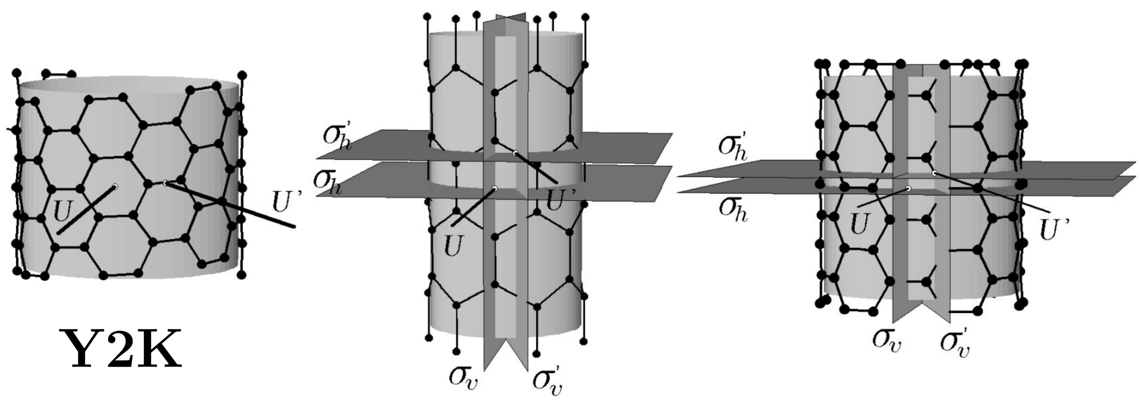
O SIMETRIJI U KVANTNOJ NERELATIVISTIČKOJ FIZICI

M. Damnjanović



Y2K

FIZIČKI FAKULTET, Beograd 2000.

UVOD

Zahvaljujući metodu dedukcije, koji precizno izdvaja relevantne karakteristike objekta izučavanja i dozvoljava jasnu interpretaciju rezultata, simetrija je danas jedan od najvažnijih koncepata fizike. Tehnika njene primene povezuje različite grane fizike, nudeći jedinstveni pogled na niz inače raznorodnih fenomena. Tako istaknuto mesto koncept duguje značaju koji simetrija ima kao *fizička osobina prostor-vremena i proučavanog sistema*. Tokom razvoja moderne fizike upravo ova osobina se sve više pokazuje kao suštinska. Dovoljno je shvatiti da masa i spin, dve suštinske karakteristike fizičkih sistema, svoje strogo objašnjenje nalaze u simetriji.

Simetrijska razmatranja zahtevaju primenu metoda teorije grupa, jedne od najznačajnijih oblasti savremene matematike. Istovremenost pojave simetrijskog koncepta u fizici i odgovarajuće tehnike u matematici podsećaju na sličan istorijat druge velike ideje fizike: neprekidnost prirodnih pojava je, da bi se precizno formulisala, zahtevala razvoj matematičkog aparata analize[1]. Mnogi, čak i relativno složeni problemi mehanike, rešavani su i ranije zahvaljujući intuiciji fizičara, ali je analiza bila neophodna za suštinsko razumevanje principa mehanike. Bez nje, onu, tako prirodnu predstavu promene, evolucije, nije moguće operacionalizovati. Izučavajući ove pojmove, Njutn (*Newton*) je počeo novu etapu u fizici, ali i u matematici. Tako se, i kroz neprekidnost, i kroz simetriju pokazalo prožimanje fizike i matematike, nastalo već u zajedničkom korenu, antičkoj geometriji. Galilejev (*Galileo*) opis ove veze je: "Knjiga prirode je pisana jezikom matematike".

Prva direktna simetrijska razmatranja u fiziku unosi ispitivanje minerala. Karakteristični oblici pojedinih kristala su oduvek privlačili pažnju naučnika. Kepler je 1611. razmišljao o uzroku koji dovodi do uvek iste forme snežnih pahulja, a precizne odnose medju uglovima različitih strana minerala Delil (*Delisle*) navodi 1783. Kraj 18. i početak 19. veka donosi ozbiljne nagoveštaje atomske fizike; klasična ideja o elementarnim delovima materije radom Daltona, Avogadroa, Berceliusa i drugih počinje da poprima danas poznati oblik. Pojam strukture materije dobija značenje rasporeda različitih atoma. U ovakvom miljeu pravilni oblici minerala više nisu prepušteni samo divljenju geologa, i postaju izazov za novu teoriju. Naši prethodnici iz zore atomistike nepogrešivo su pretpostavili da spoljni oblici odražavaju raspored, tada samo naslućivanih, delića materije. U stvari, uočene zakonitosti kod minerala su i bile jedan od pokretača razvoja ideje o atomima. Nakon zapažanja celobrojnih odnosa elemenata pri stvaranju jedinjenja, Dalton je, slušajući lekcije iz mineralogije, saznao za celobrojne veze medju uglovima

[1]Termin $\sigma\upsilon\mu\mu\varepsilon\tau\rho\iota\alpha$ u grčkom jeziku označava sklad, pravilni odnos; neprekidnost, tj. kontinuitet dolazi od pojma $\kappa o\iota\nu o\varsigma$, zajedničko činjenje (sa starijom verzijom $\sigma\upsilon\nu\varepsilon\kappa\varsigma$).

kristalnih strana, što ga je konačno uverilo u opravdanost hipoteze o atomima. Nametnuo se problem odredjivanja mogućih struktura, i njihove veze sa vidljivim oblicima. *Sadržaj* opažanja, pravilnost oblika, trebalo je, nekim *metodom*, pretvoriti u zaključak o strukturi, još jednom potvrdjujući dalekosežnost nove teorije.

Metod je nastajao istovremeno, ali potpuno nezavisno, u susedstvu — matematici. Čekalo se samo da se sadržaj izrazi u pogodnoj *formi*, da se intuitivno shvatanje pravilnosti oblika precizno opiše kao skup simetrija, operacija koje dati oblik prevode u samog sebe. Uzastopno izvodjenje dve ovakve operacije je nova simetrija, i sve one čine algebarsku strukturu grupe, koju tih decenija matematičari intenzivno proučavaju. Radovi Ojlera (*Euler*) 1761. i Lagranža (*Lagrange*) i Vandermondea (*Vandermonde*) 1771. implicitno koriste ovu strukturu, dok je Evariste Galoa (*Evariste Galois*, 1811-1832) prvi upotrebio naziv *grupa* 1830., a u oproštajnom pismu (napisano veče pred dvoboj u kome je poginuo) Gausu (*Gauss*) i Jakobiju (*Jacobi*) dao mnoge važne rezultate. Intenzivno izučavanje tokom celog 19. veka (Gaus, Abel, Kartan (*Cartan*), Klajn (*Klein*), Žordan (*Jordan*) i drugi najpoznatiji matematičari) dovodi do savremene aksiomatizacije (1854. Kejli (*Cayley*) za apstraktnu grupu, a 1895. Li (*Lie*) za grupe sa analitičkim osobinama). Na samom početku 20. veka Frobenius stvara, za fiziku najvažniju, teoriju reprezentacija grupa. Teorija grupa je i danas jedna od vodećih disciplina matematike.

Klasifikacija kristalnih struktura svela se na klasifikaciju grupa simetrije kristala. Samo uz pomoć teorije grupa, 1890., nezavisno jedan od drugoga, Fedorov i Šenflis (*Schönfliess*), završavaju klasifikaciju svih 230 mogućih geometrija kristalnih rešetki. Prva eksperimentalna tehnika kojom se neposredno proverava struktura kristala pojavila se tek 1912. godine (difrakcija rendgenskog zračenja, Laue, Fridrih (*Friedrich*) i Kniping (*Knipping*))!

O dubini i obimu prodora ovog koncepta svedoči povezanost simetrije sa zakonima održanja. Od metafizičkih nagoveštaja o nepromenljivosti kretanja, do precizne formulacije zakona održanja energije i mase (sredina prošlog veka) proteklo je više od 2000 godina. Povezivanje zakona održanja i simetrije savremeni oblik je dobilo već 1918. u radovima E. Neter (*Noether*). Kvantna teorija, stvorena dvadesetih godina ovog veka, istraživanjima Planka (*Planck*), Ajnštajna (*Einstein*), Šredingera (*Schrödinger*), Paulija, Hajzenberga (*Heisenberg*), Eugena Vignera (*Wigner*) i niza drugih fizičara, ali i matematičara fon Nojmana (*von Neumann*) i Vajla (*Weyl*), dodatno je podstakla razvoj koncepta simetrije, uvodeći najpogodniju formu — *reprezentacija grupe simetrije u prostoru stanja sistema*. To je omogućilo sistematsko korišćenje zakona održanja kroz upotrebu dobrih kvantnih brojeva. Stvorena je podloga za predstojeću primarnu ulogu simetrije u teoriji elementarnih čestica od pedesetih godina ovog veka: raspoložive eksperimentalne činjenice ukazuju na neke zakone održanja, a time se izdvaja minimalna grupa simetrija sistema; zatim se traže grupe koje sadrže minimalnu, i prave različiti teorijski modeli, u čijoj je osnovi neka od takvih grupa. Zatvarajući još jedan od krugova razvoja saznanja, ovakav koncept simetrije podseća na svoj početak: u mnoštvu dostupnih informacija o elementarnim česticama ili mineralima, simetrija je ključ za njihovu klasifikaciju i objašnjenje. No, došlo je do kvalitativne promene. U kristalografiji su dozvoljene operacije bile poznate i lako shvatljive (rotacije, translacije, refleksije); trebalo ih je samo razvrstati u različite grupe. Današnja fizika ugradjuje simetrije koje je nemoguće interpretirati izvan konteksta teorije; suština problema nije klasifikacija raspoloživih operacija, već odredjivanje skupa mogućih simetrija. Tako je od ponekad i neuočenog pratioca zakona održanja, simetrija postala okosnica opisa elementarnih interakcija.

