Rappresentazioni dei gruppi

Daniele Toffoli

June 5, 2017

1 Rappresentazioni

Consideriamo un gruppo finito $\mathcal{G}$, di ordine g, $\mathcal{G} = \{G_1, G_2, \cdots, G_g\}$. Supponiamo che ad ogni elemento del gruppo, G_i, sia associata una matrice quadrata di dimensione d, $\hat{D}(G_i)$. Se, dati due qualsiasi elementi del gruppo, G_i e G_j, abbiamo che $\hat{D}(G_i)\hat{D}(G_j) = \hat{D}(G_k)$ quando $G_iG_j=G_k$, allora il set di matrici $\hat{D}(G_1), \hat{D}(G_2), \dots \hat{D}(G_g)$ è chiamata *rappresentazione* del gruppo $\mathcal{G}$. La dimensione delle matrici, d, è detta *dimensione* della rappresentazione. Le matrici individuali, $\hat{D}(G_i)$ sono dette *matrici rappresentative.* Notiamo inoltre che la mappatura f tale che:

$$f : G_i \longrightarrow \hat{D}(G_i) \tag{1}$$

è un omomorfismo tra il gruppo $\mathcal{G}$ e il gruppo delle matrici rappresentative, $\hat{D}(G_i)$, dal momento che, per definizione, $f(G_iG_j) = f(G_i)f(G_j)$. Le seguenti proprietà sono facilmente derivate:

1. La matrice rappresentativa dell'elemento identità di $\mathcal{G}$ è la matrice identica.

   Infatti, dal momento che per definizione, $EG_i = G_iE = G_i$, $\forall i = 1, 2, \dots, n$ abbiamo che $\hat{D}(E)\hat{D}(G_i) = \hat{D}(G_i)\hat{D}(E) = \hat{D}(G_i)$, che implica che $\hat{D}(E) = \hat{1}$, ovvero la matrice rappresentativa dell'operazione identità è la matrice identica.

2. La matrice rappresentativa dell'elemento $G_i^{-1} \in \mathcal{G}$ è la matrice inversa della matrice $\hat{D}(G_i)$.

   Infatti, dalla definizione di elemento inverso, $G_iG_i^{-1} = G_i^{-1}G_i = E$ segue che:

   $$\hat{D}(G_i)\hat{D}(G_i^{-1}) = \hat{D}(G_i^{-1})\hat{D}(G_i) = \hat{1}$$

   da cui segue che $\hat{D}(G_i^{-1}) = \hat{D}^{-1}(G_i)$.

Se la mappatura f tra elementi di gruppo e matrici è un'isomorfismo, allora la rappresentazione è detta *fedele* (dal termine inglese *faithful*).

Esempio Sotto le operazioni del gruppo $\mathrm{C}_{3v} = \{E, C_3, C_3^{-1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$, le coordinate dei punti (x, y) del piano XY vengono trasformati dalle sei matrici riportate qui sotto, che formano una rappresentazione (chiamata rappresentazione E nella terminologia usata per i gruppi puntuali) del gruppo. Le sei matrici 2×2 corrispondenti ai sei elementi del gruppo C_{3v} sono:

$$\hat{D}^{(E)}(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}^{(E)}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Queste matrici costituiscono una rappresentazione faithful del gruppo C_{3v}. Si vede facilmente che le sei matrici sono matrici ortogonali (unitarie con coefficienti reali), e la rappresentazione E è un esempio di *rappresentazione unitaria.*

Ogni gruppo $\mathcal{G}$ ha una rappresentazione monodimensionale chiamata *rappresentazione identica* (o totalsimmetrica), che si ottiene associando a tutti gli elementi del gruppo la matrice unità 1×1:

$$\forall G_i \in \mathcal{G}, \hat{D}(G_i) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

La rappresentazione identica del gruppo C_{3v} è denotata con A_1:

$$\hat{D}^{(A_1)}(E) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_1)}(C_3) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_1)}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}^{(A_1)}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_1)}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_1)}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

Il gruppo C_{3v} ha un'altra rappresentazione monodimensionale, denotata con A_2:

$$\hat{D}^{(A_2)}(E) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_2)}(C_3) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_2)}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}^{(A_2)}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} -1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_2)}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} -1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(A_2)}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} -1 \end{bmatrix}$$

In totale, esistono tre rappresentazioni indipendenti (irriducibili, *vide infra*) per il gruppo C_{3v}. Vedremo poi che ciò è direttamente legato al fatto che nel gruppo C_{3v} i sei elementi sono raggruppati in tre classi di elementi coniugati.

1.1 Base di una rappresentazione

Consideriamo d vettori linearmente indipendenti,$\{\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_d\}$ di uno spazio vettoriale $\mathcal{V}$, e supponiamo che i g elementi del gruppo $\mathcal{G}$ siano operatori (lineari) in $\mathcal{G}$, ovvero $G_i : \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{V}$. Il set $\{\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_d\}$ è detto *base per una rappresentazione* del gruppo $\mathcal{G}$ se $\forall G_i \in \mathcal{G}$:

$$G_i \psi_\nu = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_\mu D_{\mu\nu}(G_i). \tag{3}$$

In accordo all'equazione (3), il set $\{\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_d\}$ genera un sottospazio invariante di $\mathcal{V}$ rispetto a tutti gli elementi del gruppo. I vettori $\{\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_d\}$ sono chiamati *funzioni di base* o *vettori di base*. Dimostriamo ora che le matrici dei coefficienti $D_{\mu\nu}(G_i)$ formano una rappresentazione del gruppo $\mathcal{G}$. Supponiamo infatti che gli operatori lineari G_i, G_j e $G_k \in \mathcal{G}$ soddisfino $G_iG_j{=}G_k$. Allora possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} G_iG_j\psi_\nu &= G_i(\sum_l \psi_l D_{l\nu}(G_j)) \\ &= \sum_l D_{l\nu}(G_j)G_i(\psi_l) \\ &= \sum_l \sum_m \psi_m D_{ml}(G_i)D_{l\nu}(G_j) \\ &= \sum_m \psi_m[\hat{D}(G_i)\hat{D}(G_j)]_{m\nu}. \end{aligned} \tag{4}$$

È anche

$$G_k\psi_\nu = \sum_m \psi_m \hat{D}_{m\nu}(G_k) \tag{5}$$

da cui $\hat{D}(G_k) = \hat{D}(G_i)\hat{D}(G_j)$. Nella derivazione abbiamo usato la proprietà di linearità degli operatori G_i, $G_i(c_1\phi_1 + c_2\phi_2) = c_1G(\phi_1) + c_2G(\phi_2)$. Inoltre, i coefficienti dei vettori trasformati $G_i\psi_\nu$ sono arrangiati nelle matrici $\hat{D}(G_i)$ in colonne: l'r-esimo vettore di base ψ_r si trasforma in accordo alla r-esima colonna della matrice $\hat{D}(G_i)$.

1.2 Equivalenza tra rappresentazioni

Consideriamo due rappresentazioni D e D' del gruppo $\mathcal{G}$, con matrici $\hat{D}$ e $\hat{D}'$ rispettivamente. Se le matrici delle rappresentazioni D e D' sono relazionate da una trasformazione di similitudine:

$$\hat{D}'(G_i) = \hat{T}^{-1}\hat{D}(G_i)\hat{T} \tag{6}$$

$\forall G_i \in \mathcal{G}$, allora le due rappresentazioni sono dette *equivalenti*. Se ciò non è vero, allora le rappresentazioni D e D' sono dette rappresentazioni *non equivalenti*. Due rappresentazioni del gruppo $\mathcal{G}$ di dimensioni d e d', con $d \neq d'$ sono necessariamente non equivalenti.

Consideriamo adesso una base $\{\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_d\}$ per la rappresentazione D del gruppo $\mathcal{G}$. Supponiamo ora di passare ad una nuova base $\{\psi'_1, \psi'_2, \ldots, \psi'_d\}$, attraverso una trasformazione lineare descritta da un'operatore T:

$$\psi'_\nu = T\psi_\nu = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_\mu T_{\mu\nu}. \tag{7}$$

La trasformazione T è invertibile, e possiamo scrivere:

$$\psi_\lambda = \sum_{k=1}^{d} \psi'_k (T^{-1})_{k\lambda}. \tag{8}$$

L'effetto dell'operatore G_i sul vettore ψ'_ν si può scrivere come:

$$\begin{aligned}
G_i \psi'_\nu &= G_i(\sum_{\mu=1}^{d} \psi_\mu T_{\mu\nu}) = \sum_{\mu=1}^{d} T_{\mu\nu} G_i(\psi_\mu) \\
&= \sum_{\mu=1}^{d} \sum_{\lambda=1}^{d} \psi_\lambda D_{\lambda\mu}(G_i) T_{\mu\nu} \\
&= \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \sum_{k} \psi'_k T^{-1}_{k\lambda} D_{\lambda\mu}(G_i) T_{\mu\nu} \\
&= \sum_{k} \psi'_k [\hat{T}^{-1} \hat{D} \hat{T}]_{k\nu}
\end{aligned} \tag{9}$$

e quindi, $\hat{D}'(G) = \hat{T}^{-1}\hat{D}\hat{T}$, ovvero la base trasformata $\{\psi'_\nu\}_{\nu=1,\ldots,d}$ genera la rappresentazione D'. Una trasformazione lineare della base risulta in una rappresentazione equivalente.

1.3 Rappresentazioni riducibili e irriducibili

Consideriamo due differenti rappresentazioni del gruppo $\mathcal{G}$, $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$, con matrici $\hat{D}^{(1)}$ e $\hat{D}^{(2)}$. Le matrici

$$\hat{D}(G_i) = \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_i) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_i) \end{bmatrix} \tag{10}$$

formano anch'esse una rappresentazione del gruppo $\mathcal{G}$. Infatti:

$$\begin{aligned}
\hat{D}(G_i)\hat{D}(G_j) &= \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_i) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_j) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_j) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_i)\hat{D}^{(1)}(G_j) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_i)\hat{D}^{(2)}(G_j) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_k) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_k) \end{bmatrix} = \hat{D}(G_k).
\end{aligned} \tag{11}$$

La rappresentazione fornita dalle matrici $\hat{D}(G_i)$ è chiamata *somma diretta* delle rappresentazioni $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$, e si scrive:

$$D = D^{(1)} + D^{(2)}. \tag{12}$$

Se $d^{(1)}$ e $d^{(2)}$ sono le dimensioni delle rappresentazioni $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ rispettivamente, allora la dimensione della rappresentazione D, d, è data da $d = d^{(1)}+d^{(2)}$. Una tale rappresentazione è detta essere *riducibile*. Dal momento che la sua struttura a blocchi può essere distrutta tramite una trasformazione di similitudine (ovvero tramite un cambiamento di base), ogni rappresentazione equivalente alla rappresentazione manifestatamente riducibile, Eq. (10), viene detta rappresentazione riducibile. Se, data una rappresentazione del gruppo $\mathcal{G}$, non è possibile trovare una trasformazione di equivalenza che porti tutte le matrici alla forma dell'Eq. (10), ovvero in una forma diagonale a blocchi, allora la rappresentazione è detta essere *irriducibile*. Una rappresentazione riducibile può essere sempre decomposta come somma diretta di rappresentazioni irriducibili. Quando questo è fatto, la decomposizione è chiamata *riduzione* o *decomposizione irriducibile*. Inoltre, risulta chiaro che a seguito della riduzione della rappresentazione riducibile attraverso una trasformazione di equivalenza, il nuovo set di base può essere suddiviso in sottoinsiemi distinti, (le basi per $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ nell esempio sopra) ogniuno dei quali genera un sottospazio invariante rispetto all'insieme degli operatori di $\mathcal{G}$. In altre parole, lo spazio vettoriale generato dalla base di una rappresentazione riducibile può essere decomposto come somma diretta di sottospazi invarianti.

