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 – grupy matic)
- Charaktery (výběr nejdůležitějších vlastností)
- Bodové grupy (symetrie molekul a krystalů)

 J. Humlíček, humlicek@physics.muni.cz

<u>Grupa</u>

Množina $\boldsymbol{G}$ prvků $A, B, \ldots$ s binární operací (AB, násobení)
s následujícími vlastnostmi:

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

$\underline{P(3)\text{: matice (3x3)}}$ ("řádek krát sloupec")

$E=(123)$

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

$A=(132)$

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

$B=(321)$

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

$C=(213)$

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

$D=(312)$

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

$F=(231)$

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

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

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

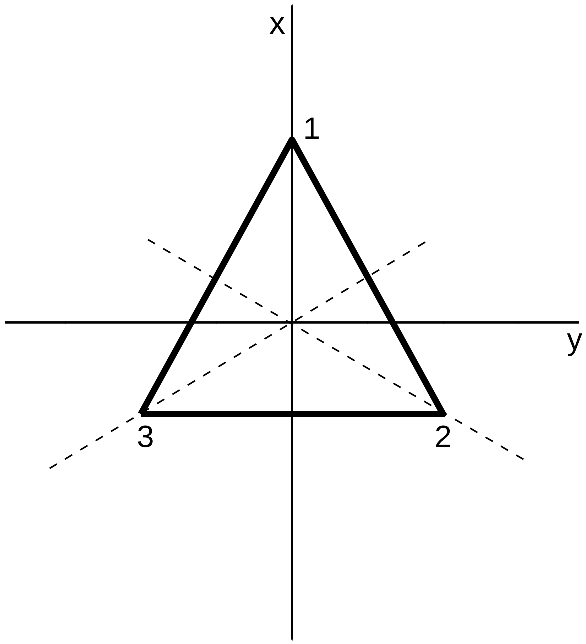
$\underline{P(3)\text{: matice (2x2) }}$(mohou permutovat tři objekty?)

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

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

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

$P(3)$ 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↔3, zrcadlení v (x,z),$(1,z)$

$$B = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$ 1↔3, zrcadlení v $(2,z)$

$$C = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$ 1↔2, zrcadlení v $(3,z)$

$$D = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$ 1,2,3→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→2,3,1,
rotace o $4\pi/3$ kolem z

Další terminologie a vlastnosti

1. Řád $\boldsymbol{G}$: počet jejích prvků; $P(3)$ je řádu 6.

2. Podgrupa $\boldsymbol{G}$: 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 $A \in \boldsymbol{G}$: 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 $A \in \boldsymbol{G}$ je Abelovská podgrupa $(E, A, A^2, \ldots, A^{n-1})$, 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. Nechť $\boldsymbol{S} \equiv (E, S_1, S_2, \ldots, S_g)$ je podgrupa $\boldsymbol{G}$ a $X \in \boldsymbol{G}$. Pravý koset $\boldsymbol{S}$ je množina $(EX, S_1X, S_2X, \ldots, S_gX)$, levý koset je $(XE, XS_1, XS_2, \ldots, XS_g)$. Koset nemusí být grupa. Koset bude podgrupou $\boldsymbol{S}$ jestliže $X \in \boldsymbol{S}$. Dva kosety dané grupy buď obsahují stejné prvky nebo nemají žádný prvek společný.

   Příklady s $P(3)$: Nechť $\boldsymbol{S} \equiv (E,A)$. Pravé kosety $\boldsymbol{S}$ 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 $B \in \boldsymbol{G}$ se označuje jako sdružený (konjugovaný) s $A \in \boldsymbol{G}$, je-li $B = XAX^{-1}$, kde X je libovolný prvek $\boldsymbol{G}$. 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 $\boldsymbol{G}$ sdružením. 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 $X \in \boldsymbol{G}$,

(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 $\boldsymbol{N}$ grupy $\boldsymbol{G}$ se značí jako samosdružená (nebo invariantní, nebo normální), je-li

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

   Samosdružená podgrupa musí obsahovat celé třídy. Pravé a levé kosety samosdružené podgrupy jsou stejné. Součiny prvků dvou pravých kosetů 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 $\boldsymbol{G}$ vychází ze samosdružené podgrupy $\boldsymbol{N}$ jako množina jejích kosetů, neboli, každý koset považujeme za prvek faktorové grupy.

$\boldsymbol{N}$ je někdy označována jako normální dělitel.

Všechna čtyři pravidla násobení jsou samozřejmě splněna:

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

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, $\boldsymbol{G}=(A,B,C,D,...)$ a $\boldsymbol{g}=(u,v,...)$, jsou homomorfní, existuje-li zobrazení (korespondence) $\boldsymbol{G}$ do $\boldsymbol{g}$, například,

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

takové, že

$AB \rightarrow uv$, $AC \rightarrow uv,...$

Je-li zobrazení jedna k jedné (řády $\boldsymbol{G}$ a $\boldsymbol{g}$ 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 premutační grupy $P(3)$ s grupou symetrie rovnostranného trojúhelníka je izomorfismus.

Teorie reprezentací

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

Ke každému $A \in \boldsymbol{G}$ přiřazujeme matici $D(A)$ tak, že $D(AB)=D(A)D(B)$,

s obvyklým násobením matic ("řádek krát sloupec").

