VIII. Groepen en representaties.

§8.1. Algemene begrippen en voorbeelden.

Het begrip *groep* speelt een centrale rol in de wiskunde. In de natuurkunde komt het begrip met name voor bij de beschrijving van symmetrieën. Zo heeft de verzameling transformaties die een bepaalde (meetkundige) eigenschap invariant laten dikwijls de structuur van een groep. Een voorbeeld is de verzameling symmetrieën van een kristal, bestaande uit de rotaties en spiegelingen die een kristal in zichzelf overvoeren.

Definitie: Een *groep* is een niet-lege verzameling G met een bewerking (hier aangegeven met $\circ$), d.w.z. voor elk tweetal $g, h \in G$ is het "product" $g \circ h$ een element van G, zodanig dat de volgende eigenschappen gelden:

a. Voor $g, h, k \in G$ is $g \circ (h \circ k) = (g \circ h) \circ k$ (de associatieve eigenschap).
b. Er is een *eenheidselement* $e \in G$ met de eigenschap dat $g \circ e = e \circ g = g$ voor alle $g \in G$.
c. Ieder element $g \in G$ heeft een inverse (aangegeven met g^{-1}) met de eigenschap dat $g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$.

In het algemeen geldt niet de commutatieve eigenschap; een groep waarvoor $g \circ h = h \circ g$ voor alle $g, h \in G$, heet een *abelse* of *commutatieve* groep.

Voorbeelden:

1. $G = \mathbf{R}$ met als bewerking de optelling is een abelse groep. Hetzelfde geldt voor $G = \mathbf{C}$ (en ook voor $G = \mathbf{Z}$).
2. $G = \mathbf{R}^*$ ($=\mathbf{R}\backslash\{0\}$) met de vermenigvuldiging is een abelse groep. Hetzelfde geldt voor $\mathbf{C}^*$.
3. Beschouw een regelmatige n-hoek. De groep van directe symmetrieën van de regelmatige n-hoek bestaat uit de rotaties om het middelpunt over een hoek van $2\pi k/n$ voor $k = 0, 1, \ldots, n-1$. De groep wordt *voortgebracht* door een rotatie R over $2\pi/n$, d.w.z. de groepselementen zijn $I, R, R^2, \ldots, R^{n-1}$ (met I de identiteit). Deze (abelse) groep heet de *cyclische* groep C_n (of $\mathbf{Z}_n$) en R noemen we een voortbrenger. De groepsbewerking is het samenstellen van afbeeldingen.
4. De *diëdergroep* D_n. Dit is de groep van alle symmetrieën van de regelmatige n-hoek, bestaande uit alle rotaties om het middelpunt over hoeken die een veelvoud zijn van $2\pi/n$ en verder de spiegelingen in de n symmetrie-assen. De groep D_n wordt voortgebracht door de rotatie R over $2\pi/n$ en een spiegeling S; de andere spiegelingen zijn van de vorm $RS, R^2S, \ldots, R^{n-1}S$ en verder bestaat de relatie $SR = R^{n-1}S$. D_n is niet abels.
5. De groep S_n van permutaties op n elementen. Een permutatie is een bijectieve afbeelding van de verzameling $\{1, 2, \ldots, n\}$ (of elke andere verzameling met n elementen) naar zichzelf. Er zijn precies $n!$ permutaties op n elementen. De groepsbewerking is compositie van permutaties. S_n is niet abels voor $n > 2$. S_n noemen we de *symmetrische groep* (op n elementen). We gaan iets uitvoeriger in op de notatie. Een permutatie in S_4 (zeg) die $1, 2, 3, 4$ op resp. $3, 2, 4, 1$ afbeeldt, noteren we als $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \end{pmatrix}$. Een andere manier is de cykelnotatie: een *cykel* is een permutatie van de vorm $i_1 \to i_2, i_2 \to i_3, \ldots, i_{k-1} \to i_k, i_k \to i_1$ waarbij $i_1, \ldots, i_k$ verschillend zijn. Zo'n cykel noteren we als $(i_1 i_2 \ldots i_k)$. Nu is elke permutatie het product van cykels. Zo is

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \end{pmatrix} = (134)(2) \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (124)(35).$$

De 1-cykels (i) die corresponderen met elementen die op zichzelf worden afgebeeld worden in de notatie vaak weggelaten. Dus in het eerste voorbeeld schrijven we ook (134).

6. $G = GL(n, \mathbf{R})$ resp. $GL(n, \mathbf{C})$ zijn de groepen van inverteerbare reële resp. complexe $n \times n$ matrices met als bewerking matrixvermenigvuldiging. Voor $n > 1$ zijn deze groepen niet-abels.

   Definitie. Zij G een groep met groepsbewerking $\circ$. Een niet-lege deelverzameling $H \subset G$ heet een *ondergroep* als H een groep is t.a.v. de groepsbewerking $\circ$.

   Het is niet moeilijk om na te gaan dat $H \subset G$ een ondergroep is van een groep G als H niet-leeg is en indien zowel $g \circ h \in H$ voor $g, h \in H$ als $g^{-1} \in H$ voor $g \in H$. Een aantal voorbeelden van ondergroepen is:

1. Als G een groep is met eenheidselement e dan zijn zowel G zelf als $\{e\}$ ondergroepen.
2. C_n is een ondergroep van D_n.
3. De verzameling gehele getallen $\mathbf{Z}$ met de optelling is een groep. Een ondergroep wordt gevormd door de n-vouden $\ldots, -2n, -n, 0, n, 2n, \ldots$. We noteren deze als $n\mathbf{Z}$.
4. Laat $K = \mathbf{R}$ of $\mathbf{C}$ en $G = GL(n, K)$. De matrices met determinant 1 vormen een ondergroep van $GL(n, K)$ die we noteren als $SL(n, K)$.
5. Een matrix A in $GL(n, \mathbf{R})$ heet orthogonaal als $A^T A = I$. De orthogonale matrices vormen een ondergroep $O(n)$ van $GL(n, \mathbf{R})$. De orthogonale matrices met determinant 1 vormen eveneens een ondergroep $SO(n)$. Er geldt dat $SO(n) = O(n) \cap SL(n, \mathbf{R})$.
6. Een matrix U in $G = GL(n, \mathbf{C})$ heet unitair als $U^* U = I$ (de hermites geadjungeerde U^* is de complex geconjugeerde van U^T). De unitaire matrices vormen een ondergroep $U(n)$ van $GL(n, \mathbf{C})$ en de unitaire matrices met determinant 1 vormen een ondergroep die we noteren als $SU(n)$.
7. Zij $G = S_n$. De even permutaties vormen een ondergroep A_n. We noemen deze groep de *alternerende groep* (op n elementen).

Definitie: Een ondergroep N van een groep G heet een *normaaldeler* als voor elke $h \in N$ en $g \in G$ geldt dat $ghg^{-1} \in N$.

Homomorfismen en isomorfismen. We beschouwen nu structuurbehoudende afbeeldingen tussen groepen, vergelijkbaar met de lineaire afbeeldingen in de lineaire algebra. Deze afbeeldingen heten *homomorfismen*:

Definitie: Laat G en G' groepen zijn met bewerkingen $\circ$ resp. $\circ'$. Een afbeelding $f : G \to G'$ heet een *homomorfisme* als voor $g, h \in G$ geldt dat $f(g \circ h) = f(g) \circ' f(h)$. Als f tevens een bijectie is (d.w.z. een inverteerbare afbeelding), dan heet f een *isomorfisme*. De groepen G en G' zijn dan *isomorf*. We noteren dit als $G \cong G'$.