Koncept neprekidnosti, stvoren u fizici, indukovao je u matematici analizu, koja se danas razvila u niz matematičkih grana; mnoge od njih su, bar za sad, vrlo udaljene od fizike, no vezu ostvaruje možda najznačajniji pravac matematike uopšte, diferencijalna geometrija. U njenom razvoju, bilo konkretnim rezultatima, bilo unošenjem niza ideja, učestvuju i fizičari. Čak i pojave koje se odlikuju različitim vrstama prekidnosti, singularitetima, izuzetno mnogo proučavane u savremenoj fizici, opisuju se jezikom diferencijalne geometrije. Identična je situacija i sa simetrijom. Neka od simetrijskih razmatranja mogu se izvršiti bez posebnih predznanja, ali za pravo razumevanje nužan je aparat teorije grupa. Potrebe fizike su uticale na formiranje i razvoj ove grane matematike, od njenog nastanka do danas. Stoga ona daje odgovarajući okvir i za izučavanje procesa kod kojih očekivana simetrija odsustvuje, ili kako se kaže, narušena je. To su, po pravilu, upravo isti oni procesi kod kojih se javljaju izvesni diskontinuiteti, čime se još jednom manifestuje duboka povezanost osobina simetrije i neprekidnosti procesa. Zato ne čudi preplitanje teorije grupa i analize u okviru diferencijalne geometrije: velike fizičke ideje, neprekidnost i simetrija, susreću se u geometriji, od koje su nastale i matematika i fizika. Tako se zatvara još jedan krug saznanja. Ovog puta možda veliki krug.

Simetrijska razmatranja se vrše u svim oblastima fizike, ali i na svim nivoima razrade fizičkih problema. Tehnički, pri različitim računima, korišćenje simetrije dovodi do znatnih uprošćavanja, što se često čini implicitno, bez pozivanja na aparat teorije grupa. Sa druge strane, primarni postulat fizike, princip relativnosti (Galilejev ili Ajnštajnov), zapravo je tvrdjenje o simetriji prostor-vremena, a njegov fizički smisao i dalekosežne posledice najjasnije se shvataju uz doslednu grupno-teorijsku analizu. Stoga je konceptu simetrije mogu̧e prići kroz odredjeni sistem, tj. izučiti različite aspekte primene simetrije u okviru jedne od grana fizike (npr. u fizici kondenzovanog stanja, molekula ili elementarnih čestica).

Nasuprot ovome, sve su češći pokušaji da se izdvoji ono što je zajedničko za simetrijska razmatranja u svim oblastima fizike, ili njihovoj većini. Za takva nastojanja je važno da se postavka fizičkog problema standardizuje u formi pogodnoj za simetrijski tretman. Sledeći takvu koncepciju, tekst počinje uvodjenjem simetrijski adaptiranih bazisa i ireducibilnih tenzorskih operatora, ukazujući na grupne projektore, kao osnovu simetrijskih tehnika.

Dalje je u prvoj glavi razmatran način primene simetrije u aproksimativnim metodima fizike. U hijerarhiji fizičke teorije, sadržaj (opšti principi i činjenice koji učestvuju u postavci) problema, i metod koji dovodi do zadovoljavajućeg rešenja, mnogostruko su povezani. Retki su slučajevi kada se na osnovu prvih principa odgovor dobija direktno. Nužan medjukorak obično je niz aproksimacija, koje sa svoje strane predstavljaju nove fizičke uslove, zakonitosti, i faktički redefinišu problem. Veština dedukcije u fizici i jeste to što je konačni (rešivi, ali višestruko modifikovani) problem, bar za pitanja na koja se traže odgovori, približan početnom. I to je tačka u kojoj simetrija ima neprocenjivu vrednost, upravo zbog svoje egzaktnosti. U standardnim tehnikama aproksimacije se vrše tako da se simetrija sačuva, pa dobijeni rezultati tačno opisuju karakteristike fenomena koje zavise samo od simetrije. No, te karakteristike su dovoljno brojne i značajne, da u mnogome odredjuju pojavu, obezbedjujući joj kvalitativno dobar opis. (Na primer, pretpostavka da interakcija dve čestice zavisi samo od njihovog rastojanja, tj. da su sve rotacije simetrije takvog sistema, dovoljna je da se dobiju selekciona pravila za kvantne prelaze u takvom sistemu, nezavisno od toga da li je interakcija Kulonova (*Coulomb*), harmonijska ili komplikovanija. Ili, činjenica da su čestice nekog sistema medjusobno identične, tj. da je svako njihovo permutovanje jedna operacija simetrije, dovodi do niza tačnih zaključaka o ponašanju takvog sistema, bez obzira na druge detalje važne za opis sistema.)

U drugoj glavi su razmotrene neke od najvažnijih nerelativističkih simetrija fizičkih sistema. U stvari, ne postoji principijelna razlika u primeni simetrije u relativističkoj i nerelativističkoj fizici; radi se samo o drugim prostorno-vremenskim grupama simetrije, tj. grupama inercijalnih transformacija, a njihov izbor odredjuje da li se opisuju relativistički fenomeni ili ne. Permutaciona simetrija sistema identičnih čestica, uzrok podele na fermione i bozone, takodje je proučena u okviru ove glave, zbog specifične veze sa geometrijskim simetrijama.

Tema treće glave je harmonijska aproksimacija, polazište većine fizičkih modela. Pokazano je kako simetrija, sa jedne strane, tehnički olakšava rešenje problema, a, sa druge, dovodi do klasifikacije sopstvenih stepeni slobode. Slika u kojoj su ovakve oscilacije, oko nekog minimuma potencijalne energije, upravo elementarne pobude, u krajnjoj liniji dovodi do pojma kvazi-čestica (a u okviru kvantne teorije polja i elementarnih čestica), te opisani metod daje njihovu simetrijsku klasifikaciju.

U okviru koncepta simetrije pojavio se pojam njenog narušenja. Kao i normalne oscilacije, ova pojava se uočava u nizu oblasti fizike: fazni prelazi kod kristala, narušenje simetrije u teoriji polja, Jan-Telerov (*Jahn, Teller*) efekat kod molekula, sve su to različiti vidovi istog procesa, spontanog narušenja simetrije, opisanog u četvrtoj glavi.

Konačno, u poslednjoj glavi je pokazano kako adijabatska aproksimacija, takodje jedno od opštih mesta fizike, rešava problem razdvajanja elektronskog i jonskog podsistema kod molekula i kristala. U takvom pristupu moguće je izvodjenje nekih zaključaka na osnovu simetrije u sasvim opštem razmatranju: nepresecanje energetskih nivoa iste simetrije, gruba podela translaciono invarijantnih sistema na provodnike i izolatore.

Već je naglašen značaj teorije grupa i njihovih reprezentacija za razumevanje i korišćenje simetrije u fizici. Da bi se olakšalo praćenje teksta, najvažniji matematički pojmovi i rezultati su pobrojani u dodacima. Većinom su ti pojmovi sasvim jednostavni, no, to se ne može reći za teoriju indukcije, posebno kada su nephodne projektivne reprezentacije. Stoga je u osnovnom tekstu učinjen pokušaj da se ove tehnike izbegnu ako postoji alternativa; u ostalim slučajevima njihovo pominjanje se svelo na uputstvo, posebno zainteresovanom čitaocu, kako da se primene. Ovakav zadatak je sproveden po cenu izostavljanja prikaza Galilejeve grupe. Time se gubi simetrijski pristup masi i spinu u nerelativističkoj fizici, pa, konačno, i odgovarajuća klasifikacija jednačina kretanja nerelativističkih elementarnih sistema. No, analogno korišćenje Puankareove (*Poincare*) grupe u, za fiziku relevantnijoj, relativističkoj teoriji, začudo je jednostavnije, te se čini da je ovaj kompromis opravdan (planira se da se u drugoj svesci iste serije prikažu relativistički aspekti).

Mnogo pročitanih (i poneka napisana) stranica iz ove oblasti sve više mi otkrivaju da je simetrija najdublje shvaćena u knjigama Lava Landaua i Eugena Vignera. Stoga sam napravio uzak izbor problema, pokušavajući da ih predočim u *njihovom smislu*, a *svojim jezikom*. Različita ograničenja (vremena, polica za knjige, interesa, ukusa...) nametnuli su ovakvu selekciju sadržaja, potvrdjujući, verovatno, da pisanje (i govor) sigurno svedoči o subjektu, a tek ponekad i o objektu. Izlaganje je stavljeno u kontekst očekivanog predznanja studenata fizike završnih godina. Studentima, kao i kolegama J. Konstantinoviću, Z. Radoviću, I. Miloxević, B. Vujičiću, S. Vojvodiću i I. Ivanoviću, želim da zahvalim na strpljenju i primedbama koje su iskazali pri čitanju pojedinih delova teksta.

