

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”)

$E=(123)$

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

$A=(132)$

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

$B=(321)$

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

$C=(213)$

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

$D=(312)$

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

$F=(231)$

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

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

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

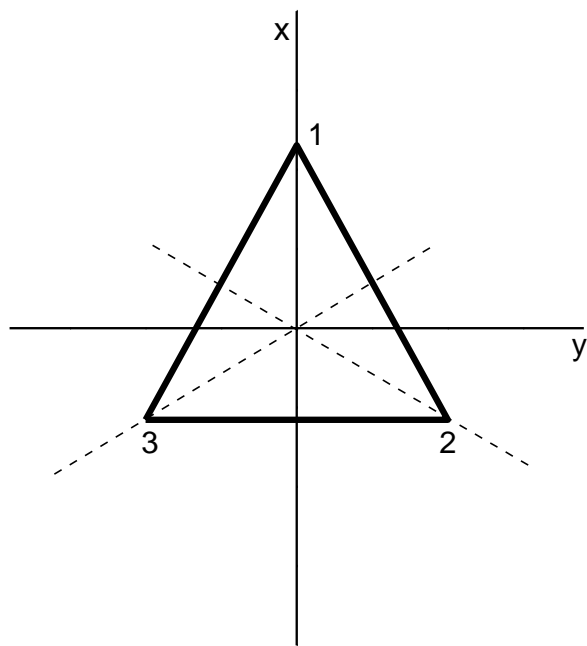
$P(3)$: matice (2x2) (mohou permutovat tři objekty?)

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

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

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

$P(3)$ 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 **sružený (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 sružením. 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 třídímenzionálních 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. Blokový 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
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
Γ_1'	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_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 Γ_R grupy $P(3)$ je:

	E	A	B	...
Γ_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, δ_{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

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

Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy $P(3)$:

	E	A	B	C	D	F
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
Γ_1'	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_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 Γ_1 a Γ_1' jsou nulové: stejný počet matic [1] a [-1], součet je [0].

2. Součet pro Γ_1 a Γ_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
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
Γ_1'	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_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 Γ_1 , a Γ_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
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
Γ_1'	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_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:

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

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

Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy $P(3)$:

	E	A	B	C	D	F
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
Γ_1'	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_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 $a=b=\Gamma_2$ jsou:

$$\sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^2 D_{rm}(A_j) D_{mu}(A_j) = \frac{n}{d_a} \sum_{m=1}^2 \delta_{rm} \delta_{mu} = \frac{n}{d_a} \delta_{ru},$$

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

Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Relace v (GOT) mohou být interpretovány následujícím způsobem. Maticové prvky unitární ireducibilní reprezentace mohou být uspořádána do množiny (sloupcových nebo řádkových) vektorů v v prostoru dimenze n (řád grupy):

$$v_{a,rs} = \sqrt{d_a / n} [D_{a,rs}(A_1), D_{a,rs}(A_2), \dots, D_{a,rs}(A_n)].$$

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 Γ_1 , Γ_1 , a Γ_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	$\chi(E)$	$\chi(A)$	$\chi(B)$	$\chi(C)$	$\chi(D)$	$\chi(F)$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_1'	1	-1	-1	-1	1	1
Γ_2	2	0	0	0	-1	-1

V úsporném zápisu vypisujeme pouze třídy:

class representation	$C_1=(E)$	$C_2=(A,B,C)$	$C_3=(D,F)$
Γ_1	1	1	1
Γ_1'	1	-1	1
Γ_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	$\chi(E)$	$\chi(A)$	$\chi(B)$	$\chi(C)$	$\chi(D)$	$\chi(F)$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_1'	1	-1	-1	-1	1	1
Γ_2	2	0	0	0	-1	-1

stejně jako ortogonalitu sloupců v tabulce obsahující třídy:

třída reprezentace	$C_1=(E)$	$C_2=(A,B,C)$	$C_3=(D,F)$
Γ_1	1	1	1
Γ_1'	1	-1	1
Γ_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”.

σ : zrcadlení v rovině, s třemi indexy.

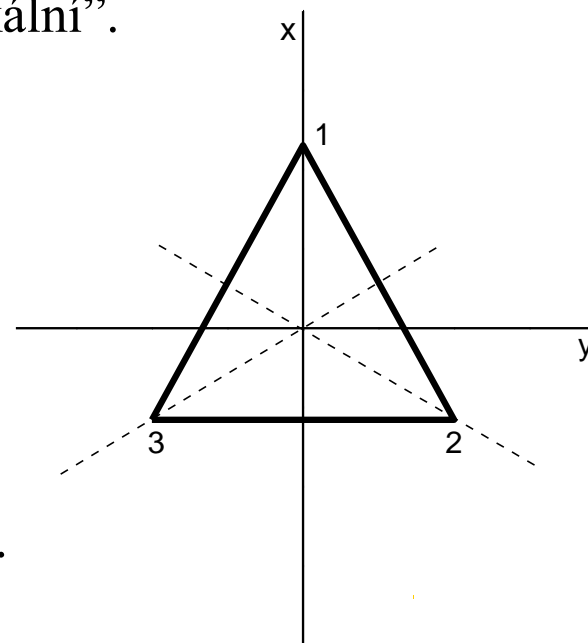
σ_h : zrcadlení v horizontální rovině.

σ_v : zrcadlení ve vertikální rovině.

σ_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 $4\pi/3$

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

První řádek a sloupec jsou triviální:

třída reprezentace	E	$3\sigma_v$	$2C_3$
Γ_1	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1		
Γ_2	2		

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

třída reprezentace	E	$3\sigma_v$	$2C_3$
Γ_1	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
Γ_2	2		

Druhý a třetí sloupec musí být ortogonální k prvnímu:

třída reprezentace	E	$3\sigma_v$	$2C_3$
Γ_1	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
Γ_2	2	0	-1

hotovo!

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

s příkladem molekuly amoniaku (NH_3) (N je mimo rovinu 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	$3\sigma_v$	$2C_3$
Γ_1	1	1	1
Γ_1'	1	-1	1
Γ_2	2	0	-1

