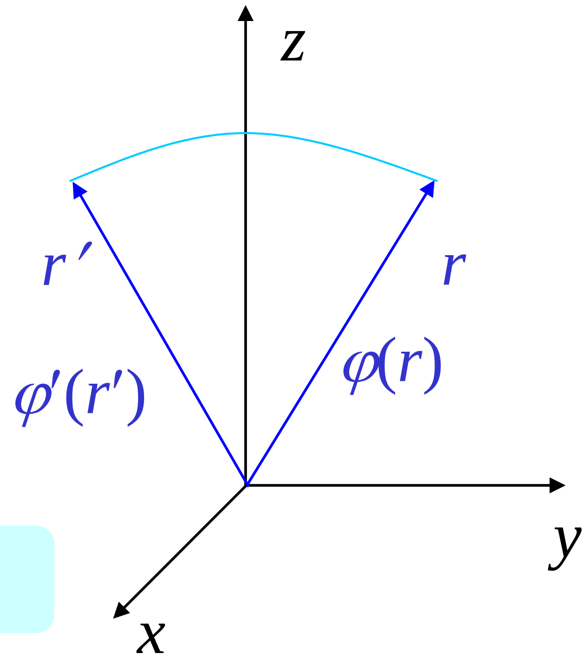
III. 表示的构造

函数的变换



矢量r在对称变化R作用下：$r'=Rr$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{22} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$r \to r', \varphi(r) \to \varphi'(r')$$

标量函数

对称性要求

$$\therefore \varphi'(r') = \varphi(r) = \varphi(R^{-1}r')$$

令$P_R\varphi(r) = \varphi'(r)$

$$\therefore \varphi'(r) = \varphi(R^{-1}r)$$

$$\therefore P_R\varphi(r) = \varphi(R^{-1}r)$$

P_R为作用于函数的算符 (函数变换算符)

如果R组成空间对称操作群，那么P_R在函数空间也构成一个群，且二者同构。

若 $G\{R, S, T, \cdots\}, \quad RS = T$

则
$$P_R P_S \varphi(r) = P_R \varphi(S^{-1} r) = \varphi(S^{-1} R^{-1} r)$$
$$= \varphi[(RS)^{-1} r] = P_{RS} \varphi(r)$$

所以$\{P_R, P_S, P_T \ldots\}$也构成一个群

且$P_R \leftrightarrow R; P_S \leftrightarrow S; P_R P_S = P_{RS} \leftrightarrow RS; \cdots$

$\therefore$ $\{\mathrm{R}\}$和$\{\mathrm{P_R}\}$有相同的乘法表，同构。

群表示的确立

函数空间中取一组函数$\{\varphi_1(r), \varphi_2(r), \ldots \varphi_n(r)\}$作为基矢，基矢的数目等于空间的维数，则

$$P_R \varphi_\alpha(r) = \sum_\beta \varphi_\beta(r) D(R)_{\beta\alpha}$$

则$\{D(R)\}$就是群$\{P_R\}$和$\{R\}$的表示矩阵。

证明： $P_S\varphi_\beta(r)=\sum_\gamma \varphi_\gamma(r)D(S)_{\gamma\beta}$ $\qquad P_R\varphi_\alpha(r)=\sum_\beta \varphi_\beta(r)D(R)_{\beta\alpha}$

则： $P_S P_R\varphi_\alpha(r)=P_S\sum_\beta \varphi_\beta(r)D(R)_{\beta\alpha}=\sum_\beta\left[P_S\varphi_\beta(r)\right]D(R)_{\beta\alpha}$

$$=\sum_\beta\left[\sum_\gamma \varphi_\gamma(r)D(S)_{\gamma\beta}\right]D(R)_{\beta\alpha}=\sum_\gamma \varphi_\gamma(r)\left[\sum_\beta D(S)_{\gamma\beta}D(R)_{\beta\alpha}\right]$$

$$=\sum_\gamma \varphi_\gamma(r)\left[D(S)D(R)\right]_{\gamma\alpha}$$

另一方面： $P_S P_R\varphi_\alpha(r)=P_{SR}\varphi_\alpha(r)=\sum_\gamma \varphi_\gamma(r)D(SR)_{\gamma\alpha}$

