Reprezentacje grup symetrii

Teoria reprezentacji

idea: ***operacjom symetrii przypisać operatory działające w przestrzeni funkcji i związać z nimi funkcje, które operatory te przeprowadzają "w siebie" (podobnie jak zb. punktów podczas operacji symetrii)***

rozważmy przekształcenie symetrii g_s

które transformuje układ współrzędnych xyz w nowy układ

$x' \, y' \, z'$

w szczególności punkt x o współrzędnych (x_1, x_2, x_3)
ma w nowym układzie współrzędne (x_1', x_2', x_3')

$$x_i' = \sum_j R_{ji}(g_s)x_j = (g_s^{-1}\mathbf{x})_i$$

w sensie

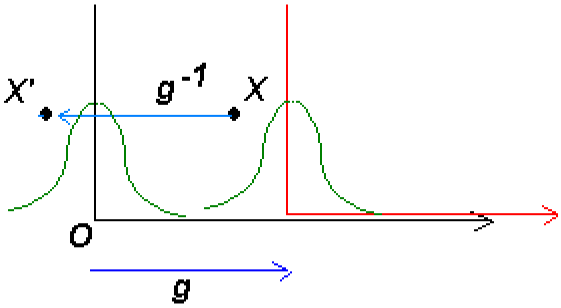
$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{21} & R_{31} \\ R_{12} & R_{22} & R_{32} \\ R_{13} & R_{23} & R_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix},$$

weźmy <u>dowolną</u> funkcję $\varphi = \varphi(x)$, x – oznacza 3 współrzędne
(φ ma pewną postać funkcyjną)

φ - jako funkcja x', jest inną funkcją x, tzn. $\varphi_s(x)$

tę nową funkcję φ_s można traktować jako otrzymaną z φ po działaniu na φ pewnym operatorem *D* (zależnym od g_s)

$$\varphi_s(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x'}) = \varphi(g_s^{-1}\mathbf{x}) = D(g_s)\varphi(\mathbf{x})$$



g = polega na translacji układu współrzędnych o a ;

funkcja np. $f(x)=\exp(-x^2)$ przy $x' = g^{-1} x = x- a$, przechodzi w $p(x)=\exp(-(x-a)^2)$

stosując kolejno wszystkie operacje *g* grupy *G*, do funkcji φ otrzymamy *h* funkcji φ_1 , φ_2 , φ_3 , ... , φ_h

z których *n* niech będzie liniowo niezależnych

tworzą one przestrzeń funkcyjną n-wymiarową z wybraną bazą

φ_j (x)

działanie *D(g)* na φ_i (x) daje

$$D(g)\varphi_i(\mathbf{x}) = \sum_j c_{ji}\varphi_j(\mathbf{x}) = \sum_j \mathrm{D}_{ji}(g)\varphi_j(\mathbf{x})$$

otrzymujemy macierzowe reprezentacje *D* , a tym samym macierzowe reprezentacje operacji symetrii g

postać macierzy D i ich wymiar, *n*, zależy od wyboru funkcji φ

*

D **może działać też na funkcje wektorowe x_1 , x_2 , x_3 ,**

(3 funkcje, przyjmujące wartości współrzędnych punktu x ,
F1(**x**) = x_1, F2(**x**) = x_2, F3(**x**) = x_3 **)**

$$D(g)\mathbf{x}_i = (g^{-1}\mathbf{x})_i$$

przy takim wyborze φ , D*(g) = R(g)*

łatwo pokazać, że D(g_p g_q) = D(g_p) D(g_q) ,
dla $g_s = g_p\, g_q$

dla operatorów:

$$D(g_p)D(g_q)\varphi(\mathbf{x}) = D(g_p)\varphi(\mathbf{x}') = D(g_p)\varphi(R(g_q)\mathbf{x}) =$$
$$\varphi(R(g_q)R(g_p)\mathbf{x}) = \varphi(g_q^{-1}g_p^{-1}\mathbf{x}) = \varphi((g_p g_q)^{-1}\mathbf{x}) = \varphi(g_s^{-1}\mathbf{x}) =$$
$$D(g_s)\varphi(\mathbf{x})$$