Sadržaj

Glava 1

PRINCIPI PRIMENE SIMETRIJE

Brojne grane fizike, čitavim spektrom metoda, istražuju različite objekte (atomi, molekuli, kristali, elementarne čestice, itd.). Jedno od retkih zajedničkih mesta svima njima je postavka problema, u kojoj se predmet ispitivanja karakteriše skupom relevantnih parametara, čime se dobija pojam stanja sistema. Skup svih stanja se naziva *prostor stanja*. Evolucija, odnosno *dinamika* sistema, obično najvažniji cilj istraživanja, jeste promena stanja tokom vremena. Tako se za svako početno stanje x, evolucijom dobija u prostoru stanja kriva $x(t)$, za koju je $x(0) = x$. Način promene je definisan osnovnim postulatima fizike, obično u formi varijacionog principa. Iz ovakve postavke se pojavljuje veličina koja opisuje dinamiku, odnosno, sadrži sve informacije o njoj.

Kvantna mehanika, teorija tipična u navedenom smislu [3, 17], za prostor stanja postulira neki vektorski prostor, $\mathcal{H}$, a dinamiku zadaje operatorom H ovoga prostora (hamiltonijan). U drugim teorijama $\mathcal{H}$ i H mogu biti drugačije prirode (npr. u klasičnoj mehanici prostor stanja, tzv. fazni prostor, ne mora biti vektorski prostor); ipak, pri lokalnom razmatranju uvek se pojavljuju isti entiteti, te se uvedena slika uvek može primeniti, bar lokalno. Stoga će u daljem tekstu biti pretpostavljen ovakav model, i fizički sistem će biti identifikovan sa parom $(\mathcal{H}, H)$.

Drugo opšte mesto fizičkih teorija je uočavanje i eksplicitna upotreba simetrija sistema. Upravo uvedeni model opisa sistema, $(\mathcal{H}, H)$, dozvoljava da se intuitivne pretpostavke precizno iskažu na jeziku reprezentacija grupa, i time stvori jedna važna tehnika za rešavanje niza fizičkih problema.

1.1 Simetrija fizičkog sistema

Pod simetrijama se podrazumevaju transformacije prostora stanja, bijekcije ovog skupa na sebe, pri kojima dinamički zakon sistema ostaje nepromenjen: ako je pod dejstvom transformacije simetrije stanje x preslikano u stanje y, tada se i kriva evolucije iz x preslikava, simetrijom, u krivu evolucije iz y, tj. u svakom trenutku vremena se $x(t)$ preslikava u $y(t)$. Odmah se zaključuje da skup simetrija čini grupu (§ A.1.1): sukcesivno izvodjenje transformacija simetrije je očigledno opet simetrija (zatvorenost); transformacije, budući da su to preslikavanja, imaju asocijativnu kompoziciju; identična transformacija je automatski simetrija, pa je to i transformacija inverzna simetriji. U razmatranom modelu, kada je $\mathcal{H}$ vektorski prostor, a evolucija odredjena operatorom H, ovako shvaćena grupa simetrije se naziva *grupa simetrije sistema*, a invarijantnost evolucije se ogleda u komutiranju sa H. Tako se dolazi do tehnički pogodne definicije simetrije sistema $(\mathcal{H}, H)$: to je grupa G čije se dejstvo (§ A.1.4) u $\mathcal{H}$ zadaje operatorima $D(G)$ koji komutiraju sa H, $[D(g), H] = 0, \quad \forall g \in G$. Često se kaže da je to grupa simetrije operatora H. U nastavku će trojka $(\mathcal{H}, H, D(G))$ biti korišćena za zadavanje fizičkog sistema sa simetrijom G.

Fizička teorija u okviru koje se vrše razmatranja, obično, unapred odredjuje neku grupu transformacija $\mathcal{G}$, čiji su elementi kandidati za simetrije sistema, npr. Euklidova grupa geometrijskih transformacija (§ 2.1.3) u nerelativističkoj mehanici, ili različite ortogonalne i unitarne grupe u teoriji elementarnih čestica. U okviru takvog modela za grupu simetrije G uzima se najveća podgrupa u $\mathcal{G}$, čiji je svaki element simetrija sistema u navedenom smislu. Jasno, tako odredjena grupa simetrije je presek grupe svih simetrija sistema i grupe $\mathcal{G}$. Pri tome ostaje mogućnost da neke simetrije sistema, koje ne pripadaju grupi $\mathcal{G}$, a često i nemaju očiglednu fizičku interpretaciju, ne budu uključene u grupu simetrije. (Nešto kasnije će biti objašnjeno kakve fizičke posledice ima ovakvo izostavljanje.)

Često se razmatra i *grupa simetrije stanja*. To je podgrupa u G koja ostavlja stanje (tj. vektor iz $\mathcal{H}$) nepromenjenim, odnosno mala grupa tog stanja (§ A.1.4). Različita stanja istog sistema mogu imati različitu simetriju.

U kvantnoj mehanici je stanje normirani vektor, a transformacije simetrije moraju ostavljati nepromenjenim moduo skalarnog proizvoda. Vigner je pokazao (§ B.2) da ovaj zahtev povlači unitarnost ili antiunitarnost operatora dejstva grupe. Time se dejstva ograničavaju na linearne ili antilinearne *reprezentacije* grupe u prostoru stanja (§ A.2). Kako svi normirani vektori koji se razlikuju samo za fazni faktor opisuju isto stanje, trebalo bi raditi sa *projektivnim* unitarnim ili antiunitarnim reprezentacijama (§ A.2.7), odnosno sa reprezentacijama natkrivajuće grupe. Osim vremenske inverzije (§ 2.6.1), u nastavku korišćene simetrije mogu se proučavati na najjednostavnijem nivou unitarnih reprezentacija. Kada je G Lijeva grupa (§ A.1.2), njeni se generatori, $\{l_1, \ldots, l_n\}$, reprezentuju u $\mathcal{H}$, i obično interpretiraju kao neke fizičke veličine. Komutiranje grupe sa H ekvivalentno je komutiranju ovih reprezentujućih operatora: $[D(l_i), H] = 0, \quad i = 1, \ldots, n$.

Tehnički gledano, simetrija omogućuje smanjenje složenosti problema. Na primer, moguće je izvršiti fizičku analizu na pogodno odabranom delu prostora stanja, pa zaključke uz pomoć simetrije izvesti i za ostala stanja. No, najčešće korišćenje simetrija i najvažnija fenomenološka manifestacija njihovog postojanja su zakoni održanja. Komutatacija simetrija sa hamiltonijanom, ukazuje da se tokom evolucije održavaju osobine kvantnog sistema izražene preko simetrija ili generatora (za Lijeve grupe). Na primer, ako je stanje sistema bilo svojstveno za neki od operatora simetrije, tokom cele evolucije će njegovo stanje stalno ostati svojstveno za isti taj operator, i to uz istu svojstvenu vrednost: $D(g)| \, x(t) \, \rangle = \alpha | \, x(t) \, \rangle$. Naravno, ukupan broj nezavisnih zakona održanja povezan je sa strukturom grupe simetrije. Ukoliko G nije maksimalna grupa simetrije sistema, uočavaju se dodatni zakoni održanja, koje je nemoguće izvesti iz G.

1.2 Standardna stacionarna stanja

Zbog unitarnosti $D(G)$, postojanje invarijantnih potprostora znači razloživost reprezentacije (§ A.2.2). Tako je $D(G)$ ortogonalni zbir ireducibilnih komponenti, $D(G) = \oplus_{\mu=1}^{s} a_\mu D^{(\mu)}(G)$, a ceo prostor $\mathcal{H}$ ireducibilnih potprostora: $\mathcal{H} = \oplus_\mu \mathcal{H}^{(\mu)} = \oplus_{\mu t_\mu} \mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$. U *standardnom bazisu* [8] $\{|\ \mu t_\mu m\ \rangle | \mu = 1, \dots, s; t_\mu = 1, \dots, a_\mu; m = 1, \dots, n_\mu\}$ (n_μ je dimenzija μ-te ireducibilne reprezentacije) prostora $\mathcal{H}$, matrice operatora reprezentacije $D(G)$ su blok-dijagonalne, sa ireducibilnim reprezentacijama kao submatricama na dijagonali:

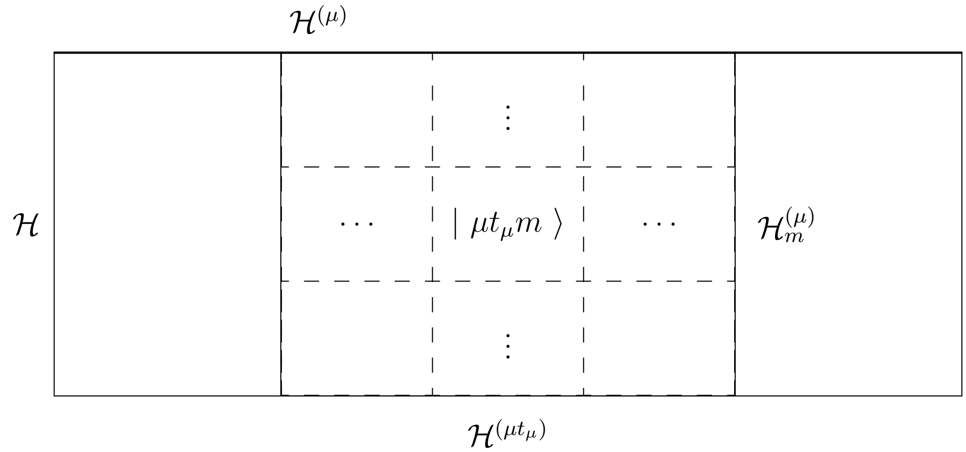
$$D(g)|\ \mu t_\mu m\ \rangle = \sum_{m'} D^{(\mu)}_{m'm}(g)|\ \mu t_\mu m'\ \rangle. \tag{1.1}$$

Za standardni bazis će se podrazumevati ortonormiranost.

