}_{\chi^{reg}(C_k) = \delta_{k1} \# G}$$

$$= c_{ij}^1 \# G$$

pokud $C_1 = (E)$

- protože však $c_{ij}^1 = n_i \delta_{ij'}$, kde index j' označuje třídu $C_{j'}$, která je složená z inverzních prvků ktěm, které jsou ve třídě C_j - můžou být stejné ($C_j = C_{j'}$), ale obecně různé, avšak vždy $n_j = n_{j'}$ a $\chi^\alpha(C_{j'}) = \chi^\alpha(C_j)^*$ díky ekvivalenci s unitární repr. a díky tomu, že pokud $a \sim b$ pak $a^{-1} \sim b^{-1}$ (pomocí stejného prvku)

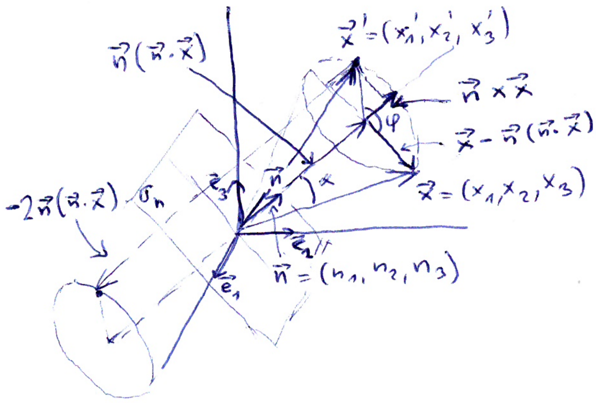
- dostáváme

$$\cancel{n_i} n_{j'} \sum_{\alpha=1}^{N_r} \chi^\alpha(C_i)\chi^\alpha(C_{j'})^* = \cancel{n_i} \delta_{ij'} \# G$$

a přeznačením a vydělením n_j máme 4)

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

nebo nevlastní rotace okolo z:

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

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

- 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 $\rightarrow$

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

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

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 $\vec{R}' = \boxed{\det D(g)}\, \underbrace{D(g)}\, \vec{R}$ — vekt. repr.

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

tyto matice tvoří pseudovekt. reprezentaci

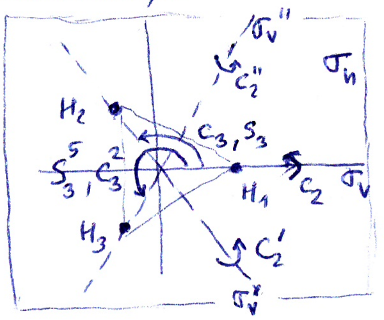
$\chi^{pV}(C_\varphi) = 1 + 2\cos\varphi$

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

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

Tabulka charakterů grupy D_{3h} a její podgrupy C_{3v}

- jde o grupu symetrie rovnostranného trojúhelníku, který tvoří v rovnovážné poloze kationt H_3^+
- operace symetrie - celkem 12



podgrupa $C_{3v} = \{E, C_3, \underset{C_3^{-1}}{C_3^2}, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$

levá třída $\sigma_h C_{3v} = \{\sigma_h, S_3, \underset{S_3^{-1}}{S_3^5}, C_2, C_2', C_2''\}$

- dohromady tvoří grupu D_{3h}

- třídy sdružených prvků - vždy do jedné třídy patří operace symetrie, které lze mezi sebou převádět pomocí jiné operace symetrie z dané grupy

tedy

	třída	prvky	sdružení pomocí	
C_{3v}	E	$\{E\}$	—	
	$2C_3$	$\{C_3, C_3^2\}$	σ_v nebo C_2	← obojí mění směr otáčení
tyto nelze převést na sebe	$3\sigma_v$	$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$	C_3 a C_3^2	← otočení roviny zrcadlení
	σ_h	$\{\sigma_h\}$	—	
	$2S_3$	$\{S_3, S_3^5\}$	σ_v nebo C_2	← opět otočení směru
	$3C_2$	$\{C_2, C_2', C_2''\}$	C_3 a C_3^2	← otočení osy rotace

- totéž bychom dostali pomocí multiplikativní tabulky nebo pomocí násobení matic 3x3 reprezent. operace symetrie v $\mathbb{R}^3$

- počty a dimenze ireducibilních repr.
  - C_{3v} má 3 třídy $\Rightarrow$ má i 3 IR $\Rightarrow \sum_{\mu=1}^{3} d_\mu^2 = 6 \Rightarrow \underbrace{1^2+1^2+2^2 = 6}_{\text{jediná možnost}}$
  - D_{3h} má 6 tříd $\Rightarrow$ 6 IR $\Rightarrow \sum_{\mu=1}^{6} d_\mu^2 = 12 \Rightarrow 1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+2^2 = 12$ opět jediná možnost

$\Rightarrow$ první sloupec tabulky charakterů (obsahuje dimenze) ($\chi(E) = \dim$ repr.)

a také vždy existuje jednorozměrná triviální (úplně symetrická) IR, $D(g) = (1)$ pro $\forall g \in G$

$\Rightarrow$ první řádek tabulky

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^1	1	1	1	1	1	1

- vektorová repr. pro D_{3h} - zvolíme hlavní osu C_3 ve směru z

→ jde o reducibilní repr. - z-tová složka se transformuje nezávisle, x a y se mixují

- není třeba konstruovat matice, stačí charaktery

	D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
vektorová repr. →	Γ^v	3	0	+1	1	−2	−1
	Γ^z	1	1	1	−1	−1	−1
	$\Gamma^{(x,y)}$	2	−1	0	2	−1	0

$\chi^v(C_3) = 1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = 0$

$\chi^v(S_3) = -1 + 2\cos\frac{2\pi}{3} = -2$

← $\chi^{(x,y)} = \chi^v - \chi^z$

použijeme Frobeniovo kritérium ireducibility k ověření, že jde o IR: $\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^*(C_k)\chi(C_k) =$

$= 1\cdot 2^2 + 2(-1)^2 + 0 + 1\cdot 2^2 + 2(-1)^2 + 0 = 12 = \# D_{3h}$

⇒ jde tedy o IR

- pseudovektorová repr. pro D_{3h} - hlavní osa opět C_3 ve směru z

- jde o repr. $D^R(g) = \det D^v(g) \cdot D^v(g)$

a tedy

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^{R_z}	1	1	−1	1	1	−1
$\Gamma^{(R_x,R_y)}$	2	−1	0	−2	1	0

← pouze otočené znaménko u nevlastních rotací (a zrcadlení)

Frobenius: $\sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^*(C_k)\chi(C_k) = 4+2+0+4+2+0 = 12 = \# D_{3h}$

- celková tabulka (již máme 5 IR ze 6)

C_{3v} / D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$	D_{3h}	C_{3v}	D_{3h}	C_{3v}
$A_1 = A_1' = \Gamma^1$	1	1	1	1	1	1		z	x^2+y^2, z^2	x^2+y^2, z^2
$A_2 = A_2' = \Gamma^{R_z}$	1	1	−1	1	1	−1	R_z	R_z		(x^2-y^2, xy)
$E = E' = \Gamma^{(x,y)}$	2	−1	0	2	−1	0	(x,y)	$(x,y), (R_x,R_y)$	(x^2-y^2, xy)	(xz, yz)
$A_1'' = \Gamma^{\det}$	1	1	−1	−1	−1	1				
$A_2'' = \Gamma^z$	1	1	1	−1	−1	−1	z			
$E'' = \Gamma^{(R_x,R_y)}$	2	−1	0	−2	1	0	(R_x,R_y)		(xz, yz)	

viz později

poslední IR lze dopočítat např. pomocí $\sum_{\alpha=1}^{N_r} \chi^\alpha(C_i)^* \chi^\alpha(C_j) = \frac{\# G}{n_i}\delta_{ij}$

nebo v tomto případě můžeme vzít antisymetrickou repr. danou vztahem $\chi(g) = \det D(g)$ ← −1 pro nevlastní rotace

Přímý součin dvou reprezentací

- nechť grupa G působí na vektorových prostorech $V^{(1)}$ a $V^{(2)}$ s bázemi $\{\vec{e}_j^{(1)}\}_{j=1}^{n_1=\dim V^{(1)}}$ a $\{\vec{e}_\ell^{(2)}\}_{\ell=1}^{n_2=\dim V^{(2)}}$ pomocí

$$T^{(1)}(g)\vec{e}_j^{(1)} = \sum_{i=1}^{n_1} \vec{e}_i^{(1)} D_{ij}^{(1)}(g) \quad \text{a} \quad T^{(2)}(g)\vec{e}_\ell^{(2)} = \sum_{k=1}^{n_2} \vec{e}_k^{(2)} D_{k\ell}^{(2)}(g)$$

neboli máme dvě (obecně reducibilní) repr. $\Gamma^{(1)}$ a $\Gamma^{(2)}$.

- pak grupa G působí též na tenzorovém součinu $V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ s bází $\vec{e}_j^{(1)} \otimes \vec{e}_\ell^{(2)}$ pomocí

$$\left[T^{(1)}(g) \otimes T^{(2)}(g)\right] \vec{e}_j^{(1)} \otimes \vec{e}_\ell^{(2)} = \sum_{i,k} \vec{e}_i^{(1)} \otimes \vec{e}_k^{(2)} \underbrace{D_{ij}^{(1)}(g)\, D_{k\ell}^{(2)}(g)}_{D_{ik,j\ell}^{(1)\otimes(2)}(g)}$$

kde matice $D^{(1)\otimes(2)}(g)$ je přímým součinem matic

$$D^{(1)\otimes(2)}(g) = D^{(1)}(g) \otimes D^{(2)}(g) = \begin{pmatrix} D_{11}^{(1)}(g) D^{(2)}(g) & D_{12}^{(1)}(g) D^{(2)}(g) & \cdots \\ D_{21}^{(1)}(g) D^{(2)}(g) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & D_{n_1 n_1}^{(1)}(g) D^{(2)}(g) \end{pmatrix}$$

přičemž báze ve $V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ je řazena postupně

$$\vec{e}_1^{(1)} \otimes \vec{e}_1^{(2)},\ \vec{e}_1^{(1)} \otimes \vec{e}_2^{(2)}, \ldots, \vec{e}_2^{(1)} \otimes \vec{e}_1^{(2)}, \ldots,\ \vec{e}_{n_1}^{(1)} \otimes \vec{e}_{n_2}^{(2)}$$

- protože obecně pro lib. A, B, A', B' platí

$$(A \otimes B)(A' \otimes B') = (AA') \otimes (BB')$$

bude i

$$D_{ik,j\ell}^{(1)\otimes(2)}(g_1 g_2) = \sum_{r,s} D_{ik,rs}^{(1)\otimes(2)}(g_1)\, D_{rs,j\ell}^{(1)\otimes(2)}(g_2)$$

a jde tedy o reprezentaci grupy G $\Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(2)}$ dimenze $n_1 n_2$.

- její charakter je dán jednoduše

$$\chi^{(1)\otimes(2)}(g) = \sum_{i,k} D_{ik,ik}^{(1)\otimes(2)}(g) = \sum_{i=1}^{n_1} D_{ii}^{(1)}(g) \sum_{k=1}^{n_2} D_{kk}^{(2)}(g) = \chi^{(1)}(g) \cdot \chi^{(2)}(g)$$

- jde obecně o reducibilní reprezentaci $\Rightarrow$ rozklad na IR a v případě přímého součinu dvou ireducibilních repr. se rozklad nazývá Clebschovou-Gordonovou řadou (viz později)

- ve složkách dostaneme (pro $\vec{x} = \sum_{j=1}^{n_1} x_j \vec{e}_j^{(1)}$ a $\vec{y} = \sum_{\ell=1}^{n_2} y_\ell \vec{e}_\ell^{(2)}$)

$$T^{(1)}(g) \otimes T^{(2)}(g)\,(\vec{x} \otimes \vec{y}) = \sum_{j,\ell} x_j y_\ell \sum_{i=1}^{n_1} \vec{e}_i^{(1)} D^{(1)}_{ij}(g) \sum_{k=1}^{n_2} \vec{e}^{(2)}_k D^{(2)}_{k\ell}(g) =$$

$$= \sum x'_i y'_k \left(\vec{e}_i^{(1)} \otimes \vec{e}^{(2)}_k\right)$$

a tedy
$$x'_i y'_k = \sum_{j=1}^{n_1} \sum_{\ell=1}^{n_2} D^{(1)}_{ij}(g)\, D^{(2)}_{k\ell}(g)\, x_j y_\ell = \sum_{j,\ell} D^{(1\otimes 2)}_{ik,j\ell}(g)\, x_j y_\ell$$

- <u>rozklad na symetrickou a antisymetrickou část pro $\Gamma^{(1)} = \Gamma^{(2)} = \Gamma$</u>
  - pokud máme jedinou reprezentaci Γ, pak lze obecně přímý součin $\Gamma \otimes \Gamma$ rozložit na symetrickou část $[\Gamma \otimes \Gamma]$ a antisymetrickou část $\{\Gamma \otimes \Gamma\}$, tj.