$$\therefore D(S)D(R)=D(SR)$$

所以$\{D(R)\}$与$\{P_R\}$及$\{R\}$同构，是$\{P_R\}$及$\{R\}$的一个表示。

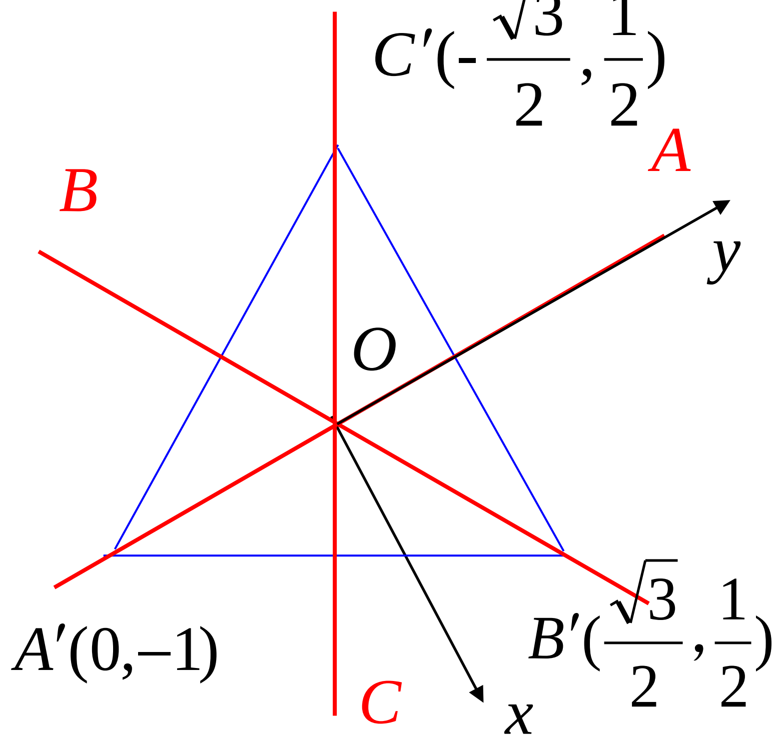
求群表示的方法之一：三角函数作基矢，(r,θ)为变量

例：求正三角形C_{3v}群的表示

C_{3v}群中的6个对称操作对r,θ的作用如下：

$E:\begin{cases} Er = r \\ E\theta = \theta \end{cases}$ ； $A:\begin{cases} Ar = r \\ A\theta = 180^\circ - \theta \end{cases}$ ； $B:\begin{cases} Br = r \\ B\theta = 60^\circ - \theta \end{cases}$ ； $C:\begin{cases} Cr = r \\ C\theta = 300^\circ - \theta \end{cases}$ ；

$D:\begin{cases} Dr = r \\ D\theta = \theta + 120^\circ \end{cases}$ ； $F:\begin{cases} Fr = r \\ F\theta = \theta - 120^\circ \end{cases}$；



取两个线性无关的基函数，
构造一个二维函数空间

$$\varphi_1(r,\theta) = \sin\theta$$

$$\varphi_2(r,\theta) = \cos\theta$$

求单位元素E的矩阵：

$$E:\begin{cases} Er = r \\ E\theta = \theta \end{cases}; \qquad \varphi_1(r,\theta) = \sin\theta \qquad \varphi_2(r,\theta) = \cos\theta$$

$$P_E\varphi_1 = \varphi_1 = \sin\theta = 1\sin\theta + 0\cos\theta$$

$$P_E\varphi_1 = \sum_i \varphi_i D_{i1} = \varphi_1 D_{11} + \varphi_2 D_{21} = \sin\theta D_{11} + \cos\theta D_{21}$$

$$P_E\varphi_2 = \varphi_2 = \cos\theta = 0\sin\theta + 1\cos\theta$$

$$P_E\varphi_2 = \sum_j \varphi_j D_{j2} = \varphi_1 D_{12} + \varphi_2 D_{22} = \sin\theta D_{12} + \cos\theta D_{22}$$

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

求元素A的矩阵：

$$A:\begin{cases} Ar = r \\ A\theta = 180^0 - \theta \end{cases};\qquad \begin{aligned}\varphi_1(r,\theta) &= \sin\theta \\ \varphi_2(r,\theta) &= \cos\theta\end{aligned}$$

$$P_A\varphi_1 = \varphi_1(A^{-1}\theta) = \varphi_1(A\theta) = \sin(180^0 - \theta) = \sin\theta + 0\cos\theta$$

$$P_A\varphi_1 = \sum_i \varphi_i D_{i1} = \varphi_1 D_{11} + \varphi_2 D_{21} = \sin\theta\, D_{11} + \cos\theta\, D_{21}$$

$$P_A\varphi_2 = \varphi_2(A^{-1}\theta) = \varphi_2(A\theta) = \cos(180^0 - \theta) = 0\sin\theta - 1\cos\theta$$

$$P_A\varphi_2 = \sum_j \varphi_j D_{j2} = \varphi_1 D_{12} + \varphi_2 D_{22} = \sin\theta\, D_{12} + \cos\theta\, D_{22}$$

$$\therefore D(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

所以正三角形C_{3v}的表示为：

$$D(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};D(A)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix};$$

$$D(B)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix};D(C)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix};$$

$$D(D)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix};D(F)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix};$$

