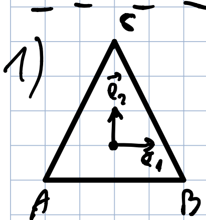
$\Gamma : G \longrightarrow GL_n(\mathbb{R})$ / $GL_n(\mathbb{C})$ rappresentazione di ordine n

---

1)

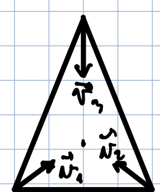


$C_{2v} = \{E, C_2, \sigma_v, \sigma'_v\}$

$\Gamma(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\Gamma(C_2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\Gamma(\sigma_v) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

$\Gamma(\sigma'_v) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

2)

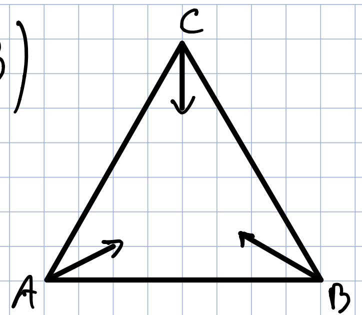


3 versori che puntano verso il baricentro.

$\Gamma(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\Gamma(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

$\Gamma(\sigma_v) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\Gamma(\sigma'_v) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

3)



triangolo equilatero, 3 versori che puntano verso il baricentro.

$$C_{3v} = \{E,\ \underbrace{A,\ B,\ C}_{\text{riflessioni}},\ \underbrace{D,\ F}_{\text{rotazioni}}\}$$

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

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

A quadrata di ordine n, traccia di $A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$

È invariante per similitudine:

$$\mathrm{tr}(P^{-1}AP) = \mathrm{tr}(A)$$

lo deduco da

$$\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$$ infatti:

$A = (a_{ij})_{\substack{i=1,\dots,m \\ j=1,\dots,n}}$ $\qquad$ $B = (b_{rs})_{\substack{r=1,\dots,n \\ s=1,\dots,m}}$

$C = AB \qquad c_{ij} = \sum_{h=1}^{n} a_{ih}\, b_{hj}$

$$tr(C) = \sum_{i=1}^{m} c_{ii} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{h=1}^{n} a_{ih}\, b_{hi} =$$

$$= \sum_{h=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} b_{hi}\, a_{ih}$$

$$= tr\, BA$$

- - - - - - - - - - - -

Allora $tr(P^{-1}AP) = tr((P^{-1}A)P) =$

$= tr(P(P^{-1}A)) = tr((PP^{-1})A) = tr\, A$

$\Gamma : G \to GL_n(\mathbb{R})$ $(\mathbb{C})$ rappresentazione.

Il CARATTERE di Γ : è una funzione da G nel campo

$\chi : G \to \mathbb{R}$ $(\mathbb{C})$: $\chi(g) = tr(\Gamma(g))$

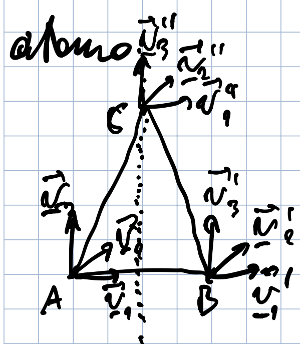
Negli esempi all'inizio:

in 1) $\chi(E)=2,\ \chi(C_2)=0,\ \chi(\sigma_v)=2,\ \chi(\sigma'_v)=0$

2) $\chi(E)=3,\ \chi(C_2)=1,\ \chi(\sigma_v)=3,\ \chi(\sigma'_v)=1$

3) $\chi(E)=3,\ \chi(A)=\chi(B)=\chi(C)=1,\ \chi(D)=\chi(F)=0$

<u>esempio</u>. G gruppo delle simmetrie di una "molecola" con N "atomi" (vertici). Associamo 3 versori ad ogni atomo