Voorbeelden:

1. Laat G, G' groepen zijn en laat e' het eenheidselement van G' zijn. De afbeelding $f : G \to G'$ gegeven door $f(g) = e'$ voor alle $g \in G$ is een homomorfisme.
2. Laat $G = S_n$ en $G' = GL(n, \mathbf{R})$. We definiëren $f : G \to G'$ als volgt: voor de permutatie $\sigma \in G$ laat $f(\sigma)$ de matrix zijn met matrixelementen $f(\sigma)_{ij} = \delta_{i,\sigma(j)}$. Dan is f een homomorfisme en S_n is dus isomorf met de ondergroep $f(S_n)$ van permutatiematrices (die in elke rij en elke kolom precies één 1 en verder nullen hebben) in G'.
3. De ondergroep H van $\mathbf{C}^*$ bestaande uit de n-de machtseenheidswortels $e^{2\pi ik/n}$ $(k = 0, 1, \ldots, n-1)$ is isomorf met $\mathbf{Z}_n$: laat immers $R \in C_n$ een voortbrenger van C_n zijn en definieer $f : C_n \to H$ door $f(R^k) = e^{2\pi ik/n}$.
4. Zij V een vectorruimte van dimensie n. De inverteerbare lineaire afbeeldingen $T : V \to V$ vormen een groep $GL(V)$ met als groepsbewerking het samenstellen van afbeeldingen die isomorf is met de groep $GL(n, \mathbf{R})$. Kies immers een basis van V en laat A_T de matrix van de afbeelding T zijn t.o.v. de gekozen basis. De afbeelding $T \to A_T$ is een isomorfisme van de groep $GL(V)$ naar $GL(n, \mathbf{R})$.

5. Laat V een reële eindig-dimensionale vectorruimte zijn met een inwendig product. Een lineaire afbeelding $T \in GL(V)$ heet orthogonaal als $\langle T(x), T(y)\rangle = \langle x, y\rangle$ voor alle $x, y \in V$. De matrix A_T van een afbeelding $T \in GL(V)$ t.o.v. een orthonormale basis is orthogonaal dan en slechts dan als T orthogonaal is. De afbeelding $T \to A_T$ vormt een isomorfisme tussen de groep van orthogonale afbeeldingen $O(V)$ en $O(n)$.

Lemma: Laat G, G' groepen zijn met eenheidselement e resp. e'. Zij $f : G \to G'$ een homomorfisme. Dan is $f(e) = e'$ en $f(g^{-1}) = f(g)^{-1}$.

Bewijs: $f(e) = f(e \circ e) = f(e) \circ' f(e)$. Linker- en rechterlid vermenigvuldigen met $f(e)^{-1}$ geeft dat $f(e) = e'$. De tweede bewering volgt uit $e' = f(e) = f(g \circ g^{-1}) = f(g) \circ' f(g^{-1})$.

Quotiëntgroep. Zij G een groep en H een ondergroep. Op G voeren we een equivalentierelatie $\sim$ in: $g_1 \sim g_2$ als $g_1 = g_2 h$ voor zekere $h \in H$. De equivalentieklassen heten de *linker-nevenklassen* van G m.b.t. H en we geven zo'n nevenklasse aan met gH. Op dezelfde manier kunnen we ook rechter-nevenklassen beschouwen. De verzameling van linker-nevenklassen vormt i.h.a. geen groep, maar dit is wel het geval als H een normaaldeler is. Dan is voor $g_1, g_2 \in G$ en $h_1, h_2 \in H$:

$$g_1 h_1 g_2 h_2 = g_1 g_2 h_1' h_2 \in g_1 g_2 H$$

zodat we $g_1 g_2 H$ als het product van de nevenklassen $g_1 H$ en $g_2 H$ kunnen beschouwen. Verder is een linker-nevenklasse gH gelijk aan de rechter-nevenklasse Hg omdat voor $h \in H$: $gh = h'g \in Hg$ (met $h' \in H$) en dus $gH \subset Hg$. Analoog geldt dat $Hg \subset gH$ zodat $gH = Hg$ voor elke $g \in G$. De verzameling nevenklassen gH vormt de *quotiëntgroep* G/H.

Laat G, G' groepen zijn en $f : G \to G'$ een homomorfisme. $\mathrm{Ker}(f)$ is de ondergroep van G bestaande uit de elementen $g \in G$ die op het eenheidselement e' van G' worden afgebeeld (dus $f(g) = e'$). Merk op dat $\mathrm{Ker}(f)$ zelfs een normaaldeler is. $f(G)$ is de ondergroep van G' die bestaat uit de beelden $f(g)$ van elementen $g \in G$ onder f.

Propositie 8.1: Laat G, G' groepen zijn en $f : G \to G'$ een homomorfisme. Dan is

$$G/\mathrm{Ker}(f) \cong f(G).$$

Bewijs: Laat $\phi : G/\mathrm{Ker}(f) \to f(G)$ de afbeelding zijn die de klasse $[g] \in G/\mathrm{Ker}(f)$ van $g \in G$ afbeeldt op het element $f(g)$. ϕ is goed gedefinieerd: als $[g] = [g']$ dan is $g' = gh$ voor zekere $h \in \mathrm{Ker}(f)$ en dus is $f(g') = f(g)f(h) = f(g)$. Verder is ϕ een homomorfisme:

$$\phi([g][g']) = \phi([gg']) = f(gg') = f(g)f(g') = \phi([g])\phi([g']).$$

ϕ is injectief: als $\phi([g]) = f(g) = e$ dan is $g \in \mathrm{Ker}(f)$ dus $[g] = [e]$; tenslotte is ϕ surjectief: als $h \in f(G)$, dan is $h = f(g) = \phi([g])$ voor zekere $g \in G$.

Voorbeeld: Laat $G = GL(n, \mathbf{R})$ en $G' = \mathbf{R}^*$, de groep van reële getallen ongelijk nul met de vermenigvuldiging. $f : G \to G'$ wordt gegeven door $f(A) = \det(A)$. f is een homomorfisme en $\ker(f) = SL(n, \mathbf{R})$. Dus is $GL(n, \mathbf{R})/SL(n, \mathbf{R}) \cong \mathbf{R}^*$.

Direct product. De groep G is het direct product van ondergroepen H_1, H_2 van G (notatie $G = H_1 \times H_2$) als geldt dat:

i. $h_1 h_2 = h_2 h_1$ voor $h_1 \in H_1$ en $h_2 \in H_2$.
ii. Elke $g \in G$ te schrijven is als $g = h_1 h_2$ met $h_1 \in H_1$ en $h_2 \in H_2$.
iii. $H_1 \cap H_2 = \{e\}$. In dit geval is de schrijfwijze $g = h_1 h_2$ van (ii) uniek.

Een verwante constructie is het *uitwendig* direct product. Als G_1, G_2 groepen zijn met eenheidselementen e_1, e_2, dan construeren we het direct product $G' = G_1 \times' G_2$ als volgt: als verzameling bestaat G' uit de paren (g_1, g_2) met $g_1 \in G_1$ en $g_2 \in G_2$. De groepsbewerking wordt verder gegeven door

$$(g_1, g_2) \circ (g_1', g_2') = (g_1 g_1', g_2 g_2').$$

Merk op dat de ondergroep $G_1 \times' \{e_2\} = \{(g_1, e_2) : g_1 \in G_1\}$ isomorf is met G_1 en de ondergroep $\{e_2\} \times' G_2$ isomorf is met G_2 en dat G' het direct product is van beide ondergroepen. Dus is $G_1 \times' G_2$ isomorf met $G_1 \times G_2$. Om deze reden schrijven we in beide gevallen $G' = G_1 \times G_2$.

