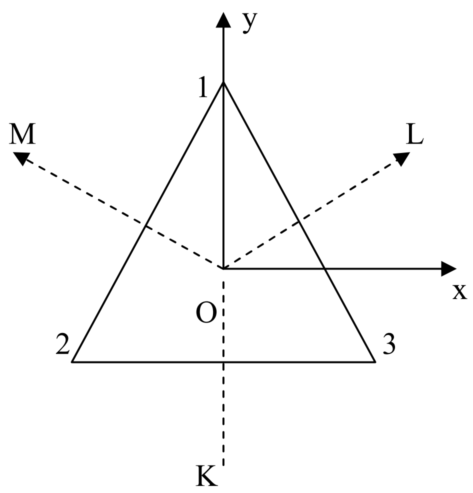
Ι. ΟΡΙΣΜΟΣ ΟΜΑΔΑΣ, ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΚΑΙ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Ι.1 Ομάδες μετασχηματισμών συμμετρίας

Όπως συνηθίζεται θα διαλέξουμε μια ομάδα συμμετρίας και θα εξετάσουμε όλες τις ιδιότητες στην συγκεκριμμένη ομάδα σε ολόκληρες τις σημειώσεις. Ο αναγνώστης θα ήταν χρήσιμο να επιλέξει μια άλλη συγγενή ομάδα και να εφαρμόσει μόνος του όλες τις πράξεις και ιδιότητες σε εκείνη την ομάδα, ώστε να κατανοήσει όλες τις νέες έννοιες πληρέστερα. Ως ομάδα εργασίας θα πάρουμε την D_3 (ή την ισόμορφη C_{3v}) που περιγράφει συμμετρίες ενός ισόπλευρου τριγώνου.

Έστω ένα ισόπλευρο τρίγωνο. Ας εξετάσουμε κάποιες πράξεις μετασχηματισμού του που το αφήνουν αμετάβλητο. Τέτοιες είναι



A:περιστροφή κατά 120^o ως προς τον άξονα z c_3

B:περιστροφή κατά 240^o ως προς τον άξονα z c_3^2

ή περιστροφή κατά -120^o ως προς τον z

K:περιστροφή κατά 180^o ως προς την ΟΚ (c_2)

L:περιστροφή κατά 180^o ως προς την OL (c_2')

M:περιστροφή κατά 180^o ως προς την OM (c_2'')

E: περιστροφή κατά 0^o ή 360^o ως προς τον z

Στην ισόμορφη ομάδα C_{3v} αντί των (c_2), (c_2'), (c_2''), έχουμε τις ανακλάσεις $(\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v'')$ ως προς τα επίπεδα που διέρχονται από τις OK, OL και OM και είναι κάθετα στο επίπεδο xy. **Προσοχή**: ενώ οι άξονες x και y συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο στις δύο ομάδες, ο z αλλάζει πρόσημο στις περιστροφές (c_2), (c_2'), (c_2''), (ομάδα D_3) ενώ παραμένει αναλλοίωτος στις ανακλάσεις $\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''$ (ομάδα C_{3v}).

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι αν εφαρμόσουμε δύο πράξεις συμμετρίας διαδοχικά, τότε προκύπτει μία από τις άλλες πράξεις συμμετρίας. Π.χ. αν πρώτα εφαρμόσουμε την Α και μετά την Κ θα προκύψει,

A: $1 \to 2$, K: $2 \to 3$,
A: $2 \to 3$, K: $3 \to 2$,
A: $3 \to 1$, K: $1 \to 1$.

Επομένως, από τον συνδυασμό των δύο πράξεων θα έχουμε: $1 \to 3$, $2 \to 2$, $3 \to 1$, δηλαδή την πράξη συμμετρίας L. Θα γράφουμε κατά σύμβαση την αλληλουχία, πρώτα εφαρμόζουμε την Α και μετά την Κ ως ΚΑ και επομένως θα ισχύει ότι L=KA.

Γενικά βρίσκουμε ότι ο οποιοσδήποτε συνδυασμός δύο στοιχείων από τις παραπάνω 6 πράξεις συμμετρίας, παράγει κάποιο άλλο στοιχείο. Επομένως από τους συνδυασμούς των στοιχείων παραμένουμε μέσα στο σύνολο των 6 αρχικών στοιχείων, που αποτελεί την ουσία της ομάδας.

Παρατηρούμε ότι αν αντιστρέψουμε την φορά εφαρμογής των δύο πράξεων και πρώτα κάνουμε την K και μετά την A (δηλαδή AK) θα έχουμε ότι: $1 \to 2$, $2 \to 1$, $3 \to 3$, δηλαδή την M. Επομένως ο συνδυασμός των δύο πράξεων συμμετρίας δεν αντιμετατίθεται πάντα (KA≠AK).
Ακόμη παρατηρούμε ότι AE=EA=A, BE=EB=B, KE=EK=K, LE=EL=L, ME=EM=M, δηλαδή ο συνδυασμός όλων των στοιχείων με το ταυτοτικό στοιχείο το αφήνει αμετάβλητο (από όπου πηγάζει το όνομα ταυτοτικό στοιχείο). Αυτό είναι μια ιδιότητα της κάθε ομάδας.
Παρατηρούμε επίσης ότι AB=BA=E, $K^2=L^2=M^2=E$. Δηλαδή για κάθε στοιχείο υπάρχει ένα άλλο, που ο συνδυασμός τους δίνει το ταυτοτικό στοιχείο, που αποτελεί άλλη μια ιδιότητα της κάθε ομάδας.

***Ορισμός ομάδας**: Ομάδα είναι ένα σύνολο στοιχείων A, B, C, D, … για τα οποία*

A) *Ορίζεται μία πράξη συνδυασμού τους ανά δύο*
B) *Ο κάθε συνδυασμός δύο στοιχείων δημιουργεί κάποιο στοιχείο της ομάδας*
C) *Υπάρχει ένα στοιχείο (ας το γράψουμε E) τέτοιο ώστε για κάθε στοιχείο P να ισχύει ότι EP=PE=P (ύπαρξη μοναδιαίου στοιχείου)*
D) *Για κάθε στοιχείο της ομάδας P υπάρχει ένα αντίστροφο στοιχείο P^{-1} που ανήκει στην ομάδα, έτσι ώστε $PP^{-1}=P^{-1}P=E$*
E) *Ο τριπλός συνδυασμός στοιχείων P(QR)=(PQ)R=PQR ορίζεται μονοσήμαντα (προσεταιριστική ιδιότητα)*

Το αντίστροφο συνδυασμού δύο στοιχείων A, B δίνεται από $(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$, ούτως ώστε ο συνδυασμός των (AB) και $(AB)^{-1}$ να δίνει το ταυτοτικό στοιχείο.

Η ομάδα καθορίζεται πλήρως από τον συνδυαστικό πίνακα των στοιχείων της.
Για την ομάδα D_3 ο συνδυαστικός πίνακας προκύπτει ότι είναι

D_3	e	c_3	c_3^2	c_2	c_2'	c_2''
e	e	c_3	c_3^2	c_2	c_2'	c_2''
c_3	c_3	c_3^2	e	c_2''	c_2	c_2'
c_3^2	c_3^2	e	c_3	c_2'	c_2''	c_2
c_2	c_2	c_2'	c_2''	e	c_3	c_3^2
c_2'	c_2'	c_2''	c_2	c_3^2	e	c_3
c_2''	c_2''	c_2	c_2'	c_3	c_3^2	e

Ο αντίστοιχος πίνακας ισχύει για την ισόμορφη ομάδα C_{3v}.

Παρατηρούμε ότι τα στοιχεία της ομάδας εμφανίζονται μία μόνο φορά σε κάθε στήλη ή γραμμή. Επομένως όλα τα στοιχεία μιας γραμμής ή στήλης είναι διαφορετικά. Πραγματικά αν AB=AC τότε θα πρέπει $A^{-1}(AB)=A^{-1}(AC)$ οπότε B=C, άτοπο.

Το στοιχείο ταυτότητας μιας ομάδας είναι μοναδικό. Πραγματικά, αν υπήρχαν δύο τέτοια στοιχεία E, E΄, τότε θα ίσχυε ότι EE΄=E΄ και EE΄=E, οπότε E=E΄.

Το αντίστροφο στοιχείο κάθε ομάδας είναι μοναδικό. Πράγματι αν A και B ήταν τα αντίστροφα στοιχεία ενός άλλου στοιχείου P θα ίσχυε ότι AP=PA=BP=PB=E. Οπότε θα ίσχυε ότι A=EA=(BP)A=B(PA)=BE=B.

Ο αριθμός των στοιχείων μιας ομάδας καλείται τάξη (order) της ομάδας. Για την ομάδα D_3 με στοιχεία τα $\{e, c_3, c_3^2, c_2, c_2', c_2''\}$, η τάξη είναι 6.

Αν όλα τα στοιχεία μιας ομάδας αντιμετατίθενται μεταξύ τους, αυτή ονομάζεται αβελιανή.

Κάθε υποσύνολο μιας ομάδας που αποτελεί ομάδα από μόνη της ονομάζεται υποομάδα της αρχικής. Στην περίπτωση της ομάδας D_3 από τον συνδυαστικό πίνακα παρατηρούμε ότι υποομάδες είναι οι $\{e, c_3, c_3^2\}, \{e, c_2\}, \{e, c_2'\}, \{e, c_2''\}$.

Παρατηρούμε ότι αν ξεκινήσουμε με τα στοιχεία c_3 και c_2 μπορούμε να δημιουργήσουμε όλα τα στοιχεία της ομάδας. Τα στοιχεία αυτά ονομάζονται γεννήτορες. Άλλοι γεννήτορες της ομάδας D_3 είναι τα στοιχεία (c_3, c_2'), (c_3, c_2''), κλπ. Κάθε ομάδα με πεπερασμένο αριθμό στοιχείων έχει έναν ελάχιστο αριθμό γεννητόρων, που ονομάζονται βάση της ομάδας (basis). Ο αριθμός των στοιχείων της βάσης ονομάζεται κατάταξη (rank) της ομάδας. Π.χ. στην ομάδα D_3 οι γεννήτορες θα είναι δύο στοιχεία p, q όπου $p^3=q^2=(qp)^2=e$. Η ομάδα θα διαθέτει τα στοιχεία $\{e, p, p^2, q, qp, qp^2\}$. Επειδή ισχύει ότι $p^3=q^2=e$ και λέμε ότι η τάξη του στοιχείου p είναι 3, ενώ του q είναι 2.

Μια ομάδα G είναι κυκλική αν υπάρχει στοιχείο p ώστε $p^n \in G$ για κάθε n. Π.χ. η υποομάδα $\{e, c_3, c_3^2\}$ είναι μια κυκλική ομάδα.

Αν σε μια κυκλική ομάδα υπάρχει κάποιος φυσικός αριθμός n ώστε $p^n=e$, τότε η ομάδα είναι πεπερασμένη. Αν n είναι ο μικρότερος φυσικός αριθμός που ισχύει αυτό, το n είναι η τάξη της κυκλικής ομάδας.

Οι κυκλικές ομάδες είναι αβελιανές (λόγω αντιμεταθετικής ιδιότητας).

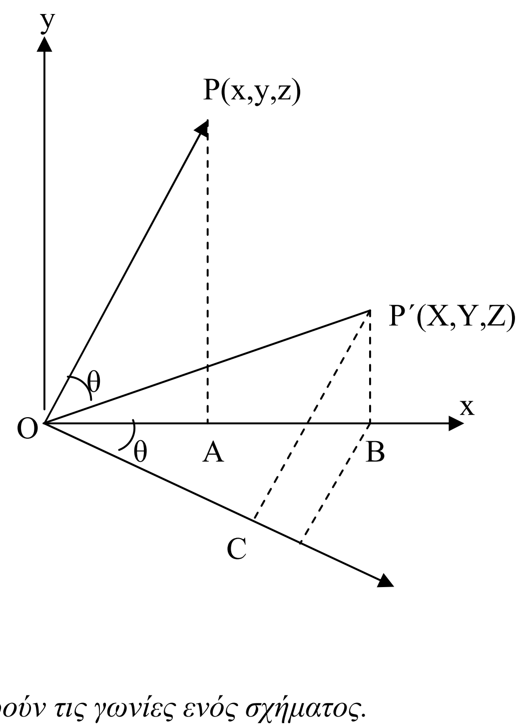
Ι.2 Πράξεις συμμετρίας εκφρασμένες αναλυτικά

Έστω σημείο P(x,y,z). Αν το περιστρέψουμε κατά την φορά των δεικτών του ρολογιού κατά γωνία θ ως προς ρον άξονα z, θα οδηγηθεί στο σημείο $P'(X,Y,Z)$. Προφανώς θα ισχύει ότι

$$\overline{OA} = \overline{OC} = \overline{OB}\cos\theta - \overline{BP'}\sin\theta$$
$$\overline{AP} = \overline{CP'} = \overline{OB}\sin\theta + \overline{BP'}\cos\theta$$

δηλαδή

$$\boxed{\begin{array}{lll} x = X\cos\theta - Y\sin\theta & \text{και} & X = x\cos\theta + y\sin\theta \\ y = X\sin\theta + Y\cos\theta & \text{και} & Y = -x\sin\theta + y\cos\theta \\ z = Z & \text{και} & Z = z \end{array}}$$



Αν είχαμε περιστρέψει τους άξονες κατά γωνία –θ θα είχαμε τις νέες συντεταγμένες (X,Y,Z) του σημείου P΄ να εκφράζονται μέσω των παραπάνω σχέσεων με τις (x,y,z). Δηλαδή είτε περιστρέψουμε τους άξονες κατά γωνία –θ είτε το σώμα κατά θ, έχουμε το ίδιο αποτέλεσμα.

Θα πρέπει να σημειώσουμε ότι οι περιστροφές διατηρούν τις γωνίες ενός σχήματος.

Για τις εφαρμογές στη Φυσική είναι συνήθως πιο εύκολο να περιστρέφουμε τους άξονες παρά τα σώματα. Έτσι αντί να λέμε ότι ένας κύλινδρος παραμένει αμετάβλητος αν τον περιστρέψουμε κατά μία τυχαία γωνία ως προς τον άξονά του *z*, μπορούμε να πούμε ότι, όπως και να ορίσουμε τους άξονες *x,y*, οι ιδιότητες του κυλίνδρου που εκφράζονται συναρτήσει των x,y παραμένουν αματάβλητες.

Όταν εφαρμόζουμε μια περιστροφή $R(\theta, z)$ κατά γωνία θ ως προς τον άξονα *z*, η επίδραση πάνω σε μια συνάρτηση *f(x,y,z)* θα προκύπτει από τις παραπάνω σχέσεις. Το ίδιο θα ισχύει και για τις διαφορικές εξισώσεις και ανάλογα για Χαμιλτονιανές. Π.χ. ας εφαρμόσουμε μια περιστροφή $R(\theta, z)$ στην εξίσωση του Schrödinger $H\psi = E\psi$, όπου η χαμιλτονιανή $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{n} k_e \frac{ne^2}{r_i} + \sum_{i=1}^{n}\sum_{<j}^{n}\frac{k_e e^2}{r_{ij}}$ εκφράζει ένα άτομο με n ηλεκτρόνια, με τον 1° όρο να εκφράζει την κινητική ενέργεια και τους 2° και 3° την ηλεκτροστατική ενέργεια ηλεκτρονίου-πυρήνα και ανάμεσα στα ηλεκτρόνια.

Εφαρμόζοντας την περιστροφή προκύπτει ότι

$$r_i^2 = x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 = (X_i \cos\theta - Y_i \sin\theta)^2 + (X_i \sin\theta + Y_i \cos\theta)^2 + Z_i^2 = X_i^2 + Y_i^2 + Z_i^2$$

Παρόμοια προκύπτει ότι

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 = (X_i - X_j)^2 + (Y_i - Y_j)^2 + (Z_i - Z_j)^2$$

Επίσης ότι

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} = \frac{\partial^2}{\partial X_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_i^2}$$

Δηλαδή $H(x_{i,}y_i, z_i) = H(X_i, Y_i, Z_i)$, οπότε η $R(\theta, z)$ αφήνει την Χαμιλτονιανή αμετάβλητη. Επειδή γενικά η μορφή της κυματοσυνάρτησης μπορεί να μεταβληθεί από την περιστροφή έπεται ότι

$$H\psi_1 = E\psi_1 \quad \Rightarrow \quad H(X_i, Y_i, Z_i)\psi_2(X_i, Y_i, Z_i) = E\psi_2(X_i, Y_i, Z_i)$$

όπου γενικά $\psi_2 \neq \psi_1$ [π.χ. μια *2p* κυματοσυνάρτηση *xf(r)* θα γίνει $(X\cos\theta - Y\sin\theta)f(r)$]. Επομένως οι ψ_1, ψ_2 θα έχουν την ίδια ιδιοσυχνότητα, δηλαδή θα συσχετίζονται διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής από τις συμμετρίες που την αφήνουν αμετάβλητη. Άλλες συνηθισμένες συμμετρίες είναι η αντιστροφή

$$x_i \to -X_i,\ y_i \to -Y_i,\ z_i \to -Z_i$$

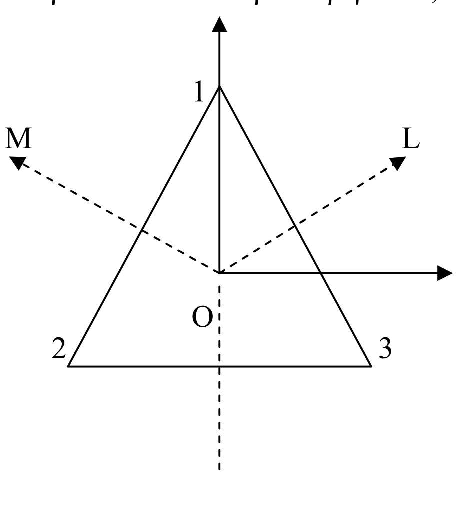
ή ανάκλαση ως προς επίπεδο

$$x_i \to -X_i, y_i \to Y_i, z_i \to Z_i$$

Αν πάρουμε ως αρχή συντεταγμένων το κέντρο του ισόπλευρου τριγώνου, οι κορυφές θα είναι (0,1), $\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, $\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

Η περιστροφή από το 1 στο 2 (*c₃*) θα αντιστοιχεί σε μια περιστροφή θ=-120° και των αξόνων κατά 120°. Επομένως

$$x_2 = -\frac{1}{2}x_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_1,\ y_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}y_1 \quad \Rightarrow$$



$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$. Δηλαδή έχουμε

μια αντιστοίχηση της επίδρασης της περιστροφής c_3 με έναν πίνακα $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Αντίστοιχα μπορούμε να αντιστοιχίσουμε τις υπόλοιπες πράξεις συμμετρίας της ομάδας με τους πίνακες

$$c_3^2 \to \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad c_2 \to \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad c_2' \to \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad c_2'' \to \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{και}$$

$$e \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Αν εφαρμόσουμε ως πράξη συνδυασμού το γινόμενο των πινάκων, θα βρούμε τον ίδιο συνδυαστικό πίνακα με την ομάδα D_3. Θα δούμε ότι οι 6 αυτοί πίνακες αποτελούν μια άλλη ισόμορφη ομάδα που θα αποτελεί και μια αναπαράσταση της ομάδας, όπως θα δούμε παρακάτω.
Είναι εύκολο να δούμε ότι οι παραπάνω μεταχηματισμοί αφήνουν την Χαμιλτονιανή τριών ιόντων στις κορυφές του ισόπλευρου τριγώνου αμετάβλητη.

I.3 Παραδείγματα ομάδων

- Το σύνολο των ακέραιων αριθμών (Z) με πράξη συνδυασμού την πρόσθεση και ταυτοτικό στοιχείο e=0.
- Το σύνολο των ρητών αριθμών (Q) με πράξη συνδυασμού την πρόσθεση και e=0.
- Το σύνολο των πραγματικών αριθμών (R) ή των μιγαδικών αριθμών (C) πράξη συνδυασμού την πρόσθεση και e=0.

Σ' όλες αυτές τις περιπτώσεις το αντίστροφο στοιχείο του X είναι το αντίθετο -X.
- Αν πάρουμε ως πράξη συνδυασμού τον πολλαπλασιασμό μπορούμε να φτιάξουμε τις ομάδες : το σύνολο των μη-μηδενικών ρητών, ή μη-μηδενικών πραγματικών ή των μη-μηδενικών μιγαδικών αριθμών. Τότε το 1 είναι το ταυτοτικό στοιχείο και 1/X το αντίστροφο του στοιχείου X.
- Ομάδα είναι το σύνολο των αριθμών module n. Τα στοιχεία είναι οι αριθμοί 0, 1, 2,..., n-1. e=0 και για κάθε στοιχείο X το αντίστροφο είναι το n-X.
- Διάφορες ομάδες προκύπτουν από κανονικά γεωμετρικά σχήματα και θα εξεταστούν παρακάτω αναλυτικά.
- Οι περιστροφές γύρω από κάποιο σταθερό άξονα αποτελούν μιά (συνεχή) ομάδα με άπειρα στοιχεία, e=(περιστροφή κατά 0^o) και αντίστροφο στοιχείο περιστροφής κατά γωνία θ η περιστροφή κατά –θ γωνία.
- Είναι προφανές ότι η μόνη ομάδα με 1 στοιχείο αποτελείται απο το e μόνο.

- Μια ομάδα με 2 στοιχεία (τάξης 2) θα είναι πάντα της μορφής $\{e,a\}$, όπου a^2=e. Δηλαδή μια αβελιανή ομάδα. Παραδείγματα είναι η ανάκλαση ως προς επίπεδο, η αντιστροφή ως προς σημείο ή η αντιμετάθεση δύο ίδιων σωματιδίων.
- Μια ομάδα τάξης 3 θα έχει την μορφή $\{e,a,b\}$. Αν a^2=e, τότε τα $\{e,a\}$ θα αποτελούσαν μια υποομάδα από μόνα τους. Όμως θα αποδειχτεί ότι η τάξη μιας υποομάδας θα πρέπει να διαιρεί την τάξη της ομάδας. Αφού αυτό δεν ισχύει, θα πρέπει a^2=b, οπότε η μόνη δυνατή ομάδα είναι μια κυκλική αβελιανή της μορφής $\{e,a,a^2\}$.
- Ομάδα τάξης 4. Υπάρχουν δύο δυνατότητες: μια κυκλική ομάδα $\{e,a,a^2,a^3\}$ ή μια άλλη με μορφή $\{e,a,b,c\}$, όπου ab=c και ac=e.
Πραγματικά αν a^2=b, τότε ac δεν μπορεί να ισούται με a,b ή c, επομένως ac=e. Οπότε θα πρέπει ab=c. Αυτό συνεπάγεται ότι a^3=c και a^4=e, δηλαδή η κυκλική ομάδα.
Αν a^2=e, τότε ab δεν μπορεί να ισούται με κάποιο από τα b,a,e, επομένως ac=b. Τότε όμως αν b^2=a ή c, θα είχαμε πάλι την κυκλική ομάδα. Άρα b^2=e και c^2=e. Θα πρέπει ba=c (αφού δεν μπορεί να ισούται με a,e,b) και ca=b, δηλαδή θα έχουμε μια αβελιανή ομάδα με συνδυαστικό πίνακα

	e	*a*	*b*	*c*
e	*e*	*a*	*b*	*c*
a	*a*	*e*	*c*	*b*
b	*b*	*c*	*e*	*a*
c	*c*	*b*	*a*	*e*

Ι.4 Η ομάδα των αντιμεταθέσεων

Η ομάδα των αντιμεταθέσεων p_{n} ορίζεται μέσω μιας αντιμετάθεσης n αριθμών 1, 2, 3, …, n, $p=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & n\\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n\end{pmatrix}$. Με τον συμβολισμό αυτόν ορίζουμε ότι $1\to p_1$, $2\to p_2$, $3\to p_3$ ..., $n\to p_n$. Η σειρά των αριθμών 1, 2, 3, ...n είναι άνευ σημασίας. Π.χ. με $p=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 1 & 4 & 2\end{pmatrix}$ εννοούμε ότι το 1 αντικαθίσταται από το 3, το 2 από το 1, το 3 από το 4 και το 4 από 2.

Το γινόμενο δύο αντιμεταθέσεων ορίζεται ως

$$qp=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & n\\ q_1 & q_2 & q_3 & \cdots & q_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & n\\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_n\\ s_1 & s_2 & s_3 & \dots & s_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & n\\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & n\\ s_1 & s_2 & s_3 & \dots & s_n\end{pmatrix}$$

π.χ.

$$qp=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 3 & 4 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 1 & 4 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 4 & 2 & 1 & 3\end{pmatrix} \text{ και}$$

$$p^{-1}=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&1&4&2\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&4&1&3\end{pmatrix}.$$

Μια απλουστευμένη μορφή γραφής είναι να θέτουμε στα δεξιά του αριθμού που αντικαθιστά τον αμέσως προηγούμενο. Έτσι μπορούμε να γράψουμε ότι
p=(1342) και qp=(1234)(1342)=(143)(2), ενώ p^{-1}=(1243).

Στην ομάδα με n αριθμούς υπάρχουν n! αντιμεταθέσεις, που ορίζουν την τάξη της ομάδας. Π.χ. για n=3 θα έχουμε 3!=6 στοιχεία, τα εξής:

$$e=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}=(1)(2)(3),\ a=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}=(12)(3),\ b=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=(1)(23),$$

$$c=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}=(13)(2),\ d=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}=(132),\ f=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=(123),$$

που εκφράζουν τις αλλαγές των κορυφών ενός τριγώνου. Μπορούμε να δείξουμε ότι τα στοιχεία της ομάδας αντιστοιχούν σε εκείνα της ομάδας D_3 ή της C_{3v}.

I.5 Γενικά θεωρήματα για την θεωρία ομάδων

Σε πολλές εφαρμογές είναι χρήσιμο να μπορούμε να κατηγοροποιήσουμε τα στοιχεία μιας ομάδας σε κλάσεις. Αυτό γίνεται μέσω μιας σχέσης ισοδυναμίας. Π.χ. αν χωρίσουμε τα στοιχεία με βάση το μήκος τους, θα λέγαμε ότι δύο στοιχεία a, b είναι ισοδύναμα (a~b) αν το a είχε το ίδιο μήκος με το b.

Γενικά, για να είναι μία σχέση ανάμεσα σε δύο στοιχεία σχέση ισοδυναμίας, θα πρέπει να ισχύουν τα εξής:

(1) Να είναι η σχέση ανακλαστική a~a (κάθε στοιχείο είναι ισοδύναμο με τον εαυτό του).
(2) Να είναι η σχέση συμμετρική. Αν a~b, τότε και b ~a.
(3) Να είναι μεταβατική, a~b και b~c, τότε και a~c.

Με βάση μια σχέση ισοδυναμίας, μπορούμε να χωρίσουμε όλα τα στοιχεία μιας ομάδας σε κλάσεις, όπου τοποθετούμε όλα τα ισοδύναμα στοιχεία.
Οποιοδήποτε στοιχείο της κλάσης μπορεί να επιλεγεί για τον χαρακτηρισμό της.
Εξ αιτίας της ιδιότητας (3), δεν είναι δυνατόν να υπάρχουν στοιχεία σε πάνω από μία κλάση. Δηλαδή οι κλάσεις δεν έχουν κοινά στοιχεία. Επομένως ο χωρισμός γίνεται σε κλάσεις ισοδυναμίας χωρίς κοινά μεταξύ τους στοιχεία.
Είναι προφανές ότι ο ισομορφισμός των ομάδων είναι μια σχέση ισοδυναμίας. Δύο ομάδες είναι ισομορφικές, αν τα στοιχεία τους και οι συνδυασμοί των στοιχείων απεικονίζονται ένα προς ένα από την μία ομάδα στην άλλη. Επομένως έχουν τον ίδιο συνδυαστικό πίνακα. Έτσι για δύο ισόμορφες ομάδες G και G΄ θα ισχύει ότι,

(i) G≅G΄ (ισόμορφο στον εαυτό του),
(ii) Αν G≅G΄ τότε και G΄≅G.
(iii) Αν G≅G΄ και G΄≅G΄΄ τότε και G≅G΄΄.

Αν πάρουμε μια ομάδα G με υποομάδα την U. Κατασκευάζουμε τα σύνολα aU, όπου a∈G και εδώ υπονοούμε τον συνδυασμό του a με όλα τα στοιχεία της υποομάδας. Έστω ότι η ομάδα G έχει τάξη N και η U έχει τάξη n. Για κάθε στοιχείο a∈G θα έχουμε το αριστερό συνσύνολο (left coset) aU, όπως μπορούμε να κατασκευάσουμε το δεξιό

συνσύνολο (right coset) Ua. Προφανώς αν το a ανήκει στην υποομάδα U, τότε το συνσύνολο θα περιέχει όλα τα στοιχεία της υποομάδας. Αν το a δεν ανήκει στην υποομάδα, τότε τα αριστερό ή δεξιό συνσύνολο θα περιέχει στοιχεία που θα είναι όλα διαφορετικά μεταξύ τους, αλλά και με τα στοιχεία της υποομάδας. Γενικά αν φτιάξουμε τα συνσύνολα aU και bU (ή αντίστοιχα τα Ua και Ub), αυτά είτε δεν θα έχουν κανένα κοινό στοιχείο είτε θα έχουν όλα τα στοιχεία τους κοινά. Πραγματικά:
Αν $ap_i=bp_j$ όπου $p\in U$ τότε $a=bp_jp_i^{-1}$ και επομένως $ap_r=b(p_jp_i^{-1})p_r=bp_s$ $(p_r\neq p_i)$, θα ισούται δηλαδή με κάποιο άλλο στοιχείο. Επειδή θα φτιάξουμε όλα τα δυνατά γινόμενα aU (ή Ua), θα έχουμε τελικά διάφορα συνσύνολα με n στοιχεία το καθένα από την ομάδα G. Μερικά συνσύνολα θα επαναλαμβάνονται, μέχρι να εξαντληθούν όλα τα στοιχεία της ομάδας. Επομένως το *n* θα πρέπει να διαιρεί το N (θεώρημα Euler-Lagrange).
Η τάξη της υποομάδας διαιρεί την τάξη της ομάδας.
Π.χ. οι υποομάδες της D_3 (C_{3v}) έχουν τάξη 3 ή 2.

I.6 Συζυγείς κλάσεις

Δύο στοιχεία a, b μιας ομάδας G λέγονται συζυγή αν υπάρχει κάποιο στοιχείο c της ομάδας, ώστε να ισχύει ότι $b = cac^{-1}$.

Διαπιστώνουμε ότι η σχέση συζυγίας είναι μια πράξη ισοδυναμίας. Εύκολα αποδεικνύουμε ότι ικανοποιούνται οι ιδιότητες της ισοδυναμίας.

Αν το στοιχείο b είναι συζυγές στο a, τότε και το a είναι συζυγές στο b. Πραγματικά, αν $b = cac^{-1}$, τότε $a = c^{-1}bc = (c^{-1})b(c^{-1})^{-1} = c'bc'^{-1}$, όπου $c' = c^{-1} \in G$.

Αν b είναι συζυγές στο a και d είναι συζυγές στο b, τότε το d είναι συζυγές στο a. Πραγματικά, αν $b = cac^{-1}$ και $d = c'bc'^{-1} = c'cac^{-1}c'^{-1} = (c'c)a(c'c)^{-1} = c''ac''^{-1}$.

Ένα σύνολο στοιχείων που είναι συζυγή το ένα με το άλλο ονομάζεται κλάση συζυγίας. Προφανώς διαφορετικές κλάσεις δεν μπορεί να έχουν κοινά στοιχεία. Επομένως η κάθε κλάση μπορεί να αναπαρασταθεί με κάποιο στοιχείο της κλάσης. Επομένως όλα τα στοιχεία μιας ομάδας θα χωρίζονται σε διάφορες κλάσεις δηλαδή $G = \sum_{i=1}^{r} K_i$, όπου r είναι ο αριθμός των κλάσεων.

Επειδή κάθε στοιχείο ανήκει μόνο σε μία κλάση, προφανώς θα ισχύει ότι $\sum_{1}^{r} r_i = g$ =τάξη της ομάδας.

Είναι προφανές ότι το ταυτοτικό στοιχείο e αποτελεί μια κλάση από μόνο του, αφού για κάθε στοιχείο a θα ισχύει ότι $e = aea^{-1}$.

Σε μια αβελιανή ομάδα, το κάθε στοιχείο αποτελεί μια κλάση από μόνο του, αφού τα στοιχεία αντιμετατίθενται μεταξύ τους.

Ας ορίσουμε ως γινόμενο $G_1 \times G_2$ δύο ομάδων G_1 και G_2 το σύνολο των στοιχείων $a_ib_j = b_ja_i$, όπου $a_i \in G_1$ και $b_j \in G_2$. Οι κλάσεις του γινομένου των δύο ομάδων $G_1 \times G_2$ θα είναι $K_{ij} = K_{1i} \cdot K_{2j}$, όπου K_{1i}, K_{2j} οι κλάσεις των G_1 και G_2 αντίστοιχα. Έτσι ο αριθμός των κλάσεων του γινομένου των ομάδων θα είναι $r = r_1 \cdot r_2$.

Αποδεικνύεται ότι ο αριθμός των στοιχείων σε μια κλάση είναι ένας διαιρέτης της τάξης της ομάδας g. Όμως ο αριθμός των κλάσεων δεν είναι κατ' ανάγκη διαιρέτης της τάξης της ομάδας.

Παράδειγμα η ομάδα D_3. Μία κλάση αποτελεί το $K_e=\{e\}$. Μια άλλη κλάση είναι από τα στοιχεία $K_3=\{c_3, c_3^2\}$. Μια τρίτη κλάση αποτελούν τα στοιχεία $K_2=\{c_2, c_2', c_2''\}$. Αντίστοιχα για την ομάδα C_{3v} η τρίτη κλάση είναι τα στοιχεία $K_\sigma=\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$. Πραγματικά παρατηρούμε ότι ο αριθμός των στοιχείων των κλάσεων διαιρεί την τάξη της ομάδας.

Είναι προφανές ότι αν K είναι μια κλάση, τότε για κάθε στοιχείο a της ομάδας θα ισχύει ότι $aKa^{-1}=K$. Αλλιώς θα υπήρχε στοιχείο της ομάδας που θα ήταν συζυγές σε στοιχείο της κλάσης, χωρίς να ανήκει στην κλάση αυτή.

Αν υπολογίσουμε το γινόμενο K_iK_j των στοιχείων δύο κλάσεων μιας ομάδας G, αυτή θα μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει των κλάσεων της ομάδας. Θα ισχύει δηλαδή ότι

$K_iK_j=\sum c_{ij}^l K_l$, όπου τα c_{ij}^l ονομάζονται σταθερές κλάσης.

Π.χ. για την ομάδα D_3 (C_{3v}) προκύπτει ο εξής πολλαπλασιαστικός πίνακας.

$$K_3K_3=\left(c_3\oplus c_3^2\right)\left(c_3\oplus c_3^2\right)=2e\oplus c_3\oplus c_3^2=2K_e\oplus K_3$$

$$K_3K_{\underset{\sigma}{2}}=\left(c_3\oplus c_3^2\right)\begin{pmatrix} c_2\oplus c_2'\oplus c_2'' \\ \sigma_v\oplus\sigma_v'\oplus\sigma_v''\end{pmatrix}=2K_{\underset{\sigma}{2}}$$

δηλαδή συνολικά

	K_e	K_3	$K_{2(\sigma)}$
K_e	K_e	K_3	$K_{2(\sigma)}$
K_3	K_3	$2K_e+K_3$	$2K_{2(\sigma)}$
$K_{2(\sigma)}$	$K_{2(\sigma)}$	$2K_{2(\sigma)}$	$3K_e+3K_3$

Όλα τα στοιχεία μιας κλάσης έχουν την ίδια τάξη. Δηλαδή $a^n=e$ με κοινό το n για όλα τα στοιχεία μιας κλάσης. Πραγματικά $b^n=\left(cac^{-1}\right)^n=ca^nc^{-1}=cec^{-1}=e$. Αυτό συνεπάγεται π.χ. ότι σε μια κλάση μπορούν συνυπάρχουν περιστροφές της ίδιας τάξης. *Προσοχή: το αντίστροφο δεν ισχύει.*

Αν κάποιο στοιχείο αντιμετατίθεται με όλα τα στοιχεία μιας ομάδας ονομάζεται αυτοσυζυγές και αποτελεί μια κλάση από μόνο του (π.χ. το ταυτοτικό στοιχείο ή όλα τα στοιχεία μιας αβελιανής ομάδας).

Όλα τα στοιχεία μιας ομάδας G που αντιμετατίθεται με κάποιο στοιχείο $a\in G$, (επομένως και το a) δημιουργούν μια ομάδα V_a, που ονομάζεται κανονικοποιητής (normalisator). Το ότι αποτελεί ομάδα φαίνεται από τα εξής: το e είναι στοιχείο της V_a. Αν $b_1, b_2\in V_a$, δηλαδή αν $b_1a=ab_1$ και $b_2a=ab_2$, τότε $(b_1b_2)a=b_1(b_2a)=b_1(ab_2)=(b_1a)b_2=(ab_1)b_2=a(b_1b_2)$ δηλαδή $b_1b_2\in V_a$. Επίσης αν $b_1a=ab_1$, τότε και $ab_1^{-1}=b_1^{-1}a$ δηλαδή $b_1^{-1}\in V_a$. Αν το a είναι αυτοσυζυγές, τότε προφανώς $V_a=G$. Αλλιώς μπορούμε να αναλύσουμε την ομάδα G σε αριστερά (ή δεξιά) συνσύνολα $G=V_a+x_1V_a+x_2V_a+\ldots+x_{r-1}V_a$. Παρατηρούμε ότι τα

$$eae^{-1} = a, \quad x_1 a x_1^{-1} = a_1, \quad x_2 a x_2^{-1} = a_2, \ldots, x_{r-1} a x_{r-1}^{-1} = a_{r-1}$$

θα πρέπει να είναι διαφορετικά μεταξύ τους, αλλά θα ανήκουν (εξ ορισμού) στην ίδια κλάση K_a που θα έχει r_a στοιχεία. Αν δύο ήταν ίσα μεταξύ τους: $x_1 a x_1^{-1} = x_2 a x_2^{-1}$, θα έπρεπε $(x_2^{-1}x_1)a = a(x_2^{-1}x_1)$, δηλαδή το $x_2^{-1}x_1 = b$ θα ανήκε στο V_a. Οπότε το $x_1 = x_2 b$ (ή παρόμοια το $x_2 = x_1 b^{-1}$), θα ανήκε επίσης στο V_a, που δεν ισχύει δεδομένου ότι επιλέγουμε το x_1 (ή το x_2) από εκείνα που δεν ανήκουν στο V_a ή στο $x_2 V_a$ (ή το $x_1 V_a$) για να δημιουργήσουμε το επόμενο συνσύνολο. Είναι προφανές από την ανάλυση ότι τα στοιχεία της κλάσης K_a θα διαιρούν τα στοιχεία της ομάδας G.

Έστω H μια υποομάδα της G. Αν μετασχηματίσουμε τα στοιχεία της H με κάποιο στοιχείο c της G, το σύνολο των στοιχείων cHc^{-1} θα αποτελούν μια άλλη υποομάδα της G, που μπορεί να ταυτίζεται με την H ή να είναι διαφορετική. Αυτή ονομάζεται συζυγής υποομάδα της G και είναι ισόμορφη της H. Ότι είναι υποομάδα προκύπτει ως εξής:
αν $h_i, h_j \in H$ τότε $\left(ch_i c^{-1}\right)\left(ch_j c^{-1}\right) = c\left(h_i h_j\right)c^{-1} = ch_k c^{-1} \in cHc^{-1}$.
Επίσης ισχύει ότι $\left(ch_i c^{-1}\right)\left(ch_i^{-1}c^{-1}\right) = ch_i h_i^{-1} c^{-1} = e$ δηλαδή το $\left(ch_i^{-1}c^{-1}\right)$ είναι αντίστροφο του $ch_i c^{-1}$ και $cec^{-1} = e$. Δηλαδή έχει τις ιδιότητες μιας ομάδας.

Στην γενική περίπτωση το cHc^{-1} θα διαφέρει από το H. Όταν όμως $cHc^{-1} = H$ για όλα τα στοιχεία της ομάδας G, τότε το H ονομάζεται *αμετάβλητη ή κανονική υποομάδα* ή *κανονικός διαιρέτης* της G.

Επειδή η σχέση cHc^{-1} ορίζει μια κλάση, θα πρέπει το H να αποτελείται από πλήρεις κλάσεις για να είναι αμετάβλητη υποομάδα.
Π.χ. για την ομάδα C_{3v} (ή την D_3) οι υποομάδες $\{e, \sigma_v\}, \{e, \sigma'_v\}, \{e, \sigma''_v\}$ δεν είναι αμετάβλητες υποομάδες, αφού δεν περιέχουν τις πλήρεις κλάσεις $\{e\}$ και $\{\sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$. Όμως η υποομάδα $\{e, c_3, c_3^2\}$ περιέχει δύο πλήρεις κλάσεις τις $\{e\}$ και $\{c_3, c_3^2\}$. Επομένως θα είναι μια αμετάβλητη υποομάδα.

Ο παραπάνω ορισμός μπορεί να γραφτεί και ως $cH = Hc$, δηλαδή τα αριστερά συνσύνολα είναι ταυτόσημα με τα δεξιά σε μια αμετάβλητη υποομάδα.

II. ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΕΙΣ ΟΜΑΔΩΝ

II.1 Τι είναι αναπαράσταση ομάδας

Ας θεωρήσουμε την ομάδα $C_{3v} = \{e, c_3, c_3^2, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v\}$ ή την ισόμορφη ομάδα $D_3 = \{e, c_3, c_3^2, c_2, c'_2, c''_2\}$ και τους μετασχηματισμούς που εκφράζονται από την αλλαγή των αξόνων, μπορούμε να δούμε πως μετασχηματίζεται κάθε συνάρτηση των συντεταγμένων x,y,z. Π.χ. αν λάβουμε τις δύο συναρτήσεις $\phi_1 = xf(r)$ και $\phi_2 = yf(r)$ (όπου $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, θα έχουμε για την περιστροφή c_3 (γωνία θ= -120°)

$$c_3\{xf(r)\} = c_3\{\phi_1\} = -\frac{x}{2}f(r) + \frac{\sqrt{3}}{2}yf(r) = -\frac{1}{2}\phi_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2$$

$$c_3\{yf(r)\} = c_3\{\phi_2\} = -\frac{\sqrt{3}}{2}xf(r) - \frac{1}{2}yf(r) = -\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_1 - \frac{1}{2}\phi_2$$

(αφού το r παραμένει αναλλοίωτο). Βλέπουμε δηλαδή ότι

$$c_3\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\}$$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε ότι η επίδραση της c_3^2 θα αντιστοιχεί με

$$c_3^2\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\} \qquad e\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\}$$

$$\sigma_v(c_2)\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\} \qquad \sigma'_v(c'_2)\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\}$$

$$\sigma''_v(c''_2)\{\phi_1, \phi_2\} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \{\phi_1, \phi_2\}$$

Μπορούμε εύκολα να επαληθεύσουμε ότι το γινόμενο των πινάκων δύο μετασχηματισμών αντιστοιχούν στον πίνακα του γινομένου των μετασχηματισμών, π.χ.

$$c_3^2 \cdot \sigma_v \mathrel{\hat{=}} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \mathrel{\hat{=}} \sigma'_v$$

$$c_3 \cdot \sigma_v' \mathrel{\hat{=}} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathrel{\hat{=}} \sigma_v \quad \text{κλπ.}$$

Επομένως οι πίνακες που δημιουργήθηκαν έχουν έναν ολόιδιο συνδυαστικό πίνακα με αυτόν της αρχικής ομάδας. Υπάρχει το ταυτοτικό στοιχείο και όλα τα χαρακτηριστικά που ορίζουν μια ομάδα, επομένως αποτελούν ομάδα ισόμορφη με την αρχική. Θα μπορούσαμε επομένως να εργαζόμαστε με το σύστημα των πινάκων και να συνάγουμε ιδιότητες για την ομάδα C_{3v} (ή την D_3).