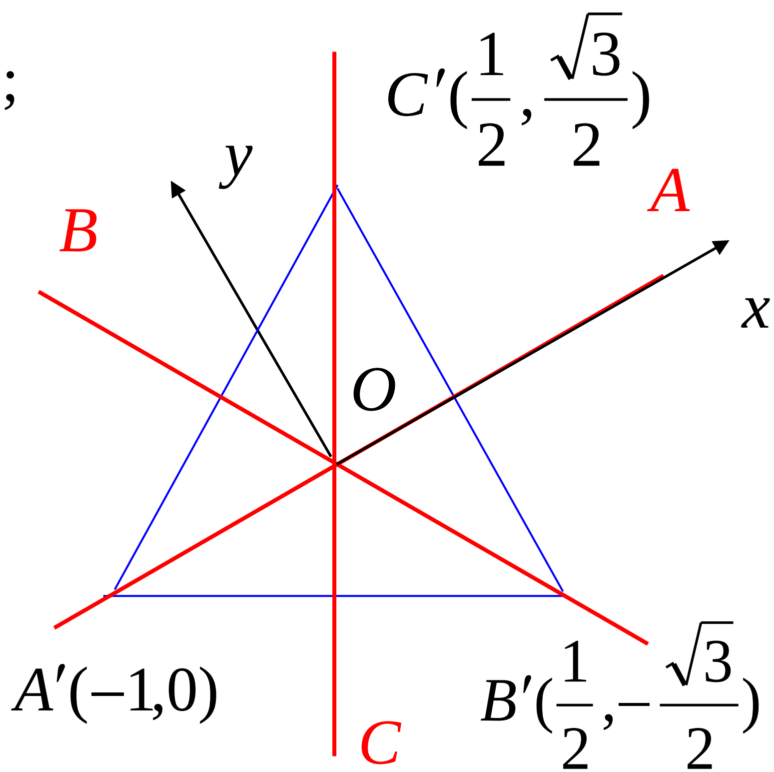
求群表示的方法之一：三角函数作基矢，(r,θ)为变量

例：求正三角形C_{3v}群的表示

C_{3v}群中的6个对称操作对r,θ的作用如下：

$$E:\begin{cases}Er=r\\E\theta=\theta\end{cases};A:\begin{cases}Ar=r\\A\theta=-\theta\end{cases};B:\begin{cases}Br=r\\B\theta=240^\circ-\theta\end{cases};C:\begin{cases}Cr=r\\C\theta=120^\circ-\theta\end{cases};$$

$$D:\begin{cases}Dr=r\\D\theta=\theta+120^\circ\end{cases};F:\begin{cases}Fr=r\\F\theta=\theta-120^\circ\end{cases};$$



改变基的顺序，重建坐标系

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi_1(r,\theta)&=\cos\theta\\ \varphi_2(r,\theta)&=\sin\theta\end{aligned}}$$

求单位元素E的矩阵：

$$E:\begin{cases} Er = r \\ E\theta = \theta \end{cases}; \qquad \begin{aligned} \varphi_1(r,\theta) &= \cos\theta \\ \varphi_2(r,\theta) &= \sin\theta \end{aligned}$$

$$P_E\varphi_1 = \varphi_1 = \cos\theta = 1\cos\theta + 0\sin\theta$$

$$P_E\varphi_1 = \sum_i \varphi_i D_{i1} = \varphi_1 D_{11} + \varphi_2 D_{21} = \cos\theta D_{11} + \sin\theta D_{21}$$

$$P_E\varphi_2 = \varphi_2 = \sin\theta = 0\cos\theta + 1\sin\theta$$

$$P_E\varphi_2 = \sum_j \varphi_j D_{j2} = \varphi_1 D_{12} + \varphi_2 D_{22} = \cos\theta D_{12} + \sin\theta D_{22}$$

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

求元素A的矩阵：

$$A:\begin{cases} Ar = r \\ A\theta = -\theta \end{cases}; \qquad \begin{aligned} \varphi_1(r,\theta) &= \cos\theta \\ \varphi_2(r,\theta) &= \sin\theta \end{aligned}$$

$$P_A\varphi_1 = \varphi_1(A^{-1}\theta) = \varphi_1(A\theta) = \cos(-\theta) = 1\cos\theta + 0\sin\theta$$

$$P_A\varphi_1 = \sum_i \varphi_i D_{i1} = \varphi_1 D_{11} + \varphi_2 D_{21} = \cos\theta D_{11} + \sin\theta D_{21}$$

$$P_A\varphi_2 = \varphi_2(A^{-1}\theta) = \varphi_2(A\theta) = \sin(-\theta) = 0\cos\theta - 1\sin\theta$$

$$P_A\varphi_2 = \sum_j \varphi_j D_{j2} = \varphi_1 D_{12} + \varphi_2 D_{22} = \cos\theta D_{12} + \sin\theta D_{22}$$

$$\therefore D(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

求元素B的矩阵：

$$B:\begin{cases} Br=r \\ B\theta=240^0-\theta \end{cases};\qquad \begin{aligned}\varphi_1(r,\theta)&=\cos\theta\\ \varphi_2(r,\theta)&=\sin\theta\end{aligned}$$

$$P_B\varphi_1=\varphi_1(B^{-1}\theta)=\varphi_1(B\theta)=\cos(240^0-\theta)=\cos 240^0\cos\theta+\sin 240^0\sin\theta$$

$$P_B\varphi_1=\sum_i\varphi_i D_{i1}=\varphi_1 D_{11}+\varphi_2 D_{21}=\cos\theta D_{11}+\sin\theta D_{21}$$

$$P_B\varphi_2=\varphi_2(B^{-1}\theta)=\varphi_2(B\theta)=\sin(240^0-\theta)=\sin 240^0\cos\theta-\cos 240^0\sin\theta$$

$$P_B\varphi_2=\sum_j\varphi_j D_{j2}=\varphi_1 D_{12}+\varphi_2 D_{22}=\cos\theta D_{12}+\sin\theta D_{22}$$

$$D(B)=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\qquad \boxed{240^0\to 120^0}\qquad D(C)=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