Voorbeelden: (1.) De groep $D_2 = \{e, a, b, ab\}$ is het direct product van de ondergroepen $H_1 = \{e, a\}$ en $H_2 = \{e, b\}$. H_1, H_2 zijn beide isopmorf met C_2. Dus is $D_2 \cong C_2 \times C_2$.
(2.) De ondergroep $\{I, -I\}$ van $O(3)$ is isomorf met C_2. Iedere $A \in O(3)$ is te schrijven als $A = A'J = JA'$ met $A' \in SO(3)$ en $J = I$ of $J = -I$. Dus is $O(3) \cong SO(3) \times C_2$.

§8.2. Representaties van eindige groepen.

Definitie: Zij G een groep en V een Hilbertruimte. Een *representatie* van G (op V) is een homomorfisme $T : G \to GL(V)$ waarbij $GL(V)$ de groep van inverteerbare lineaire operatoren op V is. V heet de *representatieruimte* van T. De dimensie van V heet de *dimensie* van de representatie. Een representatie T heet *trouw* als T injectief is.

We geven het beeld van een element g aan met $T(g)$ of met T_g. Een voorbeeld van een representatie is de *identieke representatie* $T : G \to \{id_V\}$ waarbij $T_g = id_V$ voor alle $g \in G$. Voor het eenheidselement e van G geldt dat $T(e) = id_V$.

Definitie: De representaties $T : G \to GL(V)$ en $T' : G \to GL(V')$ heten *equivalent* als er een vectorruimte-isomorfisme $\phi : V \to V'$ bestaat zodanig dat $T' = \phi \circ T \circ \phi^{-1}$.

Representaties die equivalent zijn zullen we identificeren. Als V een eindig-dimensionale vectorruimte is over het lichaam K is, dan is $GL(V)$ isomorf met de groep van inverteerbare $n \times n$-matrices $GL(n, K)$. Eindig-dimensionale representaties zijn dus equivalent met matrixrepresentaties.

Definitie: Een lineaire deelruimte W van een representatieruimte V heet *invariant* als voor elke $v \in W$ de baan $\{T_g(v) : g \in G\}$ geheel in W ligt, m.a.w. als $T_g(W) \subset W$ voor elke $g \in G$.

De representatie T heet *reducibel* als er invariante lineaire deelruimten U, W van V bestaan zodanig dat $V = U \oplus W$. T heet *irreducibel* als T niet reducibel is.

Voorbeelden: 1. Laat $G = C_n$ en laat R een voortbrenger zijn. De afbeelding $\phi_m : G \to GL(\mathbf{C}) = \mathbf{C}^*$ gegeven door $\phi_m(R^k) = \exp(2\pi imk/n)$ is een (1-dimensionale) representatie. De representatie is trouw als m en n relatief priem zijn, d.w.z. als m en n geen delers gemeen hebben (behalve 1,-1).

2. Laat G een groep zijn, en laat T, T' representaties van G zijn met representatieruimten V, en V'. De *directe somrepresentatie* $T \oplus T' : G \to GL(V \oplus V')$ is de representatie gedefinieerd door $(T \oplus T')(g)(v + v') = T(g)(v') + T(g')(v')$ waarbij $g \in G$, $v \in V, v' \in V'$. Als matrixrepresentatie is $(T \oplus T')(g) = \begin{pmatrix} T(g) & O \\ O & T'(g) \end{pmatrix}$.

3. Laat $G = S_3$. We laten S_3 als permutatiegroep werken op $\{1, 2, 3\}$. Voor de cykel $g = (132)$ geldt dus $g(1) = 3, g(2) = 1, g(3) = 2$. Dan wordt de *fundamentele representatie* $T : G \to GL(3, \mathbf{R})$ gegeven door de matrices

$$T_g = (\mathbf{e}_{g(1)}\ \mathbf{e}_{g(2)}\ \mathbf{e}_{g(3)})$$

(met kolomvectoren $\mathbf{e}_{g(i)}$) een representatie van dimensie 3. T is reducibel en de lineaire deelruimten $U = \text{span}\{(1,1,1)^T\}$ en $W = U^\perp$ (t.o.v. het standaard-inproduct op $\mathbf{R}^3$) zijn invariante lineaire deelruimten. Er geldt nu dat $T = T_U \oplus T_W$ waarbij $T_U : G \to GL(U)$ en $T_W : G \to GL(W)$ zijn. T_U en T_W zijn wel irreducibel.

Als G een eindige groep is met representatie T en $v \in V$, dan is de *baan* $\{T_g(v) : g \in G\}$ eindig en in het bijzonder spant deze een eindig-dimensionale deelruimte van V op. We zien dus:

Propositie 8.2: Irreducibele representaties van een eindige groep zijn eindig-dimensionaal.

Vanaf nu nemen we aan dat $\dim(V)$ eindig is. Een tweede resultaat is het volgende:

Propositie 8.3: Iedere eindig-dimensionale representatie T van een eindige groep G is equivalent met een unitaire representatie S. (d.w.z. $S(g)$ is unitair voor elke $g \in G$).

Bewijs: Laat $T = \sum_{g \in G} T_g^* T_g$. Dan is T positief-definiet. Laat voor elke $g \in G$: $S_g = (\sqrt{T}) T_g (\sqrt{T})^{-1}$. Dan is S equivalent met T en verder is $S_g^* S_g = id_V$. $\diamond$

Opmerking: Een andere manier om het bovenstaande resultaat te interpretren is het volgende: Als $\langle\ ,\ \rangle$ een inproduct is op V, dan is $(v, w) = \sum_{g \in G} \langle T_g v, T_g w\rangle$ eveneens een inproduct op G en $(T_h v, T_h w) = (v, w)$ voor alle $h \in G$. M.a.w. er is een inproduct op V zodanig dat T unitair is t.a.v. dit inproduct.

Propositie 8.4: Als T een unitaire representatie is op V en W is een invariante lineaire deelruimte van V, dan is $W^\perp$ eveneens een invariante lineaire deelruimte.

Bewijs: Zij $v \in W$, $w \in W^\perp$. Dan is, voor $g \in G$, $\langle v, T_g w\rangle = \langle T_g^{-1} v, w\rangle = 0$ en omdat v willekeurig is, is $T_g w \in W^\perp$. $\diamond$

Gevolg 8.5: Elke eindig-dimensionale representatie T van een eindige groep is een directe som van irreducibele representaties:

$$T = \sum_\alpha \oplus m_\alpha T^{(\alpha)}$$

(waarbij $T^{(\alpha)}$ de verschillende irreducibele representaties zijn en $m_\alpha \in \mathbf{Z}_+$ het aantal keren dat de representatie $T^{(\alpha)}$ voorkomt). De representatieruimte V is de directe som van de representatieruimten $V^{(\alpha)}$ van $T^{(\alpha)}$.

Voor het analyseren van de verschillende irreducibele representaties gebruiken we de lemma's van Schur:

Propositie 8.6: (*lemma van Schur*) (I.) Laat G een eindige groep zijn en $T : G \to GL(V)$, $T' : G \to GL(V')$ twee irreducibele representaties. Zij $\phi : V \to V'$ een lineaire afbeelding zodanig dat $\phi \circ T_g = T'_g \circ \phi$ voor elke $g \in G$. Dan is ϕ de nulafbeelding of ϕ is een isomorfisme en T, T' zijn dan equivalente representaties.

(II.) Indien $V = V'$ en $\phi \circ T_g = T_g \circ \phi$ voor alle g, dan is $\phi = \lambda \cdot id_V$ voor zekere $\lambda \in \mathbf{C}$.