. Questo dà una rappresentazione

$$\Gamma : G \to GL_{3N}(\mathbb{R})$$

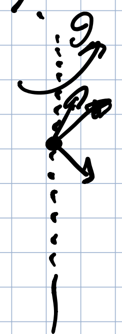
che chiameremo RAPPRESENTAZIONE TOTALE

Le matrici vengono a blocchi 3×3 che corrispondono a come le simmetrie permutano gli atomi

es: $$\Gamma(C_2)=\left[\begin{array}{c|c|c} 0 & \ddots & 0 \\ \hline \begin{smallmatrix}-1 & & \\ 0 & \ddots & \\ 0 & & \end{smallmatrix} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots \end{array}\right]$$

Quindi calcolo la traccia di $\Gamma(C_2)$: il contributo

può essere dato solo dai blocchi diagonali, che corrispondono agli atomi lasciati fissi dalle simmetrie.
Per ogni atomo fissato dalla simmetria ho un blocco 3×3. Devo calcolarne la traccia.



Se la simmetria era una rotazione di angolo θ rispetto a un asse C (che passa per l'atomo) allora il blocco relativo 3×3 è quello di una rotazione nello spazio di angolo θ rispetto a un asse.

Se l'asse è l'asse z:

$$M_\theta = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\operatorname{sen}\theta & 0 \\ \operatorname{sen}\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

la cui traccia $=$

$= 2\cos\theta + 1$

Se non è l'asse z, in ogni caso trovo una matrice simile alla M_θ, e quindi con la stessa traccia.

Nel caso che la simmetria sia impropria allora la simmetria la posso sempre scrivere come una rotazione propria di angolo θ seguita da una riflessione rispetto al piano ortogonale all'asse di rotazione es: S_4 : è una C_4 seguito da riflessione rispetto a un piano ortogonale.

Se la rotazione è fatta rispetto all'asse z, seguita dalla riflessione rispetto al piano $z=0$

$$M'_\theta = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\mathrm{sen}\,\theta & 0 \\ \mathrm{sen}\,\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

la cui traccia è

$$\mathrm{tr}\, M'_\theta = 2\cos\theta - 1$$

Quindi abbiamo trovato una "ricetta" per calcolare il carattere della rappresentazione totale: data la simmetria Φ della molecola, guardo quanti atomi rimangono fissi: u_n

Se Φ è propria, allora è rotazione di angolo θ rispetto a un certo asse, che contiene gli atomi fissati: la traccia di $\Gamma(\Phi)$ è $u_n(2\cos\theta+1)$.

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v
θ	0	π	0	0
$2\cos\theta \pm 1$	3	-1	1	1
u_n	3	1	3	1
$\chi(\Gamma)$	9	-1	3	1

← questa riga nel caso del triangolo isoscele; altrimenti la 3ª riga cambia: bisogna contare

carattere

delle rappresentazioni
totale

quanti atomi rimangono
fissi per le varie simmetrie.

$$G=\{g_1,g_2,\dots,g_h\}$$

Rappresentazioni irriducibili.

Una rappresentazione $\Gamma: G \to GL_n(\underset{\mathbb{C}}{\mathbb{R}})$ si dice

riducibile se posso trovare una $P \in GL_n(\mathbb{R})$ tale che

se $A_1=\Gamma(g_1),\ A_2=\Gamma(g_2),\ \dots,\ A_h=\Gamma(g_h)$

sono le matrici della rappresentazione, allora

$$P^{-1}A_1P=\begin{bmatrix} A_1^{(1)} & & & \\ & A_1^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_1^{(k)} \end{bmatrix} \qquad P^{-1}A_2P=\begin{bmatrix} A_2^{(1)} & & 0 & 0 \\ 0 & A_2^{(2)} & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & & A_2^{(k)} \end{bmatrix}$$

$$\dots \qquad P^{-1}A_hP=\begin{bmatrix} A_h^{(1)} & & & \\ & A_h^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_h^{(k)} \end{bmatrix}$$

con i vari blocchi $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots,$ tutti dello stesso ordine.

Queste sottomatrici $A^{(1)}, A^{(2)},$ danno delle rappresentazioni di ordine più piccolo $\Gamma^{(1)}, \Gamma^{(2)}, \dots$ rispetto all'ordine di Γ.