求元素D的矩阵：

$$D:\begin{cases} Dr = r \\ D\theta = \theta + 120^0 \end{cases};\qquad \begin{aligned}\varphi_1(r,\theta) &= \cos\theta \\ \varphi_2(r,\theta) &= \sin\theta\end{aligned}$$

$$P_D\varphi_1 = \varphi_1(D^{-1}\theta) = \varphi_1(F\theta) = \cos(\theta - 120^0) = \cos 120^0 \cos\theta + \sin 120^0 \sin\theta$$

$$P_D\varphi_1 = \sum_i \varphi_i D_{i1} = \varphi_1 D_{11} + \varphi_2 D_{21} = \cos\theta D_{11} + \sin\theta D_{21}$$

$$P_D\varphi_2 = \varphi_2(D^{-1}\theta) = \varphi_2(F\theta) = \sin(\theta - 120^0) = -\sin 120^0 \cos\theta + \cos 120^0 \sin\theta$$

$$P_D\varphi_2 = \sum_j \varphi_j D_{j2} = \varphi_1 D_{12} + \varphi_2 D_{22} = \cos\theta D_{12} + \sin\theta D_{22}$$

$$D(D) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \xrightarrow{\boxed{120^0 \to 240^0}} D(F) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

所以正三角形C_{3v}的表示为：

$$D(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};D(A)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix};$$

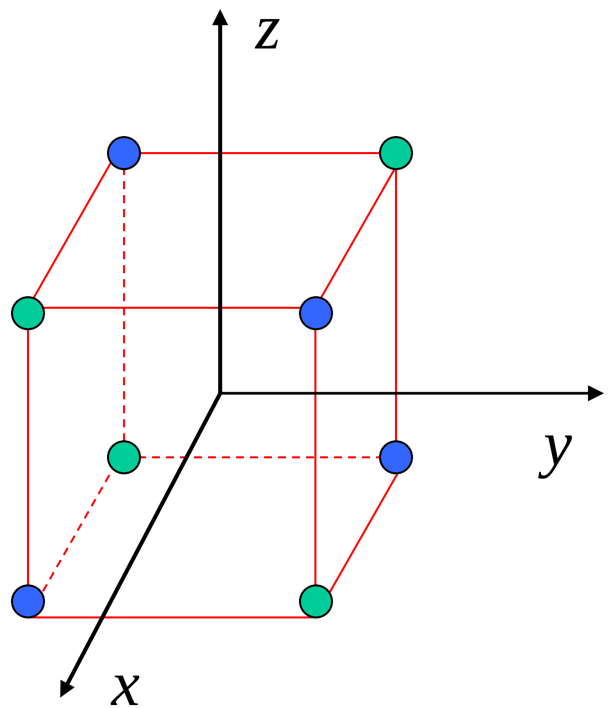
$$D(B)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix};D(C)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix};$$

$$D(D)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix};D(F)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix};$$