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

- ve složkách můžeme psát (obdobně bychom mohli vše napsat v bázi)

$$x'_i y'_k = \sum_{j,\ell} D_{ij}(g)\, D_{k\ell}(g)\, x_j y_\ell \overset{\substack{\text{jen přeznačení indexů}\\ \downarrow}}{=} \sum_{\ell,j} D_{i\ell}(g)\, D_{kj}(g)\, x_\ell y_j$$

$$x'_k y'_i = \sum_{j,\ell} D_{kj}(g)\, D_{i\ell}(g)\, x_j y_\ell = \sum_{\ell,j} D_{k\ell}(g)\, D_{ij}(g)\, x_\ell y_j$$

- sečtením všech čtyř členů dostaneme <u>symetrickou podreprezentaci</u>

$$x'_i y'_k + x'_k y'_i = \sum_{j,\ell} \underbrace{\overset{\substack{\text{pravou stranu máme 2x}\\ \downarrow}}{\tfrac{1}{2}}\left[D_{ij}(g)\, D_{k\ell}(g) + D_{i\ell}(g)\, D_{kj}(g)\right]}_{\text{matice reprezentující } [\Gamma\otimes\Gamma]} (x_j y_\ell + x_\ell y_j)$$

jejíž dimenze je $\frac{1}{2} d(d+1)$, kde d je dimenze původní Γ

a charakter je $\chi^{[\Gamma\otimes\Gamma]}(g) = \frac{1}{2}\left[\chi(g)^2 + \chi(g^2)\right]$ $\left(\text{a tedy } \chi^{[\Gamma\otimes\Gamma]}(e) = \frac{1}{2}(d^2+d) = \text{dimenze}\right)$

neboť položením $i=j$ a $k=\ell$ v druhém členu dostaneme součin matic $D(g) \cdot D(g) = D(g^2)$ a pak spočteme stopu

- odečtením dostaneme <u>antisymetrickou podreprezentaci</u>

$$x'_i y'_k - x'_k y'_i = \sum_{j,\ell} \tfrac{1}{2}\left[D_{ij}(g)\, D_{k\ell}(g) - D_{i\ell}(g)\, D_{kj}(g)\right] (x_j y_\ell - x_\ell y_j)$$

s dimenzí $\frac{1}{2} d(d-1)$ a charakterem

$$\chi^{\{\Gamma\otimes\Gamma\}}(g) = \frac{1}{2}\left[\chi(g)^2 - \chi(g^2)\right] \quad \left(\text{a tedy } \chi^{\{\Gamma\otimes\Gamma\}}(e) = \frac{1}{2}(d^2-d) = \text{dimenze}\right)$$

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

- již víme, že charaktery vlastních rotací C_φ a nevlastních rotací S_φ 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 přímé 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	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$
Γ^V	3	0	1	1	-2	-1
na druhou $\Gamma^{V\otimes V}$	9	0	1	1	4	1

- 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 charaktery jsou dány pomocí

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

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

a
$$\chi^{\{V\otimes V\}}(C_\varphi) = \frac{1}{2}[(1+2\cos\varphi)^2 - (1+2\cos 2\varphi)] =$$
$$= \frac{1}{2}[4\cos\varphi + 4\cos^2\varphi - 2(-1+2\cos^2\varphi)] = 1 + 2\cos\varphi = \chi^{PV}(C_\varphi)$$
$$\chi^{\{V\otimes V\}}(S_\varphi) = \frac{1}{2}[(-1+2\cos\varphi)^2 - (1+2\cos 2\varphi)] = 1 - 2\cos\varphi = \chi^{PV}(S_p)$$

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

- nakonec tedy dostaneme rozklady

D_{3h}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2S_3$	$3C_2$	viz dříve: D_{3h}	viz dříve: C_{3v}	viz níže: D_{3h}	viz níže: 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	R_z		
E'	2	−1	0	2	−1	0	(x,y)	$(x,y), (R_x,R_y)$	(xy, x^2-y^2)	$(xz,yz), (xy, x^2-y^2)$
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)	
nadruhou Γ^{v}	3	0	1	1	−2	−1	$= E' \oplus A_2''$ $\rightarrow (x,y)$ a z			
$\Gamma^{v\otimes v}$	9	0	1	1	4	1	$= \Gamma^{[v\otimes v]} \oplus \Gamma^{\{v\otimes v\}}$			
+ $\Gamma^{[v\times v]}$	6	0	2	2	2	2	$= 2A_1' \oplus E' \oplus E'' \rightarrow x^2, y^2, z^2, xy, xz$ a yz			
$\Gamma^{\{v\times v\}}$	3	0	−1	−1	2	−1	$= A_2' \oplus E'' \rightarrow R_x, R_y$ a R_z			

a tedy $\Gamma^{v\otimes v} = 2A_2' \oplus A_2' \oplus E' \oplus 2E''$

- přiřazení x^2, y^2, z^2, xy, yz a xz do IR grupy D_{3h}
  - asi nejefektivnější je dívat se na tyto funkce jako na složky tenzorového součinu $\vec{x} \otimes \vec{x}$, kde $\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$
  - víme 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

  a tedy např. dostaneme
  $$x'x' = x'^2 = \left(D^v_{11}(g)\,x + D^v_{12}(g)\,y + D^v_{13}(g)\,z\right)^2$$
  apod. pro $x'y'$, $x'z'$ atd. a podle výsledků pak vidíme, které složky tenzoru $\vec{x}\otimes\vec{x}$ se míchají mezi sebou (jde o symetrický tenzor; x^2, y^2, z^2, xy, yz a xz tedy budou patřit do repr. $\Gamma^{[v\otimes v]}$, jejíž rozklad známe $(2A_1' \oplus E' \oplus E'')$ a hledáme tedy kombinace které jsou bodově 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 úplně symetrické repr., u D_{3h} tedy do A_1'

- pokud má navíc bodová grupa jedinou význačnou osu C_n, kterou můžeme vždy umístit do osy z, pak i z^2 a x^2+y^2 budou nezávislé invarianty a tedy x^2+y^2 a z^2 patří u D_{3h} obě do A_1', nejen jejich součet

- zbývá nám přiřadit xy, yz, xz a x^2-y^2 (ortogonální doplněk 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 charaktery E' a E'' pro E, C_3 a σ_v stejné, musíme se podívat, jak se xz a yz transformují

    např. při σ_h, kdy

$$\left.\begin{array}{l} x' = x \\ y' = y \\ \text{a } z' = -z \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} x'z' = -xz \\ y'z' = -yz \end{array} \quad \text{neboli} \quad \begin{pmatrix} x'z' \\ y'z' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{D(\sigma_h)} \begin{pmatrix} xz \\ yz \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \chi(\sigma_h) = -2 \Rightarrow E''$$

neboli (xz, yz) patří do E''

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

    např. při C_3, kdy

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

z toho to nevíme zda E' nebo E''

    ovšem při σ_h bude

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

a tedy (xy, x^2-y^2) patří do IR E'

  - můžete si případně ověřit, že i pro S_3 či C_2 dostaneme také odpovídající charaktery

Symetrizační (též projekční) operátory pro konečné grupy

- pokud popisujeme systém, který má určitou grupu symetrie G, v bázi, která je obecná a „nerespektuje" působení této grupy, tj. mixuje bázové vektory (funkce) z různých invariantních podprostorů, je vhodné ~~mít~~ nějaký nástroj, který by umožnil zkonstruovat „symetrizovanou" bázi, tedy takovou, kde už jednotlivé bázové vektory budou spadat do jednotlivých invariantních podprostorů, které odpovídají příslušné ireducibilní repr. grupy Γ
- toto lze docílit pomocí symetrizačních operátorů
- uvažujme neprve ~~v~~ prostoru V, kde působí grupa G, invariantní podprostor $W \subset V$, který přísluší určité IR Γ^μ grupy G, tj. pro bázi $\{\vec{e}_i^{\,\mu}\}_{i=1}^{d_\mu} \in W$ bude platit

$$\underbrace{T(g)}\,\vec{e}_i^{\,\mu} = \sum_{k=1}^{d_\mu} \vec{e}_k^{\,\mu} D_{ki}^{\mu}(g) \qquad (*)$$

(operátor repr. G na prostoru V, při působení na W zůstává výsledek ve W)

- pozn. k terminologii: říkáme, že $\vec{e}_i^{\,\mu}$ patří k i-tému sloupci reprezentace Γ^μ a $\vec{e}_i^{\,\mu}$ tvoří bázi této reprezentace
- ze vztahu $(*)$ lze vytušit, že působením $T(g)$ na prvky báze by mělo jít zkonstruovat ostatní prvky báze
- s využitím relací ortogonality pro $D^\mu(g)$ dostaneme pro unitární repr.

$$\sum_{g\in G} D_{rs}^{\mu}(g)^* T(g)\,\vec{e}_i^{\,\mu} = \sum_{k=1}^{d_\mu} \sum_{g\in G} D_{rs}^{\mu}(g)^* D_{ki}^{\mu}(g)\,\vec{e}_k^{\,\mu} =$$

$$= \sum_{k=1}^{d_\mu} \frac{\#G}{d_\mu} \delta_{rk}\delta_{si}\,\vec{e}_k^{\,\mu} = \frac{\#G}{d_\mu}\delta_{si}\,\vec{e}_r^{\,\mu}$$

neboli pro $s=i$ máme

$$\vec{e}_r^{\,\mu} = \frac{d_\mu}{\#G}\sum_{g\in G} D_{ri}^{\mu}(g)^* T(g)\,\vec{e}_i^{\,\mu} = P_{ri}^{\mu}\,\vec{e}_i^{\,\mu}$$

kde jsme označili $P_{rs}^{\mu} = \dfrac{d_\mu}{\#G}\sum_{g\in G} D_{rs}^{\mu}(g)^* T(g)$ <u>symetrizační operátor</u>

a obecně $P_{rs}^{\mu}\vec{e}_i^{\,\mu} = \delta_{si}\,\vec{e}_r^{\,\mu}$

- všimněme si, že obecně nejde o projekční operátor,
  neboť např. $P^{\mu}_{12}\vec{e}^{\mu}_{2} = \vec{e}^{\mu}_{1}$, ale $P^{\mu}_{12}\vec{e}^{\mu}_{1} = 0$
  proto je lépe je nazývat symetrizační operátory
- co dostaneme, zapůsobíme-li operátorem P^{μ}_{jk} na obecný vektor $\vec{v}$?

$$P^{\mu}_{jk}\vec{v} = \frac{d_\mu}{\#G}\sum_g D^{\mu}_{jk}(g)^* T(g)\vec{v} = \vec{v}^{\mu}_{jk}$$

- pokud jsou tyto vektory nenulové pro jisté k,
  pak vektory $\{\vec{v}^{\mu}_{jk}\}_{j=1}^{d_\mu}$ tvoří bázi IR Γ^μ v podprostoru
  $\mathcal{L}(\{\vec{v}^{\mu}_{jk}\}_{j=1}^{d_\mu}) = W^\mu$, neboť

$$T(h)\vec{v}^{\mu}_{jk} = \frac{d_\mu}{\#G}\sum_{g\in G} D^{\mu}_{jk}(g)^* \underbrace{T(h)T(g)}_{T(hg)}\vec{v} =$$

← substituce $g = h^{-1}g'$ existuje jednoznačně

$$= \frac{d_\mu}{\#G}\sum_{g'\in G} D^{\mu}_{jk}(h^{-1}g')^* T(g')\vec{v} =$$

$$= \frac{d_\mu}{\#G}\sum_{g'\in G}\sum_{r=1}^{d_\mu} D^{\mu}_{jr}(h^{-1})^* D^{\mu}_{rk}(g')^* T(g')\vec{v} =$$

$$= \sum_{r=1}^{d_\mu} D^{\mu}_{jr}(h^{-1})^* \vec{v}^{\mu}_{rk} = \sum_{r=1}^{d_\mu} D^{\mu}_{rj}(h)\vec{v}^{\mu}_{rk}$$

unitarita D^μ

← lineární kombinace přes index r jak by mělo být u báze IR Γ^μ

- dostáváme tak celou bázi W^μ
  z jediného vektoru $\vec{v}\in V$, ovšem $\vec{v}$ musí obsahovat příspěvek z W^μ, jinak bychom dostali nuly
- ovšem museli bychom znát obecně $D^\mu(g)$, ale obvykle jsou tabelovány pouze charaktery IR příslušné grupy,
  proto se zavádí neúplné symetrizační operátory (již projekční)

$$P^\mu = \sum_{j=1}^{d_\mu} P^{\mu}_{jj} = \sum_{j=1}^{d_\mu}\sum_{g\in G}\frac{d_\mu}{\#G} D^{\mu}_{jj}(g)^* T(g) = \frac{d_\mu}{\#G}\sum_{g\in G}\chi^\mu(g)^* T(g),$$