dla macierzy reprezentacji *D* ,

$$D(g_p)D(g_q)\varphi_i = D(g_p)\sum_j \mathrm{D}_{ji}\varphi_j = \sum_j \mathrm{D}_{ji}\sum_k \mathrm{D}_{kj}\varphi_k =$$
$$= \sum_k\sum_j \mathrm{D}_{kj}\mathrm{D}_{ji}\varphi_k = \sum_k \mathrm{D}_{ki}(g_s)\varphi_k = D(g_s)\varphi_i$$

- zgodnie z prawem mnożenia macierzy
i pamiętając, że $g_s = g_p\, g_q$

<u>def.</u>
Jeśli każdemu elementowi g z grupy G przyporządkowana jest macierz kwadratowa D (rzędu n) , z wyżej zdefiniowanym iloczynem, to zbiór macierzy D(g) tworzy n-wymiarową reprezentację grupy G. Oznaczamy ją D.

zbiór operatorów tworzy reprezentację operatorową

zbiór liniowo niezależnych funkcji tworzy *bazę reprezentacji*
(dalej przyjmujemy, że zawsze mówimy o bazie ortonormalnej)

elementy macierzy reprezentacji są:

$$\mathrm{D}_{ji}(g) = \int \varphi_j^* D(g)\varphi_i d\mathbf{x} = \langle \varphi_j D(g)\varphi_i \rangle$$

transformacja unitarna (ortogonalna dla φ rzeczywistych)

$$S^+ = (S^*)^T = S^{-1}$$

pozwala "przejść" z bazy d bazy...

przypomnijmy, że dla macierzy unitarnej zachodzi:
(A)

$$\sum_k S_{ki}^* S_{kj} = \delta_{ij}$$

(ortogonalność ze wzgl. na kolumny i wiersze)
gdyż

$$S^+S = SS^+ = I$$

<u>Tw.</u>
dla bazy ortonormalnej, macierze D są unitarne

dowód
(pamiętamy, że *g* zachowuje długości wektorów a zatem też element obj.)

$$\delta_{ij} = \int \varphi_i^*(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int \varphi_i^*(\mathbf{x}')\varphi_j(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' =$$

$$\int \varphi_i^*(g^{-1}\mathbf{x})\varphi_j(g^{-1}\mathbf{x})d\mathbf{x} = \sum_{kl} \mathrm{D}_{ki}^* \mathrm{D}_{lj} \int \varphi_k^*(\mathbf{x})\varphi_l(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

$$= \sum_{kl} \mathrm{D}_{ki}^* \mathrm{D}_{lj} \delta_{kl} = \sum_k \mathrm{D}_{ki}^* \mathrm{D}_{kj} = \delta_{ij}$$

bo to jest warunek (A).

(skorzystałem z faktu, że jakobian transformacji =1, bo objętość [długości zachowane] dxdydz nie ulega zmianie)

łatwo pokazać (co jest oczywiste), że przy przejściu z bazy do bazy (B)

$$S^{-1}\mathrm{D}S \quad = \mathrm{D}'$$

takie reprezentacje nazywają się równoważnymi

ślad macierzy oraz wyznacznik nie ulegają zmianie przy przekształceniach unitarnych (B)

jeśli wszystkie macierze reprezentacji są różne to reprezentacja jest *w i e r n a*

jeśli nie, to mamy homomorfizm grupy G i grupy macierzy F

macierze D nie tworzące wiernej reprezentacji G, tworzą wierną reprezentację grupy ilorazowej G, utworzonej z warstw grupy G

