

3 群の表現

3.1 ベクトル空間と線形演算子

群は変換の集合として特徴づけることができることがわかった。これらの群の積などのきまりを、統一的にベクトルの変換として表現することを考える。この時、ベクトルの変換は行列で与えられ、群の積は行列の積として扱うことができる。これを群の行列表現または単に群の表現と呼ぶ。ここではまず、群の表現論に入る前に線形演算子に関する基本事項をまとめておく。

3.1.1 複素ベクトル空間

通常の3次元のベクトルの性質を抽象化して、 n 次元のベクトル空間を定義しておく。

ベクトル空間の定義

実または複素ベクトル空間 V とは、それぞれ実数または複素数によるスカラー倍が定義されており元 $\mathbf{a}, \mathbf{b} \cdots \in V$ の間に以下の関係が成り立つものをいう。

1. 積 (和) $\mathbf{a} + \mathbf{b} \in V$ が存在し、 $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}$ (可換)
2. 単位元 : $\forall \mathbf{a} \exists \mathbf{0} : \mathbf{a} + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{a}$
3. 逆元の存在 : $\exists \mathbf{x} \mathbf{a} + \mathbf{x} = \mathbf{0} : \mathbf{x} = -\mathbf{a}$
4. 結合則 : $(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c})$ (ここまで加法群の定義)
5. $\alpha(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \alpha\mathbf{a} + \alpha\mathbf{b}$
6. $\alpha(\beta\mathbf{a}) = (\alpha\beta)\mathbf{a}$
7. $(\alpha + \beta)\mathbf{a} = \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{a}$

ただし、 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ならば、複素ベクトル空間^aであり、 $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ ならば実ベクトル空間である。

^a複素線形空間 *complex linear space*.

3.1.1.1 ベクトル空間に関連した概念 以下では、特に断らない限り複素ベクトル空間を考える。 $\mathbf{a}_i \in V$ に関して、その線形和は V の元であり $\sum_i \alpha_i \mathbf{a}_i \in V, (\alpha_i \in \mathbb{C})$ を1次結合と呼び、 $\sum_i \alpha_i \mathbf{a}_i = \mathbf{0}$ が $\alpha_i = 0$ 以外に解を持たないとき、 \mathbf{a}_i は一次独立であるという。この時、 V の中で1次独立なベクトルの最大数が d 個ならば、 V を d 次元ベクトル空間と呼ぶ。

任意のベクトル \mathbf{x} は、 n 個の一次独立な組 $\{\mathbf{a}_i\}$ を用いて、

$$\mathbf{x} = \sum_i x^i \mathbf{a}_i \quad (|\mathbf{x}\rangle = \sum_i x^i |i\rangle) \quad (3.1)$$

のように一次結合で表すことができる ($d+1$ 個のベクトルは必ず 0 になる非自明な線形結合がある.) . このとき \mathbf{a}_i (または $|i\rangle$) を基底, x^i をその基底に対するベクトルの成分と呼ぶ.

Note : 注ここでは, 基底の直交性は仮定していない. また, 括弧内の記号 $|i\rangle$ はディラックのケットベクトルと呼ばれる表示で, 詳しいことはあとで説明するが, ここでは抽象的なベクトルを表す記号と考える.

3.1.2 双対ベクトル空間

ベクトルが与えられると, それに関してある数を与えるようなベクトルの関数 f を考えることができる.

$$f : |a\rangle \mapsto f(|a\rangle) \in \mathbb{C} \quad (3.2)$$

関数 f が線形であるとは

$$f(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha f(|a\rangle) + \beta f(|b\rangle) \quad (3.3)$$

が成り立つことである. このような線形関数 f は, 基底の値が分かれば

$$f(|x\rangle) = \sum x^i f(|i\rangle) \quad (3.4)$$

のように分解することで計算できる. さらに, 関数の和を自然な形

$$(f + g)(|i\rangle) = f(|i\rangle) + g(|i\rangle) \quad (3.5)$$

で定義することによって, 線形関数 f の空間はベクトル空間になり, これを双対ベクトル空間 V^* と呼ぶ. 双対ベクトル空間の基底 e_i を

$$e_i(|j\rangle) = \delta_{ij} \quad (3.6)$$

によって定義し双対基底と呼ぶ. ディラックの表記では, 双対基底の作用を

$$e_i(\cdot) = \langle i| \quad (3.7)$$

と書く. つまり, 双対基底の作用は $\langle i|$ を使うと

$$e_i(|j\rangle) = \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (3.8)$$

と表記される. 双対基底の線形結合で張られる空間は非自明な線形写像全体であり, もとの線形空間 V と同型である.

3.1.2.1 問題 双対ベクトルの基底は $\langle i|$ は, ベクトル $|x\rangle$ の i 番目の成分 x^i を取り出すことを示せ.

3.1.2.2 解答 任意のベクトル $|x\rangle$ に関して, 基底による写像を計算すると,

$$\langle i|x\rangle = \langle i|\sum_j x^j|j\rangle = \sum_j x^j\langle i|j\rangle = x^i \quad (3.9)$$

のように, $|i\rangle$ 方向の成分を得る.

注意 この議論においては, 基底の直交性を仮定する必要はない. 例えば, 3次元において同一平面にない3個のベクトル \mathbf{a}_i は, 空間ベクトルの基底とすることができる. 通常の内積を使って線形写像を表すならば, 双対空間も同じ3次元ベクトル空間と考えられ,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V} \quad (3.10)$$

がその基底になる. ただし, $V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ はベクトル $\{\mathbf{a}_i\}$ の作る平行6面体の体積, また \times はベクトル積, \cdot は内積を表す. \mathbf{b}_i が

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = \delta_{ij} \quad (3.11)$$

を満たすことは明らか. この時, $|i\rangle = \mathbf{a}_i$, $\langle i| = \mathbf{b}_i$ と考える. これは結晶構造に現れる, 逆格子ベクトル (reciprocal lattice) である.

3.1.3 線形演算子

ベクトルの変換として演算子を導入しておく.