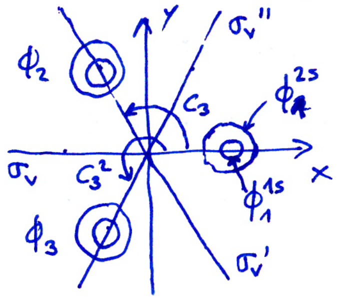
- nyní ovšem nekonstruujeme přímo bázi, ale jen vektory z W^μ:

$$P^\mu\vec{v} = \sum_{j=1}^{d_\mu}\vec{v}^{\mu}_{jj}$$

  a je tedy nutno působit na různé vektory $\vec{v}\in V$
  a ortogonalizovat

Metoda LCAO-MO pro H_3^{2+}

- jde o zkratku „linear combination of atomic orbitals – molecular orb."
- budeme uvažovat pro jednoduchost pouze 1s a 2s orbitaly v konfiguraci jader (protonů) tvořící rovnostranný trojúhelník



- pokud bychom vzali přímo tuto bázi 6 atomových orbitalů $\phi^{1s}_{i=1,2,3}$ a $\phi^{2s}_{i=1,2,3}$ a označili hodnoty maticových elementů H v této bázi (předpoklad symetrie vůči C_{3v})

zde předpokládáme, že všechny funkce jsou reálné a není tedy třeba psát nikde sdružení

$$\langle \phi_i^{ks} | H | \phi_j^{ks} \rangle = \begin{cases} \alpha_k & \text{pro } i=j \\ \beta_k & \text{pro } i\neq j \end{cases}$$

a

$$\langle \phi_i^{ks} | H | \phi_j^{\ell s} \rangle = \begin{cases} \gamma & \text{pro } i=j,\ k\neq \ell \\ \delta & \text{pro } i\neq j,\ k\neq \ell \end{cases}$$

dostali bychom plnou matici reprezentující hamiltonián v této bázi a také překryvovou matici

$$H = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \beta_1 & \gamma & \delta & \delta \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_1 & \delta & \gamma & \delta \\ \beta_1 & \beta_1 & \alpha_1 & \delta & \delta & \gamma \\ \gamma & \delta & \delta & \alpha_2 & \beta_2 & \beta_2 \\ \delta & \gamma & \delta & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_2 \\ \delta & \delta & \gamma & \beta_2 & \beta_2 & \alpha_2 \end{pmatrix} \qquad S = \begin{pmatrix} 1 & s_1 & s_1 & 0 & t & t \\ s_1 & 1 & s_1 & t & 0 & t \\ s_1 & s_1 & 1 & t & t & 0 \\ 0 & t & t & 1 & s_2 & s_2 \\ t & 0 & t & s_2 & 1 & s_2 \\ t & t & 0 & s_2 & s_2 & 1 \end{pmatrix}$$

neboť atomové orbitaly na různých jádrech nejsou obecně ortogonální (ovšem předpokládáme, že jsou normalizované a ortogonální, pokud jsou na stejném jádře)

- vlastní stavy a energie jsou určeny řešením časově-nezávislé Schrödingerovy rovnice $H\psi_i = E_i\psi_i$, ovšem vyjádříme-li ψ_i v neortogonální bázi $\psi_i = \sum_n c_{in}\phi_n$, $\phi_1 = \phi_1^{1s}, \dots, \phi_6 = \phi_3^{2s}$ a zprojektujeme-li tuto rovnici postupně na bázové funkce ϕ_m, dostaneme zobecněný problém na vlastní čísla a vlastní vektory

$$\sum_n (H_{mn} - E_i S_{mn})\, c_{in} = 0$$

který má netriviální řešení pro energie dané rovnicí

$$\det(H - ES) = 0$$

- místo abychom diagonalizovali matici 6×6, je výhodné využít symetrie systému (grupa $C_{3v} \subset D_{3h}$, neboť 1s orbitaly nemění při σ_h znaménko a není tedy potřeba uvažovat celou grupu symetrie D_{3h}, což by bylo nutné např. pro p_z orbitaly)
- vlastní stavy hamiltoniánu totiž budou příslušet určitým ired. repr. grupy symetrie systému (viz pozn. o symetrii v kvantové mechanice) a lze je jednodušeji určit v symetrizované bázi
- při působení grupy C_{3v} se 1s orbitaly mixují mezi sebou a 2s orbitaly také (nezávisle), uvažujme tedy obecně jistou trojici bázových funkcí ϕ_1, ϕ_2 a ϕ_3, pro něž platí

$$T(g)\,\phi_i = \sum_{j=1}^{3} \phi_j D^s_{ji}(g) \qquad \text{pro } \forall g \in C_{3v}$$

kde $D^s(g)$ je matice vyjadřující, jak se s-orbitaly transformují mezi sebou pro prvek g z C_{3v}, konkrétně sloupec „i" této matice určuje, na co se ztransformuje orbital ϕ_i a dostaneme tak matice

$$D^s(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^s(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^s(C_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

např. ϕ_1 přejde při C_3 na ϕ_2 atd.

$$D^s(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^s(\sigma_v') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^s(\sigma_v'') = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- snadno lze ověřit, že všechny tyto matice komutují s podmaticí hamiltoniánu $\begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}$, při jehož konstrukci jsme předpokládali invarianci vůči C_{3v}

a celá matice 6×6 komutuje s maticemi typu (také 6×6)

$$D^{1s,2s}(C_3) = \begin{pmatrix} D^s(C_3) & 0 \\ 0 & D^s(C_3) \end{pmatrix}$$

vyjadřující, že se 1s a 2s orbitaly nemixují mezi sebou

– trojice ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 (buď pro 1s, nebo 2s orbitaly) tedy tvoří nezávislé bázi reducibilní repr. grupy C_{3v} a pomocí charakteru ji můžeme rozložit na IR grupy C_{3v}, z matic dostaneme

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ^s	3	0	1

ovšem k určení tohoto charakteru nebylo nutné konstruovat celé matice, uvědomíme-li si, že

1) pokud se atom při operaci symetrie přemístí (např. při C_{3v} se posunou všechny), pak orbital tohoto atomu do charakteru nepřispěje (na diagonále bude nula),

2) pokud zůstane na místě, pak 1s orbital přispěje vždy 1 (u orbitalů p,d atd. je situace složitější, ale v zásadě stejná, jakoby byl orbital umístěn v počátku souřadnic)

– pomocí tabulky charakterů grupy C_{3v} snadno určíme

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

rozklad $\Gamma^s = A_1 \oplus E$

ovšem obecně lze použít vzorec

$$\alpha_\mu = \frac{1}{\#G} \sum_{k=1}^{N_c} n_k \chi^\mu(C_k)^* \chi(C_k)$$

pro určení, kolikrát se IR Γ^μ nachází v reduc. repr. s charakterem $\chi(C_k)$, kde C_k jsou nyní třídy sdružených prvků

neboli

$$\alpha^s_{A_1} = \frac{1}{6}(1\cdot1\cdot3 + 2\cdot1\cdot0 + 3\cdot1\cdot1) = 1$$

$$\alpha^s_{A_2} = \frac{1}{6}(1\cdot1\cdot3 + 2\cdot1\cdot0 + 3(-1)\cdot1) = 0$$

$$\alpha^s_{E} = \frac{1}{6}(1\cdot2\cdot3 + 2\cdot(-1)\cdot0 + 3\cdot0\cdot1) = 1$$

– celá repr. $\Gamma^{1s,2s}$ tvořená transformací všech 1s a 2s orbitalů by pak měla rozklad $\Gamma^{1s,2s} = 2A_1 \oplus 2E$

neboť 1s i 2s orbitaly se transformují obdobně

- symetrizovanou bázi zkonstruujeme pomocí symetrizačních operátorů, v případě jednorozměrných IR stačí použít přímo neúplný projekční operátor $P^{\mu} = \frac{d_{\mu}}{\#G} \sum_{g\in G} \chi^{\mu}(g)^{*}\, T(g)$

a tedy pro IR A_1 dostaneme

$$P^{A_1}\phi_1 = \frac{1}{6}\left(\overset{E}{1\cdot\phi_1} + \overset{C_3}{1\cdot\phi_2} + \overset{C_3^2}{1\cdot\phi_3} + \overset{\sigma_v}{1\cdot\phi_1} + \overset{\sigma_v'}{1\cdot\phi_3} + \overset{\sigma_v''}{1\cdot\phi_2}\right) = \frac{1}{3}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)$$

tedy úplně symetrickou kombinaci 1s, nebo 2s orbitalů

- abychom dostali rovnou ortogonalizovanou bázi pro IR E, museli bychom znát matice reprezentující prvky grupy C_{3v} v této reprezentaci, např. matice při působení C_{3v} v rovině (x,y)

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

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

a použít symetrizační operátory ve tvaru

$$P^{\mu}_{jk}\, v = \frac{d_{\mu}}{\#G} \sum_{g\in G} D^{\mu}_{jk}(g)^{*}\, T(g)\, v,$$

pomocí nichž bychom pro $k=1$ a $v=\phi_1$ dostali

$$P^{E}_{11}\phi_1 = \frac{2}{6}\left(\overset{E}{\phi_1} \overset{C_3}{-\frac{1}{2}\phi_2} \overset{C_3^2}{-\frac{1}{2}\phi_3} + \overset{\sigma_v}{\phi_1} \overset{\sigma_v'}{-\frac{1}{2}\phi_3} \overset{\sigma_v''}{-\frac{1}{2}\phi_2}\right) = \frac{1}{3}(2\phi_1-\phi_2-\phi_3)$$

$$P^{E}_{21}\phi_1 = \frac{2}{6}\left(\overset{E}{0\cdot\phi_1} \overset{C_3}{+\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2} \overset{C_3^2}{-\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_3} \overset{\sigma_v}{+0\phi_1} \overset{\sigma_v'}{-\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_3} \overset{\sigma_v''}{+\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\phi_2-\phi_3)$$

- pokud máme k dispozici pouze charaktery IR, pak lze použít neúplný projekční operátor na více prvků báze a pak ortogonalizovat:

$$P^{E}\phi_1 = \frac{2}{6}\left(\overset{E}{2\phi_1} \overset{C_3}{-1\cdot\phi_2} \overset{C_3^2}{-1\cdot\phi_3} \overset{\sigma}{+0}\right) = \frac{1}{3}(2\phi_1-\phi_2-\phi_3)$$

$$P^{E}\phi_2 = \frac{1}{3}(2\phi_2-\phi_3-\phi_1), \quad P^{E}\phi_3 = \frac{1}{3}(2\phi_3-\phi_1-\phi_2)$$

tyto funkce jsou všechny ortogonální na $P^{A_1}\phi_1$,
(za předpokladu, že $\langle\phi_i|\phi_i\rangle = 1$ a $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = s$ pro $\forall i\neq j$)

ale jsou lineárně závislé, např. $P^{E}\phi_3 = -P^{E}\phi_1 - P^{E}\phi_2$,
a nejsou navzájem ortogonální, ovšem lze je ortogonalizovat pomocí Gramova-Schmidtova postupu

– normalizací nakonec dostaneme symetrizovanou bázi

$$\psi_1^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_1^{1s} + \phi_2^{1s} + \phi_3^{1s}\right) \qquad \psi_4^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_1^{2s} + \phi_2^{2s} + \phi_3^{2s}\right)$$

$$\psi_2^{E} = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\phi_1^{1s} - \phi_2^{1s} - \phi_3^{1s}\right) \qquad \psi_5^{E} = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\phi_1^{2s} - \phi_2^{2s} - \phi_3^{2s}\right)$$

$$\psi_3^{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_2^{1s} - \phi_3^{1s}\right) \qquad \psi_6^{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_2^{2s} - \phi_3^{2s}\right)$$

- lze snadno ověřit, že funkce patřící do různých IR jsou navzájem ortogonální a totéž platí i pro ψ_2^E a ψ_3^E či ψ_5^E a ψ_6^E, které se transformují podle různých sloupců maticové repr. E (viz později: výběrová pravidla pro maticové elementy invariantního operátoru, kde vezmeme $\mathcal{R} = 1$)