Bewijs: (I.) Als $x \in \ker(\phi)$, dan is $\phi(T_g(x)) = T'_g(\phi(x)) = 0$ dus $T_g(x) \in \ker(\phi)$. $\ker(\phi)$ is dus een invariante lineaire deelruimte van T. Verder, als $y \in V$, dan is $T'_g(\phi(y)) = \phi(T_g(y))$, dus $\text{im}(\phi)$ is een invariante deelruimte van T'. Omdat T, T' irreducibele representaties zijn, is hetzij $\ker(\phi) = \{0\}$ hetzij $\ker(\phi) = V$. In het laatste geval is $\phi = 0$, in het eerste geval is ϕ injectief. Tevens is $\text{im}(\phi) = \{0\}$ of $\text{im}(\phi) = V'$. In het eerste geval is $\phi = 0$, in het tweede geval is ϕ surjectief. Conclusie: $\phi = 0$ of een vectorruimte-isomorfisme.

(II.) Net als in het bewijs van (I) volgt dat $\ker(\phi - \lambda \cdot id)$ hetzij de nulruimte is of geheel V. Omdat ϕ minstens één complexe eigenwaarde heeft, is er een $\lambda_0 \in \mathbf{C}$ zodanig dat $\ker(\phi - \lambda_0 \cdot id) = V$. Maar dan is $\phi = \lambda_0 \cdot id_V$. $\diamond$

Gevolg 8.7: De irreducibele representaties van een abelse groep zijn eendimensionaal.

Bewijs: Als G abels is, dan commuteert T_h voor elke $h \in G$ met alle T_g. Dus is $T_h = \lambda(h) \cdot id_V$. Omdat T irreducibel is, is V eendimensionaal.

Laat nu $T^{(\alpha)}$, $T^{(\beta)}$ irreducibele representaties van G zijn met representatieruimten $V^{(\alpha)}, V^{(\beta)}$ en $X : V^{(\alpha)} \to V^{(\beta)}$ een lineaire afbeelding. Beschouw $\phi = \sum_{g \in G} T^{(\beta)}(g) X T^{(\alpha)}(g^{-1})$. Dan is $\phi : V^{(\alpha)} \to V^{(\beta)}$ lineair en

$$\phi \circ T^{(\alpha)}(h) = \sum_{g \in G} T^{(\beta)}(g) X T^{(\alpha)}((h^{-1}g)^{-1}) = T^{(\beta)}(h) \sum_{g' \in G} T^{(\beta)}(g') X T^{(\alpha)}(g'^{-1}) = T^{(\beta)}(h) \circ \phi. \tag{8.2}$$

Volgens het lemma van Schur is $\phi = 0$ als $\alpha \neq \beta$ en $\phi = \lambda_X \cdot id_V$ als $\alpha = \beta$. Laat nu $X = E_{ij}$. Dan volgt uit (8.2) de volgende relatie tussen de matrixelementen:

$$\sum_{g \in G} T^{(\beta)}_{\ell i}(g) T^{(\alpha)}_{jm}(g^{-1}) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell m} \lambda_{ij}$$

waarbij $\lambda_{ij} \in \mathbf{C}$. Voor $\alpha = \beta$ en $\ell = m$ en $n_\alpha = \dim(V^{(\alpha)})$ krijgen we dan

$$n_\alpha \lambda_{ij} = \sum_{g \in G} \sum_{\ell=1}^{n_\alpha} T^{(\alpha)}_{\ell i}(g) T^{(\alpha)}_{j\ell}(g^{-1}) = \sum_{g \in G} T^{(\alpha)}_{ji}(e) = \delta_{ij} |G|.$$

Conclusie:

$$\sum_{g \in G} T^{(\beta)}_{\ell i}(g) T^{(\alpha)}_{jm}(g^{-1}) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell m} \delta_{ij} |G| / n_\alpha. \tag{8.3}$$

en in het geval dat T unitair is kunnen we dit schrijven als

$$\sum_{g \in G} T^{(\beta)}_{\ell i}(g) \overline{T^{(\alpha)}_{mj}(g)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell m} \delta_{ij} |G| / n_\alpha. \tag{8.3$'$}$$

Het karakter van een representatie. Laat G een eindige groep zijn en T een eindig-dimensionale representatie met representatieruimte V. Het *karakter* $\chi_T : G \to \mathbf{C}$ van T is gedefinieerd als

$$\chi_T(g) = \operatorname{tr} T(g) = \sum_{i=1}^{\dim(V)} T_{ii}(g).$$

Equivalente representaties hebben hetzelfde karakter. Verder geldt dat $\chi_T(e) = \dim(V)$ en dat als $g' = hgh^{-1}$, dan is $T(g') = T(h)T(g)T(h)^{-1}$, dus $\chi_T(g) = \chi_T(g')$, m.a.w elementen van G in dezelfde *conjugatieklasse* hebben hetzelfde karakter. Uit (8.3') volgt nu voor de karakters $\chi^{(\alpha)}$ van de irreducibele representaties $T^{(\alpha)}$, door $\ell = i, m = j$ te nemen en over i, j te sommeren

$$\sum_{g \in G} \chi^{(\beta)}(g) \overline{\chi^{(\alpha)}(g)} = \sum_{i=1}^{n_\beta} \sum_{j=1}^{n_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} |G| / n_\alpha = \delta_{\alpha\beta} |G|. \tag{8.4}$$

Hierbij nemen we aan dat de irreducibele representaties unitair zijn. De relatie (8.4) drukt de orthogonaliteit van de karakters van verschillende irreducibele representaties uit. I.h.b. zijn er eindig veel karakters. Uit het feit dat elementen van G in dezelfde conjugatieklasse hetzelfde karakter hebben, volgt dat het aantal verschillende irreducibele karakters hoogstens gelijk is aan het aantal conjugatieklassen van G. Men kan in feite bewijzen dat het aantal verschillende irreducibele representaties precies gelijk is aan het aantal verschillende conjugatieklassen van G. We zullen dat hier niet doen. Wel leiden we een aantal gevolgen van (8.4) af.

Voorbeeld: 1. Voor een abelse groep G is $g = hgh^{-1}$ voor elke $g, h \in G$. Elke conjugatieklasse bevat dus precies één element. Er zijn dus $|G|$ conjugatieklassen en $|G|$ niet-equivalente irreducibele representaties.

2. Laat $G = S_n$. Laat $(i_1 i_2 \dots i_k)$ (met $1 \leq i_1, \dots, i_k \leq n$) een k-cykel in S_n zijn. Dan is er een $g \in S_n$ zodanig dat $i_\ell = g(\ell)$ voor $\ell = 1, \dots, k$. Nu is

$$(i_1 i_2 \dots i_k) = g^{-1}(12 \dots k)g$$

dus $(i_1 i_2 \dots i_k)$ en $(12 \dots k)$ zitten in dezelfde conjugatieklasse. Omgekeerd is elk element dat in dezelfde conjugatieklasse zit als $(12 \dots k)$ een k-cykel. Een soortgelijke redenering gaat ook op voor een product van disjuncte cykels. Het aantal conjugatieklassen in S_n is dus gelijk aan het aantal manieren waarop we het getal n als een som van positieve gehele getallen kunnen schrijven (m.a.w. het aantal partities van n). In het geval $n = 3$ zijn er 3 manieren: $3, 2+1, 1+1+1$ corresponderend met de conjugatieklassen van de 3-cykels, de 2-cykels en de identiteit. Er zijn dus 3 irreducibele representaties van S_3.

