

# Základy teorie grup, symetrie

“Krása a síla **teorie grup** aplikované ve fyzice spočívá v transformaci mnoha složitých **operací symetrie** do jednoduché lineární algebry.”

- Definice grupy
- Příklad: grupa permutací  $P(3)$
- $P(3)$  jako grupa symetrie rovnostranného trojúhelníka  $C_{3v}$
- Další (užitečná!) terminologie a vlastnosti
- Representace (**jednotné a účinné zacházení**)
- Charaktery (**výběr nejdůležitějších vlastností**)
- Bodové grupy (**symetrie molekul a krystalů**)

# Grupa

Množina  $G$  prvků  $A, B, \dots$  s binární operací ( $AB$ , násobení) s následujícími vlastnostmi:

1.  $AB \in G$  (uzavřenost),
2.  $(AB)C = A(BC)$  (asociativnost),
3.  $G$  obsahuje  $E$  takové, že  $EA = AE = A$  pro každé  $A \in G$  ( $E$  je jednotkový prvek),
4. pro každé  $A \in G$  existuje  $A^{-1}$  takové, že  $AA^{-1} = A^{-1}A = E$  ( $A^{-1}$  je inverzní k  $A$ ).

Poznámky:

Pořadí uvedení prvků je nedůležité.

Násobení nemusí být komutativní ( $AB = BA$ ).

Pokud je, grupu označujeme jako Abelovskou.

## Příklad grupy: permutace tří symbolů $P(3)$

$3!=6$  prvků (grupa má řád 6),

$E=(123)$   $A=(132)$   $B=(321)$   $C=(213)$   $D=(312)$   $F=(231)$

znamená konečné pořadí tří symbolů z výchozího (123)

násobení znamená postupné permutace tří symbolů:  $AD$  ... prvně  $D$ , pak  $A$

Tabulka násobení

napravo nalevo	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

$P(3)$ : matice (3x3) (“řádek krát sloupec”)

$E=(123)$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$A=(132)$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$B=(321)$

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$C=(213)$

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$D=(312)$

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$F=(231)$

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

---

$$AD = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = B$$

$$DA = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = C$$

$P(3)$ : matice (2x2) (mohou permutovat tři objekty?)

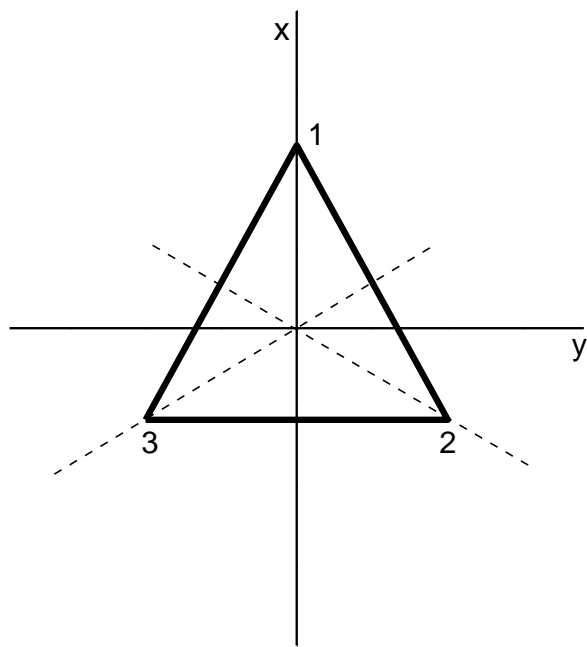
$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad B = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$$C = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} \quad D = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} \quad F = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

---

$$AD = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} = B$$

$P(3)$  reprezentuje i operace symetrie rovnostranného trojúhelníka, grupa  $C_{3v}$



$$\begin{bmatrix} y_A \\ x_A \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ x \end{bmatrix}$$