線形演算子の定義

ベクトル $|x\rangle$ に $|x'\rangle$ を対応させる変換または写像 ($\hat{T} \in \text{End}(V)$)

$$\hat{T} : |x\rangle \rightarrow |x'\rangle = \hat{T}|x\rangle \quad (3.12)$$

を演算子または作用素と呼ぶ. さらに

$$\hat{T}(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\hat{T}|a\rangle + \beta\hat{T}|b\rangle \quad (3.13)$$

が成り立つとき, この変換を一次変換または線形変換と呼び, \hat{T} を線形演算子または線形作用素と呼ぶ.

3.1.3.1 線形演算子の性質

1. 無変換の演算子を $\mathbf{1}$ と書き, 恒等変換と呼ぶ.
2. 連続する線形変換はまた線形変換になる. つまり

$$\hat{T}'\hat{T}|x\rangle = \hat{T}'|x'\rangle = \hat{T}''|x\rangle \quad (3.14)$$

これは演算子の積を定義する. $\hat{T}'\hat{T} = \hat{T}''$

3. また, \hat{T} によって定まる写像が全単射のとき, 逆変換 \hat{T}^{-1} が存在し

$$\hat{T}^{-1}\hat{T} = \hat{T}\hat{T}^{-1} = \mathbf{1} \quad (3.15)$$

が成り立つ.

3.1.4 演算子の行列表現

線形作用素は、基底の変換を与えれば一意的に定まる。実際、線形変換の性質から

$$|x'\rangle = \hat{T}|x\rangle = \sum_i (\hat{T}|i\rangle)x^i \quad (3.16)$$

なので $\hat{T}|i\rangle$ を与えることで任意のベクトルの変換が定義される。一方、変換後のベクトルも基底の線形結合でかけるので、

$$\hat{T}|i\rangle = \sum_j |j\rangle T_{ji} \quad (3.17)$$

と展開することができる。

そこで、演算子に対して行列 T_{ji} が一つ決まる。この行列を変換 \hat{T} の表現行列と呼ぶ。以下、一般に変換は $\hat{}$ をつけ、 $\hat{}$ のないものは対応した表現行列とする。

3.1.4.1 変換と行列の関係：

1. 行列要素 T_{ji} は、双対基底を使うともとまる。実際基底の完全性の関係を使うと

$$\hat{T}|i\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|\hat{T}|i\rangle \quad (3.18)$$

となる。両辺を見比べると

$$T_{ji} = \langle j|\hat{T}|i\rangle \quad (3.19)$$

であることが分かる。このように変換を行列で表すことができ、これを行列表現と呼ぶ。

2. 恒等変換の表現行列は単位行列である。
3. 逆変換 \hat{T}^{-1} の表現行列は \hat{T} の表現行列 T の逆行列 T^{-1} である。

3.2 計量ベクトル空間と連続群

3.2.0.1 ベクトル空間の内積 ベクトル空間 V 上の内積 $V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ ：

$$V \ni |a\rangle, |b\rangle \mapsto (|a\rangle, |b\rangle) \in \mathbb{C} \quad (3.20)$$

は、次の性質を満たす。

1. α, β を複素数とすると $(\alpha|u\rangle, \beta|v\rangle) = \alpha^* \beta (|u\rangle, |v\rangle)$
2. 内積の複素共役： $(|u\rangle, |v\rangle)^* = (|v\rangle, |u\rangle)$
3. 分配則： $(|u\rangle + |v\rangle, |w\rangle) = (|u\rangle, |w\rangle) + (|v\rangle, |w\rangle)$

4. 内積の正定値性： $(|v\rangle, |v\rangle) \geq 0$ であり，もし $(|v\rangle, |v\rangle) = 0$ ならば $|v\rangle = 0$ である。

内積が定義されると，そのベクトル空間のノルムが

$$\| |v\rangle \|^2 = (|v\rangle, |v\rangle) \quad (3.21)$$

で定義される。⁸

3.2.1 内積と基底

ベクトル空間の基底が

$$(|i\rangle, |j\rangle) = \delta_{ij} \quad (3.22)$$

を満たすとき，その基底を正規直交基底と呼ぶ。この時 $(|i\rangle, \cdot)$ はベクトル空間から複素数への線形写像の空間，つまり双対空間 V^* の基底と同一視できる。（“ \cdot ”のところにベクトルを入れることによって複素数が決まる。）以下では，特に断らない限り，基底は正規直交基底とし，

$$\langle i| = (|i\rangle, \cdot) = |i\rangle^\dagger \quad (3.23)$$

と書く。

1. 基底の完全性

$$\sum_i |i\rangle(|i\rangle, \cdot) = \sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbf{1} \quad (3.24)$$

の時，その基底は完全である。

2. 内積の定義から，複素ベクトル $|u\rangle, |v\rangle \in V$ ，その成分を

$$|v\rangle = v_i |i\rangle, \quad |u\rangle = u_i |i\rangle \quad (3.25)$$

とすると，その内積は

$$(|u\rangle, |v\rangle) = \langle u|v\rangle = \sum_i u_i^* v_i \quad (3.26)$$

で与えられる。

3. 複素ベクトルの内積を変えない変換をユニタリー変換と呼ぶ。

$$(\hat{U}|v\rangle, \hat{U}|u\rangle) = \langle \hat{U}v | \hat{U}u \rangle = (|v\rangle, |u\rangle) \quad (3.27)$$

4. 正規直交基底を取ると，ユニタリー変換の表現行列はユニタリー行列である。その変換性は

$$U^\dagger \mathbf{1} U = \mathbf{1} \quad (3.28)$$

で特徴づけられる。

⁸この定義は次元が ∞ の時にまで拡張できる。その時ノルムが定義されたベクトル空間を前ヒルベルト空間とよぶ。さらに，このノルムによる距離が完備な時ヒルベルト空間と呼ぶ。

証明

$$|i\rangle' = \hat{U}|i\rangle = |j\rangle U_{ji} \quad (3.29)$$

$$(|i\rangle', |k\rangle') = U_{ji}^* U_{lk} \langle j|l\rangle = U_{ji}^* U_{lk} \delta_{jl} = \delta_{ik} \quad (3.30)$$

よって

$$U^\dagger = U^{-1} \quad (3.31)$$

これは、ユニタリ行列である。

q.e.d.