Poznato je iz linearne algebre, da su, kada dva operatora komutiraju, svojstveni potprostori jednog operatora istovremeno i invarijantni za drugi operator. To omogućava korišćenje simetrije pri odredjivanju stacionarnih stanja, onih koja se tokom vremena opservabilno ne menjaju. Posledica navedenog teorema je da su svojstveni potprostori H invarijantni za sve operatore $D(G)$, i sadrže odredjeni broj ireducibilnih potprostora za $D(G)$. Zato se standardni bazis (1.1) može odabrati tako da njegovi vektori budu stacionarni, tj. svojstveni za H. Ista ireducibilna reprezentacija može se, u opštem slučaju, pojaviti u različitim svojstvenim potprostorima H, tako da se svojstvene vrednosti H mogu numerisati indeksima reprezentacija: $H|\ \mu t_\mu m\ \rangle = E_{\mu t_\mu}|\ \mu t_\mu m\ \rangle$.

Izvedeni zaključak ima višestruki značaj. Odmah se uočava mogućnost pojednostavljenja (smanjenjem dimenzije) svojstvenog problema H. To se postiže *metodom grupnih projektora*. Medju operatorima $P^{(\mu)}_{mm'} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_\mu}{|G|} \sum_{g \in G} d^{(\mu)*}_{mm'}(g) D(g)$, koji svi komutiraju sa H, su i projektori $P^{(\mu)}_{mm}$ na a_μ-dimenzionalne potprostore $\mathcal{H}^{(\mu)}_m \stackrel{\text{def}}{=} \text{spann}(\{|\ \mu t_\mu m\ \rangle | t_\mu = 1, \dots, a_\mu\})$. U $\mathcal{H}^{(\mu)}_1$ moguće je tako naći zajednički svojstveni bazis za H i $P^{(\mu)}_{11}$, tj. svojstveni bazis za redukovani operator $P^{(\mu)}_{11} H$, i to su stacionarni standardni vektori $\{|\ \mu t_\mu 1\ \rangle | t_\mu = 1, \dots, a_\mu\}$, iz kojih se delovanjem operatorima $P^{(\mu)}_{m1}$ dobija ostatak bazisa, uz iste svojstvene vrednosti. U ponudjenom algoritmu se za svako μ rešava po jedan a_μ-dimenzionalni svojstveni problem, umesto jednog veće dimenzije.

Potprostor $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ obrazovan vektorima $|\ \mu t_\mu m\ \rangle$ ($m = 1, \dots, n_\mu$, t_μ fiksirano) je ireducibilan za dejstvo grupe. Svi njegovi vektori su svojstveni za H, odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti $E_{\mu t_\mu}$, te H u $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ deluje kao konstantni operator. Drugim rečima, kako je $P^{(\mu t_\mu)} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m |\ \mu t_\mu m\ \rangle\langle\ \mu t_\mu m\ |$ projektor na ovaj potprostor, u $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ je dejstvo operatora H u stvari $P^{(\mu t_\mu)} H = E_{\mu t_\mu} P^{(\mu t_\mu)}$. Sada je jasno da se dinamika sistema redukuje u ireducibilnim potprostorima grupe: sva stanja iz istog ireducibilnog potprostora evoluiraju na isti način, i pri tome ne napuštaju taj potprostor. Ovo je, zapravo, forma izražavanja zakona održanja, no daje mogućnost da se i same dinamičke jednačine nadju uz pomoć simetrije. Ako je G grupa simetrije sistema, svaki mogući dinamički zakon mora omogućiti razlaganje prostora stanja na ireducibilne potprostore za grupu G, tako da se evolucija odvija unutar tih potprostora na opisani način. U principu je iz ovakvog uslova moguće izvesti i same jednačine kretanja elementarnih sistema (kada je grupa simetrije a priori jednaka grupi relativiteta), što poseban značaj ima u



Slika 1.1: Prostor stanja $\mathcal{H}$ se razlaže na višestruke ireducibilne potprostore $\mathcal{H}^{(\mu)}$. Svaki $\mathcal{H}^{(\mu)}$ se ortogonalno razlaže na dva načina: na a_μ izomorfnih n_μ dimenzionalnih ireducibilnih potprostora $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$, $t_\mu = 1, \ldots, a_\mu$ (vertikalni), ili na n_μ izomorfnih a_μ dimenzionalnih potprostora $\mathcal{H}_m^{(\mu)}$, $m = 1, \ldots, n_\mu$ (horizontalni). Presek svakog $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ sa svakim $\mathcal{H}_m^{(\mu)}$ je jednodimenzionalan, obrazovan standardnim vektorom $|\ \mu t_\mu m\ \rangle$.

okviru relativističke kvantne teorije polja. Na isti način se može shvatiti Blohov (*Bloch*) teorem (§ 2.3.1) ili Šredingerova jednačina slobodne čestice (§ 2.1.3).

U vezi sa svojstvenim potprostorima H često se postavlja pitanje kada su oni ireducibilni invarijantni potprostori za grupu simetrije. Suštinski deo odgovora daje

Teorem 1 *Svojstveni potprostori H su ireducibilni potprostori grupe G_H svih unitarnih operatora u $\mathcal{H}$ koji komutiraju sa H.*

Naime, ako je $\mathcal{H}_i$ i-ti svojstveni potprostor za H, i $U(\mathcal{H}_i)$ skup unitarnih operatora iz $\mathcal{H}$ koji u $\mathcal{H}_i^\perp$ deluju kao jedinični operatori, postaje jasno da je $G_H = \otimes_i U(\mathcal{H}_i)$. Pri tome su grupe $U(\mathcal{H}_i)$ sopstvene ireducibilne reprezentacije, pa su i ireducibilne reprezentacije grupe G_H (tj. za svako i je $D(U_1, \ldots, U_i, \ldots) = 1 \otimes \cdots \otimes 1 \otimes U_i \otimes 1 \cdots = U_i$ jedna ireducibilna reprezentacija grupe G_H).

Na osnovu teorema se zaključuje da ukoliko postoji *slučajna degeneracija*, tj. svojstveni potprostori H nisu ireducibilni za G, u $\mathcal{H}$ postoje unitarni operatori koji komutiraju sa H a ne reprezentuju elemente G, pa se može govoriti o nemaksimalnosti uočene grupe simetrije. Tada je grupu moguće dopuniti nekim novim simetrijama, koje ne moraju imati očigledan fizički smisao, tako da svojstveni potprostori H postanu ireducibilni za G. U tom smislu se uvodi *postulat ireducibiliteta*, kojim se zahteva ireducibilnost svojstvenih potprostora H. Poznati su primeri slučajne degeneracije, koja je posledica neuočene simetrije H: Kramersova degeneracija fermiona (§ 2.6.1, nastala zbog vremenske inverzije) ili degeneracija u Kulonovom polju, veća nego što zahteva sferna simetrija (kada se, a posteriori, otkriva dodatna simetrija izomorfna sa $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, § 2.1.2).

1.3 Transformaciona svojstva operatora

Operatori u $\mathcal{H}$ i sami obrazuju vektorski prostor $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ (ponekad nazivan superprostor). Kao što je poznato, svaki operator u $\mathcal{H}$, odredjuje linearni operator u dualnom prostoru, pa i u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$. Ako je početni operator unitaran, takav je i generisani operator u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ (u odnosu na skalarni proizvod $(A, B) \stackrel{\text{def}}{=} Tr(A^\dagger B)$). Postaje jasno da reprezentacija $D(G)$ grupe G u $\mathcal{H}$ zadaje reprezentaciju $\hat{D}(G)$ u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ (homomorfizam se lako proverava) definisanu delovanjem na proizvoljni operator A: $\hat{D}(g)A \stackrel{\text{def}}{=} D(g)AD^{-1}(g)$. Lako se pokazuje da je $\hat{D}(G)$ ekvivalentna direktnom proizvodu reprezentacija (§ A.2.5) $D(G) \otimes D^*(G)$.

Procedura razlaganja reprezentacije $\hat{D}(G)$ se može izvesti na standardni način, čime se operatorski prostor dekomponuje na medjusobno ortogonalne, invarijantne za $\hat{D}(G)$ potprostore; to su tzv. *tenzorski potprostori*. Operatori iz ireducibilnih tenzorskih potprostora se nazivaju *ireducibilni tenzori* (preciznije, ireducibilni tenzorski operatori). Komponente tenzorskog operatora su operatori nekog bazisa tenzorskog potprostora. Jasno je da se metodom grupnih projektora može naći standardni tenzorski bazis: ako je $\hat{D}(G) = \oplus_{\mu=1}^{s'} a'_\mu D^{(\mu)}(G)$, standardne tenzorske komponente u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ su bazis $\{A_m^{(\mu t_\mu)} | \mu = 1, \dots, s'; t_\mu = 1, \dots a'_\mu; m = 1, \dots n_\mu\}$, koji, za unapred izabrane matrice ireducibilnih reprezentacija grupe G, zadovoljava relacije tipa (1.1):

$$\hat{D}(g)A_m^{(\mu t_\mu)} = D(g)A_m^{(\mu t_\mu)}D^{-1}(g) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(\mu)}(g)A_{m'}^{(\mu t_\mu)}. \tag{1.2}$$

Poznavanje standardnih tenzorskih komponenti omogućava, izmedju ostalog, nalaženje operatora sa zadatim transformacionim svojstvima. Naime, često se tenzorske osobine odredjene fizičke veličine znaju (npr. invarijantna je pri delovanju grupe, ili se transformiše po drugoj poznatoj reprezentaciji). Neposredno sledi da je ona linearna kombinacija standardnih tenzorskih komponenti sa istim svojstvima, pri čemu koeficijente u kombinaciji odredjuje konkretni fizički problem. Tako se i ugaoni moment i magnetno polje transformišu po istoj ireducibilnoj reprezentaciji grupe $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$, no koeficijenti u kombinacijama standardnih tenzorskih operatora ove reprezentacije su im različiti.