求群表示的方法之二：以x, y, z为变量的函数空间

例：两种原子组成的四方晶体的对称操作所组成的群的表示

$$a = b \neq c$$



共有八个对称操作使晶格保持不变：

E：不动，

$C_2(z)$：绕z轴的2-度转动，

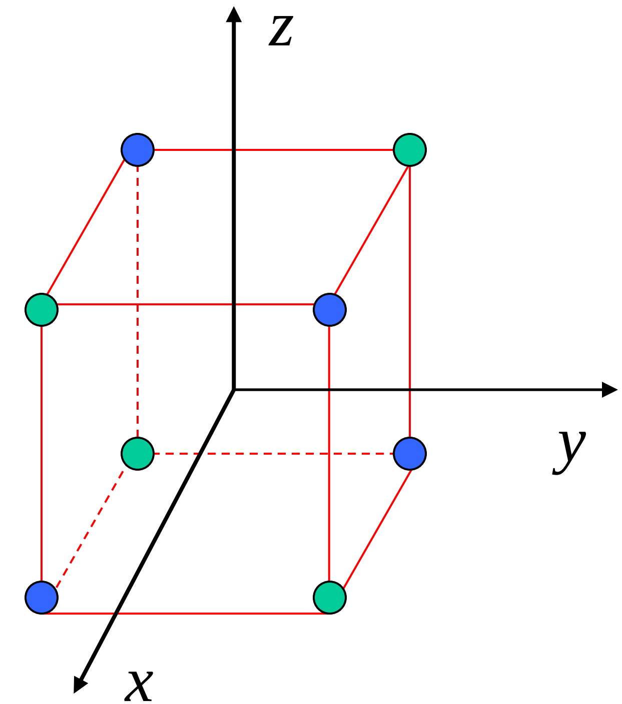
$C_2(x)$和$C_2(y)$：绕x轴和y轴的2-度转动，

σ_1和σ_2：关于对角平面(($y = x$和z轴）和（$y = -x$和z轴）)反射

iC_4和iC_4^{-1}：关于z轴4-度转动接着中心反演

选三个函数作为基矢建立一个3-维函数空间

$$\begin{cases} \varphi_1 = x \\ \varphi_2 = y \\ \varphi_3 = z \end{cases}$$



用八个对称操作作用到三个基矢，例如：

$$C_2(z)\varphi_1 = C_2(z)[x] = [-x] = -\varphi_1$$

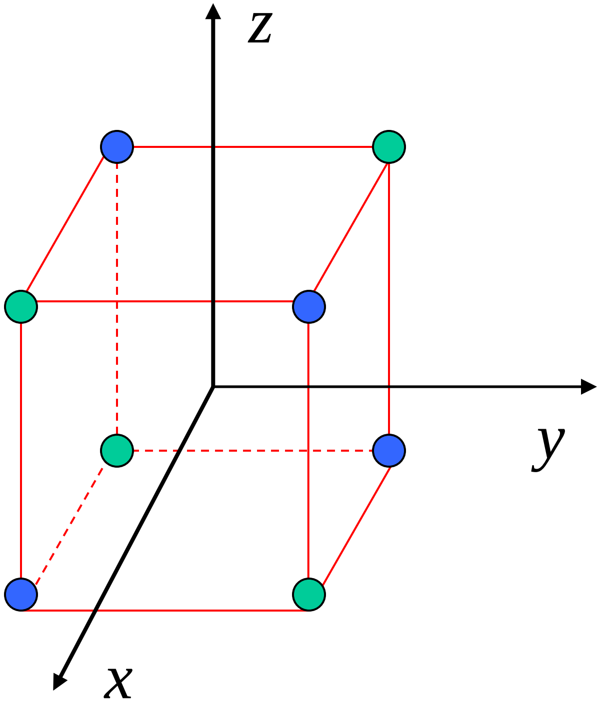
$$C_2(y)\varphi_1 = C_2(y)[x] = [-x] = -\varphi_1$$

$$C_2(x)\varphi_1 = C_2(x)[x] = [+x] = \varphi_1$$

$$\sigma_1\varphi_1 = \sigma_1[x] = [y] = \varphi_2$$

24次操作的结果:

	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	σ_1	σ_2	iC_4	iC_4^{-1}
$\varphi_1=x$	φ_1	$-\varphi_1$	φ_1	$-\varphi_1$	φ_2	$-\varphi_2$	$-\varphi_2$	φ_2
$\varphi_2=y$	φ_2	$-\varphi_2$	$-\varphi_2$	φ_2	φ_1	$-\varphi_1$	φ_1	$-\varphi_1$
$\varphi_3=z$	φ_3	φ_3	$-\varphi_3$	$-\varphi_3$	φ_3	φ_3	$-\varphi_3$	$-\varphi_3$



根据函数变换的基本公式

$$P_a\varphi_i=\sum_j \varphi_j D^a{}_{ji}, \text{即}(\varphi_1',\varphi_2',\varphi_3')=(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3)D(a)$$

则可以求得3-维表示。例如对于$D(C_2(z))$

$$(\varphi_1',\varphi_2',\varphi_3')=(-\varphi_1,-\varphi_2,\varphi_3)=(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3)\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	σ_1	σ_2	iC_4	iC_4^{-1}
φ_1=x	φ_1	-φ_1	φ_1	-φ_1	φ_2	-φ_2	φ_2	-φ_2
φ_2=y	φ_2	-φ_2	-φ_2	φ_2	φ_1	-φ_1	-φ_1	φ_1
φ_3=z	φ_3	φ_3	-φ_3	-φ_3	φ_3	φ_3	-φ_3	-φ_3

所以这个3-维表示为：

$$D(E)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(z))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(x))=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(C_2(y))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};$$

$$D(\sigma_1)=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(\sigma_2)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(iC_4)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(iC_4{}^{-1})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

为方块对角矩阵，为右下角元素组成的1-维不可约表示$D^{(1)}$及左上角元素组成的2-维不可约表示$D^{(2)}$，则3-维可约表示可写成直和的形式：

$$D(a)=D^{(1)}(a)\oplus D^{(2)}(a)$$

所以用(x, y, z)为基矢求得的表示是可约化的。

基函数的性质

定理1 函数 $\{\varphi_\lambda^j(r)\}$ 成为群G的第j个不可约表示 D_G^j 的基函数的充要条件是

表示 D_G^j 的维数

$$\varphi_\lambda^j(r) = \frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(R)^*{}_{\lambda\mu} P_R \varphi_\mu^j(r)$$

群G的阶

证明：若 $\varphi_\lambda^j(r)$ 是不可约表示 D_G^j 的基函数，根据定义

$$P_R \varphi_\lambda^j(r) = \sum_\mu \varphi_\mu^j(r) D^j(R)_{\mu\lambda}$$

$$P_R\varphi_\lambda^j(r)=\sum_\mu D^j(R)_{\mu\lambda}\varphi_\mu^j(r)$$

等式两边左乘 $D^i(R)^*{}_{\mu'\lambda'}$ 并对所有群元求和

$$\sum_{R\in G} D^i(R)^*{}_{\mu'\lambda'}P_R\varphi_\lambda^j(r)=\sum_{R\in G}\sum_\mu D^i(R)^*{}_{\mu'\lambda'}D^j(R)_{\mu\lambda}\varphi_\mu^j(r)$$

$$=\sum_\mu \boxed{\sum_{R\in G} D^i(R)^*{}_{\mu'\lambda'}D^j(R)_{\mu\lambda}}\varphi_\mu^j(r)$$

$$=\sum_\mu \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{\mu'\mu}\delta_{\lambda'\lambda}\varphi_\mu^j(r)$$

表示矩阵元的
正交性定理

取$j=i,\mu=\mu',\lambda=\lambda'$

$$\varphi_{\mu'}^i(r)=\frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} D^i(R)^*{}_{\mu'\lambda'}P_R\varphi_{\lambda'}^i(r)$$

哑标置换，

$i\to j,\mu'\to\lambda,\lambda'\to\mu$

$$\varphi_\lambda^j(r)=\frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(R)^*{}_{\lambda\mu}P_R\varphi_\mu^j(r)$$