5. 複素ベクトルの代わりに、 n 次元実ベクトル v_k を考える。このとき

$$\mathbf{v}^t \mathbf{v} = \sum v_k v_k \quad (3.32)$$

を不変にする変換は、 n 次元回転と呼ばれる。このとき表現行列は

$$\sum_j R_{ij} R_{kj} = (R^t R)_{ik} = \delta_{ik} \quad (3.33)$$

を満たす。よってこの行列は $R^t = R^{-1}$ を満たし直交行列であることが分かる。さらに、行列式が1に限るときその行列を特殊直交行列 (special orthogonal group) または回転群 (rotational group) と呼ぶ。それぞれ、 $O(n), SO(n)$ と書く。

6. 実直交群のときのパラメータの数はともに $\frac{1}{2}n(n-1)$ である。行列式の条件で落ちるのは、反転を含む変換である。

このように、内積を決めることでそれを不変にする変換を考えることができ、それぞれ群になることが分かる。この時内積を一定にするという特徴は、成分で書いた時に内積を定める計量テンソルを不変にするという形で、成分を変換する行列の特徴付けと見ることができる。

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = u_i^* \delta_{ij} v^j \rightarrow U^\dagger \mathbf{1} U = \mathbf{1} \quad (3.34)$$

ここで、 δ_{ij} は計量テンソルと呼ばれる。他にシンプレクティック群やローレンツ群が知られている。それぞれ不変にする内積と変換行列は

$$\mathbf{v}^\dagger \eta \mathbf{v} \Rightarrow A^\dagger \eta A = \eta \quad (3.35)$$

で特徴付けられる。

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots \\ -1 & 0 & 0 \cdots \\ 0 & 0 & 0 \ 1 \cdots \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

のときシンプレクティック群 (Symplectic group), また計量が

$$\eta = \text{diag}(-1, 1, 1, 1) \quad (3.37)$$

のときローレンツ群を得る。⁹

⁹ この他に行列群には、 $GL(n, \mathbb{C}/\mathbb{R}), SL(n, \mathbb{C}/\mathbb{R}), SU(n), SO(n), Sp(2n)$ などがある。

ディラック表記

ディラック表記について少しここでまとめておく。あるベクトル空間のベクトルは適当な基底で展開することができる。これを、

$$|x\rangle = \sum x^i |a_i\rangle \quad (3.38)$$

と書きケットベクトルと呼ぶ。通常正規直交基底を取り、単に $|a_i\rangle = |i\rangle$ と書く：

$$|x\rangle = \sum x^i |i\rangle \quad (3.39)$$

次にブラベクトルを、双対空間 V^* の基底として次のように導入する：

$$V^* \ni \langle i| : V \ni |i\rangle \rightarrow \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \in \mathbb{C} \quad (3.40)$$

で定義する。よって

$$x^i = \langle i|x\rangle \quad (3.41)$$

である。基底の完全性は

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbf{1} \quad (3.42)$$

と書ける。

3.3 群の表現

群の表現とは一般に群 G から V 上の線形演算子への準同型写像のことである。特にここで扱う行列表現とは、群 G の各元 g_i に対して $d \times d$ の行列 $D(g_i)$ を対応させ、群の積に対し

$$D(g_i g_j) = D(g_i) D(g_j), \quad D(g^{-1}) = D^{-1}(g), \quad D(e) = \mathbf{1} \quad (3.43)$$

(準同型) となるようにすることである。つまり、

d 次元ベクトル空間 V 上の線形変換を与える行列の空間を $M(\mathbb{C}, d)$ とする。群 G からの準同型写像 (つまり1対1とは限らない)

$$D : G \rightarrow M(\mathbb{C}, d) : g_i \mapsto D(g) \quad (3.44)$$

を群 G の行列表現または単に表現と呼び、 $D(g)$ を表現行列、 V を表現空間と呼ぶ。また d を表現の次元と呼ぶ。特に、行列がユニタリ行列の時にはそれをユニタリ表現と呼ぶ。

全ての元に対して単位行列を対応させても表現である。これを恒等表現または自明な表現 (trivial representation) と呼ぶ。一方、全ての表現行列が異なるときこれを忠実な表現 (faithful representation) と呼ぶ。

3.3.1 表現の例：共役表現

有限群の表現の例として共役表現を見てみよう．共役変換は，群準同型写像であることを説明した．そこで，ある元 $a \in G$ の $g_i \in G$ への作用を

$$Ad_a g_i = a g_i a^{-1} = g_j D_{ji}^{Ad}(a) \quad (3.45)$$

とすると，これは表現になる．これを共役表現 (Adjoint representation) と呼ぶ．

3.3.1.1 問題 群から行列への写像 D^{Ad} が表現になっていることを証明せよ．(準同型写像であることを示せばよい.)

3.4 可約表現と既約表現

有限群，特に C_{3v} の表現を具体的に構成しその性質を見ることで，群の表現の基本的な概念である可約表現と既約表現，また表現の既約分解を導入する．

3.4.1 有限群 C_{3v} の行列表現

まず， C_{3v} の 3次元空間における変換と考え，そこから行列表現を構成する．この表現は可約表現であり，その表現の既約分解を具体的にを行う．この例を通じて，表現の基本的な事項を説明する．

3.4.1.1 3次元における C_{3v} 3次元空間にある正三角形の合同変換群 C_{3v} を頂点の位置を (1, 2, 3) と呼んで，それぞれの変換に対応した置換として書くと

$$\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & c_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} & c_3^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \\ \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} & \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} & \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.46)$$

と表すことができる．これは， C_{3v} と S_3 は同型であることを意味する．

このように見た時の C_{3v} の自然な表現は 3次元空間の 3個の単位ベクトル $|i\rangle$ を取り替える変換として考えると得られる．表現行列はその基底の変換を次のような行列で表したものになっている：

$$\hat{g}|i\rangle = |g(i)\rangle = \sum |j\rangle D(g)_{ji} \quad (3.47)$$

3.4.1.2 C_{3v} の表現行列 それぞれの行列は

$$\begin{aligned} D(e) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & D(c_3) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & D(c_3^{-1}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ D(\sigma_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & D(\sigma_2) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & D(\sigma_3) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.48)$$

で与えられる.