- ovšem např. (pokud $\langle\phi_i^{1s}|\phi_j^{1s}\rangle = s_1$ pro $i \neq j$, $\langle\phi_i^{2s}|\phi_j^{2s}\rangle = s_2$ pro $i \neq j$, $\langle\phi_i^{1s}|\phi_j^{2s}\rangle = t$ pro $i \neq j$ a $\langle\phi_i^{ks}|\phi_i^{ks}\rangle = 1$, $\langle\phi_i^{1s}|\phi_i^{2s}\rangle = 0$)

$$\langle\psi_1^{A_1}|\psi_4^{A_1}\rangle = \frac{1}{3}\Big(\overset{0}{\langle\phi_1^{1s}|\phi_1^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_1^{1s}|\phi_2^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_1^{1s}|\phi_3^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_2^{1s}|\phi_1^{2s}\rangle} + \overset{0}{\langle\phi_2^{1s}|\phi_2^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_2^{1s}|\phi_3^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_3^{1s}|\phi_1^{2s}\rangle} + \overset{t}{\langle\phi_3^{1s}|\phi_2^{2s}\rangle} + \overset{0}{\langle\phi_3^{1s}|\phi_3^{2s}\rangle}\Big) = \frac{6t}{3} = 2t$$

a analogicky

$$\langle\psi_2^E|\psi_5^E\rangle = \langle\psi_3^E|\psi_6^E\rangle = -t$$

$$\langle\psi_1^{A_1}|\psi_1^{A_1}\rangle = 1 + 2s_1, \quad \langle\psi_2^E|\psi_2^E\rangle = \langle\psi_3^E|\psi_3^E\rangle = 1 - s_1$$

$$\langle\psi_4^{A_1}|\psi_4^{A_1}\rangle = 1 + 2s_2, \quad \langle\psi_5^E|\psi_5^E\rangle = \langle\psi_6^E|\psi_6^E\rangle = 1 - s_2$$

- obdobně pro maticové elementy hamiltoniánu v této bázi dostaneme např.

$$\langle\psi_1^{A_1}|H|\psi_2^E\rangle = \frac{1}{\sqrt{18}}\left(2\alpha_1 - \alpha_1 - \alpha_1 - \beta_1 - \beta_1 + 2\beta_1 + 2\beta_1 - \beta_1 - \beta_1\right) = 0$$

nebo $\langle\psi_1^{A_1}|H|\psi_1^{A_1}\rangle = \frac{1}{3}\left(3\alpha_1 + 6\beta_1\right) = \alpha_1 + 2\beta_1$ atd.

- vlastní energie tedy budou určeny pomocí determinantu matice

$$H^{\psi} - ES^{\psi} = \begin{pmatrix} \alpha_1 + 2\beta_1 - E(1+2s_1) & 0 & 0 & \gamma + 2\delta - E\,2t & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 - \beta_1 - E(1-s_1) & 0 & 0 & \gamma - \delta - E(-t) & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_1 - \beta_1 - E(1-s_1) & 0 & 0 & \gamma - \delta - E(-t) \\ \gamma + 2\delta - E2t & 0 & 0 & \alpha_2 + 2\beta_2 - E(1+2s_2) & 0 & 0 \\ 0 & \gamma - \delta - E(-t) & 0 & 0 & \alpha_2 - \beta_2 - E(1-s_2) & 0 \\ 0 & 0 & \gamma - \delta - E(-t) & 0 & 0 & \alpha_2 - \beta_2 - E(1-s_2) \end{pmatrix}$$

který se ovšem rozpadne na tři nezávislé členy pro matice 2×2 odpovídající bázovým dvojicím $\psi_1^{A_1}$ a $\psi_4^{A_1}$, ψ_2^E a ψ_5^E a nakonec ψ_3^E a ψ_6^E

- místo matice 6x6 tak stačí diagonalizovat dvě matice 2x2, neboť pro funkce patřící do IR E budou matice stejné
- pokud bychom uvažovali pouze 1s orbitaly, dostali bychom v symetrizované bázi hamiltonián přímo v diagonálním tvaru
  (opět jde o důsledek výběrových pravidel pro invariantní operátor, který je nyní hamiltonián, viz později)
  a pokud by bylo $\beta_1 < 0$, byl by nejnižší stavem úplně symetrický stav popsaný $\psi_1^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\phi_1^{1s} + \phi_2^{1s} + \phi_3^{1s})$ s energií $\frac{\alpha_1 + 2\beta_1}{1 + 2s_1}$ příslušející A_1 ired. repr. grupy C_{3v}

Symetrie v kvantové mechanice

- kvantový systém – stav popsaný vektorem (funkcí) z Hilbertova prostoru
  např. vekt. prostor kvadrat. integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3)$
  pro jednu částici (neuvažujeme spin)

- pokud se systémem provedeme transformaci jako posunutí, rotace apod.
  bude systém popsaný jiným vektorem z Hilbertova prostoru
  než před transformací → této transformaci bude odpovídat
  určitý operátor na Hilb. prostoru $\mathcal{H}$

- uvažuje-li celou grupu transformací (na $\mathbb{R}^3$ to může být např. $SO(3)$, $O(3)$, C_i, $D_{\infty h}$ atd.), bude tato grupa působit na Hilb. prostoru $\mathcal{H}$ pomocí lineárních operátorů ⇒ obecné (∞-rozměrná) reprezentace

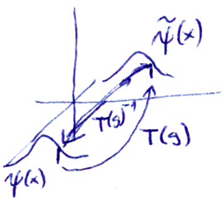
- požadavek (přirozený, aby se zachovávaly pravděpodobnosti) na zachování skalárního součinu (a normy) při těchto transformacích vede na působení unitárními operátory na $\mathcal{H}$, tj. platí

$$\langle U(g)\psi | U(g)\varphi\rangle = \langle \psi|\varphi\rangle \Rightarrow U(g)^\dagger U(g) = 1$$

- pokud transformace na $\mathbb{R}^3$ odpovídající prvku $g \in G$ jisté abstraktní grupy bude $T(g)$, pak vlnová fce v $L^2(\mathbb{R}^3)$ se změní na

$$\boxed{\tilde{\psi}(x) = U(g)\psi(x) = \psi(T(g)^{-1}x)}$$

a obdobně pro fci mnohočásticovou (všechny vekt. $\vec{x}$ se ztransformují pomocí $T(g)$)



[Jde o působení na $\mathcal{H}$, neboť
$$U(g_1)U(g_2)\psi(x) = U(g_1)\psi(T(g_2)^{-1}x) = \psi(T(g_2)^{-1}T(g_1)^{-1}x) = \psi(T(g_1g_2)^{-1}x) = U(g_1g_2)\psi(x)$$]

- pokud máme více komponent vlnové fce, mohou se navíc „míchat" při určité transformaci systému jednotlivé komponenty pomocí matic, které tvoří tolika rozměrnou repr. dané grupy, kolik ~~kom~~ komponent máme, např. pro bispinory bychom měli

$$U(g)\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\\ \psi_3(x)\\ \psi_4(x)\end{pmatrix} = D(g)\begin{pmatrix}\psi_1(T(g)^{-1}x)\\ \psi_2(T(g)^{-1}x)\\ \psi_3(T(g)^{-1}x)\\ \psi_4(T(g)^{-1}x)\end{pmatrix},$$ kde $D(g)$ je jistá 4-rozm. maticová reprezentace dané grupy

- <u>transformace operátorů</u> – transformovaný systém bude popsán fcí $U(g)\psi$ namísto původní fce ψ a hledáme operátor $\tilde{A}$, který bude mít stejné střední hodnoty (a obecně maticové elementy $\langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\varphi}\rangle$) v novém stavu jako operátor A ve stavu původním, tj.

$$\left.\begin{aligned}\langle\psi|A|\varphi\rangle &= \langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\varphi}\rangle = \langle U(g)\psi|\tilde{A}\,U(g)\varphi\rangle \\ \text{unitarita} \Rightarrow \| &\ \langle U(g)\psi|U(g)A\varphi\rangle\end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{\tilde{A} = U(g)\,A\,U(g)^\dagger}$$

- je to v souladu s tím, co dostaneme, pro operátor závislý na x, neboť

  pokud označíme $\phi(x) = A(x)\psi(x)$

  tak $U(g)\,\phi(x) = \begin{cases} U(g)\,A(x)\,\psi(x) \\ \phi(T(g)^{-1}x) = A(T(g)^{-1}x)\,\psi(T(g)^{-1}x) = A(T(g)^{-1}x)\,U(g)\,\psi(x) \end{cases}$

  a tedy $U(g)A(x) = A(T(g)^{-1}x)\,U(g) = \tilde{A}(x)\,U(g)$

- Hamiltonián H systému se obecně ztransformuje na

$$\tilde{H} = U(g)\,H\,U(g)^{\dagger}$$

nás ale budou zajímat takové transformace (operátory $U(g)$), které nechávají Hamiltonián nezměněn (tj. nemění energii systému), tj.

$$\tilde{H} = H = U(g)\,H\,U(g)^{\dagger} \Rightarrow \boxed{H\,U(g) = U(g)\,H}$$

$\Rightarrow$ grupě všech $U(g)$ komutujících s H daného kvantového systému říkáme <u>grupa symetrie</u> systému popsaného Hamiltoniánem H

[jde o grupu, neboť $U(g_1g_2)\,H\,U(g_1g_2)^{\dagger} = U(g_1)U(g_2)\,H\,U(g_2)^{\dagger}U(g_1)^{\dagger} = H$
pokud $U(g_1)$ a $U(g_2)$ patří do grupy symetrie]

- nechť ψ je vlastní fce H, tj. $H\psi = \lambda\psi$ a nechť H je invariantní při působení G na $\mathcal{H}$ pomocí $U(g)$, pak

$$\boxed{H\,U(g)\psi = U(g)\,H\psi = \lambda\,U(g)\psi}$$

neboli $U(g)\psi$ je též vlastní vektor H se stejnou vlastní hodnotou λ

$\Rightarrow$ podprostor $\mathcal{H}_\lambda \subset \mathcal{H}$ příslušný vl. hodnotě λ je <u>invariantní</u> při působení grupy G

$\Rightarrow$ lib. báze v $\mathcal{H}_\lambda$ tvoří bázi reprezentace grupy G, tj.

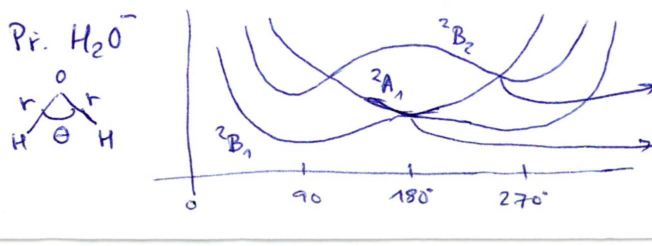
$$U(g)\,\psi_n = \sum_{m=1}^{d} \psi_m D_{mn}(g)$$

- pokud $\mathcal{H}_\lambda$ neobsahuje žádný netriviální inv. podprostor, jde o IR grupy G a její dimenze se rovná degeneraci příslušné vl. hodnoty λ

  $\Rightarrow$ degenerace je vysvětlena symetrií systému

- pokud se $\mathcal{H}_\lambda$ skládá ze dvou či více invariantních podprostorů pak buď nemáme úplnou grupu symetrie (př. atom vodíku v nerelat. kvant. mechanice)

  nebo jde o „ryzí" náhodnou degeneraci, která vzniká při vhodném nastavení „konstant" systému (parametrů)



→ náhodná degenerace pro určité Θ při fixním r

→ zde vyšší symetrie $D_{\infty h}$ – má 2-rozm. IR

Maticové elementy a výběrová pravidla pro invariantní operátory

- v kvantové teorii potřebujeme často počítat maticové elementy určitého operátoru, nebo sady operátorů, které se při působení určité grupy transformují mezi sebou

- zde si ukážeme, jak lze provýpočet těchto elementů využít symetrii nejprve pro invariantní operátor Ω, který se při působení grupy nemění, tj.

$$\Omega' = U(g)\,\Omega\,U(g)^{-1} = \Omega \quad \text{pro } \forall g \in G$$

a později pro tzv. ireducibilní tenzorové operátory pomocí obecného Wignerova-Eckartova teorému