Αν δράσουμε με όλους τους μετασχηματισμούς της ομάδας C_{3v} (ή της D_3) στην συνάρτηση $\phi_4 = (x^2 + y^2) f(r)$, θα δούμε ότι παραμένει αναλλοίωτη. Επομένως ο μετασχηματισμός για κάθε στοιχείο g της ομάδας G θα παρίσταται με την σχέση $g\{\phi_4\} = \{\phi_4\}$, που υπονοεί έναν πίνακα 1×1 με στοιχείο το 1. Είναι προφανές ότι ισχύει η σχέση ότι το γινόμενο δύο πινάκων αναπαραστάσεων θα ισούται με τον πίνακα αναπαράστασης του γινομένου των στοιχείων, αφού όλα τα στοιχεία αναπαρίστανται με το 1. Εδώ όμως θα έχουμε έναν ομοιομορφισμό και όχι μία προς μία αμοιβαία αντιστοίχηση.

Για την ομάδα D_3 μπορούμε να βρούμε και μια άλλη συνάρτηση την $\phi_3 = zf(r)$, που θα μετασχηματίζεται στον εαυτό της από τα στοιχεία της ομάδας. Πραγματικά για τα στοιχεία της ομάδας $\{e, c_3, c_3^2\}$ η συνάρτηση ϕ_3 δεν θα μεταβληθεί. Για τις περιστροφές κατά 180^o όμως z $\rightarrow$ -z, επομένως η συνάρτηση θα αλλάξει πρόσημο. Παρατηρούμε δηλαδή ότι μπορούμε να αναπαραστήσουμε τους μετασχηματισμούς των στοιχείων της ομάδας D_3 μέσω των πινάκων 1×1 με τιμές 1 για τα στοιχεία $\{e, c_3, c_3^2\}$ και -1 για τις τρείς περιστροφές. Πάλι ο συνδυαστικός πίνακας της ομάδας θα αναπαράγεται από τις τιμές των πινάκων 1×1 που επιλέξαμε. Θα αποτελούν λοιπόν και οι πίνακες αυτοί μια αναπαράσταση της ομάδας.

Μολονότι οι αναπαραστάσεις ορίστηκαν μέσω κάποιων συναρτήσεων, ουσιαστικά στα πιο πάνω παραδείγματα είναι ένα σύνολο πινάκων με τον ίδιο συνδυαστικό πίνακα με εκείνον της ομάδας.

Γενικά αναπαράσταση D(G) είναι ένας ομοιομορφισμός της ομάδας G πάνω σε ένα σύνολο αντιστρέψιμων (non-singular) γραμμικών τελεστών P, που απεικονίζουν έναν γραμμικό χώρο L στον εαυτό του: $D(G): g\in G \rightarrow P(g)\equiv P_g$. Ο χώρος L ονομάζεται χώρος αναπαράστασης της ομάδας G.

Αν η αναπαράσταση $D(G)$ απεικονίζει την ομάδα G ισομορφικά (ένα προς ένα) στους τελεστές P, τότε λέγεται πιστή αναπαράσταση.

Η τετριμμένη αναπαράσταση που αντιστοιχίζει σε κάθε στοιχείο της ομάδας G τον μοναδιαίο τελεστή, ονομάζεται μοναδιαία αναπαράσταση (ή ταυτοτική αναπαράσταση).

Η διάσταση του χώρου αναπαράστασης L ονομάζεται διάσταση της αναπαράστασης.

Αν ορίσουμε μια βάση στον χώρο αναπαράστασης L, τότε οι τελεστές P_g ορίζονται μέσω πινάκων και έχουμε αναπαράσταση πινάκων, που αποτελεί την πιο συνηθισμένη μορφή αναπαράστασης. Όμως ο τρόπος αναπαράστασης μέσω τελεστών σε έναν γραμμικό χώρο έχει το πλεονέκτημα ότι δίνει αποτελέσματα ανεξάρτητα της βάσης.

Στο προηγούμενο παράδειγμα θα μπορούσαμε να πάρουμε αντί για τις δύο συναρτήσεις $xf(r), yf(r)$ που μετασχηματίζονται μεταξύ τους, έναν οποιονδήποτε γραμμικό συνδυασμό των δύο συναρτήσεων $c_1 xf(r) + c_2 yf(r)$. Θα έχουμε δηλαδή έναν διδιάστατο χώρο αναπαράστασης. Π.χ. αν λάβουμε τις δύο συναρτήσεις $(x+iy)f(r)$ και $(x-iy)f(r)$, τότε προκύπτει ότι

$$c_3\{(x+iy)f(r)\} = c_3\{xf(r)\} + ic_3\{yf(r)\} = \left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right)(x+iy)f(r) \text{ κλπ.}$$

Δηλαδή μπορούμε να ορίσουμε τους νέους πίνακες αναπαράστασης.

Αν $\{\phi_1, \phi_2, ..., \phi_n\}$ είναι μια βάση αναπαράστασης σε n-διάστατο χώρο, τότε σε κάθε στοιχείο της ομάδας θα αντιστοιχίσουμε έναν πίνακα μέσω της δράσης του στοιχείου (δηλαδή του αντίστοιχου τελεστή) στις συναρτήσεις βάσης $T\phi_j = \sum_i D_{ij}(T)\phi_i$.

Ο λόγος που δεν ορίζουμε την σχέση ως $T\phi_j = \sum_i D_{ji}(T)\phi_i$ οφείλεται στην ανάγκη να αναπαράγεται ο συνδυαστικός πίνακας. Πραγματικά με τον τρόπο που επιλέξαμε θα ισχύει για δύο στοιχεία της ομάδας *A*, *B* όπου $C = A \cdot B$ ότι

$$C\phi_j = A(B\phi_j) = A[\sum_i D_{ij}(B)\phi_i] = \sum_i D_{ij}(B)[A\phi_i] = \sum_{i,k} D_{ij}(B)D_{ki}(A)\phi_k = \sum_{i,k} D_{ki}(A)D_{ij}(B)\phi_k$$

Όμως θα ισχύει επίσης για το στοιχείο *C* ότι $C\phi_i = \sum_k D_{ki}(C)\phi_k$.

Η σύγκριση των δύο σχέσεων μας οδηγεί στο ότι θα πρέπει $D_{ki}(C) = \sum_i D_{ki}(A)D_{ij}(B)$, που είναι η σωστή αντιστοιχία με εκείνη ανάμεσα στα στοιχεία *C* και *A*, *B*.

Αν αλλάξουμε την βάση αναπαράστασης μέσω ενός γραμμικού μετασχηματισμού, θα έχουμε $\phi'_j = \sum_i P_{ij}\phi_i$ καθώς και την αντίστροφη σχέση $\phi_j = \sum_i P^{-1}_{ij}\phi'_i$. Τότε με απλή αντικατάσταση θα προκύψει ότι $T\phi'_j = T[\sum_l P_{lj}\phi_l] = \sum_l P_{lj}T\phi_l = \sum_{l,k} P_{lj}D_{kl}(T)\phi_k = \sum_{l,k,i} P_{lj}D_{kl}(T)P^{-1}_{ik}\phi'_i$. Στην νέα βάση αναπαράστασης το στοιχείο T θα εκφράζεται μέσω ενός άλλου πίνακα D', όπου θα ισχύει ότι $T\phi'_j = \sum_i D'_{ij}\phi'_i$. Από την σύγκριση των δύο σχέσεων προκύπτει ότι $D'_{ij}(T) = \sum_{k,l} P^{-1}_{ik}D_{kl}(T)P_{lj}$, δηλαδή συμβολικά ότι $D'(T) = P^{-1} \cdot D(T) \cdot P$.

Η αναπαράσταση D' ονομάζεται ισοδύναμη με την *D*.

Γενικά δύο αναπαραστάσεις D, D' μιας ομάδας μέσω πινάκων θα λέγονται ισοδύναμες αν υπάρχει πίνακας P που συνδέει τους δύο πίνακες μέσω της σχέσης $D'(T) = P^{-1} \cdot D(T) \cdot P$ για κάθε στοιχείο της ομάδας. Στην πράξη οι ισοδύναμες αναπαραστάσεις είναι τόσο συνδεδεμένες ώστε δεν θα τις ξεχωρίζουμε, αλλά θα λέμε αναπαράσταση *D* εννοώντας κάθε αναπαράσταση που είναι ισοδύναμη μαζί της. Πρακτικά θα γράφουμε $D' = D$, χωρίς την ανάγκη να προσδιορίζουμε την βάση

αναπαράστασης. Για τον λόγο αυτό είναι πιο γενικός ο ορισμός μέσω των τελεστών, χωρίς αναφορά σε συγκεκριμένη βάση.
Αν όμως θέλουμε να βρούμε την αναπαράσταση σε μια συγκεκριμένη βάση, θα μιλάμε τότε για συγκεκριμένη αναπαράσταση. Αν τότε συμβεί να ισχύει ότι οι πίνακες από τις δύο συγκεκριμένες αναπαραστάσεις να είναι ίσες, θα λέμε ότι οι αναπαραστάσεις είναι ταυτόσημες.
Αν ορίσουμε τις αναπαραστάσεις μέσω τελεστών, τότε δύο αναπαραστάσεις $D = \{P_a | a \in G\}, D' = \{P'_a | a \in G\}$ *είναι ισοδύναμες ή όμοιες, αν όλα τα* P_a *και* P'_a *υπάρχει ένας αντιστρέψιμος (non-singular) τελεστής S τέτοιος ώστε να ισχύει ότι* $P'_a = S^{-1} P_a S$ *για κάθε* $a \in G$.
Επειδή αυτή η σχέση ανάμεσα στους τελεστές ορίζει μια σχέση ισοδυναμίας, μπορούμε να χωρίσουμε (όπως αναφέραμε πιο πριν) τις αναπαραστάσεις σε κλάσεις ισοδυναμίας, δηλαδή κλάσεις ισοδύναμων αναπαραστάσεων και να λάβουμε μια αναπαράσταση που να αντιπροσωπεύει κάθε μία κλάση. Επειδή υπάρχουν άπειροι τρόποι να αλλάξουμε την βάση αναπαράστασης, θα υπάρχουν και άπειρες αναπαραστάσεις. Όμως, όπως είδαμε, ορισμένες θα είναι ισοδύναμες με άλλες. Επομένως θα πρέπει να ψάξουμε να βρούμε μόνο τις μη-ισοδύναμες αναπαραστάσεις κάθε ομάδας.

ΙΙ.2 Αναγωγιμότητα μιας αναπαράστασης

Ας θεωρήσουμε τον διανυσματικό χώρο της τριών συναρτήσεων [*xf(r),yf(r),zf(r)*] της ομάδας $C_{3v}(32)$. Αυτά τα διανύσματα θα αποτελούν μια βάση αναπαράστασης γιατί ο χώρος των τριών διανυσμάτων (οι δύο πρώτες συναρτήσεις και η τρίτη ξεχωριστά) παραμένει αναλλοίωτος από τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας.

Ο πίνακας αναπαράστασης θα προκύψει από την μελέτη της επίδρασης κάθε στοιχείου συμμετρίας στον χώρο των διανυσμάτων $\phi_1 = xf(r), \phi_2 = yf(r), \phi_3 = zf(r)$. Όπως είδαμε

$$\begin{aligned} c_3\{\phi_1\} &= -\frac{\phi_1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2 + 0\cdot\phi_3 \\ c_3\{\phi_2\} &= -\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_1 - \frac{1}{2}\phi_2 + 0\cdot\phi_3 \\ c_3\{\phi_3\} &= 0\cdot\phi_1 + 0\cdot\phi_2 + 1\cdot\phi_3 \end{aligned} \quad \rightarrow \quad c_3\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \{\phi_1,\phi_2,\phi_3\}$$

Παρόμοια έχουμε ότι

$$c_3^2\{\phi_1\} = -\frac{\phi_1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2 + 0\cdot\phi_3$$
$$c_3^2\{\phi_2\} = \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_1 - \frac{1}{2}\phi_2 + 0\cdot\phi_3 \quad \rightarrow \quad c_3^2\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\}$$
$$c_3^2\{\phi_3\} = 0\cdot\phi_1 + 0\cdot\phi_2 + 1\cdot\phi_3$$

$$e\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} \qquad c_2\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\}$$

$$c_2'\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} \quad c_2''\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\{\phi_1,\phi_2,\phi_3\}$$

Παρατηρούμε ότι στο πάνω αριστερά μέρος των πινάκων είναι οι πίνακες 2×2 της μιας αναπαράστασης (ας την ονομάσουμε *Γ*) και κάτω δεξιά οι πίνακες 1×1 της άλλης (ας την καλέσουμε *Α*). Δηλαδή οι πίνακες 3×3 της αναπαράστασης στον 3-διάστατο αυτό χώρο θα είναι της μορφής $\begin{pmatrix} \Gamma_{ij}(T) & 0 \\ 0 & A(T) \end{pmatrix}$.

Λέμε ότι η αναπαράσταση είναι αναγώγιμη στις αναπαραστάσεις *Γ* και *Α*.

Αν λαμβάναμε σαν διανύσματα βάσης τις συναρτήσεις $\phi_1' = (x+y)f(r)$, $\phi_2' = (y+z)f(r)$, $\phi_3' = (z+x)f(r)$, τότε θα προέκυπταν οι μετασχηματισμοί

$$c_3\{\phi_1'\} = -\frac{x}{2}f + \frac{\sqrt{3}}{2}yf - \frac{\sqrt{3}}{2}xf - \frac{y}{2}f = -\frac{\phi_1'}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2' - \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_3'$$
$$c_3\{\phi_2'\} = -\frac{\sqrt{3}}{2}xf - \frac{y}{2}f + zf = \left(\frac{1+\sqrt{3}}{4}\right)\phi_1' + \left(\frac{3-\sqrt{3}}{4}\right)\phi_2' + \left(\frac{1-\sqrt{3}}{4}\right)\phi_3'$$
$$c_3\{\phi_3'\} = zf - \frac{x}{2}f + \frac{\sqrt{3}}{2}yf = \left(\frac{3+\sqrt{3}}{4}\right)\phi_1' + \left(\frac{1-\sqrt{3}}{4}\right)\phi_2' + \left(\frac{\sqrt{3}-3}{4}\right)\phi_3'$$

δηλαδή όλα τα στοιχεία του πίνακα αναπαράστασης 3×3 είναι διάφορα του μηδενός. Παρόλα αυτά πρόκειται για την ίδια (ισοδύναμη) αναπαράσταση, αφού οι δύο χώροι είναι ίδιοι και απλά έχουμε κάνει μια αλλαγή της βάσης ($\phi_1' = \phi_1 + \phi_2, \phi_2' = \phi_2 + \phi_3, \phi_3' = \phi_1 + \phi_3$). Επομένως και αυτή η αναπαράσταση θα πρέπει να ανάγεται σε άθροισμα των αναπαραστάσεων *Γ* και *Α*.

Γενικά μια αναπαράσταση $D_{ij}(T)$ μιας διακριτής ομάδας G είναι αναγώγιμη στις αναπαραστάσεις $D^{(1)}$, $D^{(2)}$, ... $D^{(\kappa)}$ αν υπάρχει κάποιος μεταχηματισμός της μορφής

$D'(T) = P^{-1}D(T)P$ *που μετασχηματίζει κάθε πίνακα $D_{ij}(T)$ της αναπαράστασης στην διαγωνοποιημένη μορφή* $\begin{pmatrix} D_{ij}^{(1)}(T) & & & & \\ & D_{ij}^{(2)}(T) & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & D_{ij}^{(\kappa)}(T) \end{pmatrix}$, *όπου $D^{(j)}(T)$ είναι μικρότεροι πίνακες (μπορεί να είναι και 1×1) και όλα τα στοιχεία εκτός διαγωνίου είναι μηδέν. Θα γράψουμε δε ότι $D = D^{(1)} + D^{(2)} + \ldots + D^{(\kappa)}$.*

Ορισμένες από τις αναπαραστάσεις $D^{(j)}$ μπορεί να είναι ίδιες. Στη γενική περίπτωση θα μπορούσε να είναι διάφορα του μηδενός τα στοιχεία πάνω από την διαγώνιο (τριγωνικός πίνακας). Στην περίπτωση όμως που οι πίνακες αναπαράστασης *D* είναι ορθομοναδιαίοι (unitary), τα μηδενικά θα βρίσκονται (όπως φαίνονται στον παραπάνω ορισμό) και στο πάνω δεξιά μέρος των πινάκων και η αναπαράσταση θα είναι πλήρως αναγώγιμη. Επειδή οι αναπαραστάσεις των πεπερασμένων ομάδων μπορούν να επιλεγούν ορθομοναδιαίες (unitary), οι αναπαραστάσεις των ομάδων αυτών θα είναι πλήρως αναγώγιμες.

Επομένως θα έχουμε $D = \sum_j m_j D^{(j)}$, όπου $D^{(j)}$ θα είναι οι διαφορετικές αναπαραστάσεις.

Η σειρά που εμφανίζονται οι $D^{(j)}$ στον παραπάνω πίνακα $\begin{pmatrix} D_{ij}^{(1)}(T) & & & & \\ & D_{ij}^{(2)}(T) & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & D_{ij}^{(\kappa)}(T) \end{pmatrix}$ μπορεί να μεταβάλλεται ανάλογα με την βάση του n-διάστατου χώρου αναπαράστασης. Όμως η ανάλυση $D = \sum_j m_j D^{(j)}$ στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις θα είναι μοναδική για κάθε αναπαράσταση *D(T)*. Επομένως θα πρέπει να βρούμε τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Εκείνες δηλαδή που δεν μπορούν να αναλυθούν στην μορφή $\begin{pmatrix} D_{ij}^{(1)}(T) & & & & \\ & D_{ij}^{(2)}(T) & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & D_{ij}^{(\kappa)}(T) \end{pmatrix}$.

Μετά θα δούμε πως αναλύεται κάθε αναπαράσταση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Για την ομάδα C_{3v}(32) (και την D_3) αποδεικνύεται ότι οι τρεις αναπαραστάσεις που βρήκαμε με τις συναρτήσεις (που ονομάζονται *Γ* ή *E*, *A* και *I*) είναι οι μόνες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Επομένως κάθε άλλη αναπαράσταση θα ανάγεται σε αυτές τις τρεις. Είδαμε ότι η Γ (ή E) είναι διδιάστατη ενώ οι οι A και I μονοδιάστατες.

Παρατηρήσαμε ότι μέσω του μετασχηματισμού $P^{-1}D(T)P$ θα προκύψει μια αναγώγιμη αναπαράσταση διαγώνιας μορφής $\begin{pmatrix} D_{ij}^{(1)}(T) & & & & \\ & D_{ij}^{(2)}(T) & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & D_{ij}^{(\kappa)}(T) \end{pmatrix}$. Ο μετασχηματισμός P θα ορίσει ένα νέο σύστημα διανυσμάτων βάσης. Σ' αυτό το σύστημα διανυσμάτων η αναπαράσταση $D'(T)$ θα αποτελείται από τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις $D'(T) = D^{(1)}(T) + D^{(2)}(T) + \ldots + D^{(\kappa)}(T)$. (Ας παραδεχτούμε ότι όλες οι $D^{(j)}(T)$ είναι διαφορετικές μεταξύ τους). Η αναπαράσταση $D'(T)$ θα έχει κάποιο n-διάστατο χώρο βάσης. Όμως για να έχει την διαγώνιο μορφή σημαίνει ότι όταν δρα στον n-διάστατο χώρο θα επηρεάζει (ανακατεύει) μόνο εκείνα τα διανύσματα (κατά ομάδες) όπως εκφράζονται από την ανάλυση στην διαγώνια μορφή. Επομένως $L = L^{(1)} + L^{(2)} + \ldots + L^{(\kappa)}$ δηλαδή θα έχουμε ανάλυση του αρχικά n-διάστατου χώρου σε αναλλοίωτους υποχώρους. Αυτός είναι ένας εναλλακτικός τρόπος ορισμού της αναγωγιμότητας της αρχικής αναπαράστασης.

Ένα παράδειγμα για την ομάδα $C_{3v}(32)$ (και την D_3) θα είναι ο χώρος $L\{x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx\}$. Αυτός ο χώρος θα παραμένει αναλλοίωτος από τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας γιατί οι μετασχηματισμοί εκφράζουν γραμμικά τις αλλαγές και επομένως, τα διανύσματα $\{x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx\}$ θα εκφράζονται από συναρτήσεις $2^{ας}$ τάξης των x, y, z. Όμως ο 6-διάστατος χώρος L περιλαμβάνει όλους τους δυνατούς συνδυασμούς $2^{ας}$ τάξης των x, y, z. Άρα θα παραμένει αναλλοίωτος (όλες οι συναρτήσεις που θα προκύπτουν από τους μετασχηματισμούς θα εκφράζονται από τις 6 αρχικές).

Αν κάνουμε τις πράξεις θα δούμε ότι η αναπαράσταση του στοιχείου c_3 δεν θα έχει την διαγώνιο μορφή, αλλά θα είναι ο πίνακας $\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Το ίδιο θα συμβαίνει και για τις αναπαραστάσεις των άλλων στοιχείων της ομάδας. Είναι όμως η αναπαράσταση αναγώγιμη;

Γνωρίζουμε ότι το άθροισμα $x^2 + y^2 + z^2$ είναι αναλλοίωτο στις πράξεις συμμετρίας της ομάδας. Άρα θα έπρεπε να είναι αναλλοίωτο. Δηλαδή η αναπαράσταση περιλαμβάνει κάποιο κομμάτι που είναι αναλλοίωτο, δηλαδή θα είναι αναγώγιμη. Μπορεί κανείς να επαληθεύσει ότι αν κάναμε αλλαγή βάσης στα νέα διανύσματα $\phi_1' = 2xy, \phi_2' = x^2 - y^2$, $\phi_3' = 2yz$, $\phi_4' = -2zx, \phi_5' = \frac{2}{\sqrt{5}}\left(x^2 + y^2 + z^2\right), \phi_6' = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(3z^2 - r^2\right)$ (που είναι κανονικοποιημένα στο $\frac{16\pi}{15}$), τότε οι υποχώροι $(\phi_1', \phi_2'), (\phi_3', \phi_4')$ παραμένουν αναλλοίωτοι και μετασχηματίζονται με την αναπαράσταση *Γ* (ή *E*). Επίσης οι υποχώροι $(\phi_5'), (\phi_6')$ είναι αναλλοίωτοι μετασχηματίζομενοι όπως η *I*. Δηλαδή $D = \Gamma + \Gamma + \mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_1$ και $L = (\phi_1', \phi_2') + (\phi_3', \phi_4') + (\phi_5') + (\phi_6')$.

ΙΙ.3 Χαρακτήρες μιας αναπαράστασης

Πως μπορούμε όμως να ξεχωρίσουμε τις αναπαραστάσεις;
Γνωρίζουμε ότι αν δύο πίνακες συνδέονται με κάποια σχέση της μορφής $D' = S^{-1} \cdot D \cdot S$ δηλαδή $D_{ij}' = S_{ik}^{-1} \cdot D_{kl} \cdot S_{lj}$, τότε το ίχνος (ή δείκτης) του πίνακα, που είναι το άθροισμα των διαγώνιων όρων, θα είναι το ίδιο στους δύο πίνακες. Πραγματικά θα ισχύει ότι

$$\sum_i D_{ii}'(T) = \sum_{i,k,l} S_{ik}^{-1} D_{kl}(T) S_{li} = \sum_{k,l}\left(\sum_i S_{ik}^{-1} S_{li}\right) D_{kl}(T) = \sum_{k,l} \delta_{kl} D_{kl}(T) = \sum_k D_{kk}(T)$$

Επομένως το ίχνος της αναπαράστασης θα παραμένει το ίδιο για όλες τις ισοδύναμες αναπαραστάσεις. Δηλαδή χαρακτηρίζει ολες τις ισοδύναμες αναπαράστασεις και ορίζεται για κάθε στοιχείο της ομάδας.
Επίσης όλα τα στοιχεία μιας κλάσης σε μια ομάδα θα συνδέονται με κάποια σχέση της μορφής $B = K^{-1} A K$, που στην αναπαράσταση θα οδηγεί στον ίδιο δείκτη. Το άθροισμα των διαγωνίων όρων θα ονομάζεται χαρακτήρας του στοιχείου για την συγκεκριμμένη αναπαράσταση. Σε κάθε αναπαράσταση θα αντιστοιχεί ένα σύνολο χαρακτήρων, όσος είναι και ο αριθμός των στοιχείων της ομάδας.
Γενικά θα ορίζουμε ως χαρακτήρες μιας αναπαράστασης τις ποσότητες $\chi(g) = Tr\{P_g\}$ για κάθε $g \in G$, όπου P_g είναι οι τελεστές που αντιστοιχούν στα στοιχεία της ομάδας και δρουν στο χώρο L. Αν διαλέξουμε μια βάση $\{e^{(i)}\}$ οι χαρακτήρες θα είναι οι αριθμοί

$$\chi(g) = Tr\{D(g)\} = \sum_{i=1}^{n} \left\langle e^{(i)} \middle| P_g \middle| e^{(i)} \right\rangle = \sum_i D_{ii}(g)$$

δηλαδή το άθροισμα των διαγωνίων όρων των πινάκων.
Προφανώς $\chi(e) = n =$ η διάσταση του χώρου L.

Αν μια αναπαράσταση είναι άθροισμα άλλων αναπαραστάσεων, τότε από τον ορισμό προκύπτει ότι θα ισχύει ότι $\chi(T) = \chi^{(\alpha)}(T) + \chi^{(\beta)}(T) + \ldots + \chi^{(l)}(T)$ αν $D = D^{(\alpha)} + D^{(\beta)} + \ldots + D^{(l)}$.

Αν θεωρήσουμε το γινόμενο δύο αναπαραστάσεων $D = D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$. Για την αναπαράσταση $D^{(\alpha)}$ θα υπάρχει μια βάση $L^{(\alpha)} = \{e^{\alpha}\}$ ώστε για κάθε στοιχείο *T* της ομάδας θα έχουμε ότι $T\{e_i^{(\alpha)}\} = \sum_k D_{ki}^{(a)}(T) e_k^{(a)}$. Αντίστοιχα για την άλλη αναπαράσταση $D^{(\beta)}$ μια άλλη βάση $L^{(\beta)} = \{e^{\beta}\}$ ώστε για το στοιχείο T θα έχουμε ότι $T\{e_i^{(\alpha)}\} = \sum_k D_{ki}^{(a)}(T) e_k^{(a)}$. Για το γινόμενο των αναπαραστάσεων $D = D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$ μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ως βάση το γινόμενο των αντίστοιχων διανυσμάτων βάσης ήτοι,

$$L^{(\alpha)} \times L^{(\beta)} = \{e_i^{(\alpha)} e_j^{(\beta)}\} = \{e_1^{(\alpha)} e_1^{(\beta)}, e_1^{(\alpha)} e_2^{(\beta)}, \ldots, e_1^{(\alpha)} e_{n_\beta}^{(\beta)}, e_2^{(\alpha)} e_1^{(\beta)}, e_2^{(\beta)}, \ldots, e_{n_\alpha}^{(\alpha)} e_{n_\beta}^{(\beta)}\}.$$

Τότε $T\{e_i^{(\alpha)} e_j^{(\beta)}\} = \left(\sum_k D_{ki}(T) e_k^{(\alpha)}\right)\left(\sum_l D_{lj}(T) e_l^{(\beta)}\right) = \sum_{k,l} D_{ki}(T) D_{lj}(T) e_k^{(\alpha)} e_l^{(\beta)}$ και τα διαγώνια στοιχεία στην βάση $e^{(\alpha)} e^{(\beta)}$ θα είναι τα στοιχεία $\sum_{i,j} \left\langle e_i^{(\alpha)} e_j^{(\beta)} \middle| T \middle| e_i^{(\alpha)} e_j^{(\beta)} \right\rangle$, δηλαδή εκείνα όπου *k=i, l=j*, επομένως τα $\sum_i D_{ii}^{(\alpha)}(T) \sum_j D_{jj}^{(\beta)}$. Έτσι θα ισχύει ότι

$$\chi(T) = \sum_m D_{mm}(T) = \sum_{i,j} D_{ii}^{(\alpha)}(T) D_{jj}^{(\beta)}(T) = \sum_i D_{ii}^{(\alpha)} \sum_j D_{jj}^{(\beta)} = \chi^{(\alpha)}(T) \chi^{(\beta)}(T).$$

Δηλαδή οι χαρακτήρες ενός γινομένου αναπαραστάσεων είναι το γινόμενο των αντίστοιχων χαρακτήρων των δύο αναπαραστάσεων. Π.χ. για την ομάδα (32) αν πάρουμε το γινόμενο δύο Γ αναπαραστάσεων $\Gamma \times \Gamma$ τότε $\chi(e) = 2.2 = 4$, $\chi(c_3) = \chi(c_3^2) = 1$, κ.λ.π.

ΙΙ.4 Πίνακας μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων της ομάδας D_3 ή της C_{3v}

Από τις βάσεις συναρτήσεων που παρουσιάστηκαν μπορούμε να συντάξουμε τον πίνακα των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων της ομάδας D_3 (ή της C_{3v})

D	$\{e\}$	$\{c_3\}$	$\{c_3^2\}$	$\{c_2\}(\sigma_v)$	$\{c_2'\}(\sigma_v')$	$\{c_2''\}(\sigma_v'')$
Γ (*E*)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$
A_1 (*I*)	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1	-1

Αν πάρουμε τους χαρακτήρες των πινάκων αναπαράστασης θα δούμε ότι είναι

D	$\{e\}$	$\{c_3\}$	$\{c_3^2\}$	$\{c_2\}$	$\{c_2'\}$	$\{c_2''\}$
Γ (*E*)	2	-1	-1	0	0	0
A_1 (*I*)	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1	-1

Επομένως ως προς τις κλάσεις θα έχουμε για τους χαρακτήρες των αναπαραστάσεων

D	$\{e\}$	$\{c_3, c_3^2\}$	$\{c_2, c_2', c_2''\}$
$\Gamma\,(E)$	2	-1	0
$A_1\,(I)$	1	1	1
A_2	1	1	-1

Παρατηρούμε ότι οι στήλες είναι ορθογώνιες μεταξύ τους. Δηλαδή, αν πολλαπλασιάσουμε τους αντίστοιχους χαρακτήρες των στηλών, το άθροισμά τους είναι μηδέν. Αυτό αποδεικνύεται ότι είναι μια γενική ιδιότητα. Επίσης παρατηρούμε ότι η πρώτη στήλη θα δίνει πάντα την διάσταση της κάθε αναπαράστασης. Τέλος θα δούμε παρακάτω ότι ο αριθμός των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων είναι ίσος με τον αριθμό των κλάσεων (που στην ομάδα D_3 είναι 3). Θα δείξουμε ακόμη ότι γενικά ισχύει ότι

(αριθμός στοιχείων) = 6 = $2^2 + 1^2 + 1^2$*=άθροισμα τετραγώνων χαρακτήρων της {e}*

Με βάση αυτές τις παρατηρήσεις (που θα αποδειχτούν παρακάτω) μπορεί κάποιος να βρη εύκολα πόσες και ποιές είναι οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις για τις απλές ομάδες. Π.χ. από το ότι θα έχουμε τρεις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις διαστάσεων n_1, n_2, n_3 έχουμε ότι $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$ και προκύπτει η μόνη λύση $n_1 = 2$, $n_2 = 1$ και $n_3 = 1$. Αναγκαστικά λοιπόν θα υπάρχει μια 2-διάστατη και δύο μονοδιάστατες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Η μια μονοδιάστατη αναπαράσταση θα είναι πάντα η ταυτοτική A_1 (= I). Επειδή αναγκαστικά οι χαρακτήρες της A_1 θα είναι 1, θα έχουμε τον πίνακα

D	$\{e\}$	$\{c_3, c_3^2\}$	$\{c_2, c_2', c_2''\}$
$\Gamma\,(E)$	2	α	β
$A_1\,(I)$	1	1	1
A_2	1	γ	δ

Εκτός από την ορθογωνιότητα των στηλών ισχύει μια αντίστοιχη σχέση ως προς τις γραμμές. Αυτή θα διατυπωθεί παρακάτω ως $\sum_{g\in G} \chi^{(\alpha)}(g)\chi^{(\beta)}(g) = h\delta_{\alpha\beta}$. Στην περίπτωση που (α)=(β) στους πάνω δείκτες της σχέσης, αυτή υποδηλώνει ότι το άθροισμα των τετραγώνων των χαρακτήρων όλων των στοιχείων της ομάδας ισούται με την τάξη της ομάδας. Έτσι θα πρέπει να ισχύει ότι $2^2 + 2\alpha^2 + 3\beta^2 = 6 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \pm 1$, $\beta = 0$. Επίσης ότι $1^2 + 2\gamma^2 + 3\delta^2 = 6 \quad \Rightarrow \quad \gamma, \delta = \pm 1$. Ακόμη η σχέση για διαφορετικούς πάνω δείκτες $(\alpha)\neq(\beta)$ θα εκφράζει την ορθογωνιότητα των γραμμών. Έτσι απο τις δύο τελευταίες γραμμές θα προκύψει ότι $1 + 2\gamma + 3\delta = 0$, που σε συνδυασμό με τις δυνατές τιμές των γ, δ υποδηλώνει ότι γ = 1 και δ = -1. Από την ορθογωνιότητα των δύο πρώτων στηλών προκύπτει ότι $2\alpha + 1 + \gamma = 0$, που συνεπάγεται ότι α = -1. Τέλος από την ορθογωνιότητα της πρώτης με την τρίτη στήλη προκύπτει ότι $2\beta + 1 + \delta = 0$, άρα β = 0.

ΙΙ.5 Παράδειγμα: Η ομάδα ενός κανονικού τετραγώνου D_4

Τα στοιχεία της ομάδας θα είναι ένας άξονας 4ης τάξης, 4 άξονες 2ας τάξης κατά τους άξονες x, y, x', y' (τα x', y' είναι περιστραμμένα κατά 45°). Ισοδύναμα θα μπορούσαμε να ορίσουμε 4 επίπεδα ανάκλασης (xz, yz, σ_v, σ_u) με την ομάδα C_{4v} που είναι ισόμορφη της D_4. Συνολικά υπάρχουν 8 στοιχεία. Ο συνδυαστικός πίνακας θα είναι ο ακόλουθος,

D_4	e	c_4	c_4^2	c_4^3	c_{2x}	c_{2y}	$c_{2x'}$	$c_{2y'}$
e	e	c_4	c_4^2	c_4^3	c_{2x}	c_{2y}	$c_{2x'}$	$c_{2y'}$
c_4	c_4	c_4^2	c_4^3	e	$c_{2x'}$	$c_{2y'}$	c_{2y}	c_{2x}
c_4^2	c_4^2	c_4^3	e	c_4	c_{2y}	c_{2x}	$c_{2y'}$	$c_{2x'}$
c_4^3	c_4^3	e	c_4	c_4^2	$c_{2y'}$	$c_{2x'}$	c_{2x}	c_{2y}
c_{2x}	c_{2x}	$c_{2y'}$	c_{2y}	$c_{2x'}$	e	c_4^2	c_4^3	c_4
c_{2y}	c_{2y}	$c_{2x'}$	c_{2x}	$c_{2y'}$	c_4^2	e	c_4	c_4^3
$c_{2x'}$	$c_{2x'}$	c_{2x}	$c_{2y'}$	c_{2y}	c_4	c_4^3	e	c_4^2
$c_{2y'}$	$c_{2y'}$	c_{2y}	$c_{2x'}$	c_{2x}	c_4^3	c_4	c_4^2	e

Από τον πίνακα βρίσκουμε ότι υπάρχουν διάφορες υποομάδες όπως : $\{e,c_4^2\},\{e,c_4,c_4^2,c_4^3\},\{e,c_{2x}\},\{e,c_{2y}\},\{e,c_{2x'}\},\{e,c_{2y'}\},\{e,c_4^2,c_{2x},c_{2y}\}$.

Πάλι από τον συνδυαστικό πίνακα βλεπουμε ότι τα στοιχεία $\{c_4,c_4^3\}$ αποτελούν μια κλάση, αφού ο συνδυασμός με οποιοδήποτε άλλο στοιχείο ($P^{-1}AP$) απλά τα εναλλάσσει. Με τον ίδιο τρόπο το στοιχείο $\{c_4^2\}$ αποτελεί μία κλάση. Επίσης κλάσεις είναι οι $\{c_{2x},c_{2y}\}$, $\{c_{2x'},c_{2y'}\}$. Επομένως υπάρχουν 5 κλάσεις (μαζί με το στοιχείο *e*).

Ως προς τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις γνωρίζουμε ότι θα είναι όσες οι κλάσεις δηλαδή 5. Θα πρέπει επίσης να ισχύει ότι $d_1^2+d_2^2+d_3^2+d_4^2+d_5^2=8$, με μοναδική λύση την $d_1=2, d_2=d_3=d_4=d_5=1$. Ο πίνακας των χαρακτήρων θα είναι

	$\{e\}$	$\{c_4^2\}$	$\{c_4,c_4^3\}$	$\{c_{2x},c_{2y}\}$	$\{c_{2x'},c_{2y'}\}$
Γ (ή Ε)	2	α	β	γ	δ
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	ε	ζ	η	θ
B_1	1	ι	κ	λ	μ
B_2	1	ν	ξ	π	ρ

Από την σχέση $\sum_{g\in G}\chi^{(\alpha)}(g)\chi^{(\beta)}(g)=h\delta_{\alpha\beta}$ με ίσους πάνω δείκτες εύκολα προκύπτει ότι όλοι οι χαρακτήρες από το ε μέχρι το ρ θα πρέπει να είναι ±1. Επίσης ότι 1+ ε + 2ζ + 2η +2θ =1+ ι + 2κ + 2λ + 2μ =1+ ν + 2ξ + 2π + 2ρ=0. Αν κάποιο από τα ε, ι, ν ήταν ίσο προς –1, τότε το άθροισμα των άλλων τριών γραμμάτων της αντίστοιχης σειράς θα έπρεπε να είναι μηδέν (π.χ. ζ + η + θ=0). Αυτό όμως είναι αδύνατο αν τα γράμματα αυτά είναι ίσα προς ±1. Επομένως ε=ι=ν=1. Τότε ζ+η+θ=κ+λ+μ=ξ+π+ρ= –1. Οπότε τα δύο από τα στοιχεία θα είναι –1 και το άλλο ίσο προς 1. Από την ορθογωνιότητα των δύο πρώτων στηλών έπεται ότι α = –2. Με βάση την σχέση $2^2+\alpha^2+2\beta^2+2\gamma^2+2\delta^2=8$ προκύπτει επίσης ότι β=γ=δ=0.

Έτσι υπολογίζονται όλα τα στοιχεία του πίνακα που είναι

	e	c_4^2	$[c_4, c_4^3]$	$[c_{2x}, c_{2y}]$	$[c_{2x'}, c_{2y'}]$
Γ (ή Ε)	2	-2	0	0	0
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1

Η συνάρτηση $zf(r)$ της A_2 αναπαράστασης θα είναι αναλλοίωτη όπως εύκολα προκύπτει, από τον έλεγχο των μετασχηματισμών των στοιχείων της ομάδας. Για την αναπαράσταση *Γ* θα μπορούσε να επιλεγεί πάλι το σύνολο των δύο συναρτήσεων $[xf(r), yf(r)]$. Τότε θα είχαν προκύψει και οι παραπάνω χαρακτήρες για κάθε στοιχείο και κλάση. Για την αναπαράσταση A_1 μπορούμε να επιλέξουμε την συνάρτηση $(x^2+y^2)f(r)$, όπως πριν. Μπορούμε επίσης να βρούμε κάποια συνάρτηση που να αλλάζει όπως η αναπαράσταση B_1. Θα πρέπει κατά την c_4^2 να μην αλλάζει. Δηλαδή όταν $x \to -x, y \to -y$ να μένει η ίδια. Άρα θα μπορεί να έχει την μορφή $f(x^2, y^2)$. Έτσι θα ικανοποιεί και το αναλλοίωτο στις πράξεις $c_{2x}(y \to -y)$ και $c_{2y}(x \to -x)$. Θα πρέπει όμως να αλλάζει πρόσημο στις πράξεις $c_4(x \to y, y \to -x)$, $c_4^3(\to -y, y \to x)$, $c_{2x'}(x \to y, y \to x)$ και $c_{2y'}(x \to -y, y \to -x)$. Μια απλή μορφή είναι η $\phi_4 = (x^2 - y^2)f(r)$. Για την αναπαράσταση B_2 θα πρέπει να μην αλλάζει για τις αλλαγές $c_{2x'}(x \to y, y \to x)$, $c_{2y'}(x \to -y, y \to -x)$, ενώ να αλλάζει πρόσημο με τις $c_4(x \to y, y \to -x)$, $c_4^3(\to -y, y \to x)$, $c_{2x}(y \to -y)$, $c_{2y}(x \to -x)$. Μια απλή μορφή είναι η $\phi_5 = xyf(r)$.