Opmerking: Laat S, T eindig-dimensionale representaties van G zijn met karakters χ_S en χ_T. Dan geldt voor het karakter $\chi_{S \oplus T}$ van $S \oplus T$ dat $\chi_{S \oplus T} = \chi_S + \chi_T$.

Laat nu $T = \sum_\alpha \oplus m_\alpha T^{(\alpha)}$ een eindig-dimensionale representatie van G zijn. Dan volgt dat $\chi(g) = \sum_\alpha m_\alpha \chi^{(\alpha)}(g)$ en door deze uitdrukking te vermenigvuldigen met $\overline{\chi^{(\beta)}(g)}$. en de orthogonaliteitsrelatie (8.4) te gebruiken volgt dat

$$m_\beta = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(g) \overline{\chi^{(\beta)}(g)}, \tag{8.5}$$

en ook volgt dat

$$\sum_{g \in G} |\chi(g)|^2 = \sum_{g \in G} \sum_{\alpha, \beta} m_\alpha m_\beta \chi^{(\alpha)}(g) \overline{\chi^{(\beta)}(g)} = \sum_{\alpha\beta} m_\alpha m_\beta \delta_{\alpha\beta} |G| = \sum_\alpha m_\alpha^2 |G|. \tag{8.6}$$

Uit (8.6) volgt i.h.b.

Propositie 8.8: De unitaire representatie T is irreducibel dan en slechts dan als $\sum_{g \in G} |\chi(g)|^2 = |G|$.

Voorbeeld: (de reguliere representatie.) Zij G een groep met $|G| = n$ elementen. We nummeren de elementen: $e = g_1, \dots, g_n$. De werking van G op zichzelf induceert een permutatie van $1, 2, \dots, n$: $g_i g_j = g_{\pi_i(j)}$. Op deze wijze zien we dat G isomorf met een ondergroep van S_n. De *reguliere representatie* $R : G \to GL(n, \mathbf{C})$ beeldt $g_i \in G$ af op de matrix $R(g_i) = (\mathbf{e}_{\pi_i(1)} \dots \mathbf{e}_{\pi_i(n)})$. Laat $R = \sum_\alpha m_\alpha T^{(\alpha)}$. We bepalen m_α. Voor het karakter χ_R geldt dat $\chi_R(g) = \sum_\alpha m_\alpha \chi^{(\alpha)}(g)$. Anderzijds is $\chi_R(e) = n$ en $\chi_R(g) = 0$ voor $g \neq e$. Nu is volgens (8.5)

$$m_\alpha = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_R(g) \overline{\chi^{(\alpha)}(g)} = \overline{\chi^{(\alpha)}(e)} = n_\alpha.$$

Conclusie: de representatie $T^{(\alpha)}$ komt dus precies $n_\alpha = \dim(V^{(\alpha)})$ voor in de reguliere representatie. Verder volgt uit (8.6) dat

$$|G|^2 = |\chi(e)|^2 = \sum_{g\in G} |\chi(g)|^2 = \sum_\alpha m_\alpha^2 |G| = \sum_\alpha n_\alpha^2 |G|$$

en dus is $\sum_\alpha n_\alpha^2 = |G|$. We hebben dus aangetoond:

Propositie 8.9: Zij G een eindige groep met irreducible representaties $T^{(1)}, \ldots, T^{(k)}$. Laat n_α de dimensie van de representatie $T^{(\alpha)}$ zijn. Dan is

$$\sum_{\alpha=1}^{k} n_\alpha^2 = |G|.$$

Voorbeeld: De irreducibele representaties van S_3. De groep S_3 heeft drie conjugatieklassen, nl. $\{e\}, \{(12),(13),(23)\}, \{(123),(132)\}$. De identieke representatie heeft karakter $\chi^{(1)}(g) = 1$ voor alle $g \in G$. Voor de *antisymmetrische* representatie $T^{(2)} : S_3 \to \mathbf{C}$ is $T^{(2)}(g) = 1$ als g een even permutatie en -1 als g een oneven permutatie is. De oneven permutaties zijn precies de 2-cykels. Omdat $T^{(2)}$ 1-dimensionaal is, is $\chi^{(2)}(g) = T^{(2)}(g)$. Er is nog een andere irreducibele representatie $T^{(3)}$. Omdat $\sum_{\alpha=1}^{3} n_\alpha^2 = |S_3| = 6$, is de dimensie van $T^{(3)}$ gelijk aan 2. Dan is $\chi^{(3)}(e) = 2$ en volgens de orthogonaliteitsrelatie is $\chi^{(3)}((12)) = 0$ en $\chi^{(3)}((123)) = -1$. In feite zijn we $T^{(3)}$ reeds tegengekomen in een eerder voorbeeld waar het een van de deelrepresentaties van de 3-dimensionale representatie T was. In termen van 2×2-matrices kunnen we $T^{(3)}$ schrijven als

$$(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, (12) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, (23) = \begin{pmatrix} 0 & \omega^2 \\ \omega & 0 \end{pmatrix}, (13) = \begin{pmatrix} 0 & \omega \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(123) = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega^2 \end{pmatrix}, (132) = \begin{pmatrix} \omega^2 & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix}.$$

S_3 heeft de volgende karaktertabel:

	(1)	(12)	(123)
#	1	3	2
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1
$\chi^{(3)}$	2	0	-1

De eerste rij staat voor de verschillende conjugatieklassen, de tweede rij bevat het aantal elementen in een conjugatieklasse. De andere rijen bevatten de waarden van de karakters $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}, \chi^{(3)}$ in de verschillende conjugatieklassen.

Het tensorproduct van twee representaties. Laat G een groep zijn en S, T twee eindig-dimensionale representaties met representatieruimten V resp. W. De tensorproductruimte $V \otimes W$ wordt voortgebracht door alle tensorproducten $v \otimes w$ met $v \in V$ en $w \in W$. Nu is de tensorproduct-representatie $S \otimes T : G \to GL(V \otimes W)$ gedefinieerd door

$$(S \otimes T)(g)(v \otimes w) = S(g)(v) \otimes T(g)(w). \tag{8.7}$$

Door bases $\{e_1, \ldots, e_n\}$ en $\{f_1, \ldots, f_m\}$ van V resp. W te kiezen krijgen we een matrixrepresentatie:

$$(S \otimes T)(g)(e_i \otimes f_j) = S(g)(e_i) \otimes T(g)(f_j) = \sum_{k,\ell=1}^{n,m} (S_g)_{ki}(T_g)_{\ell j} e_k \otimes f_\ell$$

en de matrixelementen t.o.v. de basis $\{e_i \otimes f_j\}_{i,j=1}^{n,m}$ zijn dus

$$(S \otimes T)(g)_{k\ell,ij} = S(g)_{ki} T(g)_{\ell j}. \tag{8.8}$$

Verder geldt: als χ_S, χ_T de karakters zijn van de representaties S resp. T, dan is $\chi_S \cdot \chi_T$ het karakter van $S \otimes T$.

Voor de irreducibele representaties $T^{(\alpha)}$ en $T^{(\beta)}$ van de eindige groep G noteren we voor het tensorproduct $T^{(\alpha\otimes\beta)}$. De decompositie

$$T^{(\alpha\otimes\beta)} = \sum_\gamma m_\gamma^{\alpha\beta} T^{(\gamma)}$$

heet de *Clebsch-Gordandecompositie* van het tensorproduct.

Voorbeelden: 1. Zij $G = C_n = \{e^{2\pi i k/n}\}_{k=0}^{n-1}$ en laat $T_m(e^{2\pi i k/n}) = e^{2\pi i k m/n}$ voor $m \in \mathbf{Z}$. Dan is $T_m \otimes T_{m'} = T_{m+m'}$.