Reprezentacje przywiedlne (redukowalne)

jeśli transformacja unitarna (zmiana bazy) przeprowadzi wszystkie macierze reprezentacji do postaci

$$\mathrm{D}(g) = \begin{Vmatrix} \mathrm{D}_1(g) & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \mathrm{D}_2(g) & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \mathrm{D}_\mathrm{k}(g) \end{Vmatrix}$$

z ustalonymi wymiarami D_i
to reprezentacja D jest redukowalna, (przywiedlna)

jeśli nie można już dokonać dalszej redukcji za pomocą transformacji unitarnej,
to D_i - nazywają się reprezentacjami *nieprzywiedlnymi* (nieredukowalnymi)
redukowalność reprezentacji oznacza , że można tak przetransformować jej bazę, że „podbazy” transformują się tylko w siebie pod wpływem operacji grupy G

w ogólności, niektóre D_i mogą być wzajemnie równoważne

Własności reprezentacji nieprzywiedlnych

def.

charakter, χ , reprezentacji D dla elementu g grupy G :

$$\chi(g) = \sum_i \mathrm{D}_{ii}(g)$$

czyli ślad macierzy reprezentacji.

rozważmy dwie reprezentacje D_a i D_b grupy G
(w ogólności macierze kwadratowe o różnym wymiarze);

załóżmy, że istnieje macierz A, taka że

$$\mathrm{D_a(g)A = AD_b(g)}$$

dla wszystkich $g \in G$

Lemat Schura (I)

jeżeli nieprzywiedlne reprezentacje D_a i D_b są tożsamościowo sobie równe to A = cI, c – liczba (I – jednostkowa).

Inaczej:
jedyną macierzą przemienną ze wszystkimi macierzami reprezentacji nieprzywiedlnej jest macierz A będąca krotnością macierzy jednostkowej

Dowód:
z założenia $D_a = D_b = D$, (i zachodzi to dla wszystkich g)
weźmy D odpowiadającą dowolnemu g

(1)
DA = AD, a po hermitowskim sprzężeniu $A^+D^+ = D^+A^+$

mnożąc z prawej i lewej przez D, i korzystając z unitarności D mamy

(2)
$DA^+ = A^+D$,

z (1) i (2) wynika, że (1) musi być spełnione też dla hermitowskich kombinacji A i A^+

$$A' = \frac{1}{2}(A + A^+) \quad \text{i} \quad A'' = i/2\,(A - A^+)$$

ale macierz hermitowską można sprowadzić do postaci diagonalnej, za pomocą unitarnej transformacji S, $S^{-1}A'S = a$

gdzie a jest diagonalna,
zatem mnożąc z lewej przez S^{-1}, z prawej przez S
i wstawiając $I = S^{-1}S$ mamy:

$$DA' = A'D \Rightarrow S^{-1}DSS^{-1}A'S = S^{-1}A'SS^{-1}DS \Rightarrow$$

$$D'a = aD' \quad \text{gdzie} \quad D' = S^{-1}DS$$

albo inaczej $D'a - aD' = 0$ (3)

(3) na elementach macierzowych ma postać

$$D'_{kl}\,(a_{kk} - a_{ll}) = 0 \quad , \quad (k,l = 1,2,\ldots, h)$$

a to oznacza, że

albo

- wszystkie a_{ii} są jednakowe (koniec dowodu)

  albo

- część elementów a_{ii} (i =< r) nie jest równa pozostałym dla (i > r) , ale to implikuje, że $D'_{kl} = 0$, ($k \neq l$) a to oznacza blokową postać D – co jest sprzeczne z założeniem

□

jeżeli dla dwu różnych reprezentacji D_a i D_b macierz A jest $A \neq 0$ w (1), to przynajmniej jedna z nich musi być przywiedlna;

jeśli reprezentacje D_a i D_b są równoważne, tzn.:

$$D_a = S^{-1}D_bS$$

to A musi być krotnością unitarnej S, $A = c\,S$.