Αν είχαμε ξεκινήσει από τον 6-διάστατο χώρο $L = \{x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx\}$, τότε παρατηρούμε ότι στους χαρακτήρες της αναπαράστασης θα συνεισφέρουν μόνο εκείνα τα στοιχεία που μένουν αμετάβλητα ή αλλάζουν πρόσημο (είναι διαγώνια) κατά τους μετασχηματισμούς της ομάδας. Έτσι μπορούν εύκολα να βρεθούν οι χαρακτήρες από τις αλλαγές προσήμου των στοιχείων που μένουν αναλλοίωτα, οπότε

$e: \quad L \to L, \quad tr = 6$

$c_4 : (x \to y, y \to -x, z \to z), \quad L \to \{y^2, x^2, z^2, -xy, -xz, yz\} \quad tr = 0$

$c_4^2 : (x \to -x, y \to -y, z \to z), \quad L \to \{x^2, y^2, z^2, xy, -yz, -xz\} \quad tr = 4 - 2 = 2$

$c_4^3 : (x \to -y, y \to x, z \to z), \quad L \to \{y^2, x^2, z^2, -xy, xz, -yz\} \quad tr = 0$

$c_{2x} : (x \to x, y \to -y, z \to -z), \quad L \to \{x^2, y^2, z^2, -xy, yz, -xz\} \quad tr = 2$

$c_{2y} : (x \to -x, y \to y, z \to -z), \quad L \to \{x^2, y^2, z^2, -xy, -yz, xz\} \quad tr = 2$

$c_{2x'} : (x \to y, y \to x, z \to -z), \quad L \to \{y^2, x^2, z^2, xy, -xz, -yz\} \quad tr = 2$

$c_{2y'} : (x \to -y, y \to -x, z \to -z), \quad L \to \{y^2, x^2, z^2, xy, xz, yz\} \quad tr = 2$

Επομένως θέλουμε να αναλύσουμε τους χαρακτήρες (6,2,0,2,2) αυτής της αναπαράστασης στους χαρακτήρες των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων. Με βάση την ορθογωνιότητα θα ισχύει (όπως ακριβώς αναλύουμε και βρίσκουμε τις συνιστώσες ενός διανύσματος στον καρτεσιανό χώρο):

Για την Γ(Ε) αναπαράσταση

$\frac{2\cdot 6+(-2)\cdot 2+0\cdot 0\cdot 2+0\cdot 2\cdot 2+0\cdot 2\cdot 2}{8}=1$ δηλαδή μια φορά η Γ αναπαράσταση

Για την A_1 αναπαράσταση

$\frac{1\cdot 6+1\cdot 2+1\cdot 0\cdot 2+1\cdot 2\cdot 2+1\cdot 2\cdot 2}{8}=2$ δηλαδή δύο φορές η A_1 αναπαράσταση

Για την A_2 αναπαράσταση

$\frac{1\cdot 6+1\cdot 2+1\cdot 0\cdot 2+(-1)\cdot 2\cdot 2+(-1)\cdot 2\cdot 2}{8}=0$ δηλαδή καμια φορά η A_2 αναπαράσταση

Για την B_1 αναπαράσταση

$\frac{1\cdot 6+1\cdot 2+(-1)\cdot 0\cdot 2+1\cdot 2\cdot 2+(-1)\cdot 2\cdot 2}{8}=1$ δηλαδή μία φορά η B_1 αναπαράσταση

Για την B_2 αναπαράσταση

$\frac{1\cdot 6+1\cdot 2+(-1)\cdot 0\cdot 2+(-1)\cdot 2\cdot 2+1\cdot 2\cdot 2}{8}=1$ δηλαδή μια φορά η B_2 αναπαράσταση

Τελικά $D=\Gamma\oplus 2A_1\oplus \mathrm{B}_1\oplus \mathrm{B}_2$. Βρίσκεται ότι αμετάβλητοι υποχώροι θα είναι οι $B_1: x^2-y^2$, $B_2: 2xy$, $\Gamma:(2xz,2yz)$, $A_1:\frac{2}{\sqrt{15}}\left(x^2+y^2+z^2\right)$, και $A_2:\frac{1}{\sqrt{3}}\left(2z^2-x^2-y^2\right)$, κανονικοποιημένοι στο $16\pi/15$.

ΙΙ.6 Λήμμα του Schur

Για την απόδειξη των σχέσεων ορθογωνιότητας θα χρειαστεί το παρακάτω λήμμα του Schur. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι να διατυπώσουμε αυτό το λήμμα του Schur και ένας μέσω των τελεστών είναι ο ακόλουθος:

Αν A είναι ένας γραμμικός τελεστής ≠ 0, που απεικονίζει στον εαυτό του τον χώρο L μιας μη-αναγώγιμης αναπαράστασης D(G) ομάδας G και ο οποίος αντιμετατίθεται με όλους τους τελεστές P_g της αναπαράστασης, δηλαδή ισχύει ότι $AP_g=P_gA$ για όλα τα P_g όπου $g\in G$, τότε ο τελεστής A είναι πολλαπλάσιο του μοναδιαίου τελεστή A=λe (όπου λ είναι κάποιος μιγαδικός αριθμός).

Μέσω των πινάκων αναπαράστασης, το λήμμα μπορεί να διατυπωθεί πιο ειδικά ως εξής:

Κάθε μη-μηδενικός πίνακας A_{ik} που αντιμετατίθεται με όλους τους πίνακες μιας μη-αναγώγιμης αναπαράστασης, είναι ένα πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα $A_{ik}=\lambda\delta_{ik}$.

Επίσης ισχύει και το αντίστροφο:

Αν ο μόνος μη-μηδενικός πίνακας που αντιμετατίθεται με όλους τους πίνακες μιας αναπαράστασης είναι ίσος προς $\lambda\delta_{ik}$, τότε η αναπαράσταση είναι μη-αναγώγιμη.

Ένας πολύ γενικός τρόπος να εκφραστεί το λήμμα είναι ο παρακάτω:

Αν $\Gamma_{ij}^{(1)}(T)$ και $\Gamma_{ik}^{(2)}(T)$ είναι οι πίνακες δύο μη-αναγώγιμων αναπαράστασεων $\Gamma^{(1)}$, $\Gamma^{(2)}$ (διαστάσεων n_1 και n_2) κάποιας ομάδας G και υπάρχει πίνακας P (τάξης $n_1\times n_2$) ώστε να

ισχύει ότι $P\Gamma^{(1)}(T) = \Gamma^{(2)}P$ για όλα τα στοιχεία της ομάδας ($T \in G$), τότε ισχύει κάποιο από τα ακόλουθα:
(i) Αν οι $\Gamma^{(1)}$ και $\Gamma^{(2)}$ δεν είναι ισοδύναμες αναπαραστάσεις, τότε P=0.
(ii) Αν οι $\Gamma^{(1)}$ και $\Gamma^{(2)}$ είναι ισοδύναμες αναπαραστάσεις, τότε P=0 ή $|P| \neq 0$.
(iii) Αν $\Gamma^{(1)}_{ij}(T) = \Gamma^{(2)}_{ik}(T)$, δηλαδή οι πίνακες αναπαράστασης είναι ίσοι (όχι απλά ισοδύναμοι), τότε P=0 ή P=λI όπου λ είναι σταθερά και I ο μοναδιαίος πίνακας.

<u>Απόδειξη</u>

Έστω n_2 γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα $\hat{u}_i$ που μετασχηματίζονται μεταξύ τους μέσω της αναπαράστασης $\Gamma^{(2)}$, τότε θα πρέπει $T\hat{u}_j = \sum_i \Gamma^{(2)}_{ij}(T)\hat{u}_i$. Ορίζουμε n_1 διανύσματα μέσω της $\hat{\upsilon}_j = \sum_i P_{ij}\hat{u}_i$. Ας υποθέσουμε ότι $n_1 \leq n_2$ (αλλιώς χρησιμοποιούμε τους αντιμεταθέντες πίνακες). Τότε

$$T\hat{\upsilon}_j = \sum_i TP_{ij}\hat{u}_i = \sum_i P_{ij}T\hat{u}_i = \sum_{i,k} P_{ij}\Gamma^{(2)}_{ki}(T)\hat{u}_k = \sum_{i,k} \Gamma^{(2)}_{ki}(T)P_{ij}\hat{u}_k .$$

Όμως $\sum_i P_{ki}\Gamma^{(1)}_{ij}(T) = \sum_i \Gamma^{(2)}_{ki}(T)P_{ij}$. Από τον συνδυασμό των δύο προκύπτει ότι

$$T\hat{\upsilon}_j = \sum_{i,k} P_{ki}\Gamma^{(1)}_{ij}(T)\hat{u}_k = \sum_{i,k} \Gamma^{(1)}_{ij}(T)P_{ki}\hat{u}_k = \sum_i \Gamma^{(1)}_{ij}\hat{\upsilon}_i .$$

Δηλαδή τα διανύσματα $\hat{\upsilon}_i$ μετασχηματίζονται μεταξύ τους με την $\Gamma^{(1)}$ που είναι μη-αναγώγιμη αναπαράσταση. Όμως παραδεχτήκαμε $n_1 \leq n_2$ που αντιβαίνει με την μη-αναγωγιμότητα της αναπαράστασης. Επομένως είτε θα πρέπει P=0 είτε θα πρέπει $n_1 = n_2$.
Αν οι αναπαραστάσεις είναι ισοδύναμες (οπότε και $n_1 = n_2$) τα διανύσματα $\hat{\upsilon}_i$ θα είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Επομένως θα είναι αδύνατο να βρεθούν n_1 αριθμοί α_j, ώστε $\sum_j \alpha_j\hat{\upsilon}_j = 0$. Επίσης δεν υπάρχουν n_1 αριθμοί α_j ώστε $\sum_j \alpha_j P_{ij} = 0$ για όλα τα i. Αλλιώς θα έπρεπε $\sum_j \alpha_j\hat{\upsilon}_j = \sum_{i,j} \alpha_j P_{ij}\hat{u}_i = 0$. Αυτές οι σχέσεις $\sum_j \alpha_j P_{ij} = 0$ δεν θα έχουν λύση παρά μόνο την $\alpha_j = 0$ για όλα τα j, επομένως $|P| \neq 0$.
Αν τέλος $\Gamma^{(1)}_{ij}(T) = \Gamma^{(2)}_{ij}(T)$ και P ≠ 0, τότε μπορούμε να βρούμε λ ≠ 0 ώστε $|P - \lambda I| = 0$.
Έστω Q = P – λI, οπότε $|Q| = 0$.
Ορίζουμε τα διανύσματα $\hat{w}_j = \sum Q_{ij}\hat{u}_i = \sum_i (P_{ij} - \lambda\delta_{ij})\hat{u}_i = \hat{\upsilon}_j - \lambda\hat{u}_j$.
Τότε θα ισχύει ότι $T\hat{w}_j = T(\upsilon_j - \lambda\hat{u}_j) = T\hat{\upsilon}_j - \lambda T\hat{u}_j = \sum_i \Gamma_{ij}(T)\hat{\upsilon}_i - \lambda T\hat{u}_j$.
Όμως $T\hat{u}_j = \sum_i \Gamma^{(2)}_{ij}(T)\hat{u}_i = \sum \Gamma^{(1)}_{ij}(T)\hat{u}_i$.
Έτσι προκύπτει ότι $T\hat{w}_j = \sum_i \Gamma^{(1)}_{ij}(T)\hat{\upsilon}_i - \sum_i \lambda\Gamma^{(1)}_{ij}(T)\hat{u}_i = \sum_i \Gamma^{(1)}_{ij}(\hat{\upsilon}_i - \lambda\hat{u}_i) = \sum_i \Gamma^{(1)}_{ij}\hat{w}_i$.
Επομένως τα w_i θα μετασχηματίζονται μεταξύ τους μέσω της αναπαράστασης $\Gamma^{(1)}$ και για την Q που ορίζει την αλλαγή βάσης θα ισχύει ότι είτε $|Q| \neq 0$, είτε $Q = 0$.

Το πρώτο όμως δεν ισχύει εξ ορισμού του Q, επομένως θα πρέπει Q = P – λI = 0, οπότε και θα πρέπει P = λI, που αποδεικνύει το παραπάνω λήμμα.

II.7 Κανονική αναπαράσταση

Αν επαναδιατάξουμε τον συνδυαστικό πίνακα μιας ομάδας έτσι ώστε τα στοιχεία της διαγωνίου να είναι το ταυτοτικό στοιχείο (τοποθετώντας τα στοιχεία T^{-1} στην αντίστοιχη θέση με το στοιχείο T), τότε προκύπτει η κανονική αναπαράσταση.

Π.χ. για την ομάδα D_3 θα έχουμε με την επαναδιάταξη

D_3	e	c_3	c_3^2	c_2	c_2'	c_2''
e	e	c_3	c_3^2	c_2	c_2'	c_2''
$(c_3)^{-1}$	c_3^2	e	c_3	c_2'	c_2''	c_2
$(c_3^2)^{-1}$	c_3	c_3^2	e	c_2''	c_2	c_2'
$(c_2)^{-1}$	c_2	c_2'	c_2''	e	c_3	c_3^2
$(c_2')^{-1}$	c_2'	c_2''	c_2	c_3^2	e	c_3
$(c_2'')^{-1}$	c_2''	c_2	c_2'	c_3	c_3^2	e

Στην κανονική αναπαράσταση οι πίνακες αναπαράστασης θα είναι 6×6 (γενικά g×g, όπου g είναι ο αριθμός των στοιχείων της ομάδας). Ο πίνακας αναπαράστασης ενός στοιχείου A προκύπτει θέτοντας 0 σε όλες τις θέσεις του συνδυαστικού πίνακα όπου εμφανίζονται όλα τα άλλα στοιχεία και 1 μόνο στις θέσεις που εμφανίζεται το στοιχείο A. Π.χ. για το στοιχείο c_3 της ομάδας D_3 ο πίνακας της κανονικής αναπαράστασης θα είναι

$$D^{reg}(c_3)=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\end{pmatrix},\text{ ενώ } D^{reg}(e)=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\end{pmatrix}=I\,.$$

Γενικά μπορούμε να γράψουμε ότι $D_{ij}^{reg}(A)=1$ όταν $T_i^{-1}T_j=A$ (όπου T_i ορίζουν τα διατεταγμένα στοιχεία της ομάδας), αλλιώς $D_{ij}^{reg}(A)=0$.

Μπορούμε εύκολα να αποδείξουμε ότι οι πίνακες που προκύπτουν αποτελούν μια αναπαράσταση της ομάδας. Αρκεί να δείξουμε ότι $D^{reg}(BC)=D^{reg}(B)D^{reg}(C)$ δηλαδή ότι $D_{ij}^{reg}(BC)=\sum_k D_{ik}^{reg}(B)D_{kj}^{reg}(C)$. Με βάση τον προηγούμενο συμβολισμό αρκεί να ισχύει $D^{reg}(BC)_{T_i^{-1}T_j}=\sum_k D^{reg}(B)_{T_i^{-1}T_k}D^{reg}(C)_{T_k^{-1}T_j}$.

Το άθροισμα θα έχει όρους που είναι γινόμενα δύο αριθμών, που είναι είτε 0 είτε 1. Επειδή κάθε γραμμή ή στήλη έχει ένα μόνο στοιχείο ίσο προς 1 και τα άλλα είναι 0, για να είναι το άθροισμα ≠0, θα πρέπει και $B = T_i^{-1}T_k$ και $C = T_k^{-1}T_j$ για κάποιο k. Δηλαδή θα πρέπει $BC = T_i^{-1}T_kT_k^{-1}T_j = T_i^{-1}T_j$, που συμπίπτει με τον ορισμό του αριστερά μέρους της παραπάνω σχέσης $D^{reg}(BC)_{T_i^{-1}T_j}$. Επομένως οι πίνακες που ορίζονται με τον τρόπο αυτό αποτελούν μια αναπαράσταση της ομάδας.

Είναι προφανές ότι οι χαρακτήρες όλων των στοιχείων πλην του e θα είναι μηδέν, αφού το 1 εμφανίζεται μόνο σε μη-διαγώνια στοιχεία στους πίνακες της κανονικής αναπαράστασης. Επίσης προφανώς ισχύει ότι $\chi^{reg}(e) = g$ =(αριθμός στοιχείων ομάδας), Αυτή η αναπαράσταση θα είναι αναγώγιμη. Εύκολα μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό εμφάνισης της κάθε μη-αναγώγιμης αναπαράστασης στην κανονική αναπαράσταση. Αυτή θα προκύψει, κατά τα γνωστά, από την ανάλυση με βάση τους χαρακτήρες. Έτσι έχουμε ότι ο αριθμός λ_j εμφάνισης μη-αναγώγιμης αναπαράστασης j

$\lambda_j = \frac{1}{g}\sum_T \chi^j(T)^* \chi^{reg}(T) = \frac{1}{g}\chi^j(e)^* \chi^{reg}(e) = \chi^j(e)^* = n_j =$ (διάσταση μη-αναγώγιμης αναπαράστασης).

Δηλαδή κάθε μία μη-αναγώγιμη αναπαράσταση εμφανίζεται στην κανονική αναπαράσταση, τόσες φορές όση είναι η διάστασή της.

Επομένως $D^{reg} = n_1D^{(1)} + n_2D^{(2)} + \ldots + n_rD^{(r)}$, όπου r είναι ο αριθμός των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων της ομάδας. Όμως η διάσταση της (κανονικής) αναπαράστασης θα πρέπει να ισούται με το άθροισμα των διαστάσεων των επί μέρους μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων που την αποτελούν. Δηλαδή θα πρέπει να ισχύει ότι

$$\boxed{g = n_1^2 + n_2^2 + \ldots + n_r^2 = \sum_{j=1}^{j=r} n_j^2}.$$

Προκύπτει ότι η διάσταση της κάθε μη-αναγώγιμης αναπαράστασης $n_j \le \sqrt{g}$ (μέγιστη διάσταση μη-αναγώγιμης αναπαράστασης).

II.8 1η σχέση ορθογωνιότητας

Αν θεωρήσουμε τον πίνακα $P = \sum_{T\in G} D^{(\lambda)}(T^{-1})CD^{(\mu)}(T)$, όπου το άθροισμα επεκτείνεται σε όλα τα στοιχεία της ομάδας G. Έστω ότι $D^{(\lambda)}$ και $D^{(\mu)}$ είναι δύο μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις και C είναι ένας οποιοσδήποτε πίνακας κατάλληλων διαστάσεων ώστε να ισχύει το γινόμενο των πινάκων. Τότε θα ισχύει ότι

$$PD^{(\mu)}(S) = \sum_T D^{(\lambda)}(T^{-1})CD^{(\mu)}(T)D^{(\mu)}(S) = \sum_T D^{(\lambda)}(T^{-1})CD^{(\mu)}(TS)$$

αφού θα ισχύει ότι $D(T)D(S) = D(TS)$ για κάθε αναπαράσταση. Επίσης θα ισχύει ότι

$$PD^{(\mu)}(S) = D^{(\lambda)}(S)D^{(\lambda)}(S^{-1})\sum_T D^{(\lambda)}(T^{-1})CD^{(\mu)}(TS) = D^{(\lambda)}(S)\sum_T D^{(\lambda)}(S^{-1}T^{-1})CD^{(\mu)}(TS) =$$

$$= D^{(\lambda)}(S)\sum_{T\in G} D^{(\lambda)}\left[(TS)^{-1}\right]CD^{(\mu)}(TS) = D^{(\lambda)}(S)\sum_{A\in G} D^{(\lambda)}\left[(A)^{-1}\right]CD^{(\mu)}(A) = D^{(\lambda)}(S)P$$

Δηλαδή ικανοποιείται το λήμμα του Schur, άρα θα πρέπει είτε P=0 αν είναι οι $D^{(\lambda)}$ και $D^{(\mu)}$ δεν είναι ίδιες, είτε $P=\lambda_C I$ αν οι $D^{(\lambda)}$ και $D^{(\mu)}$ είναι ίδιες (το λ_C θα εξαρτάται από τον πίνακα C). Επειδή ο πίνακας C είναι εντελώς αυθαίρετος, ας θεωρήσουμε ότι όλα του τα στοιχεία είναι μηδέν εκτός από ένα που ισούται με την μονάδα (C_{ij}=1). Τότε θα πρέπει

$$P_{kl}^{(ij)} = \sum_T D_{ki}^{(\lambda)}(T^{-1})D_{jl}^{(\mu)}(T) = \lambda_{ij}\delta_{kl}\delta_{\lambda\mu}$$

Όταν $D^{(\lambda)}= D^{(\mu)}$ τότε $\sum_T D_{ki}^{(\lambda)}(T^{-1})D_{jl}^{(\lambda)}(T) = \lambda_{ij}\delta_{kl}$ και $\sum_T D_{ki}^{(\lambda)}(T^{-1})D_{jk}^{(\lambda)}(T) = \lambda_{ij}$.

Αθροίζοντας ως προς k θα έχουμε ότι

$$\sum_k\sum_T D_{ki}^{(\lambda)}(T^{-1})D_{jk}^{(\lambda)}(T) = \sum_T\sum_k D_{ki}^{(\lambda)}(T^{-1})D_{jk}^{(\lambda)}(T) = \sum_T D_{ji}^{(\lambda)}(e) = g\delta_{ij} = \sum_k \lambda_{ij} = n_\lambda \lambda_{ij}$$

όπου g είναι ο αριθμός των στοιχείων της ομάδας και n_λ η διάσταση της αναπαράστασης. Αν η αναπαράσταση είναι μοναδιαία (unitary), τότε θα πρέπει

$$D^{(\lambda)}(T^{-1}) = \left[D^{(\lambda)}(T)\right]^{-1} = \left[D^{(\lambda)}(T)\right]^{*}_{transpose} \quad\Rightarrow\quad D_{ki}^{(\lambda)-1}(T) = D_{ik}^{(\lambda)*}(T)$$

Αντικαθιστώντας την τιμή της σταθεράς λ_{ij} που προέκυψε, βρίσκουμε τελικά ότι

$$\boxed{\sum_T D_{ik}^{(\lambda)*}(T)D_{jl}^{(\mu)}(T) = \frac{g}{n_\lambda}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{\lambda\mu}},$$

που αποτελεί την *1η σχέση ορθογωνιότητας*.

Αν θέσουμε $l=j$ και $k=i$ προκύπτει ότι $\sum_T D_{ii}^{(\lambda)*}(T)D_{jj}^{(\mu)}(T) = \frac{g}{n_\lambda}\delta_{ij}\delta_{\lambda\mu}$ και αν αθροίσουμε ως προς i και j, θα έχουμε για τους χαρακτήρες ότι

$$\boxed{\sum_T \chi^{(\lambda)*}(T)\chi^{(\mu)}(T) = g\delta_{\lambda\mu}},$$

που αποτελεί την σχέση ορθογωνιότητας χαρακτήρων των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων.

Παρατηρούμε ότι τα $\chi^{(\lambda)}(T)$ για τα διάφορα λ συμπεριφέρονται ως ορθογώνια διανύσματα σε έναν g-διάστατο χώρο. Αν επομένως έχουμε μια τυχαία αναγώγιμη αναπαράσταση, αυτή θα μπορεί να αναλυθεί στα διανύσματα αυτά με έναν μοναδικό τρόπο. Δηλαδή αν $D(T) = D^{(\alpha)}(T) + D^{(\beta)}(T) + \ldots + D^{(\varepsilon)}(T) = \sum_l c_l D^{(l)}(T)$, με τους αντίστοιχους χαρακτήρες $\chi(T) = \chi^{(\alpha)}(T) + \chi^{(\beta)}(T) + \ldots + \chi^{(\varepsilon)}(T) = \sum_l c_l \chi^{(l)}$, τότε θα έχουμε ότι

$$\sum_T \chi(T)\chi^{(\lambda)*}(T) = \sum_T\sum_l c_l\chi^{(l)}(T)\chi^{(\lambda)*}(T) = \sum_l c_l \sum_T \chi^{(l)}(T)\chi^{(\lambda)*}(T) = \sum_l c_l g\delta_{\lambda l} = gc_\lambda$$

δηλαδή $c_\lambda = \frac{1}{g}\sum \chi^{(\lambda)*}(T)\chi(T)$.

Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να βρούμε την ανάλυση μιας αναπαράστασης στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

ΙΙ.9 Τελεστές προβολής

Με ποιό τρόπο όμως μπορούμε να διαλέξουμε τα διανύσματα βάσης, που μετασχηματίζονται με τις διάφορες αναπαραστάσεις; Έστω $D_{ij}^{(\lambda)}(T)$ κάποια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση και φ κάποιο διάνυσμα στον χώρο L. Δημιουργούμε τα διανύσματα $\varphi_{ij}^{(\lambda)} = \sum_T D_{ij}^{(\lambda)*}(T)\left(\hat{T}\varphi\right)$ για κάποια i και j. Τότε θα ισχύει ότι

$$\hat{A}\varphi_{ij}^{(\lambda)} = \sum_T D_{ij}^{(\lambda)*}(T)\left(\hat{A}\hat{T}\varphi\right) = \sum_l \delta_{il} \sum_T D_{lj}^{(\lambda)*}(T)\left(\hat{A}\hat{T}\varphi\right) = \sum_{k,l} D_{ik}^{(\lambda)*}(A^{-1}) D_{kl}^{(\lambda)*}(A) \sum_T D_{lj}^{(\lambda)*}(T)\left(\hat{A}\hat{T}\varphi\right) =$$

$$= \sum_k D_{ik}^{(\lambda)*}(A^{-1}) \sum_T D_{kj}^{(\lambda)*}(AT)\left(\hat{A}\hat{T}\varphi\right) = \sum_k D_{ik}^{(\lambda)*}(A^{-1})\varphi_{kj}^{(\lambda)} = \sum_k D_{ki}^{(\lambda)}(A)\varphi_{kj}^{(\lambda)}$$

δηλαδή τα διανύσματα $\varphi_{ij}^{(\lambda)}$ του L μετασχηματίζονται μεταξύ τους (για κάθε i) σύμφωνα με την μη-αναγώγιμη αναπαράσταση $D^{(\lambda)}(T)$. Θέτοντας $i=j$ και αθροίζοντας προκύπτει

$$\sum_i \varphi_{ii}^{(\lambda)} = \varphi^{(\lambda)} = \sum_i \sum_T D_{ii}^{(\lambda)*}(T)\left(\hat{T}\varphi\right) = \sum_T \chi^{(\lambda)*}(T)\hat{T}\varphi$$

Οι ποσότητες $P_{ij}^{(\lambda)} \equiv \sum_T D_{ij}^{(\lambda)*}(T)\,\hat{T}$ και $P^{(\lambda)} \equiv \sum_T \chi^{(\lambda)*}(T)\,\hat{T}$ ονομάζονται τελεστές προβολής, γιατί από κάποιο διάνυσμα φ επιλέγουν το μέρος εκείνο που κείται (μετασχηματίζεται) σε έναν υποχώρο μιας αναπαράστασης.

Για την ομάδα D_3 οι τελεστές προβολής $P_{ij}^{(\lambda)} \equiv \sum_T D_{ij}^{(\lambda)*}(T)\,\hat{T}$ προκύπτει σχετικά εύκολα ότι θα είναι οι ακόλουθοι:

$$\hat{P}^{(A_1)} = \hat{P}_e + \hat{P}_{c_3} + \hat{P}_{c_3^2} + \hat{P}_{c_2} + \hat{P}_{c_2'} + \hat{P}_{c_2''},\ \hat{P}^{(A_2)} = \hat{P}_e + \hat{P}_{c_3} + \hat{P}_{c_3^2} - \hat{P}_{c_2} - \hat{P}_{c_2'} - \hat{P}_{c_2''},$$

$$\hat{P}_{11}^{(\Gamma)} = \hat{P}_e - \hat{P}_{c_2} + \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{c_2'} + \hat{P}_{c_2''} - \hat{P}_{c_3} - \hat{P}_{c_3^2}\right),\ \hat{P}_{12}^{(\Gamma)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\hat{P}_{c_3^2} - \hat{P}_{c_3} + \hat{P}_{c_2'} - \hat{P}_{c_2''}\right),$$

$$\hat{P}_{21}^{(\Gamma)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\hat{P}_{c_3} - \hat{P}_{c_3^2} + \hat{P}_{c_2'} - \hat{P}_{c_2''}\right),\ \hat{P}_{22}^{(\Gamma)} = \hat{P}_e + \hat{P}_{c_2} - \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{c_2'} + \hat{P}_{c_2''} + \hat{P}_{c_3} + \hat{P}_{c_3^2}\right)$$

ΙΙ.10 2η σχέση ορθογωνιότητας

Αν πολλαπλασιάσουμε τα δύο μέρη της πρώτης σχέσης ορθογωνιότητας $\sum_{A\in G} D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{kl}^{(\lambda)*}(A) = \frac{g}{n_\mu}\delta_{jl}\delta_{ik}\delta_{\lambda\mu}$ με την ποσότητα $\eta_\mu D_{ji}^{(\mu)-1}(B)$ και αθροίσουμε ως προς τα μ, i, j θα προκύψει ότι

$$\sum_{i,j,\mu,A} n_\mu D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ji}^{(\mu)-1}(B) D_{kl}^{(\lambda)*}(A) = g D_{lk}^{(\lambda)-1}(B) = \sum_{i,j,\mu,A} n_\mu D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ji}^{(\mu)-1}(B) D_{lk}^{(\lambda)-1}(A)$$

Αυτό για να ισχύει για κάθε B θα πρέπει να ισχύει ότι

$$\boxed{\sum_{i,j}\sum_\mu n_\mu D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ji}^{(\mu)-1}(B) = \sum_{i,j}\sum_{\mu=1}^{r'} n_\mu D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ij}^{(\mu)*}(B) = g\delta_{AB}}.$$

Αυτή η 2η σχέση ορθογωνιότητας εκφράζει την ορθογωνιότητα των στηλών στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

Παρόμοια από την 1η σχέση ορθογωνιότητας των χαρακτήρων βρίσκουμε ότι

$$\boxed{\sum_T \chi^{(\lambda)*}(T)\chi^{(\mu)}(T) = g\delta_{\lambda\mu} = \sum_{a=1}^{r} n_a \chi^{(\lambda)*}(K_a)\chi^{(\mu)}(K_a)}$$

όπου K_a είναι ένα στοιχείο από την a κλάση, r είναι ο αριθμός των κλάσεων της ομάδας και n_a ο αριθμός των στοιχείων της a κλάσης.
Η ορθογωνιότητα εκφράζει πάλι έναν r-διάστατο διανυσματικό χώρο r' με ορθογώνια διανύσματα $\chi^{(\mu)}(K_a)\sqrt{n_a}$, που είναι γραμμικώς ανεξάρτητα.
Πολλαπλασιάζοντας την παραπάνω σχέση με $\chi^{(\mu)*}(K_b)$ και αθροίζοντας ως προς μ βρίσκουμε ότι

$$\sum_{a=1}^{r}\sum_{\mu} n_a \chi^{(\mu)}(K_a)\chi^{(\mu)*}(K_b)\chi^{(\lambda)*}(K_a) = g\chi^{(\lambda)*}(K_b)$$

Αυτό μπορεί να ισχύει μόνο αν $\boxed{\sum_{\mu=1}^{r'} \chi^{(\mu)}(K_a)\chi^{(\mu)*}(K_b) = \frac{g}{n_a}\delta_{ab}}$, που εκφράζει την ορθογωνιότητα του πίνακα χαρακτήρων, αν r' είναι ο αριθμός των μη-ισοδύναμων αναπαραστάσεων.
Για την ομάδα D_3 χρησιμοποιήσαμε προηγουμένως την ορθογωνιότητα αυτή για τον υπολογισμό των χαρακτήρων των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων.

Τα διανύσματα που ορίζονται από τις στήλες (που είναι όσες ο αριθμός των κλάσεων) θα ορίζουν ένα σύστημα ορθοδιανυσμάτων σε έναν χώρο από r συναρτήσεις. Επομένως ο αριθμός των μη-ισοδύναμων αναπαραστάσεων r' θα είναι $\leq r$ (αριθμός στηλών και κλάσεων). Όμως είχαμε βρη ότι ισχύει επίσης ότι $\sum_{T} \chi^{(\lambda)*}(T^{-1})\chi^{(\mu)}(T) = g\delta_{\lambda\mu}$, που αν την ξαναγράψουμε ως προς τις κλάσεις θα έχει την μορφή $\sum_{a=1}^{r} n_a \chi^{(\lambda)*}(K_a)\chi^{(\mu)}(K_a) = g\delta_{\lambda\mu}$. Δηλαδή τα r' γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα των χαρακτήρων των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων θα βρίσκονται σε έναν r-διάστατο χώρο. Στον χώρο αυτό μπορούμε να ορίσουμε τα ορθοκανονικοποιημένα διανύσματα $\sqrt{\frac{n_a}{g}}\chi^{(\lambda)}(K_a)$. Προφανώς ο αριθμός r' των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων της ομάδας θα ικανοποιεί την σχέση $r' \leq r$ γιατί στον χώρο με άξονες τις κλάσεις, τα γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα δεν μπορεί να είναι περισσότερα από την διάσταση του χώρου.

Ταυτόχρονα από την σχέση $\sum_{a=1}^{r} n_a \chi^{(\lambda)*}(K_a)\chi^{(\mu)}(K_a) = g\delta_{\lambda\mu}$ συνεπάγεται ότι θα έχουμε r γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα σε έναν χώρο με r' διαστάσεις, όπου $r \leq r'$. Επομένως θα πρέπει τελικά $\boxed{r = r'}$.

Δηλαδή ο αριθμός των διαφορετικών (μη-ισοδύναμων) μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων μιας πεπερασμένης ομάδας είναι ίσος με τον αριθμό των κλάσεων.

<u>*Παραδείγματα ορθογωνιότητας από την ομάδα D_3.*</u>

Η σχέση $\sum_{T} D_{ik}^{(\lambda)*}(T^{-1})D_{jl}^{(\mu)}(T) = \frac{g}{n_\lambda}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{\lambda\mu}$ για την Γ μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας D_3 (λ=μ, n_λ=2) σημαίνει ότι τα αντίστοιχα στοιχεία είναι ορθογώνια, δηλαδή τα $\left(1,-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$, $\left(0,-\frac{\sqrt{3}}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0,\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$, $\left(0,\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2},0,\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$, $\left(1,-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1,-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ της Γ αναπαράστασης και τα A_1(1,1,1,1,1,1), A_2(1,1,1,-1,-1,-1) είναι ορθογώνια μεταξύ τους. Επί πλέον το τετράγωνο του μέτρου τους για τα 4 της Γ θα είναι 6/2=3, ενώ στις A_1 και A_2 είναι 6/1=6.

Η άλλη σχέση $\sum_{i,j}\sum_{\mu} n_{\mu} D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ji}^{(\mu)-1}(B) = \sum_{i,j}\sum_{\mu} n_{\mu} D_{ij}^{(\mu)}(A) D_{ij}^{(\mu)*}(B) = g\delta_{AB}$ σημαίνει ότι πρέπει να πολλαπλασιάζονται τα αντίστοιχα στοιχεία δύο στηλών και να προστίθενται λαμβάνοντας υπόψη την διάσταση της κάθε αναπαράστασης. Π.χ. για Α=e και Β=c_3 θα έχουμε $2\cdot\left[1\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)+0\cdot\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+0\cdot\frac{\sqrt{3}}{2}+1\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)\right]+1\cdot 1+1\cdot 1=0$ κλπ.

Δηλαδή τα διανύσματα $\left[\sqrt{2}(1,0,0,1),1,1\right]$, $\left[\sqrt{2}\left(-\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right),1,1\right]$, $\left[\sqrt{2}\left(-\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right),1,1\right]$, $\left[\sqrt{2}(-1,0,0,1),1,-1\right]$, $\left[\sqrt{2}\left(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right),1,-1\right]$ και $\left[\sqrt{2}\left(\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right),1,-1\right]$ είναι ορθογώνια μεταξύ τους και το τετράγωνο του μέτρου τους είναι ίσο προς 6 (=g).

Εύκολα βρίσκουμε από τους τελεστές προβολής ότι π.χ. $\hat{P}_e\left[x^2\right]=x^2$, $\hat{P}_{c_3}\left[x^2\right]=\left(-\frac{x}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2=\frac{x^2}{4}+\frac{3y^2}{4}+\frac{\sqrt{3}}{2}xy$, $\hat{P}_{c_3^2}\left[x^2\right]=\frac{x^2}{4}+\frac{3y^2}{4}-\frac{\sqrt{3}}{2}xy$, $\hat{P}_{c_2}\left[x^2\right]=x^2$, $\hat{P}_{c_2'}\left[x^2\right]=\frac{x^2}{4}+\frac{3y^2}{4}+\frac{\sqrt{3}}{2}xy$ και $\hat{P}_{c_2''}\left[x^2\right]=\frac{x^2}{4}+\frac{3y^2}{4}-\frac{\sqrt{3}}{2}xy$. Επομένως θα έχουμε ότι $\widehat{P}^{(A_1)}\left[x^2\right]=3(x^2+y^2)=\widehat{P}^{(A_1)}\left[y^2\right]$, ενώ $\widehat{P}^{(A_2)}\left[x^2\right]=0$. Επίσης $\widehat{P}^{(A_1)}\left[xy\right]=0=\widehat{P}^{(A_2)}\left[xy\right]$. Ακόμη ότι $\widehat{P}_{22}^{(\Gamma)}\left[x^2\right]=\frac{3}{2}\left(x^2-y^2\right)$, $\widehat{P}_{11}^{(\Gamma)}\left[x^2\right]=\widehat{P}_{12}^{(\Gamma)}\left[x^2\right]=0$, και $\widehat{P}_{21}^{(\Gamma)}\left[x^2\right]=3xy$.

III. ΟΜΑΔΕΣ ΣΗΜΕΙΟΥ

III.1 Ορισμός ομάδων σημείου

Θα ψάξουμε να βρούμε εκείνες τις πράξεις συμμετρίας, που αφήνουν κάποιο σημείο σταθερό και την απόσταση μεταξύ δύο σημείων του χώρου αναλλοίωτη. Αυτές θα ορίσουν μια σειρά από ομάδες, που ονομάζονται ομάδες σημείου.

Ας θεωρήσουμε την αρχή των αξόνων ως σταθερό σημείο. Οι πράξεις συμμετρίας μπορεί να είναι περιστροφές γύρω από κάποιο άξονα που περνά από το σταθερό σημείο, ανακλάσεις ως προς επίπεδα που διέρχονται από το σημείο, αντιστροφή ως προς το σημείο, ή γινόμενα αυτών των πράξεων.

Τις περιστροφές ως προς άξονα κατά γωνία $\varphi_n = {}^{2\pi}\!/_{n}$ τις συμβολίζουμε με c_n και λέμε ότι έχουμε έναν άξονα συμμετρίας n-τάξης, γιατί μετά από n διαδοχικές πράξεις επιστρέφουμε στην αρχική θέση. Δηλαδή θα ισχύει ότι $(c_n)^n = c_n^n = e$. Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι θα ισχύει επίσης ότι $c_n^m c_n^l = c_n^l c_n^m = c_n^{m+l}$. Τα στοιχεία που αποτελούν τις διαδοχικές περιστροφές κατά γωνία φ_n θα ανήκουν σε μια αβελιανή ομάδα. Για να είμαστε πιο ακριβείς, συνήθως ορίζουμε και την διεύθυνση του άξονα συμμετρίας. Έτσι π.χ. $c_n(z) \equiv c_{nz}$ υποδηλώνει περιστροφή γύρω από τον άξονα z κατά γωνία $2\pi/n$.

Οι ανακλάσεις ως προς ένα επίπεδο συμβολίζονται με σ και προφανώς θα ισχύει ότι $\sigma^2 = e$. Δηλαδή θα υπάρχει μια άλλη ομάδα με δύο στοιχεία $\{e, \sigma\}$. Αν ορίσουμε και το επίπεδο ανάκλασης, μπορούμε να γράψουμε ότι $\sigma(z) \equiv \sigma_z$, υποδηλώνοντας ανάκλαση ως προς επίπεδο κάθετο στον άξονα z (δηλαδή επίπεδο παράλληλο στο xy).

Σε ένα ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων xyz, μια περιστροφή ως προς τον άξονα z κατά γωνία φ μπορεί να αναπαρασταθεί μέσω των σχέσεων

$$\left.\begin{aligned} x' &= x\cos\varphi - y\sin\varphi \\ y' &= x\sin\varphi + y\cos\varphi \\ z' &= z \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = c(\varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Δηλαδή η πράξη συμμετρίας $c(\varphi)$ θα ορίζεται μέσω του παραπάνω πίνακα.

Με παρόμοιο τρόπο η ανάκλαση ως προς επίπεδο yz θα παρίσταται με τον πίνακα,

$$\left.\begin{aligned} x' &= -x \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \sigma_x \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Επί πλέον στοιχεία συμμετρίας μπορούν να δημιουργηθούν από γινόμενα περιστροφών ή ανακλάσεων, π.χ. $\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = i$ ή $J =$ αντιστροφή.

Το γινόμενο μιας περιστροφής κατά γωνία $\varphi_n = 2\pi/n$ και μιας ανάκλασης ονομάζεται κατοπτρική περιστροφή και συμβολίζεται με το s_n. Αυτή περιγράφει ανάκλαση ως προς οριζόντιο επίπεδο που είναι κάθετο στον κατακόρυφο άξονα περιστροφής. Θα ισχύει ότι

$s_n = c_n \cdot \sigma_h = \sigma_h \cdot c_n, \quad \Rightarrow \quad s_n^m = \begin{cases} c_n^m & m = \alpha\rho\tau\iota o\varsigma \\ c_n^m \cdot \sigma_h & m = \pi\varepsilon\rho\iota\tau\tau o\varsigma \end{cases}$. Επομένως θα ισχύει ότι

$s_n^n = \begin{cases} e & m = \alpha\rho\tau\iota o\varsigma \\ \sigma_h & m = \pi\varepsilon\rho\iota\tau\tau o\varsigma \end{cases}$, και πάντα ότι $s_n^{2n} = e$, δηλαδή ότι η τάξη του s_n είναι $2n$, όταν το n είναι περιττός αριθμός.

Συχνά αντί της κατοπτρικής περιστροφής χρησιμοποιείται η περιστροφή-αντιστροφή

$i_n = c_n \cdot i = i \cdot c_n, \quad \Rightarrow \quad i_n^m = \begin{cases} c_n^m & m = \alpha\rho\tau\iota o\varsigma \\ c_n^m \cdot i & m = \pi\varepsilon\rho\iota\tau\tau o\varsigma \end{cases}$ και $i_n^n = \begin{cases} e & m = \alpha\rho\tau\iota o\varsigma \\ i & m = \pi\varepsilon\rho\iota\tau\tau o\varsigma \end{cases}$, ενώ πάντα θα ισχύει ότι $i_n^{2n} = e$.

Οι σχέσεις ανάμεσά τους θα είναι

$i = i_1 = s_2$ όπως φαίνεται αμέσως (περιστροφή κατά 180^o και ανάκλαση ισοδυναμεί με αντιστροφή ως προς την αρχή των αξόνων)

$i_2 = s_1 = \sigma_h$ περιστροφή κατά 180^o και αντιστροφή ισοδυναμεί με ανάκλαση

$$i_4^m = c_4^m \cdot i^m = c_4^m \cdot s_2^m = c_4^m \cdot c_2^m \cdot \sigma_h^m = c_4^m \cdot c_4^{2m} \cdot \sigma_h^m = c_4^{3m} \cdot \sigma_h^m = c_4^{4-m} \cdot \sigma_h^{4-m} = s_4^{4-m},$$

$$i_3^m = c_3^m \cdot i^m = c_3^m \cdot s_2^m = c_3^m \cdot c_2^m \cdot \sigma_h^m = c_6^{2m} \cdot c_6^{3m} \cdot \sigma_h^m = c_6^{5m} \cdot \sigma_h^m = c_6^{6-m} \cdot \sigma_h^{6-m} = s_6^{6-m},$$

$$i_6^m = c_6^m \cdot i^m = c_6^m \cdot s_2^m = c_6^m \cdot c_2^m \cdot \sigma_h^m = c_6^m \cdot c_6^{3m} \cdot \sigma_h^m = c_6^{4m} \cdot \sigma_h^m = c_3^{2m} \cdot \sigma_h^m = c_3^{6-m} \cdot \sigma_h^{6-m} = s_3^{6-m}$$

Ως προς τις ανακλάσεις, υπάρχουν τριών ειδών:

σ_h: ανακλάσεις ως προς επίπεδο κάθετο στον n-στης τάξης άξονα περιστροφής

σ_v: ανακλάσεις ως προς επίπεδο που περιλαμβάνει τον κύριο άξονα συμμετρίας

σ_d: ανακλάσεις ως προς επίπεδο που περιλαμβάνει τον κύριο άξονα συμμετρίας, αλλά διχοτομεί την γωνία ανάμεσα στους δευτερεύοντες άξονες συμμετρίας.