2. Zij $G = S_3$ en laat $T^{(1)}, T^{(2)}, T^{(3)}$ de irreducibele representaties van G zijn (zie boven). We bepalen de Clebsch-Gordandecompositie van $T^{(3\otimes3)}$. Er geldt $T^{(3\otimes3)} = \sum_{j=1}^3 m_j T^{(j)}$. Dan is

$$\sum_{j=1}^{3} m_j \chi^{(j)}(g) = \chi^{(3\otimes3)}(g) = (\chi^{(3)}(g))^2.$$

Voor $g = (1), (12), (123)$ geeft dit de vergelijkingen

$$m_1 + m_2 + 2m_3 = 4, \quad m_1 - m_2 = 0, \quad m_1 + m_2 - m_3 = 1.$$

De oplossing is $m_1 = m_2 = m_3 = 1$, m.a.w. $T^{(3\otimes3)} = T^{(1)} \oplus T^{(2)} \oplus T^{(3)}$.

Ondergroepen en representaties; de geïnduceerde representatie. Zij G een eindige groep met een representatie T en zij H een ondergroep van G. Door alleen de elementen T_h met $h \in H$ te beschouwen, verkrijgen we een representatie van G, de restrictie van T tot H. Als T een irreducibele representatie van G is, hoeft T i.h.a. geen irreducibele representatie van H te zijn. Beschouw als voorbeeld $G = S_3$, $H = \{(1), (123), (132)\}$ de ondergroep voortgebracht door de 3-cykels. H is isomorf met de cyclische groep C_3. Laat T de 2-dimensionale representatie van G zijn. Omdat H abels is, zijn alle irreducibele representaties van H eendimensionaal. I.h.b. is de restrictie van T tot H reducibel.

Omgekeerd bestaat er een constructie om uit een gegeven representatie T van een ondergroep H een representatie van G te maken. Deze representatie van G heet de *geïnduceerde representatie* van T.

Zij T een representatie van H met representatieruimte V. Kies een volledig representantenstelsel $\{c_0 = e, c_1, \ldots, c_{m-1}\}$ van de linkernevenklassen van H in G, m.a.w. elk element van G is op unieke wijze te schrijven als $c_i h$ met $0 \le i \le m-1$ en $h \in H$. Hierbij is $m = |G|/|H|$. We nemen nu $m-1$ kopieën $c_1 V, \ldots, c_{m-1} V$ van V en nemen als representatieruimte de directe som

$W = V \oplus c_1 V \oplus \ldots \oplus c_{m-1} V$. Een basis van $c_j V$ noteren we als $\{c_j e_1, \ldots, c_j e_k\}$ waarbij $\{e_1, \ldots, e_k\}$ een basis van V is. Nu is voor $0 \leq i, j \leq m-1$ en $h \in H$

$$c_i h c_j = \sum_{p=0}^{m-1} c_p h_p^{(i,j)}$$

waarbij $h_p = h_p^{(i,j)} \in H$. De schrijfwijze is uniek. Nu is de geïnduceerde representatie T^{ind} gedefinieerd door

$$T^{ind}_{c_i h}(c_j e_\ell) = \sum_{p=0}^{m-1} c_p T_{h_p}(e_\ell). \tag{8.9}$$

Hierbij is $h_p = h_p^{(i,j)}$; $T_{h_p}(e_\ell)$ is een lineaire combinatie van $e_1, \ldots, e_k$ en het rechterlid van (8.9) is dus een lineaire combinatie van de basiselementen $c_p e_\ell$ van W. Het is niet moeilijk om na te gaan dat T^{ind} een representatie is, d.w.z. $T^{ind}_{gg'} = T^{ind}_g T^{ind}_{g'}$ voor $g, g' \in G$.

Voorbeeld: Zij G een eindige groep met eenheidselement e. Laat $H = \{e\}$. H heeft één irreducibele representatie, de (1-dimensionale) identieke representatie. T_1. Ga na dat de geïnduceerde representatie van T_1 precies de reguliere representatie van G is.

§8.3. Fysische toepassingen.

We geven een drietal toepassingen van representatietheorie.

Dipoolmomenten. Beschouw een (driedimensionaal) kristal met een zekere symmetrie(punt)groep G. De vraag is of het kristal een elektrisch of magnetisch dipoolmoment kan hebben. De puntgroep G bestaat uit rotaties en spiegelingen. Als ondergroep van de orthogonale groep heeft G een 3-dimensionale representatie T. Het kristal kan een elektrisch of magnetisch dipoolmoment hebben indien er een invariante richting (onder de symmetriegroep) bestaat. Als G alleen rotaties bevat, dan is dit het geval precies als T de triviale representatie als deelrepresentatie bevat. Als G ook spiegelingen bevat, is er een verschil tussen een magnetische en een elektrische polarizatievector: een elektrische polarizatievector is een gewone vector, en keert de richting om bij puntspiegeling $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$; de magnetsiche polarizatievector is een pseudovector en is invariant onder de puntspiegeling $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$.

We beschouwen het geval dat de kristalgroep wordt voortgebracht door een rotatie R over 120^o om een zekere as en een rotatie S over 180^o om een as die loodrecht staat op de eerste. In dit geval is $R^3 = S^2 = I$ (de identieke afbeelding) en $RS = SR^2$. De groep is isomorf met S_3. Als we als assen de x_3-as resp. de x_2-as nemen dan wordt de matrixrepresenatie van G gegeven door

$$R = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad S = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Voor het karakter χ geldt dus

$$\chi(I) = 3,\ \chi(R) = 0,\ \chi(S) = -1.$$

Als we dit vergelijken met de karaktertabel van de irreducibele representaties $T^{(1)}, T^{(2)}, T^{(3)}$ van S_3 dan zien we dat $\chi = \chi^{(2)} + \chi^{(3)}$ en dus $T = T^{(2)} \oplus T^{(3)}$. T bevat dus niet de triviale representatie en er is dus geen elektrisch of magnetisch dipoolmoment.

Degeneratie van energietoestanden. Beschouw een quantummechanisch systeem met Hamiltoniaan $\mathbf{H}$ en toestandsruimte V. $\mathbf{H}$ is een (zelfgeadjungeerde) lineaire operator op V. Neem aan dat de Hamiltoniaan symmetrisch is t.o.v. een groep G. Dit betekent het volgende: G werkt op V d.m.v. een representatie T. Voor elke $u \in V$ is dan $T_g(\mathbf{H}u) = \mathbf{H}T_g(u)$, m.a.w. $T_g\mathbf{H} = \mathbf{H}T_g$ voor alle $g \in G$. Laat E een (energie)eigenwaarde van $\mathbf{H}$ zijn. Uit de bovenstaande relatie volgt dan dat de eigenruimte V_E invariant is onder de representatie T. I.h.a. zal (de restrictie van) T irreducibel zijn op V_E. Is dit niet het geval, dan heet de eigenwaarde E *gedegenereerd.* Vaak bestaat er dan een grotere symmetriegroep $G' \supset G$ van de Hamiltoniaan (er moet immers een reden zijn dat dezelfde energie-eigenwaarde vaker voorkomt).