- uvažujme maticový element

$$M = \langle \psi_k^\mu | \Omega | \phi_\ell^\nu \rangle$$

kde ψ_k^μ a φ_ℓ^ν jsou dvě sady vektorů z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ které tvoří bázi dvou ireducibilních reprezentací grupy G. (může jít o vlastní stavy Hamiltoniánu, který má G jako grupu symetrie, ale obecně uvažujme lib. takové vektory)

tj. platí
$$U(g)\,\psi_k^\mu = \sum_{i=1}^{d_\mu} \psi_i^\mu D_{ik}^\mu(g) \quad , \quad U(g)\,\phi_\ell^\nu = \sum_{j=1}^{d_\nu} \phi_j^\nu D_{j\ell}^\nu(g)$$

- protože uvažujeme unitární působení G na $\mathcal{H}$, bude platit též, že

$$M \overset{\text{unitarita}}{=} \langle U(g)\psi_k^\mu | U(g)\Omega\varphi_\ell^\nu \rangle \overset{\substack{\text{invariantní operátor} \\ U(g)\Omega = \Omega U(g)}}{=}$$

$$= \langle U(g)\psi_k^\mu | \Omega\, U(g)\varphi_\ell^\nu \rangle$$

$$= \Big\langle \sum_{i=1}^{d_\mu} \psi_i^\mu D_{ik}^\mu(g) \Big| \Omega \sum_{j=1}^{d_\nu} \phi_j^\nu D_{j\ell}^\nu(g) \Big\rangle \overset{\text{linearita}}{=}$$

$$= \sum_{i,j} D_{ik}^\mu(g)^* D_{j\ell}^\nu(g)\, \langle \psi_i^\mu | \Omega | \phi_j^\nu \rangle$$

- sumou přes $\forall g \in G$ nakonec dostaneme, s využitím relací ortogonality

$$\sum_{g\in G} D_{ik}^\mu(g)^* D_{j\ell}^\nu(g) = \frac{\# G}{d_\mu}\,\delta^{\mu\nu}\,\delta_{ij}\,\delta_{k\ell}$$

$$\#G \cdot M = \sum_{g\in G} M = \sum_{i,j} \sum_{g\in G} D^{\mu}_{ik}(g)^* D^{\nu}_{j\ell}(g) \langle \psi^{\mu}_i | \Omega | \phi^{\nu}_j \rangle$$

$$= \frac{\#G}{d_\mu} \sum_{i,j} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{k\ell} \langle \psi^{\mu}_i | \Omega | \phi^{\nu}_j \rangle$$

a tedy
$$M = \langle \psi^{\mu}_k | \Omega | \phi^{\nu}_\ell \rangle = \delta^{\mu\nu} \delta_{k\ell}\, h^{\mu}$$

kde $h^{\mu} = \frac{1}{d_\mu} \sum_{i=1}^{d_\mu} \langle \psi^{\mu}_i | \Omega | \phi^{\nu}_i \rangle$ je tzv. redukovaný maticový element nezávislý na k a ℓ

- výběrová pravidla

1) maticový element invariantního operátoru Ω mezi stavy, které přísluší různým ired. repr. je nulový

2) pokud stavy patří do stejné ired. repr. ($\mu=\nu$), ale transformují se podle různých sloupců ($k \neq \ell$), pak je tento element též nulový

3) diagonální maticové elementy $\langle \psi^{\mu}_k | \Omega | \phi^{\mu}_k \rangle$ pro stejné ired. repr. a pro $k=\ell$ jsou pro všechna k stejné, protože h^{μ} nezávisí na k a ℓ

pozn: k určení h^{μ} není třeba počítat „průměr" $\frac{1}{d_\mu}\sum_{i=1}^{d_\mu}$, ale stačí spočítat právě jen jeden z nich, např. $\langle \psi^{\mu}_1 | \Omega | \psi^{\mu}_1 \rangle$

$\Rightarrow$ pokud řešíme problém vlastních stavů systému popsaného Hamiltoniánem H invariantním při působení grupy G v určité bázi (např. atomových orbitalů) vyplatí se tuto bázi symetrizovat, protože pak budou všechny matic. elementy mezi různými IR a různými sloupci dané IR nulové, což vede na diagonalizaci menších matic

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)

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

<u>Př.</u> 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.

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

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

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

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 $(E1\,E2|A_2 11) = \frac{1}{\sqrt{2}}$
a $(E2\,E1|A_2 11) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

- 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 symetrická 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 $(E1\,E1|A_1 11) = \frac{1}{\sqrt{2}}$
$(E2\,E2|A_1 11) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

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

$$\Psi_1^{E1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1\varphi_1 - \varphi_2\varphi_2) \Rightarrow \quad (E1E1|E11) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (E2E2|E11) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Psi_2^{E1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1\varphi_2 + \varphi_2\varphi_1) \quad\quad (E1E2|E12) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (E2E1|E12) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

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. $U(g)\varphi_i = \sum_j \varphi_j D_{ji}(g)$ a $U(g)\varphi_k = \sum_\ell \varphi_\ell D_{\ell k}(g)$

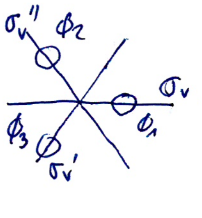
a tedy matice reprezentující $g \in G$

- v případě symetrizovaných 1s orbitalů, tj.

$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\phi_1 - \phi_2 - \phi_3)$

$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 - \phi_3)$

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



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

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

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

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

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

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 $D_{11}\cdot D_{21}$ →	$\psi_1\varphi_2$, $\psi_2\varphi_1$	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 $D_{11}\cdot D_{22} \neq D_{21}\cdot D_{12}$

Wignerův - Eckartův teorém

Nechť A^{ϱ}_r jsou komponenty ireducibilního tenzorového operátoru na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ při působení grupy G na $\mathcal{H}$ pomocí unitárních operátorů $U(g)$, tj.

$$U(g)A^{\varrho}_r U(g)^{-1} = \sum_t A^{\varrho}_t D^{\varrho}_{tr}(g),$$

potom maticové elementy

$$M = \langle \psi^{\mu}_k | A^{\varrho}_r | \varphi^{\nu}_\ell \rangle$$

mezi vektory ψ^{μ}_k a φ^{ν}_ℓ, které se transformují podle k-tého, resp. ℓ-tého sloupce ireducibilních reprezentací Γ^{μ}, resp. Γ^{ν} grupy G, lze spočítat jako

$$M = \sum_{\lambda_\mu} (\varrho r, \nu\ell | \mu\lambda_\mu k)^* (\psi^{\mu} \| A^{\varrho} \| \varphi^{\nu})_{\lambda_\mu}$$

kde $(\psi^{\mu} \| A^{\varrho} \| \varphi^{\nu})_{\lambda_\mu}$ se nazývá redukovaný maticový element, který nezávisí na r, ℓ a k, ale závisí obecně na λ_μ, které čísluje ired. repr. Γ^{μ}, pokud je v rozkladu $\Gamma^{\varrho} \otimes \Gamma^{\nu}$ obsažena vícekrát, a kde $(\varrho r, \nu\ell | \mu\lambda_\mu k)$ jsou Clebshovy-Gordanovy koeficienty rozkladu $\Gamma^{\varrho} \otimes \Gamma^{\nu}$.

Důkaz:

Víme, že pro invariantní operátor Ω platí

$$\langle \psi^{\mu}_k | \Omega | \varphi^{\nu}_\ell \rangle = \delta_{\mu\nu} \delta_{k\ell} h^{\mu}, \quad \text{kde } h^{\mu} = \frac{1}{d_\mu} \sum_j \langle \psi^{\mu}_j | \Omega | \varphi^{\mu}_j \rangle$$

Vektory $A^{\varrho}_r \varphi^{\nu}_\ell$ tvoří bázi přímého součinu reprezentací $\Gamma^{\varrho} \otimes \Gamma^{\nu}$

neboť

$$U(g)A^{\varrho}_r U(g)^{-1} U(g) \varphi^{\nu}_\ell = \sum_{t,i} A^{\varrho}_t \varphi^{\nu}_i \underbrace{D^{\varrho}_{tr}(g) D^{\nu}_{i\ell}(g)}_{[D^{\varrho}(g) \otimes D^{\nu}(g)]_{ti, r\ell}}$$

a můžeme je tedy vyjádřit v bázi vhodné pro rozklad do ired. repr.

$$A^{\varrho}_r \varphi^{\nu}_\ell = \sum_{\sigma, \lambda_\sigma, s} (\varrho r, \nu\ell | \sigma\lambda_\sigma s)^* \underbrace{\Psi^{\sigma(\varrho,\nu)\lambda_\sigma}_s}_{\text{tyto vektory tvoří báze ired. repr. } \Gamma^{\sigma}}$$

Dosazením do M dostaneme

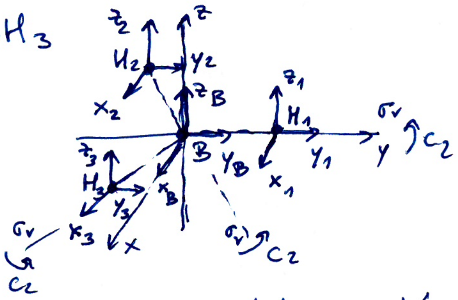
$$M = \sum_{\sigma, \lambda_\sigma, s} (\varrho r, \nu\ell | \sigma\lambda_\sigma s)^* \langle \psi^{\mu}_k | \Psi^{\sigma\lambda_\sigma}_s \rangle = \left\{ \begin{array}{l} \text{nyní použijeme výsledek} \\ \text{pro invariantní operátor } \Omega = \mathbb{1} \\ \Rightarrow \delta_{\mu\sigma} \text{ a } \delta_{ks} \text{ zruší sumy přes } \sigma \text{ a } s \end{array} \right\} =$$

$$= \sum_{\lambda_\mu} \underbrace{(\varrho r, \nu\ell | \mu\lambda_\mu k)^*}_{\text{zde jsou ukryta výběrová pravidla}} \underbrace{\left(\frac{1}{d_\mu} \sum_j \langle \psi^{\mu}_j | \Psi^{\mu\lambda_\mu}_j \rangle \right)}_{\equiv (\psi^{\mu} \| A^{\varrho} \| \varphi^{\nu})_{\lambda_\mu}}$$

Cvičení: Výběrová pravidla v infračervené a Ramanově spektroskopii

- podrobnosti kolem teorie molekulové spektroskopie lze nalézt např. v knize Jiří Fišer: Úvod do molekulové symetrie apod.
- zde si pro jednoduchost uvedeme zjednodušenou verzi, kde odhlédneme od nutnosti škálovat vibrační souřadnice hmotností atomů
- uvažovat budeme základní vibrace molekuly boranu

BH_3



D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A_1'	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_2'	1	1	−1	1	1	−1	R_z	
E'	2	−1	0	2	−1	0	(x,y)	(x^2-y^2, xy)
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)
Γ^{3N}	12	0	−2	4	−2	2		
	vše	pouze "B"	"B+H"	vše	"B"	"B+H"		

- uvažujeme malá posunutí jednotlivých atomů ⇒
⇒ $3N = 12$ stupňů volnosti

$(\underbrace{x_1, y_1, z_1}_{H_1}, \underbrace{x_2, y_2, z_2}_{H_2}, \underbrace{x_3, y_3, z_3}_{H_3}, \underbrace{x_B, y_B, z_B}_{B})$

- tvoří 12-rozměrnou reducibilní reprezentaci Γ^{3N} grupy D_{3h}, která ovšem zahrnuje nejen vibrace (6-rozm. podprostor), ale i translace a rotace molekuly (vektorová a pseudovekt. repr.)
- charakter této 12-rozm. repr. Γ^{3N} lze určit přímočaře pomocí pravidel:
  1) pokud se při operaci symetrie atom přesune, pak do charakteru příslušné souřadnice nepřispějí (vektory)
  2) pokud atom zůstane na místě, tak přispěje charakterem vektorové reprezentace (viz v tabulce $(x,y) + z$)

$\chi(C_\varphi) = 1 + 2\cos\varphi$
$\chi(S_\varphi) = -1 + 2\cos\varphi$

- dostaneme rozklad

$$\Gamma^{3N} = \underbrace{\Gamma^{transl.}}_{\underset{(x,y)}{E'} \oplus \underset{z}{A_2''}} \oplus \underbrace{\Gamma^{rotace}}_{\underset{(R_x,R_y)}{E''} \oplus \underset{R_z}{A_2'}} \oplus \underbrace{\Gamma^{vibrace}}_{A_1' \oplus 2E' \oplus A_2''}$$

neboť

$$\alpha^{3N}_{A_1'} = \frac{1}{12}\sum_{g \in D_{3h}} \chi^{A_1'}(g)^* \chi^{3N}(g) = \frac{1}{12}\left(1.1.12 + 0 + 3.1.(-2) + 1.1.4 + 2.1.(-2) + 3.1.2\right) = 1$$

$$\alpha^{3N}_{E'} = \frac{1}{12}\left(1.2.12 + 0 + 0 + 1.2.4 + 2.(-1)(-2) + 0\right) = 3$$

a

$$\alpha^{3N}_{A_2''} = \frac{1}{12}\left(1.1.12 + 0 + 3.(-1)(-2) + 1.(-1).4 + 2(-1)(-2) + 3.1.2\right) = 2$$