Za proizvod operatora važi: $D(g)A_m^{(\mu)}B_n^{(\nu)}D^{-1}(g) = \sum_{m'n'} D_{m'm}^{(\mu)}(g)D_{n'n}^{(\nu)}(g)A_{m'}^{(\mu)}B_{n'}^{(\nu)}$, pa je jasno da ovakvi proizvodi za različite m i n obrazuju invarijantni potprostor u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ u kome je dejstvo grupe opisano direktnim proizvodom reprezentacija $D^{(\mu)}(G) \otimes D^{(\nu)}(G)$. Ta reprezentacija nije ireducibilna u opštem slučaju, već se razlaže u Klebš-Gordanovu (*Clebsch, Gordan*) seriju (§ A.2.5):

$$D^{(\mu)}(G) \otimes D^{(\nu)}(G) = \oplus_\lambda a_\lambda^{\mu\nu} D^{(\lambda)}(G). \tag{1.3}$$

To pokazuje da proizvodi operatora mogu imati nova transformaciona svojstva.

U različitim oblastima fizike čest je slučaj da se simetrija sistema lako nalazi, dok je tačan oblik hamiltonijana nepoznat. To, u stvari, znači da raspoložive informacije o sistemu nisu dovoljne za potpuno odredjivanje hamiltonijana (na primer ne znaju se potencijali interakcija nekih od komponenti sistema). Tada se pristupa stvaranju modela, tj. formiranju hamiltonijana koji zadovoljava sve fizičke zahteve. Kako je simetrija poznata, a svi operatori $D(g)$ obavezno komutiraju sa pravim hamiltonijanom, odmah se zaključuje da kao modelni hamiltonijan treba odabrati neki operator koji se transformiše po jediničnoj reprezentaciji grupe, tzv. skalar grupe, što znatno smanjuje broj mogućnosti. Ako fizički argumenti ukazuju i na veličine relevantne za dinamiku, problem dobija poznatu formu: kako formirati skalar od takvih veličina. Znanje Klebš-Gordanovih serija grupe odmah pokazuje kakvi proizvodi navedenih veličina mogu biti skalari grupe. Često je u pitanju nepoznat oblik interakcije nekih podsistema, npr. interakcija dve čestice. Simetrijski zahtev da potencijal bude invarijantan pri delovanju transformacija grupe G, redukuje broj mogućih modela, a neke dodatne pretpostavke mogu čak potpuno odrediti model (tako se u fizici elementarnih čestica medju hamiltonijanima koji zadovoljavaju sve fizičke uslove, uključujući i simetrijske, za model bira onaj koji ima u izvesnom smislu najjednostavniju formu). Važan element u ovakvom pristupu je uočavanje glatkosti potencijala, što omogućava razvoj u red i aproksimaciju invarijantnim polinomom odredjenog stepena (§ 4.1). Sa stanovišta simetrije, isti tip problema se javlja kod aproksimativnih tehnika, kada je, zahvaljujući prekomplikovanosti tačnog hamiltonijana, potrebno odrediti model koji pokazuje sve važne karakteristike sistema (§ 1.7).

1.4 Vigner-Ekartov teorem

Poznavanje ireducibilnih reprezentacija grupe G, i njenog dejstva $D(G)$ u $\mathcal{H}$, time i u $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$, omogućava izvodjenje niza relevantnih fizičkih zaključaka direktno iz simetrije, tj. na osnovu matematičkog formalizma teorije grupa. Verovatno najkorišćeniji deo ovakve analize čine iskazi vezani za matrične elemente tenzorskih operatora, jer se upravo preko matričnih elemenata različitih operatora izražavaju sve merljive veličine. Kada se uoči da u $\mathcal{H}$ postoji standardni bazis, a u operatorskom prostoru bazis standardnih komponenti, te da se svaki matrični element proizvoljnog operatora može svesti na matrične elemente standardnih komponenti u standardnom bazisu, dakle, čisto simetrijske entitete, odmah postaje jasan pravac grupno-teorijskog razmatranja.

Formulacija rezultata vezanih za matrične elemente je posebno jednostavna kada G ima osobinu da su vrednosti svih koeficijenata $a_\lambda^{\mu\nu}$ u Klebš-Gordanovim serijama (1.3) ove grupe ili 0 ili 1. Pod tom pretpostavkom se dokazuje (§ B.3)

Teorem 2 *(Vigner-Ekart) Matrični element* $\langle\, \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b \,\rangle$ *je proizvod Klebš-Gordanovog koeficijenta,* $\langle\, \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b \,\rangle$*, i redukovanog matričnog elementa,* $(\alpha t_\alpha \,||\, A^{(\mu t_\mu)} \,||\, \beta t_\beta)$*, koji ne zavisi od* a*,* b *i* m*:*

$$\langle\, \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b \,\rangle = \langle\, \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b \,\rangle (\alpha t_\alpha \,||\, A^{(\mu t_\mu)} \,||\, \beta t_\beta).$$

Jasno je da zahtev $a_\lambda^{\mu\nu} = 0, 1$ obezbedjuje jednoznačnost do na fazni faktor Klebš-Gordanovih koeficijenata. U slučajevima da grupa nema traženo svojstvo, Klebš-Gordanovi koeficijenti se moraju precizirati nekom dodatnom konvencijom.

Iz Vigner-Ekartove (*Eckart*) faktorizacije sledi da odredjivanje jednog matričnog elementa $\langle\, \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b \,\rangle$ omogućava nalaženje svih ostalih $n_\alpha n_\mu n_\beta$ elementa $\langle\, \alpha t_\alpha a' \mid A_{m'}^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b' \,\rangle$

pri istim t_α, t_μ i t_β, na osnovu Klebš-Gordanovih koeficijenata: $\langle\ \alpha t_\alpha a' \mid A^{(\mu t_\mu)}_{m'} \mid \beta t_\beta b'\ \rangle = \frac{\langle\ \mu\beta\alpha a' \mid \mu m', \beta b'\ \rangle}{\langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle} \langle\ \alpha t_\alpha a \mid A^{(\mu t_\mu)}_{m} \mid \beta t_\beta b\ \rangle$. Klebš-Gordanovi koeficijenti su vezani isključivo za grupu, ne zavise od razmatranog fizičkog konteksta, te se daju tablično ili kao računarski programi. Osim toga, treba imati u vidu da se u fizici često traži samo odnos matričnih elemenata, što se odmah svodi na čisto grupno-teorijsku analizu; čak i kada je potrebno znati njihovu punu vrednost, odredjivanje jednog od njih može biti jednostavno ili čak eksperimentalno. Posebno, ako je A skalar grupe, tj. tenzorski operator jedinične reprezentacije, nalazi se $\langle\ \alpha t_\alpha a\ |A|\ \beta t_\beta b\ \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}(\alpha t_\alpha||A||\beta t_\beta)$, često korišćen iskaz da nenulti matrični elementi ovakvog operatora povezuju vektore istih transformacionih svojstava.

1.5 Selekciona pravila

Tipičan problem kvantne fizike, odredjivanje verovatnoće prelaza iz jednog u drugo stanje fizičkog sistema, svodi se na odredjivanje izvesnih matričnih elemenata, te ilustruje upotrebu Vigner-Ekartovog teorema.

Najčešća formulacija zadatka je sledeća: na sistem koji se u početnom trenutku $t = 0$ nalazi u stacionarnom stanju $\mid i\ \rangle$ svog hamiltonijana H_0, počinje da deluje perturbacija, definisana operatorom $V(t)$. Treba odrediti verovatnoću da se nakon isteka vremena τ sistem nadje u stacionarnom stanju $\mid f\ \rangle$ hamiltonijana H_0 (npr. nakon prestanka delovanja perturbacije). U svim varijantama rešavanja ovakvih problema (uključujući tu i teoriju rasejanja), pojavljuje se matrični element perturbacije u svojstvenom bazisu H_0. Na primer, u najjednostavnijem slučaju, kada je tokom razmatranog vremena perturbacija konstantna, nalazi se za verovatnoću prelaza: $W_{if}(\tau) = 2\frac{1-\cos(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\tau)}{|E_f - E_i|^2}|\langle\ f|V|i\ \rangle|^2$, gde su sa E obeležene odgovarajuće svojstvene energije hamiltonijana.

Uočavanje simetrije sistema omogućava korišćenje standardnog stacionarnog bazisa i standardnih komponenti perturbacije. Time su stvoreni tipični uslovi za primenu Vigner-Ekartovog teorema. Naročito je jednostavno, koristeći poznate Klebš-Gordanove koeficijente, odrediti kada je verovatnoća prelaza jednaka nuli, tj. kada je prelaz zabranjen. Očigledno je $W_{\beta b \mapsto \alpha a} = 0$ uvek kada je relevantni Klebš-Gordanov koeficijent jednak nuli (za sve dozvoljene tenzorske komponente perturbacije). Tako se dobijaju tzv. *selekciona pravila*. Nešto grublji uvid u selekciona pravila daje i analiza Klebš-Gordanovih serija: kada su $a^{\mu\beta}_{\alpha}$ jednaki 0, nestaju i svi odgovarajući Klebš-Gordanovi koeficijenti. Takodje treba zapaziti da prelaz može biti zabranjen zbog nekih drugih fizičkih razloga, čak i kada simetrija dozvoljava; i u ovom slučaju se može pretpostaviti da je reč o nepotpunom poznavanju stvarne simetrije sistema.