実際, 例えばそれぞれの基底の c_3 による変換

$$(\hat{c}_3|1\rangle, \hat{c}_3|2\rangle, \hat{c}_3|3\rangle) = (|c_3(1)\rangle, |c_3(2)\rangle, |c_3(3)\rangle) = (|2\rangle, |3\rangle, |1\rangle) \quad (3.49)$$

が, 行列による変換

$$(|i\rangle D_{i1}(c_3), |i\rangle D_{i2}(c_3), |i\rangle D_{i3}(c_3)) = (|2\rangle, |3\rangle, |1\rangle). \quad (3.50)$$

で再現される. つまり,

$$|c_3(i)\rangle = \sum_j |j\rangle D_{ji}(c_3) \quad (3.51)$$

3.4.1.3 問題

1. C_{3v} の全ての元に 1 を対応させる写像が表現 (自明な表現) を与えることを示せ.
2. c_3 以外の変換に関しても, ここで導いた表現行列を使って計算すると, (3.51) と同様の関係が成立することを確認せよ.
3. 上記の行列を使って, C_{3v} の積の表と, 行列の積が等しいことを示せ. つまり

$$D(g_1)D(g_2) = D(g_1g_2) \quad (3.52)$$

が成り立ち, 表現になっていることを示せ.

4. C_{3v} の共役の表を用いて, 共役表現を構成せよ.

3.4.1.4 略解

1. 準同型写像であることを示せばよい.
2. 具体的に行列を書けば一致することが分かる.
3. 行列を掛けてみよ.
4. 共役表現行列は群の元を

$$\{g_i\} = (e, c_3, c_3^{-1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad (3.53)$$

とすると

$$Ad_a g_i = g_j D_{ji}(a) \quad (3.54)$$

なので, 表から読み取ることができ

$$D(e) = \mathbf{1}_6, \quad D(c_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(c_3^{-1}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

$$D(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

3.4.2 既約表現と既約分解

これで、 C_{3v} の行列表現が構成できたことになる。この例は、さらに表現の性質を教えてくださいるので、もう少し詳しく見てみよう。

1. 表現の定義より、 C_{3v} の全ての変換で

$$|v_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \quad (3.57)$$

が不変であることがわかる。これは、 $|v\rangle$ が回転軸であることから明らか。図：

2. そこで、この $|v_0\rangle$ に直交するベクトルを次のように作ることができる。

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle - |2\rangle) \quad (3.58)$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|1\rangle - |2\rangle - |3\rangle) \quad (3.59)$$

図：

3. $|v_0\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle$ は正規直交基底になっているので、元の基底から適当な回転で得ることができる。つまり、ある直交行列 T によって

$$|v_i\rangle = |j\rangle T_{ji} \quad (3.60)$$

と書ける。¹⁰ さらに、

$$\hat{g}|v_i\rangle = \hat{g}|j\rangle T_{ji} = |k\rangle D_{kj}(g) T_{ji} = |v_j\rangle (T^{-1}D(g)T)_{ji} \quad (3.62)$$

である。ところが、 $|v_0\rangle$ は不変なので

$$T^{-1}D(g)T = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{array} \right) \quad (3.63)$$

のようにブロック状になっているはずである。それぞれのブロックはやはり表現になっているので

$$T^{-1}D(g)T = \left(\begin{array}{cc} D^{(A_1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(E)}(g) \end{array} \right) \quad (3.64)$$

のように2個の表現行列 $D^{(r)}(g)$ を与えている。

¹⁰具体的には

$$T = \left(\begin{array}{ccc} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{array} \right) \quad (3.61)$$

4. それぞれは 1×1 (2×2) の行列になっており, 単に 1 次元表現とも呼ばれる. 1 次元表現 A_1 はすべての元に 1 を対応させる自明な表現になっている.
5. E は 2 次元表現で, 新しい軸では $|v_1\rangle$ と $|v_2\rangle$ で定まる平面の回転と反転である. それぞれの表現は

$$\begin{aligned} D(e) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D(c_3) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad D(c_3^{-1}) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \\ D(\sigma_1) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_2) = \begin{pmatrix} -\cos \alpha & \sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_3) = \begin{pmatrix} -\cos \alpha & -\sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.65)$$

ただし, $\alpha = \frac{2\pi}{3}$.

6. このように, 表現がいくつかの小さな表現に分解されるとき可約表現 (reducible) とよび, もはや分解できないときは既約表現 (irreducible) と呼ぶ. 可約な表現を例のように分解することを既約分解と呼ぶ.
7. C_{3v} の例は, 3 次元直交座標を使って定義した 3 次元表現が A_1 と E と 2 つの表現に既約分解されることを示している. C_{3v} には, もう一つの 1 次元表現 A_2 が存在する. A_2 は C_{3v} を対称群 S_3 として見たとき, 奇置換が -1 , 偶置換が 1 とする表現である.
8. 3 次元表現空間 $V = \{|i\rangle\}$ は, $V_1 = \{|v_0\rangle\}$ と $V_E = \{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ の直和に分解され, それぞれ群の作用によって混ざることはない. それぞれの基底で張られる空間を不変部分空間と呼ぶ.

既約表現

既約表現の表現空間 V の不変部分空間は自分自身か自明なものしかない.

3.5 シュールの補題

1. シュールの補題 1: 2 つの既約表現 $D^{(i)}(g)$ が, ある行列 M で

$$\forall g \in G : MD^{(1)}(g) = D^{(2)}(g)M \quad (3.66)$$

を満たすとき, 2 個の表現は同値 (M が同形写像を与える) であるかまたは $M = 0$ である.

いま, それぞれの表現空間を $V^{(i)}$ とする. すると, $M : V^{(1)} \rightarrow V^{(2)}$ である.