必要性

充分性

反过来，若已满足等式 $$\varphi_\lambda^j(r) = \frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(R)^*{}_{\lambda\mu} P_R \varphi_\mu^j(r) \quad (*)$$

则 $\{\varphi_\lambda^j(r)\}$ 为不可约表示 D_G^j 的基

（*）式两边用 P_S 从左侧作用

$$P_S\varphi_\lambda^j(r) = \frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(R)^*{}_{\lambda\mu} P_S P_R \varphi_\mu^j(r) \quad \xrightarrow[\text{重排定理}]{R\to S^{-1}R}$$

$$P_S\varphi_\lambda^j(r) = \frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(S^{-1}R)^*{}_{\lambda\mu} P_S P_{S^{-1}R} \varphi_\mu^j(r)$$

$$= \frac{l_j}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\upsilon} D^j(S^{-1})^*{}_{\lambda\upsilon} D^j(R)^*{}_{\upsilon\mu} P_R \varphi_\mu^j(r)$$

$$= \sum_{\upsilon} \underbrace{\boxed{D^j(S^{-1})^*{}_{\lambda\upsilon}}}_{D^j(S)_{\upsilon\lambda}} \underbrace{\boxed{\frac{l_j}{g}\sum_{R\in G} D^j(R)^*{}_{\upsilon\mu} P_R \varphi_\mu^j(r)}}_{\varphi_\upsilon^j(r)}$$

定理2： 属于两个不等价不可约幺正表示的任意两个基函数，或属于同一不可约幺正表示的不同列的两个基函数相互正交。

证：属于$D^{(j)}(G)$的基为{ φ_{μ}^{j} }，$\mu=1, 2, \ldots, m_j$

属于$D^{(j')}(G)$的基为{ $\varphi_{\mu'}^{j'}$ }，$\mu'=1, 2, \ldots, m_{j'}$

在幺正算符作用下：

幺正

$$\left(\varphi_{\mu}^{j},\varphi_{\mu'}^{j'}\right)=\left(\hat{P}_R\varphi_{\mu}^{j},\hat{P}_R\varphi_{\mu'}^{j'}\right) \qquad (\because \quad \hat{P}_R^{+}\hat{P}_R=1) \quad (R\in G)$$

$$=\left(\sum_{\lambda=1}^{m_j}D_{\lambda\mu}^{j}(R)\varphi_{\lambda}^{j},\sum_{\lambda'=1}^{m_{j'}}D_{\lambda'\mu'}^{j'}(R)\varphi_{\lambda'}^{j'}\right)$$

$$=\sum_{\lambda}\sum_{\lambda'}D_{\lambda\mu}^{j}(R)^{*}D_{\lambda'\mu'}^{j'}(R)\left(\varphi_{\lambda}^{j},\varphi_{\lambda'}^{j'}\right)$$

这是对任意$R\in G$ 都成立

把上式对群元素求和：

$$\sum_{R\in G}\left(\varphi_{\mu}^{j},\varphi_{\mu'}^{j'}\right)=\sum_{\lambda}\sum_{\lambda'}\underbrace{\sum_{R\in G}D_{\lambda\mu}^{j}(R)D_{\lambda'\mu'}^{j'}(R)}_{=\frac{g}{m_j}\delta_{jj'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}}\left(\varphi_{\lambda}^{j},\varphi_{\lambda'}^{j'}\right)$$

$$=\frac{g}{m_j}\sum_{\lambda}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\left(\varphi_{\lambda}^{j},\varphi_{\lambda}^{j'}\right)$$

$$=\frac{g}{m_j}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\boxed{\sum_{\lambda}\left(\varphi_{\lambda}^{j},\varphi_{\lambda}^{j'}\right)}$$

内积之和λ无关，

取为 f

$$\therefore\qquad\left(\varphi_{\mu}^{j},\varphi_{\mu'}^{j'}\right)=\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\frac{f}{m_j}$$

不同表示

不同列的基函数

回看这个3-维表示

$$D(E)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(z))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(x))=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(C_2(y))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};$$

$$D(\sigma_1)=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(\sigma_2)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(iC_4)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(iC_4{}^{-1})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