Kada je simetrija opisana Lijevom grupom, standardni stacionarni bazis je bazis težina (zajednički svojstveni bazis operatora koji reprezentuju Kartanovu podalgebru — najveći skup komutirajućih generatora), pri čemu su elementima algebre pridruženi hermitski operatori, sa obično jasnom fizičkom interpretacijom (ugaoni momenti, impulsi, itd.). Težine daju svojstvene vrednosti operatora Kartanove podalgebre, pa i tenzorski operatori nose takve grupne oznake. Na osnovu poznatog stava iz teorije reprezentacija Lijevih algebri, da se kod direktnih proizvoda reprezentacija težine sabiraju, zaključuje se da su selekciona pravila zapravo zakoni održanja pridruženih fizičkih veličina. Isti smisao imaju i u slučaju diskretnih grupa, npr. održanje parnosti pri inverziji ili nekoj refleksiji, ili održanje kvazi-impulsa, kvazi-ugaonog momenta, itd.

1.6 Simetrija složenog sistema

U kontekstu izloženog algoritma korišćenja simetrije sistema $(\mathcal{H}, H, D(G))$, preko standardnih bazisa, lako se dolazi do odgovora na pitanja vezana za slučaj kada se razmatrani sistem pojavljuje kao podsistem, tj. deo nekog većeg sistema. Odmah se razgraničavaju dve kvalitativno različite situacije. Naime, moguće je da ostatak sistema ne interaguje sa podsistemom, te da transformacije jednog dela ne utiču na drugi deo sistema. Tada je ukupna grupa simetrije direktni proizvod grupa simetrije podsistema (§ A.1.5). U slučaju kada postoji interakcija podsistema, ukupna grupa simetrije je dodatno ograničena simetrijama interakcije, te se svodi na presek grupe simetrije interakcije sa proizvodom podsistemskih grupa. Ovo je sadržaj jednog od prvih simetrijskih zapažanja u fizici; formulisao ga je Kiri (*Curie*) pre jednog veka [19], te se tradicionalno naziva *Kirijev princip*. Često se kao rezultat nalazi da ceo sistem ostaje invarijantan samo pri koincidentnom delovanju zajedničkih simetrija, pa je ukupna grupa simetrije je presek podsistemskih grupa.

1.7 Približni metodi

Neizolovan sistem koji slabo interaguje sa okolinom, obično se razmatra perturbativno, tako da se rezultati dobijeni za izolovani sistem popravljaju. Perturbativni metod se koristi i kada je dinamika izolovanog sistema isuviše komplikovana: pribegava se aproksimaciji, kojom se jedan deo hamiltonijana proglašava za osnovni (i tačno razmatra), da bi se rešenja kasnije popravljala preostalim delom. Bez obzira na razlike u postavci, formalni tretman ovih slučajeva je jednak: pojavljuje se osnovni deo hamiltonijana, H, i perturbacija, V. Jedna manifestacija Kirijevog principa je da je ukupna simetrija G' presek simetrije G osnovnog dela i simetrije perturbacije. Stoga je G' podgrupa u G (kada se razmatra izolovani sistem — drugi pomenuti slučaj — važno je odrediti H i V tako da zadrže pravu simetriju sistema; tada je $G'{=}G$, čime se a priori obezbedjuje simetrijski kvalitet i osnovnih i popravljenih rezultata). Zato višedimenzionalne ireducibilne reprezentacije G, koje su bile vezane za degeneraciju pojedinih svojstvenih vrednosti H, više ne moraju biti ireducibilne za G'. Naime, u odgovarajućem ireducibilnom potprostoru reprezentacije $D^{(\mu)}(G)$ grupa G' deluje kao sužena reprezentacija $D^{(\mu)}(G)\downarrow G'$, i može se redukovati: $D^{(\mu)}(G)\downarrow G' = \oplus_{\lambda=1}^{s} a_{\lambda}^{\mu} D^{(\lambda)}(G')$ (*relacije kompatibilnosti*, § A.2.6). Kako vektori različitih ireducibilnih reprezentacija G' ne moraju odgovarati istom svojstvenom potprostoru operatora $H+V$, relacije kompatibilnosti opisuju cepanje nivoa neperturbovanog hamiltonijana.

Veličina cepanja se računa perturbativnom tehnikom [3, 16]: V je skalarni operator grupe G', te za standardni bazis $\{|\,\mu\lambda t_\lambda l\,\rangle | \lambda = 1,\ldots,s; t_\lambda = 1,\ldots,a_{\lambda}^{\mu}, l = 1,\ldots,n_\lambda\}$ uočenog potprostora reprezentacije $D^{(\mu t_\mu)}(G)$ Vigner-Ekartov teorem daje $\langle\,\mu\lambda t_\lambda l\,|V|\,\mu\lambda' t'_{\lambda'} l'\,\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{ll'}(\mu\lambda t_\lambda||V||\mu\lambda t'_\lambda)$.

Tako se u matrici V pojavljuju skalarne podmatrice u blokovima koji povezuju ekvivalentne ireducibilne reprezentacije grupe G'. Na primer, ako je $D^{(\mu)}(G) \downarrow G' = 2D^{(\lambda)}(G') + D^{(\lambda')}(G')$, nalazi se $V = \begin{pmatrix} aI_\lambda & bI_\lambda & 0 \\ b^*I_\lambda & cI_\lambda & 0 \\ 0 & 0 & dI_{\lambda'} \end{pmatrix}$. Svojstvene vrednosti ove matrice su popravke osnovnih stanja, tj. razlike medju njima daju cepanje nivoa. U slučaju kada su ireducibilne komponente sužene reprezentacije različite, dobija se blok-dijagonalna matrica, čime je svojstveni problem pojednostavljen. Simetrijska analiza se može izvršiti i za popravke višeg reda, no, mada složeniji, ovakvi računi ne sadrže nove simetrijske tehnike, i u daljem tekstu će biti razmatrane samo perturbacije prvog reda.

Druga važna aproksimativna tehnika je varijacioni metod [3, 18]. Zasniva se na ekstremalnim osobinama svojstvenih vrednosti; npr. najniža svojstvena vrednost operatora H je istovremeno minimalna vrednost funkcionala $\varepsilon(|\, x\,\rangle) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, x\, |H|\, x\,\rangle$ (uz uslov da je $|\, x\,\rangle$ normirani vektor) na $\mathcal{H}$. Stoga je za svaki odabrani podskup $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ *probnih vektora* minimalna vrednost na $\mathcal{S}$ ovog funkcionala jedna majoranta najniže svojstvene vrednosti H (ukoliko $\mathcal{S}$ sadrži baš osnovno stanje, rezultat je egzaktan). Očigledno, vrednost metoda zavisi od izbora skupa $\mathcal{S}$. Simetrija može pomoći već u tom koraku. Na primer, poznato je da većina fizičkih sistema ima osnovno stanje potpuno simetrično, tj. invarijantno na delovanje grupe simetrije. Prema tome, za probni skup pri odredjivanju osnovnog stanja dobri kandidati su vektori iz potprostora jedinične reprezentacije u $\mathcal{H}$, odnosno *nepokretne tačke* dejstva grupe G u $\mathcal{H}$. Na sličan način se može postupiti i za ostala svojstvena stanja: kada se jednom odredi osnovno stanje, ostala su ortogonalna na njega, te se probni vektori mogu tako i odabrati. Ako postoje neki fizički razlozi da se očekuju odredjena transformaciona svojstva ovih stanja, izbor se vrši medju vektorima potprostora odgovarajuće ireducibilne reprezentacije; ukoliko nema dodatnih ograničenja na ove vektore, ceo potprostor a priori postaje skup probnih funkcija, čime se dolazi do *Rejli-Ricovog (Rayleigh, Ritz)* varijacionog metoda.

Rejli-Ricov metod je karkterističan po tome što se za skup probnih vektora uzima neki potprostor $\mathcal{H}^{pr}$ u $\mathcal{H}$. Simetrijski pristup je izuzetno olakšan ako je $\mathcal{H}^{pr}$ invarijantan, tj. $D(G)$ komutira sa projektorom P na $\mathcal{H}^{pr}$, što se uvek može postići odgovarajućim dopunjavanjem tog potprostora. Tada se u njemu dejstvo grupe redukuje u $D^{pr}(G) = PD(G)P$. Aproksimacija se vrši tako što se operator H zamenjuje u $\mathcal{H}^{pr}$ operatorom PHP, (u slučaju da je $\mathcal{H}^{pr}$ invarijantan i za H dobijeni rezultati su tačni, a ne aproksimativni). Kako $D(G)$ komutira i sa P i sa H, komutira i sa PHP, te se stvara standardna slika $(\mathcal{H}^{pr}, PHP, D^{pr}(G))$. Izborom probnog potprostora je izvršena delimična dijagonalizacija H, aproksimativnom "izolacijom podsistema", odnosno lokalizacijom interakcije u ovom potprostoru. Dalji koraci su, kao i uvek, dijagonalizacija PHP uz pomoć ireducibilnih komponenti $D^{pr}(G)$. Način aproksimacije otvara mogućnost korišćenja grupe simetrije "izolovanog" podsistema, što je očigledno maksimalna, te i najefikasnija upotreba simetrije.