La rappresentazione data dalle matrici riportate nell' Eq. (10) è detta *completamente riducibile*. Una rappresentazione riducibile non deve necessariamente essere *completamente riducibile*, dal momento che può avere una struttura con matrici non nulle nel blocco in alto a destra dell'Eq. (10). Come vedremo in seguito, dal momento che una qualsiasi rappresentazione di un gruppo finito è equivalente a una rappresentazione unitaria, ovvero composta da matrici unitarie, le rappresentazioni riducibili saranno sempre completamente riducibili, e questi due termini (riducibile e completamente riducibile) saranno sempre considerati sinonimi.

2 Rappresentazioni irriducibili del gruppo $\mathrm{C}_{\infty v}$

Come abbiamo visto, il gruppo $\mathrm{C}_{\infty v}$ è il gruppo delle operazioni di simmetria delle molecole diatomiche eteronucleari. Gli elementi del gruppo sono

1. Rotazione $R(\alpha)$ di un angolo α attorno all'asse internucleare.

2. Riflessioni rispetto a un piano che contiene l'asse internucleare.

Gli elementi generatori possono quindi essere presi come $R(\alpha)$ e $\sigma(zx) \equiv \sigma_y$. Le rotazioni formano un sottogruppo (C_∞), dal momento che il prodotto di due rotazioni è una rotazione:

$$R(\alpha)R(\alpha') = R(\alpha + \alpha') \tag{13}$$

Inoltre:

$$R(\alpha)\sigma_y = \sigma_y R(-\alpha) \tag{14}$$

come verificato graficamente in Figura 1.

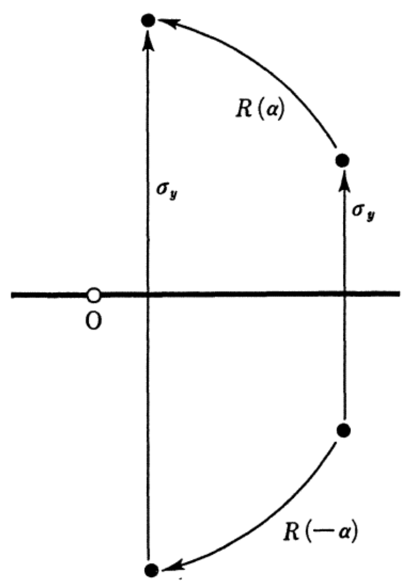

Figure 1: Dimostrazione della relazione $R(\alpha)\sigma_y = \sigma_y R(-\alpha)$.

Le rappresentazioni irriducibili ammettono funzioni di base v_m tali che:

$$R(\alpha)v_m = e^{-im\alpha}v_m. \tag{15}$$

Dal momento che $R(\alpha + 2\pi) = R(\alpha)$, abbiamo che $e^{-2\pi im} = 1$ e quindi m deve essere un numero intero:

$$2\pi m = 2k\pi$$

con $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots,$. Consideriamo adesso rappresentazioni irriducibili di $C_{\infty v}$. Dato v_λ con $\lambda \in \mathbb{Z}$, $\lambda > 0$:

$$R(\alpha)v_\lambda = e^{-i\lambda\alpha}v_\lambda \tag{16}$$

Dall'equazione (14) segue quindi che:

$$R(\alpha)[\sigma_y v_\lambda] = [R(\alpha)\sigma_y]v_\lambda = [\sigma_y R(-\alpha)]v_\lambda = e^{i\lambda\alpha}(\sigma_y v_\lambda) \tag{17}$$

da cui segue che $\sigma_y v_\lambda = v_{-\lambda}$.

Inoltre, abbiamo che:

$$R(\alpha)v_{-\lambda} = e^{i\lambda\alpha}v_{-\lambda}, \tag{18}$$

e

$$\sigma_y v_{-\lambda} = \sigma_y(\sigma_y v_\lambda) = v_\lambda, \tag{19}$$

da cui segue che i vettori di base $\{v_\lambda, v_{-\lambda}\}$, essendo chiusi rispetto alle operazioni del gruppo $C_{\infty v}$, formano una base per una rappresentazione (irriducibile, vedi esercizio sotto) bidimensionale (eccetto quando $\lambda = 0$) del gruppo.

In notazione matriciale scriviamo:

$$\begin{bmatrix} R(\alpha)v_\lambda & R(\alpha)v_{-\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_\lambda & v_{-\lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\lambda\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\lambda\alpha} \end{bmatrix} \tag{20}$$

e

$$\begin{bmatrix} \sigma_y v_\lambda & \sigma_y v_{-\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_\lambda & v_{-\lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

Esercizio: Mostra che la rappresentazione generata dai vettori di base $\{v_\lambda, v_{-\lambda}\}$ è irriducibile.

Se la rappresentazione fosse riducibile, sarebbe possibile trovare una combinazione lineare dei vettori di base $\{v_\lambda, v_{-\lambda}\}$, $v = c_\lambda v_\lambda + c_{-\lambda} v_{-\lambda}$ tale che $R(\alpha)v = kv$ e $\sigma_y v = k'v$. Dimostreremo che questo è impossibile. Infatti:

$$\begin{aligned} R(\alpha)v &= c_\lambda R(\alpha)v_\lambda + c_{-\lambda}R(\alpha)v_{-\lambda} \\ &= e^{-i\lambda\alpha}(c_\lambda v_\lambda + c_{-\lambda}e^{2i\lambda\alpha}v_{-\lambda}), \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} \sigma_y v &= c_\lambda \sigma_y v_\lambda + c_{-\lambda}\sigma_y v_{-\lambda} \\ &= (c_\lambda v_{-\lambda} + c_{-\lambda} v_\lambda), \end{aligned} \tag{23}$$

e $\sigma_y v \neq k'v$ a meno che $c_\lambda = c_{-\lambda}$ oppure $c_\lambda = -c_{-\lambda}$. Inoltre, a meno che $\lambda = 0$, $R(\alpha)v$ non può essere scritto nella forma kv. Quindi per $\lambda \neq 0$ la rappresentazione è irriducibile.

Per $\lambda = 0$ la rappresentazione è invece riducibile, dal momento che le funzioni sono invarianti rispetto alle rotazioni. Prendiamo due combinazioni lineari del tipo $v_0^\pm \equiv v_\lambda \pm v_{-\lambda}$.

Abbiamo i seguenti risultati:

$$\begin{cases} R(\alpha)v_0^+ = v_0^+\,, & \sigma_y v_0^+ = v_0^+ \\ R(\alpha)v_0^- = v_0^-\,, & \sigma_y v_0^- = -v_0^- \end{cases} \tag{24}$$

da cui si evince che v_0^+ è base per la rappresentazione totalsimmetrica del gruppo $C_{\infty v}$, mentre v_0^- è base per una seconda rappresentazione monodimensionale del gruppo. (NOTA: se v è base per una rappresentazione monodimensionale di σ_y, $\sigma_y v = cv$ e dal momento che $\sigma_y^2 = E$, $c^2 = 1 \Longrightarrow c = \pm 1$.) Concludendo, il gruppo $C_{\infty v}$ possiede due rappresentazioni monodimensionali, D_0^+ e D_0^-, e rappresentazioni bidimensionali D_λ con $\lambda = 1, 2, \ldots$ In notazione spettroscopica, usata per classificare i livelli energetici delle molecole lineari appartenenti al gruppo $C_{\infty v}$ $D_0^+ \equiv \Sigma^+$, $D_0^- \equiv \Sigma^-$ e si usano i simboli $\Pi, \Delta, \Phi, \ldots$ in corrispondenza a $\lambda = 1, 2, 3, \ldots$

3 Effetto degli operatori di simmetria su funzioni

Abbiamo già esaminato l'effetto degli operatori di simmetria (rotazioni, riflessioni, inversione e rotazioni improprie) sui punti del piano e dello spazio. Studieremo adesso l'effetto degli operatori di simmetria sulle funzioni. Considereremo dapprima il caso particolare di funzioni di due variabili, $z = f(x, y)$, e generalizzeremo poi i risultati ottenuti a funzioni arbitrarie di n variabili, $y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Una funzione di due variabili può essere rappresentata disegnando alcune sue *curve di livello*, come riportato in Figura 2, ovvero l'insieme dei punti (x, y) soluzioni di equazioni del tipo $f(x, y) = c$ con c assegnato.

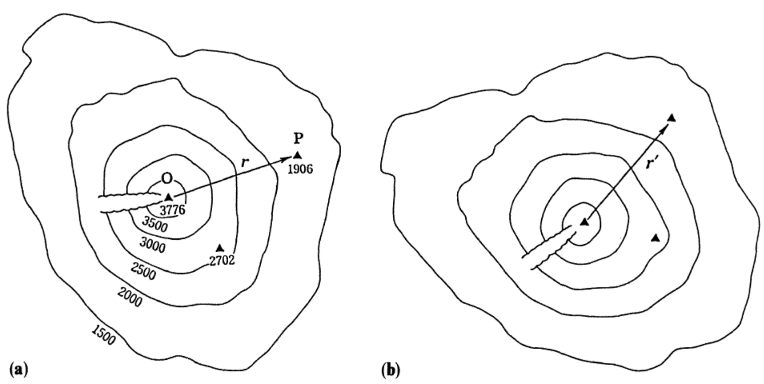

Figure 2: Esempio di rappresentazione di una funzione di due variabili tramite curve di livello. La figura rappresenta la mappa del monte Fuji (Giappone). (a) Mappa originale. (b) Mappa ruotata attorno all'origine O di un generico angolo α.

