II. 有限群表示的基本定理

定义： 若一个群G的表示矩阵都是幺正矩阵，则这个表示称为G的幺正表示。

定理： **有限**群的任何非奇异的矩阵表示，都可以通过相似变换变成幺正的矩阵表示。

证：对于给定的表示$D(G)$，要找出相似变换x，使得：

$$\bar{D}(R) = x^{-1}D(R)x \quad \text{——①} \quad （假定D非幺正）$$

和

$$\bar{D}(R)\bar{D}(R)^{\dagger} = 1 \quad \text{——②}$$

经过相似变换后，$\bar{D}(G)$ 仍为G的表示称等价表示。

Forming the matrix sum: $H = \sum_{S \in G} D(S)\, D(S)^\dagger$

Here, $\left(D(S)^\dagger\right)_{ij} = (D(S)^*)_{ji}$: transposed complex conjugate

$$H^\dagger = \left(\sum_{S \in G} D(S)\, D(S)^\dagger\right)^\dagger = \sum_{S \in G} D(S)\, D(S)^\dagger$$

Any Hermitian matrix can be diagonalized by a suitable unitary transformation. Let U be a unitary matrix made up of the orthonormal eigenvectors which diagonalize H to give the diagonal matrix d

$$\begin{aligned} d &= U^{-1} H U \\ &= U^{-1} \sum_{S \in G} D(S)\, D(S)^\dagger U \\ &= U^{-1} \sum_{S \in G} D(S) U\, U^{-1} D(S)^\dagger U = \sum_{S \in G} \widetilde{D}(S)\, \widetilde{D}(S)^\dagger \end{aligned}$$

Here, $\widetilde{D}(S) = U^{-1} D(S) U$

d: contains only real, positive diagonal elements

$$d_{kk} = \sum_{S \in G} \sum_j \left(\widetilde{D}(S)\right)_{kj} \left(\widetilde{D}(S)^\dagger\right)_{jk}$$

$$= \sum_{S \in G} \sum_j \left(\widetilde{D}(S)\right)_{kj} \left(\widetilde{D}(S)^*\right)_{kj}$$

$$= \sum_{S \in G} \sum_j \left|\left(\widetilde{D}(S)\right)_{kj}\right|^2 > 0$$

So one can form two matrices: $d^{1/2}, d^{-1/2}$

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{d_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{d_{22}} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}, d^{-1/2} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{d_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{d_{22}} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

$$d = d^{1/2} d^{1/2} = \sum_{S \in G} \widetilde{D}(S)\, \widetilde{D}(S)^\dagger$$

$\rightarrow d(diagonal\ matrix) \rightarrow I(unit\ matrix)$

define a new set of matrices:

$$\bar{D}(S) \equiv d^{-1/2}\widetilde{D}(S)d^{1/2}$$

We now show that $\bar{D}(S)$ are unitary

$$\bar{D}(S)\bar{D}(S)^{\dagger} = d^{-1/2}\widetilde{D}(S)\boxed{d^{1/2}\ d^{1/2}}\widetilde{D}(S)^{\dagger}d^{-1/2}$$

$$= d^{-1/2}\widetilde{D}(S)\boxed{\sum_{R\in G}\widetilde{D}(R)\,\widetilde{D}(R)^{\dagger}}\widetilde{D}(S)^{\dagger}d^{-1/2}$$

$$= d^{-1/2}\sum_{R\in G}\widetilde{D}(S)\widetilde{D}(R)\left(\widetilde{D}(S)\widetilde{D}(R)\right)^{\dagger}d^{-1/2}$$

$$= d^{-1/2}\sum_{R\in G}\widetilde{D}(SR)\left(\widetilde{D}(SR)\right)^{\dagger}d^{-1/2}$$

Rearrangement theorem

$$= d^{-1/2}\boxed{\sum_{R\in G}\widetilde{D}(R)\,\widetilde{D}(R)^{\dagger}}d^{-1/2} = 1$$

$$\bar{D}(R) = x^{-1}D(R)x \rightarrow x = Ud^{1/2}$$

Issai Schur

(10 Jan 1875 - 10 Jan 1941)

Schur引理1: 与群的某一不可约表示的所有矩阵可对易的矩阵（ M ）必为常数矩阵(常数乘以单位阵)。因此，如果存在一个非常数对易矩阵，那么这个表示是可约的，不存在这样的常数对易矩阵，则表示不可约。