$d_1 > d_2$ のとき $\exists \mathbf{v} \in V^{(1)}, M\mathbf{v} = 0$ つまり $\mathbf{v} \in \text{Ker}M$ が存在する.

$$MD^{(1)}\mathbf{v} = D^{(2)}M\mathbf{v} = 0 \quad (3.67)$$

ところが, $V^{(1)}$ は表現空間なので $D^{(1)}\mathbf{v}$ も $\text{Ker}M$. g を変えてもこのことは変わらないので $\text{Ker}M$ は不変部分空間である. 既約表現が不変部分空間を持つことになり矛盾.

$d_2 > d_1$ とすると,

$$MD^{(1)}(g)\mathbf{v} \subset V^{(2)} \quad (3.68)$$

つまり $MV^{(1)} \subset V^{(2)}$ であり, 表現 $V^{(2)}$ が不変部分空間をもつので既約であることに矛盾する.

$d_1 = d_2$ の時, $M\mathbf{v} \neq 0$ ならば, $MD^{(1)}\mathbf{v} = MV^1 \neq 0$. よって M は正則なので, $D^{(1)} = M^{-1}D^{(2)}M$ が成り立つ. このような2つの表現は, 同値である.

2. シュールの補題2:

$$\forall g \in G \quad D(g)M = MD(g) \quad (3.69)$$

ならば, $M = c\mathbf{1}$

証明 c を M の固有値の一つとし, $A = M - cE$ とする. 一方, シュールの補題1より $AD(g) = D(g)A$ が成り立つので A は正則か 0 . $\det A = 0$ より $A = 0$ つまり $M = cE$.

まとめ: 表現の既約分解

1. 群からの $D \in \text{Aut}(V)$ への準同型写像があるとき, D とその作用する空間のペアを表現と呼ぶ (D, V). 行列表現では D を表現行列, V を表現空間と呼ぶ.
2. ある表現があった時, 一般に行列 T による共役変換で得られる表現は表現として等価である.

$$D' = TDT^{-1} \Rightarrow D' \sim D \quad (3.70)$$

3. 可約表現とは, 適当な行列 T によって, D がブロック対角になる場合 (完全可約^a).
4. ある可約表現がブロック対角になった時, それぞれのブロックは, 積で閉じている. つまり, そのブロックだけ取り出しても表現になっている. 既約表現とは, このように, 小さな行列に分解されない表現である.
5. 全ての群の元に関して, ブロックに分かれているということは, 表現空間は, 群の作用によってそのブロックに対応した部分空間から出ることはない. これを不変部分空間とよぶ.
6. 既約表現の表現空間には, 不変部分空間は自明なものを除いて存在しない.
7. 表現行列がユニタリ行列の時, ユニタリ表現とよぶ.
8. 群の既約表現を α, β の添え字で区別する. 既約分解は

$$D = \oplus_{\alpha} D^{\alpha}, \quad V = \oplus V^{\alpha} \quad (3.71)$$

^a三角行列になる場合と区別するときには完全可約と呼ぶ.

3.6 指標

3.6.1 表現の直交性定理

位数 r の群 G の, 既約なユニタリー表現は次の直交関係を満たす

$$\sum_g \overline{D_{ij}^{(\alpha)}(g)} D_{kl}^{(\beta)}(g) = \frac{r}{d_\alpha} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.72)$$

ただし, d_α は表現 α の次元.

3.6.1.1 証明の概要

$$M = \sum_g D^\alpha(g^{-1}) B D^\beta(g) \quad (3.73)$$

という行列を考える. ここに, $D^\alpha(g')$ をかけると

$$\begin{aligned} D^\alpha(g') M &= \sum_g D^\alpha(g'g^{-1}) B D^\beta(g) = \sum_g D^\alpha(g'g^{-1}) B D^\beta(gg'^{-1}) D^\beta(g') \\ &= \sum_{g''} D^\alpha(g''^{-1}) B D^\beta(g'') D^\beta(g') = M D^\beta(g') \end{aligned} \quad (3.74)$$

よって, シューアの補題より $\alpha \neq \beta$ ならば, M はゼロ. B は行列の 1 つの要素だけ $B_{ik} = 1$ で他はゼロとする. すると

$$M_{jl} = \sum_g D_{ji}^\alpha(g^{-1}) D_{kl}^\beta(g) = 0 \quad (3.75)$$

一方, $\alpha = \beta$ ならばシューアの補題より M は B に依らずに単位行列に比例するはずなので

$$M_{jl} = \sum_g D_{ji}^\alpha(g^{-1}) D_{kl}^\alpha(g) = c \delta_{jl} \quad (3.76)$$

ここで, トレースを取る. つまり $l = j$ として

$$\text{左辺} = \sum_j M_{jj} = \sum_{g,j} D_{kj}^\alpha(g) D_{ji}^\alpha(g^{-1}) = \sum_g D^\alpha(e)_{ki} = r \delta_{ki} \quad (3.77)$$

一方

$$\text{右辺} = c \sum_j \delta_{jj} = c d_\alpha \quad (3.78)$$

よって $c = \frac{r}{d_\alpha} \delta_{ki}$ である. これらの結果と D がユニタリー表現であることから問題の関係式が得られる.

3.6.2 指標

指標

$\chi^\alpha(g) = \text{Tr}\{D^\alpha(g)\}$ を表現 D^α の指標と呼ぶ.

1. 指標は同じ類の元では同じ値をとる. trace の性質より

$$\mathrm{Tr}\{D^\alpha(aga^{-1})\} = \mathrm{Tr}\{D^\alpha(a)D^\alpha(g)D^\alpha(a)^{-1}\} = \mathrm{Tr}\{D^\alpha(g)\}. \quad (3.79)$$

このような関数を類関数と呼ぶ.

2. 既約表現の指標は直交する. 位数 r の群 G の指標は

$$\sum_g \chi^{\alpha*}(g)\chi^\beta(g) = r\delta_{\alpha\beta} \quad (3.80)$$

(3.114) より明らか. また指標が class function なので, 類 (class) $[c_i]$ の代表元を c_i とすると次のようにも書くことができる.

$$\sum_{i=1}^{n_c} r_i \chi^{\alpha*}(c_i)\chi^\beta(c_i) = r\delta_{\alpha\beta} \quad (3.81)$$

3. 表現の指標を知っていれば, 可約表現にどのような既約表現が含まれているかがわかる. ある可約表現があつて, それについて指標の直交性をつかうと

$$\sum_g \chi^{\alpha*}(g)\chi(g) = \sum_{i=1}^{n_c} r_i \chi^{\alpha*}(c_i) \left(\sum_{\beta \in R} \chi^\beta(c_i) \right) = r n_\alpha \quad (3.82)$$

r_i は類の元の数, n_α は可約表現の中に現れる既約表現 $D^{(\alpha)}$ の回数.