Consideriamo il punto $P = (x, y)$ rappresentato dal vettore di posizione $\boldsymbol{r}$. A seguito di una rotazione $R(\alpha)$ attorno all'origine, il punto P viene portato sul punto $P' = (x', y')$, descritto dal vettore di posizione $\boldsymbol{r}'$, ovvero $\boldsymbol{r}' = R(\alpha)\boldsymbol{r}$. Se $f(\boldsymbol{r})$ rappresenta la funzione originaria, mentre $f'(\boldsymbol{r})$ la funzione ruotata (qui notiamo che il sistema di riferimento OXY rimane fisso), allora possiamo scrivere:

$$f'(P') = f(P) \tag{25}$$

ovvero

$$f'(R\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r}) \tag{26}$$

Se indichiamo con P_R l'operatore che opera su funzioni, $f' \equiv P_R f$ e scriviamo:

$$P_R f(R\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r}) \tag{27}$$

ovvero, dal momento che $\boldsymbol{r} = R^{-1}\boldsymbol{r}'$:

$$P_R f(\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}\boldsymbol{r}). \tag{28}$$

Dal momento che stiamo considerando rotazioni sul piano, possiamo rappresentare il generico operatore di rotazione $R(\alpha)$ attraverso la matrice:

$$\hat{R}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \tag{29}$$

e dal momento che la matrice $\hat{R}(\alpha)$ è una matrice ortogonale:

$$\hat{R}^{-1}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \tag{30}$$

Abbiamo:

$$P_R f(x, y) = f(x\cos\alpha + y\sin\alpha, y\cos\alpha - x\sin\alpha). \tag{31}$$

Nella derivazione, il sistema di riferimento OXY è stato tenuto fisso, mentre la mappa è stata ruotata dall'operatore P_R. Una trattazione analoga può essere sviluppata assumendo di tenere la mappa fissa e di ruotare (in senso inverso) il sistema di riferimento, ottenendo chiaramente il medesimo risultato. Questa seconda interpretazione è visualizzata in Figura 3. Se a seguito della rotazione del sistema di riferimento, il punto $P = (x, y)$ ha coordinate $P' = (x', y')$ abbiamo comunque (il valore della funzione $f(x, y)$ non dipende dal sistema di riferimento) $f(P) = f'(P')$.
Esercizio: Data la funzione $f(x, y) = x+iy$, mostra che $P_R f(x, y) = e^{-i\alpha} f(x, y)$.

$$\begin{aligned} P_R f(x, y) &= f(x\cos\alpha + y\sin\alpha, y\cos\alpha - x\sin\alpha) \\ &= (x\cos\alpha + y\sin\alpha) + i(-x\sin\alpha + y\cos\alpha) \\ &= \cos\alpha(x + iy) - i\sin\alpha(x + iy) \\ &= e^{-i\alpha} f(x, y) \end{aligned}$$

Esercizio: Espandendo in serie di potenze in α la parte destra dell'Eq. (31), mostra che $P_R = e^{-i\alpha l_z} = 1 - i\alpha l_z + \frac{(-i\alpha)^2}{2} l_z^2 + \ldots$, in termini della componente z dell'operatore momento angolare:

$$l_z = -i(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}). \tag{32}$$

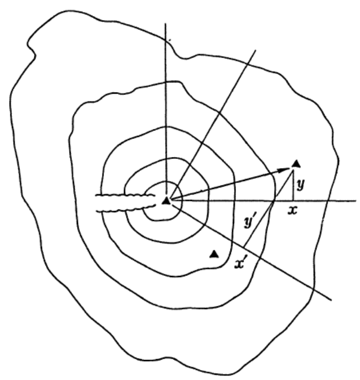

Figure 3: Esempio di rotazione passiva: la mappa non viene ruotata, ma il sistema di riferimento viene ruotato dello stesso angolo ma in verso opposto.

Fissiamo il punto (x, y). Usando la notazione $u = x\cos\alpha + y\sin\alpha$ e $v = y\cos\alpha - x\sin\alpha$, abbiamo $P_R f(x, y) \equiv f(u, v)$ con $u = u(\alpha)$ e $v = v(\alpha)$. Inoltre $u(0) = x$ e $v(0) = y$.

Quindi, espandendo $P_R f(x, y)$ in serie di Taylor attorno a $\alpha = 0$ abbiamo:

$$P_R f(x, y) = f(x, y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f}{d\alpha^n} \alpha^n.$$

Usando la regola della catena per la differenziazione di funzioni a più variabili:

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\alpha} &= \frac{\partial f}{\partial u}\frac{du}{d\alpha} + \frac{\partial f}{\partial v}\frac{dv}{d\alpha} \\ &= v\frac{\partial f}{\partial u} - u\frac{\partial f}{\partial v} \end{aligned}$$

dal momento che $\frac{du}{d\alpha} = v$ e $\frac{dv}{d\alpha} = -u$.

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\alpha}|_{\alpha=0} &= y\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial y} \\ &= -(x\frac{\partial f}{\partial y} - y\frac{\partial f}{\partial x}) \\ &= -il_z f. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f}{d\alpha^2} &= (\frac{\partial}{\partial u}\frac{du}{d\alpha} + \frac{\partial}{\partial v}\frac{dv}{d\alpha})(\frac{\partial f}{\partial u}\frac{du}{d\alpha} + \frac{\partial f}{\partial v}\frac{dv}{d\alpha}) \\ &= v^2\frac{\partial^2 f}{\partial u^2} - 2uv\frac{\partial^2 f}{\partial uv} + u^2\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \end{aligned}$$

ed infine otteniamo:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 f}{d\alpha^2}|_{\alpha=0} &= y^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2xy\frac{\partial^2 f}{\partial xy} + x^2\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \\
&= (y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y})(y\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial y})f \\
&= (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})(x\frac{\partial f}{\partial y} - y\frac{\partial f}{\partial x}) = (-il_z)^2 f.
\end{aligned}$$

Procedendo in maniera analoga per le derivate di ordine superiore si ottiene l'uguaglianza richiesta.

La definizione data dall' Eq. (28) può essere direttamente estesa alle tre dimensioni. Se un' operazione di simmetria R porta il punto di coordinate $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ al punto $\boldsymbol{r'} = (x', y', z')$, allora il valore della nuova funzione $P_R f$ nel punto $\boldsymbol{r'}$ deve essere uguale al valore di f nel punto $\boldsymbol{r}$:

$$P_R f(\boldsymbol{r'}) = f(\boldsymbol{r}).$$

Ponendo adesso $\boldsymbol{r} = R^{-1}\boldsymbol{r'}$ e sostituendo $\boldsymbol{r'}$ con $\boldsymbol{r}$ otteniamo:

$$P_R f(\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}\boldsymbol{r}).$$

Consideriamo adesso il prodotto di due operazioni P_R e P_S su una funzione arbitraria:

$$P_S P_R f = P_S(P_R f) = P_S(g(\boldsymbol{r})) \tag{33}$$

dove $g(\boldsymbol{r}) = P_R f(\boldsymbol{r})$. Ora, per definizione $P_S g(\boldsymbol{r}) = g(S^{-1}\boldsymbol{r})$ da cui concludiamo che:

$$\begin{aligned}
P_S P_R f(\boldsymbol{r}) &= P_S g(\boldsymbol{r}) = g(S^{-1}\boldsymbol{r}) = P_R f(S^{-1}\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}S^{-1}\boldsymbol{r}) \\
&= f[(SR)^{-1}\boldsymbol{r}]
\end{aligned} \tag{34}$$

.

Possiamo anche scrivere:

$$P_{SR} f(\boldsymbol{r}) = f[(SR)^{-1}\boldsymbol{r}] \tag{35}$$

da cui deduciamo che $P_{SR} = P_S P_R$. è opportuno usare una notazione semplificata. Nel proseguio scriveremo $R \equiv P_R$ e l'equazione (28) verrà scritta semplicemente come $Rf(\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}\boldsymbol{r})$ senza causare ambiguità.

4 Rappresentazioni del gruppo C_{3v} basate sui polinomi omogenei

Consideriamo un sistema di riferimento cartesiano OXYZ e un triangolo equilatero tale che l'asse C_3 (normale al piano del triangolo) punta nella direzione [111] come nella figura 4, e studiamo come le operazioni di simmetria del gruppo C_{3v} trasformano una funzione arbitraria $f = f(x, y, z)$.

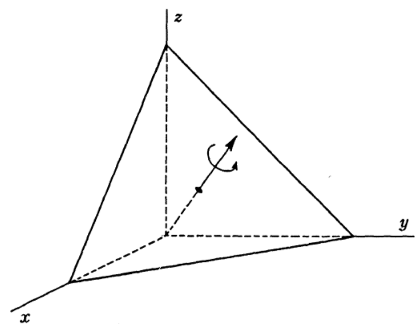

Figure 4: Triangolo equilatero con l'asse C_3 nella direzione [111].

Guardando all'Eq. (28) si noti come sia necessario calcolarsi le matrici rappresentative degli elementi del gruppo C_{3v}, e a tale scopo è conveniente usare come base la base canonica, ovvero i versori $\hat{\boldsymbol{i}}, \hat{\boldsymbol{j}}, \hat{\boldsymbol{k}}$. A seguito della rotazione C_3, $\hat{\boldsymbol{i}} \to \hat{\boldsymbol{j}}$, $\hat{\boldsymbol{j}} \to \hat{\boldsymbol{k}}$, e $\hat{\boldsymbol{k}} \to \hat{\boldsymbol{i}}$ e la matrice rappresentativa dell'operatore C_3 è

$$\hat{C}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Nota che la matrice è ortogonale, e la matrice inversa è la sua trasposta. A seguito della rotazione C_3, il generico punto del piano $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ viene trasformato in $\boldsymbol{r'} = (x', y', z') = (z, x, y)$. Inoltre, $R^{-1}\boldsymbol{r} = (y, z, x)$. In accordo all'equazione (28), possiamo quindi scrivere per la generica funzione $f(x, y, z)$:

$$C_3 f(x, y, z) = f(y, z, x)$$

Come altro esempio consideriamo l'operazione σ_1. Dal momento che il suo effetto sui vettori di base si può scrivere come $\hat{\boldsymbol{i}} \to \hat{\boldsymbol{i}}$, $\hat{\boldsymbol{j}} \to \hat{\boldsymbol{k}}$, e $\hat{\boldsymbol{k}} \to \hat{\boldsymbol{j}}$, la sua matrice rappresentativa sarà:

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

e possiamo scrivere:

$$\sigma_1 f(x,y,z) = f(x,z,y)$$

Procedendo allo stesso modo per tutti gli altri elementi del gruppo, otteniamo la seguente tabella che riporta il risultato dell'applicazione degli elementi del gruppo, R, ad una generica funzione di tre variabili, f.

Table 1: Effetto degli operatori di simmetria del gruppo C_{3v} su una arbitraria funzione $f(x,y,z)$.

R	$[Rf](x,y,z)$
E	$f(x,y,z)$
C_3	$f(y,z,x)$
C_3^{-1}	$f(z,x,y)$
σ_1	$f(x,z,y)$
σ_2	$f(z,y,x)$
σ_3	$f(y,x,z)$

Vogliamo adesso calcolare le rappresentazioni ottenute dalle seguenti tre funzioni:

$$\begin{aligned} f_1(x,y,z) &= x \\ f_2(x,y,z) &= y \\ f_3(x,y,z) &= z \end{aligned} \tag{36}$$

Usando i risultati generali della tabella 1 otteniamo per l'operazione C_3:

$$\begin{aligned} C_3 f_1(x,y,z) &= f_1(y,z,x) = y = f_2 \\ C_3 f_2(x,y,z) &= f_2(y,z,x) = z = f_3 \\ C_3 f_3(x,y,z) &= f_3(y,z,x) = x = f_1. \end{aligned}$$

Quindi nella base $\{f_1, f_2, f_3\}$, la matrice rappresentativa dell'operatore C_3 è tale che:

$$\begin{bmatrix} C_3 f_1, & C_3 f_2, & C_3 f_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1, & f_2, & f_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{37}$$

Procedendo allo stesso modo per gli altri elementi del gruppo C_{3v} otteniamo la seguente rappresentazione tridimensionale:

$$\hat{D}(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(C_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Questa rappresentazione è riducibile. La combinazione lineare:

$$f^{(A_1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}(f_1 + f_2 + f_3) \tag{38}$$

è una base per la rappresentazione irriducibile A_1, dal momento che è invariante rispetto a tutte le operazioni del gruppo C_{3v}, come è facile dimostrare dai risultati sopra. Le altre due funzioni che si trasformano in accordo alla rappresentazione E sono:

$$\begin{aligned} f_1^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2f_1 - f_2 - f_3) \\ f_2^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_2 - f_3) \end{aligned} \tag{39}$$