设群G，表示$D(G)\{D(R)\forall R\in G\}$

参考幺正化定理，可将表示矩阵$D(G)$取作幺正矩阵。

若$D(R)M = MD(R)$，对此式两边取转置共轭：

$$M^{\dagger}D(R)^{\dagger} = D(R)^{\dagger}M^{\dagger}$$ ，两边乘$D(R)(\quad)D(R)$

$\because D(R)$幺正，故上式即为：

$$D(R)M^{\dagger}\boxed{D(R)^{\dagger}D(R)} = \boxed{D(R)D(R)^{\dagger}}M^{\dagger}D(R)$$

$$D(R)M^{\dagger} = M^{\dagger}D(R)$$

即：只要M和$D(R)$对易，就有$M^{\dagger}$和$D(R)$对易，

则$D(R)$与$H_1 \equiv M + M^{\dagger}$和$H_2 \equiv i\left(M - M^{\dagger}\right)$都可对易。

$$H_1{}^{\dagger} = (M + M^{\dagger})^{\dagger} = M^{\dagger} + M = H_1;$$

$$H_2{}^{\dagger} = -i\left(M - M^{\dagger}\right)^{\dagger} = -iM^{\dagger} + iM = H_2$$

$H_j(j = 1,2)$是厄米算符，可用幺正矩阵将其对角化。

对厄米矩阵 H_j，总有幺正矩阵U，使

$U^{-1}H_jU = d$ 为对角矩阵

$$\therefore \boxed{U^{-1}H_jU}\boxed{U^{-1}D(R)U} = U^{-1}D(R)UU^{-1}H_jU$$

$d\widetilde{D}(R) = \widetilde{D}(R)d$, 取等式两边的$ij$ 元，可得

$$d_{ii}\widetilde{D}(R)_{ij} = \widetilde{D}(R)_{ij}d_{jj}$$

$\widetilde{D}(R)_{ij}\left(d_{ii} - d_{jj}\right) = 0, \forall R \in G$

讨论：如果$d_{ii} \neq d_{jj}$，非常数矩阵，对于所有R，$\widetilde{D}(R)_{ij} = 0$，这意味着$\widetilde{D}(R)$具有相同的块对角结构，按照定义$\widetilde{D}(R)$就是可约化的，作为相似矩阵的$D(R)$ 也就可约化。

如果$D(R)$不可约化，必然有$d_{ii} = d_{jj}$，对应常数阵，这样 H_j 为常数矩阵， $M = 1/2(H_1 - i H_2)$ 也是常数矩阵。

Schur引理1：

a. 直接应用：

Abel群的不可约表示矩阵一定是一维的（即常数矩阵），因为它的任何一个元素的表示矩阵必与其它所有元素的表示矩阵对易。

b. 物理阐释：

跟G所有群元表示矩阵对易的非常数矩阵$\hat{O}$（可观测量：可以是能量，对应$\hat{H}$），$\hat{O}$存在不同的观测值，每一个观测值对应G的一个不可约表示。在每一个观测值对应的Hilbert空间里，用群G作用，得到的态是 **d**（该观测值简并度）个态的线性叠加。

具体来说，对于本征值方程，如果$[H, G] = 0$, 那么在能量为E_i的简并子空间，对称群G构成一个$d(\neq g)$维不可约表示$\left\{\varphi_j^{(i)}\right\}$,

$$H\varphi_j^{(i)} = E_i \varphi_j^{(i)}, \qquad j = 1,2,\cdots,d$$

$$H = E_i \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, d\text{维常数阵。}$$

The degree of degeneracy =
the dimension of irreducible representation
$G\varphi_j^{(i)}$ $\forall j$ span a d-dim space

Schur引理2： 设$D^{(1)}(G)$和$D^{(2)}(G)$是群G的两个不等价不可约表示，维数分别为m_1和m_2，x是一个$m_1\times m_2$矩阵，如果对所有元素$R\in G$有：$D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R)$，则必有$x=0$。

$m_1\times m_1$ $m_1\times m_2$ $m_2\times m_2$

证明： $D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R)$

设$D^{(1)}$和$D^{(2)}$均为幺正矩阵，它们不可再约化

对等式两边取厄米共轭： $x^\dagger\left(D^{(1)}(R)\right)^\dagger = \left(D^{(2)}(R)\right)^\dagger x^\dagger$

$\because$ $D^{(1)}$和$D^{(2)}$**幺正**，故有$x^\dagger\left(D^{(1)}(R)\right)^{-1} = \left(D^{(2)}(R)\right)^{-1} x^\dagger$