Omgekeerd, neem aan dat de Hamiltoniaan $\mathbf{H}$ verstoord is, d.w.z. het systeem heeft een Hamiltoniaan $\mathbf{H}' = \mathbf{H} + \epsilon\mathbf{V}$ waarbij ϵ klein is en $\mathbf{V}$ eveneens een zelfgeadjungeerde operator is. Doorgaans zal de symmetriegroep H van de verstoorde Hamiltoniaan $\mathbf{H}'$ een (echte) ondergroep zijn van G. Als we de representatie T tot H beperken dan zal T niet meer altijd irreducibel zijn op de energie-eigenruimte V_E, maar V_E splitsen in een directe som van (minimale) invariante deelruimten $V_{E_1}, \ldots, V_{E_k}$ waarop $\mathbf{H}$ eigenwaarden $E_1, \ldots, E_k$ heeft. Als ϵ klein is dan zullen de eigenwaarden $E_1, \ldots, E_k$ weinig verschillen van E. Een voorbeeld van deze situatie is het Zeeman-effect, waarbij in aanwezigheid van een magnetisch veld een magnetische energie-term aan de Hamiltoniaan van een atoom wordt toegevoegd. Het gevolg is dat de nieuwe Hamiltoniaan (met de magnetische term) een kleinere symmetrie heeft dan de oorspronkelijke Hamiltoniaan, waardoor de energieniveaus van het atoom verder uiteenvallen in niveaus van verschillende energie.

Normale modes.

Beschouw een klassiek systeem dat wordt beschreven door (gegeneraliseerde) coördinaten $q_1, q_2, \ldots, q_n$ die functies zijn van de tijd t. De tijdsafgeleiden $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots$ heten de gegeneraliseerde snelheden. $q_1, q_2, \ldots$ kunnen bijvoorbeeld de x, y resp. z-coördinaten zijn van N deeltjes (er zijn dan $n = 3N$ gegeneraliseerde coördinaten) maar kunnen bijvoorbeeld ook hoekvariabelen zijn. We nemen verder aan dat de totale energie $T + V$ van het systeem behouden is, waarbij de kinetische energie T een kwadratische vorm is in $\dot{q}_i$ d.w.z. $T = \sum_{i,j=1}^{n} m_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j$ ofwel, in matrixvorm, $T = \dot{q}^T M \dot{q}$ waarbij $M = (m_{ij})$ en waarbij $q = (q_1 \ldots q_n)^T$ en M de $n \times n$-matrix is met elementen m_{ij}. We kunnen aannemen dat M symmetrisch is. Omdat T positief is als niet $\dot{q} = 0$, is de matrix M positief-definiet. Neem verder aan de potentiële energie V alleen van q_i (en niet van $\dot{q}_i$) afhangt en dat het systeem zich in een stabiel evenwicht bevindt voor $q_i = q_i^0$. Door $q_i - q_i^0$ in q_i te hernoemen, kunnen we aannemen dat $q_i^0 = 0$. Dan is $\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_{q=0} = 0$ en voor q_i klein geldt dan dat $V(q) \approx V(0) + \sum_{i,j=1}^{n} k_{ij} q_i q_j$ waarbij $k_{ij} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right)_{q=0} = k_{ji}$ en waarbij we de termen van orde 3 en hoger verwaarlozen. In matrixvorm wordt dan $V = V(0) + q^T K q$ waarbij de matrix $K = (k_{ij})$ symmetrisch is. Omdat het evenwicht stabiel is, neemt V in $q = 0$ een minimum aan en is dus K positief semidefiniet. Dan geldt

$$T + V = \dot{q}^T M \dot{q} + q^T K q + V(0) = E$$

met E constant. Door de afgeleide naar q_i te nemen volgen de bewegingsvergelijkingen

$$M\ddot{q} + Kq = 0.$$

Volgens de lineaire algebra bestaat er nu een inverteerbare $n \times n$-matrix Q zodanig dat $Q^T M Q = I$, $Q^T K Q = L$ waarbij $L = \mathrm{diag}(\omega_1^2, \ldots, \omega_n^2)$ een (positief-semidefiniete) diagonaalmatrix is, dus $\omega_i^2 \geq 0$. Als we $Q^{-1}q = \eta$ definiëren, dan wordt de bewegingsvergelijking $\ddot{\eta} = L\eta$ of, in termen van de coördinaten $\eta_1, \ldots, \eta_n$

$$\ddot{\eta}_i = \omega_i^2 \eta_i, \qquad (i = 1, \ldots, n).$$

De coördinaten η_i noemen we de *normale coördinaten* van het systeem en als alle $\eta_i = 0$ zijn op een enkele η_J na, dan is het systeem in een *normale mode*. Uit de bewegingsvergelijking volgt dan dat het systeem een trilling uitvoert met frequentie ω: $\eta_J(t) = A\cos\omega_J(t - t_0)$ voor zekere A, t_0.

Neem nu aan dat het systeem een symmetrie bezit, waarbij de kinetische energie en de potentiële energie hetzelfde blijven. Dit betekent dat er een groep G is die via een representatie $\tilde{D}$ op de coördinaten q_i en de afgeleiden $\dot{q}_i$ werkt, zodat T en V gelijk blijven onder de transformaties $q_i \to \tilde{D}(g)q_i$ resp. $\dot{q}_i \to \tilde{D}(g)\dot{q}_i$ voor $g \in G$. In plaats van G op q_i te laten werken, kunnen we ook G op η_i laten werken. Dit levert een equivalente representatie. We geven deze aan met D. Dan geldt $I = \eta^T\eta = (D(g)\eta)^T D(g)\eta$ resp. $V = \eta^T L \eta = (D(g)\eta)^T L D(g)\eta$. Omdat $\eta \in \mathbf{R}^n$ willekeurig is, volgt dat $D(g)^T D(g) = I$ en $D(g)^T L D(g) = L$ voor $g \in G$. Uit de eerste vergelijking volgt dat $D(g)$ unitair is, dus D is een unitaire representatie. Uit de tweede vergelijking volgt dan dat $[D(g), L] = 0$ voor alle $g \in G$. Uit het lemma van Schur volgt dan dat de eigenwaarden ω_i van L constant zijn in elke lineaire deelruimte invariant onder D. Dit geeft aanleiding tot een degeneratie van de eigenfrequenties en dus ook de energie: de normale modes die behoren bij dezelfde irreducibele deelrepresentatie, hebben gelijke eigenfrequenties. Zo kunnen we de normale modes classificeren door naar de ontbinding van D in irreducibele representaties te kijken.

Voorbeeld: trillingsmodes van het watermolecule. Een watermolecule bestaat uit twee waterstofatomen en een zuurstofatoom. De hoek tussen de lijnen die het zuurstofatoom met een waterstofatoom verbinden bedraagt ongeveer 107^o. We beschouwen de atomen als punten Z, H_1, H_2 in de driedimensionale Euclidische ruimte en leggen een assenstelsel aan zodat in evenwichtsstand het zuurstofatoom Z op de z-as ligt (en coördinaten $(0, 0, b)$ heeft en de waterstofatomen aan weerszijden van het vlak $x = 0$ liggen in de punten $H_1(-a, 0, 0)$ en $H_2(a, 0, 0)$. De symmetriegroep van het molecule is $\{I, R, S, RS\}$ waarbij I de identieke afbeelding is, R een rotatie over 180^o om de z-as is en S een spiegeling in het vlak $x = 0$; dus $R(x, y, z) = (-x, -y, z)$ en $S(x, y, z) = (-x, y, z)$. $RS = SR$ is de spiegeling in het vlak $y = 0$. De symmetriegroep (die we G noemen) is (isomorf met) D_2.