- pokud bychom symetrizovali „bázi malých posunutí",
  našli bychom kromě translací a rotací především
  normální vibrační módy, které by tedy příslušely do
  IR grupy D_{3h} A_1', $2\times E'$ a A_2''

- chceme-li určit, zda je určitý normální vibrační mód
  aktivní či neaktivní v infračervené či Ramanově spektroskopii,
  je nutné určit zda je nenulový maticový element
  typu $\langle \varphi_k^m | A_r^s | \varphi_e^v \rangle$, kde $|\varphi_e^v\rangle$ odpovídá počátečnímu
  vibračnímu stavu, $|\varphi_k^m\rangle$ konečnému
  a A_r^s je nějaká složka buď

  1) dipólového operátoru $\vec{\mu}$ pro infračervenou spektroskopii
     (jde o vektorový oper. příslušející do $\Gamma^{\text{vektorová}}$)
  2) operátoru polarizability molekuly $\overleftrightarrow{\alpha}$ pro Ramanovu spektr.
     (jde o tenzor 2. řádu, který je symetrický a tedy
     se transformuje podle repr. $\Gamma^{[v\otimes v]}$, neboli, $x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz$)

- pro fundamentální přechody bude konečným stavem základní
  vibrační stav (nulové kmity ve všech normálních módech), který
  je úplně symetrický, a počátečním stavem bude stav, kdy je právě
  jeden z normálních módů excitovaný a má tak symetrii
  tohoto módu (v našem případě bude patřit buď do A_1', E', nebo A_2'')

- výběrová pravidla:
  infračervené spektrum ~ $\underbrace{\langle 0 | \vec{\mu} | \nu_i \rangle}_{\Gamma^{\mu} = \Gamma^{\nu}} \neq 0$, pokud Γ^{μ} a $\Gamma^{\text{vibr.}}$ mají stejné ireducibilní repr.

  základní stav z A_1' vibrační mód z A_1', E', nebo A_2''

  neboli $\Gamma^{\mu} = E' \oplus A_2''$ a tedy vibr. módy z E' a A_2'' budou aktivní,
  ale A_1' nebude

  Ramanova spektra ~ $\langle 0 | \overleftrightarrow{\alpha} | \nu_i \rangle$, nyní $\Gamma^{\alpha} = A_1' \oplus E' \oplus E''$
  nenulové, pokud bude vibrační mód z A_1' a E'
  a neaktivní bude mód z A_2''

Vztah reprezentací grup a jejich podgrup

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

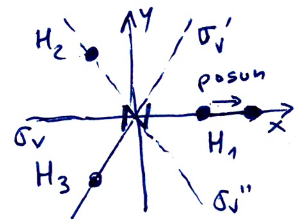
- omezíme-li se v jisté reprezentaci Γ grupy G pouze na prvky její podgrupy H, dostaneme opět reprezentaci, které se říká subdukovaná repr. $\Gamma \downarrow H$ z grupy G na podgrupu H
- pokud bude Γ některou z IR grupy G, např. Γ_G^μ s charakterem $\chi_G^\mu(g)$, pak $\Gamma_G^\mu \downarrow H$ bude 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

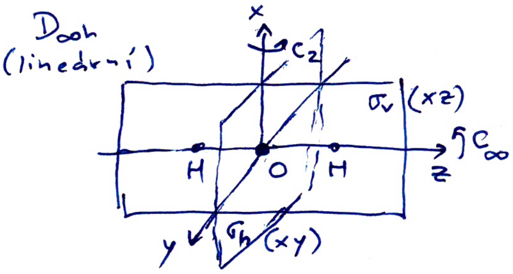
$H \sim C_s$	E	σ_v	
A'	1	1	charaktery IR podgrupy H
A''	1	-1	
$A' = A_1 \downarrow H$	1	1	charaktery subdukovaných repr. z IR grupy C_{3v}
$A'' = A_2 \downarrow H$	1	-1	
$A' \oplus A'' = E \downarrow H$	2	0	

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

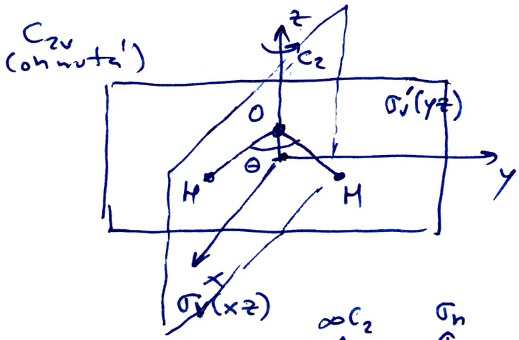
- vidíme tedy, že se při narušení symetrie rozštěpí dvojnásobně degenerovaná hladina příslušející IR E grupy C_{3v} na nedegenerované hladiny příslušející IR A' a A'' podgrupy H

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	$2C_\infty^\varphi(z) \ldots C_2(z)$	$\infty\sigma_v$	$\sigma_h(xy)$	$2S_\infty^\varphi(z) \ldots i$	∞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	$2\cos 2\varphi$ ... 2	0	2	$2\cos 2\varphi$ ... 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	$2\cos 2\varphi$ ... 2	0	−2	$-2\cos 2\varphi$ ... −2	0
⋮						

		∞C_2 $\updownarrow$	σ_h $\updownarrow$	$\infty\sigma_v$ $\updownarrow$	
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

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

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

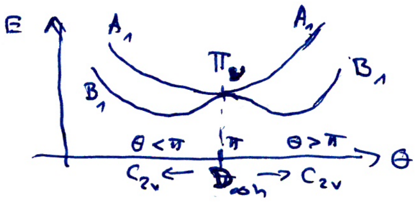
$$z \leftrightarrow y \quad \Rightarrow \quad \underset{(z)}{\Sigma_u^+} = \underset{(y)}{B_2}$$

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

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

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 $G = g_1H + g_2H + \dots + g_MH$, 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 $\phi_1, \dots, \phi_d$ 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)

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

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

$$T(g)\phi_{ti} = T(gg_t)\phi_i = T(g_s)T(g_s^{-1}gg_t)\phi_i =$$

- neboť gg_t určitě náleží do nějaké levé třídy, řekněme $g_sH \Rightarrow g_s^{-1}gg_t \in H$

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

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

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

neboli

$$\boxed{D_G(g)_{sj,ti} = \delta_{st}(g) D_H(g_s^{-1}gg_t)_{ji}}$$

- 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 $D_G(g)\,D_G(g') = D_G(gg')$

rozepsání dostaneme

$$\sum_{rk} D_G(g)_{sj,rk}\, D_G(g')_{rk,ti} = \sum_{rk} \underbrace{\delta_{sr}(g)\,\delta_{rt}(g')}_{\substack{\shortparallel \\ 1 \text{ pokud } gg_r = g_s h \text{ pro } h\in H \\ g'g_t = g_r h' \text{ pro } h'\in H}} D_H(g_s^{-1} g g_r)_{jk}\, D_H(g_r^{-1} g' g_t)_{ki} =$$

$\Big\}\ gg'g_t = g_s \underbrace{hh'}_{\in H}$

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

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

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

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

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

unitarita D_H

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

- 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

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{charakter indukované}\\ \text{repr. z IR } \Gamma_H^\nu}}{\chi^{\nu\uparrow G}(g)} = \sum_\mu a_\mu^{\nu\uparrow G}\, \underset{\substack{\uparrow\\ \text{charaktery IR } \Gamma_G^\mu \text{ grupy } G}}{\chi_G^\mu(g)}$$

což můžeme též vyjádřit jako

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

$$\chi^{\nu\uparrow G}(g) = \sum_s \delta_{ss}(g)\,\chi_H^\nu(g_s^{-1} g g_s) \overset{\downarrow}{=} \underset{\substack{\uparrow\\ \text{musíme dělit } \#H \text{, neboť tolik}\\ \text{různých } g_s \text{ bychom mohli zvolit}}}{\frac{1}{\#H}} \sum_{\substack{g'\in G\\ g'^{-1}gg'\in H}} \chi_H^\nu(g'^{-1} g g')$$

buď g není sdružené s žádným prvkem z H, pak $\chi(g) = 0$, nebo je, a pak $gg_s \in g_s H$
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 induk. 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 $h = g'^{-1}gg' \in H$

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

$$= \frac{1}{\#G}\frac{1}{\#H}\sum_{h\in H}\sum_{g'\in G}\chi_G^\mu(\underbrace{g'hg'^{-1}}_{\substack{\text{sdružený prvek k } h,\\ \text{charakter stejný} \to \text{lze nahradit } h}})^*\chi_H^\nu(h)$$

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

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 $\chi^{\mu\times\nu}(h_1h_2) = \chi^{\mu}(h_1)\chi^{\nu}(h_2)$

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

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

- 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

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

- 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 induk. 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	$=A_2\oplus E$
				$\Rightarrow \alpha_{A_1}^{A'\uparrow C_{3v}} = \frac{1}{6}(3+3)=1 \Rightarrow$
A_1	1	1	1	
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 $A_1\downarrow H = A'$, $A_2\downarrow H = A''$, $E\downarrow H = A'\oplus A''$

Symetrická grupa S_n

- neboli grupa permutací n-prvkové množiny, jejíž prvky uspořádáme do přihrádek očíslovaných $1, \dots, n$ a přemístění prvků zapíšeme jako $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$, tj. prvek z 1. přihrádky se přesune do přihr. p_1 atd.

- jednotkový prvek = identita (žádné přemístění)

$$e = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix}$$

inverzní prvek k $g = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$ je $g^{-1} = \begin{pmatrix} p_1 & \dots & p_n \\ 1 & \dots & n \end{pmatrix}$, $g^{-1}g = gg^{-1} = e$

neboť složením dvou permutací

$$g_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix} \quad a \quad g_2 = \begin{pmatrix} p_1 & \dots & p_n \\ q_1 & \dots & q_n \end{pmatrix}$$

dostaneme též permutaci $g_2 g_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{pmatrix}$

[zde využíváme toho, že nezáleží na pořadí sloupců, např. $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$]

- <u>řád grupy</u> je $n!$ (kolika způsoby lze n prvků rozdělit do n přihrádek)

- kromě mnoha aplikací je S_n významná též díky

<u>Cayleyho teorému</u>: Každá konečná grupa řádu n je izomorfní nějaké podgrupě symetrické grupy S_n

[každému $h \in G$ (řádu n) přiřadíme permutaci $\begin{pmatrix} g_1 & g_2 & \dots & g_n \\ hg_1 & hg_2 & \dots & hg_n \end{pmatrix}$]
(viz věta o přeuspořádání)

- v praxi je ale snažší zabývat se každou grupou zvlášť, než vycházet z S_n

- <u>cykly</u> – každá permutace se skládá z tzv. cyklů = uzavřených řetězců výměn prvků

např. $g = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 4 & 6 & 1 & 5 & 3 \end{pmatrix}$ obsahuje cykly $(1 \to 2 \to 4 \to 1) = (124)$, $(3 \to 6 \to 3) = (36)$ a (5)

tj. g lze zapsat též takto $g = (124)(36)(5)$

ale též jako $g = (241)(36)$

$g = (63)(124)$

jednocykly jako (5) se vynechávají apod.

tj. nezáleží na pořadí cyklů (obecně pokud neobsahují stejná čísla!)

ani na tom, kterým číslem cyklus začíná

- <u>transpozice</u> = permutace obsahující jen jeden cyklus délky 2 a jinak samé jednocykly, tj. $g=(i\,j)$
  - každý cyklus (a tedy i permutaci) lze vyjádřit jako součin transpozic, např. $(1\,2\,\dots\,n)=\underbrace{(1\,n)\dots(1\,3)(1\,2)}_{\text{zde záleží na pořadí}}$

  obecně cyklus délky n lze rozložit na $n-1$ transpozic

- <u>sudá</u> permutace – lze-li rozložit na sudý počet transpozic
  <u>lichá</u> permutace – —"— na lichý —"—