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

žádná změna

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$2 \leftrightarrow 3$ , zrcadlení v  $(x,z), (1,z)$

$$B = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$1 \leftrightarrow 3$ , zrcadlení v  $(2,z)$

$$C = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$1 \leftrightarrow 2$ , zrcadlení v  $(3,z)$

$$D = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$1,2,3 \rightarrow 3,1,2$ ,  
rotace o  $2\pi/3$  kolem  $z$

$$F = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$1,2,3 \rightarrow 2,3,1$ ,  
rotace o  $4\pi/3$  kolem  $z$

## Další terminologie a vlastnosti

1. **Řád  $G$** : počet jejích prvků;  $P(3)$  je řádu 6.
2. **Podgrupa  $G$** : množina jejích prvků, tvořící grupu;  
podgrupy  $P(3)$ :  $(E)$ ,  $(E,A)$ ,  $(E,B)$ ,  $(E,C)$ ,  $(E,D,F)$ .  
Řád grupy je dělitelný řádem podgrupy.
3. **Řád  $n$  prvku  $A \in G$** : nejmenší hodnota pro  $A^n = E$ ;  
v  $P(3)$ ,  $E$  je řádu 1,  $A, B, C$  jsou řádu 2,  $D, F$  jsou řádu 3.
4. **Perioda  $A \in G$**  je Abelovská podgrupa  $(E, A, A^2, \dots, A^{n-1})$ , kde  $n$  je řád  $A$ ; periody  
 $P(3)$ :  $(E)$ ,  $(E,A)$ ,  $(E,B)$ ,  $(E,C)$ ,  $(E,D,D^2) = (E, F, F^2) = (E,D,F)$ .

## pokračování

5. Necht'  $S \equiv (E, S_1, S_2, \dots, S_g)$  je podgrupa  $G$  a  $X \in G$ . **Pravý koset**  $S$  je množina  $(EX, S_1X, S_2X, \dots, S_gX)$ , **levý koset** je  $(XE, XS_1, XS_2, \dots, XS_g)$ . Koset nemusí být grupa. Koset bude podgrupou  $S$  jestliže  $X \in S$ . Dva kosety dané grupy buď obsahují stejné prvky nebo nemají žádný prvek společný.

Příklady s  $P(3)$ : Necht'  $S \equiv (E, A)$ . Pravé kosety  $S$  jsou  $(E, A)E = (E, A)A = (E, A)$ , což je podgrupa, a  $(E, A)B = (E, A)D = (B, D)$  a  $(E, A)C = (E, A)F = (C, F)$  což podgrupy nejsou.

6. Prvek  $B \in G$  se označuje jako **sdužený (konjugovaný)** s  $A \in G$ , je-li  $B = XAX^{-1}$ , kde  $X$  je libovolný prvek  $G$ . Je-li  $B$  konjugovaný s  $A$  a  $C$  je konjugovaný s  $B$ , pak  $C$  je konjugovaný s  $A$ .

7. **Třída** je množina prvků které dostaneme z daného prvku  $G$  sdužením. Jednotkový prvek je jedinou třídou, která tvoří podgrupu. Všechny prvky třídy mají stejný řád. Abelovská grupa má tolik tříd jako prvků.  $P(3)$  má tři třídy:  $(E)$ ,  $(A, B, C)$ , and  $(D, F)$ .



Pojem třídy je velmi důležitý; prověříme třídy grupy  $P(3)$ :

třída (užitečný je pohled na inverzní prvky,  $A^{-1}=A$ ,  $B^{-1}=B$ ,  $C^{-1}=C$ ,  $D^{-1}=F$ ,  $F^{-1}=D$ ):

( $E$ ) triviální, neboť  $XEX^{-1}=E$  pro každé  $X \in G$ ,

( $A, B, C$ ) prvky řádu 2, v tabulce součinů červené,

( $D, F$ ) prvky řádu 3, v tabulce součinů zelené;

je-li některý ze součinů ve sdružení mimo třídu, zbylý ho “vrací”

right left	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

## pokračování

8. Podgrupa  $N$  grupy  $G$  se značí jako **samosdružená** (nebo **invariantní**, nebo **normální**), je-li

$XNX^{-1}=N$ , kde  $X$  je libovolný prvek  $G$ .