即 $x^\dagger D^{(1)}\left(R^{-1}\right) = D^2\left(R^{-1}\right)x^\dagger$

$\because R$是取遍整个群G，故上式可写成： $x^\dagger D^{(1)}(R) = D^{(2)}(R)x^\dagger$

$$x^{\dagger}D^{(1)}(R)=D^{(2)}(R)x^{\dagger}$$

左乘x得：

$$xx^{\dagger}D^{(1)}(R)=\boxed{xD^{(2)}(R)}x^{\dagger}$$

$\because\ D^{(1)}(R)x\ =xD^{(2)}(R)$，上式为：$xx^{\dagger}D^{(1)}(R)=D^{(1)}(R)xx^{\dagger}(\forall R\in G)$

据Schur引理1，$xx^{\dagger}$必为常数矩阵：

$$xx^{\dagger}=cI_{m_1}\quad（*）$$

（i）当$m_1=m_2$时，此时x为方阵，且奇异的，即$\det x=0$，否则据

$D^{(1)}(R)x\ =xD^{(2)}(R)\rightarrow D^{(1)}(R)=xD^{2}(R)x^{-1}$，

即$D^{(1)}(R)$和$D^{(2)}(R)$等价，

与假设矛盾，故x是奇异的。

$\therefore$对（*）两端求行列式：$\det\left(xx^{\dagger}\right)=\det(x)\det\left(x^{\dagger}\right)=c^{m_1}=0$

$\therefore\quad c=\ 0$　又 $c=\sum_j x_{ij}x_{ji}^{\dagger}=\sum_j\left|x_{ij}\right|^2=0$

$\therefore\quad x$的所有矩阵元均为零，是个零矩阵（null matrix） （ii）当$m_1 \neq m_2$时, 设$m_1 > m_2$

可对矩阵x添上$m_1 - m_2$列零元使得x变为y

$$y = \left.\begin{pmatrix} \underbrace{x}_{m_2} & \underbrace{0}_{m_1-m_2} \end{pmatrix}\right\} m_1 \text{ rows} \qquad y^\dagger = \underbrace{\begin{pmatrix} x^\dagger \\ 0 \end{pmatrix}}_{m_1}$$

$$y^\dagger y = \begin{pmatrix} x^\dagger x & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ 和} yy^\dagger = xx^\dagger = cI_{m_1\times m_1}$$

显然： $\det y = \det y^\dagger = 0 \quad \therefore c = 0$

$\mathrm{Tr}\left(yy^\dagger\right) = \sum_{ik} y_{ik}{y^\dagger}_{ki} = \sum_{ik}|y_{ik}|^2 = 0$, 对于任意$i, k$,

有 $y_{ik} = 0$, y是null matrix，x也是。

定义：群G的m维线性表示可以看成G的一个矩阵函数，它的每一个矩阵元都是G的一个函数，称为群函数，共有m^2个群函数。

Van Vleck

正交定理：（**the Wonderful orthogonality theorem**）

有限群G的不等价不可约幺正表示的矩阵元素，作为群函数，满足正交关系：

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda} \qquad \text{——}（\Delta）$$

其中g是群G的阶，m_j是表示$D^{(j)}(G)$的维数。

证明：设有一$m_i \times m_j$矩阵Y，它只有第$\boldsymbol{\mu}$行第$\boldsymbol{\nu}$列元素不为零

即：$(Y)_{\rho\lambda} = \delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\lambda}$ (projection : refer to Howard Georgi)

定义$m_i \times m_j$矩阵X：$X = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}\left(R^{-1}\right) Y D^{(j)}(R)$

则：
$$\boxed{X_{\rho\lambda}} = \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\rho'\lambda'} D^{(i)}_{\rho\rho'}\left(R^{-1}\right) Y_{\rho'\lambda'} D^{(j)}_{\lambda'\lambda}(R)$$
$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\rho'\lambda'} D^{(i)}_{\rho\rho'}\left(R^{-1}\right) \delta_{\mu\rho'}\delta_{\nu\lambda'} D^{(j)}_{\lambda'\lambda}(R)$$
$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}_{\rho\mu}\left(R^{-1}\right) D^{(j)}_{\nu\lambda}(R)$$
$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}_{\rho\mu}(R)^{-1} D^{(j)}_{\nu\lambda}(R)$$

幺正

$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}_{\rho\mu}(R)^{\dagger} D^{(j)}_{\nu\lambda}(R)$$

这就是Δ式（正交定理）左边

$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}_{\mu\rho}(R)^{*} D^{(j)}_{\nu\lambda}(R)$$

—— （ΔΔ）

另一方面 $D^{(i)}(S)X=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}D^{(i)}(S)D^{(i)}\left(R^{-1}\right)YD^{(j)}(R)$

$$=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}D^{(i)}\left(SR^{-1}\right)YD^{(j)}(R)\boxed{D^{(j)}\left(S^{-1}\right)D^{(j)}(S)}$$