Consideriamo l'effetto dell'operazione C_3 sulle funzioni $f_1^{(E)}$ ed $f_2^{(E)}$:

$$\begin{aligned} C_3 f_1^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2C_3 f_1 - C_3 f_2 - C_3 f_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2f_2 - f_3 - f_1) \end{aligned}$$

che può essere scritto come combinazione lineare di $f_1^{(E)}$ e $f_2^{(E)}$ nel seguente modo:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}f_1^{(E)} + \frac{\sqrt{3}}{2}f_2^{(E)} &= -\frac{1}{2}[\frac{1}{\sqrt{6}}(2f_1 - f_2 - f_3)] + \frac{\sqrt{3}}{2}[\frac{1}{\sqrt{2}}(f_2 - f_3)] \\ &= -\frac{1}{2}[\frac{1}{\sqrt{6}}(2f_1 - f_2 - f_3)] + \frac{3}{2}[\frac{1}{\sqrt{6}}(f_2 - f_3)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2f_2 - f_3 - f_1). \end{aligned}$$

Procedendo in maniera analoga con $f_2^{(E)}$:

$$\begin{aligned} C_3 f_2^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(C_3 f_2 - C_3 f_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_3 - f_1) \end{aligned}$$

$C_3 f_2^{(E)}$ può a sua volta essere scritto come combinazione lineare di $f_1^{(E)}$ e $f_2^{(E)}$:

$$\begin{aligned} -\frac{\sqrt{3}}{2} f_1^{(E)} - \frac{1}{2} f_2^{(E)} &= -\frac{\sqrt{3}}{2}[\frac{1}{\sqrt{6}}(2f_1 - f_2 - f_3)] - \frac{1}{2}[\frac{1}{\sqrt{2}}(f_2 - f_3)] \\ &= -\frac{1}{2}[\frac{1}{\sqrt{2}}(2f_1 - f_2 - f_3)] - \frac{1}{2}[\frac{1}{\sqrt{2}}(f_2 - f_3)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_3 - f_1) \end{aligned}$$

Le relazioni sopra possono essere scritte in forma matriciale nel seguente modo:

$$\begin{bmatrix} C_3 f_1^{(E)} & C_3 f_2^{(E)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^{(E)} & f_2^{(E)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix},$$

ovvero

$$\begin{bmatrix} C_3 f_1^{(E)} & C_3 f_2^{(E)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^{(E)} & f_2^{(E)} \end{bmatrix} \hat{D}^{(E)}(C_3).$$

Procedendo esattamente allo stesso modo per gli altri elementi del gruppo, si dimostra che le funzioni $f_1^{(E)}$ ed $f_2^{(E)}$ sono base per la rappresentazione bidimensionale E del gruppo C_{3v}. Quindi la rappresentazione tridimensionale ottenuta usando come base i polinomi omogenei di grado 1 può essere decomposta come somma diretta di $A_1 + E$. La decomposizione può essere ottenuto con una trasformazione lineare T:

$$\begin{bmatrix} f^{(A_1)} & f_1^{(E)} & f_2^{(E)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & f_3 \end{bmatrix} \hat{T}$$

dove $\hat{T}$ è una matrice ortogonale avente la seguente forma:

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

A seguito della trasformazione di equivalenza, Eq. (6), con matrice $\hat{T}$, le matrici rappresentative prendono la forma diagonale a blocchi:

$$\hat{D}'(G_i) = \begin{bmatrix} \hat{D}^{(A_1)}(G_i) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(E)}(G_i) \end{bmatrix} \tag{40}$$

$\forall G_i \in C_{3v}$. Per esempio:

$$\hat{D}'(C_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Consideriamo adesso i polinomi omogenei di grado 2. Essi sono:

$$\begin{cases} x^2\,,\; y^2\,,\; z^2 \\ yz\,,\; zx\,,\; xy \end{cases} \tag{41}$$

In maniera analoga a quanto fatto per i polinomi omogenei di grado 1, si può dimostrare che l'insieme dei polinomi $f_1 = x^2$, $f_2 = y^2$, e $f_3 = z^2$, è chiuso rispetto alle operazioni del gruppo C_{3v}, e la base $\{f_1, f_2, f_3\}$ fornisce una rappresentazione riducibile analoga a quella vista per i polinomi omogenei di grado 1. Come conseguenza, tale rappresentazione può essere ridotta a somma diretta $A_1 + E$. Allo stesso modo, l'insieme dei polinomi $f_1 = yz$, $f_2 = zx$, e $f_3 = xy$, è chiuso rispetto alle operazioni del gruppo C_{3v}, e le funzioni di base forniscono una rappresentazione riducibile analoga a quella vista per i polinomi omogenei di grado 1. Dai polinomi dell' Eq. (41) si ottiene la decomposizione irriducibile $2A_1 + 2E$. La rappresentazione irriducibile A_2 appare nei polinomi omogenei di terzo grado.
Esercizio: Mostra che

$$f^{(A_2)}(x, y, z) = x(y^2 - z^2) + y(z^2 - x^2) + z(x^2 - y^2)$$

è base per la rappresentazione irriducibile A_2 del gruppo C_{3v}. Applicando le operazioni di simmetria del gruppo C_{3v} alla f, ed usando i risultati della tabella 1, otteniamo:

$$\begin{cases} Ef^{(A_2)} = (+1)f^{(A_2)} \\ C_3 f^{(A_2)} = (+1)f^{(A_2)} \\ C_3^{-1} f^{(A_2)} = (+1)f^{(A_2)} \\ \sigma_1 f^{(A_2)} = (-1)f^{(A_2)} \\ \sigma_2 f^{(A_2)} = (-1)f^{(A_2)} \\ \sigma_3 f^{(A_2)} = (-1)f^{(A_2)} \end{cases}$$

che dimostra come $f^{(A_2)}$ è base per la rappresentazione irriducibile A_2 del gruppo C_{3v}.

5 Teoria delle rappresentazioni

Nella seguente trattazione considereremo un gruppo finito $\mathcal{G} = \{G_1, G_2, \ldots, G_g\}$ di ordine g. Alcuni dei teoremi riportati in questa sezione saranno dati senza dimostrazione.

5.1 Rappresentazione unitaria equivalente

Teorema: Una qualsiasi rappresentazione del gruppo finito $\mathcal{G}$ può essere convertita in una rappresentazione unitaria attraverso una trasformazione di equivalenza.

Dal momento che ogni rappresentazione di un gruppo finito $\mathcal{G}$ è equivalente a una rappresentazione unitaria, possiamo restringere la nostra trattazione a tali rappresentazioni senza perdita di generalità.

5.2 Primo lemma di Schur

Lemma. Date due rappresentazioni irriducibili $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ del gruppo $\mathcal{G}$, di dimensioni m e n rispettivamente, una matrice rettangolare $\hat{M}$ che soddisfi:

$$\hat{D}^{(1)}(G)\hat{M} = \hat{M}\hat{D}^{(2)}(G) \tag{42}$$

$\forall\ G \in \mathcal{G}$, deve avere una delle seguenti caratteristiche:

1. La matrice nulla (tutti gli elementi uguali a zero).
2. Una matrice quadrata ($m = n$), con $\texttt{det}(\hat{M}) \neq 0$.

Notiamo che

1. $\hat{M} = 0$ trivialmente soddisfa l'Eq. (42).
2. La condizione $\texttt{det}(\hat{M}) \neq 0$ garantisce l'esistenza della matrice inversa $\hat{M}^{-1}$. Possiamo quindi scrivere:

$$\hat{D}^{(2)}(G) = \hat{M}^{-1}\hat{D}^{(1)}(G)\hat{M} \tag{43}$$

   e quindi $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ sono rappresentazioni equivalenti.

Possiamo quindi concludere che se $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ non sono rappresentazioni equivalenti, allora $\hat{M} = 0$.

5.3 Secondo lemma di Schur

Lemma. Una matrice $\hat{M}$ che commuta con tutte le matrici di una rappresentazione D del gruppo $\mathcal{G}$ deve essere un multiplo della matrice unità *se D è una rappresentazione irriducibile*. Ovvero, se $\forall\ G \in \mathcal{G}$:

$$\hat{D}(G)\hat{M} = \hat{M}\hat{D}(G) \tag{44}$$

con $\hat{M} = c\hat{1}$ con $c \in \mathbb{C}$ e arbitrario, allora la rappresentazione D è irriducibile.
Esercizio: Verifica il secondo lemma di Schur per la rappresentazione irriducibile E del gruppo C_{3v},

$$\hat{D}^{(E)}(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}^{(E)}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(E)}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

La matrice $\hat{M}$ 2×2 avrà la seguente forma:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

con costanti a, b, c, d da determinare. È sufficiente considerare gli elementi C_3 e σ_1, che possono essere presi come i generatori del gruppo C_{3v}. La condizione che $\hat{M}$ e $\hat{\sigma}_1$ commutino:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

porta alle seguenti relazioni tra i coefficienti:

$$\begin{cases} b = -b & \Longrightarrow b = 0 \\ c = -c & \Longrightarrow c = 0. \end{cases}$$

La condizione che $\hat{M}$ e $\hat{C}_3$ commutino:

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

porta alla condizione $d = a$, ovvero $\hat{M} = a\hat{1}$ con a numero arbitrario.
Esercizio: Mostra che per la rappresentazione del gruppo C_{3v} generata dai polinomi omogenei di primo grado esiste una matrice $\hat{M}$ diversa dalla matrice unità che commuta con tutti gli elementi del gruppo.

La rappresentazione del gruppo C_{3v} generata dai polinomi omogenei di primo grado è la seguente:

$$\hat{D}(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(C_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \hat{D}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

e la matrice $\hat{M}$ 3×3 contiene 9 numeri:

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

Anche in questo caso, per ottenere il set di condizioni indipendenti sui coefficienti sarà sufficiente considerare gli elementi generatori C_3 e σ_1. La condizione che $\hat{M}$ e $\hat{C}_3$ commutino:

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

porta alle condizioni:

$$\begin{cases} b = g = f \\ e = i = a \\ d = h = c \end{cases}$$

La condizione che $\hat{M}$ e $\hat{\sigma}_1$ commutino porta alla condizione $b = c$, ovvero $\hat{M}$ ha la seguente struttura:

$$\hat{M} = \begin{bmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ b & b & a \end{bmatrix}$$

con due costanti a, b arbitrarie. La matrice $\hat{M}$ non deve necessariamente essere la matrice identica.