[jde o dobrou definici, neboť určitá permutace se <u>vždy</u> rozloží na sudý počet transpozic, kdežto jiná vždy na lichý, toto lze vidět např. působením na polynom v prom. $x_1,\dots,x_n$

$$p(x_1,\dots,x_n)=\prod_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{n}(x_i-x_j)=\det V=\det\begin{pmatrix}1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1}\\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1}\\ \vdots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1}\end{pmatrix}$$

tzv. Vandermondeho matice

transpozici odpovídá výměna řádků → změna znaménka $\det V$]

- alternující grupa $A_n\subset S_n$ = grupa všech sudých permutací řádu $\frac{n!}{2}$

- <u>třídy sdružených prvků</u> – jednu třídu vždy tvoří permutace které mají stejnou strukturu cyklů, tj. obsahují <u>stejný počet stejně dlouhých cyklů</u>

  neboť pro $g=\begin{pmatrix}1 & 2 & \dots & n\\ p_1 & p_2 & \dots & p_n\end{pmatrix}$ a $h=\begin{pmatrix}1 & \dots & n\\ q_1 & \dots & q_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}p_1 & \dots & p_n\\ q_{p_1} & \dots & q_{p_n}\end{pmatrix}$

  dostaneme $h^{-1}=\begin{pmatrix}q_1 & \dots & q_n\\ 1 & \dots & n\end{pmatrix}$ a tedy $hgh^{-1}=\begin{pmatrix}q_1 & \dots & q_n\\ q_{p_1} & \dots & q_{p_n}\end{pmatrix}$

  neboli permutujeme podle h jak horní řádek, tak dolní
  → v cyklech se permutují prvky, ale jejich délka zůstane

  př. $g=(1\,2)(3\,4\,5)$ $\quad h=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\4&3&1&5&2\end{pmatrix}$

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

  z $g=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\2&1&4&5&3\end{pmatrix}$

- další pravidla pro skládání cyklů

1) $(a\ldots b\, c\, d\ldots e) = (a\ldots b\, c)(c\, d\ldots e)$ (rozklad, nebo složení cyklů)

neboť jde o součin

$$\begin{pmatrix} a\ldots b\, d\ldots e\, c \\ \ldots b\, c\, d\ldots e\, a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a\ldots b\, c\, d\ldots e \\ a\ldots b\, d\ldots e\, c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\ldots b\, c\, d\ldots e \\ \ldots b\, c\, d\ldots e\, a \end{pmatrix}$$

2) $(a b)(a\, c_1\ldots c_k\, b\, d_1\ldots d_l) = (b\, d_1\ldots d_l)(a\, c_1\ldots c_k)$

ovšem $(a\, c_1\ldots c_k\, b\, d_1\ldots d_l)(a b) = (a\, d_1\ldots d_l)(b\, c_1\ldots c_k)$

3) z 1) plyne rozklad na transpozice, např.

$$(2\,4\,1\,5) = (24)(41)(15) = (24)(14)(15)$$

4) ovšem dokonce lze každou permutaci rozložit na transpozice typu $(12), (23), \ldots (n-1\ n)$, tj. $(i, i+1)$

[podle 3) stačí rozložit transpozici $(j\ j+k)$, kde $k>1$ a $j+k \leq n$

postupně využívání $(j\ j+k) = \underbrace{(j\ j+k-1)(j+k-1\ j+k)(j\ j+k-1)}_{\text{sdružení, tj. zaměníme } j+k-1 \text{ číslem } j}$

až se dostaneme k $(j\ j+1)$

po drobném přeuspořádání a zrušení stejných cyklů dostaneme

$$(j\ j+k) = (j\ j+1)(j+1\ j+2)\ldots(j+k-1\ j+k)(j+k-2\ j+k-1)\ldots(j\ j+1)$$

neboli stačí ukázat, že $(j\ j+k) = (j\ j+1 \ldots j+k)(j+k-1 \ldots j)$

což je zřejmé z rozepsání

$$(j\ j+k) = \left(\begin{array}{cccccccc} 1\ldots j-1 & j & j+1 & \ldots & j+k-1 & j+k & \ldots & n \\ 1\ldots j-1 & j+k-1 & j & \ldots & j+k-2 & j+k & \ldots & n \\ 1\ldots j-1 & j+k & j+1 & & j+k-1 & j & \ldots & n \end{array}\right) \quad a_2$$

Počet prvků tříd sdružených prvků

- označme určitou třídu symbolem $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\overset{\text{počet 2-cyklů}}{\nu_2}}, \ldots n^{\nu_n})$
- protože cykly můžeme permutovat a posunovat elementy v cyklu

bude $$\#C_{(\nu)} = \frac{n!}{1^{\nu_1}\nu_1!\ \underbrace{2^{\nu_2}}_{\text{posun 2-cyklů}}\underbrace{\nu_2!}_{\text{permutace 2-cyklů}} \ldots n^{\nu_n}\nu_n!}$$

Reprezentace symetrické grupy S_n

- obecné poznámky:
  - počet IR je jako vždy roven počtu tříd sdružených prvků, které jsou dány strukturou cyklů ⇒ počet IR = počet rozkladů čísla n

Př: $S_3 \sim C_{3v}$

$S_3 \sim C_{3v}$	E (1^3)	σ_v $3(2^1 1^1)$	C_3 $2(3^1)$
$A_1 = \Gamma^s = \Gamma^1$	1	1	1
$E = \Gamma^2$	2	0	-1
$A_2 = \Gamma^a = \Gamma^3$	1	-1	1

číslo $3 = 1+1+1$
$= 2+1$
$= 3$
má tři rozklady ⇒ 3 IR
a také 3 třídy (1^3), $(2^1 1^1)$ a (3^1)
s počty prvků $\#(1^3) = \frac{3!}{1^3 \cdot 3!} = 1$

$\#(2^1 1^1) = \frac{3!}{1^1 1!\, 2^1 \cdot 1!} = 3$

$\#(3^1) = \frac{3!}{3^1 \cdot 1!} = 2$

- každá grupa S_n má dvě jednorozměrné IR
  symetrickou Γ^s, kdy $\chi^s(g) = 1$ pro $\forall g \in S_n$
  a antisymetrickou Γ^a, kdy $\chi^a(g) = \begin{cases} 1 & \text{pro sudé permutace} \\ -1 & \text{pro liché permutace} \end{cases}$
  (též alternující)

  (neboť složením dvou sudých či dvou lichých permutací dostaneme sudou ⇔ $1 \cdot 1 = (-1)(-1) = 1$, a složením liché a sudé dostaneme lichou ⇔ $(-1) \cdot 1 = -1$)

- navíc, je-li Γ^μ lib. IR grupy S_n s maticemi $D^\mu(g)$, pak je též IR $\Gamma^{\tilde{\mu}}$ s maticemi $D^{\tilde{\mu}}(g) = \chi^a(g) D^\mu(g)$
  a charakterem $\chi^{\tilde{\mu}}(g) = \chi^a(g)\chi^\mu(g)$

  (Frobeniovo kritérium ireduc. dává
  $$\sum_{g \in S_n} \chi^{\tilde{\mu}}(g)^* \chi^{\tilde{\mu}}(g) = \sum_{g \in S_n} \underbrace{(\chi^a(g))^2}_{1} \chi^\mu(g)^* \chi^\mu(g) = \# G$$
  je-li Γ^μ ireducibilní)

  můžou nastat 2 možnosti:
  a) buď jde o dvě různé IR (říká se jim pak sdružené) kdy je alespoň jeden charakter u liché permutace nenulový (viz např. IR T_1 a T_2 u grupy $T_d \sim S_4$)

  b) nebo $\Gamma^{\tilde{\mu}} = \Gamma^\mu$, kdy však musí být všechny charaktery lichých permutací nulové (samosdružená IR) (viz repr. E u $C_{3v} \sim S_3$ či u $T_d \sim S_4$)

- obecně se při značení a odvozování IR grupy S_n používají Youngovy tabulky (viz níže), uvedeme si výsledky bez důkazů, podrobnosti viz např. kniha od Hamermeshe

Youngovo schéma, Youngova tabulka a Yamanouchiho symbol

- označení tříd pomocí symbolu $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \ldots, n^{\nu_n})$

  vyjadřující cyklickou strukturu permutací: ν_1 cyklů délky 1

  $\vdots$

  pro něž platí ν_n cyklů délky n

  $$\nu_1 + 2\nu_2 + \ldots + n\nu_n = n$$

  (tedy ν_i jsou často nulová)

- přestože se $\#\mathrm{IR} = \#$tříd, k označení IR se používá jiný symbol, a sice $[\lambda] = [\lambda_1, \ldots \lambda_n]$, který je sice ve vztahu k (ν) pomocí $\lambda_k = \sum_{j=k}^{n} \nu_j$ pro $k = 1, \ldots, n$

  navíc

  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0 \Leftarrow$ neboli

  a též $\nu_i = \lambda_i - \lambda_{i+1}$ pro $i = 1, \ldots, n-1$

  $$\begin{aligned} \lambda_1 &= \nu_1 + \nu_2 + \ldots + \nu_n \\ \lambda_2 &= \qquad \nu_2 + \ldots + \nu_n \\ &\vdots \\ \lambda_n &= \qquad\qquad\qquad \nu_n \end{aligned}$$

  z čehož $\sum_{k=1}^{n} \lambda_k = \nu_1 + 2\nu_2 + \ldots n\nu_n = n$

  ovšem označení IR se bere jako nezávislé na značení tříd

- vidíme, že $[\lambda]$ je určitý rozklad čísla n, a tedy počet IR (a i počet tříd) je roven počtu možných rozkladů čísla n (není jednoduchý vzorec)

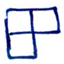
- v obou symbolech (ν) i $[\lambda]$ se obvykle vynechávají nuly a každému rozkladu čísla n odpovídá jedna třída a jedna IR $D^{[\lambda]}$ grupy S_n a lze ji graficky znázornit pomocí Youngova schémato (n buněk uspořádaných do řádků pod sebou o délkách $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_r$)

  r … počet nenulových λ_i

Př: pro S_3 budeme mít

standardní uspořádání IR ↓

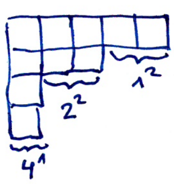
$[3] \longleftrightarrow$  $\longleftrightarrow (1^3)$

$[21] \longleftrightarrow$  $\longleftrightarrow (1^1, 2^1)$

$[1^3] = [111] \longleftrightarrow$  $\longleftrightarrow (3^1)$

třídy sdružených prvků

- obecněji tedy

$[5\,3\,1^2] \longleftrightarrow$ $\lambda_1 = 5 \rightarrow$, $\lambda_2 = 3 \rightarrow$, $\lambda_3 = 1 \rightarrow$, $\lambda_4 = 1 \rightarrow$  $\longleftrightarrow (1^2, 2^2, 4^1)$

- <u>Youngova tabulka</u> je obecně Youngovo schéma vyplněné čísly $1, \dots, n$, ovšem užitečné jsou především <u>standardní Youngovy tabulky</u> (YT), kdy v každém řádku, resp. sloupci vyplněná čísla rostou zleva doprava, resp. shora dolů

- ukazuje se, že pomocí standardních YT lze označit jednotlivé bázové funkce (vektory) příslušející IR dané odpovídajícím Youngovým schématem

<u>Př:</u> pro S_3 dostaneme

jediná možnost vyplnění

$$[3] \longleftrightarrow \boxed{1\,|\,2\,|\,3} \Rightarrow d^{[3]} = 1 \longleftrightarrow A_1$$

zde je použito tzv. slovníkové uspořádání $\longrightarrow$

$$[21] \longleftrightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} < \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \Rightarrow d^{[21]} = 2 \longleftrightarrow E$$

$$[1^3] \longleftrightarrow \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline\end{array} \Rightarrow d^{[1^3]} = 1 \longleftrightarrow A_2$$

pro grupu $C_{3v} \sim S_3$

- obecně <u>počet standardních YT</u> pro určité YS $[\lambda]$ tedy <u>dává dimenzi</u> odpovídající IR <u>$d^{[\lambda]}$</u>

- protože YT jsou poněkud těžkopádné pro označení vektorů báze, používá se jiný symbol, tzv. <u>Yamanouchiho symbol</u>

$\{r\} = \{r_n, r_{n-1}, \dots, r_2, r_1\}$, kde r_i udává číslo řádku, ve kterém se nachází číslo „i" ve SYT

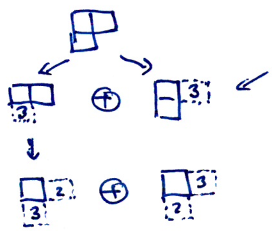
např. $\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} \longleftrightarrow \{2,1,1\}$, $\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \longleftrightarrow \{1,2,1\}$

pozn.: Youngova schémata a SYT jsou vymyšleny tak, aby bylo snadné určovat rozklady subdukovaných reprezentací při přechodu od S_n k S_{n-1} a dále k S_{n-2} atd.