ΙΙΙ.2 Ομάδες συμμετρίας σημείου

Μια 3-διάστατη ομάδα περιστροφής είναι εκείνη που αφήνει αμετάβλητα ένα σημείο και όλες τις γωνίες και αποστάσεις ενός Ευκλείδιου χώρου. Αν υπάρχουν μόνο περιστροφές, τότε ονομάζεται ομαλή (κανονική) ομάδα περιστροφών, που είναι ισόμορφη με την υποομάδα SO(3) = R(3) όλων των ορθογώνιων πινάκων 3×3 με ορίζουσα ίση προς 1. Το γινόμενο μιας ομαλής ομάδας με την ομάδα αντιστροφής $C_i=\{e,i\}$ παράγει την μη-κανονική ομάδα περιστροφών, που περιλαμβάνει κανονικές περιστροφές και περιστροφοαντιστροφές. Αυτή η ομάδα είναι ισόμορφη με την O(3) = C_i × SO(3) όλων των ορθογώνιων πινάκων.

[Ορθογώνιοι ονομάζονται οι πίνακες Α εκείνοι για τους οποίους ισχύει ότι $|A| = \pm 1$.]

Οι ομάδες SO(3) και O(3) ονομάζονται ομαλές (κανονικές) και μη-ομαλές (μη-κανονικές) ομάδες περιστροφών αντίστοιχα.

Οι ομαλές ομάδες σημείου περιγράφουν τις συμμετρίες που αφήνουν αμετάβλητο ένα μόριο (ή την στοιχειώδη κυψελίδα ενός στερεού). Για τον συμβολισμό τους υπάρχουν δύο δυνατότητες: ο συμβολισμός του Schönflies που ακολουθείται από τους φασματομέτρες και ο διεθνής συμβολισμός των Hermann-Mauguin, που χρησιμοποιείται κύρια από τους κρυσταλλογράφους. Στον διεθνή συμβολισμό χρησιμοποιούνται τα κύρια στοιχεία συμμετρίας της ομάδας (π.χ. οι γεννήτορες). Έτσι ένας άξονας συμμετρίας n-τάξης κανονικών περιστροφών συμβολίζεται με *n*, ενώ ένας μη-κανονικός με $\overline{n}$. Ένα επίπεδο ανάκλασης με τον δείκτη m και γράφεται σε συνδυασμό με το n ως *nm* ή *n*/*m* όταν αναφέρεται σε ανάκλαση ως προς οριζόντιο επίπεδο.

III.3 Οι κανονικές ομάδες σημείου

i) Οι κυκλικές ομάδες περιστροφής C_n (*n* στην διεθνή σύμβαση) περιλαμβάνουν n στοιχεία, δηλαδή τις δυνάμεις του γεννήτορα στοιχείου c_n

$$C_n = \{c_n^m | m = 0,1,2,\ldots,n-1\} = \{e, c_n, c_n^2, \ldots, c_n^{n-1}\}$$

Αυτά περιγράφουν ένα κανονικό πολύγωνο με n κορυφές, ένα ορθό πρίσμα με n ακμές και είναι μια αβελιανή ομάδα. Κάθε στοιχείο της ομάδας αποτελεί μια κλάση από μόνη της.

ii) Οι ομάδες των διέδρων D_n (*n*22 για άρτιο n και *n*2 για n περιττό) περιγράφουν τα στοιχεία συμμετρίας που αποτελούνται από έναν άξονα συμμετρίας n-τάξης και ακόμη n τον αριθμό 2^{ας} τάξης άξονες κάθετους στον κύριο άξονα και σε γωνίες π/n ο ένας με τον άλλο (απ' όπου και ο συμβολισμός των Hermann-Mauguin). Είναι φανερό ότι εκφράζει ορισμένα στοιχεία συμμετρίας που αφήνουν αμετάβλητο ένα ορθό πρίσμα με βάση ένα κανονικό n-γωνο. Τα στοιχεία της ομάδας D_n είναι,

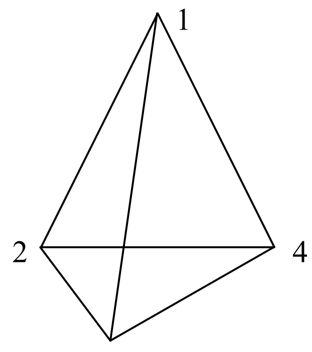
$$D_n = \{c_n^m; c_2, c_2', c_2', \ldots\}, \text{ όπου } c_n^n = c_2^2 = c_2'^2 = c_2''^2 = \ldots = (c_n c_2)^2 = e$$

Οι πρώτες σχέσεις είναι προφανείς, ενώ η τελευταία προκύπτει επίσης εύκολα.
Η τάξη της ομάδας C_n είναι 2n (τα n στοιχεία c_n^m και οι n τον αριθμό c_2 άξονες). Οι γεννήτορες θα είναι το c_n και ένας από τους $c_2 \perp c_n$. Η ομάδα δεν είναι αβελιανή για n ≥ 3. Αποδεικνύεται ότι ο αριθμός των κλάσεων είναι $\frac{n+6}{2}$ όταν n είναι άρτιος και $\frac{n+3}{2}$ όταν το n είναι περιττός.

iii) Η ομάδα συμμετρίας ενός κανονικού τετραέδρου T (23), που περιλαμβάνει 4 άξονες 3^{ης} τάξης που περνούν από κάθε κορυφή και το κέντρο της απέναντι έδρας και 3 άξονες 2^{ας} τάξης, που περνούν από τα μέσα των αντίθετων ακμών και είναι κάθετοι μεταξύ τους. Δηλαδή

$$T = \{e, c_3, c_3', c_3'', c_3''', c_2, c_2', c_2''\}, \text{ όπου } c_3^3 = c_3'^3 = c_3''^3 = c_3'''^3 = c_2^2 = c_2'^2 = c_2''^2 = (c_3 c_2)^2 = e$$

Η τάξη της ομάδας είναι 12, όπως φαίνεται από τα παραπάνω στοιχεία.
Αν απαριθμήσουμε τις κορυφές του κανονικού τετραέδρου με τα σημεία 1,2,3,4 μπορούμε να αντιστοιχίσουμε τους μετασχηματισμούς συμμετρίας με τις αντιμεταθέσεις



$e:\ 1234 \to 1234$, $c_3:\ 1234 \to 1423$, $c_3^2:\ 1234 \to 1342$, $c_3':\ 1234 \to 4213$,
$c_3'^2:\ 1234 \to 3241$, $c_3'':\ 1234 \to 4132$, $c_3''^2:\ 1234 \to 2431$, $c_3''':\ 1234 \to 3124$,
$c_3'''^2:\ 1234 \to 2314$, $c_2:\ 1234 \to 2143$, $c_2':\ 1234 \to 3412$, $c_2'':\ 1234 \to 4321$.

Βλέπουμε ότι από όλους τους συνδυασμούς των 4 αριθμών που είναι 24, εμφανίζονται μόνο οι μισοί συνδυασμοί. Λείπουν οι ανακλάσεις ως προς τα επίπεδα που περνούν από μια ακμή και το μέσο της απέναντι ακμής. Αυτές θα συμπλήρωναν άλλα 12 στοιχεία και θα είχαμε την ομάδα T_d ($\overline{4}3m$) με τα 24 στοιχεία που είναι ισόμορφη με τις αντιμεταθέσεις των αριθμών 1,2,3,4. Τα 24 στοιχεία του T_d χωρίζονται στις 5 κλάσεις $\{e\}$, $\{3c_4^2\}$, $\{4c_3, 4c_3^2\}$, $\{3Jc_4, 3Jc_4^3\}$, $\{6Jc_2\}$, όπου J εδώ συμβολίζουμε την αντιστροφή. Επομένως η T_d είναι η πλήρης ομάδα μετασχηματισμών ενός τετραέδρου.

Για την ομάδα T με τα 12 στοιχεία οι γεννήτορες είναι 2, δηλαδή το c_3 και το c_2. Υπάρχουν 4 κλάσεις : $\{e\}$, $\{3c_4^2\}$, $\{4c_3\}$, $\{4c_3^2\}$.

Παρατηρούμε ότι στην ομάδα T τα στοιχεία c_3 και c_3^2 ανήκουν σε διαφορετική κλάση, ενώ στην T_d στην ίδια. Η αιτία είναι ότι στην T ομάδα δεν υπάρχει πράξη συμμετρίας που να μπορεί να αντιστρέψει την διαγώνιο του κύβου, όπου μπορούμε να εγγράψουμε ένα κανονικό τετράεδρο. Παρόμοια διαφορά θα δούμε και ως προς την ομάδα O.

iv) Η ομάδα του οκταέδρου O (432) περιγράφει τις συμμετρίες ενός κύβου ή ενός κανονικού οκταέδρου.
Στην ομάδα αυτή υπάρχουν 3 άξονες συμμετρίας 4ης τάξης, που είναι παράλληλοι στις ακμές του κύβου και περνούν από το κέντρο του. Ακόμη υπάρχουν 6 άξονες 2ας τάξης, που διέρχονται από τα μέσα των αντιδιαμετρικών παράλληλων ακμών του κύβου. Τέλος υπάρχουν 4 άξονες 3ης τάξης, που ενώνουν τις αντιδιαμετρικές κορυφές του κύβου. Συνολικά υπάρχουν 24 στοιχεία στην ομάδα αυτή, που χωρίζεται σε 5 κλάσεις : $\{e\}$, $\{3c_4, 3c_4^3\}$, $\{3c_4^2\}$, $\{4c_3, 4c_3^2\}$ και $\{6c_2\}$.

Ως γεννήτορες μπορούμε να πάρουμε π.χ. έναν στοιχείο συμμετρίας 4ης τάξης ως προς τον z-άξονα (c_{4z}) και ένα στοιχείο περιστροφής 3ης τάξης (c_3) ως προς την διαγώνιο –x = y = –z. Η ομάδα του τετραέδρου T είναι κανονική (αμετάβλητη) υποομάδα (επομένως έχει πλήρεις κλάσεις) της O με δείκτη 2 (=24/12), όπως μπορεί να φανεί εύκολα αν εγγράψουμε ένα κανονικό τετράεδρο στον κύβο.

Η ομάδα O είναι ισόμορφη της T_d.

v) Η ομάδα του κανονικού εικοσαέδρου $\mathfrak{I}$(532) ή του δωδεκαέδρου.
Δεν εμφανίζεται συχνά αυτή η συμμετρία στη φύση, παρά μόνο σε οιωνεί κρυστάλλους. Η ομάδα αποτελείται από 6 άξονες 5ης τάξης, 10 άξονες συμμετρίας 3ης τάξης και 15 άξονες συμμετρίας 2ας τάξης. Έχει στο σύνολό της 60 στοιχεία. Υπάρχουν 5 κλάσεις και δύο γεννήτορες π.χ. ένα c_5 και ένα c_2.

Σημειώστε ότι ένα κανονικό εικοσάεδρο αποτελείται από 20 τριγωνικές έδρες, ενώ το κανονικό δωδεκάεδρο από 12 κανονικά πεντάγωνα.

III.4 Μη-ομαλές (μη-κανονικές) ομάδες σημείου

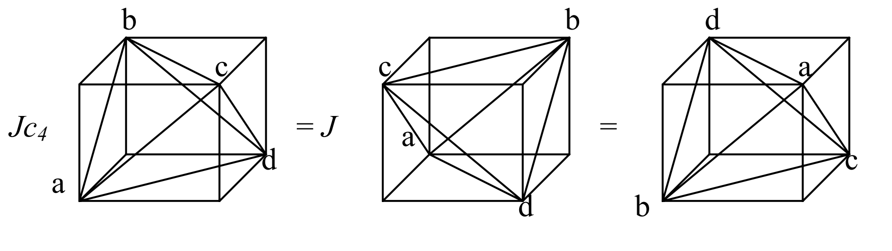
Αυτές μπορούν να παραχθούν από τις κανονικές με το γινόμενό τους με την ομάδα αντιστροφής, $C_i = \{e, i\}$. Με τον τρόπο αυτό προκύπτουν ορισμένες από τις μη-ομαλές ομάδες.

1a) Από την C_n λαμβάνουμε την C_{nh} (για n άρτιο) και την S_{2n} (για n περιττό).
1b) Από την D_n λαμβάνουμε την D_{nh} (για n άρτιο) και την D_{nd} (για n περιττό).
1c) Από την T λαμβάνουμε την T_h, από την O την O_h και από την $\mathfrak{I}$ την $\mathfrak{I}_h$.

Η ομάδα $T_h = T \otimes C_i$ έχει 24 στοιχεία, αλλά δεν είναι ομάδα συμμετρίας ενός κανονικού τετραέδρου. Έχει 8 κλάσεις και επομένως δεν είναι ισόμορφη με τις ομάδες O και T_d, που έχουν 5 κλάσεις.

Η ομάδα $O_h = O \otimes C_i$ έχει 48 στοιχεία και αποτελεί την πλήρη ομάδα συμμετρίας ενός κύβου. Από τα 48 στοιχεία τα 24 είναι οι κανονικές περιστροφές (που αποτελούν την ομάδα O) και τα άλλα 24 οι μη-κανονικές (μη-ομαλές) περιστροφές. Η ομάδα αυτή έχει 10 κλάσεις που δημιουργούνται από τις 5 κλάσεις της ομάδας O. Η ομάδα O_h ουσιαστικά περιγράφει τους 48 τρόπους που μπορούμε να διαλέξουμε τους καρτεσιανούς άξονες που είναι παράλληλοι στις ακμές του κύβου, αφού οι 6 αντιμεταθέσεις των x,y,z συνδυάζονται με τους 8 συνδυασμούς ±x, ±y, ±z.
Η ομάδα T_d είναι υποομάδα της O_h. Επίσης η ομάδα T_h είναι υποομάδα της O_h.

Παρατηρούμε ότι η ομάδα T_d δεν προκύπτει από τον συνδυασμό $T \otimes C_i$. Ο λόγος είναι ότι η αντιστροφή δεν κρατάει αναλλοίωτο ένα τετράεδρο. Το ίδιο συμβαίνει με μια περιστροφή κατά 90° γύρω από έναν άξονα x ή y ή z. Για τον λόγο αυτό η T_h δεν εκφράζει συμμετρίες ενός τετραέδρου.
Αν πάρουμε όμως τον συδυασμό Jc_4 σε ένα τετράεδρο, θα δούμε ότι

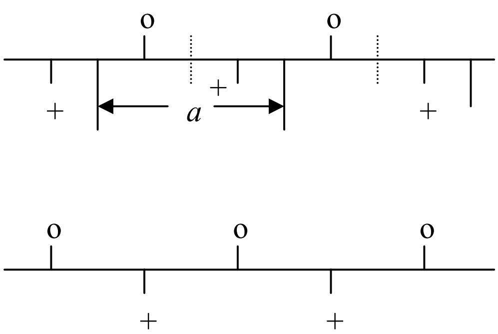


Επομένως η ομάδα T_d θα μπορούσε να δημιουργηθεί από την ομάδα O αν στην υποομάδα T της O ενεργούσαμε με κατάλληλη αντιστροφή. Αν γράψουμε την σχέση $O = T + cT$ τότε θα προκύψει η $T_d = T + JcT$. Αυτός είναι ένας ακόμη τρόπος να δημιουργήσουμε μη-κανονικές ομάδες σημείου. Έτσι δημιουργούμε
2a) Από την C_{2n} με την αμετάβλητη υποομάδα C_n με δείκτη 2 ($C_{2n} = C_n + c_{2n}C_n$), την ομάδα S_{2n} (n άρτιος) και C_{nh} (n περιττός).
2b) Από την D_n με αμετάβλητη υποομάδα την C_n ($D_n = C_n + c_2 C_n$), λαμβάνουμε την C_{nv}.
2c) Από την D_{2n} με την αμετάβλητη υποομάδα την D_n ($D_{2n} = D_n + c_{2n}D_n$), λαμβάνουμε την D_{nd} (n άρτιος) και την D_{nh} (n περιττός).
2d) Από την O με αμετάβλητη υποομάδα την T λαμβάνουμε όπως είπαμε την T_d.

2e) Από τις ομάδες T και $\mathfrak{T}$ δεν προκύπτει καμια άλλη, γιατί δεν έχουν αμετάβλητη υποομάδα. Με τον τρόπο αυτό όμως υπάρχει ο κίνδυνος να δημιουργηθούν όχι μόνο ισόμορφες ομάδες αλλά και ταυτόσημες. Π.χ. $C_i = S_2$, $C_s = C_{1h}$, $C_{3i} = S_6$, $C_{3h} = S_3$ κλπ. Επίσης και ισόμορφες, όπως π.χ. $D_n \cong C_{nv}$, $D_2 \cong C_{2h}$, $D_6 \cong D_{3h} \cong D_{3d}$, $T_d \cong O$ $D_4 \cong D_{2d}$, $S_4 \cong C_4$, $C_6 \cong C_{3h} \cong C_{3i}$, $C_i \cong C_s \cong S_2$.

III.5 Η ομάδα των παράλληλων μετατοπίσεων και οι χωρικές ομάδες

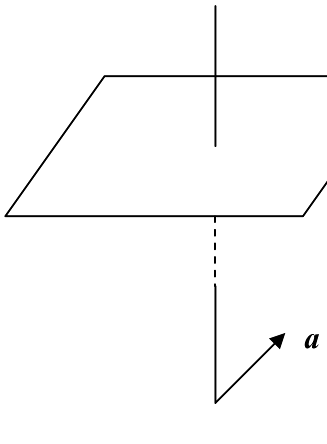
Ας υποθέσουμε περιοδικές οριακές συνθήκες σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα N σημείων. Αυτό σημαίνει ότι υποθέτουμε πως $\vec{x} + N\vec{a} = \vec{x}$, αν $\vec{a}$ είναι η πλεγματική σταθερά. Ένα κρυσταλλικό πλέγμα θα είναι αμετάβλητο κατά την μετατόπιση **t** κατά ***a*** ($\vec{x}' = \vec{x} + \vec{a}$) ή μετά από N μετατοπίσεις. Πιο γενικά θα είναι αμετάβλητο στον συνδυασμό μιας μετατόπισης και μιας πράξης συμμετρίας της ομάδας σημείου. Είναι δυνατόν όμως, να είναι αμετάβλητο από έναν συγκεκριμένο συνδυασμό μετατοπίσης και περιστροφής, αλλά να μην είναι αμετάβλητο για κάθε μία από αυτές τις πράξεις συμμετρίας ξεχωριστά. Αυτό συμβαίνει στην περίπτωση πολυατομικών κρυστάλλων, όπου η θεμελιώδης κυψελίδα περιλαμβάνει άτομα σε διάφορες θέσεις. Ένα απλό παράδειγμα είναι το παρακάτω με δύο ειδών άτομα o και + που βρίσκονται σε μονοδιάστατο κρυσταλλικό πλέγμα σταθεράς *a*.



Μια μετακίνηση κατά *a* δεν αλλάζει τίποτε στο κρύσταλλο. Αν όμως πάρουμε μετακίνηση *a*/2 θα έχουμε μεταβολή. Συγκεκριμένα τα άτομα o θα ανταλλάξουν τις θέσεις τους με τα + . Αυτό γίνεται φανερό στο διπλανό σχήμα. Επομένως ο κρύσταλλος δεν παραμένει αμετάβλητος. Αν όμως το συνδυάσουμε με μια περιστροφή κατά 180^o γύρω από άξονα που είναι κατακόρυφος, τότε θα καταλήξουμε στον αρχικό κρύσταλλο.

Αυτού του είδους οι περιστροφές ονομάζονται *ελικοειδείς περιστροφές*.

Αντίστοιχα θα μπορούσαμε να είχαμε την αντανάκλαση ενός κρυστάλλου ως προς ένα επίπεδο, συνοδευόμενη από μια παράλληλη μετατόπιση ως προς ένα διάνυσμα που βρίσκεται στο επίπεδο. Αυτό το επίπεδο ανάκλασης ονομάζεται *επίπεδο ολίσθησης*.



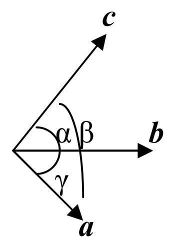
Είναι δυνατόν η απλή παράλληλη μετατόπιση κατά διάνυσμα ***a*** να μην αποτελεί μια πράξη συμμετρίας του κρυστάλλου. Δηλαδή κατά την μετατόπιση να μην καταλήγουμε στο ίδιο άτομο και μόνο με τον συνδυασμό των δύο πράξεων να παραμένει ο κρύσταλλος αναλλοίωτος.

Σημειώστε ότι δύο διαδοχικές πράξεις ελικοειδούς περιστροφής και ανακλαστικής ολίσθησης θα αντιμετατίθενται.

Η πλήρης ομάδα συμμετρίας του κρυστάλλου Ονομάζεται η *ομάδα χώρου* του υλικού (space group). Είναι φανερό ότι τα στοιχεία της ομάδας χώρου είναι συνδυασμοί στοιχείων της ομάδας σημείου καθώς και μετατοπίσεων. Στην γενική όμως περίπτωση οι πράξεις μετατοπίσεων δεν αντιμετατίθενται με εκείνες της ομάδας σημείου.

III.6 Κρυσταλλογραφικά συστήματα

Ας παραστήσουμε την μοναδιαία κυψελίδα με τα διανύσματα ***a***, ***b***, ***c*** και τις απέναντι γωνίες με τα σύμβολα α, β και γ.
Υπάρχουν διάφορες δυνατότητες συμμετρίας.



<u>Τρικλινές</u>

Είναι το σύστημα με την χαμηλότερη συμμετρία .
Είναι προφανές ότι δεν υπάρχει κανένας περιορισμός στην επιλογή των αξόνων και των γωνιών τους στη θεμελιώδη κυψελίδα και το σύστημα περιγράφεται με $a \neq b \neq c$ (για τους άξονες) και $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ (για τις γωνίες).

<u>Μονοκλινές</u>

Είναι το σύστημα που παρουσιάζει άξονα συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης (c_2) ή συμμετρία ανάκλασης (σ). Συνήθως λαμβάνουμε τον άξονα συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης κατά την διεύθυνση ***c*** (όπως συνηθίζεται από τους φυσικούς στερεάς κατάστασης) ή κατά μήκος του άξονα ***b*** (όπως συνηθίζεται από τους κρυσταλλογράφους). Είναι προφανές ότι για να υπάρχει άξονας συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης κατά τον άξονα ***c***, θα πρέπει οι ***a*** και ***b*** να είναι κάθετοι στον άξονα ***c***, ώστε κατά την περιστροφή κατά 180^o να ταυτίζονται.
Η γωνία μεταξύ των ***a*** και ***b*** δεν θα ορίζεται γιατί η περιστροφή κατά 180^o δεν θα την επηρεάζει. Επομένως $a \neq b \neq c$ και $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$.
Αν είχαμε διαλέξει τον άξονα ***b*** ως άξονα συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης, τότε $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$.

<u>Ορθορομβικό σύστημα</u>

Στο σύστημα αυτό έχουμε 2 άξονες $2^{ας}$ τάξης συμμετρίας ή δύο κατοπτρικά επίπεδα. Έστω ότι οι δύο άξονες $2^{ας}$ τάξης είναι κατά μήκος των αξόνων ***a*** και ***b***. Τότε η επίδραση της μιας συμμετρίας (παράλληλης στον ***a***-άξονα) πάνω σε διάνυσμα **r**(x,y,z) θα δίνει $c_{2a}[x,y,z]=[x,-y,-z]$. Ενώ η άλλη συμμετρία (παράλληλη στον ***b***-άξονα) $c_{2a}[x,y,z]=[-x,y,-z]$. Το γινόμενο των δύο θα δίνει $c_{2a}[x,y,z]=[-x,-y,z]$, δηλαδή έναν άξονα συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης παράλληλον στον άξονα ***c***. Επομένως όταν έχουμε 2 άξονες $2^{ας}$ τάξης, θα έχουμε αυτόματα και έναν τρίτο. Επί πλέον θα πρέπει οι τρεις άξονες ***a***, ***b*** και ***c*** θα πρέπει να είναι κάθετοι μεταξύ τους. Δηλαδή $a \neq b \neq c$ και $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

<u>Τετραγωνικό σύστημα</u>

Εδώ υπάρχει συμμετρία $4^{ης}$ τάξης. Αν λάβουμε ως άξονα συμμετρίας $4^{ης}$ τάξης τον ***c***, είναι προφανές ότι οι άξονες ***a***, ***b*** να είναι κάθετοι στον άξονα ***c***. Επί πλέον θα πρέπει μια περιστροφή ως προς τον άξονα ***c*** να μην αλλάζει τον κρύσταλλο. Επομένως θα πρέπει $a = b$ και γ=90^o, ενώ δεν μπορούμε να συμπεράνουμε τίποτε για τον άξονα ***c***. Τελικά $a = b \neq c$ και $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Κυβικό σύστημα

Είναι το σύστημα με την μεγαλύτερη συμμετρία. Μολονότι υπάρχουν συνήθως 3 άξονες συμμετρίας 4^{ης} τάξης, που είναι κάθετοι μεταξύ τους, είναι πιο γενικό να οριστεί με βάση τους 4 άξονες συμμετρίας 3^{ης} τάξης, αφού είναι δυνατόν να υπάρχει κυβικής συμμετρίας κρύσταλλος χωρίς κανένα άξονα συμμετρίας 4^{ης} τάξης.
Είναι εύκολο να δει κανείς ότι θα πρέπει $a = b = c$ και $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.
Αποδεικνύεται ότι όταν ένας κρύσταλλος έχει περισσότερους από έναν άξονα συμμετρίας 3^{ης} τάξης, τότε περιλαμβάνει 4 τέτοιους άξονες συμμετρίας, που σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία 109^o 28'.

Εξαγωνικό σύστημα

Είναι το σύστημα που παρουσιάζει έναν άξονα συμμετρίας 6^{ης} τάξης. Είναι κάπως μπερδεμένο με το τριγωνικό σύστημα γιατί η συμμετρία $\overline{6}$ ισοδυναμεί με μη-κανονική περιστροφή γύρω από άξονα συμμετρίας 3^{ης} τάξης ή με κανονική περιστροφή γύρω από έναν άξονα 3^{ης} τάξης, ακολουθούμενη από μια ανάκλαση.
Αν κάνουμε μια περιστροφή κατά 60^o θα πρέπει να καταλήγουμε στον άλλο άξονα ή στην προέκταση αυτού. Επομένως η γωνία των αξόνων θα είναι 60^o ή 120^o. Αν κάναμε δύο περιστροφές θα καταλήγαμε σε διαφορετικό άξονα αν η γωνία ήταν 60^o. Επομένως θα πρέπει να είναι ίση με 120^o. Επί πλέον οι δύο άξονες ***a*** και ***b*** θα πρέπει να είναι ίσου μήκους. Τελικά $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, ενώ $\gamma = 120^\circ$.

Τριγωνικό σύστημα (ρομβοεδρικό)

Μοιάζει με το εξαγωνικό. Περιγράφεται από έναν άξονα συμμετρίας 3^{ης} τάξης. Στην περίπτωση που δεν έχει άξονα συμμετρίας 6^{ης} τάξης, λέγεται ρομβοεδρικό.
Με την περιστροφή κατά 120^o γύρω από τον άξονα συμμετρίας 3^{ης} τάξης εύκολα προκύπτει ότι θα πρέπει $a = b = c$ και $\alpha = \beta = \gamma$, ενώ ο άξονας συμμετρίας 3^{ης} τάξης θα είναι κατά την διεύθυνση [111] και θα ισαπέχει από τους άξονες ***a***, ***b*** και ***c***.

ΙΙΙ.7 Τα 14 κρυσταλλικά πλέγματα Bravais

Από τα 7 κρυσταλλογραφικά συστήματα δεν προκύπτουν μόνο αντίστοιχα κρυσταλλικά πλέγματα, γιατί σε ορισμένες περιπτώσεις υπάρχει η πιθανότητα να τοποθετηθούν πρόσθετα άτομα σε ειδικές θέσεις υψηλής συμμετρίας, που να μην αλλοιώνουν την συμμετρία του κρυστάλλου. Φυσικά τα επί πλέον άτομα θα τοποθετηθούν σε θέσεις συμμετρίας που δεν αλλάζουν την συνολική συμμετρία.

Πάντα θα είναι δυνατόν να ορίσουμε μια μικρή κυψελίδα (την θεμελιώδη) που να δημιουργεί ολόκληρο το κρυσταλλικό πλέγμα. Όμως σε αρκετές περιπτώσεις, αυτή η θεμελιώδης κυψελίδα δεν θα αναπαριστά τόσο καθαρά την συμμετρία του κρυστάλλου. Για τον λόγο αυτό δεν χρησιμοποιείται από τους κρυσταλλογράφους. Χρησιμοποιείται όμως συχνά από φυσικούς στερεάς κατάστασης, γιατί με την πλήρη συμμετρία μετατόπισης που διαθέτουν ως προς το πλέγμα (και την χαμιλτονιανή), είναι πιο χρήσιμοι στους υπολογισμούς των ηλεκτρονιακών καταστάσεων ή των κανονικών ταλαντώσεων του πλέγματος.

Τα επί πλέον άτομα μπορούν να τοποθετηθούν στις εξής θέσεις:
Α) Στο κέντρο της κυψελίδας (χωροκεντρωμένο, I), οπότε η κυψελίδα έχει 2 άτομα ανά κυψελίδα.
Β) Στο κέντρο των εδρών (εδροκεντρωμένο, F), οπότε θα υπάρχουν 3 άτομα στην θεμελιώδη κυψελίδα.
Γ) Στο κέντρο μιας έδρας (βασικεντρωμένο, A ή B ανάλογα ποια έδρα έχει το άτομο). Το άτομο τοποθετείται στην μία μόνο από τις τρεις έδρες και συμβολίζεται ανάλογα.
Αν προσπαθούσαμε να τοποθετήσουμε και ένα δεύτερο άτομο στο κέντρο της άλλης έδρας, τότε αποδεικνύεται ότι θα έπρεπε να υπάρχει ένα άτομο και στο κέντρο της τρίτης έδρας και θα είχαμε το εδροκεντρωμένο σύστημα.

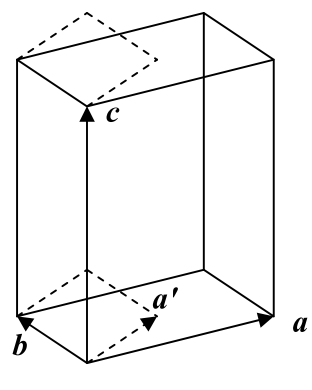
Με βάση τα 7 κρυσταλλογραφικά συστήματα μπορούμε να δημιουργήσουμε τα εξής κρυσταλλικά πλέγματα:

1) <u>*Τρικλινές*</u> ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$)

Επειδή δεν υπάρχει στοιχείο συμμετρίας, δεν μπορούμε να τοποθετήσουμε άλλο άτομο σε κάποια θέση συμμετρίας, γιατί απλά είναι σαν να επανακαθορίζουμε την στοιχειώδη κυψελίδα μικρότερη από την αρχική. Επομένως στο τρικλινές υπάρχει μόνο το κύριο πλέγμα P.

2) <u>*Μονοκλινές*</u> ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$)

Αν δοκιμάσουμε να τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο της πλευράς ***c*** της κυψελίδας, θα καταλήξουμε σε έναν επανακαθορισμό των αξόνων (***a΄***, ***b***, ***c***), που είναι αποδεκτός, αφού διατηρεί την ορθογωνιότητα των ***a΄***, ***b*** με τον ***c***-άξονα. Το ίδιο ισχύει αν τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο της κυψελίδας. Δηλαδή I=P.
Μπορούμε όμως να τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο μιας από τις πλευρές A ή B. Τότε δεν θα μπορούσαμε να ορίσουμε μια P κυψελίδα με τα κέντρα αυτών των πλευρών γιατί δεν θα διατηρούσε την ορθοωνιότητα των πλευρών ***a΄***, ***b*** με τον ***c***-άξονα.
Επομένως στο μονοκλινές θα υπάρχουν δύο περιπτώσεις P και B (ή A).



3) <u>*Ορθορομβικό*</u> ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Μπορούμε να προσθέσουμε άτομα στο κέντρο της κυψελίδας, στο κέντρο μιας έδρας ή στα κέντρα των τριών εδρών. Δεν μπορούμε να ξαναορίσουμε την μοναδιαία κυψελίδα με τα άτομα αυτά, γιατί δεν θα διατηρούσε την ορθορομβική συμμετρία. Επομένως θα έχουμε τα πλέγματα P, C, I και F.

4) <u>*Τετραγωνικό*</u> ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Αν τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο της πλευράς Α ή Β, τότε δεν θα ισχύει η συμμετρία $4^{ης}$ τάξης ως προς τον άξονα ***c***. Αν πάλι τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο της C πλευράς, τότε θα μπορούσαμε να ορίσουμε δύο νέους άξονες ***a΄*** και ***b΄*** υπό 45^o γωνία ως προς τους αρχικούς. Έτσι θα είχαμε ένα άλλο σύστημα P. Δηλαδή P = C. Μπορούμε όμως να τοποθετήσουμε ένα άτομο στο κέντρο της κυψελίδας χωρίς να αλλοιωθεί η συμμετρία. Αν δε τοποθετήσουμε άτομα στα κέντρα και των τριών εδρών, τότε αποδεικνύεται ότι θα μπορούσαμε να είχαμε πάρει κατάλληλα τους νέους άξονες ***a΄*** και ***b΄*** και να είχαμε απλά ένα άτομο στο κέντρο. Δηλαδή I = F. Επομένως τελικά έχουμε P και I.

5) <u>Κυβικό</u> ($a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Στο κυβικό μπορούμε να τοποθετήσουμε άτομο στο κέντρο του κύβου, χωρίς να αλλοιωθεί η συμμετρία. Αυτός ο χωροκεντρωμενος κυβικός κρύσταλλος I συμβολίζεται ως bcc (body-centred cubic).

Αν τοποθετήσουμε ένα άτομο σε μια έδρα, για να διατηρηθεί η συμμετρία θα πρέπει να τοποθετηθούν άτομα και στις τρεις έδρες. Αυτός ο εδροκεντρωμένος F κυβικός κρύσταλλος συνήθως συμβολίζεται ως fcc (face-centred cubic).

Επομένως υπάρχουν τρία κυβικά πλέγματα Bravais P, I και F.

6) <u>Εξαγωνικό</u> ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$)

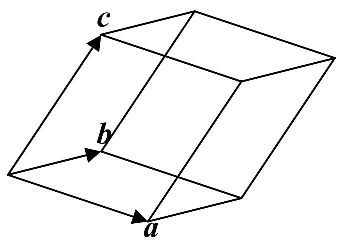
Εδώ έχουμε μόνο το κύριο σύστημα, γιατί αν προσπαθήσουμε να τοποθετήσουμε άτομα στο κέντρο ή στα κέντρα των εδρών, δεν ισχύει η συμμετρία. Έτσι υπάρχει μόνο το P. Υπάρχει όμως μια επικάλυψη με το τριγωνικό σύστημα.

7) <u>Ρομβοεδρικό</u> ($a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma$)

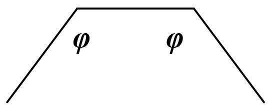
Και αυτό το σύστημα είναι μόνο τύπου P.

III.8 Χωρικές ομάδες

Τα άτομα ή τα μόρια (ή ιόντα) στα στερεά βρίσκονται συνήθως διατεταγμένα σε κανονικές θέσεις. Αν θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα άπειρο κρυσταλλικό πλέγμα, αυτό θα περιγράφεται από κάποια περιοδικότητα, με βάση κάποια στοιχειώδη κυψελίδα που επαναλαμβάνεται συνέχεια. Αυτή η στοιχειώδης κυψελίδα θα περιγράφεται από διανύσματα βάσης ***a***, ***b***, ***c***. Αν θέλουμε να εφαρμόσουμε τις συμμετρίες που διατηρούν αμετάβλητο το κρυσταλλικό πλέγμα, θα πρέπει να δούμε ποιές συμμετρίες σημείου αφήνουν το σύστημα ανέπαφο.



Ήδη από το γεγονός ότι μια πράξη συμμετρίας θα πρέπει να οδηγεί σε ένα πλέγμα που να καλύπτει ολόκληρο το χώρο μας περιορίζει τις ομάδες σημείου. Π.χ. αν θελήσουμε να καλύψουμε ένα επίπεδο με κανονικά πολύγωνα τότε παρατηρούμε ότι το άθροισμα των γωνιών των τριγώνων από το κέντρο προς τις πλευρές θα είναι *m*π. Επομένως, θα πρέπει $m\varphi = m\pi - 2\pi = (m-2)\pi \Rightarrow \varphi = \frac{m-2}{m}\pi = \pi - \frac{2\pi}{m}$.



Αν τοποθετήσουμε n από αυτά τα τρίγωνα στην ίδια κορυφή, τότε για να καλύψουμε ολόκληρο το χώρο, θα πρέπει $n\varphi = 2\pi = n\pi\frac{m-2}{m} \Rightarrow n = \frac{2m}{m-2} = 2 + \frac{4}{m-2}$. Αυτό συνεπάγεται ότι οι δυνατότητες θα είναι $m = \infty,6,4,3,2$. Επομένως επιτρέπονται μόνο $n = 2,3,4,6,\infty$ τάξης άξονες συμμετρίας.

ΙΙΙ.9 Οι κρυσταλλογραφικές ομάδες σημείου για κάθε κρυσταλλογραφικό σύστημα

1) *Τρικλινές* ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$)

Το τρικλινές έχει δύο συμμετρίες την ταυτοτική (e) και την αντιστροφή (i). Δεν μπορούμε να προσθέσουμε άλλες συμμετρίες γιατί θα καταλήξουμε σε άλλο σύστημα. Επομένως μπορούμε να έχουμε δύο κρυσταλλογραφικά συστήματα, ένα με την πιο χαμηλή συμμετρία $C_1(1)$ και ένα με δύο στοιχεία $\{e,i\}$ το $C_i(\bar{1})$.
Η ολοεδρική ομάδα είναι η C_i ενώ η C_1 είναι υποομάδα.

2) *Μονοκλινές* ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$)

Αυτό το σύστημα έχει έναν άξονα 2^{ας} τάξης (c_2) ή μια συμμετρία ανάκλασης (σ_h). Κάθε αντικείμενο με συμμετρία 2^{ας} τάξης θα ανήκει σε αυτό, δηλαδή η C_2 (2). Αυτή η ομάδα έχει 2 στοιχεία, όπως και η ομάδα C_{1h} (m) με τα στοιχεία {e,σ_h}. Αν κάνουμε διαδοχικά περιστροφή κατά 180^o και ανάκλαση, θα πάρουμε μια αντιστροφή (i). Επομένως συμβατή με το μονοκλινές θα είναι η ομάδα $\{e,c_2,i,\sigma_h\} = C_{2h}\left(\frac{2}{m}\right)$, που είναι η πιο μεγάλη ομάδα του συστήματος και οι άλλες είναι υποομάδες.

3) *Ορθορομβικό* ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Έχει 2 άξονες 2ας τάξης ή 2 επίπεδα ανάκλασης. Αν έχει δύο άξονες θα έχει και τρίτον 2^{ας} τάξης. Η ομάδα αυτή D_2 (222) έχει 4 στοιχεία $\{e,c_2,c_2',c_2''\}$.
Είναι προφανές ότι όταν υπάρχουν τα δύο επίπεδα ανάκλασης, θα υπάρχει και ένας άξονας συμμετρίας 2^{ας} τάξης, ως προς την τομή των επιπέδων. Επομένως μια συμβατή ομάδα θα είναι η C_{2v} ($mm2$) με τα στοιχεία $\{e,\sigma_v[100],\sigma_v'[010],c_2[001]\}$ ή οι άλλες δύο που προκύπτουν με κυκλική εναλλαγή των αξόνων, που όμως δεν εκφράζουν άλλη ομάδα σημείου. Επειδή υπάρχουν τρεις άξονες συμμετρίας, θα υπάρχουν και τρία επίπεδα ανάκλασης και επομένως στοιχείο συμμετρίας μπορεί να είναι και η αντιστροφή. ΄Ετσι η μεγαλύτερη ομάδα συμμετρίας θα είναι η D_{2h} (mmm) με στοιχεία $\{e,c_2,c_2',c_2'',\sigma_v,\sigma_v',\sigma_v'',i\}$ και υποομάδες τις C_{2v} και D_2.

4) *Τετραγωνικό* ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Υπάρχει ένας άξονας 4^{ης} τάξης συμμετρίας. Θα υπάρχουν δύο ομάδες C_4 (4) και S_4 ($\bar{4}$) . Άλλες πράξεις συμμετρίας που θα αλλάζουν το κρυσταλλογραφικό σύστημα θα είναι π.χ. επίπεδα ανάκλασης και άξονες συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης, που είναι παράλληλοι στους άξονες ***a*** ή ***b***. Τότε όμως ο συνδυασμός των πράξεων $(c_4[001])(c_2[100]) = (c_2[110])$, δημιουργεί έναν άλλο άξονα συμμετρίας $2^{ας}$ τάξης ως προς την διαγώνιο [110] του επιπέδου ***ab***. Αυτή είναι η ομάδα D_4 (422) με τα 8 στοιχεία $\{e, c_4, c_4^2, c_4^3, \sigma_a, \sigma_b, \sigma_d, \sigma_d'\}$. Η ανάκλαση ως προς το οριζόντιο επίπεδο θα μας δώσει την ομάδα C_{4h} (4/*m*) με 8 επίσης στοιχεία συμμετρίας. Άλλο επίπεδο ανάκλασης μπορεί να είναι το ***ac*** επίπεδο, που περιλαμβάνει τον άξονα c_4[001]. Εξ αιτίας της συμμετρίας c_4, θα δημιουργηθεί τότε ένα άλλο επίπεδο συμμετρίας που είναι διαγώνιο ως προς τους άξονες ***a***,***b*** και που ορίζει την ομάδα C_{4v} (4*mm*) με 8 στοιχεία επίσης.

Αν προσθέσουμε ένα κατοπτρικό επίπεδο (ανάκλασης) και έναν άξονα $2^{ας}$ τάξης κάθετον στον ***c*** άξονα, θα προκύψει μια άλλη ομάδα η D_{4h} (4/*mmm*), που έχει 16 στοιχεία συμμετρίας και αποτελεί την ολοεδρική ομάδα του τετραγωνικού συστήματος. Τελικά θα υπάρχουν οι ομάδες, C_4 (4), D_4 (422), C_{4h} (4/*m*), C_{4v} (4*mm*), D_{4h} (4/*mmm*), S_4 ($\overline{4}$), D_{2d} ($\overline{4}2m$), όπου η τελευταία δημιουργήθηκε από την S_4 με την προσθήκη ενός άξονα συμμετρίας 2ας τάξης κάθετου στον ***c***-άξονα.

Όλες αυτές οι ομάδες είναι υποομάδες της D_{4h} (4/*mmm*).

5) <u>*Κυβικό*</u> ($a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Έχουμε περιγράψει τις συμμετρίες του κύβου και είδαμε ότι η μεγαλύτερη ομάδα έχει 48 στοιχεία και είναι η O_h (*m*3*m*), που αποτελεί και την ολοεδρική ομάδα. Υποομάδες έχουμε δει ότι είναι οι *O* (432) με 24 στοιχεία, T_d ($\overline{4}3m$) με 24 στοιχεία, T_h (*m*3) με 24 στοιχεία και η *T* (23) με 12 στοιχεία.