3.6.3 C_{3v} の指標

前節で構成した C_{3v} の表現を使って C_{3v} の既約表現の指標を計算することができる.

1. 1次元表現 A_1 (自明な1次元表現) の指標は, 全ての元 $g \in C_{3v}$ に関して¹¹これを $\chi^{A_1}(g)$ と書く:

$$\chi^{A_1}(g) = \mathrm{Tr}\{D^{A_1}(g)\} = 1 \quad (3.83)$$

である.

2. もうひとつの1次元表現は, 対称群として見た時に偶変換に1奇変換に-1を与える1次元表現でその指標を χ^{A_2} と書くと, その値は類の代表元に対して

$$\chi^{A_2}(e) = 1, \chi^{A_2}(c_3) = 1, \chi^{A_2}(\sigma_i) = -1 \quad (3.84)$$

である.

¹¹ 1次元の指標では, 1×1 行列のトレースを取ることになるが, 結局表現そのものである.

3. 前節で得られた2次元表現 D^E の指標 χ^E は

$$\chi^E(e) = 2, \chi^E(c_3) = -1, \chi^E(\sigma_i) = 0 \quad (3.85)$$

である.

これらの指標は表に与えてある. 表から, それぞれの指標は直交していることが簡単に読み取れるだろう. たとえば, χ^E と χ^{A_2} は

$$\sum n(c_i) \chi^E(c_i) \chi^{A_2}(c_i) = 1 \cdot (2 \cdot 1) + 2(-1 \cdot 1) + 3(0 \cdot -1) = 0 \quad (3.86)$$

さらに, 自然な3次元の可約表現の指標を求めると, 表現行列より

$$\chi^{(3)}(e) = 3, \chi^{(3)}(c_3) = 0, \chi^{(3)}(\sigma_i) = 1 \quad (3.87)$$

これも表に与えてある.

C_{3v} の指標の表

C_{3v} の既約表現, 自明な表現 A_1 , 偶奇性による表現 A_2 , 2次元表現 E の指標の表, および例で挙げた3次元可約表現の指標:

$g \setminus$ 指標	$\chi^{A_1}(g)$	$\chi^{A_2}(g)$	$\chi^E(g)$	$\chi^{(3)}(g)$
e	1	1	2	3
c_3	1	1	-1	0
c_3^{-1}	1	1	-1	0
σ_1	1	-1	0	1
σ_2	1	-1	0	1
σ_3	1	-1	0	1

(3.88)

3.6.3.1 問題 共役表現の既約分解を指標を次の手順で求めよ.

1. 共役表現の指標を求めよ.
2. 指標の直交性から, 共役表現を既約分解したときにでる表現とその重複数を求めよ.

3.6.3.2 略解

1. 共役表現の指標は表現行列のトレースより

$$\chi^{Ad}(e) = 6, \chi^{Ad}(c_3) = \chi^{Ad}(c_3) = 3, \chi^{Ad}(\sigma_i) = 2 \quad (3.89)$$

2. C_{3v} の指標の表と, 指標の直交性を使って既約分解すると

$$\chi^{Ad} = 3 \cdot \chi^{A_1} + 1 \cdot \chi^{A_2} + 1 \cdot \chi^E \quad (3.90)$$

よって

$$Adjoint \text{ rep.} = (3 \times A_1) \oplus A_2 \oplus E \quad (3.91)$$

3.6.4 指標の2乗和と既約分解

既約表現の指標の2乗の和 $\sum_g \chi^\alpha(g) = 6$ になっている。また $\chi^{(3)}$ の2乗の和をとると $3^2 + 2 \cdot 0 + 3 \cdot 1^2 = 12 = 2 \cdot r$ と位数 r の2倍になっている。これは、 $\chi^{(3)}$ は可約表現で、既約分解すると2個の既約表現に分解できることを意味している。

一般にある表現 $D(g) = \bigoplus_\alpha q^\alpha D^\alpha(g)$ のように分解しているとするとその指標は $\chi(g) = \sum q^\alpha \chi^\alpha(g)$ で与えられる。ここで、 q^α は表現 D に現れる既約表現 α の縮退度である。すると、指標の2乗の和に関して次のことが成り立つ：

指標の2乗和に関する定理

ある表現 D の指標 $\chi(g)$ の2乗和は群の位数 r に比例し、既約分解に現れる α の多重度を q^α とすると

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = r \sum_\alpha (q^\alpha)^2 \quad (3.92)$$

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = \sum_g \left| \sum_\alpha q^\alpha \chi^\alpha(g) \right|^2 = \sum_g \sum_{\alpha, \beta} q^\alpha q^\beta \chi^{\alpha * \alpha}(g) \chi^\beta(g) = r \sum_{\alpha, \beta} q^\alpha q^\beta \delta_{\alpha\beta} \quad (3.93)$$

よって、関係式を得ることができた¹²。

3.7 正則表現

すべての既約表現を作りだす方法。

1. 正則表現を

$$D_{ij}^{(R)}(g) \equiv \delta(g_i g g_j^{-1}) \quad (3.94)$$

で定義する。ただし、 $\delta(e) = 1$ のデルタ関数。

2. 表現であること

$$[D^{(R)}(g)D^{(R)}(g')]_{ij} = \sum_k \delta(g_i g g_k^{-1}) \delta(g_k g' g_j^{-1}) \quad (3.95)$$