Přikladem 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 třídimenzionálních matic:

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

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

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

Teorie reprezentací

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

(srovnat s předchozí transformací poloh vrcholů rovnostranného trojúhelníka)

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

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

<u>Teorie reprezentací</u>

Reprezentace jsou obecně tvořeny maticemi s komplexními prvky.

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

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

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

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

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 reducibiní 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]
$\Gamma_{1'}$	[1]	[-1]	[-1]	[-1]	[1]	[1]
Γ_2	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$

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,...,n) s nenulovými determinanty může být převedena 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:

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

Následujícím výpočtem zjistíme, že matice D_u jsou unitární:

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

$$= H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)UH_dU^{-1}D^+(A_j)UH_d^{-1/2}$$

$$= H_d^{-1/2}U^{-1}D(A_j)U[\sum_{k=1}^{n}U^{-1}D(A_k)UU^{-1}D^+(A_k)U]U^{-1}D^+(A_j)UH_d^{-1/2}$$

$$= H_d^{-1/2}[\sum_{k=1}^{n}U^{-1}D(A_j)D(A_k)UU^{-1}D^+(A_k)D^+(A_j)U]H_d^{-1/2} = I,$$

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,

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

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

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

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

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,...,n) a ($D_b(A_j)$, j=1,...,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: δ_{ab} =1 for a=b and δ_{ab} =0 for $a \neq b$.

Pro unitární reprezentace se tato relace zjednodušuje na

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

Teorie reprezentací - ortogonalita ireducibilních reprezentací

Ireducibilní reprezentace grupy $P(3)$:

	E	A	B	C	D	F
Γ_1	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]
$\Gamma_{1'}$	[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 $\Gamma_{1'}$ 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]
$\Gamma_{1'}$	[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 $\Gamma_{1'}$ 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	$[1]$	$[1]$	$[1]$	$[1]$	$[1]$	$[1]$
$\Gamma_{1'}$	$[1]$	$[-1]$	$[-1]$	$[-1]$	$[1]$	$[1]$
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*:

Γ_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]
$\Gamma_{1'}$	[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*:

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

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

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):

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

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, $\Gamma_{1'}$ 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,...,n) dané reprezentace jsou velmi užitečné při zacházení s grupou $\boldsymbol{G}$; 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 $D_a(A_j)$,

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

Soubor stop pro všechny prvky grupy,

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

označujeme jako charakter reprezentace (D_a). Protože

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

podobnostní transformace nemění charakter reprezentace:

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

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
$\Gamma_{1'}$	1	-1	-1	-1	1	1
Γ_2	2	0	0	0	-1	-1

V úsporném zápisu vypisujeme pouze třídy:

class / representation	$\boldsymbol{C}_1=(E)$	$\boldsymbol{C}_2=(A,B,C)$	$\boldsymbol{C}_3=(D,F)$
Γ_1	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
Γ_2	2	0	-1

Teorie reprezentací - charaktery

Charaktery ireducibilních reprezentací ($D_a(A_j)$, j=1,...,n) a ($D_b(A_j)$, j=1,...,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
$\Gamma_{1'}$	1	-1	-1	-1	1	1
Γ_2	2	0	0	0	-1	-1

stejně jako ortogonalitu sloupců v tabulce obsahující třídy:

třída / reprezentatace	$\boldsymbol{C}_1=(E)$	$\boldsymbol{C}_2=(A,B,C)$	$\boldsymbol{C}_3=(D,F)$
Γ_1	1	1	1
$\Gamma_{1'}$	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, $j=1,\ldots, n_r$, 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.

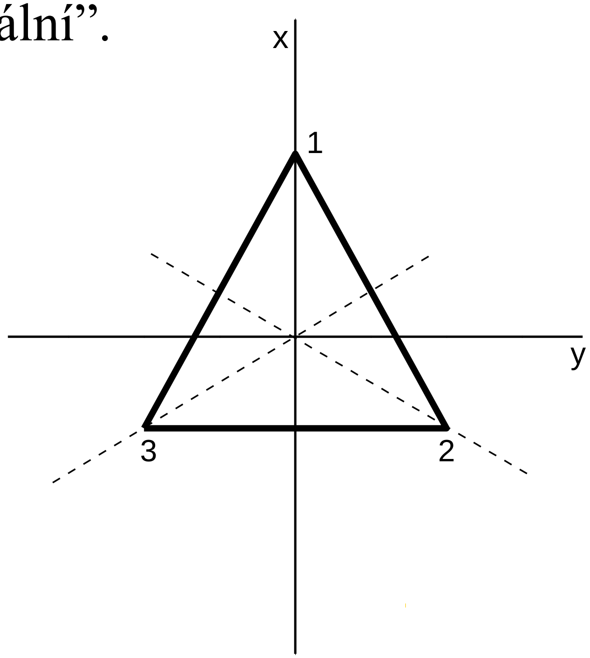
σ_h: zrcadlení v horizontální rovině.

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!

<u>Shrnutí pro grupu</u> 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
$\Gamma_{1'}$	1	-1	1
Γ_2	2	0	-1