Př: v S_3

S_2

S_1



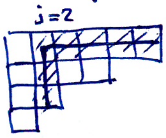
2 možné odebrání $\boxed{3}$ odpovídají rozkladu na 2 IR podgrupy S_2

a pak vždy jedno odebrání $\boxed{2}$ dává rozklad na 2 IR (stejné) podgrupy S_1

neboli $[21] = [2] \oplus [1^2] = [1] \oplus [1]$

obecně: IR grupy S_n pro YS $[\lambda]$ subdukovaná na S_{n-1} $\left(\text{permutace} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n-1 & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_{n-1} & n \end{pmatrix}\right)$ je direktním součtem IR S_{n-1} odpovídajících YS vzniklých z $[\lambda]$ odebráním jednoho čtverečku všemi <u>možnými</u> způsoby

– hák, háková tabulka a pravidlo pro dimenzi $d^{[\lambda]}$

– jako **hák v Youngově schématu** označujeme všechna políčka napravo a dolů od jistého políčka (i,j) včetně tohoto políčka, např. $i=1$ $j=2$  zde $h_{12} = 7$

– **délka háku** h_{ij} = počet těchto políček

– **háková tabulka** = Youngovo schéma vyplněné délkami háků, např. $\begin{array}{|c|c|}\hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \cline{1-1}\end{array}$ nebo $\begin{array}{cccccc} 9 & 7 & 5 & 4 & 2 & 1 \\ 6 & 4 & 2 & 1 & & \\ 3 & 1 & & & & \\ 1 & & & & & \end{array}$

– lze ukázat, že dimenze $d^{[\lambda]} = \dfrac{n!}{\prod_{i,j} h_{ij}}$ (tzv. hákové pravidlo)

Př: pro S_3: $\boxed{3\,|\,2\,|\,1} \Rightarrow d^{[3]} = \frac{3!}{3\cdot 2} = 1$

$\begin{array}{cc} 3 & 1 \\ 1 & \end{array} \Rightarrow d^{[21]} = \frac{3!}{3} = 2$

$\begin{array}{c} 3 \\ 2 \\ 1 \end{array} \Rightarrow d^{[1^3]} = \frac{3!}{3\cdot 2} = 1$

nebo pro S_{13} a výše uvedenou hákovou tabulku $d^{[6421]} = 13\cdot 12\cdot 11\cdot 10 = 17160$:-)

Charaktery iredocibilních repr. S_n (podle Coleman: Adv. Quant. Chem. vol. 4 (1968) 83)

– vezměme první sloupec hákové tabulky pro $[\lambda]$ a zaveďme symbol $D = |h_{11}\ h_{21}\ h_{31} \dots h_{r1}| = |h_1\ h_2 \dots h_r|$, pro který použijeme pravidla:

1) $D = 0$ pokud lib. $h_i < 0$ nebo pokud $h_i = h_j$ pro lib. i a j
2) D změní znaménko, pokud přehodíme lib. h_i a h_j
3) $D_0 = |r-1\ \ r-2\ \dots\ 2\ 1\ 0| = 1$
4) „násobení" číslem μ:
$\mu D = |h_1-\mu\ \ h_2 \dots h_r| + |h_1\ \ h_2-\mu \dots h_r| + \dots + |h_1\ h_2 \dots h_r-\mu|$

– chceme-li spočítat charakter třídy $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \dots, n^{\nu_n})$, násobíme D postupně ν_n-krát číslem n, ν_{n-1}-krát $n-1, \dots, \nu_1$-krát 1, a postupně zjednodušujeme podle výše uvedených pravidel až na součet D_0

Př: charaktery S_4

$T_d \sim S_4$		$1(1^4)$	$6(1^2,2)$	$8(1,3)$	$3(2^2)$	$6(4)$
$D = \|4\|$	$\chi^{[4]}$	1	1	1	1	1
$D = \|41\|$	$\chi^{[3,1]}$	3	1	0	−1	−1
$D = \|32\|$	$\chi^{[2,2]}$	2	0	−1	2	0
$D = \|421\|$	$\chi^{[2,1^2]}$	3	−1	0	−1	1
$D = \|4321\|$	$\chi^{[1^4]}$	1	−1	1	1	−1

pro $(1^2,2)$: $2D = |21|$, $1^2|21| = |01| = 1 \Leftarrow D = |4|$ apod.

např. pro $\chi^{[2,2]}(1,3)$:

$3|32| = |02| + |\underbrace{3\ \ -1}_{0}| = -|20|$

$-1|20| = -|10| - |2\ -1| = -1$

nebo $\chi^{[21^2]}(4)$: $4|421| = |021| = |210| = 1$

a pro $\chi^{[1^4]}(2^2)$: $2|4321| = |4301|$, $2|4301| = |2301| = 1$ atd.

Maticová reprezentace symetrické grupy - tzv. ortogonální

- odvozena Alfredem Youngem na začátku 20. století
- víme, že stačí najít matice reprezentující transpozice $(i\ i+1)$, neboť všechny ostatní permutace z nich lze složit, a tedy i matice reprezentující lib. permutaci dostaneme jako součin matic pro $(i\ i+1)$
- pro transpozice $(i\ i+1)$ v rámci grupy S_n lze zkonstruovat matice IR příslušejících Youngovu schématu $[\lambda]$ následovně:

1) zkonstruujte standardní YT pro $[\lambda]$ ve vzestupném pořadí (u Yamanouchiho symbolů sestupně)
   - po sobě jdoucí čísla i a $j=i+1$ se vyskytují buď
     a) ve stejném řádku
     nebo b) ve stejném sloupci
     nebo c) v různých řádcích a sloupcích, ale pak je lze přehodit, přičemž opět dostaneme SYT

2) číslujte řádky a sloupce matice pomocí SYT, neboli pomocí Yamanouchiho symbolů a vyplňte ji pro transpozici $(i\ j)$ takto:
   a) pro SYT, kde i a j jsou na stejném řádku, vyplňte 1 na diagonálu, 0 jinde
   b) jsou-li i a j ve stejném sloupci, pak na diagonálu -1
   c) do průsečíků 2 řádků a 2 sloupců označených SYT, ve kterých lze i a j přehodit (tj. nejsou ve stejném řádku, ani sloupci), vyplňte hodnoty $\begin{pmatrix} -\rho & \sqrt{1-\rho^2} \\ \sqrt{1-\rho^2} & \rho \end{pmatrix}$ kde ρ^{-1} je nejmenší počet kroků z políčka s hodnotou i do políčka s j

Př. IR $[\lambda]=[3\,1]$ grupy S_4

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

$Y_1=\{2,1,1,1\}$ $\quad Y_2=\{1,2,1,1\}$ $\quad \{1,1,2,1\}=Y_3$

jde o 3-rozměrnou IR

2)
$$D^{[3,1]}(12) = \begin{array}{c} \\ Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} Y_1 & Y_2 & Y_3 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}$$

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

např. v $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ je počet kroků z 2 do 3 roven $2=\frac{1}{\rho} \Rightarrow \rho=\frac{1}{2}$

$$D^{[3,1]}(34) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{8}}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

v $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}$ je počet kroků z 3 do 4 roven $3=\frac{1}{\rho} \Rightarrow \rho=\frac{1}{3}$

Cvičení: konstrukce IR grupy S_4 pomocí indukce z IR podgrupy S_3

- jde zároveň o IR grupy $T_d \sim S_4$ pomocí IR grupy $C_{3v} (\subset T_d) \sim S_3$

- vyjdeme z IR grupy S_3, která v S_4 tvoří podgrupu

$C_{3v} \sim S_3$	E (1^3)	$3\sigma_v$ $3(2^1 1^1)$	$2C_3$ $2(3^1)$
$A_1 = [3]$	1	1	1
$E = [21]$	2	0	−1
$A_2 = [1^3]$	1	−1	1

$$S_3 \sim H = \{\underset{\sim E}{(1)(2)(3)(4)},\ \underset{\sim C_3}{(123)(4)},\ \underset{\sim C_3^2}{(132)(4)},\ \underset{\sim \sigma_d}{(12)(3)(4)},\ \underset{\sim \sigma_d}{(13)(2)(4)},\ \underset{\sim \sigma_d}{(23)(1)(4)}\}$$

kde (4) zůstává stále na místě, tj. permutujeme pouze 1, 2, 3

- levé třídy lze generovat pomocí transpozic se 4:

$g_1 = E$

$$g_2 = (14) \Rightarrow g_2 H = \{\underset{\sim \sigma_d}{(14)(2)(3)},\ \underset{\sim S_4}{(1234)},\ \underset{\sim S_4}{(1324)},\ \underset{\sim C_3}{(124)(3)},\ \underset{\sim C_3}{(134)(2)},\ \underset{\sim C_2}{(14)(23)}\}$$

$$g_3 = (24) \Rightarrow g_3 H = \{\underset{\sim \sigma_d}{(24)(1)(3)},\ \underset{\sim S_4}{(1423)},\ \underset{\sim S_4}{(1342)},\ \underset{\sim C_3}{(142)(3)},\ \underset{\sim C_2}{(13)(24)},\ \underset{\sim C_3}{(234)(1)}\}$$

$$g_4 = (34) \Rightarrow g_4 H = \{\underset{\sim \sigma_d}{(34)(1)(2)},\ \underset{\sim S_4}{(1243)},\ \underset{\sim S_4}{(1432)},\ \underset{\sim C_2}{(12)(34)},\ \underset{\sim C_3}{(143)(2)},\ \underset{\sim C_3}{(243)(1)}\}$$

- charaktery indukovaných reprezentací jsou obecně dány

$$\chi^{M\uparrow S_4}(g) = \sum_{s=1}^{4} \delta_{s,g}(g)\, \chi^M_{S_3}(g_s^{-1} g g_s)$$

kde $\delta_{s,g}(g) = 1$ pro $g_s^{-1} g g_s \in H$

- protože se při sdružení zachovává struktura cyklů, tak $g_s^{-1} g g_s \in H$ jen pro g ze tříd

1) $(1^4) = E$: $\chi^{M\uparrow S_4}(E) = 4 \cdot \chi^M_{S_3}(E)$
   $\uparrow$ $g_s^{-1} E g_s \in H$ pro $\forall g_s$

2) $(2^1 1^2)$: vezmeme $g = (12)(3)(4)$
   $\Rightarrow g_s^{-1} g g_s \in H$ pro $g_1 = E$ a $g_4 = (34)$
   $\Rightarrow \chi^{M\uparrow S_4}(2^1 1^2) = 2 \cdot \chi^M_{S_3}(2^1 1^1)$

3) $(3^1 1^1)$: vezmeme $g = (123)(4)$
   $\Rightarrow g_s^{-1} g g_s \in H$ jen pro $g_1 = E$
   $\Rightarrow \chi^{M\uparrow S_4}(3^1 1^1) = 1 \cdot \chi^M_{S_3}(3^1)$

- pro třídy (4^1) a (2^2) bude charakter vždy nulový, neboť nejsou obsaženy v H vůbec

S_4	E (1^4)	$6\sigma_d$ $6(2^1 1^2)$	$3C_2$ $3(2^2)$	$8C_3$ $8(3^1 1^1)$	$6S_4$ $6(4^1)$
$[3]\uparrow S_4$	4	2	0	1	0
$[21]\uparrow S_4$	8	0	0	−1	0
$[1^3]\uparrow S_4$	4	−2	0	1	0
$[4]$	1	1	1	1	1
$[31]$	3	1	−1	0	−1
$[2^2]$	2	0	2	−1	0
$[21^2]$	3	−1	−1	0	1
$[1^4]$	1	−1	1	1	−1

$[3]\uparrow S_4$

$[21]\uparrow S_4$

$[1^3]\uparrow S_4$

- postupnou konstrukci IR grupy S_4 z IR grupy S_3 lze tedy provést tak, že v $[3]\uparrow S_4$ a $[1^3]\uparrow S_4$ zjistíme, kolikrát je v nich obsažena sym. a antisym. IR $[4]$ a $[1^4]$ a pak odečtením $[4]$ od $[3]\uparrow S_4$ a $[1^4]$ od $[1^3]\uparrow S_4$ dostaneme $[31]$ a $[21^2]$, u kterých ověříme, že jde již o IR, pak rozložíme $[21]\uparrow S_4$ na $[31] + [21^2] + \text{zbytek}$, kde zbytek bude poslední IR $[2^2]$