Samosdružená podgrupa musí obsahovat celé třídy. Pravé a levé kosety samosdružené podgrupy jsou stejné. Součiny prvků dvou pravých koseť samosdružené podgrupy tvoří další pravý koset.

Například,  $(E,D,F)$  je samosdružená podgrupa  $P(3)$ , zatímco  $(E,A)$ ,  $(E,B)$ ,  $(E,C)$  nejsou; pravé a levé kosety  $(E,D,F)A=(A,C,B)$  a  $A(E,D,F)=(A,B,C)$  jsou stejné součiny  $(A,C,B)(E,D,F)$  tvoří pravý koset  $(A,B,C)$ , součiny  $(A,B,C)(A,B,C)$  tvoří pravý koset  $(E,D,F)$ .

9. Grupa bez samosdružené podgrupy se označuje jako **prostá**.

## pokračování

10. **Faktorová grupa** grupy  $G$  vychází ze samosdružené podgrupy  $N$  jako množina jejích kosetů, neboli, každý koset považujeme za prvek faktorové grupy.

$N$  je někdy označována jako **normální dělitel**.

Všechna čtyři pravidla násobení jsou samozřejmě splněna:

1. Uzavřenost:  $(N_i X)(N_j Y) = N_i (X N_j) Y = N_i (N_k X) Y = (N_i N_k)(XY)$  pro  $X, Y \in G$  a  $N_i, N_j, N_k \in N$ ,  $N_k = X N_j X^{-1}$ .
2. Asociativnost je splněna neboť platí pro všechny prvky  $G$ .
3. Jednotkovým prvkem faktorové grupy je koset obsahující  $E \in G$ .
4. Existuje inverzní prvek:  $(XN)(X^{-1}N) = (NX)(X^{-1}N) = NN = N$ .

11. **Index** podgrupy je celkový počet kosetů.

Řád faktorové grupy je index samosdružené podgrupy.

## pokračování

Například,  $\mathcal{E}=(E,D,F)$  je samosdružená podgrupa  $P(3)$ ,

$\mathcal{A}=(A,B,C)$  je její jediný (pravý i levý) koset.

$\mathcal{E}$  a  $\mathcal{A}$  tvoří (Abelovskou) faktorovou grupu s tabulkou součinů

	$\mathcal{E}$	$\mathcal{A}$
$\mathcal{E}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{A}$
$\mathcal{A}$	$\mathcal{A}$	$\mathcal{E}$

Tato grupa je **izomorfní** (ekvivalentní, s jedno-jednoznačnou korespondencí) s grupou  $P(2)$  permutací dvou objektů, nebo s podgrupami  $(E,A)$ ,  $(E,B)$ ,  $(E,C)$  grupy  $P(3)$ .

## Teorie reprezentací

Dvě grupy,  $G=(A,B,C,D,\dots)$  a  $g=(u,v,\dots)$ , jsou **homomorfní**, existuje-li zobrazení (korespondence)  $G$  do  $g$ , například,

$$A \rightarrow u, (B,C) \rightarrow v, \dots,$$

takové, že

$$AB \rightarrow uv, AC \rightarrow uv, \dots$$

Je-li zobrazení jedna k jedné (řády  $G$  a  $g$  jsou stejné), tyto dvě grupy jsou **izomorfní**.

Například zobrazení  $P(3)$  do  $P(2)$ ,

$$(E,D,F) \rightarrow \mathcal{E}, (A,B,C) \rightarrow \mathcal{A}$$

je **homomorfismus**. Korespondence permutační grupy  $P(3)$  s grupou symetrie rovnostranného trojúhelníka je **izomorfismus**.

## Teorie reprezentací

Homomorfismus nebo isomorfismus grupy  $G$  s grupou čtvercových matic označujeme jako **reprezentaci**  $G$ .

Ke každému  $A \in G$  přiřazujeme matici  $D(A)$  tak, že  $D(AB) = D(A)D(B)$ , s obvyklým násobením matic (“řádek krát sloupec”).