5.4 Il *Grande Teorema di Ortogonalità*

Teorema. Gli elementi delle matrici di una rappresentazione unitaria *irriducibile* $D^{(\alpha)}$, di dimensione d_α, soddisfano la seguente *relazione di ortogonalità*:

$$\sum_G D_{ij}^{(\alpha)}(G)^* D_{kl}^{(\alpha)}(G) = \frac{g}{d_\alpha} \delta_{ik} \delta_{jl}, \tag{45}$$

dove la sommatoria corre su tutti i g elementi del gruppo $\mathcal{G}$. Se $D^{(\alpha)}$ e $D^{(\beta)}$ sono due rappresentazioni irriducibili non equivalenti del gruppo, allora

$$\sum_G D_{ij}^{(\alpha)}(G)^* D_{kl}^{(\beta)}(G) = 0. \tag{46}$$

Le equazioni (45) e (46) possono essere combinate in un'unica equazione:

$$\sum_G D_{ij}^{(\alpha)}(G)^* D_{kl}^{(\beta)}(G) = \frac{g}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ik} \delta_{jl}. \tag{47}$$

Dimostrazione. Sia $\hat{B}$ una matrice rettangolare arbitraria, con d_α righe e d_β colonne, e costruiamo una matrice $\hat{M}$ come:

$$\hat{M} = \sum_G \hat{D}^{(\alpha)}(G^{-1})\hat{B}\hat{D}^{(\beta)}(G).$$

Abbiamo che:

$$M_{jl} = \sum_G \sum_i \sum_k D^{(\alpha)}_{ji}(G^{-1})B_{ik}D^{(\beta)}_{kl}(G).$$

La matrice $\hat{M}$ siffatta, soddisfa al primo lemma di Shur. Infatti, per un elemento arbitrario $G' \in \mathcal{G}$ abbiamo:

$$\begin{aligned}
\hat{D}^{(\alpha)}(G')\hat{M} &= \sum_G \hat{D}^{(\alpha)}(G')\hat{D}^{(\alpha)}(G^{-1})\hat{B}\hat{D}^{(\beta)}(G) \\
&= \sum_G \hat{D}^{(\alpha)}(G'G^{-1})\hat{B}\hat{D}^{(\beta)}(G)
\end{aligned}$$

Ora, posto $G'' = GG'^{-1}$ con $G = G''G'$, e usando il teorema del riarrangiamento:

$$\begin{aligned}
\hat{D}^{(\alpha)}(G')\hat{M} &= \sum_{G''} \hat{D}^{(\alpha)}(G''^{-1})\hat{B}\hat{D}^{(\beta)}(G''G') \\
&= \sum_{G''} \hat{D}^{(\alpha)}(G''^{-1})\hat{B}\hat{D}^{(\beta)}(G'')\hat{D}^{(\beta)}(G') \\
&= \hat{M}\hat{D}^{(\beta)}(G'). \qquad (48)
\end{aligned}$$

Se le due rappresentazioni non sono equivalenti, allora $\hat{M} = 0$. Inoltre, dal momento che $\hat{B}$ è arbitraria, possiamo scegliere $B_{jl} = \delta_{ji}\delta_{lk}$ da cui otteniamo:

$$\sum_G D^{(\alpha)}_{ji}(G^{-1})D^{(\beta)}_{kl}(G) = 0$$

Dal momento che stiamo lavorando con rappresentazioni unitarie, $[\hat{D}(G^{-1})]_{ji} = [\hat{D}^\dagger(G)]_{ji} = D_{ij}(G)^*$ e abbiamo l'equazione (46). Nel caso in cui $\alpha = \beta$, usando il secondo lemma di Schur, abbiamo $\hat{M} = c\hat{1}$, ovvero:

$$\sum_G \sum_i \sum_k D^{(\alpha)}_{ji}(G^{-1})B_{ik}D^{(\alpha)}_{kl}(G) = c\delta_{jl}.$$

Come prima, dal momento che $\hat{B}$ è arbitraria, scegliamo $\hat{B}$ in modo tale che $B_{jl} = \delta_{ji}\delta_{lk}$ e otteniamo:

$$\sum_G D^{(\alpha)}_{ji}(G^{-1})D^{(\alpha)}_{kl}(G) = c\delta_{jl}.$$

Per determinare la costante c, poniamo $j = l$ e sommiano sull'indice j.

$$\sum_G \sum_{j=1}^{d_\alpha} D_{kj}^{(\alpha)}(G) D_{ji}^{(\alpha)}(G^{-1}) = c \sum_{j=1}^{d_\alpha} 1.$$

ovvero:

$$\sum_G [D^{(\alpha)}(E)]_{ki} = c d_\alpha.$$

da cui $g\delta_{ki} = cd_\alpha$ e $c = \frac{g}{d_\alpha}\delta_{ki}$.

Consideriamo ancora il grande teorema di ortogonalità:

$$\sum_G D_{ij}^{(\alpha)}(G)^* D_{kl}^{(\beta)}(G) = \frac{g}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ik} \delta_{jl}.$$

e cerchiamo di associargli una interpretazione geometrica. Possiamo considerare i numeri:

$$D_{ij}^{(\alpha)}(G_1), D_{ij}^{(\alpha)}(G_2), \ldots, D_{ij}^{(\alpha)}(G_g)$$

come componenti di un vettore in uno spazio g-dimensionale. Ogni vettore contiene tre indici, l'indice della rappresentazione, α, e gli indici di riga e colonna i, j. Il numero di questi vettori è dato da:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2$$

ed il teorema di ortogonalità esprime semplicemente l'ortogonalità tra questi vettori. Dal momento che in uno spazio g-dimensionale ci possono essere al massimo g vettori mutuamente ortogonali, abbiamo la diseguaglianza:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 \leq g.$$

Vedremo in seguito che vale la relazione di uguaglianza:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = g. \tag{49}$$

e l'Eq. (49) è molto utile nella determinazione della tabella dei caratteri del gruppo $\mathcal{G}$.

6 Caratteri

Sia D una rappresentazione del gruppo $\mathcal{G}$. Denotiamo con $\chi(G)$ la traccia della matrice rappresentativa $\hat{D}(G)$ dell'elemento $G \in \mathcal{G}$:

$$\chi(G) = \mathtt{Tr}(\hat{D}(G)) = \sum_{i=1}^{d} D_{ii}(G) \tag{50}$$

allora l'insieme delle tracce $\chi(G_1), \chi(G_2), \ldots, \chi(G_g)$ per tutti gli elementi del gruppo $\mathcal{G}$ costituisce *il carattere della rappresentazione* D. I caratteri delle rappresentazioni irriducibili sono chiamati *caratteri irriducibili* o *caratteri semplici.* Dal momento che l'elemento identità E è rappresentato dalla matrice unità, $\chi(E) = d$, la dimensione della rappresentazione. I caratteri delle tre rappresentazioni irriducibili A_1, A_2, ed E del gruppo C_{3v} sono riportati nella tabella 2.

Table 2: Tabella dei caratteri del gruppo C_{3v}.

C_{3v}	E	C_3, C_3^{-1}	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

La traccia di una matrice quadrata soddisfa le seguenti proprietà:

1. $\mathtt{Tr}\{\hat{T}\hat{S}\} = \mathtt{Tr}\{\hat{S}\hat{T}\}$ Infatti:

$$\mathtt{Tr}\{\hat{T}\hat{S}\} = \sum_i \sum_j T_{ij} S_{ji} = \sum_j \sum_i S_{ji} T_{ij} = \sum_j (\hat{S}\hat{T})_{jj} = \mathtt{Tr}\{\hat{S}\hat{T}\} \tag{51}$$

2. La traccia è invariante rispetto a una trasformazione di similitudine. Posto $\hat{S} = \hat{Q}\hat{T}^{-1}$, abbiamo:

$$\mathtt{Tr}\{\hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1}\} = \mathtt{Tr}\{\hat{Q}\hat{T}^{-1}\hat{T}\} = \mathtt{Tr}\{\hat{Q}\}. \tag{52}$$

Possiamo quindi enunciare le seguenti proprietà dei caratteri:

1. Matrici rappresentative di elementi coniugati hanno la stessa traccia. Infatti due elementi coniugati G_i e G_j di un gruppo $\mathcal{G}$ sono relazionati da:

$$G_j = G G_i G^{-1}$$

   per qualche elemento $G \in \mathcal{G}$. Le matrici rappresentative soddisfano una corrispondente relazione:

$$\hat{D}(G_j) = \hat{D}(G)\hat{D}(G_i)\hat{D}^{-1}(G)$$

   da cui segue che $\chi(G_j) = \chi(G_i)$.

2. Rappresentazioni equivalenti possiedono lo stesso carattere.

6.1 Prima e seconda ortogonalità dei caratteri

Teorema: *prima ortogonalità dei caratteri.* I caratteri delle rappresentazioni irriducibili soddisfano la seguente relazione di ortogonalità:

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi^{\beta}(G) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{53}$$

dove $\chi^{(\alpha)}$ e $\chi^{(\beta)}$ sono i caratteri delle rappresentazioni irriducibili $D^{(\alpha)}$ e $D^{(\beta)}$ rispettivamente, mentre la somma si estende su tutti i g elementi del gruppo $\mathcal{G}$.
Dimostrazione. Usiamo il teorema di ortogonalità, Eq. (47):

$$\sum_G D_{ij}^{(\alpha)}(G)^* D_{kl}^{(\beta)}(G) = \frac{g}{d_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ik}\delta_{jl}.$$

Poniamo $i = j$ e $k = l$ e sommiano su i e k:

$$\sum_G \sum_i \sum_k D_{ii}^{(\alpha)}(G)^* D_{kk}^{(\beta)}(G) = \sum_i \sum_k \frac{g}{d_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ik}$$

ed infine:

$$\begin{aligned} \sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi^{(\beta)}(G) &= \frac{g}{d_\alpha}\delta_{\alpha\beta} d_\alpha \\ &= g\delta_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Se il gruppo $\mathcal{G}$ possiede n_c, classi, e se denotiamo il numero di elementi della classe $\mathcal{C}_k$ con h_k l'Eq. (53) può essere riscritta come:

$$\sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(\beta)}(\mathcal{C}_k) = g\delta_{\alpha\beta}. \tag{54}$$

Teorema: *seconda ortogonalità dei caratteri.* I caratteri delle rappresentazioni irriducibili soddisfano la seguente relazione di ortogonalità:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_i)^* \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_j) = \frac{g}{h_i}\delta_{ij} \tag{55}$$

dove n_r è il numero di rappresentazioni irriducibili del gruppo $\mathcal{G}$. Mentre la dimostrazione sarà posticipata, possiamo usare i due teoremi di ortogonalità dei caratteri per dimostrare che il numero di rappresentazioni irriducibili di un gruppo $\mathcal{G}$ è uguale al numero di classi di elementi coniugati, ovvero $n_c = n_r$.

Dalla prima relazione di ortogonalità,

$$\sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(\beta)}(\mathcal{C}_k) = g\delta_{\alpha\beta}.$$

Se consideriamo n_r vettori in uno spazio di dimensione n_c con componenti

$$\sqrt{h_1}\chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_1), \sqrt{h_2}\chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_2), \ldots, \sqrt{h_{n_c}}\chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_{n_c}))$$

con $\alpha = 1, 2, \ldots, n_r$, allora la parte sinistra dell'Eq. (54) rappresenta il prodotto scalare di due vettori, mentre la parte destra dell' Eq. (54) può essere interpretata come la condizione di ortogonalità tra vettori. Dal momento che in uno spazio di dimensione n_c possiamo avere al massimo n_c vettori mutuamente ortogonali, dobbiamo necessariamente avere $n_r \leq n_c$.