为方块对角矩阵，为右下角元素组成的1-维不可约表示$D^{(1)}$及左上角元素组成的2-维不可约表示$D^{(2)}$，则3-维可约表示可写成直和的形式：

$$D(a)=D^{(1)}(a)\oplus D^{(2)}(a)$$

$D^{(1)}$表示中的两个基矢e_x,e_y正交，

它们与$D^{(2)}$表示中的基矢e_z正交。

定理3： 若基函数 $\varphi_1(r), \varphi_2(r), \ldots, \varphi_l(r)$ 满足

$$(\varphi_n(r), \varphi_m(r)) = C\delta_{n,m}$$

则由这组基函数荷载的表示D_G 是一个幺正表示

定理4： 若$\varphi_1(r), \varphi_2(r), \ldots, \varphi_l(r)$是群$G$的表示$D_G$的基函数，

另有一套线性无关的函数 $\psi_1(r), \psi_2(r), \ldots, \psi_l(r)$

它们可用基函数的线性组合表示出，即$\psi_m(r) = \sum_{n=1}^{l} S_{nm}\varphi_n(r)$

那么，函数$\psi_1(r), \psi_2(r), \ldots, \psi_l(r)$荷载群$G$的表示$D'_G$ ，且满足

$$D'(R) = S^{-1}D(R)S, \forall R \in G$$

定理5：若$\{\varphi_k^j\}$是群G的第$\boldsymbol{j}$个幺正表示的基函数，则其

平方和在群$\boldsymbol{G}$的所有元作用下是不变的，即

$$P_R \sum_k |\varphi_k^j|^2 = \sum_k |\varphi_k^j|^2$$

逆定理也成立，如果$\{\varphi_k^j\}$满足上式， 则以 $\{\varphi_k^j\}$

为基的表示是幺正表示。

特征标的性质

特征标 $\chi^j(R) = trD^j(R) = \sum_{\mu=1}^{m_j} D^j_{\mu\mu}(R)$

这是群元素$R \in G$在第 j 套表示中的特征标。

1）正交定理

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^i_{\mu\rho}(R)^* D^j_{\nu\lambda}(R) = \frac{1}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda}$$

取$\mu = \rho$, $\nu = \lambda$，并对μ和ν求和得：

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\mu} D^i_{\mu\mu}(R)^* \cdot \sum_{\nu} D^j_{\nu\nu}(R) = \frac{1}{m_j}\underbrace{\sum_{\mu}\sum_{\nu}}_{m_j}\delta_{\mu\nu}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}$$

即 $\sum_{R\in G}\chi^i(R)^*\chi^j(R) = g\delta_{ij}$

正三角形C_{3v}的不可约表示：

	E	A	B	C	D	F
D^1	1	1	1	1	1	1
D^2	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

$$\sum_{R\in G} \chi^1(R)^* \chi^2(R) = 1\times 2 + 1\times 0 + 1\times 0 + 1\times 0 + 1\times(-1) + 1\times(-1) = 0 = g\delta_{12}$$

$$\sum_{R\in G} \chi^2(R)^* \chi^2(R) = 2\times 2 + 0 + 0 + 0 + (-1)\times(-1) + (-1)\times(-1) = 6 = g\delta_{22}$$

2）特征标是相似变换下的不变量，故有：

i）等价表示具有相同的特征标

ii）同一共轭元素类中诸元素具有相同的特征标

（实际上，特征标是类的函数）

证：若S同R共轭，则$S=T^{-1}RT$，T，S，$R\in G$

则 $$D(S)=D(T^{-1}RT)=D(T^{-1})D(R)D(T)$$

$$\chi(S)=\chi(T^{-1}RT)=tr\{D(T^{-1})D(R)D(T)\}=tr\{D(T)D(T^{-1})D(R)\}$$

$$=tr\{D(E)D(R)\}=trD(R)=\chi(R)$$

设群G有S个类，第α类含h_α个元素（群元素个数）， 则第二正交关系改写为：

$$\sum_{\alpha=1}^{s}h_\alpha\chi_\alpha^{i*}\chi_\alpha^{j}=g\delta_{ij}$$

3) 一个可约表示的特征标，等于约化后各不可约表示的特征标之和

$$D=\sum_j \oplus\, a_j D^j(R)$$

$$\chi(R)=\sum_j \chi^j(R)a_j$$

第j个不可约表示在可约表示中出现的次数, 称为**约化系数**

$$\boxed{\sum_{R\in G}\chi^i(R)^*}\chi(R)=\sum_{R\in G}\sum_j \chi^i(R)^*\chi^j(R)a_j$$

$$=\sum_j\left[\sum_{R\in G}\chi^i(R)^*\chi^j(R)\right]a_j$$

$$=\sum_j \delta_{ij}g\,a_j=g\,a_i$$

类C的群元数目

$$\boxed{a_i=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}\chi^i(R)^*\chi(R)=\frac{1}{g}\sum_C h_C\,\chi^i(C)^*\chi(C)}$$

相关推论：

约化系数$\boldsymbol{a_i}$被唯一确定

(a) 如果给定这个表示的特征标系与某一个不可约表示的特征标系 χ_G^i 完全相同，那么，给定的表示是不可约表示，而且与 D_G^i 等价。

(b) 如果给定的表示的特征标系与任何一个不可约表示的特征标系都不同，那么这个表示肯定是可约表示。
利用约化系数的公式可将其约化。

4）不可约表示的判据

$$\sum_{R\in G}\chi(R)^*\chi(R)=g \text{ 或 } \sum_C h_C\chi(C)^*\chi(C)=g$$

证明： 已知 $$\chi(R)=\sum_j \chi^j(R)a_j$$

$$\chi(R)^*=\sum_j \chi^j(R)^*a_j{}^*$$

两式相乘 $$\frac{1}{g}\sum_{R\in G}\chi(R)^*\chi(R)=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_i \chi^i(R)^*a_i{}^*\sum_j \chi^j(R)a_j$$

$$=\frac{1}{g}\sum_{ij}a_i{}^*a_j\sum_{R\in G}\chi^i(R)^*\chi^j(R)$$

$$=\frac{1}{g}\sum_{ij}a_i{}^*a_j\delta_{ij}g$$

$$=\sum_i|a_i|^2$$

只有某个$a_i=1$，
成为不可约表示D_G^i本身，
其它系数都为0

用判据检测上述表示的不可约性 $\sum_{R\in G}\chi(R)^*\chi(R)=g$

例 1

	E	A	B	C	D	F
D^1	1	1	1	1	1	1
D^2	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$