单位元

$$=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}D^{(i)}\left(SR^{-1}\right)YD^{(j)}\left(RS^{-1}\right)D^{(j)}(S)$$

$$=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}D^{(i)}\left(\left(RS^{-1}\right)^{-1}\right)YD^{(j)}\left(RS^{-1}\right)D^{(j)}(S)$$

重排定理

$$=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}D^{(i)}(R^{-1})YD^{(j)}(R)D^{(j)}(S)$$

$$\equiv XD^{(j)}(S)$$

$$\boxed{D^{(i)}(S)X=XD^{(j)}(S)}$$

$$D^{(i)}(S)X = XD^{(j)}(S)$$

当$i \neq j$时，据schur引理2，$X \equiv 0$（∵S是任取的）

当$i = j$时，据schur引理1，$X = C_{\mu\nu}I = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(j)}\left(R^{-1}\right)YD^{(j)}(R)$

（∵C常数同Y有关，故同$\mu\nu$有关）

对（ΔΔ）两边取$i = j$，$\rho = \lambda$并对λ求和：

$E = I$ (单位矩阵)

$$\sum_{\lambda} X_{\lambda\lambda} = \sum_{\lambda=1}^{m_j} C_{\mu\nu} = m_j C_{\mu\nu} = \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\lambda} D_{\mu\lambda}^{(j)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R)$$

$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R)^{\dagger} D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R)^{-1} D_{\nu\lambda}^{(j)}(R)$$

$$= \frac{1}{g}\sum_{R\in G}\sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R^{-1}) D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D_{\nu\mu}^{(j)}\left(RR^{-1}\right) = \delta_{\mu\nu}$$

$$\therefore\ C_{\mu\nu} = \frac{1}{m_j}\delta_{\mu\nu}, \qquad \frac{1}{g}\sum_{R\in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{p\lambda}$$

表示矩阵元的正交性定理

有限群G的不等价不可约幺正表示的矩阵元素，作为群函数，满足正交关系：

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} D^{(i)}_{\mu\rho}(R)^* D^{(j)}_{\nu\lambda}(R) = \frac{1}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda} \qquad \text{——（}\Delta\text{）}$$

其中g是群G的阶，m_j是表示$D^{(j)}(G)$的维数。

正交定理指出：作为群函数，群G的不等价不可约表示的矩阵元互相正交，同一不可约幺正表示的m_j^2个矩阵元也互相正交，这些群函数模的平方等于g/m_j。

表示和矢量空间:

正交性定理意味着维度为g的矢量空间的正交归一性关系。

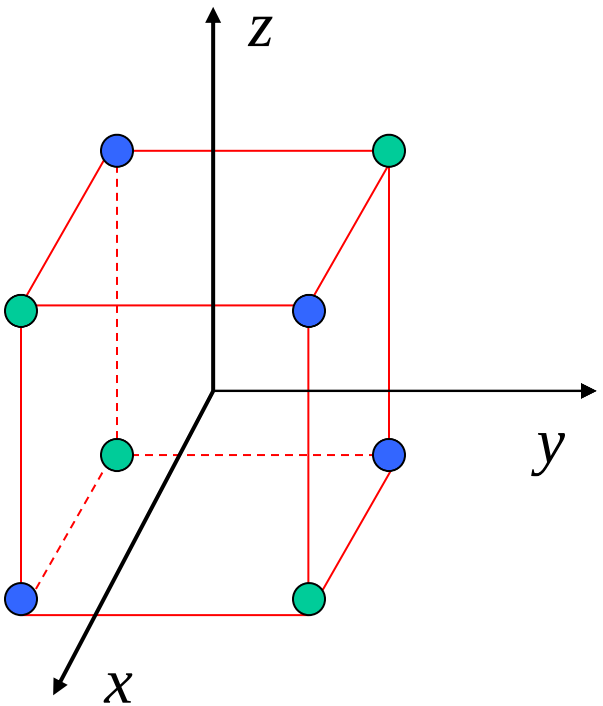
$D_{\mu\nu}^{(i)}(R)$可以视为这个g维空间中的元：

$$V_{\mu\nu}^{(i)} = \left[D_{\mu\nu}^{(i)}(A_1), D_{\mu\nu}^{(i)}(A_2), \cdots, D_{\mu\nu}^{(i)}\left(A_g\right)\right]$$
$$G = \left\{A_1, A_2, \cdots, A_g\right\}$$