De atomen bevinden zich i.h.a. niet in de evenwichtsstand maar voeren een trilling uit rond de evenwichtsstand, zoals boven beschreven. Er zijn in principe $9 = 3\times 3$ trillingsmodes te verwachten en we onderzoeken welke gedegenereerd zijn als gevolg van de symmetrie. Als gegeneraliseerde coördinaten gebruiken we de afwijkingen van de evenwichtsstand van de drie atomen in de drie richtingen. Laat (x_1, y_1, z_1) de uitwijkingen beschrijven van molecule H_1, (x_2, y_2, z_2) van H_2 en (x_3, y_3, z_3) van Z. G werkt op deze coördinaten via een 9-dimensionale representatie. T Hierbij is

$$T(R)(x_1, y_1, z, 1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3) = (-x_2, -y_2, z_2, -x_1, -y_1, z_1, -x_3, -y_3, z_3),$$

$$T(S)(x_1, y_1, z, 1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3) = (-x_2, y_2, z_2, -x_1, y_1, z_1, -x_3, y_3, z_3),$$
$$T(RS)(x_1, y_1, z, 1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3) = (x_1, -y_1, z_1, x_2, -y_2, z_2, x_3, -y_3, z_3).$$

Door naar de karakters te kijken kunnen we de representatie T ontbinden in irreducibele deelrepresentaties. D_2 is abels en heeft dus 4 irreducibele representaties. De karaktertabel van D_2 is

	I	R	S	RS
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

.

De karakters van T zijn te vinden uit de hierboven beschreven actie van G op $\mathbf{R}^9$ en zijn

$$\chi_T(I) = 9,\ \chi_T(R) = -1,\ \chi(S) = 1,\ \chi(RS) = 3.$$

Hieruit volgt dat

$$T = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 3B_2.$$

Nu zijn er zes modes met frequentie nul (de *nulmodes* of *zero modse*). Deze corresponderen met een uniforme translatie of rotatie. Een translatie in de x-richting heeft als invariante deelruimte span$\{\mathbf{v} = \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_4 + \mathbf{e}_7\}$; doordat $T(R)(\mathbf{v}) = T(S)(\mathbf{v}) = -\mathbf{v}$, correspondeert deze met een deelrepresentatie B_2. Op dezelfde manier tonen we aan dat een uniforme translatie in de y- resp. z-richting correspondeert met de deelrepresentaties B_1 resp. A_1. We beschouwen nu een uniforme rotatie om de x-as. Deze heeft als infinitesimale verplaatsingen $\epsilon(0, z_i, -y_i)$ en heeft dus als invariante deelruimte span$\{\mathbf{e}_8\}$. Doordat $-T(R)(\mathbf{e}_8) = T(S)(\mathbf{e_8}) = \mathbf{e}_8$, correspondeert een uniforme rotatie om de x-as met de deelrepresentatie B_1. Analoog hebben rotaties om de y- en z-as invariante deelruimten span$\{a\mathbf{e}_6 - a\mathbf{e}_3 - b\mathbf{e}_7\}$ resp. span$\{\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_5\}$ en corresponderen dus met de deelrepresentaties B_2 resp. A_2. De drie overblijvende modes zijn echte trillingsmodes (met $\omega^2 > 0$) en corresponderen met $2A_1 \oplus B_2$. De hiermee overeenkomende invariante deelruimtes vormen het orthogonaal complement van de invariante deelruimten van de nulmodes. Om de invariante deelruimten te bepalen gebruiken we het volgende resultaat:

Propositie 8.10: Zij G een eindige groep en $T : G \to GL(V)$ een unitaire eindig-dimensionale representatie. Als de irreducibele representatie $T^{(\alpha)}$ voorkomt in T dan wordt de projectie op de invariante lineaire deelruimte van V die overeenkomt met de representatie $T^{(\alpha)}$ gegeven door

$$P_T^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{h \in G} \overline{\chi^{(\alpha)}(h)} T(h), \tag{8.10}$$

met n_α de dimensie van $T^{(\alpha)}$. Als $T^{(\alpha)}$ niet voorkomt in T, dan is $P_T^{(\alpha)} = O$.

Bewijs: Laat $T = \sum_\alpha m_\alpha T^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^m T^{(k)}$ de ontbinding van T in irreducibele componenten zijn, $m_\alpha > 0$, waarbij $T^{(k)}$ een van de irreducibele representaties is en $T^{(k)}$ al dan niet equivalent met $T^{(k')}$ is. Laat $V = \oplus_{k=1}^m V^{(k)}$ de corresponderende decompositie van de representatieruimte V zijn. Kies nu een orthonormale basis $\{\mathbf{e}_j^{(k)}\}_{j=1}^{n_\alpha}$ van $T^{(k)}$ (waarbij $T^{(k)}$ equivalent met $T^{(\alpha)}$ is) zodanig dat

$$T(g)\mathbf{e}_j^{(k)} = \sum_{\ell=1}^{n_\alpha} T^{(\alpha)}(g)_{j\ell} \mathbf{e}_\ell^{(k)}.$$

De matrices van de restrictie van $T(g)$ tot $V^{(k)}$ resp. $V^{(k')}$ zijn dus gelijk als $T^{(k)}$ en $T^{(k')}$ equivalent zijn. Laat nu $T^{(k)}$ equivalent zijn met de irreducibele representatie $T^{(\alpha)}$ en laat $T^{(\beta)}$ een irreducibele representatie van G zijn. Dan geldt, voor $j = 1, \ldots, n_\alpha$

$$P_T^{(\beta)} \mathbf{e}_j^{(k)} = \frac{n_\beta}{|G|} \sum_{h \in G} \overline{\chi^{(\beta)}(h)} T(h) \mathbf{e}_j^{(k)} = \frac{n_\beta}{|G|} \sum_{h \in G} \sum_{i=1}^{n_\beta} \sum_{\ell=1}^{n_\alpha} T^{(\beta)}(h^{-1})_{ii} T^{(\alpha)}(h)_{j\ell} \mathbf{e}_\ell^{(k)} =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_\beta} \sum_{\ell=1}^{n_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{i\ell} \mathbf{e}_\ell^{(k)} = \delta_{\alpha\beta} \mathbf{e}_j^{(k)} = \begin{cases} \mathbf{e}_j^{(k)} & \text{als } T^{(\beta)} \cong T^{(k)} \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Hierbij is (8.3) gebruikt. Vanwege lineariteit geldt dus dat $P_T^{(\beta)}$ de projectie-operator op de lineaire deelruimte $m_\beta V^{(\beta)}$ van V is, en O als $V^{(\beta)}$ niet als irreducibele deelrepresentatie voorkomt in T. $\diamond$

Als we Propositie 8.10 toepassen op het voorbeeld, vinden we voor $T^{(1)} = A_1$ dat $P_T^{(1)} = (T(I) + T(R) + T(S) + T(RS))/4$ en $\mathrm{im}(P_T^{(1)}) = \mathrm{span}\{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_9\}$; voor $T^{(4)} = B_2$ is $P_T^{(4)} = (T(I) - T(R) - T(S) + T(RS))/4$ en $\mathrm{im}(P_T^{(4)}) = \mathrm{span}\{\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7\}$. Bij de trillinsmode die correspondeert met B_2 hoort de trillingsmode $2b(\mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_6) + a(-2\mathbf{e}_7 + \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_4)$; bij A_1 horen de trillingsmodes $\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_4$ en $\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_6 - 2\mathbf{e}_9$. $\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_4$ komt overeen met een trilling waarbij ZS vast blijft en H_1, H_2 in tegengestelde richting trillen; $\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_6 - 2\mathbf{e}_9$ komt overeen met een trilling van de drie atomen in de z-richting waarbij de fase van Z tegengesteld is aan die van H_1, H_2 en de amplitude twee maal zo groot is. Merk op dat voor elk van drie trillingsmodes geldt dat het zwaartepunt van het molecule op zijn plaats blijft en het impulsmoment nul is.