Uobičajen je, medjutim, zbog tradicionalnih i eksperimentalnih razloga, prividno drugačiji metod rada, kojim se problem i svrstava u grupu varijacionih. Odabira se odredjeni skup (linearno nezavisnih) vektora $\{|\, i\,\rangle | i = 1, \ldots, n\}$, pa se $\mathcal{H}^{pr}$ konstruiše kao lineal nad njima. To znači da su probni vektori linearne kombinacije $| x \rangle = \sum_i c_i | i \rangle$, a koeficijenti c_i postaju varijacioni parametri funkcionala: $E(| x \rangle) = E(c_1, \ldots, c_n)$. Bazisni vektori $| i \rangle$ ne moraju biti ortonormirani, pa Gramova matrica $S_{ij} = \langle i | j \rangle$ ne mora biti jedinična. Označavajući sa h matricu $h_{ij} = \langle i | PHP | j \rangle$, varijacioni ekstremum (uz uslov normiranosti vektora) nalazi se iz jednačine

$$(h - \epsilon S)| x \rangle = 0 \quad \text{ili} \quad \sum_j (h_{ij} - \epsilon S_{ij}) c_j = 0, \ i = 1. \ldots, n. \tag{1.4}$$

($| x \rangle$ je reprezentovan u bazisu $| i \rangle$, to je kolona koeficijenata c_i, a varijacioni uslov je sistem homogenih jednačina po c_j). Jednačine (1.4) su ekvivalentne svojstvenom problemu operatora PHP, jer su zapravo projekcije jednačine $(PHP - \epsilon I)| x \rangle = 0$ na vektore uočenog bazisa, te su potprostori varijacionih ekstremuma istovremeno svojstveni potprostori za PHP. Zato je i procedura ista kao uobičajena. Eventualne prednosti poslednje interpretacije su u obično prirodnom izboru probnog bazisa (neki fizički razlozi nameću pretpostavku lokalizacije) i reprezentacije grupe, te mogućnosti procene "integrala prepokrivanja" S_{ij} i elemenata h_{ij} (npr. Hikelov (*Hückel*) metod molekularnih orbitala, § 5.3).

Pri proučavanju složenih sistema, kao što su molekuli ili kristali, značajno uprošćenje donosi *adijabatska aproksimacija*. Sastoji se u pretpostavci da se dinamika celog sistema može razložiti na dinamike dva podsistema, "lakog" i "teškog". Ova uslovna podela znači da je evolucija "teškog" sistema dovoljno spora, tako da ima smisla razmatrati evoluciju "lakog" pri zamrznutom "teškom". Postupak dozvoljava izuzetno efikasno korišćenje simetrije, no, zbog tehničkih specifičnosti, biće posebno razmotren (§ 5.1). Isto važi i za široko primenjivanu *harmonijsku aproksimaciju*, koja je uobičajena polazna tačka svih perturbativnih tehnika, pa i celih fizičkih modela (§ 3).

Glava 2

NERELATIVISTIČKE SIMETRIJE

Intuitivne predstave o materiji izgradjenoj od delova koji su elementarni na datom nivou posmatranja, tesno su povezane sa pojmom lokalnosti. Uobičajeno je zapravo za strukturne delove smatrati prostorno razdvojene celine, koje, svaka za sebe, zauzimaju odredjenu oblast. U kvantnoj teoriji je ovakvo shvatanje unekoliko izmenjeno, no njegova suština, prostorna-vremenska parametrizacija stanja je ostala. To znači da se stanja realnih fizičkih sistema mogu izraziti kao funkcije koordinata, pa je prostor stanja vektorski prostor funkcija na konfiguracionom prostoru. Kompletan opis realnog sistema, dakle, sistema o čijem se položaju uopšte može govoriti, zahteva ovakav prostor, i to je jedan vid *uslova lokalnosti* u kvantnoj teoriji[1]. U tom prostoru stanja grupa simetrije deluje tzv. *koordinatnom reprezentacijom*: geometrijska transformacija g je definisana na konfiguracionom prostoru (§ A.1.4), a operatori koordinatne reprezentacije su zadati dejstvom $D(g)f(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} f(g^{-1}\boldsymbol{x})$ na vektore, odnosno funkcije koordinata, $f(\boldsymbol{x})$. (Često se, zbog odredjenih pogodnosti, razmatraju i prostori koji nisu ovoga tipa, no tada se ne radi sa realnim sistemima; npr. kada je moguće, u okviru odredjenih formalnih faktorizacija, izdvojeno proučavati spinski "podsistem".)

Svaka, pa i koordinatna, reprezentacija odredjuje novu reprezentaciju u prostoru odgovarajućih operatora (§ 1.3), odnosno, način promene operatora pri dejstvu simetrija. U koordinatnoj reprezentaciji definisani su operatori položaja, impulsa, ugaonog momenta i drugih fizičkih veličina, i način promene operatora mora odgovarati iskustveno poznatim transformacijama samih veličina. Na primer, pri dejstvu rotacije $R = (R_{ij})$, koordinate $\boldsymbol{x}$ postaju $\boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x}$, te u koordinatnoj reprezentaciji mora biti zadovoljeno $\hat{\boldsymbol{x}}' = D(R)\hat{\boldsymbol{x}}D^\dagger(R) = \sum_j R_{ji}\hat{x}_j$. U tom smislu koordinatna reprezentacija odredjuje način promene operatora koordinata i drugih fizičkih veličina.

Sa druge strane, elementarni fizički sistem, tačkasta čestica, bez podsistema i interakcije, za grupu simetrije ima ukupnu grupu simetrije prostora, tj. grupu relativnosti. Prostor stanja takvog sistema mora biti ireducibilan za ovu grupu, jer bi reducibilnost, kako je objašnjeno u § 1.2, značila postojanje veće simetrije, odnosno neke neuočene strukture sistema, koja bi omogućila nove transformacije, pa i nove simetrije. Zaključuje se da prostor stanja elementarnog

[1] Precizno, uslov lokalnosti zahteva tzv. opremljeni prostor Hilbertovog prostora $L^2(\mathbb{R}^3)$ ili $L^2(\mathbb{R}^4)$, da bi se potpuno lokalizovana stanja opisala Dirakovom (*Dirac*) δ-funkcijom.

sistema mora nositi ireducibilnu, eventualno projektivnu reprezentaciju grupe relativiteta. Jasno, kandidati za opis elementarnog sistema su samo one reprezentacije u čijem se prostoru može odrediti skup opservabli sa osobinama koordinata (uslov lokalnosti). Ovakve reprezentacije su ireducibilne komponente u opštem slučaju reducibilne koordinatne reprezentacije. Uslov kojim se odredjuje pripadnost nekom od ireducibilnih potprostora, tj. uslov $P^{(\mu t_\mu)} | \psi \rangle = | \psi \rangle$ daje *jednačinu kretanja* slobodnog elementarnog sistema.

U nerelativističkoj fizici za grupu relativiteta se postulira Galilejeva grupa. Ona pored prostornih, geometrijskih simetrija (translacije i rotacije) sadrži i vremenske translacije i Galilejeve bustove (transformacije prelaza u referentni sistem koji se kreće ravnomerno u odnosu na početni; relativistička i nerelativistička fizika se na nivou simetrije razlikuju upravo po ovim transformacijama). Konstrukcija ireducibilnih reprezentacija ove grupe je težak zadatak [14], komplikovaniji nego za odgovarajuću relativističku Puankareovu grupu, te će, zbog nebitnosti pojma nerelativističke elementarne čestice, biti izostavljena[2].

Stoga će pažnja biti posvećena pre svega geometrijskim simetrijama. To su izometrične transformacije [5, 9] Euklidovog trodimenzionalnog prostora (održavaju rastojanje u $\mathbb{R}^3$), odnosno elementi proširene Euklidove grupe $E_3 = T^3 \wedge \mathrm{O}(3, \mathbb{R})$. Svaki element ovog semidirektnog proizvoda jednoznačno se faktoriše na $R \in \mathrm{O}(3, \mathbb{R})$ i $\boldsymbol{t} \in T^3$ ($\boldsymbol{t}$ je vektor iz $\mathbb{R}^3$ za koji se vrši uočena translacija), pa se transformacije Euklidove grupe zadaju u obliku $(R|\boldsymbol{t})\boldsymbol{r}' \stackrel{\text{def}}{=} R\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{t}$.

Izotropnost sistema obezbedjuje da mu je grupa simetrije najmanje $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, a homogenost i izotropnost Euklidovu grupu $T^3 \wedge \mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Samo tačkasti sistemi mogu imati simetriju Euklidove grupe, dok višečestični diskretni sistemi ne mogu biti izotropni, niti invarijantni na neprekidnu podgrupu translacione grupe T^3. Medjutim, njihova grupa simetrije može sadržati neku diskretnu podgrupu u T^3. Svaka takva podgrupa (osim $(I|0)$) je beskonačna, i zahteva periodičnost sistema u odredjenim pravcima. Stoga se diskretni višečestični sistemi klasifikuju u sledeće kategorije:

(*i*) Sistemi bez translacione simetrije (npr. molekuli). Njihova grupa simetrije je podgrupa $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$. Transformacije ovih grupa ostavljaju koordinatni početak nepokretnim, i zato se zovu *tačkaste grupe* [9, 20].

(*ii*) Sistemi periodični u jednom pravcu (polimeri, kvazi-jednodimenzionalni podsistemi kristala). Njihova grupa simetrije sadrži pored translacija (generisanih jednim elementom), i ortogonalne transformacije koje ne menjaju pravac periodičnosti: *linijske grupe* [23].

(*iii*) Simetrije sistema periodičnih u dva pravca (kvazi-dvodimenzionalni podsistemi kristala, slojevi) su translacije (dva generatora sa linearno nezavisnim translacionim vektorima) kombinovane sa ortogonalnim transformacijama koje ne menjaju ravan pravaca periodičnosti: *planarne grupe* [10].