这三个指标标示了一个特殊的矢量，所有的矢量在这个空间里正交，只要这三个指标中任意一个不一样。

例：两种原子组成的四方晶体的对称操作所组成的群的表示

$a = b \neq c$



共有八个对称操作使晶格保持不变：

E：不动，

$C_2(z)$：绕z轴的2-度转动，

$C_2(x)$和$C_2(y)$：绕x轴和y轴的2-度转动，

$\sigma_1(y=x,z)$ 和$\sigma_2((y=x,z))$关于对角平面反射

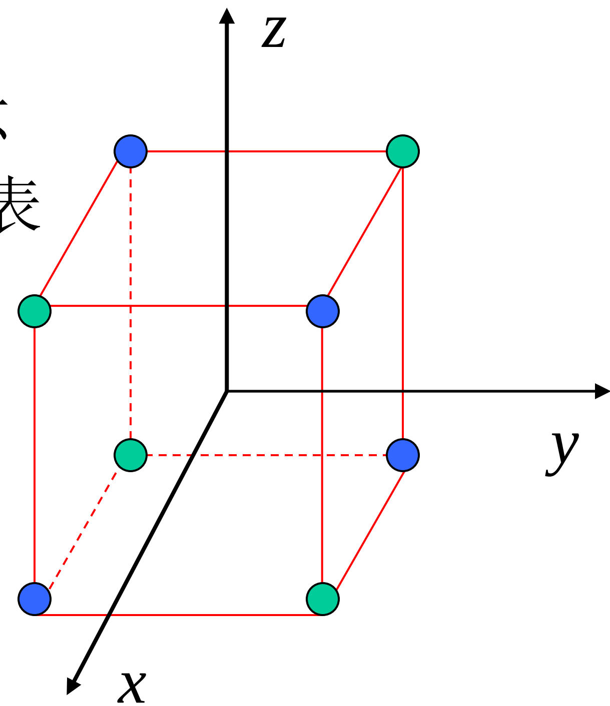
iC_4和iC_4^{-1}：关于z轴4-度转动接着中心反演

八个对称操作所对应的变换矩阵

$$D(E)=\left(\begin{array}{cc|c}1&0&0\\0&1&0\\\hline 0&0&1\end{array}\right);D(C_2(z))=\left(\begin{array}{cc|c}-1&0&0\\0&-1&0\\\hline 0&0&1\end{array}\right);D(C_2(x))=\left(\begin{array}{cc|c}1&0&0\\0&-1&0\\\hline 0&0&-1\end{array}\right);D(C_2(y))=\left(\begin{array}{cc|c}-1&0&0\\0&1&0\\\hline 0&0&-1\end{array}\right);$$

$$D(\sigma_1)=\left(\begin{array}{cc|c}0&1&0\\1&0&0\\\hline 0&0&1\end{array}\right);D(\sigma_2)=\left(\begin{array}{cc|c}0&-1&0\\-1&0&0\\\hline 0&0&1\end{array}\right);D(iC_4)=\left(\begin{array}{cc|c}0&1&0\\-1&0&0\\\hline 0&0&-1\end{array}\right);D(iC_4{}^{-1})=\left(\begin{array}{cc|c}0&-1&0\\1&0&0\\\hline 0&0&-1\end{array}\right)$$

蓝色 对角线 （下底面）绿色 对角线 绕z轴逆时针



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

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

所以用(x, y, z)为基矢求得的表示是可约化的。

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

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

一维显然表示

	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	σ_1	σ_2	iC_4	iC_4^{-1}
$D^{(1)}$	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1
$D^{(2)}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$
$\bar{D}$	1	1	1	1	1	1	1	1

	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	σ_1	σ_2	iC_4	iC_4^{-1}
$D^{(1)}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
$D^{(2)}$	$\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0 & 1\\-1 & 0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{pmatrix}$
$\bar{D}$	1	1	1	1	1	1	1	1

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda}$$

$$\sum_{R\in G} D^{(1)}(R)^* \overline{D}(R) = 1\times1+1\times1+(-1)\times1+(-1)\times1+1\times1+1\times1+(-1)\times1+(-1)\times1 = 0$$

$$\sum_{R\in G} D_{11}^{(2)}(R)^* D_{11}^{(2)}(R) = 1\times1+(-1)\times(-1)+1\times1+(-1)\times(-1)+0+0+0+0 = 4 = 8/2$$

$$\sum_{R\in G} D_{11}^{(2)}(R)^* D_{22}^{(2)}(R) = 1\times1+(-1)\times(-1)+1\times(-1)+(-1)\times1+0+0+0+0 = 0$$