NOTAZIONE: Posso scrivere $\Gamma = \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \dots + \Gamma^{(r)}$

e dico che Γ si decompone nelle rappresentazioni $\Gamma^{(1)}, \dots, \Gamma^{(r)}$.

es: $G = C_{2v}$, Γ la rappresentazione scritta all'inizio:

$$\Gamma(E) = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \quad \Gamma(C_2) = \left(\begin{array}{c|c} -1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \quad \Gamma(\sigma_v) = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

$$\Gamma(\sigma_v') = \left(\begin{array}{c|c} -1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

$\Gamma = \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)}$ $\qquad$ $\Gamma^{(1)}$ primo blocco

$\Gamma^{(2)}$ secondo blocco

Se Γ non è riducibile, allora la diremo <u>IRRIDUCIBILE</u>.

es: 1) rappresentazione di ordine 1 è irriducibile

2) $G = C_{3v}$

riflessioni $\qquad$ rotazioni

C_{3v}	E	A	B	C	D	F
banale Γ_1	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)
segno Γ_2	(1)	(-1)	(-1)	(-1)	(1)	(1) $\leftarrow \Gamma_2(F)$
Γ_3	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

$\Gamma_3(B)$

esercizio: Γ_3 è irriducibile (suggerimento: non esiste nessun vettore che sia autovettore per tutte e 6 le matrici simultaneamente)

Formule di ortogonalità per le rappresentazioni irriducibili:

Indichiamo con $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$ le varie rappresentazioni irriducibili di un gruppo $G = \{R_1, R_2, \dots, R_h\}$

Quando scrivo $\Gamma_i(R_j)$ intendo la matrice associata alla simmetria R_j dalla rappresentazione Γ_i

1)
$$\sum_{j=1}^{h} \Gamma_i(R_j)_{rs} \; \Gamma_{i'}(R_j)_{r's'} = \frac{h}{l_i} \delta_{ii', rr', ss'}$$

dove:

l_i = ordine di Γ_i

$$\delta_{ii', rr', ss'} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq i' \text{ oppure } r \neq r' \text{ oppure } s \neq s' \\ 1 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

$= (\delta_{ii'} \cdot \delta_{rr'} \cdot \delta_{ss'})$

Nell'esempio segue:

$i=2$, $i'=3$, $r=s=1$, $r'=1$, $s'=2$

$$\Gamma_2(E)_{11}\,\Gamma_3(E)_{12}+\Gamma_2(A)_{11}\,\Gamma_3(A)_{12}+\Gamma_2(B)_{11}\,\Gamma_3(B)_{12}+\Gamma_2(C)_{11}\,\Gamma_3(C)_{12}+\Gamma_2(D)_{11}\,\Gamma_3(D)_{12}+\Gamma_2(F)_{11}\,\Gamma_3(F)_{12}$$

$$=\frac{6}{1}\cdot 0$$

Se $i=i'=3$, $r=1$, $s=2$, $r'=1$, $s'=1$

$$\Gamma_3(E)_{12}\,\Gamma_3(E)_{21}+\Gamma_3(A)_{12}\,\Gamma_3(A)_{21}+\Gamma_3(B)_{12}\,\Gamma_3(B)_{21}+\Gamma_3(C)_{12}\,\Gamma_3(C)_{21}+\Gamma_3(D)_{12}\,\Gamma_3(D)_{21}+\Gamma_3(F)_{12}\,\Gamma_3(F)_{21}$$

$$=0\cdot 0+0\cdot 0+\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\frac{\sqrt{3}}{2}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\frac{\sqrt{3}}{2}=0$$

Se $i=i'=3$, $r=r'=1$, $s=s'=2$

$$\Gamma_3(E)_{12}\,\Gamma_3(E)_{12}+\Gamma_3(A)_{12}\,\Gamma_3(A)_{12}+\Gamma_3(B)_{12}\,\Gamma_3(B)_{12}+\Gamma_3(C)_{12}\,\Gamma_3(C)_{12}+\Gamma_3(D)_{12}\,\Gamma_3(D)_{12}+\Gamma_3(F)_{12}\,\Gamma_3(F)_{12}$$

$$=0\cdot 0+0\cdot 0+\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)=3=\frac{h=6}{l_3=2}$$