6) <u>*Εξαγωνικό*</u> ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$)

Εδώ υπάρχει άξονας συμμετρίας $6^{ης}$ τάξης και τελικά δημιουργούνται 7 ομάδες: C_6 (6) με 6 στοιχεία, D_6 (622) με 12 στοιχεία, C_{6h} (6/*m*) με 12 στοιχεία, C_{6v} (6*mm*) με 12 στοιχεία, D_{3h} ($\overline{6}m2$) με 12 στοιχεία, C_{3h} ($\overline{6}$)με 6 στοιχεία, D_{6h} (6/*mmm*) που με 24 στοιχεία αποτελεί την ολοεδρική ομάδα.

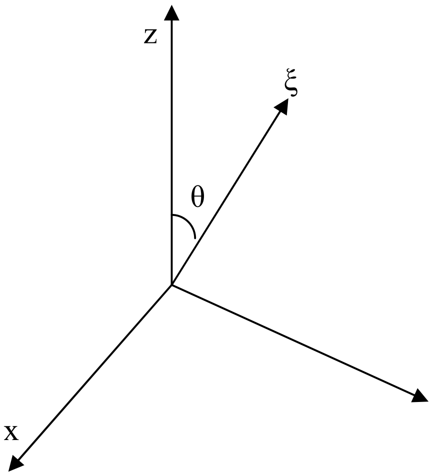
7) <u>*Ρομβοεδρικό*</u> ($a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma$)

Εδώ έχουμε έναν άξονα συμμετρίας $3^{ης}$ τάξης και με διαδοχική προσθήκη στοιχείων συμμετρίας καταλήγουμε σε 5 ομάδες για το σύστημα αυτό: C_3 (3) με 3 στοιχεία, C_{3i} ή S_6 ($\overline{3}$)με 6 στοιχεία, D_3 (32) με 6 στοιχεία, C_{3v} (3*m*) με 6 στοιχεία και D_{3d} ($\overline{3}m$) με 12 στοιχεία. Όλες οι ομάδες αποτελούν υποομάδες της D_{3d} ($\overline{3}m$).

IV. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

IV.1 Οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας των περιστροφών

Οι πράξεις συμμετρίας των ομάδων σημείου είναι υποσύνολα εκείνων που αφήνουν αμετάβλητο κάποιο σημείο (την αρχή των αξόνων). Όλες οι περιστροφές αποτελούν μια ομάδα που αφήνουν αναλλοίωτη μια σφαίρα. Ας θεωρήσουμε μια περιστροφή κατά γωνία φ γύρω από άξονα $\hat{\xi}$, που κείται στο επίπεδο $y\hat{o}z$. Τότε η περιστροφή $Rot(\varphi,\hat{z})$ δεν είναι τίποτε άλλο από μια περιστροφή γύρω από τον άξονα $\hat{x}$ κατά γωνία θ, μετά μια περιστροφή κατά γωνία φ ως προς τον άξονα $\hat{\xi}$ και τέλος μια περιστροφή στην αρχική θέση του άξονα $\hat{z}$. Δηλαδή



$$Rot(\varphi,\hat{z}) = Rot(-\theta,\hat{x})Rot(\varphi,\hat{\xi})Rot(\theta,\hat{x})$$

Σύμφωνα με τον ορισμό της ισοδυναμίας, οι δύο περιστροφές ως προς διαφορετικούς άξονες $\hat{\xi}$ και $\hat{z}$ αλλά υπό την ίδια γωνία, θα είναι ισοδύναμοι και θα ανήκουν στην ίδια κλάση. Θα υπάρχει επομένως ένας άπειρος αριθμός κλάσεων, άρα και άπειρος αριθμός μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων. Τις περιστροφές μπορούμε να τις παραστήσουμε με τις γωνίες (θ,φ) των σφαιρικών συντεταγμένων. Ως συναρτήσεις των αναπαραστάσεων μπορούμε να πάρουμε τις σφαιρικές αρμονικές $Y(\theta,\varphi)$, που προκύπτουν ως λύσεις της εξίσωσης Laplace και αφορούν την γωνιακή εξάρτηση $\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi)$

και έχουν ιδιοτιμές $\lambda = -l(l+1)$, όπου l είναι ο τροχιακός κβαντικός αριθμός. Οι λύσεις είναι κατά τα γνωστά

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \quad (-l \le m \le l)$$

όπου N_{lm} είναι ένας παράγοντας κανονικοποίησης και $P_l^{|m|}$ τα πολυώνυμα Legendre τάξης m. Επειδή ο τελεστής για τις συναρτήσεις Y είναι αμετάβλητος ως προς τις περιστροφές, οι $2l$+1 συναρτήσεις Y_l^m για δεδομένο l θα αποτελούν έναν αμετάβλητο χώρο συναρτήσεων, και επομένως έναν χώρο αναπαράστασης για την ομάδα των περιστροφών. Αυτές οι αναπαραστάσεις θα είναι μη-αναγώγιμες, γιατί αν αλλάξουμε τον πολικό άξονα, τότε αποδεικνύεται ότι η νέα συνάρτηση $Y_l^m(\theta',\varphi')$ θα είναι γραμμικός συνδυασμός όλων των Y_l^m του ίδιου l. Δηλαδή

$$\widehat{P}_R Y_l^m = \sum_{m'} D^{(l)}(R)_{m'm} Y_l^{m'} \, .$$

Αν περιστρέψουμε ένα σημείο ως προς τον άξονα $\hat{z}$ κατά γωνία α (δηλαδή τους άξονες κατά γωνία –α), τότε οι σφαιρικές αρμονικές θα αλλάξουν ως εξής:

$\widehat{P}_R Y_l^m(\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi-\alpha) = e^{-im\alpha} Y_l^m(\theta,\varphi)$.

Επομένως η αναπαράσταση για την περίπτωση αυτή θα είναι ένας διαγώνιος πίνακας

$$D^{(l)}(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-il\alpha} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-i(l-1)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{il\alpha} \end{pmatrix}.$$

Επομένως οι χαρακτήρας της αναπαράστασης θα είναι

$$\chi^{(l)}(\alpha) = Tr\left[D^{(l)}(\alpha)\right] = e^{-il\alpha} + e^{-i(l-1)\alpha} + \dots + e^{il\alpha} = \frac{\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}.$$

Επειδή όλες οι περιστροφές κατά την ίδια γωνία α ανήκουν στην ίδια κλάση ανεξάρτητα του άξονα, γι' αυτό θα έχουν τον ίδιο χαρακτήρα $\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\alpha \Big/ \sin\frac{\alpha}{2}$.

Δεν θα υπάρχει άλλη μη-αναγώγιμη αναπαράσταση περιττής τάξης, γιατί αν υπήρχε θα έπρεπε να είναι ορθογώνια ως προς τους χαρακτήρες όλων των παραπάνω. Άρα θα ήταν ορθογώνια και ως προς την διαφορά ανά δύο των συναρτήσεων δηλαδή $\chi^{(l)}(\alpha) - \chi^{(l-1)}(\alpha) = 2\cos(l\alpha)$. Επειδή περιστροφές κατά $\pm\alpha$ ανήκουν στην ίδια κλάση, ο χαρακτήρας χ(α) θα έπρεπε να είναι μια άρτια συνάρτηση του *α*, άρα θάπρεπε να αναλύεται στις συναρτήσεις cos*lα*. Επομένως

Οι σφαιρικές αρμονικές τάξης l σχηματίζουν μια βάση για τις περιττές μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις τάξης 2l+1 της ομάδας όλων των περιστροφών.

Για τις αναπαραστάσεις άρτιας διάστασης, που αναλογούν σε ημιακέραιο κβαντικό αριθμό στροφορμής αποδεικνύεται ότι ισχύει η ίδια σχέση για τους χαρακτήρες που θα είναι κάθετοι προς εκείνους των περιττών διαστάσεων αναπαράστασης, αρκεί να επεκταθεί ο χώρος ορισμού της γωνίας *α* από ±π σε ±2π. Αυτό θα σημαίνει ότι κατά την περιστροφή κατά γωνία 2π θα υπάρχει μια αλλαγή προσήμου, και θα χρειάζεται μια περιστροφή κατά 4π για να επανέλθει στην αρχική θέση.

Παράδειγμα: Για την ομάδα D_3, οι σφαιρικές αρμονικές με *l*=2 θα δώσουν χ(*e*)=5, ενώ για τα c_3, c_3^2 (*α*=120^o) χ(c_3)=sin 300^o/sin 60^o= -1. Επίσης για τα c_2, c_2', c_2'' (*α*=180^o) χ(c_2)=sin 450^o/sin 90^o= 1 και από ανάλυση προκύπτει ότι $D = \Gamma \oplus \Gamma \oplus A_1$, με διανύσματα $Y_2^0 = 2z^2 - x^2 - y^2, Y_2^1 = zx, Y_2^{-1} = yz, Y_2^2 = x^2 - y^2, Y_2^{-2} = 2xy$.

IV.2 Εφαρμογή των αναπαραστάσεων στην κβαντομηχανική

Έστω *H* η χαμιλτονιανή ενός συστήματος, ψ η κυματοσυνάρτηση και *E* η ενέργεια του. Η εξίσωση του Schrodinger για την μόνιμη κατάσταση θα είναι $H\psi = E\psi$. Αν δράσουμε με κάποια πράξη συμμετρίας *T* στα δύο μέρη της εξίσωσης, θα προκύψει ότι $TH\psi = ET\psi$. Έστω $T\psi(q_i) = \psi'(q_i')$, όπου q_i είναι οι μεταβλητές του συστήματος. Μπορούμε να γράψουμε $THT^{-1}T\psi = ET\psi \quad \Rightarrow \quad THT^{-1}\psi'(q_i') = E\psi'(q_i')$.

Αν ισχύει ότι $H = THT^{-1} \quad \Rightarrow \quad HT = TH$ (δηλαδή ο τελεστής της πράξης συμμετρίας αντιμετατίθεται με την χαμιλτονιανή ή απλά την αφήνει αμετάβλητη), τότε θα ισχύει ότι $H\psi' = E\psi'$. Επομένως η κυματοσυνάρτηση ψ' θα ικανοποεί την ίδια κυματική εξίσωση με την ίδια ενέργεια. Αυτό σημαίνει ότι θα υπάρχει ενεργειακός εκφυλισμός και η πράξη συμμετρίας θα δημιουργεί μια άλλη κυματοσυνάρτηση ενεργειακά εκφυλισμένη με την αρχική. Το ίδιο θα ισχύει για κάθε άλλη πράξη συμμετρίας που θα αφήνει την χαμιλτονιανή αμετάβλητη. Προφανώς το γινόμενο δύο τέτοιων πράξεων συμμετρίας θα αποτελεί μια άλλη συμμετρία που θα αφήνει την χαμιλτονιανή ανεξάρτητη. Όλα αυτά τα στοιχεία συμμετρίας θα ορίζουν μια ομάδα συμμετρίας της χαμιλτονιανής. Ξεκινώντας με κάποια κυματοσυνάρτηση και εφαρμόζοντας όλες τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας συμμετρίας της χαμιλτονιανής θα δημιουργήσουμε μια αλληλουχία ενεργειακά εκφυλισμένων κυματοσυναρτήσεων. Αν με αυτό τον τρόπο βρίσκουμε όλες τις εκφυλισμένες κυματοσυναρτήσεις κάποιας ενεργειακής κατάστασης, τότε θα λέμε ότι έχουμε έναν ομαλό εκφυλισμό. Ειδάλλως θα λέμε ότι έχουμε και κάποιον τυχαίο εκφυλισμό, που πιθανά να υποκρύβει μια λανθάνουσα συμμετρία του συστήματος.

Στην περίπτωση του ομαλού εκφυλισμού οι ενεργειακά εκφυλισμένες κυματοσυναρτήσεις θα ορίζουν έναν χώρο αναπαράστασης της ομάδας συμμετρίας της χαμιλτονιανής. Δηλαδή στην περίπτωση αυτή,

Αν μια χαμιλτονιανή H είναι αμετάβλητη σε μια ομάδα μετασχηματισμών G, τότε οι κυματοσυναρτήσεις που ανήκουν στην ίδια ενεργειακή στιβάδα δημιουργούν μια βάση αναπαράστασης της ομάδας G.

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές θα αποτελούν έναν αμετάβλητο (για τις πράξεις συμμετρίας της *G*) χώρο, που μπορεί να είναι αναγώγιμος ή όχι. Όμως δεν γίνεται κυματοσυναρτήσεις που ανήκουν στον ίδιο μη-αναγώγιμο διανυσματικό χώρο να έχουν διαφορετική ενέργεια. Αυτό ισχύει γιατί η κυματοσυνάρτηση θα προκύπτει από τις άλλες του διανυσματικού χώρου με κάποια από τις σχέσεις συμμετρίας που αφήνουν την *H* αμετάβλητη. Επομένως θάπρεπε να ανήκει στην ίδια ενεργειακή στάθμη. Δηλαδή θα ισχύει ότι,

Αν κάποια χαμιλτονιανή είναι αμετάβλητη σε κάποια ομάδα συμμετρίας G, τότε οι κυματοσυναρτήσεις της χαμιλτονιανής, που μετασχηματίζονται σύμφωνα με κάποια μη-αναγώγιμηα αναπράσταση της ομάδας G ανήκουν στην ίδια ενεργειακή στάθμη.

Λαμβάνοντας υπόψη και τον τυχαίο εκφυλισμό μπορούμε να πούμε ότι

Αν μια ομάδα G περιλαμβάνει όλες τις δυνατές συμμετρίες μιας χαμιλτονιανής, τότε οι κυματοσυναρτήσεις της κάθε ενεργειακής στιβάδας μετασχηματίζονται μη-αναγώγιμα υπό την ομάδα G, εκτός από τις περιπτώσεις τυχαίων εκφυλισμών.

Π.χ. η χαμιλτονιανή ενός ελεύθερου ατόμου, στην περίπτωση που υπάρχει κέντρο συμμετρίας. Τότε η χαμιλτονιανή που την περιγράφει θα είναι αναλλοίωτη ως προς την ομάδα $C_i = \{e, i\}$, που περιλαμβάνει την ταυτότητα και την αντιστροφή ως προς το κέντρο συμμετρίας. Η ομάδα αυτή έχει δύο μόνο αναπαραστάσεις, τις A_1 και A_2. Η πρώτη κατά την αντιστροφή δεν αλλάζει πρόσημο, ενώ η δεύτερη αλλάζει. Επομένως οι κυματοσυναρτήσεις χωρίζονται σε άρτιες και περιττές. Περισσότερα παραδείγματα θα δούμε με την διατήρηση της στροφορμής, που οδηγεί σε εκφυλισμένες κυματοσυναρτήσεις, σύμφωνα με τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας περιστροφών στο χώρο.

IV.3 Η επίδραση κάποιας διαταραχής

Έστω ότι $H = H_o + H_1$, όπου H_o είναι μια απλή χαμιλτονιανή και H_1 κάποια διαταραχή. Συνήθως η H_o έχει υψηλότερη συμμετρία από την διαταραχή H_1 και επομένως οι κυματοσυναρτήσεις της H_o θα έχουν μεγαλύτερο εκφυλισμό, που εν μέρει θα μπορεί να αρθεί από την επίδραση της H_1. Μπορούμε να αποδείξουμε ότι αν H, H_o, και H_1 είναι και οι τρεις αμετάβλητες σε μια ομάδα συμμετρίας G, και αν οι κυματοσυναρτήσεις μιας ενεργειακής στιβάδας της H_o μετασχηματίζεται σύμφωνα με την αναπαράσταση D που ανάγεται στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις $D = D^{(1)} + D^{(2)} + \ldots + D^{(n)}$, τότε την μέγιστη άρση εκφυλισμού που μπορεί να φέρει η διαταραχή H_1 είναι σε n υποστιβάδες. Οι κυματοσυναρτήσεις της κάθε μιας από αυτές τις υποστιβάδες θα μετασχηματίζονται σύμφωνα με κάποια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση $D^{(i)}$, που θα αντιστοιχίζεται με αυτή την υποστιβάδα.

Γενικά αν η ομάδα G_1 της διαταραχής είναι μεγαλύτερης συμμετρίας από εκείνη της ομάδας G_o της H_o, τότε η συνολική χαμιλτονιανή έχει ομάδα συμμετρίας την G_o και οι καταστάσεις περιγράφονται από τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της G_o, όπως και στην αδιατάρακτη περίπτωση. Δηλαδή εξ αιτίας της διαταραχής δεν υπάρχει άρση του εκφυλισμού παρά μόνο μετατόπιση των ενεργειακών καταστάσεων.

Στην περίπτωση όμως που η ομάδα συμμετρίας G της H είναι μικρότερης συμμετρίας από την αρχική G_o της H_o (πιο γενικά όταν $G = G_o \cap G_1 \subseteq G_o$), τότε η H είναι αμετάβλητη ως προς την G (γενικά $G_o \cap G_1$). Επειδή οι διαστάσεις των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων της G θα είναι μικρότερες (ή το πολύ ίσες) από εκείνες της G_o, τότε ο εκφυλισμός των ιδιοσυναρτήσεων θα αρθεί εν μέρει, επομένως οι στιβάδες θα διαχωριστούν.

Στην περίπτωση που $G = G_1 \subseteq G_o$, οι μη-αναγώγιμες (στην συνηθισμένη περίπτωση) αναπαραστάσεις $D^{(a)}$ ως προς την ομάδα G_o, που περιγράφουν τις αδιατάρακτες ιδιοτιμές E_o, θα είναι στην γενική περίπτωση αναγώγιμες αναπαραστάσεις ως προς την ομάδα G. Τότε θα πρέπει να αναχθούν στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις $\Delta^{(\beta)}(G)$ της ομάδας G κατά τα γνωστά: $D^{(a)}(G) = \sum_{\beta=1}^{r} m_{\beta,a} \Delta^{(\beta)}(G)$, όπου $m_{\beta,a}$ θα είναι η πολλαπλότητα εμφάνισης της κάθε μη-αναγώγιμης αναπαράστασης της ομάδας G. Οι συντελεστές $m_{\beta,a}$ θα δίνονται από πίνακες αντιστοίχησης χαρακτηριστικούς για κάθε συνδυασμό ομάδων G_o και G_1.

Για παράδειγμα, ένα ελεύθερο άτομο ακολουθεί την ομάδα συμμετρίας των περιστροφών $G_o = SO(3)$. Αν τοποθετηθεί σε έναν κρύσταλλο που ακολουθεί κυβική συμμετρία (οκταεδρική O), τότε η συμμετρία του περιορίζεται. Ο διαχωρισμός των εκφυλισμένων ιδιοκαταστάσεων της αρχικής ομάδας, όπως γνωρίζουμε ορίζεται από τον τροχιακό κβαντικό αριθμό l, όπου l=0 για την s-στιβάδα, l=1 για την p (3 διανύσματα βάσης), l=2 για την d (5 διανύσματα βάσης), κ.λ.π.

Η οκταεδρική ομάδα O (432) έχει 5 κλάσεις, e, c_3, c_{2z}, c_{2d}, c_4, με πίνακα χαρακτήρων που παρουσιάζεται παρακάτω.

Από την σχέση $\chi^{(l)}(\varphi)=\dfrac{\sin\left(l+\dfrac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\dfrac{\varphi}{2}}$ για l=0 έχουμε $\chi^{(o)}$=1 για όλα τα στοιχεία.

	e	c_3	c_{2z}	c_{2d}	c_4
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	-1	1
T_2	3	0	-1	1	-1

Επομένως $D^{(a)}(G)=A_1$ (μονή στιβάδα).

Για l=1, $\chi^{(1)}(e)$=3, $\chi^{(1)}(c_3)=\chi^{(1)}(120^o)=\sin 180^o/\sin 60^o=0$, $\chi^{(1)}(c_2)=\chi^{(1)}(180^o)=\sin 270^o/\sin 90^o=-1$, $\chi^{(1)}(c_4)=\chi^{(1)}(90^o)=\sin 135^o/\sin 45^o=1$. Προφανώς $D^{(a)}(G)=T_1$, παραμένει ο τριπλός εκφυλισμός.

Για l=2 $\chi^{(2)}(e)$=5, $\chi^{(2)}(c_3)=\chi^{(2)}(120^o)=\sin 300^o/\sin 60^o=-1$, $\chi^{(2)}(c_2)=\chi^{(2)}(180^o)=\sin 450^o/\sin 90^o=1$, $\chi^{(2)}(c_4)=\chi^{(2)}(90^o)=\sin 225^o/\sin 45^o=-1$. Από σύγκριση με τον πίνακα προκύπτει ότι $D^{(a)}(G)=T_2\oplus E$, κλπ.

Επομένως οι s, p στιβάδες δεν διαχωρίζονται εξ αιτίας του κυβικού πεδίου, ενώ η στιβάδα d (αρχικά 5 ενεργειακά εκφυλισμένες) χωρίζει σε μία με διπλό εκφυλισμό και σε μία άλλη με τριπλό.

IV.4 Μείωση της συμμετρίας

Είναι συνηθισμένο η συμμετρία ενός συστήματος να περιορίζεται από μια διαταραχή. Έτσι π.χ. μια κυβική συμμετρία μπορεί να καταλήξει σε τετραγωνική και διαδοχικά σε ορθορομβική (δηλαδή $a=b=c \;\Rightarrow\; a=b\neq c \;\Rightarrow\; a\neq b\neq c$). Τότε η νέα ομάδα συμμετρίας U θα περιέχει μόνο μερικά από τα στοιχεία συμμετρίας της αρχικής ομάδας G και θα αποτελεί υποομάδα της ($U\subset G$).

Όπως είδαμε οι αναπαραστάσεις της αρχικής ομάδας G θα αποτελούν αναπαραστάσεις και της υποομάδας U αλλά στην γενική περίπτωση θα είναι αναγώγιμες. Έτσι αν έχουμε ένα χώρο αναπαράστασης $L^{(\alpha)}$ της αρχικής ομάδας G, αυτός θα υποδιαιρείται σε μη-αναγώγιμους υποχώρους $l^{(\beta)}$ στην υποομάδα U, $L^{(\alpha)}=\sum_\beta m_{\beta\alpha} l^{(\beta)}$.

Έστω $D^{(\alpha)}(A)$ είναι μια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της αρχικής ομάδας G με χαρακτήρες $\chi^{(\beta)}(A)$ και $\Delta^{(\beta)}(A)$ είναι μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της υποομάδας U με χαρακτήρες $\psi^{(\beta)}(A)$, τότε θα ισχύει ότι

$$\chi^{(\alpha)}(A)=\sum_\beta m_{\beta,\alpha}\psi^{(\beta)}(A)$$

όπου η πολλαπλότητα εμφάνισης της κάθε αναπαράστασης της U θα είναι

$$m_{\beta,\alpha}=\frac{1}{h}\sum_{A\in U}\chi^{(\alpha)}(A)\psi^{(\beta)*}(A)$$

όπου h είναι η τάξη της υποομάδας U.

Παράδειγμα: η ομάδα D_3 έχει για υποομάδες τις $C_3 = \{e, c_3, c_3^2\}$, $C_s = \{e, c_2\}$ ή $\{e, \sigma\}$. Προφανώς η C_s έχει δύο κλάσεις τις $\{e\}$, $\{c_2\}$ και τάξη 2, δηλαδή δύο μονοδιάστατες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις,

	e	c_2
A_1	1	1
A_2	1	-1

Για την υποομάδα C_3 που είναι αβελιανή, θα έχουμε τρεις κλάσεις $\{e\},\{c_3\},\{c_3^2\}$ και μονοδιάστατες αναπαραστάσεις. Όπως γνωρίζουμε, $D(A^2)=[D(A)]^2$ και για τις μονοδιάστατες αναπαραστάσεις αυτό υποδηλώνει ότι $\chi(A^2)=[\chi(A)]^2$ και $\chi(A^3)=[\chi(A)]^3=$ $=\chi(e)=1$, δηλαδή το $\chi(A)$ θα είναι μία από τις τρεις ρίζες της μονάδας $\chi_k = e^{\frac{2\pi}{3}ik}$. Δηλαδή οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις θα είναι

	e	c_3	c_3^2
A	1	1	1
E'	1	ε	ε*
E''	1	ε*	ε

Όπου $\varepsilon = \dfrac{-1 \pm i\sqrt{3}}{2}$ είναι μία από τις τρίτες ρίζες της μονάδας.

Είναι προφανές ότι οι αναπαραστάσεις A_1, A_2 της D_3 (με δείκτες 1,1,1 για τα στοιχεία e, c_3, c_3^2) θα αντιστοιχίζονται στην αναπαράσταση A της C_3. Η αναπαράσταση Γ της D_3 με χαρακτήρες (2,-1,-1) για τα στοιχεία $\{e\},\{c_3\},\{c_3^2\}$, θα αναλυθεί στις A, E' και E'' της ομάδας C_3 με πολλαπλότητες $m_A = \dfrac{2\cdot 1 + 1\cdot(-1) + 1\cdot(-1)}{3} = 0$, $m_{E'} = \dfrac{2 - \varepsilon - \varepsilon^*}{3} = 1$ και $m_{E''} = \dfrac{2 - \varepsilon^* - \varepsilon}{3} = 1$.

Για την ομάδα C_s με στοιχεία $\{e,c_2\}$, η αρχική ομάδα D_3 έχει χαρακτήρες (για τα αντίστοιχα στοιχεία e,c_2) για την A_1 (1,1), την A_2 (1,-1) και την Γ (2,0). Επομένως θα αντιστοιχίζονται $A_1(D_3) \to A_1(C_s)$, $A_2(D_3) \to A_2(C_s)$ και $\Gamma(D_3) \to A_1 + A_2\ (C_s)$.
Δηλαδή προκύπτει ο ακόλουθος πίνακας αντιστοίχησης της αρχικής ομάδας D_3 με τις υποομάδες C_3 και C_s.

D_3	A_1	A_2	Γ
C_3	A	A	$E' \oplus E''$
C_s	A_1	A_2	$A_1 \oplus A_2$

<u>*Σημείωση*</u>: Παρατηρούμε ότι προέκυψαν μιγαδικά στοιχεία στην αναπαράσταση της C_3. Αποδεικνύεται ότι οι συζυγείς μιγαδικές αναπαραστάσεις μπορούν να συνδυαστούν στην περίπτωση αυτή και να φτιάξουν μια διδιάστατη αναπαράσταση.

Γενικά μια αναπαράσταση είναι πργαμτική αν τα στοιχεία της $D^{(\alpha)}$ είναι πραγματικοί αριθμοί. Ονομάζεται ψευδοπραγματική, αν το $D^{(\alpha)*}$ είναι ισοδύναμο του $D^{(\alpha)}$ (δηλαδή αν $D^{(\alpha)*} = S^{-1}D^{(\alpha)}S$) αλλά το $D^{(\alpha)}$ δεν είναι πραγματικός αριθμός. Τέλος είναι μιγαδική αν το $D^{(\alpha)*}$ δεν είναι ισοδύναμο του $D^{(\alpha)}$, δηλαδή αν υπάρχει άλλη αναπαράσταση $D^{(\beta)} \approx D^{(\alpha)*}$, όπου $\beta \neq \alpha$. Η πραγματικότητα μιας αναπαράστασης ελέγχεται από την τιμή της ποσότητας $\frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(\alpha)}(A^2)$. Αν είναι ίση προς 1 είναι πραγματική, -1 ψευδοπραγματική και 0 μιγαδική. Για την C_3 οι E', E'' είναι μιγαδικές.

IV.5 Πρόσθεση στροφορμών

Έστω ότι ένα άτομο έχει δύο ηλεκτρόνια στην εξωτερική στιβάδα και θέλουμε να βρούμε την συνολική στροφορμή τους. Θα πρέπει να προσθέσουμε τις επί μέρους στροφορμές των δύο j_1 και j_2. Γνωρίζουμε από την κβαντομηχανική ότι η συνολική στροφορμή θα πάρει οποιαδήποτε τιμή ανάμεσα στις ακραίες $|j_1 - j_2|$ και $|j_1 + j_2|$. Αν εξετάσουμε το πρόβλημα με την θεωρία ομάδων, για τα δύο ηλεκτρόνια θα υπάρχει ένας εκφυλισμός $(2j_1+1)$ και $(2j_2+1)$ αντίστοιχα. Αυτό υπονοεί ότι μπορούμε να πάρουμε $2j_1+1$ γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα $\overline{u}_{m_1}(1)$ που θα δημιουργούν μια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας των περιστροφών. Επίσης για το άλλο ηλεκτρόνιο θα έχουμε $2j_2+1$ γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα $\overline{\upsilon}_{k_2}(2)$ που θα αποτελούν έναν αναλλοίωτο χώρο αναπαράστασης της ομάδας.

Αν συνδυάσουμε τους δύο χώρους, θα δημιουργήσουμε $(2j_1+1)(2j_2+1)$ διανύσματα βάσης της μορφής $\overline{u}_{m_1}(1)\overline{\upsilon}_{m_2}(2)$, που θα αποτελούν μια, γενικά αναγώγιμη, αναπαράσταση της ομάδας περιστροφών. Αν υπάρξουν αλληλεπιδράσεις, το ευθύ γινόμενο θα περιλαμβάνει στιβάδες με διαφορετικές ενέργειες, που θα αντιστοιχούν στην ανάλυση της αναπαράστασης σε μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Έστω R μια περιστροφή κατά γωνία φ και $\widehat{P}_R$ ο αντίστοιχος τελεστής. Τότε

$$\widehat{P}_R u_{m_1}(1) = \sum_{k_1} D^{(j_1)}_{k_1 m_1}(R)u_{k_1}(1), \quad \widehat{P}_R u_{m_2}(2) = \sum_{k_2} D^{(j_2)}_{k_2 m_2}(R)\upsilon_{k_2}(2)$$

Επομένως θα ισχύει για το ευθύ γινόμενο ότι

$$\widehat{P}_R u_{m_1}(1)\upsilon_{m_2}(2) = \sum_{k_1} D^{(j_1)}_{k_1 m_1}(R)u_{k_1}(1)\sum_{k_2} D^{j_2}_{k_2 m_2}(R)\upsilon_{k_2}(2) = \sum D^{(j_1)}_{k_1 m_1}(R)D^{j_2}_{k_2 m_2}(R)u_{k_1}(1)\upsilon_{k_2}(2).$$

Κατά τα γνωστά, ο χαρακτήρας της αναπαράστασης του γινομένου των αναπαραστάσεων θα είναι από την αναδιάταξη των όρων

$$\chi^{(D)}(R) = \chi^{(j_1)}(R)\chi^{(j_2)}(R) = \sum_{l_1=-j_1}^{j_1} e^{-il_1\varphi} \sum_{l_2=-j_2}^{j_2} e^{-il_2\varphi} = \sum_{l_1,l_2} e^{-i(l_1+l_2)\varphi} = \sum_{J=0}^{\infty} a_J \sum_{M=-J}^{J} e^{-iM\varphi}.$$

Προφανώς $|M| \le j_1 + j_2$ δηλαδή $a_J=0$ όταν $J>j_1+j_2$. Πραγματικά θα υπάρχει ένας μόνο όρος με $|M| = j_1 + j_2$ επομένως $a_{j_1+j_2} = 1$. Για $|M| = j_1 + j_2 - 1$ θα υπάρχουν δύο συνδυασμοί $(j_1-1)+j_2$ και $j_1+(j_2-1)$. Όμως στην άθροιση για $|M|=j_1+j_2$ ήδη υπήρξε ένας όρος j_1+j_2-1, επομένως $a_{j_1+j_2-1}=1$, κ.ο.κ. όλα τα a_J=1. Επομένως

$$\chi^{(j_1)}(R)\chi^{(j_2)}(R)=\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{J}e^{-iM\varphi}=\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\chi^{(J)}(R).$$

Δηλαδή ισχύει ότι $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}=\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}D^{(J)}=D^{(j_1+j_2)}+D^{(j_1+j_2-1)}+\ldots+D^{(j_1-j_2)}$

που εκφράζει τον γνωστό κανόνα άθροισης στροφορμών.

Π.χ. $D^{(2)}\times D^{(1/2)}=D^{(5/2)}+D^{(3/2)}$ και

$D^{(1)}\times D^{(1)}\times D^{(1)}=D^{(1)}\times\left[D^{(2)}+D^{(1)}+D^{(0)}\right]=D^{(3)}+D^{(2)}+D^{(1)}+D^{(2)}+D^{(1)}+D^{(0)}+D^{(1)}$

IV.6 Συντελεστές Clebsch-Gordan

Έστω $D^{(\alpha)}, D^{(\beta)}$ δύο αναπαραστάσεις μιας ομάδας *G*, που αναφέρονται σε βάσεις διανυσμάτων $\{e_i^{(\alpha)};i=1,2,\ldots n_\alpha\}$ και $\{e_j^{(\beta)};j=1,2,\ldots n_\beta\}$ δύο γραμμικών χώρων $L^{(\alpha)}$ και $L^{(\beta)}$. Σχηματίζουμε το γινόμενο Kronecker $D^{(\alpha\times\beta)}(A)=\{D^{(\alpha)}(A)\times D^{(\beta)}(A)\}$, που θα αναφέρεται στη βάση $\{e_{ij}^{(\alpha\beta)}\}=\{e_i^{(\alpha)}e_j^{(\beta)};i=1,2,\ldots,n_\alpha,\ j=1,2,\ldots n_\beta\}$ του γινομένου $L^{(\alpha)}\times L^{(\beta)}$.

Οι χαρακτήρες της $D^{(\alpha\times\beta)}$ θα είναι $\chi^{(\alpha\times\beta)}(A)=\chi^{(\alpha)}(A)\cdot\chi^{(\beta)}(A)$ και η αναπαράσταση $D^{(\alpha\times\beta)}$ θα είναι μια νέα αναπαράσταση της ομάδας *G*. Αυτή η αναπαράσταση στη γενική περίπτωση θα είναι αναγώγιμη. Επομένως μπορεί να αναλυθεί στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας *G* κατά τα γνωστά: $D^{(\alpha\times\beta)}=\sum_\gamma(\alpha\beta|\gamma)D^{(\gamma)}$, όπου η άθροιση γίνεται στους υποχώρους, στους οποίους ανάγεται η αναπράσταση. Δηλαδή $L^{(\alpha)}\times L^{(\beta)}=\sum_\gamma(\alpha\beta|\gamma)L^{(\gamma)}$, που αποτελεί την ανάπτυξη Clebsch-Gordan, με τα $(\alpha\beta\,|\,\gamma)$ να αποτελούν τους *συντελεστές αναγωγής*. Προφανώς θα ισχύει ότι

$$(\alpha\beta|\gamma)=\frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(\alpha)}(A)\cdot\chi^{(\beta)}(A)\cdot\chi^{(\gamma)*}(A)=\frac{1}{g}\sum_{s=1}^{r}r_s\chi^{(\alpha)}(K_s)\cdot\chi^{(\beta)}(K_s)\cdot\chi^{(\gamma)*}(K_s).$$

Π.χ. για την ομάδα D_3 (ή την C_{3v}) είχαμε βρη ότι

$\chi^{(A_1\times A_1)}=\chi^{(A_1)}\cdot\chi^{(A_1)}=(1,1,1)$, $\chi^{(A_2\times A_2)}=\chi^{(A_2)}\cdot\chi^{(A_2)}=(1,1,1)$,

$\chi^{(\Gamma\times\Gamma)}=\chi^{(\Gamma)}\cdot\chi^{(\Gamma)}=(4,1,0)$, $\chi^{(A_1\times A_2)}=\chi^{(A_1)}\cdot\chi^{(A_2)}=(1,1,-1)$,

$\chi^{(A_1\times\Gamma)}=\chi^{(A_1)}\cdot\chi^{(\Gamma)}=(2,-1,0)$, $\chi^{(A_2\times\Gamma)}=\chi^{(A_2)}\cdot\chi^{(\Gamma)}=(2,-1,0)$.

Επομένως θα έχουμε τον εξής συνδυαστικό πίνακα, όπως εύκολα προκύπτει από την ανάλυση των παραπάνω χαρακτήρων στους χαρακτήρες της ομάδας D_3 (ή της C_{3v}).

	A_1	A_2	Γ
A_1	A_1	A_2	Γ
A_2	A_2	A_1	Γ
Γ	Γ	Γ	$A_1+A_2+\Gamma$

Παρατηρούμε από την ανάλυση ότι οι συντελεστές είναι εντελώς συμμετρικοί στους δείκτες α,β,γ όταν οι αναπαραστάσεις είναι πραγματικοί. Αλλιώς είναι συμμετρικοί μόνο ως προς τους δείκτες α και β.

Η αναγωγή των αναπαραστάσεων του γινομένου $D^{(\alpha\times\beta)}$ γίνεται μέσω ενός πίνακα $C^{\alpha\beta}$, που μετασχηματίζει την ορθογώνια βάση $\left\{e_i^{(\alpha)}e_j^{(\beta)}\right\}$ σε μια άλλη βάση αναγωγής $\left\{e_l^{(\gamma,s)}; s=1,2,\ldots(\alpha\beta|\gamma)\right\}$, μέσω των σχέσεων,

$$e_l^{(\gamma,s)} = \sum_{i,k}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i\;\; k|l\end{pmatrix} e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)} \text{ και } \sum_{\gamma}(\alpha\beta|\gamma)d_\gamma = d_\alpha d_\beta$$

Οι παράμετροι αλλαγής βάσης ονομάζονται συντελεστές Clebsch-Gordan (CGS) ή Wigner. Όταν οι βάσεις $\left\{e_i^{(\alpha)}e_j^{(\beta)}\right\}$ και $\left\{e_l^{(\gamma,s)}\right\}$ είναι ορθομοναδιαίες, τότε οι συντελεστές CGS ικανοποιούν τις συνθήκες ορθογωνιότητας,

$$\sum_{i,k}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma'\, s'\\ i\;\; k|l'\end{pmatrix}^{*}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i\;\; k|l\end{pmatrix} = \delta_{\gamma\gamma'}\delta_{ss'}\delta_{ll'}, \quad \left(C^{\alpha\beta}\right)^{-1}D^{(\alpha\times\beta)}C^{\alpha\beta} = \text{(διαγώνιος πίνακας με τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις)}$$

$$\sum_{\gamma,s,l}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i\;\; k|l\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i'k'|l\end{pmatrix}^{*} = \delta_{ii'}\delta_{kk'}, \text{ όπου } \quad m_\gamma = (\alpha\beta|\gamma)$$

και

$$e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)} = \sum_{\gamma,s,l}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i\;\; k|l\end{pmatrix}^{*} e_l^{(\gamma,s)} \text{ και } \sum_{s}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ i\;\; k|m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\beta|\gamma\, s\\ j\;\; l|n\end{pmatrix}^{*} = \frac{d_\gamma}{g}\sum_{A\in G}D_{ij}^{(\alpha)}(A)D_{kl}^{(\beta)}(A)D_{mn}^{(\gamma)*}(A)$$

Οι συντελεστές CGS δύνανται να επιλεγούν πραγματικοί για πολλές ομάδες και οι σχέσεις είναι συνήθως πιο απλές.
Πιο πολλά για τους CGS θα δούμε σε συνδυασμό με την πρόσθεση στροφορμών στην κβαντομηχανική. Για την ομάδα D_3 (ή C_{3v}) προκύπτει από την παραπάνω σχέση ότι $L^{\Gamma\times\Gamma} = L^{A_1} + L^{A_2} + L^{\Gamma}$, δηλαδή s=1 και εύκολα βρίσκουμε από τις αναπαραστάσεις ότι

$$\begin{pmatrix}\Gamma\Gamma|A_1\\ i\;\; k|1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}\Gamma\Gamma|A_2\\ i\;\; k|1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}\Gamma\Gamma|\Gamma\\ i\;\; k|1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \text{και}$$

$$\begin{pmatrix}\Gamma\Gamma|\Gamma\\ i\;\; k|2\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

Αν f_1, f_2 και g_1, g_2 είναι τα διανύσματα βάσης (συναρτήσεις) της $L^{(\Gamma)}$ τότε της $L^{(\Gamma\times\Gamma)}$ θα είναι τα

$$e^{(A_1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_1g_1 + f_2g_2\right),\ e^{(A_2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_1g_2 - f_2g_1\right), \text{ και}$$

$$e_1^{(\Gamma)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_1g_2 + f_2g_1\right),\ e_2^{(\Gamma)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_1g_1 - f_2g_2\right).$$

IV.7 Τανυστές

Τανυστής m τάξης ($T_{ijk..}$) είναι μια ποσότητα που μετασχηματίζεται, με την αλλαγή των αξόνων, όπως το γινόμενο m διανυσμάτων ($A_iB_jC_k\ldots$). Η βάση του τανυστή m τάξης θα είναι επομένως το γινόμενο των m γραμμικών χώρων $L^{(m)} = R_3^{(1)} \times R_3^{(2)} \times R_3^{(3)} \times \ldots \times R_3^{(m)}$. Έτσι μια περιστροφή D στον χώρο $L=R_3$ θα δημιουργεί μια περιστροφή $D^{(m)} = D \times D \times \ldots \times D$ στον γραμμικό χώρο $L^{(m)}$. Οι αντίστοιχοι πίνακες θα δημιουργούν μια τανυστική αναπαράσταση σε μορφή πινάκων της ομάδας SO(3). Αυτή η αναπαράσταση θα είναι συνήθως αναγώγιμη και θα αποτελείται από μη-αναγώγιμα μέρη.

Αν κάνουμε μια αλλαγή βάσης στον χώρο $L=R_3$ της μορφής $\hat{e}_i' = \sum D_{ki}\hat{e}_k$, τότε ένας τανυστής π.χ. 2^{ας} τάξης θα μετασχηματίζεται όπως $T_{ij}' = \sum_{k,l=1}^{3} D_{ik}D_{jl}T_{kl}$ ενώ ένας άλλος 1^{ης} τάξης (δηλαδή ένα διάνυσμα) όπως $T_i' = \sum_{k=1}^{3} D_{ik}T_k$.

Αν θεωρήσουμε φυσικές ποσότητες συστημάτων, που είναι αναλλοίωτες σε κάποια πράξη συμμετρίας, τότε και οι τανυστές που περιγράφουν την ποσότητα θα πρέπει να είναι αναλλοίωτοι επίσης.

Αν έχουμε έναν τανυστή m τάξης, τότε η αναπαράσταση είδαμε ότι θα είναι $D^{(m)} = D \times D \times \ldots \times D$. Αναλύοντας αυτήν την αναπαράσταση σε μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας, μπορούμε να βρούμε πόσες φορές εμφανίζεται η ταυτοτική αναπαράσταση A_1. Ο αριθμός αυτός θα ορίσει πόσα στοιχεία του τανυστή είναι απαραίτητα για να ορίσουμε όλα τα 3^m στοιχεία του. Επειδή όμως όλοι οι χαρακτήρες της ταυτοτικής αναπαράστασης είναι ίσοι με 1, ο αριθμός εμφάνισης της αναπαράστασης A_1 μπορεί να προκύψει από την ανάλυση των χαρακτήρων του τανυστή,

$$N = \frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(m)}(A)\chi_{A_1}^{*}(A) = \frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(m)}(A).$$

Ο τρόπος υπολογισμού μπορεί να γίνει πιο εύκολα κατανοητός μέσω κάποιων παραδειγμάτων, γιατί συνήθως το φυσικό πρόβλημα επιβάλλει επί πλέον συμμετρίες, όπως π.χ. την συμμετρία ως προς την εναλλαγή δύο δεικτών του τανυστή.

Ένα παράδειγμα τανυστή 4^{ης} τάξης

Η σχέση που συνδέει την ανηγμένη παραμόρφωση ε_{ij} με την τάση σ_{ij} είναι γραμμική (νόμος του Hooke)

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl},$$

όπου C_{ijkl} είναι οι ελαστικές σταθερές του στερεού.

