

# Rozklad přímého součinu reprezentací $\Rightarrow$

$\Rightarrow$  Clebschova - Gordonova řada, Clebschovy - Gordonovy koeficienty

- přímý - použitelné vzorce

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

$$a_{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{1}{\#G} \sum_g \chi^{(\sigma)}(g)^* \chi^{(\mu\nu)}(g)$$

dostaneme rozklad

$$\rho^{(\mu\nu)} = \sum_{\sigma} \oplus a_{\sigma}^{\mu\nu} \rho^{(\sigma)} = \sum_{\sigma} \oplus (\mu\nu\sigma) \rho^{(\sigma)}$$

kteřemu se říká Clebschova - Gordonova řada

čísla  $(\mu\nu\sigma)$  jsou jednoznačně dány pro libovolnou konečnou (Lieovu kompaktní)

grupu např. pro  $C_{3v}$  máme

| $\rho^{(\sigma)}$ | E | $2C_2$ | $3\sigma_v$ |
|-------------------|---|--------|-------------|
| $A_1$             | 1 | 1      | 1           |
| $A_2$             | 1 | 1      | -1          |
| E                 | 2 | -1     | 0           |

$\Rightarrow$

| $\rho^{(\mu\nu)}$  | E | $2C_2$ | $3\sigma_v$ |                             |
|--|---|--------|-------------|-----------------------------|
| $A_1 \otimes A_1$  | 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                         |
| $E \otimes E$  | 4 | 1      | 0           | = $A_1 \oplus A_2 \oplus E$ |
| báze $\psi_1\psi_1, \psi_1\psi_2 + \psi_2\psi_1, \psi_2\psi_2$ | 3 | 0      | 1           | = $A_1 \oplus E$            |
| báze $\psi_1\psi_2 - \psi_2\psi_1$                             | 1 | 1      | -1          | = $A_2$                     |

- fyzikálně zajímavější je ale nalezení báze, která by byla bází pro jednotlivé ireducibilní repr., tj. chtěli bychom přejít od  $\psi_j^{(\mu)} \psi_l^{(\nu)}$  k bázi  $\Psi_s^{(\sigma\lambda)}$ ,  $s=1, \dots, d_{\sigma}$ ,  $\lambda=1, \dots, (\mu\nu\sigma)$ , kde  $\lambda$  čísleje jednotlivé ireducibilní inv. podprostory příslušející téže IR  $\rho^{(\sigma)}$

- fce  $\Psi_s^{(\sigma\lambda)}$  musí být lin. kombinací  $\psi_j^{(\mu)} \psi_l^{(\nu)}$  a naopak, tedy

$$\Psi_s^{(\sigma\lambda)} = \sum_{j,l} \psi_j^{(\mu)} \psi_l^{(\nu)} \underbrace{(\mu_j, \nu_l | \sigma\lambda_s)}_{\text{Clebschovy - Gordonovy koeficienty}}$$

tvorí matici  $d_{\mu} d_{\nu} \times d_{\sigma}$

- speciálně pro grupu rotací jsou často nazývány též Wignerovy koeficienty (ale někdy se liší ~~čísly~~ faktorem)

- Clebschovy - Gordonovy koeficienty nejsou jednoznačně určeny, pokud  $(\mu\nu\sigma) = 1$  pro nějaké  $\lambda$ , pak jsou určeny až na fázový faktor  $e^{i\omega}$ , pro  $(\mu\nu\lambda) > 1$  až na ~~unitární~~ unitární matici  $(\mu\nu\lambda) \times (\mu\nu\lambda)$

- starý známý příklad  $H_3^+$

- báze 1s a 2s orbitalů  $\Rightarrow$

$\Rightarrow$  symetricky adaptovaná báze (viz strana (26))

přesněně báze těchto

$$\psi_1^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\phi_1^{1s} + \phi_2^{1s} + \phi_3^{1s}) \quad \text{a podobně pro } \phi^{2s}$$

zařazenou  $\psi \rightarrow \varphi$

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

$$\psi_2^E = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_2^{1s} - \phi_3^{1s})$$

- máme-li 2 elektrony (opět neuvádíme spin a tedy ani Pauliho vylučovací princip) dostali bychom 36 kombinací  $\psi_1^{A_1}(r_1)\psi_1^{A_1}(r_2), \dots, \psi_2^E(r_1)\psi_2^E(r_2)$

- uvádíme ~~je~~ podmnožinu této báze, a sice  $\psi_1^E(r_1)\psi_1^E(r_2), \dots, \psi_2^E(r_1)\psi_2^E(r_2)$

kteří je dána <sup>tensor.</sup> součinem  $\{\psi_1^E, \psi_2^E\} \otimes \{\psi_1^E, \psi_2^E\} \rightarrow$  ta tvoří

bázi jisté reducibilní repr. <sup>E $\otimes$ E</sup> grupy  $C_{3v}$ , pro viz jsme dostali

Clebschovy - Gordanovu větu  $E \otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E$   $\vdash (EA_1) = (EA_2) = (EE) = 1$

- chtěli bychom přejít k bázi  $\Psi_s^{(A_1)} = \sum_{j_1, j_2} \psi_{j_1}^E \psi_{j_2}^E (E_{j_1, E_{j_2}} | \chi_{A_1}^s)$

~~kteří~~ jejíž prvky přísluší jednotlivým IR v rozkladu CC řady.

v případě konečných grup lze opět provést pomocí projekčních (symetrických)

operátorů např.

$$P_{\psi_1^E \psi_1^E}^{A_1, E, E} = \frac{1}{\#G} \sum_{g \in G} \chi_{A_1}^*(g) O_g (\psi_1^E \psi_1^E) = \frac{1}{6} \sum_{j_1, j_2} \psi_{j_1}^E \psi_{j_2}^E D_{j_1}^E(g) D_{j_2}^E(g)$$

dostaneme

$$= \frac{1}{6} [3\psi_1^E \psi_1^E + 3\psi_2^E \psi_2^E] \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1^E \psi_1^E + \psi_2^E \psi_2^E] = \Psi_1^{A_1}$$

$$\Rightarrow (E_1, E_1 | A_1, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}, (E_2, E_2 | A_1, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}, (E_1, E_2 | A_1, 1) = (E_2, E_1 | A_1, 1) = 0$$

podobně  $P_{\psi_1^E \psi_1^E}^{A_2, E, E} = 0$

$$P_{\psi_1^E \psi_2^E}^{A_2, E, E} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^E \psi_2^E - \psi_2^E \psi_1^E) = \Psi_1^{A_2}$$

$$P_{\psi_1^E \psi_2^E}^{E, E, E} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^E \psi_2^E + \psi_2^E \psi_1^E) = \Psi_1^E$$

$$P_{\psi_1^E \psi_2^E}^{E, E, E} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^E \psi_2^E + \psi_2^E \psi_1^E) = \Psi_2^E$$

$$(E_1, E_1 | A_2, 1) = 0$$

$$(E_1, E_2 | A_2, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(E_2, E_1 | A_2, 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(E_2, E_2 | A_2, 1) = 0$$