このとき、右辺がゼロにならない g_k は

$$g_k = g_i g \quad , \quad g_k^{-1} = g' g_j^{-1} \quad (3.96)$$

が同時に成り立つとき。つまり、

$$g_i g g' g_j^{-1} = e \quad (3.97)$$

の時 $g g' = g_i^{-1} g_j$ 。これが唯一であることは、積の一意性から明らか。よって

$$[D(g)D(g')]_{ij} = D(g g')_{ij} \quad (3.98)$$

が成り立つ。

¹²注意：つまり、 C_{3v} に関して言えば $\sum_\alpha (q^\alpha)^2 = 2$ なので、縮退数 q^α が1で、2個の異なる既約表現がある。縮退数が大きな時は必ずしも一通りに決まらない場合がある。例えば $2^2 = 1^2 \times 4$

3. 正則表現の既約分解 :

正則表現の指標は,

$$\chi^{(R)}(g) = \sum_i \delta(g_i g g_i^{-1}) = r \delta(g) \quad (3.99)$$

よって

$$\chi^{(R)}(e) = r, \quad \chi^{(R)}(\text{else}) = 0 \quad (3.100)$$

一方, 正則表現を既約表現に分解したとき, q^α を既約表現 D^α の縮退数として,

$$D^{(R)} = \sum q^\alpha D^{(\alpha)} \quad (3.101)$$

とすると, 指標の直交性を使って

$$q^\alpha = \frac{1}{r} \sum_g \chi^{(R)}(g) \chi^\alpha(g) = \chi^\alpha(e) = d_\alpha \quad (3.102)$$

と書ける. つまり, 正則表現は既約表現をその次数と同じ回数だけ含んでいる.

4. 既約分解のトレースをとることで,

$$\text{Tr}\{D^{(R)}\} = \sum d^\alpha \text{Tr}\{D^{(\alpha)}\} \Rightarrow \chi^{(R)}(g) = \sum d^\alpha \chi^\alpha(g) \quad (3.103)$$

よって, $g = e$ とすると次の関係が成り立つ :

群の位数と既約表現

既約表現の次数の 2 乗和が群の位数 r に等しい. つまり

$$r = \sum d_\alpha^2 \quad (3.104)$$

例えば C_{3v} , $d_\alpha = 2, 1, 1$ よって $r = 4 + 1 + 1 = 6$ である.

3.8 指標の第 2 種直交性

1. **Theorem** 指標の第 2 種直交性 : 群 G の指標 χ^α , 類を C_i その代表元を c_i とすると

$$\sum_\alpha \chi^\alpha(c_i) \chi^\alpha(c_j) = \delta_{ij} \frac{r}{r_i} \quad (3.105)$$

ただし, r_i は類の元の数で和はすべての既約表現についてとる.

2. 証明 $\mathbf{C}_i = \sum c_k$, $c_k \in [c_i]$ c_i は \mathbf{C}_i の代表元.

$$g\mathbf{C}_i = \mathbf{C}_i g \quad (3.106)$$

なので, ある表現をとると

$$D^{(\alpha)}(g)D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i)D^{(\alpha)}(g) \quad (3.107)$$

よって,

$$D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = \lambda \mathbf{1}_{d_\alpha} \quad (3.108)$$

代表元を $c_i \in \mathbf{C}_i$ として両辺のトレースをとると

$$\chi^\alpha(\mathbf{C}_i) = r_i \chi^\alpha(c_i) = \lambda d_\alpha \quad \text{where } c_i \in \mathbf{C}_i, d_\alpha = \text{Tr}\{\mathbf{1}_{d_\alpha}\} \quad (3.109)$$

よって λ について解いて (3.108) に代入すると

$$D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = \frac{r_i}{d_\alpha} \chi^\alpha(c_i) \mathbf{1}_{d_\alpha} \quad (3.110)$$

類演算子の積の関係から

$$D^\alpha(\mathbf{C}_i)D^\alpha(\mathbf{C}_j) = \sum c_{ij}^k D^\alpha(\mathbf{C}_k) \quad (3.111)$$

よって

$$\frac{r_i r_j}{d_\alpha^2} \chi^\alpha(c_i) \chi^\alpha(c_j) = \sum_k c_{ij}^k \frac{r_k}{d_\alpha} \chi^\alpha(c_k) \quad (3.112)$$

既約表現について和をとると

$$r_i r_j \sum_\alpha \chi^\alpha(c_i) \chi^\alpha(c_j) = \sum_\alpha \sum_k c_{ij}^k r_k (d_\alpha \chi^\alpha(c_k)) = \sum_k c_{ij}^k r_k \chi^R(c_k) = c_{ij}^1 r_k \chi^R(e) = r r_k \delta_{ij} \quad (3.113)$$

ここで, カッコ内の和 $\sum_\alpha d_\alpha \chi^\alpha = \chi^{(R)}$ を使った. また最後の変形は, 正則表現は $\chi^{(R)}(e) = 1$ のみが値を持つことを使った. よって, 定理が成り立つ.

有限群の表現と指標のまとめ

既約表現の直交性：位数 r の群 G の，既約なユニタリー表現 $D^{(\alpha)}$ の次元を d_α とする．既約表現 $D^{(\alpha)}$ は次の直交関係を満たす

$$\sum_g \overline{D_{ij}^{(\alpha)}(g)} D_{kl}^{(\beta)}(g) = \frac{r}{d_\alpha} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.114)$$

ただし， \sum_g は全ての G の元 g についての和を意味する．

$\chi^\alpha(g) = \text{Tr}\{D^\alpha(g)\}$ を指標， r_i を類 c_i の元の数， n_c を類の数， n_r を既約表現の数とすると．

(a) 指標の第1種直交性： $\chi^\alpha(c_i)$ は n_r 個の互いに直交する n_c 次元ベクトル．

$$\sum_g \overline{\chi^\alpha(g)} \chi^\beta(g) = \sum_i^{n_c} r_i \overline{\chi^\alpha(c_i)} \chi^\beta(c_i) = r \delta_{\alpha\beta} \quad (3.115)$$

(b) 指標の第2種直交性： $\chi^\alpha(c_i)$ は n_c 個の互いに直交する n_r 次元ベクトル．

$$\sum_\alpha^{n_r} \overline{\chi^\alpha(c_i)} \chi^\alpha(c_j) = \frac{r}{r_i} \delta_{ij} \quad (3.116)$$