Επειδή $\sigma_{ij}=\sigma_{ji}$ και $\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ji}$, οι αρχικά 81 σταθερές C_{ijkl} περιορίζονται σε 36. Υπάρχει όμως και η συμμετρία $C_{ijkl}=C_{klij}$, οπότε τελικά ο μέγιστος αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών ενός κρυστάλλου θα είναι 21.

Προφανώς οι τανυστές 2^{ας} τάξης σ_{ij} και ε_{ij} θα μετασχηματίζονται όπως το γινόμενο δύο διανυσμάτων $T_{ij}=A_iB_j$. Η αναπαράσταση ενός διανύσματος $\mathrm{D}^{(l=1)}$ μπορεί να γίνει μέσω της ομάδας περιστροφών για στροφορμή l=1 (δηλαδή τα διανύσματα είναι αντίστοιχα των σφαιρικών αρμονικών για l=1). Επομένως η αναπαράσταση για τον τανυστή 2^{ας}

τάξης θα είναι το γινόμενο Kronecker $D^{(1)}\times D^{(1)}$, που αναλύεται με βάση την πρόσθεση στροφορμών στο άθροισμα $D^{(0)}+D^{(1)}+D^{(2)}$.

Εύκολα βρίσκουμε ότι η 1-διάστατη αναλλοίωτη ποσότητα θα αντιστοιχεί στο βαθμωτό μέγεθος $T_{11}+T_{22}+T_{33}$, που αποτελεί το ίχνος του 3×3 πίνακα T_{ij}, ή ισοδύναμα, το βαθμωτό μέγεθος που προκύπτει από το εσωτερικό γινόμενο $\vec{A}\cdot\vec{B}$, που εκφράζει ο τανυστής 2^{ας} τάξης. Ο αναλλοίωτος χώρος D(1) θα είναι 3-διάστατος και αντιστοιχεί στις ποσότητες $(T_{23}-T_{32}),(T_{31}-T_{13}),(T_{12}-T_{21})$, που δεν είναι άλλες από το εξωτερικό γινόμενο $\vec{A}\times\vec{B}$ των αντίστοιχων διανυσμάτων και είναι ένα ψευδοδιάνυσμα, γιατί δεν αλλάζει πρόσημο με την αντιστροφή των αξόνων, όπως ένα συνηθισμένο διάνυσμα. Τέλος για τον 5-διάστατο χώρο βρίσκουμε ότι μια κατάλληλη βάση θα είναι οι ποσότητες $(T_{11}+T_{22}-2T_{33}),(T_{11}-T_{22}),(T_{23}+T_{32}),(T_{13}+T_{31}),(T_{12}+T_{21})$.

Αν ο τανυστής T_{ij} είναι συμμετρικός, τότε από τους τρεις χώρους, μόνο ο 1-διάστατος και ο 5-διάστατος είναι αποδεκτοί. Επομένως η αναπαράσταση για τους συμμετρικούς τανυστές σ_{ij} και ε_{ij} θα είναι $\left[D^{(1)}\times D^{(1)}\right]_{sym}=D^{(0)}+D^{(2)}$.

Έτσι ο τανυστής C_{ijkl} θα αναπαρίσταται με το γινόμενο Kronecker αλλά μόνο με το συμμετρικό, γιατί οι δείκτες (ij) και (kl) αντιμετατίθενται. Δηλαδή η αναπαράσταση του C_{ijkl} θα είναι τελικά,

$$\left[D^{(2)}+D^{(0)}\right]\times\left[D^{(2)}+D^{(0)}\right]_{sym}=D^{(4)}+2D^{(2)}+2D^{(0)}\ .$$

Επομένως ο 4^{ης} τάξης τανυστής των ελαστικών σταθερών θα ορίζεται από 9+2×5+2×1=21 ανεξάρτητες μεταβλητές στην περίπτωση της μικρότερης συμμετρίας του κρυατάλλου.

Αν εργαστούμε με τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας περιστροφών, αυτές θα περιγράφονται από τους χαρακτήρες $\chi^{(l)}(\varphi)=\dfrac{\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}}$.

Για l=0 $\chi^{(0)}(\varphi)=1$.

l=1 $\chi^{(1)}(\varphi)=1+2\cos\varphi$ (στις μη-κανονικές περιστροφές $\chi^{(1)}(-\varphi)=-\chi(\varphi)$)

l=2 $\chi^{(2)}(\varphi)=-1+2\cos\varphi+4\cos^2\varphi$

l=3 $\chi^{(3)}(\varphi)=-1-4\cos\varphi+4\cos^2\varphi+8\cos^3\varphi$

Ένα βαθμωτό μέγεθος θα παραμένει αναλλοίωτο με τις πράξεις συμμετρίας, επομένως οι χαρακτήρες του θα είναι

$\chi_{scalar}=1$.

Ένα διάνυσμα θα αντιστοιχεί στο l=1, επομένως στους δείκτες

$$\chi^{(1)}(\varphi)=1+2\cos\varphi\ .$$

Ένας τανυστής 2ας τάξης θα έχει ως χαρακτήρες τους:

$\chi^{(2)}(\varphi)=(1+2\cos\varphi)^2=1+4\cos^2\varphi+4\cos\varphi=\chi^{(2)}(\varphi)+\chi^{(1)}(\varphi)+\chi^{(0)}(\varphi)$ κλπ.

Αν ο τανυστής είναι συμμετρικός τότε $\chi^{sym}_{3\times3}(\varphi)=\chi^{(2)}(\varphi)+\chi^{(0)}(\varphi)$.

Μετά τις πράξεις εύκολα μπορούμε να αποδείξουμε ότι θα ισχύει

$$\chi^{sym}_{3\times3}(\varphi)=\frac{1}{2}\left[\chi^{(1)}(\varphi)\right]^2+\frac{1}{2}\chi^{(1)}(2\varphi)\ .$$

Επομένως πιο γενικά μπορούμε να γράψουμε ότι $\chi^{sym}(A) = \frac{1}{2}\left[\chi(A)\right]^2 + \frac{1}{2}\chi(A^2)$.

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση ενός τετραγωνικού κρυστάλλου συμμετρίας D_4 (422). Αυτός έχει 5 κλάσεις με χαρακτήρες

D_4	e	c_4^2	c_4, c_4^3	c_{2x}, c_{2y}	c'_{2x}, c'_{2y}
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0

Για την αναπαράσταση $D^{(l=4)}$, οι χαρακτήρες θα προκύψουν κατά τα γνωστά ίσοι προς, $\chi^{(4)}(e) = 9$, $\chi^{(4)}(c_2) = \chi^{(4)}(180^\circ) = 1$, $\chi^{(4)}(c_4) = \chi^{(4)}(90^\circ) = 1$.

Έτσι προκύπτει ότι $D^{(4)} = 2A_1 + A_2 + B_1 + B_2 + 2E$.

Για την $D^{(l=2)}$ αναπαράσταση θα έχουμε $\chi^{(2)}(e) = 5$, $\chi^{(2)}(c_2) = 1$, $\chi^{(2)}(c_4) = -1$. Επομένως $D^{(2)} = A_1 + B_1 + B_2 + E$. Τέλος $D^{(0)} = A_1$. Έτσι συνολικά θα έχουμε ότι $D^{(4)} + 2D^{(2)} + 2D^{(0)} = 6A_1 + A_2 + 3B_1 + 3B_2 + 4E$.

Παρατηρούμε ότι η αναπαράσταση A_1 εμφανίζεται 6 φορές. Επομένως οι ελαστικές σταθερές C_{ijkl} που μετασχηματίζονται όπως οι $D^{(4)} + 2D^{(2)} + 2D^{(0)}$ θα μπορούν να εκφραστούν με 6 σταθερές.

Οι σταθερές αυτές μπορούν να επιλεγούν με έναν γενικό τρόπο, αλλά συνήθως είναι εύκολα να τις βρούμε εφαρμόζοντας τις συμμετρίες της ομάδας. Έτσι από την συμμετρία $x \leftrightarrow y$ βρίσκουμε ότι $C_{11}=C_{22}$ και $C_{i4}=C_{i5}$, όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τον συνηθισμένο συμβολισμό $xx \to 1$, $yy \to 2$, $zz \to 3$, $xy \to 6$, $xz \to 5$ και $yz \to 4$.

Επίσης κατά την περιστροφή κατά 180^o, $x \to -x$, $y \to -y$, $z \to z$, οπότε οι όροι της μορφής *xxxz*, *yyyz*, *xxyz*, *yyxz*, *zzxz*, *zzyz* θα είναι μηδέν, δηλαδή $C_{15}=C_{14}=C_{24}=C_{25}=C_{35}=0$. Κατά την περιστροφή κατά 45^o ως προς τον άξονα z, $x \to y$, $y \to -x$, $z \to z$, οπότε $C_{16}=C_{26}=C_{36}=C_{46}=C_{56}=0$. Τελικά οι μη-μηδενικές συνιστώσες θα είναι οι C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, και C_{66}. Ο πίνακας των ελαστικών σταθερών στην ανηγμένη μορφή των δεικτών θα έχει για τον τετραγωνικό κρύσταλλο την μορφή,

$$C_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}.$$

IV.8 Θεώρημα Wigner-Eckart

Είδαμε ότι ένας τανυστής m τάξης θα αναπαρίσταται μέσω του γινομένου $D^{(m)} = D^{(1)} \times D^{(1)} \times \ldots \times D^{(1)}$. Επίσης είδαμε ότι στην πρόσθεση των στροφορμών ισχύει ότι $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}$. Έτσι $D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}$. Παρόμοια προκύπτει ότι $D^{(1)} \times D^{(1)} \times D^{(1)} = \left[D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}\right] \times D^{(1)} = D^{(0)} + 3D^{(1)} + 2D^{(2)} + D^{(3)}$, κλπ.
Σε κάθε περίπτωση ο τανυστής θα χωρίζεται σε μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις διαφόρων διαστάσεων. Π.χ. για m=2, είδαμε ότι ο τανυστής T_{ij} θα χωρίζεται σε ένα βαθμωτό μέγεθος, ένα ψευδοδιάνυσμα και έναν 5-διάστατο χώρο. Κάτι αντίστοιχο θα ισχύει για κάθε τανυστή.

Επί πλέον είδαμε ότι οι κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε εκφυλισμένες ενεργειακά καταστάσεις αποτελούν (συνήθως) μια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας συμμετρίας της χαμιλτονιανής του συστήματος. Δηλαδή υπό την επίδραση ενός στοιχείου συμμετρίας της ομάδας, κάθε ιδιοσυνάρτηση ($\phi_i^{(\alpha)}$) που αντιστοιχεί σε κάποια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση (α), θα μετασχηματίζεται ανάμεσα στις (d_α) εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις, που έχουν την ίδια ενέργεια, $\widehat{A}\varphi_i^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^{d_\alpha} D_{ki}^{(\alpha)}(A)\varphi_k^{(\alpha)}$.
Το ίδιο στοιχείο συμμετρίας όταν δράσει σ' έναν από τους αναλλοίωτους υποχώρους στους οποίους χωρίζεται ένας τανυστής m-τάξης, θα μετασχηματίζει τα d_α στοιχεία μεταξύ τους (π.χ. τα 5 στοιχεία του συμμετρικού τανυστή 2ας τάξης T_{ij}). Δηλαδή,

$$\widehat{A}T_j^{(\beta)} = \sum_{l=1}^{d_\beta} D_{lj}^{(\beta)}(A)T_l^{(\beta)}$$

Αν εφαρμόσουμε το στοιχείο συμμετρίας Α στην συνάρτηση $T_j^{(\beta)}\varphi_i^{(\alpha)}$ θα προκύψει ότι

$$\widehat{A}T_j^{(\beta)}\varphi_i^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^{d_\alpha} \sum_{l=1}^{d_\beta} D_{lj}^{(\beta)}(A)D_{ki}^{(\alpha)}(A)T_l^{(\beta)}\varphi_k^{(\alpha)} .$$

Επομένως τα στοιχεία $T_j^{(\beta)}\varphi_i^{(\alpha)}$ θα μετασχηματίζονται μεταξύ τους μέσω του γινομένου των πινάκων $D_{lj}^{(\beta)}(A)D_{ki}^{(\alpha)}(A)$. Δηλαδή όπως μετασχηματίζονται τα γινόμενα των ιδιοσυναρτήσεων $\phi_j^{(\beta)}\phi_i^{(\alpha)}$, μέσω του γινομένου $D^{(\beta)} \times D^{(\alpha)}$. Έχουμε όμως δη ότι το γινόμενο δύο αναπαραστάσεων αναλύεται στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις μέσω των συντελεστών Clebsch-Gordan ($\alpha\beta/\gamma$). Επί πλέον μπορούμε να επιλέξουμε έναν γραμμικό συνδυασμό των $\phi_j^{(\beta)}\phi_i^{(\alpha)}$, που θα διαγωνοποιεί και ανάγει την αναπαράσταση. Δηλαδή μπορούμε να γράψουμε ότι

$$\varphi_j^{(\beta)}\varphi_i^{(\alpha)} = \sum_{\gamma,s_\gamma,l} \begin{pmatrix} \beta\alpha | \gamma\, s_\gamma \\ j\ \ i\, | l \end{pmatrix}^{*} \varphi_{l,s_\gamma}^{(\gamma)}$$, όπου s_γ=1, 2, 3, ... ($\alpha\beta/\gamma$).

Αν πολλαπλασιάσουμε με την ιδιοσυνάρτηση $\phi_l^{(\gamma')*}$ και ολοκληρώσουμε θα έχουμε ότι

$\int \varphi_{l'}^{(\gamma')*} \varphi_j^{(\beta)} \varphi_i^{(\alpha)} d^3 r = \sum_{\gamma, s_\gamma, l} \begin{pmatrix} \beta\alpha | \gamma\, s_\gamma \\ j \;\; i | l \end{pmatrix}^* C_{s'_\gamma}^{(\gamma')}$, όπου το $C_{s'_\gamma}^{(\gamma')}$ θα εξαρτάται από τα $\gamma', s_{\gamma'}$, αλλά όχι από το *l*. Επειδή το $\phi_j^{(\beta)} \phi_i^{(\alpha)}$ θα μετασχηματίζεται με τον ίδιο τρόπο, θα έχουμε ότι $\left\langle \varphi_l^{(\gamma)} \middle| T_j^{(\beta)} \middle| \varphi_i^{(\alpha)} \right\rangle = \sum_{s_\gamma} \begin{pmatrix} \beta\alpha | \gamma\, s_\gamma \\ j \;\; i | l \end{pmatrix}^* C_{s_\gamma}^{(\gamma)}$, όπου το $C_{s_\gamma}^{(\gamma)}$ θα εξαρτάται από την μορφή του τελεστή $T_j^{(\beta)}$ και τα (γ) και (sγ), αλλά θα είναι ανεξάρτητο των i,j,l.

Αυτό αποτελεί το θεώρημα των Wigner-Eckart και τα στοιχεία $C_{s_\gamma}^{(\gamma)}$ ονομάζονται ανηγμένα στοιχεία του πίνακα. Είναι προφανές ότι αν η αναπαράσταση $D^{(\gamma)}$ δεν υπάρχει στην αναγωγή του γινομένου $D^{(\beta)} \times D^{(\alpha)}$, τότε τα στοιχεία του πίνακα θα μηδενίζονται. Με τρόπο αυτό μπορούμε να βρούμε κατ' ευθείαν τις μη-επιτρεπτές μεταπτώσεις που προκαλούνται από μια αλληλεπίδραση που αναπαριστάνεται με τον τελεστή-τανυστή *T*.

Στην ειδική περίπτωση που οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις εμφανίζονται το πολύ μια φορά, δηλαδή οι συντελεστές (*αβ/γ*) είναι ίσοι με 0 ή 1, τότε ο s_γ δεν είναι απαραίτητος και τα αποτελέσματα προκύπτουν σχετικά εύκολα μέσω κατάλληλων συναρτήσεων $\phi_j^{(\beta)} \phi_i^{(\alpha)}$. Για το παράδειγμα της ομάδας D_3 (ή της C_{3v}) και από τον συνδυαστικό πίνακα που είχαμε υπολογίσει προκύπτει εύκολα ότι $\left\langle A_1 \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| A_1 \right\rangle = \left\langle A_2 \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| A_1 \right\rangle = 0$. Επίσης ότι $\left\langle A_2 \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| A_2 \right\rangle = \left\langle A_2 \middle| T_1^{(A_1)} \middle| A_1 \right\rangle = \left\langle \Gamma, l \middle| T_1^{(A_1)} \middle| A_1 \right\rangle = 0$, κλπ.

	A_1	A_2	Γ
A_1	A_1	A_2	Γ
A_2	A_2	A_1	Γ
Γ	Γ	Γ	$A_1+A_2+\Gamma$

Στην ηλεκτρική διπολική προσέγιση, ο τελεστής της αλληλεπίδρασης θα είναι ένα διάνυσμα. Θα μετασχηματίζεται επομένως όπως η στροφορμή *l*=1, οπότε $\chi^{(1)}(e) = 3$, $\chi^{(1)}(c_3) = \chi^{(1)}(120^\circ) = 0$, και $\chi^{(1)}(c_2) = \chi^{(1)}(180^\circ) = 1$. Από την αναγωγή (με βάση αυτούς τους χαρακτήρες) εύκολα θα προκύψει ότι $D=A_1+\Gamma$. Από τις μέχρι τώρα αναλύσεις είναι προφανές ότι τα (*x*,*y*) θα μετασχηματιστούν όπως η αναπαράσταση *Γ*, ενώ το *z* όπως η A_1.

Συμπεραίνουμε ότι δεν θα έχουμε μεταπτώσεις ηλεκτρικού διπόλου με πολώσεις *x*, *y* ανάμεσα στις στιβάδες συμμετρίας $A_1 \leftrightarrow A_1$, $A_1 \leftrightarrow A_2$ και $A_2 \leftrightarrow A_2$. Ενώ για τις πολώσεις κατά τον άξονα *z* δεν θα έχουμε τις μεταπτώσεις $A_1 \leftrightarrow A_2$, $A_1 \leftrightarrow \Gamma$ και $A_2 \leftrightarrow \Gamma$. Από τους συντελεστές Clebsch-Gordan που υπολογίσαμε για την συγκεκριμμένη ομάδα, βρίσκουμε ότι

$$\left\langle \Gamma, l \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| A_1 \right\rangle = C^\Gamma \begin{pmatrix} \Gamma\, A_1 | \Gamma \\ j \;\; 1 \,| l \end{pmatrix}^* = \frac{C^\Gamma}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \left\langle \Gamma, l \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| A_2 \right\rangle = C^\Gamma \begin{pmatrix} \Gamma\, A_2 | \Gamma \\ j \;\; 1 \,| l \end{pmatrix}^* = \frac{C^\Gamma}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\left\langle \Gamma, 1 \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| \Gamma, i \right\rangle = C^\Gamma \begin{pmatrix} \Gamma\,\Gamma | \Gamma \\ j \;\; i | 1 \end{pmatrix}^* = \frac{C^\Gamma}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \left\langle \Gamma, 2 \middle| T_j^{(\Gamma)} \middle| \Gamma, i \right\rangle = C^\Gamma \begin{pmatrix} \Gamma\,\Gamma | \Gamma \\ j \;\; i | 2 \end{pmatrix}^* = \frac{C^\Gamma}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\left\langle A_1 \middle| T_1^{(A_1)} \middle| A_1 \right\rangle = C^{A_1} \begin{pmatrix} A_1\, A_1 | A_1 \\ 1 \;\; 1 \,| 1 \end{pmatrix}^* = C^{A_1}, \left\langle A_2 \middle| T_1^{(A_1)} \middle| A_2 \right\rangle = C^{A_2} \begin{pmatrix} A_1\, A_2 | A_2 \\ 1 \;\; 1 \,| 1 \end{pmatrix}^* = C^{A_2}, \text{ κλπ.}$$

Με βάση αυτά μπορούμε να συμπεράνουμε ότι για τις μεταπτώσεις $A_1 \leftrightarrow \Gamma$, η πόλωση της κατάστασης συμμετρίας Γ κατά τον άξονα x θα πρέπει να είναι μη-μηδενική. Επίσης βρίσκουμε ποιες μετατπώσεις και μη τι πολώσεις επιτρέπονται.

IV.9 Φωνόνια (κανονικοί τρόποι ταλάντωσης μορίων)

Σε ένα μόριο τα άτομα (ιόντα) θα κινούνται γύρω από την θέση ευσταθούς ισορροπίας, εκτελώντας αρμονικές (σε πρώτη προσέγγιση) ταλαντώσεις. Αυτές οι ταλαντώσεις μπορούν να αναλυθούν σε κανονικούς τρόπους ταλάντωσης, που για ένα μόριο με N άτομα θα είναι 3N σε αριθμό. Αν αφαιρεθούν από αυτές οι 3 τρόποι που εκφράζουν κίνηση στο σύνολο του μορίου, καθώς και τους 3 τρόπους, που εκφράζουν περιστροφή του μορίου, θα έχουμε 3N-6 εσωτερικούς τρόπους ταλάντωσης του μορίου. Αυτοί οι τρόποι ταλάντωσης θα υπάρχουν και σε ένα στερεό, με την διαφορά ότι θα υπάρχουν συνολικά 3N-3 εσωτερικοί τρόποι ταλάντωσης, αφού οι περιστροφές του μορίου δεν θα μπορούν να αφαιρεθούν. Στην περίπτωση του στερεού οι κανονικοί τρόποι ταλάντωσης ονομάζονται φωνόνια και τα επίπεδα κύματα θα δίνονται από συναρτήσεις της μορφής $Ae^{i\left[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k})t\right]}$. Οι εσωτερικές ταλαντώσεις του κάθε μορίου θα συνδυάζονται με εκείνες του διπλανού και θα δημιουργούν ένα οδεύον κύμα, που περιγράφεται από την προηγούμενη εξίσωση.

Το $\vec{k}$ θα παίρνει τιμές διακριτές σε ολόκληρη την ζώνη Brillouin. Για ένα κυβικό πλέγμα μα ακμή *a*, που σχηματίζει ένα υλικό μήκους *L*, το $\vec{k}$ θα παίρνει τιμές σε κάθε διάσταση $k_n = \frac{2\pi}{L}n$, όπου n=1,2,3,…$n_{\max}$ και $n_{\max} = \frac{L}{a}$. Κοντά στο κέντρο της ζώνης Brillouin, τα φωνόνια θα έχουν πρακτικά την ίδια κίνηση στα διπλανά μόρια, επομένως θα αντιστοιχούν στους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης του ελεύθερου μορίου (εκτός από τις περιστροφικές κινήσεις).

Το πρόβλημα προσδιορισμού των κανονικών τρόπων ταλάντωσης ενός μορίου θα το εξετάσουμε μέσω ενός παραδείγματος του μορίου του όζοντος. Στο μόριο αυτό τα άτομα του οξυγόνου είναι τοποθετημένα στις κορυφές ενός ισοπλεύρου τριγώνου, επομένως έχουν την πλήρη συμμετρία του τριγώνου. Η ομάδα αυτή έχει 12 στοιχεία και είναι η D_{3h} ($\bar{6}m2$). Αποτελείται από 6 κλάσεις με πίνακα χαρακτήρων

	e	m_z	c_3	$\bar{6}_z$	c_2	m_x	Συναρτήσεις	
A_1	1	1	1	1	1	1		z^2, x^2+y^2
A_2	1	1	1	1	-1	-1	I_z	
B_1	1	-1	1	-1	1	-1		
B_2	1	-1	1	-1	-1	1	z	
E_1	2	2	-1	-1	0	0	x,y	x^2-y^2,xy
E_2	2	-2	-1	1	0	0	I_x, I_y	xz,yz

Η δυναμική ενέργεια εξ αιτίας των ταλαντώσεων θα είναι $V = \frac{1}{2}\sum_i \omega_i^2 q_i^2$, όπου ω_i είναι οι ιδιοσυχνότητες και q_i τα πλάτη ταλάντωσης. Η ενέργεια δεν θα πρέπει να αλλάζει υπό την επίδραση των μετασχηματισμών της ομάδας του μορίου. Αν όλες οι ιδιοσυχνότητες είναι διαφορετικές, τότε και τα q_i^2 θα πρέπει να είναι αναλλοίωτα ως προς τις πράξεις συμμετρίας. Δηλαδή τα q_i θα πρέπει να μετασχηματίζονται μέσω μιας μονοδιάστατης αναπαράστασης (με στοιχεία ±1). Αν όμως ισχύει ότι $\omega_1=\omega_2=\omega_3$, τότε το αναλλοίωτο της V θα σημαίνει αναλλοίωτο για την ποσότητα $q_1^2+q_2^2+q_3^2$. Αυτό σημαίνει ότι τα τρία q_i θα πρέπει να μετασχηματίζονται μεταξύ τους. Δηλαδή να ορίζουν μια βάση αναπαράστασης, που στη γενική περίπτωση θα είναι μη-αναγώγιμη.

Πως μπορούμε όμως να βρούμε τους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης που επιτρέπει η συμμετρία του συστήματος; Ας δώσουμε τυχαίες μετατοπίσεις σε όλα τα άτομα του μορίου. Για το όζον, θα έχουμε δ_{xa}, δ_{ya}, δ_{za}, όπου a=1,2,3 αναφέρεται στα τρία άτομα του μορίου (τα ιόντα του οξυγόνου).

Μια περιστροφή c_{2y} θα επιφέρει τις εξής αλλαγές

$$\delta'_{x1}=-\delta_{x1},\ \delta'_{y1}=\delta_{y1},\delta'_{z1}=-\delta_{z1},$$

$$\delta'_{x2}=-\delta_{x3},\delta'_{y2}=\delta_{y3},\delta'_{z2}=-\delta_{z3},$$

$$\delta'_{x3}=-\delta_{x2},\delta'_{y3}=\delta_{y2},\delta'_{z3}=-\delta_{z2},$$

που θα παριστάνεται μέσω του πίνακα

	δ_{x1}	δ_{y1}	δ_{z1}	δ_{x2}	δ_{y2}	δ_{z2}	δ_{x3}	δ_{y3}	δ_{z3}
δ'_{x1}	-1								
δ'_{y1}		1							
δ'_{z1}			-1						
δ'_{x2}							-1		
δ'_{y2}								1	
δ'_{z2}									-1
δ'_{x3}				-1					
δ'_{y3}					1				
δ'_{z3}						-1			

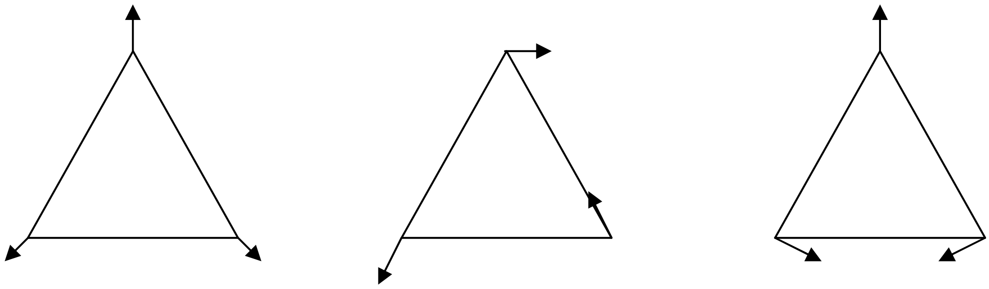
Προφανώς όλοι αυτοί οι πίνακες θα αποτελούν μια αναπαράσταση, αφού με τις πράξεις συμμετρίας οι διάφορες συνιστώσες θα αλλάζουν πάντα μεταξύ τους.
Ο χαρακτήρας της αναπαράστασης θα είναι –1. Στην τιμή του χαρακτήρα συνεισφέρουν μόνο τα άτομα που μένουν αμετάβλητα κατά την πράξη συμμετρίας. Κάθε άτομο που μετασχηματίζεται στον εαυτό του συνεισφέρει ±(1+2cosθ) ανάλογα αν είναι κανονικές περιστροφές ή μη-κανονικές κατά γωνία θ.

Με τον τρόπο αυτό εύκολα προκύπτει ότι

$$\chi(e)=9,\ \chi(m_z)=3,\ \chi(c_3)=0,\ \chi(\overline{6}_z)=0,\ \chi(c_2)=-1,\ \chi(m)=1.$$

Με βάση τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας $\overline{6}m2$, η αναπαράσταση (που θα είναι αναγώγιμη) μπορεί να αναλυθεί στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Από την ορθογωνιότητα των χαρακτήρων προκύπτουν εύκολα ότι $D_{tot}=A_1+A_2+B_2+2E_1+E_2$. Τρεις από τις τυχαίες μετατοπίσεις θα υποδηλώνουν μεταφορική κίνηση ολόκληρου του μορίου και θα μετασχηματίζονται όπως το διάνυσμα, δηλαδή όπως $D_{trans}=B_2+E_1$. Οι περιστροφές θα αντιστοιχούν στις I_x, I_y, I_z και επομένως $D_{rot} = A_2 + E_2$. Επομένως τελικά $D_{vib} = A_1 + E_1$.

Επειδή η αναπαράσταση A_1 είναι η ταυτοτική, οι τρόποι ταλάντωσης του μορίου δεν θα αλλάζουν σε όλες τις πράξεις συμμετρίας. Εύκολα βλέπει κανείς ότι πρόκειται για τον τρόπο που το μόριο μεγαλώνει (σαν να αναπνέει) όλο μαζί. Στον άλλο τρόπο ταλάντωσης θα έχουμε έναν διπλό ενεργειακό εκφυλισμό και συνήθως επιλέγουμε τα ιδιοδιανύσματα όπως στο σχήμα που ακολουθεί.



A_1-τρόπος　　　　　　E_1-τρόπος ενεργειακά εκφυλισμένος

IV.10 Οπτική φασματοσκοπία υπερύθρου (IR) και Raman

Τα φωνόνια μπορούν να μελετηθούν με οπτικές φασματοσκοπικές μεθόδους υπερύθρου (IR) και Raman. Στην πρώτη περίπτωση το ΗΜ κύμα απορροφάται από κάποιο φωνόνιο. Η αλληλεπίδραση του ΗΜ κύματος με την διπολική ροπή των μορίων μπορεί να παρασταθεί μέσω ενός τελεστή σε διανυσματική μορφή. Επομένως ο τανυστής αλληλεπίδρασης Τ στο θεώρημα των Wigner-Eckart θα είναι $1^{ης}$ τάξης. Στην περίπτωση της φασματοσκοπίας Raman, έχουμε μη-ελαστική σκέδαση του φωτός, που περιγράφεται μέσω ενός τανυστή $2^{ας}$ τάξης (πολωσιμότητας) που είναι συμμετρικός. Και στις δύο περιπτώσεις θα έχουμε μεταπτώσεις της μορφής $\left\langle \gamma \middle| T^{\beta} \middle| \alpha \right\rangle$, όπου α και γ εκφράζουν την αρχική και τελική κατάσταση των φωνονίων και Τ είναι ο τελεστής αλληλεπίδρασης. Για να βρούμε ποιές μεταπτώσεις επιτρέπονται θα πρέπει να δούμε αν περιλαμβάνονται οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της $\left|\gamma\right\rangle$ κατάστασης στο γινόμενο των αναπαραστάσεων $D^{(\alpha\times\beta)} = D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$. Δηλαδή αν η $D^{(\gamma)}$ υπάρχει στην $D^{(\alpha\times\beta)}$. Ισοδύναμα θα μπορούσαμε να δούμε αν υπάρχει η ταυτοτική αναπαράσταση A_1 στο τριπλό γινόμενο $D^{(\gamma)} \times D^{(\alpha\times\beta)}$, δηλαδή αν το τριπλό γινόμενο είναι αναλλοίωτο στις πράξεις συμμετρίας της ομάδας.

<u>*Παράδειγμα*</u>: Για το μόριο του νερού, γνωρίζουμε ότι τα ιόντα του υδρογόνου με εκείνο του οξυγόνου σχηματίζουν γωνία 104.5°. Το μόριο έχει ομάδα συμμετρίας την C_{2v}. Οι αναπαραστάσεις είναι

C_{2v} (2mm)			e	c_2	σ_v	σ_v'
x^2, y^2, z^2	z	A_1	1	1	1	1
xy	I_z	A_2	1	1	-1	-1
xz	I_y, x	B_1	1	-1	-1	1
yz	I_x, y	B_2	1	-1	1	-1

α) Για την φασματοσκοπία IR. Ο τανυστής είναι 1ης τάξης και εύκολα υπολογίζονται οι χαρακτήρες $\chi(e)=3,\ \chi(c_2)=-1,\ \chi(\sigma_v)=1,\ \chi(\sigma_v')=1$, και από εκεί ότι $T_i = A_1 + B_1 + B_2$. Αυτό προκύπτει και απ' ευθείας από τις χαρακτηριστικές συναρτήσεις μετασχηματισμού των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων του παραπάνω πίνακα.
Για τις μεταπτώσεις τα αποτελέσματα προκύπτουν από το γινόμενο των χαρακτήρων των αντίστοιχων αναπαραστάσεων, π.χ. $T_i\left|A_1\right\rangle = A_1 + B_1 + B_2$, $T_i\left|B_2\right\rangle = A_1 + A_2 + B_2$, κλπ.
Αν για το H_2O κάνουμε την αντίστοιχη ανάλυση των κανονικών τρόπων ταλάντωσης θα προκύψει ότι όλοι οι τρόποι είναι $D_{tot} = 3A_1 + A_2 + 2B_1 + 3B_2$. Όμως $D_{trans} = A_1 + B_1 + B_2$ (όπως ο τανυστής-διάνυσμα στην φασματοσκοπία υπερύθρου). Επίσης $D_{rot} = A_2 + B_1 + B_2$. Επομένως $D_{vib} = 2A_1 + B_2$.
Επειδή στο γινόμενο $D^{(\alpha\times\beta)}$ εμφανίζονται και οι δύο αναπαραστάσεις των εσωτερικών τρόπων ταλάντωσης, επιτρέποντια όλες οι μεταπτώσεις ανάμεσα στις καταστάσεις συμμετρίας A_1 και B_2.
β) Για την φασματοσκοπία Raman. Ο τανυστής είναι συμμετρικός 2ας τάξης. Αυτός αναλύεται (όπως είδαμε παραπάνω) σε $\chi^{sym}(a) = \frac{1}{2}[\chi(a)]^2 + \frac{1}{2}\chi(a^2)$. Με τον τρόπο αυτόν βρίσκουμε για τους χαρακτήρες ότι $\chi(e)=6,\ \chi(c_2)=2,\ \chi(\sigma_v)=2,\ \chi(\sigma_v')=2$ και για την αναπαράσταση ότι $T_{ij}^{sym} = 3A_1 + A_2 + B_1 + B_2$. Επομένως θα έχουμε,
$T_{ij}^{sym}\left|A_1\right\rangle = 3A_1 + A_2 + B_1 + B_2$ και $T_{ij}^{sym}\left|B_2\right\rangle = A_1 + A_2 + B_1 + 3B_2$.
Πάλι θα επιτρέπονται όλες οι μεταπτώσεις ανάμεσα στα φωνόνια συμμετρίας A_1 και B_2.

IV.11 Άρση εκφυλισμού εξ αιτίας κρυσταλλικού πεδίου (crystal field splitting)

Όταν τοποθετούμε κάποιο άτομο [με αρχική συμμετρία O(3)] σε κάποια θέση σε έναν κρύσταλλο, η τοπική συμμετρία που νοιώθει το άτομο μειούται και περιγράφεται από κάποια ομάδα G. Η τοπική συμμετρία καθορίζει την μορφή του δυναμικού V που νοιώθει το άτομο. Το αποτέλεσμα της επίδρασης του δυναμικού θα εξαρτάται από την σχετική ένταση του V ως προς τις άλλες αλληλεπιδράσεις που υπάρχουν στο άτομο, όπως ανάμεσα στα ηλεκτρόνια ή εκείνη μεταξύ σπιν και τροχιακού. Ανάλογα ποια είναι ισχυρότερη θα μας ορίσει με ποια θα ξεκινήσουμε θεωρώντας διαδοχικά τις άλλες δύο ως διαταραχές.

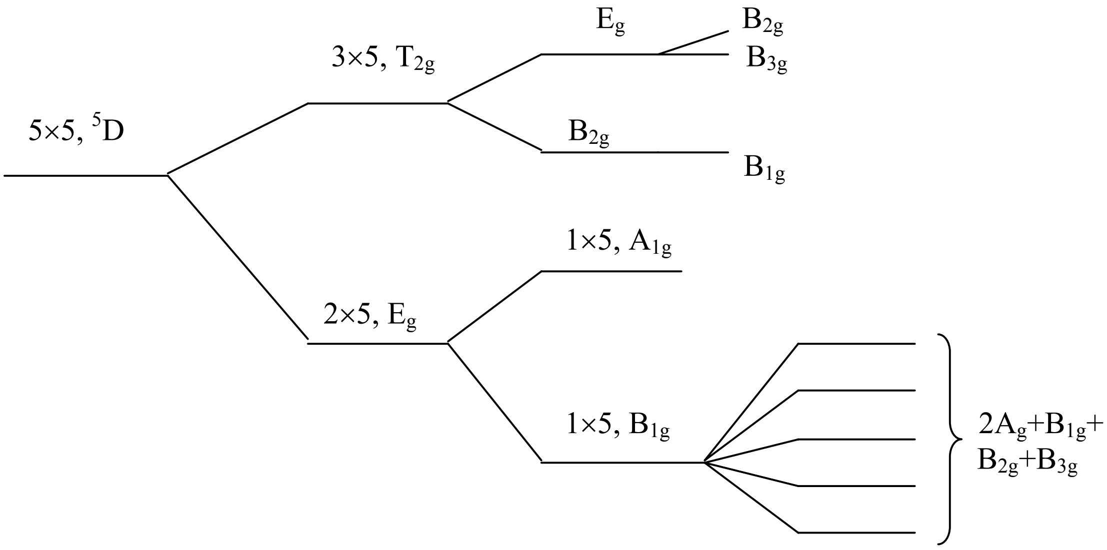
Ας υποθέσουμε ότι έχουμε το Cr (χρώμιο) σε μια ένωση με σθένος +2. Αρχικά το άτομο έχει 6 ηλεκτρόνιο σε μια ηλεκτρονική διάταξη $3d^6$, αλλά με σθένος +2 θα έχει διάταξη $3d^4$ στην εξωτερική στιβάδα. Στα άτομα με μικρό ατομικό αριθμό, μια καλή προσέγγιση είναι ότι αθροίζονται ξεχωριστά τα σπιν ($S=s_1+s_2+$..) και οι τροχιακές στροφορμές ($L=l_1+l_2+$…) και μετά τα δύο αθροίσματα. Σύμφωνα με τον κανόνα του Hund, η στιβάδα με την μικρότερη ενέργεια θα είναι εκείνη με σπιν παράλληλα, οπότε S=2. Επειδή υπάρχουν λιγότερα από τα μισά ηλεκτρόνια στην στιβάδα, την χαμηλότερη ενέργεια θα την έχει ο συνδυασμός με το μικρότερο δυνατό J=L+S. Αυτό προφανώς θα ισχύει για την στιβάδα ^5D με 5πλό εκφυλισμό λόγω σπιν.

Τοποθετούμε το ιόν σε κρύσταλλο με τοπική συμμετρία την οκταεδρική O (432) ή την O_h ($m3m$). Για τους χαρακτήρες της αναπαράστασης $D^{(2)}$ βρίσκουμε ότι $\chi(e)=5,\ \chi(c_3)=-1,\ \chi(c_2)=1,\ \chi(c_{2d})=1,\ \chi(c_4)=-1$, για τις 5 κλάσεις της ομάδας (ή τις 10 της O_h). Με βάση τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι $D^{(2)}=E_g+T_{2g}$, για την O_h ομάδα και χωρίς τον δείκτη g για την O (για όλες τις σχέσεις που ακολουθούν). Δηλαδή ο 5πλος αρχικός εκφυλισμός αίρεται εν μέρει σε ένα 2πλο και έναν 3πλο.

Αν μειώσουμε περαιτέρω την συμμετρία σε τετραγωνική D_{4h}, μπορούμε να βρούμε από την αντιστοίχηση των χαρακτήρων ότι $E_g \to A_{1g}+B_{1g}$, ενώ ο 3πλος εκφυλισμός αίρεται εν μέρει $T_{2g} \to E_g + B_{2g}$.

Τέλος με μια ορθορομβική παραμόρφωση (μείωση συμμετρίας) στην ομάδα D_{2h} θα προκύψει (πάλι από την αντιστοίχηση των χαρακτήρων των αντίστοιχων στοιχειών συμμετρίας) ότι $B_{2g} \to B_{1g}$, $E_g \to B_{2g}+B_{3g}$ (αίρεται ο εκφυλισμός), ενώ $B_{1g} \to A_g$.

Αν λάβουμε υπόψη και τα σπιν τότε στο συγκεκριμένο παράδειγμα θα έχουμε μια πεντάδα καταστάσεων λόγω σπιν (2S+1=5). Αν η χαμηλότερη ενεργειακά κατάσταση ήταν η B_{1g}, με το σπιν θα δημιουργήσει τις 5 καταστάσεις $2A_g+B_{1g}+B_{2g}+B_{3g}$. Αυτό προκύπτει γιατί η $D^{(2)}$ αναλύεται τελικά σε $2A_g+B_{1g}+B_{2g}+B_{3g}$, ενώ η B_{1g} μετασχηματίστηκε σε A_g και ισχύει ότι $A_g \times D^{(2)} = D^{(2)} = 2A_g+B_{1g}+B_{2g}+B_{3g}$.
Ένα παραστατικό διάγραμμα ενεργειακών καταστάσεων για τις διάφορες συμμετρίες είναι το παρακάτω.



Για τον υπολογισμό του διαχωρισμού των ενεργειακών σταθμών E_g και T_{2g}, μπορούμε να εργαστούμε με τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του υδρογόνου (σε πρώτη προσέγγιση). Για l=2 θα έχουμε 5 ενεργειακά εκφυλισμένες στάθμες $\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ (αγνοώντας το σπιν). Μέσω των τελεστών προβολής μπορούμε να συνθέσουμε τις $\psi_1^{E_g}=R_{n2}Y_2^0=\psi_{n20}$ και $\psi_2^{E_g}=R_{n2}Y_2^{2c}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n22}+\psi_{n2-2}\right)$ για τις E_g στιβάδες και

$$\psi_1^{T_{2g}} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n22} - \psi_{n2-2}\right), \psi_2^{T_{2g}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\psi_{n21} + \psi_{n2-1}\right), \psi_3^{T_{2g}} = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n21} + \psi_{n2-1}\right) \text{ για τις } T_{2g}$$

Η αλληλεπίδραση V μπορεί να αναπτυχθεί σε σφαιρικές αρμονικές επίσης και επειδή θα είναι αναλλοίωτη σε όλους τους μετασχηματισμούς της ομάδας O_h (*m*3*m*), θα μετασχηματίζεται όπως η ταυτοτική αναπαράσταση. Κρατώντας αρμονικές μέχρι 4ης τάξης προκύπτει ότι,

$$V(r,\vartheta,\varphi) = AY_0^0 + Br^4\left[Y_4^0 + \sqrt{\frac{5}{14\pi}}\left(Y_4^4 + Y_4^{-4}\right)\right] \quad \left(\text{γενικά } V = \sum_{l,m} b_{lm} Y_l^m\right)$$

Οπότε

$$E^{E_g} = \left\langle \psi_1^{E_g} \middle| V \middle| \psi_1^{E_g} \right\rangle = \frac{A}{2\sqrt{\pi}}\langle r\rangle - \frac{3B}{7\sqrt{\pi}}\langle r^4\rangle, \; E^{T_{2g}} = \frac{A}{2\sqrt{\pi}}\langle r\rangle + \frac{2B}{7\sqrt{\pi}}\langle r^4\rangle,$$

όπου $r^n = \int R_{n2}^*(r) R_{n2}(r) dr$.