Lemat Schura (II)

dla dwu różnych reprezentacji nieprzywiedlnych D_a i D_b jedyną macierzą spełniającą
(x) $D_a A = A D_b$ dla wszystkich $g \in G$ i $a \neq b$, jest $A = 0$.

dowód:
niech D_a ma dim=p, a D_b ma dim=r,

z unitarności D, $D^+(g) = D^{-1}(g) = D(g^{-1})$ mamy (po hermitowskim sprzęgnięciu (x))
(4)

$$A^+ D_a(g^{-1}) = D_b(g^{-1}) A^+$$

mnożąc z lewej strony przez A dostajemy
(4b)

$$AA^+ D_a(g^{-1}) = AD_b(g^{-1}) A^+$$

i pamiętając, że założenie jest spełnione też dla g^{-1}, tzn.:

$$AD_b(g^{-1}) = D_a(g^{-1}) A$$

(gdyż $g^{-1} \in G$)
po pomnożeniu tym razem z prawej przez A^+ i porównując z (4b) mamy

$$AA^+ D_a(g^{-1}) = D_a(g^{-1}) AA^+$$

ale AA^+ jest macierzą kwadratową o wymiarze p, zatem z pierwszego lematu Schura, $AA^+ = c\, I$, zatem det $AA^+ = c^p$. Dla $c \neq 0$ => det $A \neq 0$;

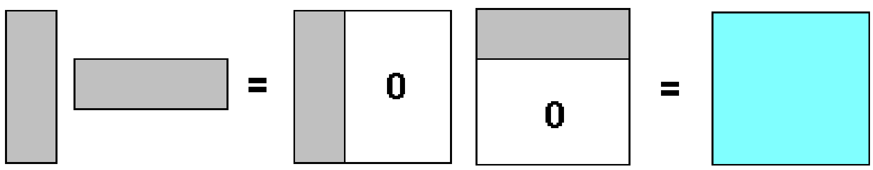
jeśli p = r, to A jest macierzą kwadratową => istnieje A^{-1}

a to, przy założeniu (x) oznacza, że D_a i D_b są równoważne, co przeczy założeniu; a zatem dla p=r c=0, tzn. $AA^+ = 0$,

$$\sum_{l} A_{kl}A^{+}_{lk} = \sum_{l} A_{kl}A^{*}_{kl} = \sum_{l} \left|A_{kl}\right|^{2} = 0$$

a to oznacza A = 0.

jeśli p < r, to A można uzupełnić do kwadratowej zerami do macierzy A' , ale wówczas det A' = 0, ale A'A'$^+$ = AA$^+$



to   det A'A'$^+$ = det AA$^+$ = det A' det A'$^+$ = 0

a to oznacza, że AA$^+$ = 0, bo stała c musi wtedy być = zeru
i tym samym A = 0, gdyż jak wyżej.

□

Z II-go lematu Schura wynika:

ważna relacja ortogonalności   (O1)

$$\sum_{g} D^{a}_{ij}(g) D^{b\,*}_{lk}(g) = 0$$

dla a≠b tzn. dla nierównoważnych reprezentacji nieprzywiedlnych, i dowolnych i,j,k,l

dowód:

utwórzmy macierz $\mathbf{A} = \sum_{g} D_{\mu}(g)\mathbf{B}D^{-1}_{\nu}(g)$

(tu indeksy reprezentacji są u dołu)

gdzie B jest dowolną macierzą;

sprawdźmy, że **A** spełnia (x)

$$\mathrm{D}_\mu(g')\mathbf{A} = \sum_g \mathrm{D}_\mu(g')\mathrm{D}_\mu(g)\mathbf{B}\mathrm{D}_\nu^{-1}(g) = \sum_g \mathrm{D}_\mu(g')\mathrm{D}_\mu(g)\mathbf{B}\mathrm{D}_\nu^{-1}(\mathrm{g})\mathrm{D}_\nu^{-1}(g')\mathrm{D}_\nu(g') =$$