(c) $n_c = n_r$ ：既約表現の数は類の数に等しい．

(d) 指標による既約分解：ある可約表現 D の指標 $\chi(g)$ は，その既約分解に現れる表現 α の多重度を q^α とすると

$$\chi(g) = \sum_\alpha q^\alpha \chi^\alpha(g) \quad (3.117)$$

と書ける．指標の直交性から，既約表現の多重度 q^α は

$$q^\alpha = \frac{1}{r} \sum_g \overline{\chi^\alpha(g)} \chi(g) \quad (3.118)$$

で求めることができる．

(e) すべての既約表現について，その表現の次数の2乗の和は位数に等しい

$$\sum_\alpha^{n_r} d_\alpha^2 = r \quad (3.119)$$

(f) 対称群 S_n の類の数は， n の分割数に等しいことから，対称群の既約表現の数も n の分割数に等しい．

3.9 積表現と規約分解

量子力学などにおける応用では、波動関数がある表現空間のベクトルになる。その時、2つの状態にある粒子の衝突などを考えると、表現ベクトルの積をとる必要が出てくる。ここでは、そのような場合に必要な群論的手法を紹介する。

1. 積表現

二つの表現が α, β が \mathbf{a}_i と \mathbf{b}_j というそれぞれ d_α と d_β 次元の基底ベクトルの変換として

$$\hat{g}\mathbf{a}_i = \sum_j \mathbf{a}_j D^\alpha(g)_{ji}, \quad \hat{g}\mathbf{b}_k = \sum_l \mathbf{b}_l D^\beta(g)_{lk} \quad (3.120)$$

と定義されているとする。このとき、2つのベクトルの積（テンソル積という）は $d = d_\alpha d_\beta$ 次元の表現になっている。

$$\hat{g}(\mathbf{a}_i \mathbf{b}_k) = (\hat{g}\mathbf{a}_i \hat{g}\mathbf{b}_k) = (\mathbf{a}_j \mathbf{b}_l) D^\alpha(g)_{ji} D^\beta(g)_{lk} \quad (3.121)$$

2. この積表現も、規約表現で分解できるはずである。規約表現の基底ベクトルを \mathbf{e}_k^α と呼ぶと

$$\mathbf{e}_k^\alpha = \sum_{ij} \mathbf{a}_i \mathbf{b}_j \langle \alpha, i; \beta, j | \alpha, k \rangle \quad (3.122)$$

この係数は角運動量の場合に出現するクレプシュ・ゴルダン係数と同種の役割を果たす。

3. 逆に、ある規約表現を2つの表現の積に分解することも可能である。

$$\sum_{\tilde{\gamma}k} \mathbf{e}_k^{\tilde{\gamma}} \langle \tilde{\gamma}, k | \alpha, i; \beta, j \rangle = \mathbf{a}_i \mathbf{b}_j \quad (3.123)$$

ただし、 $\tilde{\gamma}$ は同一の表現が複数回出てくることもあることをしめす。

3.10 例 1 : アンモニア (ただしフリップを考えない)

対称性は C_{3v} である. それぞれの指標は,

窒素と水素原子の座標を $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_4$ とすると, ラグランジアンは,

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{x}_4^2) \quad (3.124)$$

4 個の座標があるので自由度は 12. さらに全体の回転と並進の自由度 6 を取り除くと, 振動の自由度は 6 ある. (6 個のモードがある) それぞれの, 指標を求めると.

$$\chi([e]) = 6, \chi([c_3]) = 0, \chi([\sigma]) = 2 \quad (3.125)$$

以下では, これを省略して $(6, 0, 2)$ というベクトルで書く.

この振動モードの指標は以下のように, 変換によって動かない粒子の座標変換を順を追って計算することで求めることができる.

1. 並進は重心座標と同じなので, $E + A_1 = (3, 0, 1)$ (Parity に対して 2 座標は 1, 鏡に直行する座標のみ -1)
2. 回転は軸ベクトルなので, $E + A_2 = (3, 0, -1)$ (Parity に関してベクトルに -1 がかかる.)
3. NH_3 の場合次元は 12, 回転の場合動かない原子は 1 個でそのベクトルの寄与が $1 + 2 \cos(2\pi/3) = 0$. 反転で動かない原子は 2 個でさらにそれぞれの原子上の座標が 1 の寄与をするので全体で 2. よって $NH_3 = (12, 0, 2)$
4. 振動は $(6, 0, 2) = 2E + 2A_1$

よって, 振動は $2E + 2A_1$ に分解される.

3.10.1 三角形に繋がった 2 次元の粒子

対称性の群はやはり C_{3v}

$$g \triangleright x_i^k |x_i(k)\rangle = D(g)_{ij} x_j^k |x_i(k)\rangle \quad (3.126)$$

1. 全体の指標は, $([e], [c_3], [\sigma]) = (6, 0, 0)$
 - (a) 全ての座標の数は 6 個なので $\chi([e])$ は 6
 - (b) 回転で全ての粒子が移動するので $\chi([c_3]) = 0$.
 - (c) 反転に関しては, 動かない粒子が 1 個, その座標には反転に関して動かない軸と方向が変わる軸があるので変換行列は $diag(1, -1)$. よって $\chi([\sigma]) = 0$.
2. 平行移動に相当する変位は 2 次元なので E 表現. $([e], [c_3], [\sigma]) = (2, -1, 0)$
基底ベクトルは $|X\rangle = |x_1\rangle + |x_2\rangle + |x_3\rangle$, $|Y\rangle = |y_1\rangle + |y_2\rangle + |y_3\rangle$
3. 回転 1 次元表現で鏡像変換で向きが変わるので A_2 表現. $([e], [c_3], [\sigma]) = (1, 1, -1)$

4. よって, 並進と回転の両方で, $([e], [c_3], [\sigma]) = (3, 0, -1)$
5. 振動の指標は $([e], [c_3], [\sigma]) = (6, 0, 0) - (3, 0, -1) = (3, 0, 1)$
6. この振動の既約分解は $(3, 0, 1) = E + A_1$. その内訳は
 - (a) 膨張 1 次元なので $A_1 = (1, 1, 1)$
 - (b) 振動 2 次元 $E = (2, -1, 0)$