例 2

$$D(E)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(z))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(C_2(x))=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(C_2(y))=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix};$$

$$D(\sigma_1)=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(\sigma_2)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};D(iC_4)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix};D(iC_4{}^{-1})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

投影算符

$$\hat{P}_R \varphi_\mu^j = \sum_\lambda D_{\lambda\mu}^j(R)\varphi_\lambda^j$$

两边左乘$\sum_{R\in G} D_{\lambda'\mu'}^i(R)^*$ 则：

$$\sum_{R\in G} D_{\lambda'\mu'}^i(R)^* \hat{P}_R \varphi_\mu^j = \sum_\lambda \sum_{R\in G} D_{\lambda'\mu'}^i(R)^* D_{\lambda\mu}^j(R)\varphi_\lambda^j$$

$$= \sum_\lambda \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}\varphi_\lambda^j = \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\varphi_{\lambda'}^j$$

即：

$$\frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} D_{\lambda'\mu'}^i(R)^* \hat{P}_R \phi_\mu^j = \delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\varphi_{\lambda'}^j$$

定义投影算符：

$$\boxed{P_{\lambda'\mu'}^i \equiv \frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} D_{\lambda'\mu'}^i(R)^* \hat{P}_R} \qquad \text{—— (*)}$$

投影算符： $$P^i_{\lambda'\mu'} \equiv \frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} D^i_{\lambda'\mu'}(R)^* \hat{P}_R \qquad \text{——（*）}$$

$\therefore$原式为：$P^i_{\lambda'\mu'}\varphi^j_{\mu} = \delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\varphi^j_{\lambda'}$

它说明：一个表示里的基函数不能投影到别的表示中去，而只能在自己表示中的基之间相互投影，即：当 $i=j, \lambda=\lambda', \mu'=\mu$ 时

$$P^i_{\lambda\mu}\varphi^i_{\mu} = \varphi^i_{\lambda}$$

$\lambda=\mu$

$$P^i_{\mu\mu}\varphi^i_{\mu} = \varphi^i_{\mu}$$

$$P^i_{\mu} \equiv \frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} D^i_{\mu\mu}(R)^* \hat{P}_R$$

准投影算符

对μ求和

$$P^i \equiv \frac{l_i}{g}\sum_{R\in G} \chi^i(R)^* P_R$$

特征标投影算符

用意何在？

假定已知: (1)群G某个不可约表示矩阵$D^i(R)$
(2) 形成表示的某列基函数

通过 $P^i_{\lambda\mu}\varphi^i_\mu = \varphi^i_\lambda$ 求出其它列基函数

定义第j个不可约表示的各列基函数之和为第j个不可约表示的基φ^j

$$\varphi^j = \sum_\alpha a_\alpha^j \varphi_\alpha^j(r)$$

以 $P_{\mu\nu}^j$ 作用其上

$$P_{\mu\nu}^j \varphi^j = \sum_\alpha P_{\mu\nu}^j a_\alpha^j \varphi_\alpha^j(r) = \sum_\alpha a_\alpha^j \delta_{\nu\alpha} \varphi_\alpha^j(r) = a_\nu^j \varphi_\mu^j(r)$$

投影算符可从第j个不可约表示的基 φ^j 中选出这个表示的第 μ 列基函数φ_μ^j

如有任一 函数 $\psi(r)$ ，可写为各不可约表示的基之和，即

$$\psi(r) = \sum_j b_j \varphi^j = \sum_j \sum_\alpha b_j a_\alpha^j \varphi_\alpha^j(r)$$ 以 $P_{\mu\nu}^i$ 作用其上

$$P_{\mu\nu}^i \psi(r) = \sum_j \sum_\alpha b_j a_\alpha^j P_{\mu\nu}^i \varphi_\alpha^j(r) = \sum_j \sum_\alpha b_j a_\alpha^j \delta_{ij} \delta_{\nu\alpha} \varphi_\mu^j(r) = b_i a_\nu^i \varphi_\mu^i(r)$$

可从包含有第 i个不可约表示的基的任意函数中，将这个不可约表示的第 μ 列基函数挑选出来。

用意何在？

假定已知: 群G某个不可约表示矩阵$D^i(R)$

不知道基函数

任意函数

1，通过 $P^i_{\mu\mu}\ F \to \varphi^i_\mu$ 求出第μ列基函数

2，通过 $P^i_{\lambda\mu}\varphi^i_\mu = \varphi^i_\lambda$ 求出其它列基函数

P 78: 例1 (喀兴林书第一版)

请自行验证

$$P^i \varphi_\alpha^j(r) = \delta_{ij} \varphi_\alpha^j(r)$$

作用于第 j 个不可约表示的第 α 列基函数上，仍然是这个基函数

$$P^i \psi(r) = b_i \varphi^i$$

作用在含有不可约表示的基的任一函数上，可将不可约表示的基 φ^i 求出。

用意何在？

假定：只知道特征标表$\chi^{i}(R)$，而表示矩阵$D^{i}(R)$未知

不知道基函数

1，选择合适的任意函数： $P^{i}F \rightarrow \varphi^{i}$
求出按照第i个表示的基函数变换的函数

2，以此为基础求矩阵表示

P 80：例2 (喀兴林书第一版)