Similmente, se consideriamo le n_r componenti:

$$\chi^{(1)}(\mathcal{C}_i), \chi^{(2)}(\mathcal{C}_i), \ldots, \chi^{(n_r)}(\mathcal{C}_i)$$

come componenti di un vettore in uno spazio di dimensione n_r, l'equazione. (55) rappresenta la relazione di ortogonalità tra gli n_c differenti vettori. Dal momento che in uno spazio di dimensione n_r ci possono essere al massimo n_r vettori mutuamente ortogonali, $n_c \leq n_r$. Ne segue quindi che

$$n_r = n_c \tag{56}$$

e abbiamo l'importante risultato che *il numero di rappresentazioni irriducibili non equivalenti di un gruppo è uguale al numero di classi di elementi coniugati.*

7 Riduzione di una rappresentazione riducibile

Data una rappresentazione riducibile del gruppo $\mathcal{G}$, con matrici della forma

$$\hat{D}(G_i) = \begin{bmatrix} \hat{D}^{(1)}(G_i) & 0 \\ 0 & \hat{D}^{(2)}(G_i) \end{bmatrix} \tag{57}$$

la traccia è data semplicemente da $\chi(G_i) = \chi^{(1)}(G_i) + \chi^{(2)}(G_i)$. In generale una rappresentazione riducibile D può essere scritta come somma diretta di rappresentazioni irriducibili, $D^{(\alpha)}$:

$$D = \sum_\alpha q_\alpha D^{(\alpha)} \tag{58}$$

con interi $q_\alpha \geq 0$. Dal momento che ogni rappresentazione riducibile è equivalente a una rappresentazione diagonale a blocchi,

$$\chi(G) = \sum_\alpha q_\alpha \chi^{(\alpha)}(G). \tag{59}$$

I coefficienti q_α possono essere calcolati usando la prima relazione di ortogonalità dei caratteri:

$$
\begin{aligned}
\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi(G) &= \sum_G \sum_\beta \chi^{(\alpha)}(G)^* q_\beta \chi^{(\beta)}(G) \\
&= \sum_\beta q_\beta [\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi^{(\beta)}(G)] \\
&= \sum_\beta q_\beta [g\delta_{\alpha\beta}] = g q_\alpha
\end{aligned}
$$

da cui otteniamo:

$$
q_\alpha = \frac{1}{g} \sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi(G) \tag{60}
$$

oppure, se la somma è presa sulle classi del gruppo $\mathcal{G}$:

$$
q_\alpha = \frac{1}{g} \sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^* \chi(\mathcal{C}_k), \tag{61}
$$

e notiamo che la riduzione di una rappresentazione riducibile può essere fatta usando solamente i caratteri senza la necessità di conoscere tutti gli elementi delle matrici della rappresentazione riducibile.
Esempio. Come esempio consideriamo la rappresentazione del gruppo C_{3v} fornita dai polinomi omogenei di primo grado, vista precedentemente. Per questa rappresentazione (che è riducibile) abbiamo $\chi(E) = 3$, $\chi(C_3) = \chi(C_3^{-1}) = 0$, $\chi(\sigma_1) = \chi(\sigma_2) = \chi(\sigma_3) = 1$. Abbiamo la seguente decomposizione irriducibile:

$$
\begin{aligned}
q_{A_1} &= \frac{1}{6}[1 \times 1 \times 3 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times 1] = 1 \\
q_{A_2} &= \frac{1}{6}[1 \times 1 \times 3 + 2 \times 1 \times 0 + 3 \times (-1) \times 1] = 0 \\
q_E &= \frac{1}{6}[1 \times 2 \times 3 + 2 \times (-1) \times 0 + 3 \times 0 \times 1] = 1
\end{aligned}
$$

e la rappresentazione riducibile e' ridotta a $A_1 + E$.
Esercizio. Per il carattere χ di una rappresentazione arbitraria D, dimostra che

$$
\sum_G |\chi(G)|^2 = mg
$$

e che:

i D è irriducibile se $m = 1$.

ii D è riducibile se $m \geq 2$.

Dalla prima relazione di ortogonalità dei caratteri, posto $\alpha = \beta$:

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi^{\alpha}(G) = \sum_G |\chi^{(\alpha)}(G)|^2 = g.$$

Se la rappresentazione D è riducibile, $D = \sum_\alpha q_\alpha D^{(\alpha)}$.

$$\begin{aligned}
\sum_G |\chi(G)|^2 &= \sum_G [\sum_\alpha q_\alpha \chi^{(\alpha)}(G)^*][\sum_\beta q_\beta \chi^{(\beta)}(G)] \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta q_\alpha q_\beta [\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^* \chi^{(\beta)}(G)] \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta q_\alpha q_\beta [g\delta_{\alpha\beta}] \\
&= (\sum_\alpha q_\alpha^2) g.
\end{aligned}$$

Notiamo che $(\sum_\alpha q_\alpha^2)$ è un intero $m \geq 2$.

7.1 Restrizione a un sottogruppo

Sia $\mathcal{H}$ un sottogruppo proprio di $\mathcal{G}$ e sia D una rappresentazione del gruppo $\mathcal{G}$. Se consideriamo le matrici $\hat{D}(H_i)$ degli elementi H_i di $\mathcal{H}$, allora otteniamo una rappresentazione del sottogruppo $\mathcal{H}$. Questa rappresentazione ottenuta restringendo la rappresentazione D ai soli elementi del sottogruppo $\mathcal{H}$ è denotata con $D \downarrow \mathcal{H}$, ed è detta *rappresentazione indotta* (subduced representation). La rappresentazione indotta è in generale riducibile anche se D è una rappresentazione irriducibile di $\mathcal{G}$.

Esempio. Consideriamo $\mathcal{G} = C_{3v}$ e $\mathcal{H} = C_s = \{E, \sigma_1\}$. La tabella dei caratteri del gruppo C_s è riportata nella tabella 3:

Table 3: Tabella dei caratteri del gruppo C_s.

C_s	E	σ
A'	1	1
A''	1	-1

Nella notazione usata per indicare le rappresentazioni irriducibili, la rappresentazione A' è simmetrica rispetto a σ, mentre A'' è antisimmetrica. Se restringiamo le rappresentazioni irriducibili A_1, A_2, e E del gruppo C_{3v} al sottogruppo C_s, come indicato in Tabella 4, risulta evidente che $A_1 \downarrow \mathcal{H} = A'$, $A_2 \downarrow \mathcal{H} = A''$, mentre $E \downarrow \mathcal{H} = A' + A''$:

Table 4: Carattere delle rappresentazioni A_1, A_2, ed E di C_{3v} nel gruppo C_s.

C_s	E	σ
A_1	1	1
A_2	1	-1
E	2	0

$$
\begin{aligned}
q_{A'} &= \frac{1}{2}[1 \times 2 \times 1 + 1 \times 0 \times 1] = 1 \\
q_{A''} &= \frac{1}{2}[1 \times 2 \times 1 + 1 \times 0 \times -1] = 1.
\end{aligned}
$$

Queste relazioni sono chiamate *relazioni di compatibilità.*

8 Rappresentazioni prodotto

Siano $D^{(\alpha)}$ e $D^{(\beta)}$ due rappresentazioni irriducibili del gruppo $\mathcal{G}$, di dimensioni d_α e d_β rispettivamente. Siano poi $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{d_\alpha}\}$ e $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{d_\beta}\}$ le due basi delle rappresentazioni $D^{(\alpha)}$ e $D^{(\beta)}$. Per definizione abbiamo che $\forall G \in \mathcal{G}$:

$$G\phi_j = \sum_i \phi_i D_{ij}^{(\alpha)}(G) \tag{62}$$

e

$$G\psi_l = \sum_k \psi_k D_{kl}^{(\beta)}(G). \tag{63}$$

I $d_\alpha d_\beta$ prodotti del tipo $\phi_j \psi_l$ sono trasformati nel seguente modo:

$$
\begin{aligned}
G(\phi_j \psi_l) &= G(\phi_j)G(\psi_l) = \sum_i \phi_i D_{ij}^{(\alpha)}(G) \sum_k \psi_k D_{kl}^{(\beta)}(G) \\
&= \sum_i \sum_k \phi_i \psi_k D_{ij}^{(\alpha)}(G) D_{kl}^{(\beta)}(G) \\
&= \sum_i \sum_k \phi_i \psi_k [\hat{D}^{(\alpha \times \beta)}(G)]_{ik,jl}
\end{aligned}
$$

dove abbiamo definito

$$[\hat{D}^{(\alpha \times \beta)}(G)]_{ik,jl} = D_{ij}^{(\alpha)}(G) D_{kl}^{(\beta)}(G). \tag{64}$$

e le righe e colonne della matrice $\hat{D}^{(\alpha \times \beta)}(G)$ sono rappresentate da coppie di indici. Il set di vettori $\phi_j \psi_l$ è chiuso rispetto alle operazioni del gruppo, ed è base per una rappresentazione di dimensione $d_\alpha d_\beta$. Le matrici dell'Eq. (64) costituiscono una rappresentazione, come è facile dimostrare:

$$\begin{aligned}
[\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(G)\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(G')]_{ik,jl} &= \sum_{\mu\nu}[\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(G)]_{ik,\mu\nu}[\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(G')]_{\mu\nu,jl} \\
&= \sum_{\mu\nu} D^{(\alpha)}_{i\mu}(G)D^{(\beta)}_{k\nu}(G)D^{(\alpha)}_{\mu j}(G')D^{(\beta)}_{\nu l}(G') \\
&= D^{(\alpha)}_{ij}(GG')D^{(\beta)}_{kl}(GG') \\
&= [\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(GG')]_{ik,jl}.
\end{aligned}$$

Questa rappresentazione, denotata con $D^{(\alpha)}\times D^{(\beta)}$, è chiamata *rappresentazione prodotto diretto* oppure *rappresentazione prodotto*. Il carattere della rappresentazione prodotto è determinato ponendo $i = j$ e $k = l$ e sommando su i e k:

$$\begin{aligned}
\chi^{(\alpha\times\beta)}(G) &= \sum_i\sum_k[\hat{D}^{(\alpha\times\beta)}(G)]_{ik,ik} = \sum_i\sum_k D^{(\alpha)}_{ii}(G)D^{(\beta)}_{kk}(G) \\
&= \chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G). \qquad (65)
\end{aligned}$$

Le rappresentazioni prodotto diretto sono generalmente riducibili. Scrivendo la decomposizione irriducibile di $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$ come:

$$D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)} = \sum_\gamma q_\gamma D^{(\gamma)},$$

dove q_γ dà il numero di volte in cui $D^{(\gamma)}$ entra nella decomposizione irriducibile di $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$, i valori di q_γ possono essere calcolati come segue:

$$\begin{aligned}
q_\gamma &= \frac{1}{g}\sum_G \chi^{(\gamma)}(G)^*\chi^{(\alpha\times\beta)}(G) \\
&= \frac{1}{g}\sum_G \chi^{(\gamma)}(G)^*\chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G). \qquad (66)
\end{aligned}$$

Per le rappresentazioni $D^{(\gamma)}$ per le quali $q_\gamma \neq 0$, appropriate combinazioni lineari delle funzioni prodotto $\phi_j\psi_l$ daranno funzioni di base adattate alla decomposizione. I coefficienti delle combinazioni lineari sono espressi in termini di *coefficienti di Clebsh-Gordan*:

$$\Psi^{(\gamma)p}_m = \sum_{jl}\phi_j\psi_l\langle\alpha j\beta l|p\gamma m\rangle. \qquad (67)$$