Παρατηρούμε ότι αν η V είναι ελκτική B<0 και $E^{T_{2g}} < E^{E_g}$, ενώ αν είναι απωστική ισχύει το αντίθετο.

ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΘΕΩΡΙΑΣ ΟΜΑΔΩΝ ΣΤΗ ΦΥΣΙΚΗ

A.1 Μια ομάδα δημιουργείται με γεννήτορες τους πίνακες $u = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, $\upsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ και πράξη συνδυασμού τον πολλαπλασιασμό. Βρείτε τα στοιχεία της ομάδας. Είναι η ομάδα αβελιανή;

Λύση

Από συνδυασμό των στοιχείων προκύπτει ότι $u^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $u^3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $u^4 = e = v^2$, $uv = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $vu = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq uv$ και τέλος $u^2 v = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$. Έχουμε όλους τους συνδυασμούς τιμών πινάκων 2×2 με στοιχεία ±1. Ο πολλαπλασιασμός δύο στοιχείων θα δημιουργήσει κάποιον από αυτούς τους πίνακες. Επομένως θα υπάρχουν 8 στοιχεία $\{e, u, u^2, u^3, v, uv, vu, u^2v\}$ και η ομάδα δεν είναι αβελιανή.

A.2 Βρείτε τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας C_5, που αποτελείται από έναν άξονα συμμετρίας 5ης τάξης μόνο.

Λύση

Η ομάδα C_5 είναι αβελιανή και επομένως έχει 5 κλάσεις όσα στοιχεία και 5 μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις, που θα είναι όλες μονοδιάστατες. Αν χ είναι ο χαρακτήρας μιας αναπαράστασης του στοιχείου c_5, τότε το στοιχείο c_5^k θα έχει χαρακτήρα χ^k και για k=5, $c_5^5 = e$, οπότε και χ^5=1. Δηλαδή το χ είναι κάποια από τις ρίζες $e^{2\pi i n/5}$, με n = 0, 1, 2, 3 και 4. Επομένως ο πίνακας χαρακτήρων θα είναι (λαμβάνοντας υπόψη ότι χ^5=1, έτσι π.χ. $\chi^4\chi^4$=χ^8=χ^3, $\chi^4\chi^4\chi^4$=χ^{12}=χ^2, κλπ):

	e	c_5	c_5^2	c_5^3	c_5^4
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	χ	χ^2	χ^2	χ^2
Γ_3	1	χ^4	χ^3	χ^2	χ
Γ_4	1	χ^2	χ^4	χ	χ^3
Γ_5	1	χ^3	χ	χ^4	χ^2

A.3 Τα δύο εξωτερικά ηλεκτρόνια ενός ατόμου είναι τοποθετημένα στις στιβάδες 2p3p. Το άτομο τοποθετείται σε υλικό κυβικής συμμετρίας (ομάδα Ο). Αν αγνοήσουμε τα σπιν, βρείτε πως αναλύονται οι στιβάδες. Αν υπήρχε ένα μόνο ηλεκτρόνιο στη στιβάδα 2p, τι θα συνέβαινε;

Λύση

Οι στιβάδες p έχουν L=1, επομένως οι χαρακτήρες $D^{(L)}$ για την ομάδα Ο (432) θα είναι $\chi = \dfrac{\sin 3\varphi/2}{\sin \varphi/2}$=3 ($\varphi$=0°), 0 ($\varphi$=120°), -1 ($\varphi$=180°), 1 ($\varphi$=90°). Δηλαδή για τις 5 κλάσεις έχει τους χαρακτήρες 3, 0, -1, -1 και 1. Για το γινόμενο $D^{(L)}\times D^{(L)}$ οι χαρακτήρες θα είναι τα αντίστοιχα γινόμενα από τις 5 κλάσεις, δηλαδή 9, 0, 1, 1, 1. Εύκολα υπολογίζουμε την ανάλυση σύμφωνα με τους χαρακτήρες αυτούς ότι $D^{(L)}\times D^{(L)}$=A_1+E+T_1+T_2. Δηλαδή αναλύεται σε μια 1-διάστατη (μονή στιβάδα), σε μια 2-διάστατη (διπλά εκφυλισμένη) και δύο 3-διάστατες (τριπλά εκφυλισμένες). Αν είχαμε ένα ηλεκτρόνιο στην στιβάδα p, θα είχαμε σύμφωνα με τους χαρακτήρες μια T_1. Επομένως δεν θα υπάρξει μείωση του αρχικού τριπλού εκφυλισμού.

A.4 Πως μειώνεται η συμμετρία μιας στιβάδας *p* ενός κρυστάλλου συμμετρίας O (432) από το κέντρο της ζώνης Brillouin (σημείο Γ) προς το σημείο Λ της κατεύθυνσης (111);

Λύση

Στο κέντρο της ζώνης Brillouin, το ηλεκτρόνιο έχει την πλήρη συμμετρία της ομάδας. Στην *p* στιβάδα το ηλεκτρόνιο παρίσταται με σφαιρικές αρμονικές με χαρακτήρες $\chi = \dfrac{\sin 3\varphi/2}{\sin\varphi/2}$ =3 (φ=0^o), 0 (φ=120^o), -1 (φ=180^o), 1 (φ=90^o), για τις κλάσεις της ομάδας O (432). Δηλαδή μετασχηματίζεται όπως η μη-αναγώγιμη αναπαράσταση T_1 της ομάδας. Κινούμενοι κατά την κατεύθυνση (111) θα υπάρξει μείωση της αρχικής συμμετρίας σε C_{3v}, όπως παρατηρεί κανείς εύκολα αν υποθέσει ότι έχει μια παραμόρφωση του αρχικού κύβου κατά την διαγώνιο (111). Σύμφωνα με τον πίνακα χαρακτήρων της νέας ομάδας συμμετρίας C_{3v}, έχουμε

C_{3v} (3m)	e	$2c_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Οι χαρακτήρες στην νέα ομάδα θα είναι χ(e)=χ(φ=0)=3, χ(c_3)=χ(φ=120^o)=0 και χ(σ_v)=1 (αντιστοιχεί σε x→x, y→-y, z→z). Όπως φαίνεται κατευθείαν από τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας C_{3v}, αυτοί οι χαρακτήρες αντιστοιχούν σε A_1+E. Επομένως T_1 (αρχικά) → A_1+E (τελικά).

A.5 Το μόριο του νερού έχει τα τρία άτομα σε διάταξη ισοσκελούς τριγώνου με γωνία κορυφής (άτομο οξυγόνου) 104.5^o και ομάδα συμμετρίας την C_{2v} με 4 στοιχεία όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα χαρακτήρων. Βρείτε τις συμμετρίες των τρόπων ταλάντωσης που οφείλονται στην συνολική μετατόπιση, στην περιστροφή του μορίου και στις εσωτερικές ταλαντώσεις.

Λύση

Αν δώσουμε τυχαίες μετατοπίσεις u_{ix}, u_{iy}, u_{iz} (i=1,2,3) στα τρία άτομα, θα έχουμε μια 9-διάστατη αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας συμμετρίας του μορίου. Αν εφαρμόσουμε τις πράξεις συμμετρίας, εύκολα βρίσκουμε τους χαρακτήρες της αναπαράστασης από τα άτομα που παραμένουν αμετάβλητα. Έτσι προκύπτει ότι : χ(e)=9, χ(c_2)=-1 (μόνο το άτομο του οξυγόνου παραμένει αμετάβλητο και x→-x, y→-y, z→z), χ(σ_v)=3 (όλα τα άτομα παραμένουν αμετάβλητα κατά την ανάκλαση ως προς το επίπεδο του H_2O και x→-x, y→y, z→z), χ(σ'_v)=1 (μόνο το οξυγόνο μένει αμετάβλητο και x→x, y→-y, z→z). Από την ορθογωνιότητα των χαρακτήρων αναλύουμε αυτούς τους χαρακτήρες και βρίσκουμε ότι ν(A_1)=3, ν(A_2)=1, ν(B_1)=2 και ν(B_2)=3. Δηλαδή ότι $D^{tot}(H_2O)=3A_1\oplus A_2\oplus 2B_1\oplus 3B_2$. Από τον πίνακα χαρακτήρων και συναρτήσεων της ομάδας έχουμε

C_{2v} (2mm)			e	c_2	σ_v	σ'_v
x^2, y^2, z^2	z	A_1	1	1	1	1
xy	I_z	A_2	1	1	-1	-1
xz	I_y, x	B_1	1	-1	-1	1
yz	I_x, y	B_2	1	-1	1	-1

ότι οι περιστροφές μετασχηματίζονται (όπως τα I_x, I_y, I_z) με $A_2\oplus B_1\oplus B_2$ και οι παράλληλες μετατοπίσεις (όπως τα x,y,z) με $A_1\oplus B_1\oplus B_2$. Επομένως οι εσωτερικές ταλαντώσεις σύμφωνα με τα υπόλοιπες $2A_1\oplus B_2$.

A.6 Θεωρούμε τις εξής συναρτήσεις $f_1(x)=x$, $f_2(x)=1-x$, $f_3(x)=\dfrac{x}{1-x}$, $f_4(x)=\dfrac{1}{x}$, $f_5(x)=\dfrac{1}{1-x}$, και $f_6(x)=\dfrac{x-1}{x}$. Αν ο νόμος συνδυασμού δύο συναρτήσεων ορίζεται ως η αντικατάσταση της μίας μέσα στην άλλη δείξτε ότι (α) $f_5 f_6 = f_6 f_5 = f_i^2 = f_1$ (όπου *i*=1,2,3,4) και (β) το σύνολο αυτών των συναρτήσεων αποτελεί ομάδα ισομορφική της ομάδας S_3.

Λύση

Αν εφαρμόσουμε τον νόμο συνδυασμού δύο συναρτήσεων θα βρούμε ότι $f_i(f_1(x)) = f_1(f_i(x)) = f_i(x)$ για κάθε $f_i(x)$. Επομένως η $f_1(x)$ αντιστοιχεί στο στοιχείο *e* μιας ομάδας. Επίσης $f_5(f_6(x)) = \dfrac{1}{1-f_6(x)} = \dfrac{1}{1-\dfrac{x-1}{x}} = x = f_1(x) = f_6(f_5(x)) = \dfrac{f_5 - 1}{f_5} = \dfrac{\dfrac{1}{1-x}-1}{\dfrac{1}{1-x}}$.

Δηλαδή $f_5 f_6 = f_6 f_5 = f_1$, όπου η $f_1(x)$ αντιστοιχεί στο μοναδιαίο στοιχείο της ομάδας. Παρόμοια βρίσκουμε ότι $f_i^2(x) = f_i(f_i(x)) = x = f_1(x)$. Η ομάδα έχει το ίδιο συνδυαστικό πίνακα και είναι ισομορφική της S_3, που αναλύεται στην παρακάτω άσκηση και έχει τα εξής 6 στοιχεία {e,(12),(23),(31),(123),(321)}. Η αντιστοίχηση μπορεί να είναι της μορφής $f_1 \to e$, $f_2, f_3, f_4 \to (12),(23),(31)$ και $f_5, f_6 \to (123),(321)$.

Α.7 Κατασκευάστε τον συνδυαστικό πίνακα της ομάδας αντιμεταθέσεων S_3. Βρείτε ένα σύστημα αναπαραστάσεων με πίνακες για την διδιάσταση μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας.

Λύση

Η ομάδα αποτελείται από 3!=6 στοιχεία που είναι {e,(12),(23),(31),(123),(321)}. Τα γινόμενα των στοιχείων δίνουν π.χ. (12)(23)=(1→2, 2→ 1, 3→ 3)(2→3, 3→2, 1→1)=(1→2, 2→3, 3→1)=(123), κλπ. Έτσι φτιάχνεται ο συνδυαστικός πίνακας που ακολουθεί

	e	(12)	(23)	(31)	(123)	(321)
E	e	(12)	(23)	(31)	(123)	(321)
(12)	(12)	E	(123)	(321)	(23)	(31)
(23)	(23)	(321)	e	(123)	(31)	(12)
(31)	(31)	(123)	(321)	e	(12)	(23)
(123)	(123)	(31)	(12)	(23)	(321)	E
(321)	(321)	(23)	(31)	(12)	e	(123)

Εύκολα βρίσκουμε ότι υπάρχουν τρεις κλάσεις {e}, {(12),(23),(31)} και {(123),(321)}. Επομένως $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 6 \;\Rightarrow\; d_1 = d_2 = 1, d_3 = 2$. Ο πίνακας χαρακτήρων προκύπτει από την ορθογωνιότητα και είναι ο ίδιος με τις ομάδες D_3 (23) και C_{3v} (3m). Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε επομένως τους πίνακες από αυτές τις ισόμορφες ομάδες, που είναι για την E μη-αναγώγιμη αναπαράσταση

$$D(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad D(23) = D(c_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad D(12) = D(c_2'') = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

$$D(31) = D(c_2') = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix},\quad D(123) = D(c_3) = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix},\quad D(321) = D(c_3^2) = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}$$

Α.8 Βρείτε την τάξη μιας ομάδας που δημιουργείται από δύο γεννήτορες x,y που υπακούουν στις σχέσεις $x^3=y^2=(xy)^2=$e. Ποιες είναι οι δυνατές υποομάδες;

Λύση

Προφανώς e, x, x^2, y θα είναι 4 από τα στοιχεία. Επίσης θα είναι και τα xy και το x^2y. Επί πλέον ο συνδυασμός ανά δύο αυτών των 6 στοιχείων δίνει ένα από αυτά, π.χ. $(xy)(x^2y) = xyx^2y = (xy)^{-1}x^2y = y^{-1}x^{-1}x^2y = y^{-1}xy = yxy = y(xy)^{-1}= yy^{-1}x^{-1}=x^{-1}=x^2$. Επίσης $(x^2y)^2=x^2yx^2y=xxyx^2y=xy^{-1}x^{-1}x^2y=(xy)(xy)=$e. Υποομάδες θα είναι $\{e,x,x^2\}$, $\{e,y\}$, $\{e,xy\}$, $\{e,x^2y\}$.

Α.9 Ποια είναι η τάξη μιας ομάδας που δημιουργείται από δύο γεννήτορες που ικανοποιούν τις σχέσεις $x^3=y^2=(xy)^3=e$;

Λύση

Το στοιχείο x θα αντιστοιχεί σε έναν άξονα 3ης τάξης και ο y σε έναν 2ης τάξης. Τελικά η ομάδα θα μοιάζει με εκείνη του κανονικού τετραέδρου T (23) με 12 στοιχεία.

Α.10 Αν το κάθε στοιχείο $x\neq e$ μιας ομάδας έχει τάξη 2, δείξτε ότι η ομάδα είναι αβελιανή.

Λύση

Έστω δύο τυχαία στοιχεία της ομάδας x,y. Τότε το στοιχείο xy θα ανήκει στην ομάδα και προφανώς θα έχει τάξη 2, δηλαδή θα πρέπει $(xy)^2=e=x^2=y^2$. Επομένως θα πρέπει να ισχύει ότι $xyxy=e=x^2y^2=xxyy$ δηλαδή θα πρέπει $xy=yx$.

Α.11 Αποδείξτε ότι η ομάδα που γεννιέται από τα στοιχεία a,b ώστε $a^2=b^k=(ab)^2=e$ $(k\geq 3)$, είναι ισόμορφη εκείνης που γεννιέται από τα στοιχεία $x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ και $y=\begin{pmatrix}\xi & 0\\ 0 & \xi^{-1}\end{pmatrix}$, όπου $\xi=\exp\left(\frac{2\pi i}{k}\right)$.

Λύση

Προκύπτει ότι $x^2=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=e$, $y^2=\begin{pmatrix}\xi & 0\\ 0 & \xi^{-2}\end{pmatrix}$, $y^k=\begin{pmatrix}\xi^k & 0\\ 0 & \xi^{-k}\end{pmatrix}=e$, $xy=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi & 0\\ 0 & \xi^{-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \xi^{-1}\\ \xi & 0\end{pmatrix}$ και $(xy)^2=\begin{pmatrix}0 & \xi^{-1}\\ \xi & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \xi^{-1}\\ \xi & 0\end{pmatrix}=e$. Επομένως έχουν τους ίδιους γεννήτορες και θα είναι ισόμορφες.

Α.12 Για την ομάδα D_4 βρείτε τα στοιχεία της ομάδας, τις κλάσεις και τις υποομάδες.

Λύση

Αν g και h είναι οι γεννήτορες (ένας άξονας 4ης τάξης και ένας 2ας) τότε τα στοιχεία της ομάδας θα είναι $D_4=\{e,g,g^2,g^3,h,gh,g^2h,g^3h\}$, όπου $g^4=h^2=(gh)^2=e$. Από τον συνδυαστικό πίνακα εύκολα βρίσκουμε ότι οι κλάσεις θα είναι οι $\{e\}$, $\{g^2\}$, $\{g,g^3\}$, $\{h,g^2h\}$, $\{gh,g^3h\}$.
Οι υποομάδες τάξης 2 θα είναι: $\{e,h\}$, $\{e,gh\}$, $\{e,g^2\}$, $\{e,g^2h\}$, $\{e,g^3h\}$.
Ενώ τάξης 4: $\{e,g,g^2,g^3\}$, $\{e,g^2,gh,g^3h\}$, $\{e,g^2,h,g^2h\}$.

Α.13 Πως μειώνεται η συμμετρία μιας στιβάδας *p* ενός κρυστάλλου συμμετρίας O_h (m3m) στο κέντρο της ζώνης Brillouin, αν κινηθούμε προς κάποιο σημείο Δ κατά μήκος του άξονα k_x; Διερευνήστε επίσης την κίνηση προς τα σημεία Σ (διεύθυνση (101)) και Λ (διεύθυνση (111)).

Λύση

Οι κυματοσυναρτήσεις σε έναν περιοδικό κρύσταλλο είναι συναρτήσεις Bloch δηλαδή της μορφής $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, όπου $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ μια περιοδική συνάρτηση στο κρυσταλλικό πλέγμα. Αν η εξίσωση του Schrödinger για το ηλεκτρόνιο είναι της μορφής $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$ και με την αντικατάσταση της παραπάνω μορφής προκύπτει η εξίσωση $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_{\vec{k}} + \left[V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m}\vec{k}\cdot\vec{p}\right]u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)u_{\vec{k}}(\vec{r})$. Στην θέση $\vec{k} = 0$ (κέντρο ζώνης Brillouin) η κυματοσυνάρτηση θα έχει την πλήρη συμμετρία της σημειακής ομάδας που καθορίζει το δυναμικό $V(\vec{r})$. Για $\vec{k} \neq 0$ θα υπάρξει μείωση της συμμετρίας ανάλογα με την διεύθυνση του $\vec{k}$. Στην συγκεκριμένη περίπτωση κατά τον άξονα k_x (σημείο Δ) η συμμετρία θα μειωθεί σε C_{4v}.

Στο σημείο $\vec{k} = 0$ οι τρεις εκφυλισμένες καταστάσεις μετασχηματίζονται όπως τα x,y,z, που αντιστοιχούν στη μη-αναγώγιμη αναπαράσταση T_{1u} της ομάδας O_h (m3m). Οι χαρακτήρες της T_{1u} θα αντιστοιχιστούν με τους $\chi(e) = 3,\quad \chi(c_{2x}) = -1,\quad \chi(c_{4x}) = 1,\quad \chi(\sigma_v) = 1,\quad \chi(\sigma_d) = 1$ της ομάδας C_{4v}. Επομένως θα έχουμε την αναγωγή $T_{1u} \to A_1 + E$ όπως προκύπτει από τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας C_{4v}.

Για το σημείο Σ κατά μήκος της διεύθυνσης (101), θα έχουμε μείωση της συμμετρίας σε C_{2v} (2mm). Αυτή η ομάδα έχει 4 μη-αναγώγιμες μονοδιάστατες αναπαραστάσεις για τις 4 κλάσεις $(\{e\}, \{c_{2y}\}, \{m_x\}, \{m_y\})$. Οι χαρακτήρες της T_{1u} θα αντιστοιχιστούν τώρα στους $\chi(e) = 3,\quad \chi(c_{2y}) = -1,\quad \chi(m_x) = 1,\quad \chi(m_z) = 1$ και εύκολα προκύπτει ότι $T_{1u} \to A_1 + B_1 + B_2$.

Τέλος για το σημείο Λ κατά την διεύθυνση (111) η συμμετρία θα γίνει C_{3v} με 3 μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις A_1+A_2+E. Οι χαρακτήρες της αρχικής συμμετρίας θα γίνουν τώρα $\chi(e) = 3,\quad \chi(c_3) = 0,\quad \chi(m) = 1$. Επομένως προκύπτει ότι τότε $T_{1u} \to A_1 + E$.

Α.14 Βρείτε πως μετασχηματίζεται μια στιβάδα f (ℓ=3) ενός ελεύθερου ηλεκτρονίου, όταν βρεθεί σε κρυσταλλικό πεδίο κυβικής συμμετρίας O (432) και μετά αν μειωθεί η συμμετρία του σε D_4 (422). Αγνοήστε το σπιν.

Λύση

Οι χαρακτήρες της στιβάδας f (ℓ=3) ενός ελεύθερου ατόμου περιγράφονται από την συνάρτηση $\chi_\ell(\varphi) = \sin\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\varphi \Big/ \sin\frac{\varphi}{2}$, που στην περίπτωση της ομάδας O (432) δίνει τις ακόλουθες τιμές για τις 5 κλάσεις : $\chi(e) = 7, \chi(c_3) = 1, \chi(c_4^2) = -1, \chi(c_2) = -1, \chi(c_4) = -1$. Από τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας προκύπτει εύκολα ότι η αναπαράσταση αναλύεται στις $A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$ με χαρακτήρες των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων :

Για την A_2 $\chi(e) = 1, \chi(c_3) = 1, \chi(c_4^2) = 1, \chi(c_2) = -1, \chi(c_4) = -1$

Για την T_1 $\chi(e) = 3, \chi(c_3) = 0, \chi(c_4^2) = -1, \chi(c_2) = -1, \chi(c_4) = 1$

Για την T_2 $\chi(e) = 3, \chi(c_3) = 0, \chi(c_4^2) = -1, \chi(c_2) = 1, \chi(c_4) = -1$

Έτσι ο αρχικός 7πλός εκφυλισμός καταλήγει στον κρύσταλλο συμμετρίας O (432) σε μια απλή και δύο τριπλές στιβάδες (αγνοώντας το σπιν).

Με την μείωση της συμμετρίας σε D_4 (422), Οι χαρακτήρες της στιβάδας συμμετρίας A_2 στην Ο (432) θα αντιστοιχιστούν στους $\chi(e)=1,\ \chi(c_{4z}^2)=1,\ \chi(c_{4z})=-1,\ \chi(c_{2x})=1,\ \chi(c_{2d})=-1$ των πέντε κλάσεων της ομάδας D_4. Αυτοί οι χαρακτήρες αντιστοιχούν στην B_1 μη-αναγώγιμη αναπαράσταση. Παρόμοια για την στιβάδα T_1 βρίσκουμε ότι οι χαρακτήρες στην ομάδα Ο αντιστοιχίζονται στην D_4 με τους $\chi(e)=3,\ \chi(c_{4z}^2)=-1,\ \chi(c_{4z})=1,\ \chi(c_{2x})=-1,\ \chi(c_{2d})=-1$, που αναλογούν στο άθροισμα $A_2 \oplus E$. Δηλαδή έχουμε ανάλυση της τριπλά εκφυλισμένης στιβάδας σε μια διπλά εκφυλισμένη και μια μονή στιβάδα. Τέλος για την άλλη τριπλά εκφυλισμένη στιβάδα T_2 προκύπτουν οι χαρακτήρες $\chi(e)=3,\ \chi(c_{4z}^2)=-1,\ \chi(c_{4z})=-1,\ \chi(c_{2x})=-1,\ \chi(c_{2d})=1$ που αναλογούν στο άθροισμα $B_2 \oplus E$.

A.15 Σύμφωνα με ποια μη-αναγώγιμη αναπαράσταση της ομάδας Ο (432) μετασχηματίζεται η διαταραχή $H' = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2$; Αν εφαρμοστεί αυτή η διαταραχή σε μια αρχική κατάσταση κυβικής συμμετρίας (της ομάδας Ο), τι είδους μεταπτώσεις επιτρέπονται;

Λύση

Μπορούμε να γράψουμε την διαταραχή ως εξής:

$$H' = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2 = \left(\frac{A-B}{2}\right)\left(x^2 - y^2\right) - \left(\frac{A+B}{2}\right)\left(3z^2 - r^2\right)$$

Από τον πίνακα χαρακτήρων και μετασχηματισμού συναρτήσεων της ομάδας Ο (432) προκύπτει ότι οι δύο συναρτήσεις $\left(x^2 - y^2, 3z^2 - r^2\right)$ μετασχηματίζονται μεταξύ τους στην αναπαράσταση E της ομάδας. Η μετάπτωση από μια αρχική κατάσταση $|i\rangle$ σε μια τελική $|f\rangle$ μέσω της διαταραχής H', θα εξαρτάται από το $\langle f|H'|i\rangle$ και θα πρέπει η κατάσταση $|f\rangle$ να έχει συμμετρία που να συμπεριλαμβάνεται στο γινόμενο $D_{H'} \otimes D_{|i\rangle}$. Η αρχική κατάσταση θα έχει κάποια συμμετρία από τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις A_1, A_2, E, T_1, T_2. Έτσι θα έχουμε τους συνδυασμούς με τους αντίστοιχους χαρακτήρες και αναγωγές :

$\chi(E \otimes A_1) = 2,-1,2,0,0 \quad \Rightarrow \quad E \otimes A_1 = E$

$\chi(E \otimes A_2) = 2,-1,2,0,0 \quad \Rightarrow \quad E \otimes A_2 = E$

$\chi(E \otimes E) = 4,1,2,0,0 \quad \Rightarrow \quad E \otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E$

$\chi(E \otimes T_1) = 6,0,-2,0,0 \quad \Rightarrow \quad E \otimes T_1 = T_1 + T_2$

$\chi(E \otimes T_2) = 6,0,-2,0,0 \quad \Rightarrow \quad E \otimes T_2 = T_1 + T_2$

Επομένως τις μεταπτώσεις που επιτρέπονται θα είναι της μορφής :

$A_1 \leftrightarrow E,\quad A_2 \leftrightarrow E,\quad E \leftrightarrow E,\quad T_1 \leftrightarrow T_1,\quad T_2 \leftrightarrow T_2,\quad T_1 \leftrightarrow T_2$

A.16 Ξέρουμε ότι η ομάδα που αναπαριστά όλες τις δυνατές μεταθέσεις τριών αριθμών είναι η S_3. Βρείτε έναν τρόπο να αναπαρασταθεί αυτή η ομάδα με πίνακες 3×3. Αποδείξτε ότι αυτή η αναπαράσταση είναι αναγώγιμη.

Λύση

Μπορούμε να ξεκινήσουμε με έναν χώρο τριών συναρτήσεων, $f_A(r) = f(r - r_A)$, $f_B(r) = f(r - r_B)$ και $f_C(r) = f(r - r_C)$, όπου η καθεμία είναι γύρω από μία κορυφή ισόπλευρου τριγώνου. Οι αντιμεταθέσεις των τριών αριθμών, 1,2,3 μπορεί να αναπαρασταθούν μέσω των αλλαγών των συναρτήσεων αυτών μεταξύ τους. Δηλαδή e: $f_A \to f_A, f_B \to f_B, f_C \to f_C$ θα παριστάνεται με τον πίνακα $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$. Το στοιχείο (12): $f_A \to f_B, f_B \to f_A, f_C \to f_C$ με τον πίνακα $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$. Παρόμοια βρίσκουμε ότι για (23): $f_A \to f_A, f_B \to f_C, f_C \to f_B$ ο πίνακας θα είναι $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$. Για το (31): $f_A \to f_C, f_B \to f_B, f_C \to f_A$ και $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$. Για το (123): $f_A \to f_B, f_B \to f_C, f_C \to f_A$ και $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$. Ενώ για το (321): $f_A \to f_C, f_B \to f_A, f_C \to f_B$ και $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$. Οι χαρακτήρες αυτής της αναπαράστασης είναι χ(e)=3, χ((12),(23),(31))=1 και χ((123),(321))=0 και η αναπαράσταση ανάγεται σε μια $A_1 \oplus E$.

Α.17 Βρείτε τις αμετάβλητες υποομάδες και τις κλάσεις της ομάδας αντιμεταθέσεων S_4. Κατασκευάστε τον πίνακα χαρακτήρων για τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

Λύση

Η ομάδα S_4 έχει 4!=24 στοιχεία {e, (12), (13), (14), (23), (24), (34), (12)(34), (13)(24), (14)(23), (123), (124), (132), (134), (142), (143), (234), (243), (1234), (1243), (1324), (1423), (1432)}. Υπάρχουν 5 κλάσεις {e}, {(12), (13), (14), (23), (24), (34)}, {(12)(34), (13)(24), (14)(23)}, {(123), (124), (132), (134), (142), (143), (234), (243)}, {(1234), (1243), (1324), (1423), (1432)}.
Υπάρχουν διάφορες αμετάβλητες υποομάδες όπως μία με 12 στοιχεία {e, (12)(34), (13)(24), (14)(23), (123), (124), (132), (134), (142), (143), (234), (243)}, που είναι ισόμορφη της ομάδας *T*. Μια άλλη αμετάβλητη υποομάδα με 4 στοιχεία V_4={e, (12)(34), (13)(24), (14)(23)} ονομάζεται ομάδα του Klein. Από τον αριθμό των κλάσεων και των στοιχείων προκύπτει ότι $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 24 \;\Rightarrow\; d_1 = d_2 = 1,\; d_3 = 2,\; d_4 = d_5 = 3$. Κατά τα γνωστά, μια μονοδιάστατη αναπαράσταση θα έχει χαρακτήρες $\chi(A_1)$=(1,1,1,1,1). Η άλλη μονοδιάστατη αναπαράσταση μπορεί να προκύψει από την αμετάβλητη υποομάδα *T* δεδομένου ότι $S_4 = \{T, (23)T\} \;\Rightarrow\; S_4 / T \cong C_2$ (ισόμορφο). Έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε τους χαρακτήρες της άλλης μονοδιάστατης αναπαράστασης από το γινόμενο των χαρακτήρων των δύο υποομάδων, οπότε $\chi(A_2)$=(1,1,-1,-1,1). Από την άλλη αμετάβλητη υποομάδα V_4 μπορούν να υπολογιστούν κάποιοι χαρακτήρες, γιατί $S_4 / V_4 \cong D_3$ και η ομάδα D_3 έχει μια διδιάστατη αναπαράσταση. Οπότε προκύπτει ότι $\chi(E)$=(2,2,0,0,-1). Οι υπόλοιποι χαρακτήρες προκύπτουν σχετικά εύκολα από τους κανόνες ορθογωνιότητας.

Α.18 Η ομάδα συμμετρίας του κανονικού τετραέδρου είναι η Τ. Βρείτε τα στοιχεία συμμετρίας, τις διακριτές κλάσεις και τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις με τους χαρακτήρες τους.

Λύση

Τα στοιχεία της ομάδας Τ είναι 12 $\{e, c_3, c_3^2, c_3', c_3'^2, c_3'', c_3''^2, c_3''', c_3'''^2, c_2, c_2', c_2''\}$, ενώ οι κλάσεις είναι 4 $(\{e\}, \{c_2, c_2', c_2''\}, \{4c_3\}, \{4c_3^2\})$. Επομένως $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 = 12 \;\Rightarrow\; d_1 = d_2 = d_3 = 1, d_4 = 3$. Μια αμετάβλητη υποομάδα με δύο πλήρεις κλάσεις είναι η $N = \{\{e\}, \{c_2, c_2', c_2''\}\}$ και η ομάδα $T = \{N, c_3 N, c_3^2 N\}$. Οι χαρακτήρες αναπαράστασης της ομάδας $C_3 = \{e, c_3, c_3^2\}$ θα είναι οι τρίτες ρίζες της μονάδας, δηλαδή $\chi^3 = 1$. Επομένως οι χαρακτήρες της ομάδας T για τις μονοδιάστατες αναπαραστάσεις θα είναι από τον ισομορφισμό $T/N \to C_3$ της μορφής

	e	c_2	c_3	c_3^2
A_1	1	1	1	1
E΄	1	1	χ	χ^2
E΄΄	1	1	χ^2	χ
T	3	a	b	c

Από την ορθογωνιότητα βρίσκουμε αμέσως ότι b=c=0 και a=-1.

A.19 Αποδείξτε ότι υπάρχει μόνο μία ομάδα τάξης 3.

Λύση

Έστω τα στοιχεία είναι το e, a, b. Κατασκευάζουμε τον συνδυαστικό πίνακα. Σε κάθε γραμμή και στήλη θα πρέπει να εμφανίζεται το κάθε στοιχείο μόνο μια φορά και έτσι να εμφανίζονται όλα τα στοιχεία. Προφανώς a.e=a. Αν a.a=e τότε θα πρέπει a.b=b. Όμως τότε a=e, άτοπο. Επομένως a.a=b και a.b=e. Αφού e.a=a και a.a=b, έπεται ότι θα πρέπει a.b=e. Οπότε και b.b=a. Δηλαδή ο πίνακας θα είναι πάντα της μορφής

	e	a	b
e	e	a	b
a	a	b	e
b	b	e	a

A.20 Βρείτε τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας D_4 και κατασκευάστε τον πίνακα χαρακτήρων.

Λύση

Η ομάδα D_4 έχει οκτώ στοιχεία $\{e, c_4, c_4^2, c_4^3, c_{2x}, c_{2y}, c'_{2x}, c'_{2y}\}$ και πέντε κλάσεις $(\{e\}, \{c_4^2\}, \{c_4, c_4^3\}, \{c_{2x}, c_{2y}\}, \{c'_{2x}, c'_{2y}\})$. Επομένως θα έχει και 5 μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις και θα ισχύει ότι $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 8 \;\Rightarrow\; d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 1,\;\; d_5 = 2$. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις αναπαραστάσεις μιας από τις αμετάβλητες υποομάδας, που αποτελούνται από πλήρεις κλάσεις, για να βρούμε τους χαρακτήρες της ομάδας εύκολα. Μια τέτοια αμετάβλητη υποομάδα με τρεις κλάσεις είναι η $N = \{\{e\}, \{c_4^2\}, \{c_4, c_4^3\}\}$ με $D_4 = \{N, c_{2x}N\}$. Η ομάδα $\{e, c_{2x}\}$ έχει δύο αναπαραστάσεις με χαρακτήρες (1,1) και (1,-1). Επομένως για τις τρεις κλάσεις της ομάδας N θα έχουμε τους χαρακτήρες $\chi\{(e),(c_4^2),(c_4,c_4^3)\} = 1$ και για το $c_{2x}N$ $\chi\{(c_{2x},c_{2y}),(c'_{2x},c'_{2y})\} = 1$ ή $\chi\{(e),(c_4^2),(c_4,c_4^3)\} = 1$ και $\chi\{(c_{2x},c_{2y}),(c'_{2x},c'_{2y})\} = -1$. Παρόμοια από την αμετάβλητη υποομάδα $N' = \{(e),(c_4^2),(c_{2x},c_{2y})\}$ με $D_4 = \{N', c'_{2x}N\}$ βρίσκουμε άλλη μια αναπαράσταση με χαρακτήρες $\chi\{(e),(c_4^2),(c_{2x},c_{2y})\} = 1$ και $\chi\{(c_4,c_4^3),(c'_{2x},c'_{2y})\} = -1$. Τέλος από την υποομάδα $N'' = \{(e),(c_4^2),(c'_{2x},c'_{2y})\}$ με $D_4 = \{N'', c_{2x}N''\}$ βρίσκουμε την αναπαράσταση με χαρακτήρες $\chi\{(e),(c_4^2),(c'_{2x},c'_{2y})\} = 1$ και $\chi\{(c_4,c_4^3),(c_{2x},c_{2y})\} = -1$.

Επομένως ο πίνακας χαρακτήρων θα είναι της μορφής που φαίνεται παρακάτω. Από την ορθογωνιότητα δε εύκολα μπορούμε να υπολογίσουμε τα στοιχεία της τελευταίας σειράς. Έτσι βρίσκουμε ότι a = -2 και b = c = d = 0.

D_4	e	c_4^2	c_4, c_4^3	c_{2x}, c_{2y}	c'_{2x}, c'_{2y}
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	a	b	c	d

A.21 Έστω μια διδιάστατη αναπαράσταση με διανύσματα $\hat{e}_x$ και $\hat{e}_y$ (π.χ. της ομάδας D_3). Βρείτε πως αναλύεται σε δύο μονοδιάστατες αναπαραστάσεις σε μιγαδικό επίπεδο.

Λύση

Μια τυχαία περιστροφή κατά γωνία φ θα ορίσει μια νέα βάση

$$\hat{e}'_1 = U(\varphi)\hat{e}_1 = \hat{e}_1 \cos\varphi + \hat{e}_2 \sin\varphi$$

$$\hat{e}'_2 = U(\varphi)\hat{e}_2 = -\hat{e}_1 \sin\varphi + \hat{e}_2 \cos\varphi$$

Ας ορίσουμε τα διανύσματα (στον μιγαδικό χώρο)

$\hat{e}_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{e}_1 + i\hat{e}_2\right)$ και $\hat{e}_- = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{e}_1 - i\hat{e}_2\right)$ τότε

$$\hat{e}'_+ = U(\varphi)\hat{e}_+ = U(\varphi)\hat{e}_1 + iU(\varphi)\hat{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\hat{e}_1 \cos\varphi + \hat{e}_2 \sin\varphi\right) + i\left(-\hat{e}_1 \sin\varphi + \hat{e}_2 \cos\varphi\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hat{e}_1 e^{-i\varphi} + i\hat{e}_2 e^{-i\varphi}\right] = e^{-i\varphi}\hat{e}_+$$

Παρόμοια προκύπτει ότι $\hat{e}'_- = U(\varphi)\hat{e}_- = e^{i\varphi}\hat{e}_-$. Δηλαδή τα διανύσματα $\hat{e}_+$ και $\hat{e}_-$ αποτελούν αναλλοίωτους μονοδιάστατους χώρους και η διδιάστατη αναπαράσταση μπορεί να χωριστεί στις δύο (μιγαδικές) μονοδιάστατες.

A.22 Έστω ένας 6-διάστατος χώρος που αποτελείται από όλα τα πολυώνυμα 2ου βαθμού της μορφής $f(x,y) = ax^2 + bxy + cy^2 + dx + ey + h$, όπου a, b, … σταθερές. Αν τα x,y μετασχηματίζονται όπως η ομάδα D_3, να βρείτε πως ανάγεται αυτή η 6-διάστατη αναπαράσταση της D_3.

Λύση

Από τους πίνακες μετασχηματισμού (περιστροφές στον χώρο x,y) των x,y μπορούμε να υπολογίσουμε πως αλλάζουν οι συναρτήσεις x^2, y^2, xy, x, y και 1. Έτσι μπορούμε να δημιουργήσουμε τους πίνακες αναπαράστασης και από τους χαρακτήρες τους να τους αναγάγουμε στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας D_3. Επειδή όμως ήδη γνωρίζουμε από τα παραδείγματα στην θεωρία ότι οι διπλές συναρτήσεις (x,y) καθώς και (x^2-y^2, xy) αποτελούν χώρους της Γ διδιάστατης αναπαράστασης και ότι οι συναρτήσεις x^2+y^2 καθώς και η σταθερά 1 αναπαραστάσεις της A_1, μπορούμε να βρούμε εύκολα το αποτέλεσμα αν γράψουμε την συνάρτηση με την μορφή $f(x,y) = \left(\dfrac{a+c}{2}\right)\left(x^2 + y^2\right) + bxy + \left(\dfrac{a-c}{2}\right)\left(x^2 - y^2\right) + dx + ey + h$

δηλαδή θα έχουμε αναγωγή σε $2A_1 + 2Γ$.

A.23 Έστω (x_1, y_1) και (x_2, y_2) δύο διδιάστατα διανύσματα αναπαράστασης της ομάδας D_3. Θεωρήστε τον διανυσματικό χώρο $(x_1x_2, x_1y_2, x_2y_1, y_1y_2)$. Βρείτε τους πίνακες αναπαράστασης σ' αυτόν τον 4-διάστατο χώρο από εκείνους των (x, y). Αναγάγετε την αναπαράσταση σε μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις και υπολογίστε τους συντελεστές Clebsch-Gordan.

Λύση

Από τους μετασχηματισμούς των (x,y) μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τις αλλαγές των γινομένων (x_1x_2, x_1y_2, y_1x_2, y_1y_2). Έτσι βρίσκουμε ότι

$$D(e)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad D(c_2')=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}&\sqrt{3}&3\\\sqrt{3}&-1&3&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&3&-1&-\sqrt{3}\\3&\sqrt{3}&-\sqrt{3}&1\end{pmatrix},\quad D(c_2'')=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&-\sqrt{3}&-\sqrt{3}&3\\-\sqrt{3}&-1&3&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&3&-1&\sqrt{3}\\3&\sqrt{3}&\sqrt{3}&1\end{pmatrix},$$

$$D(c_2)=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad D(c_3)=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&-\sqrt{3}&-\sqrt{3}&3\\\sqrt{3}&1&-3&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-\sqrt{3}&1&-\sqrt{3}\\3&\sqrt{3}&\sqrt{3}&1\end{pmatrix},\quad D(c_3^2)=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}&\sqrt{3}&3\\-\sqrt{3}&1&-3&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-3&1&\sqrt{3}\\3&-\sqrt{3}&-\sqrt{3}&1\end{pmatrix}$$

Προφανώς $\chi(e)=4,\quad \chi(c_2)=0,\quad \chi(c_3)=1 \;\Rightarrow\; D^{(2\times 2)}=A_1+A_2+E$. Θα έχουμε δηλαδή δύο μονοδιάστατους υποχώρους και έναν διδιάστατο, που θα είναι αναλλοίωτοι.