Příkladem homomorfní reprezentace permutační grupy  $P(3)$  is je grupa dvou jednorozměrných matic  $[1], [-1]$ :

$$(E, D, F) \rightarrow [1], (A, B, C) \rightarrow [-1].$$

Tabulka součinů této grupy matic je

	[1]	[-1]
[1]	[1]	[-1]
[-1]	[-1]	[1]

## Teorie reprezentací

Jinou reprezentací grupy  $P(3)$ , kterou velmi snadno dostaneme je grupa sestávající z jediné jednorozměrné matice [1]:

$$(E, A, B, C, D, F) \rightarrow [1].$$

Tabulka součinů je

	[1]
[1]	[1]

Jednorozměrná reprezentace [1] je reprezentací kterékoliv grupy.

## Teorie reprezentací

Izomorfní reprezentací permutační grupy  $P(3)$  je grupa následujících šesti třídimezních matic:

(tyto matice permutují prvky sloupcového vektoru s obvyklým pravidlem na násobení matic)

$$D(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D(A) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D(B) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D(C) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D(D) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D(F) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$



## Teorie reprezentací

Jinou izomorfní reprezentací permutační grupy  $P(3)$  je grupa následujících šesti dvojrozměrných matic:

(srovnat s předchozí transformací poloh vrcholů rovnostranného trojúhelníka)

$$D(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(A) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(B) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$$D(C) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} \quad D(D) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} \quad D(F) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

## Teorie reprezentací

Reprezentace jsou obecně tvořeny maticemi s komplexními prvky.

Symbol  $*$  používáme pro komplexní sdružení,  $T$  pro transpozici, symbol  $+$  pro sdružení:

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \dots \\ d_{21} & d_{22} & \dots \\ \dots & & \end{bmatrix}, \quad D^T = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{21} & \dots \\ d_{12} & d_{22} & \dots \\ \dots & & \end{bmatrix}, \quad D^+ = \begin{bmatrix} d_{11}^* & d_{21}^* & \dots \\ d_{12}^* & d_{22}^* & \dots \\ \dots & & \end{bmatrix}.$$

Hermitovská matice je definována pomocí  $D^T = D^*$ , or  $D^+ = D$ .

Unitární matice pomocí  $D^+ = D^{-1}$ .

Unitární matice zachovávají normu vektoru:

$(Dv)^+ Dv = (v^+ D^+) (Dv) = v^+ v$ , kde  $v$  je sloupcový vektor,  $v^+$  je sdružený řádkový vektor.

**Dimenzionalita** reprezentace je dimenzionalita jejích matic (počet sloupců a řádků).

## Teorie reprezentací

Reprezentace nejsou jedinečné. Jednoduchý způsob, jak získat novou reprezentaci je vytvoření matic následujícím způsobem

$$D(A) = \begin{bmatrix} D_n(A) & O \\ O^T & D_m(A) \end{bmatrix},$$

kde  $D_n(A)$  a  $D_m(A)$  jsou matice nějaké  $n$ — a  $m$ —dimenzionální reprezentace, a  $O$  je matice tvořená  $n \times m$  nulami. Blokovaný tvar matic  $D(A)$  nahoře znamená, že tvoří **reducibilní reprezentaci** (obsahuje nejméně dvě reprezentace). Nulové matice „oddělují“ dvě reprezentace ve složené matici.

Dále, použití **podobnostní** transformace

$$UD(A)U^{-1}$$

dává novou reprezentaci, označovanou jako **ekvivalentní**.

## Teorie reprezentací

Jestliže nějaká podobnostní transformace vede k témuž blokovému tvaru matic, označujeme reprezentaci jako **reducibilní**; v opačném případě je **ireducibilní**. Jinými slovy, ireducibilní reprezentace nemůže být vyjádřena pomocí reprezentací menší dimenze.