$$\sum_{g''} \mathrm{D}_\mu(g'')\mathbf{B}\mathrm{D}_\nu^{-1}(g'')\mathrm{D}_\nu(g') = \mathbf{A}\mathrm{D}_\nu(g')$$

a zatem **A** = 0 , tzn. $\sum_g \sum_{k'l'} \left[\mathrm{D}_\mu(g)\right]_{ik'} \left[\mathbf{B}\right]_{k'l'} \left[\mathrm{D}_\nu^{-1}(g)\right]_{l'l} = 0$

(jako il-ty element A)

ale B – była wybrana dowolnie, to weźmy **B** tylko z jednym elementem (jk) różnym od zera, $B_{k'l'} = \delta_{k'j}\,\delta_{l'k}$ i w rezultacie

$$\sum_g \mathrm{D}_{\mathrm{ij}}^{\mu}(g)\mathrm{D}_{\mathrm{kl}}^{\nu}(g^{-1}) = 0$$

a to jest to samo co (O1)

natomiast dla a = b

$$\sum_g \mathrm{D}_{\mathrm{ij}}^{\mathrm{a}}(g)\mathrm{D}_{\mathrm{kl}}^{\mathrm{a}}(g^{-1}) = c_{jk}\delta_{il}$$

żeby obliczyć c_{jk} kładziemy $l = i$ i sumujemy po i,

suma δ_{ii} (po prawej stronie) da n_a - wymiar reprezentacji nieprzywiedlnej D_a ,
a z lewej:
(O2)

$$\sum_g \sum_{\mathrm{i}} \mathrm{D}_{\mathrm{ij}}^{\mathrm{a}}(g)\mathrm{D}_{\mathrm{ki}}^{\mathrm{a}}(g^{-1}) = \sum_g \mathrm{D}_{\mathrm{kj}}(g^{-1}g) = h\delta_{kj}$$

zatem

$$c_{jk} = \frac{h}{n_a}\delta_{jk}$$

(O1) i (O2) można razem zapisać jako:
(O3)

$$\sum_g \mathrm{D}^{\mathrm{a}}_{\mathrm{ij}}(g)\mathrm{D}^{\mathrm{b}}_{\mathrm{lk}}{}^*(g) = \frac{h}{n_a}\delta_{ab}\delta_{il}\delta_{jk}$$

to *„przypomina”* relację ortogonalności dla wektorów jednostkowych np. w R^3 :

$$\left(\mathbf{e^a e^b}\right) = \sum_i e_i^a e_i^b = \delta_{ab}$$

gdzie:
a,b = 1,2,3 – numeruje ortogonalne wektory,
i = 1,2,3 – numeruje współrzędne;

przy czym w (O3) „wektory” określone są przez reprezentacje, kolumny i wiersze...
tzn. każdy „wektor” zdefiniowany jest przez trzy indeksy a,i,j

wielkość $\left(\frac{n_a}{h}\right)^{1/2} \mathrm{D}^{a}_{\mathrm{ij}}(g)$ **można uważać za g-tą składową**

(współrzędną) pewnego wektora (określonego przez indeksy a,i,j);
liczba takich wektorów – przy ustalonym $a=b$ wynosi n_a^2 - liczba elementów macierzy reprezentacji a ;
a wymiar przestrzeni = h - rząd grupy , czyli liczba składowych;

ale

liczba wzajemnie ortogonalnych wektorów jest nie większa

tzn. $\leq$ od h -wymiaru przestrzeni
(dla zbioru zupełnego jest równa h)

zatem (B)

$$\boxed{\sum_{a=1}^{N} n_a^2 = h}$$

... **jedna z najważniejszych relacji** **... (bez dowodu, że zachodzi =)**

N – liczba nierównoważnych reprezentacji nieprzywiedlnych

(B) - to twierdzenie Burnside’a