Nell'Eq. (67) m specifica i partners della rappresentazione $D^{(\gamma)}$ e $p = 1, 2, \ldots, q_\gamma$. Come esempio consideriamo il prodotto $E \times E$ del gruppo C_{3v}. La rappresentazione E è bidimensionale e le basi $\{\phi_1, \phi_2\}$ e $\{\psi_1, \psi_2\}$ si trasformano, sotto le operazioni del gruppo C_{3v} in accordo alle matrici:

$$\hat{D}^{(E)}(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(C_3^{-1}) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}^{(E)}(\sigma_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \hat{D}^{(E)}(\sigma_2) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad \hat{D}^{(E)}(\sigma_3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Dal momento che $\chi^{(E)}(E) = 2$, $\chi^{(E)}(C_3) = \chi^{(E)}(C_3^{-1}) = -1$ e $\chi^{(E)}(\sigma_i) = 0$, $i = 1, 2, 3$, la rappresentazione prodotto ha i seguenti caratteri, $\chi^{(E\times E)}(E) = 4$, $\chi^{(E\times E)}(C_3) = \chi^{(E\times E)}(C_3^{-1}) = 1$ e $\chi^{(E\times E)}(\sigma_i) = 0$, $i = 1, 2, 3$. Abbiamo quindi la seguente decomposizione irriducibile:

$$\begin{aligned}
q_{A_1} &= \frac{1}{6}[1 \times 1 \times 4 + 2 \times (1) \times 1 + 3 \times 1 \times 0] = 1 \\
q_{A_2} &= \frac{1}{6}[1 \times 1 \times 4 + 2 \times (1) \times 1 + 3 \times (-1) \times 0] = 1 \\
q_E &= \frac{1}{6}[1 \times 2 \times 4 + 2 \times (-1) \times 1 + 3 \times 0 \times 0] = 1
\end{aligned}$$

ovvero $E \times E = A_1 + A_2 + E$. Le funzioni di base sono:

$$\begin{aligned}
\Psi^{(A_1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\psi_1 + \phi_2\psi_2) \\
\Psi^{(A_2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\psi_2 - \phi_2\psi_1) \\
\Psi_1^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_1\psi_1 + \phi_2\psi_2) \\
\Psi_2^{(E)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\psi_2 + \phi_2\psi_1).
\end{aligned}$$

8.1 Rappresentazioni prodotto simmetriche e antisimmetriche

Consideriamo il caso particolare $D^{(\alpha)} = D^{(\beta)}$. Possiamo scrivere:

$$G(\phi_j\psi_l) = \sum_i \sum_k \phi_i\psi_k D_{ij}^{(\alpha)}(G) D_{kl}^{(\alpha)}(G) \tag{68}$$

e

$$G(\phi_l\psi_j) = \sum_i \sum_k \phi_k\psi_i D_{kl}^{(\alpha)}(G) D_{ij}^{(\alpha)}(G). \tag{69}$$

Sommando e sottraendo le due equazioni sopra otteniamo:

$$G(\phi_j\psi_l \pm \phi_l\psi_j) = \sum_i \sum_k (\phi_i\psi_k \pm \phi_k\psi_i) D_{kl}^{(\alpha)}(G) D_{ij}^{(\alpha)}(G) \tag{70}$$

che dimostra che il set di funzioni:

$$\Psi^+_{jl} = \phi_j \psi_l + \phi_l \psi_j$$

e

$$\Psi^-_{jl} = \phi_j \psi_l - \phi_l \psi_j$$

sono chiusi rispetto alle operazioni del gruppo, e formano quindi una base per una rappresentazione del gruppo. Nota che la dimensione della base $\{\Psi^+_{jl}\}$ è pari a $\frac{1}{2} d_\alpha d_\alpha + \frac{1}{2} d_\alpha = \frac{d_\alpha (d_\alpha+1)}{2}$, mentre la dimensione della base $\{\Psi^-_{jl}\}$ è pari a $\frac{d_\alpha d_\alpha}{2} - \frac{1}{2} d_\alpha = \frac{d_\alpha (d_\alpha - 1)}{2}$. La rappresentazione basata sulla base $\{\Psi^+_{jl}\}$ è chiamata *rappresentazione prodotto simmetrica* ed indicata con $[D^{(\alpha)} \times D^{(\alpha)}]$, mentre la rappresentazione basata sulla base $\{\Psi^-_{jl}\}$ è chiamata *rappresentazione prodotto antisimmetrica* ed indicata con $\{D^{(\alpha)} \times D^{(\alpha)}\}$, dal momento che

$$\Psi^{(\pm)}_{jl} = \pm \Psi^{(\pm)}_{lj}. \tag{71}$$

Valgono le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}
G(\Psi^+_{jl} + \Psi^+_{lj}) &= \sum_i \sum_k \phi_i \psi_k [D^{(\alpha)}_{ij}(G) D^{(\alpha)}_{kl}(G) + D^{(\alpha)}_{il}(G) D^{(\alpha)}_{kj}(G)] \\
&+ \sum_i \sum_k \phi_k \psi_i [D^{(\alpha)}_{il}(G) D^{(\alpha)}_{kj}(G) + D^{(\alpha)}_{ij}(G) D^{(\alpha)}_{kl}(G)] \\
&= \sum_i \sum_k \Psi^+_{ik} [D^{(\alpha)}_{ij}(G) D^{(\alpha)}_{kl}(G) + D^{(\alpha)}_{il}(G) D^{(\alpha)}_{kj}(G)] \\
&= 2G\Psi^+_{jl}
\end{aligned}$$

da cui otteniamo:

$$G\Psi^+_{jl} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \Psi^+_{ik} [D^{(\alpha)}_{ij}(G) D^{(\alpha)}_{kl}(G) + D^{(\alpha)}_{il}(G) D^{(\alpha)}_{kj}(G)] \tag{72}$$

e i coefficienti della combinazione lineare nell'Eq. (72) formano le matrici della rappresentazione prodotto simmetrica. Per la rappresentazione antisimmetrica, procedendo allo stesso modo, otteniamo:

$$G\Psi^-_{jl} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \Psi^-_{ik} [D^{(\alpha)}_{ij}(G) D^{(\alpha)}_{kl}(G) - D^{(\alpha)}_{il}(G) D^{(\alpha)}_{kj}(G)]. \tag{73}$$

Per quanto riguarda i caratteri delle rappresentazioni prodotto simmetriche e antisimmetriche, poniamo $i = j$ e $k = l$ e sommiamo su i, k:

$$\begin{aligned}
\chi^{[\alpha \times \alpha]} &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_k [D^{(\alpha)}_{ii}(G) D^{(\alpha)}_{kk}(G) + D^{(\alpha)}_{ik}(G) D^{(\alpha)}_{ki}(G)] \\
&= \frac{1}{2} [\chi^{(\alpha)}(G)^2 + \chi^{(\alpha)}(G^2)] \qquad (74)
\end{aligned}$$

per la rappresentazione simmetrica, e

$$\chi^{\{\alpha\times\alpha\}} = \frac{1}{2}[\chi^{(\alpha)}(G)^2 - \chi^{(\alpha)}(G^2)] \tag{75}$$

Come illustrazione dei concetti introdotti fin qui, consideriamo la rappresentazione prodotto $E\times E$ del gruppo C_{3v}. Raggruppando gli elementi del gruppo C_{3v} in classi, con $\mathcal{C}_1 = \{E\}$, $\mathcal{C}_2 = \{C_3, C_3^{-1}\}$, e $\mathcal{C}_3 = \{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\}$, abbiamo le seguenti relazioni:

$$\chi^{[E\times E]}(\mathcal{C}_1) = \tfrac{1}{2}(2^2+2) = 3 \qquad \chi^{\{E\times E\}}(\mathcal{C}_1) = \tfrac{1}{2}(2^2-2) = 1$$

$$\chi^{[E\times E]}(\mathcal{C}_2) = \tfrac{1}{2}((-1)^2+(-1)) = 0 \qquad \chi^{\{E\times E\}}(\mathcal{C}_2) = \tfrac{1}{2}((-1)^2-(-1)) = 1$$

$$\chi^{[E\times E]}(\mathcal{C}_3) = \tfrac{1}{2}((0)^2+(2)) = 1 \qquad \chi^{\{E\times E\}}(\mathcal{C}_3) = \tfrac{1}{2}((0)^2-(2)) = -1$$

e da questi caratteri e usando la relazione

$$q_\beta = \frac{1}{g}\sum_{k=1}^{n_c} h_k\chi^{(\beta)}(\mathcal{C}_k)^*\chi(\mathcal{C}_k)$$

per la rappresentazione $[E\times E]$ otteniamo:

$$\begin{aligned}
q_{A_1} &= \frac{1}{6}(1\times 1\times 3 + 2\times 1\times 0 + 3\times 1\times 1) = 1\\
q_{A_2} &= \frac{1}{6}(1\times 1\times 3 + 2\times 1\times 0 + 3\times(-1)\times 1) = 0\\
q_E &= \frac{1}{6}(1\times 2\times 3 + 2\times(-1)\times 0 + 3\times 0\times 1) = 1
\end{aligned}$$

da cui $[E\times E] = A_1 + E$. Per la rappresentazione $\{E\times E\}$ otteniamo:

$$\begin{aligned}
q_{A_1} &= \frac{1}{6}(1\times 1\times 1 + 2\times 1\times 1 + 3\times 1\times -1) = 0\\
q_{A_2} &= \frac{1}{6}(1\times 1\times 1 + 2\times 1\times 1 + 3\times(-1)\times -1) = 1\\
q_E &= \frac{1}{6}(1\times 2\times 1 + 2\times(-1)\times 1 + 3\times 0\times -1) = 0
\end{aligned}$$

da cui $\{E\times E\} = A_2$.

9 Rappresentazione di un gruppo prodotto diretto

Consideriamo adesso un gruppo $\mathcal{G}$, prodotto diretto di due gruppi $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, $\mathcal{G} = \mathcal{A}\times\mathcal{B}$. Sia poi $D^{(a)}$ una rappresentazione d_a-dimensionale del gruppo $\mathcal{A}$, e

$D^{(b)}$ una rappresentazione d_b-dimensionale del gruppo $\mathcal{B}$. Per elementi arbitrari $A \in \mathcal{A}$ e $B \in \mathcal{B}$ possiamo costruire la matrice rappresentativa per l'elemento $AB \in \mathcal{A} \times \mathcal{B}$:

$$[\hat{D}^{(a\times b)}(AB)]_{ik,jl} = D^{(a)}_{ij}(A) D^{(b)}_{kl}(B) \tag{76}$$

che forma una rappresentazione del gruppo prodotto diretto $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$. Infatti

$$\begin{aligned}
[\hat{D}^{(a\times b)}(A_1B_1)\hat{D}^{(a\times b)}(A_2B_2)]_{ik,jl} &= \sum_{\mu\nu} [\hat{D}^{(a\times b)}(A_1B_1)]_{ik,\mu\nu}[\hat{D}^{(a\times b)}(A_2B_2)]_{\mu\nu,jl} \\
&= \sum_{\mu\nu} \hat{D}^{(a)}_{i\mu}(A_1)\hat{D}^{(b)}_{k\nu}(B_1)\hat{D}^{(a)}_{\mu j}(A_2)\hat{D}^{(b)}_{\nu l}(B_2) \\
&= \sum_{\mu} \hat{D}^{(a)}_{i\mu}(A_1)\hat{D}^{(a)}_{\mu j}(A_2) \sum_{\nu} \hat{D}^{(b)}_{k\nu}(B_1)\hat{D}^{(b)}_{\nu l}(B_2) \\
&= \hat{D}^{(a)}_{ij}(A_1A_2)\hat{D}^{(b)}_{kl}(B_1B_2) \\
&= [\hat{D}^{(a\times b)}(A_1B_1A_2B_2)]_{ik,jl}.
\end{aligned}$$

La dimensione della rappresentazione è data da $d_a d_b$, mentre il carattere è dato da:

$$\chi^{(a\times b)}(AB) = \chi^{(a)}(A)\chi^{(b)}(B). \tag{77}$$

La rappresentazione è detta *rappresentazione del gruppo prodotto diretto* (*outer direct product representation*).
Esercizio: Mostra che:

1. Se $D^{(a)}$ e $D^{(b)}$ sono rappresentazioni irriducibili dei gruppi $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, allora $D^{(a\times b)}$ è una rappresentazione irriducibile del gruppo $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$.