Από τους μετασχηματισμούς βλέπουμε ότι

$$|x_1'x_2'\rangle=\left[|x_1\rangle\cos\varphi+|y_1\rangle\sin\varphi\right]\cdot\left[|x_2\rangle\cos\varphi+|y_2\rangle\sin\varphi\right]=|x_1x_2\rangle\cos^2\varphi+|y_1y_2\rangle\sin^2\varphi+\sin\varphi\cos\varphi\left(|x_1y_2\rangle+|x_2y_1\rangle\right)$$

$$|y_1'y_2'\rangle=|x_1x_2\rangle\sin^2\varphi+|y_1y_2\rangle\cos^2\varphi-\sin\varphi\cos\varphi\left(|x_1y_2\rangle+|x_2y_1\rangle\right).$$

Άρα $|x_1'x_2'\rangle+|y_1'y_2'\rangle=|x_1x_2\rangle+|y_1y_2\rangle$ και η ποσότητα $|x_1x_2\rangle+|y_1y_2\rangle$ παραμένει αναλλοίωτη. Παρόμοια προκύπτει ότι και η ποσότητα $|x_1y_2\rangle-|y_1x_2\rangle$ μένει αναλλοίωτη, ενώ τα $|x_1x_2\rangle-|y_1y_2\rangle$ και $|x_1y_2\rangle+|y_1x_2\rangle$ μετασχηματίζονται μεταξύ τους. Επομένως οι νέες βάσεις θα είναι οι

$$e^{A_1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1x_2\rangle+|y_1y_2\rangle\right],\quad e^{A_2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1y_2\rangle-|y_1x_2\rangle\right],$$

$$e_1^{\Gamma}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1x_2\rangle-|y_1y_2\rangle\right],\quad e_2^{\Gamma}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1y_2\rangle+|y_1x_2\rangle\right]$$

Από σύγκριση προκύπτει ότι οι συντελεστές Clebsch-Gordan θα είναι

$$\left(\begin{array}{cc|c}\Gamma&\Gamma&A_1\\i&k&1\end{array}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \left(\begin{array}{cc|c}\Gamma&\Gamma&A_2\\i&k&1\end{array}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c}\Gamma&\Gamma&\Gamma\\i&k&1\end{array}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \left(\begin{array}{cc|c}\Gamma&\Gamma&\Gamma\\i&k&1\end{array}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

Α.24 Δύο από τα στοιχεία μιας ομάδας με πράξη συνδυασμού τον πολλαπλασιασμό δίνονται από τους πίνακες $A=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$, $B=\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}$. Βρείτε όλα τα στοιχεία της ομάδας και τις κλάσεις.

Λύση

Εύκολα προκύπτει ότι $A^2=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}=B^2=-e$, οπότε $A^2=B^2=C=-e$. Έτσι $C^2=e$. Επίσης έχουμε ότι $AD=-B=\widehat{B},\quad DB=-A=\widehat{A}$,

$AC = -A = CA$ και $AB = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = D, \quad BA = -D, \quad D^2 = C$. Τελικά θα έχουμε τα 8 στοιχεία $\{e, A, B, C, D, \hat{A}, \hat{B}, \hat{D}\}$, αφού προκύπτει ότι $A^3 = CA = -A = \hat{A}, \quad BAB^{-1} = -ABB^{-1} = -A = \hat{A}$, κλπ. Επίσης θα έχουμε ότι $C^{-1} = C, \quad A\hat{A} = B\hat{B} = D\hat{D} = e$. Οι κλάσεις θα είναι οι εξής 5, $\{e\}, \{C\}, \{A, \hat{A}\}, \{B, \hat{B}\}, \{D, \hat{D}\}$.

Α.25 Έστω ένα επίπεδο μόριο με τα τέσσερα ισοδύναμα ιόντα στις κορυφές ενός τετραγώνου. Η αρχική συμμετρία του μορίου C_{4v} (*4mm*) μειώνεται με την παραμόρφωσή του κατά μία διαγώνιο, ώστε το μόριο να γίνει επίπεδος ρόμβος (συμμετρίας C_{2v}). Βρείτε αν, με την μείωση της συμμετρίας, διαχωρίζονται οι διάφορες ενεργειακές στιβάδες που αντιστοιχούν στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της αρχικής ομάδας C_{4v}.

Λύση

Με βάση τον πίνακα των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων των δύο ομάδων θα υπάρχουν 4 μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις, που είναι μονοδιάστατες. Επομένως δεν μπορούν να διαχωριστούν με την μείωση της συμμετρίας, αλλά να αλλάξει η συμμετρία τους. Λαμβάνοντας υπόψη τους χαρακτήρες των αναπαραστάσεων στις δύο ομάδες εύκολα παρατηρεί κανείς ότι θα ισχύει ανάμεσα στις ομάδες C_{4v} και C_{2v} η εξής αντιστοίχηση: $A_1 \to A_1, \quad A_2 \to A_2, \quad B_1 \to A_1, \quad B_2 \to A_2$.

Η στιβάδα συμμετρίας Ε (ή Γ) έχει διπλό εκφυλισμό, που με την μείωση της συμμετρίας θα αρθεί, ώστε να καταλήξει σε κάποιες από τις μονοδιάστατες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας C_{2v}. Από απλή σύγκριση των χαρακτήρων παρατηρούμε ότι θα πρέπει $E \to B_1 + B_2$.

C_{4v} (*4mm*)	e	c_{2z}	$2c_{4z}$	σ_x, σ_y	σ'_x, σ'_y
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0

C_{2v} (*2mm*)	e	c_2	σ_x	σ_y
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

Α.26 Δημιουργήστε αναπαραστάσεις της ομάδας C_{4v} (*4mm*) ενός τετραγώνου ξεκινώντας από τις συναρτήσεις: (A) z. (B) x^2. Αν οι αναπαραστάσεις είναι αναγώγιμες, κάνετε την αναγωγή και βρείτε τους κατάλληλους συνδυασμούς των συναρτήσεων, που παράγουν τις αντίστοιχες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

Λύση

Αν δράσουμε με τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας στην συνάρτηση z, θα έχουμε τα εξής: $e\{z\} = z, [c_{2z}, c_{4z}]\{z\} = z, \left[\sigma_x, \sigma_y, \sigma_x', \sigma_y'\right]\{z\} = z$. Επομένως η συνάρτηση παραμένει αναλλοίωτη (με χαρακτήρες 1) δηλαδή έχουμε την A_1 αναπαράσταση.

Για την συνάρτηση x^2 θα έχουμε αντίστοιχα:

$e\{x^2\} = x^2, [c_{2z}]\{x^2\} = x^2, [c_{4z}]\{x^2\} = y^2, [\sigma_x]\{x^2\} = x^2, [\sigma_y]\{x^2\} = x^2, [\sigma'_x]\{x^2\} = y^2, [\sigma'_y]\{x^2\} = y^2$

Επομένως η ομάδα των δύο συναρτήσεων x^2 και y^2 θα είναι αναλλοίωτες. Από αυτές μπορούμε να κατασκευάσουμε τις συναρτήσεις $f_1 = x^2 + y^2$ και $f_2 = x^2 - y^2$. Παρατηρούμε ότι η f_1 είναι αναλλοίωτη και $e\{f_2\} = f_2, [c_{2z}]\{f_2\} = f_2, [c_{4z}]\{f_2\} = -f_2, [\sigma_x, \sigma_y]\{f_2\} = f_2, \ [\sigma'_x, \sigma'_y]\{f_2\} = -f_2$. Δηλαδή έχει χαρακτήρες που αντιστοιχούν στην αναπαράσταση B_1.

C_{4v} (*4mm*)	e	c_{2z}	$2c_{4z}$	σ_x, σ_y	σ'_x, σ'_y
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0

Α.27 Ποιες διαφορετικές ομάδες 4ης τάξης υπάρχουν; Βρείτε τον πίνακα χαρακτήρων και τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις για κάθε μία από αυτές.

Λύση

Η ομάδα θα έχει 4 στοιχεία και θα είναι της μορφής $\{e, A, B, C\}$.

Θα ισχύει είτε $A^2=e$ ή $A^2=B$ (ή C που θα είναι το ίδιο).

Αν $A^2=B$, τότε $A[e, A, B, C] = [A, B, AB, AC]$. Δηλαδή θα πρέπει είτε $AB=e$, είτε $AC=e$. Αν $AB=e$ τότε θα ισχύει ότι $AC=C$ άτοπο. Επομένως $AC=e$. και $AB = C \Rightarrow A^3 = C \Rightarrow A^4 = AC = e$. Άρα θα έχουμε την κυκλική ομάδα $\{e, A, B = A^2, C = A^3\}$. Η ομάδα θα έχει τόσες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις όσες και στοιχεία (αφού είναι αβελιανή). Αν χ είναι ο χαρακτήρας του στοιχείου A, τότε οι χαρακτήρες των άλλων στοιχείων θα είναι χ^2 και χ^3, ενώ θα πρέπει $\chi^4=1$ ($A^4=e$). Δηλαδή το χ θα είναι μία από τις τέσσερις μιγαδικές ρίζες της μονάδας $\chi_k = \exp\left(\frac{2\pi i}{4}k\right)$ με k=0,1,2,3. Ο πίνακας των αναπαραστάσεων θα είναι

	e	c_4	c_4^2	c_4^3
A_1	1	1	1	1
Γ_1	1	i	-1	$-i$
Γ_2	1	$-i$	-1	i
Γ_3	1	-1	1	-1

Στην άλλη περίπτωση που $A^2=e$, θα έπεται ότι $AB=C$ (αφού δεν μπορεί να είναι ίσο με A ή B) και $AC=B$. Αν $B^2=A$ τότε και $BC=e$ και $B^4=e$, δηλαδή η κυκλική ομάδα που είχαμε πριν. Άρα $B^2=e$, $AB=BA$, $AC=CA$, $CB=BC$ δηλαδή μια ακόμη αβελιανή ομάδα. Επομένως θα έχουμε πάλι τέσσερις κλάσεις με πίνακα χαρακτήρων (προκύπτει εύκολα από ορθογωνιότητα)

	e	c_4	c_4^2	c_4^3
A_1	1	1	1	1
Γ_1	1	1	-1	-1
Γ_2	1	-1	1	-1
Γ_3	1	-1	-1	1

Α.28 Θεωρήστε το σύνολο των πινάκων της μορφής $\begin{pmatrix} 2^k & f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, όπου k είναι ένας ακέραιος αριθμός και $f(x)$ πολυώνυμο ως προς x. Να ελέγξετε όλες τις ιδιότητες ορισμού μιας ομάδας και να αποδείξετε ότι οι πίνακες αποτελούν ομάδα με συνδυαστική πράξη τον πολλαπλασιασμό. Είναι η ομάδα αβελιανή;

Λύση

Από τον πολλαπλασιασμό δύο τυχαίων στοιχείων προκύπτει ότι

$\begin{pmatrix} 2^k & p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2^l & f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2^{k+l} & 2^k f(x) + p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, δηλαδή ένα άλλο στοιχείο του συνόλου των πινάκων. Όταν k=0 και $p(x)$=0 το στοιχείο έχει την μορφή του μοναδιαίου πίνακα $e = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, που αποτελεί και το μοναδιαίο στοιχείο με eA=Ae=A.

Αντίστοιχα, το αντίστροφο στοιχείο θα πρέπει να είναι της μορφής $\begin{pmatrix} 2^{-k} & f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, όπου

$\begin{pmatrix} 2^k & p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2^{-k} & f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2^k f(x) + p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = e$. Δηλαδή θα πρέπει να ισχύει ότι $2^k f(x)$=-$p(x)$ που ορίζει την συνάρτηση $f(x)$ ως $f(x) = -2^k p(x)$. Επομένως το σύνολο των στοιχείων ορίζουν μια ομάδα. Η ομάδα αυτή δεν θα είναι αβελιανή γιατί δύο τυχαία στοιχεία A, B δεν θα αντιμετατίθενται. Πραγματικά

$$AB = \begin{pmatrix} 2^k & p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2^l & f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2^{k+l} & 2^k f(x) + p(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq BA = \begin{pmatrix} 2^{k+l} & 2^l p(x) + f(x) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Α.29 Δημιουργήστε αναπαραστάσεις της ομάδας D_3 ενός ισοπλεύρου τριγώνου ξεκινώντας από την συνάρτηση $zf(r)x^2$, όπου z είναι ο άξονας $3^{ης}$ τάξης συμμετρίας και $f(r)$ τυχαία συνάρτηση του $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Αν η αναπαράσταση είναι αναγώγιμη, κάνετε την αναγωγή και βρείτε τους κατάλληλους συνδυασμούς των συναρτήσεων που παράγουν τις αντίστοιχες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

Λύση

Με τις πράξεις συμμετρίας το x^2 θα μετασχηματιστεί σε όρους που θα έχουν και τα y^2, xy, ενώ το z θα γίνει ±z. Η συνάρτηση $f(r)$ θα παραμένει αμετάβλητη στους μετασχηματισμούς της D_3. Επομένως οι ελάχιστες συναρτήσεις θα είναι οι (zx^2,zy^2,zxy). Με την βάση αυτή ο χαρακτήρας του μετασχηματισμού c_2 θα προκύπτει από τις μεταβολές (zx^2,zy^2,zxy) → ($-zx^2$,$-zy^2$,zxy) και θα είναι $\chi(c_2)$= -1. Για να αποφύγουμε τις πράξεις για τον μετασχηματισμό c_3 μπορούμε να αλλάξουμε τη βάση και να χρησιμοποιήσουμε την [$z(x^2+y^2)$,$z(x^2-y^2)$, zxy] που θα έχει τον ίδιο χαρακτήρα.
Όμως $z(x^2+y^2)$ → $z(x^2+y^2)$ επομένως το tr=1, ενώ για τα [$z(x^2-y^2)$, zxy] το tr(E) = -1 όπως φαίνεται από τον πίνακα. Επομένως ο $\chi(c_3)$=0. Δηλαδή θα έχουμε τους χαρακτήρες (3,0,-1), που από τον πίνακα εύκολα προκύπτει ότι θα αντιστοιχούν στους συνδυασμούς $E \oplus A_2$. Προφανώς η A_2 θα μετασχηματίζεται όπως η συνάρτηση $z(x^2+y^2)$, ενώ η E όπως οι [$z(x^2-y^2)$, zxy].

Α.30 Σε κάποιο μόριο τα άτομα είναι τοποθετημένα στις κορυφές ενός ισοπλεύρου τριγώνου με ομάδα συμμετρίας την D_3. Τί είδους μεταπτώσεις επιτρέπονται ανάμεσα στους εσωτερικούς τρόπους ταλάντωσης στην φασματοσκοπία IR (μετασχηματίζεται όπως ένα διάνυσμα) και τί στην φασματοσκοπία Raman (μετασχηματίζεται όπως ένας συμμετρικός τανυστής $2^{ας}$ τάξης);

Λύση

Αν $u_{ix,y,z}$ είναι οι μετατοπίσεις των τριών ατόμων, τότε προφανώς $\chi(e)$ = 9, ενώ $\chi(c_3)$ = 0, αφού όλα τα άτομα αλλάζουν θέση κατά τον μετασχηματισμό. Για τον μεταχηματισμό c_2 θα έχουμε ότι
$\chi(c_2)$ =(δύο άτομα αλλάζουν θέση και u_{2x} → - u_{2x}, u_{2y} → u_{2y}, u_{2z} → - u_{2z})= -1. Δηλαδή οι χαρακτήρες θα είναι (9,0,-1) που θα αντιστοιχούν στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις $D = A_1 \oplus 2A_2 + 3E$. Από τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας προκύπτει ότι οι μετατοπίσεις x,y,z και οι περιστροφές I_x,I_y,I_z μετασχηματίζονται όπως το $E \oplus A_2$. Επομένως $D^{\text{int}} = A_1 \oplus E$.

Οι μεταπτώσεις που είναι ενεργές στην φασματοσκοπία IR θα είναι σαν τα διανύσματα x,y,z δηλαδή όπως οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις $E \oplus A_2$. Οι χαρακτήρες της αναπαράστασης θα είναι (3,0,-1). Η επίδραση του ΗΜ κύματος με τις ταλαντώσεις του πλέγματος θα έχει τις συμμετρίες που προκύπτουν από το γινόμενο των συμμετριών, δηλαδή $(A_2 \oplus E)|A_1\rangle = A_2 \oplus E$, $A_2|E\rangle = E$, ενώ $E|E\rangle = A_1 + A_2 + E$ όπως προκύπτει από την ανάλυση του τετραγώνου των χαρακτήρων της αναπαράστασης E (4,1,0) στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις A_1, A_2 και E. Δηλαδή θα επιτρέπονται σε φασματοσκοπία IR οι μεταπτώσεις $A_1 \rightarrow E$ και $E \rightarrow E, A_1$.
Η αντίστοιχη διαδικασία για την φασματοσκοπία Raman θα είναι να βρεθούν αρχικά οι χαρακτήρες ενός συμμετρικού τανυστή 2^{ας} τάξης. Κατά τα γνωστά αυτοί δίνονται από την σχέση $\chi_{sym}^{(3\times3)} = 4\cos^2\varphi + 2\cos\varphi$. Επομένως οι χαρακτήρες θα είναι (6,0,2), που εύκολα αναλύονται στους χαρακτήρες των μη-αναγώγιμων αναπαραστάσεων και δίνουν $R_{ij} = 2A_1 \oplus 2E$. Η επίδραση αυτού του είδους της συμμετρίας στην συμμετρία των φωνονίων των εσωτερικών τρόπων ταλάντωσης (A_1,E) θα δημιουργήσει $R_{ij}|A_1\rangle = 2A_1 \oplus 2E$ (μεταπτώσεις $A_1 \rightarrow A_1$ και $A_1 \rightarrow E$), $A_1|E\rangle = E$ (μεταπτώσεις $E \rightarrow E$) και $E|E\rangle = A_1 + A_2 + E$ (μεταπτώσεις $E \rightarrow A_1$, E). Δηλαδή επιτρέπονται όλες οι μεταπτώσεις στην φασματοσκοπία Raman.

Α.31 Ας παραδεχτούμε ότι σε κάποιο μόριο το ιόν του Ni βρίσκεται στο κέντρο ενός τετραγώνου με ομάδα συμμετρίας την D_4, όπου στις κορυφές του τετραγώνου υπάρχουν τέσσερα ίδια ιόντα. Στο ελεύθερο άτομο του Ni οι πέντε d στιβάδες (yz, zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) είναι εκφυλισμένες. Βρήτε τους χαρακτήρες της αναπαράστασης της ομάδας D_4, που δημιουργούνται από αυτές τις 5 συναρτήσεις. Αίρεται ο ενεργειακός εκφυλισμός των d στιβάδων του Ni μέσα στο ιόν; Βρήτε συμμετρικούς συνδυασμούς αυτών των d συναρτήσεων που μετασχηματίζονται σύμφωνα με τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις της ομάδας D_4.

Λύση

Η στιβάδα *d* έχει στροφορμή *l*=2.
Οι μετασχηματισμοί της ομάδας θα επιφέρουν τις εξής μεταβολές στον 5-διάστατο διανυσματικό χώρο των συναρτήσεων.
(e): δεν υπάρχει αλλαγή, επομένως χ(*e*)=5
(c_4^2): (yz, zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) → (-yz, -zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) επομένως χ(c_4^2)= 1
(c_4): (yz, zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) → (-xz, yz, -xy, y^2-x^2, $2z^2$-x^2-y^2) επομένως χ(c_4)= -1
(c_{2d}): (yz, zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) → (-xz, -yz, xy, y^2-x^2, $2z^2$-x^2-y^2) επομένως χ(c_{2d})= 1
(c_{2x}): (yz, zx, xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) → (yz, -xz, -xy, x^2-y^2, $2z^2$-x^2-y^2) επομένως χ(c_{2x})= 1
Επομένως οι χαρακτήρες της αναπαράστασης *D* θα είναι (5,1,-1,1,1) και η αναγωγή στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις δίνει ότι $D = A_1 \oplus B_1 \oplus B_2 \oplus E$.
Είναι εύκολο εποπτικά να βρούμε ότι οι συναρτήσεις που μετασχηματίζονται με τις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις θα είναι A_1: ($2z^2$-x^2-y^2), B_1: (x^2-y^2), B_2: (xy), E: (yz, zx).

Α.32 Θεωρήστε τις τέσσερις συναρτήσεις του x, $f_1(x) = x$, $f_2(x) = -x$, $f_3(x) = 1/x$, και $f_4(x) = -1/x$, όπου η συνδυαστική πράξη ορίζεται ως $f_i f_j(x) \equiv f_i\lfloor f_j(x)\rfloor$. (α) Σχηματίστε τον συνδυαστικό πίνακα. (β) Είναι η ομάδα αβελιανή; (γ) Με ποια ομάδα 4^{ης} τάξης είναι ισόμορφη;

Λύση

Εφαρμόζοντας τον ορισμό βρίσκουμε ότι $f_1 f_j(x) \equiv f_1\lfloor f_j(x)\rfloor = f_j(x) = f_j f_1(x)$ για κάθε στοιχείο $f_j(x)$. Επομένως η συνάρτηση $f_1(x)$ δρα όπως το ταυτοτικό στοιχείο. Επίσης συνδυάζοντας τις συναρτήσεις μπορούν να προκύψουν μόνο μία από τις 4 δυνατότητες που εκφράζουν οι συναρτήσεις $f_j(x)$. Π.χ. $f_2 f_3(x) \equiv f_2[f_3(x)] = f_2(1/x) = -1/x = f_4(x)$. Ενώ και ο συνδυασμός $f_3 f_2(x) \equiv f_3[f_2(x)] = f_3(-x) = -1/x = f_4(x)$. Ενώ $f_2 f_4(x) \equiv f_2[f_4(x)] = f_2(-1/x) = 1/x = f_3(x)$ και $f_4 f_2(x) \equiv f_4[f_2(x)] = f_4(-x) = 1/x = f_3(x)$. Ακόμη $f_2^2(x) \equiv f_3^2 = f_4^2 = x = f_1(x)$. Τέλος $f_4 f_3(x) \equiv f_4[f_3(x)] = f_4(1/x) = -x = f_2(x)$ και $f_3 f_4(x) \equiv f_3[f_4(x)] = f_3(-1/x) = -x = f_2(x)$. Η ομάδα είναι αβελιανή και ισόμορφη στην ομάδα $\{e, c_2, c_2', c_2''\}$.

A.33 Δημιουργήστε αναπαραστάσεις της ομάδας $C_{4v} = \{e, c_4, c_4^2, c_4^3, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_{x'}, \sigma_{y'}\}$, ξεκινώντας από τις συναρτήσεις (α) x^3, (β) e^{ix} και (γ) $\cos x$, όπου ο άξονας συμμετρίας 4ης τάξης ορίζεται ως z. Αν η αναπαράσταση μέσω των συναρτήσεων που θα δημιουργήσετε είναι αναγώγιμη, να κάνετε την αναγωγή στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις. Βρείτε κατάλληλους συνδυασμούς των συναρτήσεων αυτών που να παράγουν τις αντίστοιχες μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις.

Λύση

Οι μετασχηματισμοί της ομάδας ουσιαστικά εναλλάσσουν τα ±x, ±y. Επομένως
(α) η συνάρτηση x^3 θα μετασχηματιστεί σε $\pm x^3$ και $\pm y^3$. Οι χαρακτήρες προκύπτουν εύκολα και είναι (2,0,-2,0,0) για τις 5 κλάσεις $\{\{e\},\{c_4^2\},\{c_4, c_4^3\},\{\sigma_x, \sigma_y\},\{\sigma_{x'}, \sigma_{y'}\}\}$. Προφανώς αντιστοιχεί στην αναπαράσταση E και οι συναρτήσεις θα είναι οι (x^3, y^3).
(β) η συνάρτηση e^{ix} θα δημιουργήσει τις συναρτήσεις e^{-ix}, e^{iy} και e^{-iy}. Από τους μετασχηματισμούς προκύπτει ότι οι χαρακτήρες για τις 5 κλάσεις θα είναι οι (4,0,0,2,0), που αναλύεται στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις A_1+B_1+E. Το τελείως συμμετρικό άθροισμα ($e^{ix}+e^{-ix}+e^{iy}+e^{-iy}$)= 2(cosx+cosy) θα μετασχηματίζεται όπως η πλήρως συμμετρική αναπαράσταση A_1. Το άθροισμα ($e^{ix}+e^{-ix}-e^{iy}-e^{-iy}$)=2(cosx-cosy) όπως η B_1, ενώ οι δύο άλλες ορθογώνιες συναρτήσεις ($e^{ix}-e^{-ix}+e^{iy}-e^{-iy}$)= 2i(sinx+siny) και ($e^{ix}-e^{-ix}-e^{iy}+e^{-iy}$)=2i(sinx-siny) θα μετασχηματίζονται μεταξύ τους με την E.
(γ) η συνάρτηση cos$x$ θα δημιουργήσει την συνάρτηση cos$y$. Οι χαρακτήρες θα είναι (2,2,0,2,0) για τις 5 κλάσεις, που αναλύονται σε A_1+B_1. Εύκολα επαληθεύεται ότι ο συνδυασμός (cos$x$+cos$y$) θα μετασχηματίζεται όπως η τελείως συμμετρική αναπαράσταση A_1, ενώ η (cos$x$-cos$y$) όπως η B_1.

A.34 (α) Βρείτε με ποιο τρόπο αίρεται ο αρχικός ενεργειακός εκφυλισμός των ηλεκτρονικών στιβάδων με L=0, L=1, L=2 και L=3, ενός ατόμου που τοποθετείται σε κρυσταλλική θέση οκταεδρικής συμμετρίας (ομάδα O). Αγνοήστε το σπιν. (β) Πώς αίρεται περαιτέρω ο ενεργειακός εκφυλισμός αν υπάρχει κάποια μικρή διαταραχή συμμετρίας D_4 (όπου ο άξονας συμμετρίας της ομάδας D_4 συμπίπτει με έναν από τους 4ης τάξης συμμετρίας άξονες της ομάδας O);

Λύση

Οι στιβάδες με στροφορμή L έχουν ενεργειακό εκφυλισμό (εκτός του σπιν) 2L+1. Επομένως θα έχουμε 1, 3, 5 και 7 στιβάδες με ίδια ενέργεια για τις τέσσερις στροφορμές. Η L=0 προφανώς είναι εντελώς συμμετρική και δεν θα αλλάξει στον κρύσταλλο. Για να βρούμε τα υπόλοιπα θα πρέπει να υπολογίσουμε τους χαρακτήρες για τις κλάσεις της ομάδας Ο στην συγκεκριμένη στροφορμή της κάθε στιβάδας από την σχέση $\chi(\varphi) = \sin(l+1/2)\varphi / \sin\varphi$. Στις συγκεκριμένες περιπτώσεις δίνει τους χαρακτήρες (3,0,-1,-1,1) για L=1, (5,-1,1,1,-1) για L=2 και (7,1,-1,-1,-1) για L=3.
Με βάση τον πίνακα χαρακτήρων της ομάδας εύκολα προκύπτει ότι για L=1 θα έχουμε την T_1 αναπαράσταση (δεν αίρεται ο εκφυλισμός), για L=2 θα έχουμε την E+T_2 (οι 5 στιβάδες χωρίζονται σε μια τρεις και σε δύο στιβάδες), ενώ για L=3 θα έχουμε A_2+T_1+T_2 (δύο τριπλές και μια απλή στιβάδα).
Όταν μειωθεί η συμμετρία σε D_4, θα έχουμε την αντιστοιχία των συμμετριών των δύο ομάδων [$e \to e$, $c_4^2, c_{2x}, c_{2y} \to c_4^2$(O), $c_4, c_4^3 \to c_4, c_4^3$(O), $c_{2x'}, c_{2y'} \to c_2$(O)], που συνεπάγεται ότι οι αναπαραστάσεις της ομάδας Ο θα αντιστοιχιστούν με τις εξής της ομάδας C_{4v}: $A_2 \to B_1$, $E \to A_1$+B_1,

$T_1 \rightarrow E+A_2$ και $T_2 \rightarrow E+B_2$ (από την ανάλυση των χαρακτήρων), που υποδεικνύει και την συμμετρία των στιβάδων στην νέα διαταραχή.

Α.35 Αποδείξτε ότι ένας τανυστής 2^{ας} τάξης οκταεδρικής συμμετρίας (ομάδα *O*), είναι ένας ισότροπος τανυστής, δηλαδή είναι αμετάβλητος ως προς όλες τις περιστροφές.

Λύση

Ένας τανυστής 2^{ας} τάξης αναλύεται στο άθροισμα $D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)}$. Οι χαρακτήρες των αναπαραστάσεων $D^{(l)}$ θα δίνονται από την σχέση $\sin(l+1/2)\varphi \big/ \sin\varphi/2$, που στην συγκεκριμένη ομάδα υποδηλώνει χαρακτήρες :
Για l=0 χ(D)=(1,1,1,1,1). Επομένως έχουμε την A_1 αναπαράσταση.
Για l=1 χ(D)=(3,0,-1,1,-1). Επομένως έχουμε την ανάλυση στην T_2 αναπαράσταση.
Για l=2 χ(D)=(1,1,1,1,1). Επομένως έχουμε την ανάλυση στις αναπαραστάσεις $E+T_1$.
Συνολικά θα έχουμε για τον τανυστή την ανάλυση στις αναπαραστάσεις $A_1+E+T_1+T_2$. Η πλήρως συμμετρική αναπαράσταση εμφανίζεται μία φορά, που υποδηλώνει ότι οι σταθερές T_{ij} του τανυστή που μετασχηματίζονται όπως οι $D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}$ θα μπορούν να εκφραστούν με μία σταθερά. Δηλαδή ο τανυστής 2^{ας} τάξης ενός κρυστάλλου οκταεδρικής συμμετρίας θα είναι αμετάβλητος στις περιστροφές και θα εκφράζεται με μια σταθερά μόνο.

Α.36 Θεωρήστε ένα σύνολο που αποτελείται από τους (p-1) φυσικούς αριθμούς 1, 2, 3, …. (p-1). Ας υποθέσουμε ότι ορίζουμε μια συνδυαστική πράξη οποιονδήποτε δύο στοιχείων του συνόλου μέσω του γινομένου τους αλλά με modulo p (όπου το p είναι ένας πρώτος αριθμός).
(α) Αποδείξτε ότι το σύνολο αποτελεί μία ομάδα.
(β) Βρείτε τον συνδυαστικό πίνακα για p=7.
(γ) Αποδείξτε ότι A^{p-1}=e για κάθε στοιχείο A της ομάδας.

Λύση

Προφανώς το γινόμενο δύο αριθμών A και B modulo p θα είναι ένας αριθμός modulo p, δηλαδή κάποιος αριθμός στο διάστημα (0,1,2,….p-1). Αν το γινόμενο ήταν 0, τότε το γινόμενο A·B θα έπρεπε να διαιρείται με p, που είναι πρώτος αριθμός. Όμως ούτε το A, ούτε το B διαιρούνται με p, αφού κανένα δεν είναι το 0. Προφανώς ισχύει ότι 1·A=A·1=A (δηλαδή e=1). Η προσεταιριστική ιδιότητα θα ισχύει, γιατί το υπόλοιπο από διαίρεση με αριθμό p, ενός γινομένου τριών αριθμών, A, B, Γ, δεν εξαρτάται από την σειρά που γίνονται οι πολλαπλασιασμοί. Τέλος, σε κάθε αριθμό A(modulo p), θα υπάρχει ένας αντίστροφος A^{-1}(modulo p), ούτως ώστε $A^{-1}\cdot A$=e=1. Για να γίνει αυτό θα πρέπει $A^{-1}\cdot A$=np+1. Προφανώς το A^{-1}=(np+1)/A (modulo p) δεν μπορεί να είναι το 0 και θα ανήκει στο σύνολο 1,2,3….p.
Ο συνδυαστικός πίνακας για p=7 θα είναι

	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**
1	1	2	3	4	5	6
2	2	4	6	1	3	5
3	3	6	2	5	1	4
4	4	1	5	2	6	3
5	5	3	1	6	4	2
6	6	5	4	3	2	1

Η ομάδα είναι αβελιανή και έχει p-1 στοιχεία. Επομένως θα ισχύει ότι A^{p-1}=e. Οι χαρακτήρες της αβελιανής ομάδας για τις p μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις θα προκύπτουν από τις (p-1) ρίζες της μονάδας.

A.37 Βρείτε πόσα μπορεί να είναι τα διαφορετικά στοιχεία με τα οποία εκφράζονται όλα τα στοιχεία ενός πλήρως συμμετρικού τανυστή τέταρτης τάξης (π.χ. ο τανυστής των ελαστικών σταθερών ενός κρυστάλλου), στην περίπτωση που ο κρύσταλλος έχει τριγωνική συμμετρία ομάδας D_3.

Λύση

Ο πλήρως συμμετρικός τανυστής $4^{ης}$ τάξης θα έχει την μορφή, $D^{(4)}+2D^{(2)}+2D^{(0)}$.

Για l=4, οι χαρακτήρες $\chi^{(l)}(\cos\varphi)=\dfrac{\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}}$ θα είναι:

$\chi^{(4)}(e)=9,\quad \chi^{(4)}(c_2)=1,\quad \chi^{(4)}(c_3)=0$.

Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι $D^{(4)}=2A_1+A_2+3E$.

Για l=2 θα έχουμε τους χαρακτήρες $\chi^{(2)}(e)=5,\quad \chi^{(2)}(c_2)=1,\quad \chi^{(2)}(c_3)=-1$.

$D^{(2)}=A_1+2E$, $D^{(0)}=A_1$. Επομένως ο τανυστής θα αναλύεται σε $6A_1+A_2+7E$, άρα θα εκφράζεται με 6 σταθερές.

A.38 Για την ομάδα C_{3v} και ορίζοντας ως *z* τον άξονα $3^{ης}$ τάξης συμμετρίας, δημιουργήστε αναπαραστάσεις και προσδιορίστε τις υπόλοιπες συναρτήσεις που συνοδεύουν, σε κάθε περίπτωση ξεχωριστά, την συνάρτηση:

(α) xz

(β) xy

(γ) x^3

Αν η αναπαράσταση είναι αναγώγιμη, κάνετε την αναγωγή στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις για κάθε περίπτωση.

Λύση

(α) Έχουμε ήδη αποδείξει ότι η συνάρτηση z είναι αμετάβλητη (A1 μη-αναγώγιμη αναπαράσταση), όπως και το ζεύγος (x,y) (E μη-αναγώγιμη αναπάρασταση).

(β) Με τις περιστροφές οι άξονες (x,y) θα ανακατευθούν και το γινόμενο xy θα εκφραστεί συναρτήσει των (x^2,y^2,xy), που θα αποτελέσει τον αμετάβλητο 3-διάστατο χώρο, που θα είναι αναγώγιμος. Κατά τα γνωστά, η αναγωγή του σε μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις θα είναι σε A_1+E με χαρακτηριστικές συναρτήσεις τις (x^2+y^2) και (x^2-y^2,xy).

(γ) Αν εφαρμόσουμε τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας, η συνάρτηση x^3 θα εκφραστεί συναρτήσει των τεσσάρων συναρτήσεων (x^3,y^3,x^2y,xy^2), που θα αποτελέσουν έναν αμετάβλητο χώρο. Αυτός θα είναι αναγώγιμος. Από τις πράξεις συμμετρίας προκύπτει ότι η c_2 θα έχει χαρακτήρα $\chi(c_2)$=0, ενώ το $\chi(c_3)$=1, ενώ $\chi(e)$=4. Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι θα θα ισοδυναμεί με A_1+A_2+E.

A.39 Στο μόριο NH_3 τα τρία άτομα του υδρογόνου βρίσκονται στις κορυφές ισόπλευρου τριγώνου, ενώ το άζωτο βρίσκεται ακριβώς πάνω από το κέντρο του τριγώνου. Βρείτε:

(α) Ποια ομάδα περιγράφει την συμμετρία του μορίου και γιατί.

(β) Τις συμμετρίες όλων των κανονικών τρόπων ταλάντωσης του μορίου.

(γ) Τις συμμετρίες που αντιστοιχούν στις εσωτερικές ταλαντώσεις του μορίου.

Λύση

Η ομάδα συμμετρίας του μορίου θα είναι η C3v.

Οι μετατοπίσεις θα ορίζουν μια 12-διάστατη αναπαράσταση με χαρακτήρες

$\chi(e)=12,\quad \chi(c_2)=2,\quad \chi(c_3)=0$, που προκύπτουν από τα αμετάβλητα στις πράξεις της ομάδας άτομα του μορίου. Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι

$I_{tot} = 3A_1 + A_2 + 4E$. Οι μετατοπίσεις θα ορίζονται από τις συναρτήσεις x,y,z, που θα αντιστοιχούν στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις A_1 (z) και E (x,y). Επομένως οι υπόλοιποι κανονικοί τρόποι ταλάντωσης θα είναι οι $I_{tot} - I_{trans} = 2A_1 + A_2 + 3E$. Οι περιστροφές θα δίνονται από τις αναπαραστάσεις A_2 και E. Άρα οι εσωτερικές ταλαντώσεις θα είναι συμμετρίας $I_{\text{int}} = 2A_1 + 2E$.

A.40 Δίνονται οι τέσσερις πίνακες

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Βρείτε τον ελάχιστο αριθμό συμπληρωματικών πινάκων, ώστε το σύνολο να αποτελεί ομάδα. Αποδείξτε ότι η ομάδα που προκύπτει είναι ισόμορφη της $C_{4v} = \{e, c_4, c_4^2, c_4^3, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_{x'}, \sigma_{y'}\}$.

Λύση

Μπορούμε να πούμε ότι ο πίνακας A προκύπτει από τον E με τις αντικαταστάσεις των τεσσάρων σε διάταξη στηλών με τον εξής τρόπο: 1η γραμμή το 1ο στο 4ο, 2η γραμμή το 2ο στο 1ο, 3η γραμμή το 3ο στο 2ο και 4η γραμμή το 4ο στο 3ο. Σε ένα τετράγωνο 1234, αυτή η πράξη αντιστοιχεί σε περιστροφή κατά 90^o με τη φορά των δεικτών του ρολογιού ή σε περιστροφή κατά 270^o κατά την αντίθετη κατεύθυνση. Παρόμοια θα βρίσκαμε ότι ο πίνακας B θα αντιστοιχεί σε περιστροφή κατά 180^o. Ο πίνακας C θα αντιστοιχεί σε περιστροφή κατά 180^o ως προς άξονα 2ης τάξης (c_{2y}). Τα υπόλοιπα στοιχεία προκύπτουν από τους συνδυασμούς αυτών των τεσσάρων και προφανώς ορίζουν την ομάδα D_4 ή την ισόμορφη C_{4v}.

A.41 Βρείτε την ομάδα αντιμεταθέσεων που αφήνει αμετάβλητη την συνάρτηση (α) $x_1x_2+x_3+x_4$, (β) $x_1x_2+x_3x_4$ και αποδείξτε ότι η (β) ομάδα έχει ως υποομάδα εκείνη της ερώτησης (α).

Λύση

(α) Εποπτικά προκύπτει ότι τα στοιχεία της ομάδας είναι τα E=(1)(2)(3)(4), A=(12), B=(34) και C=AB=(12)(34). Θα ισχύει ότι $A^2=B^2=(AB)^2=E$.

(β) Ορισμένα στοιχεία προκύπτουν εύκολα, όπως τα E=(1)(2)(3)(4), A=(12), B=(34), C=(12)(34), D=(14)(23), F=(13)(24). Τα άλλα δύο προκύπτουν από τους συνδυασμούς των στοιχείων ανά δύο. Έτσι CD=F, DF=C, AD=(1324)=G και H=AF=(1423). Τα 8 αυτά στοιχεία αποτελούν ομάδα με υποομάδα εκείνη της (α) ερώτησης.

A.42 Στην τριγωνική διάταξη ενός μορίου (ομάδα συμμετρίας D_{3h}), οι δεσμοί του κεντρικού ατόμου ως προς τα γειτονικά του που βρίσκονται στις κορυφές του ισόπλευρου τριγώνου είναι διατεταγμένοι κατά τις ενδοατομικές διευθύνσεις (τρεις σ-δεσμοί) ή κάθετα στις διευθύνσεις αυτές (τρεις π-δεσμοί κάθετοι στο επίπεδο του μορίου και άλλοι τρεις π-δεσμοί επί του επιπέδου). Βρείτε τους χαρακτήρες των αναπαραστάσεων των δεσμών (α) σ και (β) π, καθώς και στις συμμετρίες που αναλύονται στις δύο περιπτώσεις.

Λύση

Οι σ-δεσμοί είναι κατά την διεύθυνση των ενδοατομικών αποστάσεων. Δοκιμάζοντας τις πράξεις συμμετρίας της ομάδας διαπιστώνουμε (από το είδος της αλλαγής των σ-δεσμών) ότι οι χαρακτήρες θα έχουν τις τιμές: $\chi^{(\sigma)}(e)= 3$, $\chi^{(\sigma)}(c_3)=\chi^{(\sigma)}(s_3)= 0$, $\chi^{(\sigma)}(c'_2)= \chi^{(\sigma)}(\sigma_v)= 1$, $\chi^{(\sigma)}(\sigma_h)= 3$.

Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι $\Gamma^{(\sigma)}=A'_1+E'$.

Για τους π-δεσμούς υπάρχουν 3 δεσμοί κάθετοι στο επίπεδο και άλλοι παράλληλοι. Επομένως θα έχουμε μια 6-διάστατη αναπαράσταση. Πάλι μπορούμε να βρούμε ότι $\chi^{(\pi)}(e)= 6$, $\chi^{(\pi)}(c_3)=\chi^{(\pi)}(s_3)= 0$, $\chi^{(\sigma)}(c'_2)= -2$, $\chi^{(\sigma)}(\sigma_v)= 0$, $\chi^{(\sigma)}(\sigma_h)= 0$.

Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι $\Gamma^{(\pi)}=A'_2+A''_2+E'+E'$.

Α.43 Το μόριο του νερού έχει τα τρία άτομα σε διάταξη ισοσκελούς τριγώνου με ομάδα συμμετρίας την C_{2v}. (α) Βρείτε τις συμμετρίες όλων των κανονικών τρόπων ταλάντωσης που αντιστοιχούν στις εσωτερικές ταλαντώσεις του μορίου. (β) Τι είδους συμμετρίας κανονικοί τρόποι ταλάντωσης μπορούν να διεγερθούν μέσω της φασματοσκοπίας Raman και τι μέσω της φασματοσκοπίας υπερύθρου;

Λύση

Δίνουμε τυχαίες μετατοπίσεις στα άτομα του μορίου δημιουργώντας μια 9-διάστατη αναπαράσταση. Με εποπτεία βρίσκουμε τους χαρακτήρες της αναπαράστασης αυτής, από τα άτομα που δεν αλλάζουν θέση. Έτσι προκύπτει ότι $\chi(e)=9$, $\chi(c_2)=-1$, $\chi(\sigma_v)=3$, $\chi(\sigma'_v)=1$.
Από την ανάλυση στις μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις προκύπτει ότι $\Gamma^{tot}=3A_1+A_2+3B_1+2B_2$.
Εφαρμόζοντας τα στοιχεία της ομάδας βλέπουμε ότι οι συναρτήσεις x,y,z μετασχηματίζονται όπως οι μη-αναγώγιμες αναπαραστάσεις B_1, B_2 και A_1 αντίστοιχα. Επομένως $\Gamma^{tot}-\Gamma^{tran}=2A_1+A_2+2B_1+B_2$.
Οι περιστροφές μετασχηματίζονται όπως το εξωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων. Έτσι προκύπτει ότι οι περιστροφές κατά τον άξονα x,y,z, θα μετασχηματίζονται όπως τα B_2, B_1 και A_2 αντίστοιχα. Επομένως $\Gamma^{tot}-\Gamma^{tran}-\Gamma^{rot}=\Gamma^{int}=2A_1+B_1$.
Ο A_1 τρόπος ταλάντωσης μπορεί να διεγερθεί με φασματοσκοπία Raman (συμμετρίες x^2,y^2,z^2) και IR (συμμετρία z). Επίσης ο B_1 μπορεί να διεγερθεί με φασματοσκοπία Raman (συμμετρία xz) και IR (συμμετρία x).