Grupa  $P(3)$  má tři ireducibilní reprezentace (dvě jedno- a jednu dvojrozměrnou):

prvek grupy: symbol reprezentace	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$\Gamma_1$	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
$\Gamma_1'$	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
$\Gamma_2$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$

## Teorie reprezentací

Příklad reducibilní reprezentace  $\Gamma_R$  grupy  $P(3)$  je:

	$E$	$A$	$B$	...
$\Gamma_R$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{-\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$	...

Ireducibilní reprezentace v ní obsažené se obvykle uvádějí ve tvaru:

$$\Gamma_R = \Gamma_1 + \Gamma_{1'} + \Gamma_2 .$$

## Teorie reprezentací

Zvláštní důležitost mezi různými reprezentacemi mají ty, které jsou tvořeny unitárními maticemi. Každá reprezentace  $(D(A_j), j=1, \dots, n)$  s nenulovými determinanty může být přivedena k unitárnímu tvaru pomocí podobnostní transformace. Snadno to vidíme pomocí Hermitovské matice

$$H = \sum_{j=1}^n D_j D_j^+,$$

která může být diagonalizována unitární transformací  $U$  vytvořenou z ortonormálních vlastních vektorů  $H$ :

$$H_d = U^{-1} H U.$$

Všechny prvky diagonální matice  $H_d$  jsou kladné; existuje tedy její odmocnina a pomocí ní můžeme najít hledanou podobnostní transformaci jako:

$$D_u(A_j) = H_d^{-1/2} U^{-1} D(A_j) U H_d^{1/2}.$$

## Teorie reprezentací

Následujícím výpočtem zjistíme, že matice  $D_u$  jsou unitární:

$$\begin{aligned} D_u(A_j)D_u^+(A_j) &= H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)UH_d^{1/2}(H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)UH_d^{1/2})^+ \\ &= H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)UH_dU^{-1}D^+(A_j)UH_d^{-1/2} \\ &= H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)U\left[\sum_{k=1}^n U^{-1}D(A_k)UU^{-1}D^+(A_k)U\right]U^{-1}D^+(A_j)UH_d^{-1/2} \\ &= H_d^{-1/2}\left[\sum_{k=1}^n U^{-1}D(A_j)D(A_k)UU^{-1}D^+(A_k)D^+(A_j)U\right]H_d^{-1/2} = I, \end{aligned}$$

kde  $I$  je jednotková matice. Suma v posledním řádku je diagonální matice  $H_d$ , neboť násobení pevnými maticemi  $D(A_j)$  pouze přeskupuje prvky reprezentace.

## Teorie reprezentací

Ireducibilní reprezentace má dvě následující vlastnosti ohledně komutačních vlastností,

$$MD(A_j) = D(A_j)M, j = 1, \dots, n,$$

s pomocnými maticemi  $M$  (Schurovo první a druhé lemma):

1. Jediná matice komutující se všemi maticemi ireducibilní reprezentace je násobek jednotkové,  $\text{const.} \times I$ . Jestliže existuje nekonstantní komutující matice, reprezentace je reducibilní.
2. Jsou-li  $(D_a(A_j), j=1, \dots, n)$  a  $(D_b(A_j), j=1, \dots, n)$  reprezentace dané grupy dimenzionality po řadě  $d_a$  a  $d_b$ , pak, pokud je matice  $M (d_a \times d_b)$  taková, že

$$MD_a(A_j) = D_b(A_j)M, j = 1, \dots, n,$$

$M$  musí být nulová pro  $d_a \neq d_b$ . Pro  $d_a = d_b$ ,  $M$  je nenulová pouze pro dvě reprezentace odlišující se pouze podobnostní transformací, tedy ekvivalentní.



## Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace  $(D_a(A_j), j=1, \dots, n)$  a  $(D_b(A_j), j=1, \dots, n)$  dané grupy, s dimenzemi pořadě  $d_a$  a  $d_b$ , splňují následující

velký teorém o ortogonalitě (great orthogonality theorem):

$$\sum_{j=1}^n D_{a,rs}(A_j) D_{b,tu}(A_j^{-1}) = \frac{n}{d_a} \delta_{ab} \delta_{rt} \delta_{su},$$

kde  $D_{a,rs}$  je prvek  $D_a$  z  $r$ -tého řádku a  $s$ -tého sloupce,  $\delta_{ab}$  je Kroneckerův symbol:  $\delta_{ab} = 1$  for  $a=b$  and  $\delta_{ab} = 0$  for  $a \neq b$ .

Pro unitární reprezentace se tato relace zjednodušuje na

$$\sum_{j=1}^n D_{a,rs}(A_j) D_{b,tu}^*(A_j) = \frac{n}{d_a} \delta_{ab} \delta_{rt} \delta_{su}. \quad (\text{GOT})$$

## Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy  $P(3)$ :

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$\Gamma_1$	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
$\Gamma_1'$	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
$\Gamma_2$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$

Kontrola ortogonality:

1. Součty pro  $\Gamma_1$  a  $\Gamma_1'$  jsou nulové: stejný počet matic [1] a [-1], součet je [0].

2. Součet pro  $\Gamma_1$  a  $\Gamma_2$  je nulový:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

## Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy  $P(3)$ :

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$\Gamma_1$	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
$\Gamma_1'$	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
$\Gamma_2$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$

3. Suma v (GOT) pro  $\Gamma_1$ , a  $\Gamma_2$  je nulová:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

# Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy  $P(3)$ :

	$E$	$A$	$B$	$C$	$D$	$F$
$\Gamma_1$	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
$\Gamma_1'$	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
$\Gamma_2$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$

Součty v (GOT) pro  $a=b$  jsou:

$$\Gamma_1: [1]^2 + [1]^2 + [1]^2 + [1]^2 + [1]^2 + [1]^2 = [6].$$

$$\Gamma_1': [1]^2 + [-1]^2 + [-1]^2 + [-1]^2 + [1]^2 + [1]^2 = [6].$$

$$\Gamma_2: \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^2 + \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^2 + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}^2 + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}^2 + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}^2 + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

## Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Relace  $v$  (GOT) mohou být interpretovány následujícím způsobem. Maticové prvky unitární ireducibilní reprezentace mohou být do množiny

(sloupcových nebo řádkových) vektorů  $v$  prostoru dimenze  $n$  (řád grupy):

$$v_{a,rs} = \sqrt{d_a / n} [D_{a,rs}(A_1), D_{a,rs}(A_1), \dots, D_{a,rs}(A_n)].$$

Jednotlivé vektory jsou označeny symbolem reprezentace,  $a$ , a indexy  $r$  a  $s$  řádku a sloupce. Všechny tyto vektory jsou navzájem ortogonální (“projekce na zbylé členy jsou nulové”).

Navíc, zahrnutí normalizačního faktoru (odmocnina ve formuli nahoře) zaručuje normalizaci (jednotkovou délku vektoru):

$$v_{a,rs} v_{a,rs}^+ = 1.$$

Maximální počet ortogonálních vektorů v  $n$ -rozměrném prostoru je  $n$ .

## Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_1$ , a  $\Gamma_2$  grupy  $P(3)$  obsahuje následující ortonormální vektory:

normalizační faktor	$v_1$	$v_2$	$v_3$	$v_4$	$v_5$	$v_6$
$1/\sqrt{6}$	1	1	1	1	1	1
$1/\sqrt{6}$	1	-1	-1	-1	1	1
$1/\sqrt{3}$	1	-1	1/2	1/2	-1/2	-1/2
1	0	0	-1/2	1/2	1/2	-1/2
1	0	0	-1/2	1/2	-1/2	1/2
$1/\sqrt{3}$	1	1	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2

## Teorie reprezentací - charaktery

Matice  $(D_a(A_j), j=1, \dots, n)$  dané reprezentace jsou velmi užitečné při zacházení s grupou  $G$ ; jsou ovšem dány až na podobnostní transformaci  $UD_aU^{-1}$ . Žádoucí je tedy tuto nejednoznačnost odstranit.