   Come criterio di irriducibilità consideriamo la relazione

   $$\sum_G |\chi(G)|^2 = mg \begin{cases} \texttt{irriducibile se} & m = 1 \\ \texttt{riducibile se} & m \geq 2 \end{cases}$$

   Abbiamo:

   $$\begin{aligned}
   \sum_G |\chi(G)|^2 &= \sum_{A\in\mathcal{A}} \sum_{B\in\mathcal{B}} |\chi(AB)|^2 \\
   &= \sum_{A\in\mathcal{A}} \sum_{B\in\mathcal{B}} |\chi^{(a)}(A)|^2 |\chi^{(b)}(B)|^2 \\
   &= (\sum_{A\in\mathcal{A}} |\chi^{(a)}(A)|^2)(\sum_{B\in\mathcal{B}} |\chi^{(b)}(B)|^2) \\
   &= m_{\mathcal{A}} m_{\mathcal{B}} g_{\mathcal{A}} g_{\mathcal{B}} \\
   &= m_{\mathcal{A}} m_{\mathcal{B}} g_{\mathcal{A}\times\mathcal{B}}.
   \end{aligned}$$

Se $D^{(a)}$ e $D^{(b)}$ sono rappresentazioni irriducibili, $m_{\mathcal{A}} = m_{\mathcal{B}} = 1$ e la rappresentazione prodotto diretto è irriducibile.

2. Queste rappresentazioni esauriscono le rappresentazioni irriducibili del gruppo $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$.

   Il numero di rappresentazioni irriducibili è eguale al numero di classi di elementi coniugati del gruppo. Per una coppia di elementi coniugati, $A_k B_l$ e $A_i B_j$ possiamo scrivere, per un qualche $AB \in \mathcal{A} \times \mathcal{B}$:

$$\begin{aligned} A_k B_l &= (AB)(A_i B_j)(AB)^{-1} \\ &= ABA_i B_j A^{-1} B^{-1} \\ &= (AA_i A^{-1})(BB_j B^{-1}) \end{aligned}$$

   da cui segue che se $n_c(\mathcal{A}) = n_r(\mathcal{A})$ e $n_c(\mathcal{B}) = n_r(\mathcal{B})$ sono il numero di classi di $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ rispettivamente (eguali al numero n_r di rappresentazioni irriducibili) il numero di classi del gruppo $\mathcal{A}\times\mathcal{B}$ è quindi pari a $n_c(\mathcal{A}\times\mathcal{B}) = n_c(\mathcal{A})n_c(\mathcal{B})$ da cui segue che $n_r(\mathcal{A} \times \mathcal{B}) = n_r(\mathcal{A})n_r(\mathcal{B})$.

Esempio: Consideriamo $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$. Date le tabelle dei caratteri di C_{3v} e C_{1h} (o C_s), le rappresentazioni del gruppo prodotto diretto sono 6:

Table 5: Tabella dei caratteri del gruppo $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$.

D_{3h}	E	C_3, C_3^{-1}	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	σ_h	$C_3\sigma_h, C_3^{-1}\sigma_h$	U_1, U_2, U_3
$A_1 \times A' = A_1'$	1	1	1	1	1	1
$A_2 \times A' = A_2'$	1	1	-1	1	1	-1
$E \times A' = E'$	2	-1	0	2	-1	0
$A_1 \times A'' = A_1''$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_2 \times A'' = A_2''$	1	1	-1	-1	-1	1
$E \times A'' = E''$	2	-1	0	-2	1	0

10 La rappresentazione regolare

La rappresentazione regolare è definita dalle matrici:

$$[D^{(\texttt{reg})}(G)]_{ij} = \delta(G_i^{-1} G G_j) \tag{78}$$

dove

$$\delta(G) = \begin{cases} 1 & \texttt{se} G = E \\ 0 & \texttt{altrimenti} \end{cases}$$

Gli indici di riga e colonna sono specificati dai numeri i e j legati agli elementi G_i e G_j del gruppo $\mathcal{G}$. Gli unici elementi diversi da zero della matrice sono tali che $G_i = GG_j$. La dimensione della rappresentazione è eguale all'ordine, g, del gruppo $\mathcal{G}$. La forma esplicita delle matrici si può ottenere dalla tabella di moltiplicazione del gruppo. Data la tabella di moltiplicazione, lasciamo la prima colonna come stà, mentre la prima riga presenta gli elementi inversi. Da questa tabella si ottiene $D^{(\mathtt{reg})}(G)$ sostituendo l'elemento G con 1 e il resto con 0. Consideriamo ancora il gruppo C_{3v}. Dalla tabella di moltiplicazione:

Table 6: Tabella di moltiplicazione del gruppo C_{3v}.

C_{3v}	E	$(C_3)^{-1}$	$(C_3^{-1})^{-1}$	$(\sigma_1)^{-1}$	$(\sigma_2)^{-1}$	$(\sigma_3)^{-1}$
E	E	C_3^{-1}	C_3	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	E	C_3^{-1}	σ_3	σ_1	σ_2
C_3^{-1}	C_3^{-1}	C_3	E	σ_2	σ_3	σ_1
σ_1	σ_1	σ_3	σ_2	E	C_3	C_3^{-1}
σ_2	σ_2	σ_1	σ_3	C_3^{-1}	E	C_3
σ_3	σ_3	σ_2	σ_1	C_3	C_3^{-1}	E

e dalla relazione $G_i^{-1}GG_j = E \Longrightarrow G = G_iG_j^{-1}$ otteniamo per l'elemento C_3 la seguente matrice rappresentativa:

$$\hat{D}^{(\mathtt{reg})}(C_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Il carattere della rappresentazione regolare è dato da:

$$\chi^{(\mathtt{reg})}(G) = \sum_{i=1}^{g} \delta(G_i^{-1}GG_i) = \begin{cases} g & \mathtt{G=E} \\ 0 & \mathtt{altrimenti} \end{cases} \tag{79}$$

dal momento che $G_iGG_i^{-1} = E \Longrightarrow G = G_i^{-1}EG_i = E$. Inoltre la rappresentazione è riducibile (infatti $\sum_G |\chi^{(\mathtt{reg})}(G)|^2 = g^2 = gg)$), e può essere data la seguente decomposizione irriducibile:

$$\begin{aligned} D^{(\mathtt{reg})} &= \sum_\alpha q_\alpha D^{(\alpha)} \\ \chi^{(\mathtt{reg})}(G) &= \sum_\alpha q_\alpha \chi^{(\alpha)}(G) \end{aligned} \tag{80}$$

$$
\begin{aligned}
q_\alpha &= \frac{1}{g}\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)^*\chi^{(\mathtt{reg})}(G) \\
&= \frac{1}{g}\chi^{(\alpha)}(E)\chi^{(\mathtt{reg})}(E) \\
&= \frac{1}{g}d_\alpha g \\
&= d_\alpha
\end{aligned} \tag{81}
$$

da cui si vede che la molteplicità q_α della rappresenzione $D^{(\alpha)}$ è eguale alla dimensione d_α della rappresentazione $D^{(\alpha)}$. Infine:

$$
\chi^{(\mathtt{reg})}(G) = \sum_\alpha d_\alpha \chi^{(\alpha)}(G) = \begin{cases} 0 \texttt{ se} & G \neq E \\ \sum_\alpha d_\alpha^2 = g \texttt{ se} & G = E \end{cases} \tag{82}
$$

da cui otteniamo l'importante relazione:

$$
\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = g. \tag{83}
$$

11 Costruzione della tabella dei caratteri

Per determinare i caratteri delle rappresentazioni irriducibili si usano le seguenti relazioni:

1. Il numero delle rappresentazioni irriducibili non equivalenti, n_r, è uguale al numero di classi di elementi coniugati, n_c, $n_r = n_c$.

2. La somma dei quadrati delle dimensioni delle rappresentazioni irriducibili è eguale all'ordine g del gruppo:

$$
d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_{n_r}^2 = g
$$

3. Prima relazione di ortogonalità dei caratteri:

$$
\sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(\beta)}(\mathcal{C}_k) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{84}
$$

4. Seconda relazione di ortogonalità dei caratteri:

$$
\sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_i)^* \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_j) = \frac{g}{h_i}\delta_{ij} \tag{85}
$$

5. La relazione:

$$
h_i h_j \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_i)\chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_j) = d_\alpha \sum_k c_{ij}^k h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k) \tag{86}
$$

In molti casi, le prime tre relazioni sono sufficienti per determinare la tabella dei caratteri. La quarta condizione può essere usata come complemento. Per alcuni gruppi, le relazioni 1–4 non sono sufficienti per determinare univocamente i caratteri. In questi rari casi, la relazione 5 può essere impiegata.
Esempio: Determinazione della tabella dei caratteri del gruppo C_{3v}.
Il gruppo C_{3v} ha $g = 6$, e possiede tre classi di elementi coniugati, $n_c = 3 = n_r$, da cui deduciamo che ci sono tre rappresentazioni irriducibili indipendenti. Gli unici interi che soddisfano alla relazione $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 6$ sono $d_1 = d_2 = 1$ e $d_3 = 2$. Ci sono 2 rappresentazioni monodimensionali e una rappresentazione bidimensionale. Una rappresentazione monodimensionale è la rappresentazione totalsimmetrica, indicata con A_1. Possiamo quindi parzialmente riempire la tabella dei caratteri:

Table 7: Tabella dei caratteri del gruppo C_{3v}.

$\mathcal{C}_1 = \{E\}$	$\mathcal{C}_2 = \{C_3, C_3^{-1}\}$	$\mathcal{C}_3 = \sigma_1, \sigma_2\sigma_3$
1	1	1
1		
2		

Per derivare i caratteri della seconda rappresentazione monodimensionale, notiamo che $C_3^3 = E$ e per i caratteri scriviamo $\chi(C_3)^3 = 1$. Inoltre, dalla $C_3C_3^{-1} = E$ abbiamo $\chi(C_3)\chi(C_3^{-1}) = 1$, da cui $\chi(C_3) = \frac{1}{\chi(C_3^{-1})}$, da cui necessariamente $\chi(C_3) = +1$. Dalla relazione di ortogonalità abbiamo che $\chi(\sigma_i) = -1$. Il carattere della rappresentazione bidimensionale è determinato dalle relazioni di ortogonalità con le rappresentazioni monodimensionali:

$$\sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathcal{C}_k)^* \chi^{(E)}(\mathcal{C}_k) = 0$$

con $\alpha = A_1$ o A_2. Otteniamo il seguente sistema:

$$\begin{cases} 1 \times 1 \times 2 + 2 \times 1 \times \chi^{(E)}(\mathcal{C}_2) + 3 \times 1 \times \chi^{(E)}(\mathcal{C}_3) = & 0 \\ 1 \times 1 \times 2 + 2 \times 1 \times \chi^{(E)}(\mathcal{C}_2) + 3 \times (-1) \times \chi^{(E)}(\mathcal{C}_3) = & 0 \end{cases} \tag{87}$$

ovvero

$$\begin{cases} 4 + 4\chi^{(E)}(\mathcal{C}_2) = 0 & \longrightarrow \chi^{(E)}(\mathcal{C}_2) = -1 \\ 6\chi^{(E)}(\mathcal{C}_3) = 0 & \longrightarrow \chi^{(E)}(\mathcal{C}_3) = 0 \end{cases} \tag{88}$$

Esercizio: Mostra che rappresentazioni irriducibili di gruppi abeliani sono monodimensionali. Per gruppi abeliani $n_r = n_c = g$ e l'unica soluzione dell'equazione:

$$d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_g^2 = g$$

è $d_1 = d_2 = \ldots d_g = 1$.