Označme  $\chi_a(A_j)$  stopu **stopu (trace)** matice  $D_a(A_j)$ ,

$$\chi_a(A_j) = \text{Tr} \{ D_a(A_j) \} = \sum_{j=1}^{d_a} D_{a,jj}.$$

Soubor stop pro všechny prvky grupy,

$$\chi_a(A_1), \chi_a(A_2), \dots, \chi_a(A_n),$$

označujeme jako **charakter** reprezentace  $(D_a)$ . Protože

$$\text{Tr} \{ UD \} = \sum_j \left( \sum_k U_{jk} D_{kj} \right) = \sum_k \left( \sum_j D_{kj} U_{jk} \right) = \text{Tr} \{ DU \},$$

podobnostní transformace nemění charakter reprezentace:

$$\text{Tr} \{ UDU^{-1} \} = \text{Tr} \{ U(DU^{-1}) \} = \text{Tr} \{ (DU^{-1})U \} = \text{Tr} \{ D(U^{-1}U) \} = \text{Tr} \{ D \}.$$

Ekvivalentní reprezentace jsou navzájem svázány podobnostní transformací, mají tedy stejný charakter.

## Teorie reprezentací - charaktery

Prvky grupy uvnitř jedné třídy jsou spojeny sdružením, odpovídající matice reprezentace jsou spojeny podobnostní transformací → odpovídající části charakteru libovolné reprezentace jsou stejné.

Tabulka charakterů ireducibilních reprezentací grupy  $P(3)$ :

charakter reprezentace	$\chi(E)$	$\chi(A)$	$\chi(B)$	$\chi(C)$	$\chi(D)$	$\chi(F)$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_1'$	1	-1	-1	-1	1	1
$\Gamma_2$	2	0	0	0	-1	-1

V úsporném zápisu vypisujeme pouze třídy:

class representation	$C_1=(E)$	$C_2=(A,B,C)$	$C_3=(D,F)$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_1'$	1	-1	1
$\Gamma_2$	2	0	-1



## Teorie reprezentací - charaktery

Charaktery ireducibilních reprezentací  $(D_a(A_j), j=1, \dots, n)$  a  $(D_b(A_j), j=1, \dots, n)$  splňují **relace ortogonality**:

$$\sum_{j=1}^n \chi_a(A_j) \chi_b^*(A_j) = n \delta_{ab},$$

které jsou důsledkem (GOT) pro matice. Charaktery také splňují druhou relaci ortogonality, obsahující sumaci přes reprezentace namísto sumace přes prvky grupy:

$$\sum_a \chi_a(C_k) \chi_a^*(C_l) = \frac{n}{n_k} \delta_{kl},$$

kde  $\chi_a(C_k)$  je (společná) hodnota z charakteru pro  $k$ -tou třídu, tvořenou  $n_k$  prvky, a  $n_c$  je počet tříd, který je roven počtu neekvivalentních ireducibilních reprezentací.

## Teorie reprezentací - charaktery

Ortogonalitu řádků v tabulce charakterů ireducibilních reprezentací grupy  $P(3)$  můžeme snadno prověřit:

charakter reprezentace	$\chi(E)$	$\chi(A)$	$\chi(B)$	$\chi(C)$	$\chi(D)$	$\chi(F)$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_1'$	1	-1	-1	-1	1	1
$\Gamma_2$	2	0	0	0	-1	-1

stejně jako ortogonalitu sloupců v tabulce obsahující třídy:

třída reprezentace	$C_1=(E)$	$C_2=(A,B,C)$	$C_3=(D,F)$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_1'$	1	-1	1
$\Gamma_2$	2	0	-1

## Teorie reprezentací - konstrukce tabulky charakterů

Nejdřív je třeba najít třídy. Pak můžeme použít následující vlastnosti:

- (1) Počet  $n_r$  neekvivalentních ireducibilních reprezentací je roven počtu tříd,  $n_c = n_r$ .
- (2) Součet čtverců dimenzionalit,  $d_j, j=1, \dots, n_r$ , je roven řádu grupy.
- (3) Vždy je přítomna identická reprezentace, která dává řádek jedniček.
- (4) Vždy je přítomna třída obsahující jednotkový prvek, která dává sloupec se stopami jednotkových matic, tedy dimenzionalit.
- (5) Platí ortogonalita charakterů, pro řádky i sloupce.

Teorie reprezentací - konstrukce tabulky charakterů grupy  $P(3)$ , izomorfní s  $C_{3v}$ , s použitím **Schoenfliesovy notace** pro prvky symetrie bodových grup

$E$ : identita; nutná pro grupu.

$C_n$ : rotace o  $2\pi/n$ ; rotační ose říkáme  $n$ -četná.

Osa s největším  $n$ , označovaná jako hlavní, je “vertikální”.

$\sigma$ : zrcadlení v rovině, s třemi indexy.

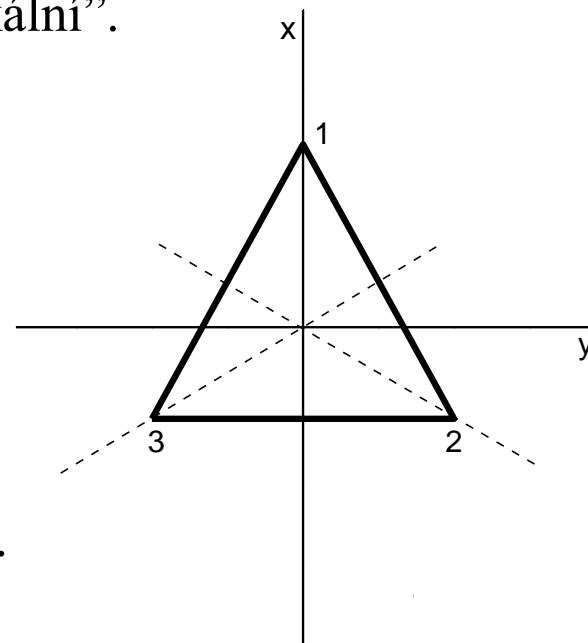
$\sigma_h$ : zrcadlení v horizontální rovině.

$\sigma_v$ : zrcadlení ve vertikální rovině.

$\sigma_d$ : zrcadlení ve vertikální diagonální rovině.

$I$ : inverze,  $x \leftrightarrow -x$ ,  $y \leftrightarrow -y$ ,  $z \leftrightarrow -z$ .

$S_n$ : nevlastní rotace o  $2\pi/n$ ; složena z rotace o  $2\pi/n$ , následované zrcadlením v horizontální rovině ( $\sigma_h C_n$ ).



třída:	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
operace symetrie:	identita	zrcadlení 1 zrcadlení 2 zrcadlení 3	rotace o $2\pi/3$ rotace o $4\pi/3$
			36

# Teorie reprezentací - konstrukce tabulky charakterů grupy $P(3)$ , izomorfní s $C_{3v}$

První řádek a sloupec jsou triviální:

třída reprezentace	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1		
$\Gamma_2$	2		

Druhý řádek musí být ortogonální k prvnímu, s patřičnou hodnotou sumy čtverců:

třída reprezentace	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
$\Gamma_2$	2		

Druhý a třetí sloupec musí být ortogonální k prvnímu:

třída reprezentace	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
$\Gamma_2$	2	0	-1

hotovo!

Shrnutí pro grupu  $C_{3v}$  (izomorfní s permutační grupou  $P(3)$ )

s příkladem molekuly amoniaku ( $\text{NH}_3$ ) (N je mimo rovinu  $\text{H}_3$ ):

6 operací symetrie, 6-ti rozměrný prostor ortogonálních vektorů tvořících charaktery

3 třídy sdružených prvků, tabulka (3x3) charakterů tří ireducibilních reprezentací

class representation	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
$\Gamma_1$	1	1	1
$\Gamma_1'$	1	-1	1
$\Gamma_2$	2	0	-1