[2]Zapravo, uslov lokalnosti zadovoljavaju samo projektivne reprezentacije sa netrivijalnim faktor-sistemom (§ A.2.7); u faktor-sistemu se javlja konstanta koja ima fizički smisao mase (odgovarajuća prekrivajuća grupa je netrivijalno proširenje Galilejeve, a novi generator odgovara masi sistema). Zato se za svaku masu formira poseban skup reprezentacija, te je u nerelativističkoj kvantnoj teoriji, zbog različitih transformacionih osobina, zabranjena superpozicija stanja različitih masa.

(iv) Sistemi sa tri pravca periodičnosti (kristali), imaju, pored ortogonalnih simetrija, tri generatora translacija sa linearno nezavisnim vektorima: *prostorne grupe* [22, 20].

U nastavku će biti prvo razmotrena Euklidova grupa, da bi se kroz nju uvele sve geometrijske simetrije, a zatim će se detaljnije proučiti simetrije navedenih klasa diskretnih sistema. Tačkastim i prostornim grupama je posvećena nešto veća pažnja, jer se one već tradicionalno koriste u fizici diskretnih sistema. Zbog preplitanja sa prostornim simetrijama, koje rezultuje izgradnjom magnetnih grupa i Kramersovom degeneracijom, vremenska inverzija se, obično, proučava zajedno sa prostornim simetrijama. Slično je i sa permutacijama sistema identičnih čestica; one dovode do podele svih sistema na fermione i bozone, a duboka veza sa geometrijskim simetrijama se manifestuje kroz utvrdjenu, i za sada samo pomoću relativističkih zahteva indirektno objašnjenu, vezu spina (ponašanje pri rotacijama) i statistike (ponašanje pri permutacijama).

2.1 Geometrijske simetrije

Kao što je pomenuto, Euklidova grupa je semidirektni proizvod translacione i grupe svih rotacija prostora $\mathbb{R}^3$. Ovakva struktura omogućava jednostavno odredjivanje ireducibilnih reprezentacija, na osnovu reprezentacija podgrupa. Osim toga, proučavanje translacione i rotacione grupe dovodi do niza za fiziku relevantnih zaključaka, tako da će prvo one biti razmotrene.

2.1.1 Translacije

Invarijantna podgrupa translacija T^3 je Abelova, i direktni je proizvod tri grupe translacija duž koordinatnih osa. Stoga svaki vektor $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^3$ odedjuje jednu unitarnu ireducibilnu (jednodimenzionalnu) reprezentaciju grupe T^3: $\Delta^{(\boldsymbol{k})}(I|\boldsymbol{t}) \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{t}}$. U koordinatnoj reprezentaciji, u prostoru funkcija na $\mathbb{R}^3$, delovanje operatora translacija je $D(I|\boldsymbol{t})f(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} f(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})$ (tzv. pasivna reprezentacija, u kojoj operacija deluje na koordinatni sistem). Potprostor koji odgovara ireducibilnoj reprezentaciji $\Delta^{(\boldsymbol{k})}(T^3)$ zadat je uslovom $D(I|\boldsymbol{t})f(\boldsymbol{x}) = e^{-\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{t}}f(\boldsymbol{x})$, odnosno, funkcionalnom jednačinom $f(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t}) = e^{-\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{t}}f(\boldsymbol{x})$. Kao što je poznato, rešenja ove jednačine su *ravni talasi* $f(\boldsymbol{x}) = Ce^{\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}$, što znači da svakoj ireducibilnoj reprezentaciji translacione grupe odgovara jednodimenzionalni potprostor koordinatne reprezentacije[3].

Istovremeno, generator translacija duž $x$ose se reprezentuje (§ A.2.1) operatorom $D(l_x)f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(x-t_x,y,z)}{\partial t_x}|_{t_x=0} = -\frac{\partial}{\partial x}f(\boldsymbol{x})$, i analogno za ostale koordinate. Jasno je da se generator translacija, nakon množenja sa $\imath\hbar$, identifikuje sa operatorom impulsa $p_i = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$, a sama translacija je reprezentovana operatorom $D(I|\boldsymbol{t}) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\boldsymbol{t}\boldsymbol{p}}$. Uslov da je funkcija $f(\boldsymbol{x})$ iz $\boldsymbol{k}-$tog ireducibilnog potprostora na jeziku generatora je diferencijalna jednačina $\frac{\partial}{\partial x_i}f(\boldsymbol{x}) = \imath k_i f(\boldsymbol{x})$, tj. $p_i f(\boldsymbol{x}) = \hbar k_i f(\boldsymbol{x})$. Stoga su ravni talasi istovremeno svojstvena stanja impulsa, sa tačno odredjenom svojstvenom vrednošću $\hbar\boldsymbol{k}$, i vektor ireducibilne reprezentacije $\boldsymbol{k}$ (pomnožen sa $\hbar$) je impuls slobodne čestice u stanju koje odgovara reprezentaciji $\boldsymbol{k}$.

[3]Ravni talasi su normirani na Dirakovu δ-funkciju, što, ponovo, ukazuje na potrebu za opremljenim Hilbertovim prostorom, i značaj uslova lokalnosti.

Treba naglasiti da je upravo sprovedeni postupak, odredjivanje ireducibilnih reprezentacija grupe i izdvajanje njihovih potprostora u koordinatnoj reprezentaciji (uz dobijanje funkcionalnih jednačina na nivou grupe, odnosno diferencijalnih jednačina na nivou generatora Lijeve grupe), jedan od uobičajenih načina primene simetrije, anticipiran u § 1.2. (Potpuno analogno, samo za punu grupu relativiteta, dobijaju se jednačine kretanja, npr. Šredingerova (*Schrödinger*) ili Klajn-Gordonova.)

2.1.2 Rotacije i refleksije

$\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ je trodimenzionalna Lijeva grupa, koja je kompaktna i nepovezana [5, 13]. Ima dve komponente povezanosti, pri čemu je komponenta jedinice upravo podgrupa $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Pri tome je $\mathrm{O}(3,\mathbb{R}) = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \otimes \{e, P\}$, gde je $P = -I$, *prostorna inverzija*. Stoga su reprezentacije $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ odredjene reprezentacijama grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$.

Svaka rotacija u $\mathbb{R}^3$ se može dekomponovati na tri rotacije oko koordinatnih osa za tzv. *Ojlerove uglove* φ, θ i ψ, čime joj se bijektivno pridružuje matrica

$$R(\varphi,\theta,\psi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\psi - \cos\theta\sin\varphi\sin\psi & -\sin\varphi\cos\psi - \cos\theta\cos\varphi\sin\psi & \sin\psi\sin\theta \\ \sin\psi\cos\varphi + \cos\theta\cos\psi\sin\varphi & -\sin\varphi\sin\psi + \cos\theta\cos\varphi\cos\psi & -\cos\psi\sin\theta \\ \sin\varphi\sin\theta & \cos\varphi\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

iz $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Grupa $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ je povezana, ali dvostruko, i njene reprezentacije se nalaze kao reprezentacije dvostruko prekrivajuće prosto povezane grupe $\mathrm{SU}(2)$. To znači da će svakom elementu R grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ odgovarati dva elementa U i $-U$ grupe $\mathrm{SU}(2)$. Naime, svaki element grupe $\mathrm{SU}(2)$ može se predstaviti u obliku

$$U(\varphi,\theta,\psi) = \begin{pmatrix} e^{\frac{\imath}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & -\imath e^{\frac{\imath}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\imath e^{\frac{\imath}{2}(\psi-\varphi)}\sin\frac{\theta}{2} & e^{-\frac{\imath}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

pri čemu je sa

$$h(U(\varphi,\theta,\psi)) \stackrel{\text{def}}{=} R(\varphi,\theta,\psi) \tag{2.1}$$

definisan (natkrivajući) homomorfizam $\mathrm{SU}(2)$ na $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, koji u I_3 slika i I_2 i $-I_2$. Ako je u prostoru $\mathcal{H}$ zadata reprezentacija $D(\mathrm{SU}(2))$, elementu R se pridruže operatori $D(U)$ i $D(-U)$ (tj. $D(h^{-1}(R))$. Kada je reprezentacija grupe $\mathrm{SU}(2)$ verna, ova dva operatora su različita, te je tom procedurom uspostavljena dvoznačna korespondencija: svakom elementu R je pridružen par operatora, tj. reprezentacija je u odnosu na $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ dvoznačna. Ovo nije prava reprezentacija, jer je uslov homomorfizma ispunjen samo u smislu množenja parova: proizvod bilo kog operatora koji odgovara elementu R, sa nekim od operatora pridruženim rotaciji R', jedan je od dva operatora koji reprezentuju RR'. Ako se za svaki element R odredi jedan od dva moguća operatora, tada je proizvod $D(R)D(R') = f(R,R')D(RR')$, gde je $f(R,R')$ u zavisnosti od izbora ili 1 ili -1; time ovo postaje projektivna reprezentacija grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ sa sistemom faktora f (§ A.2.7). U ostalim slučajevima je $D(U) = D(-U)$, te se dobija prava reprezentacija grupe rotacija.

Pošto je reč o Lijevim grupama, pri konstrukciji ireducibilnih reprezentacija se koriste generatori. Skup svih rotacija $R_{\varphi\boldsymbol{a}}$ oko istog orta $\boldsymbol{a}$, jednoparametarska je podgrupa (§ A.1.2).

Stoga su operatori koji reprezentuju ove rotacije $D(R_{\varphi \boldsymbol{a}}) = e^{-\imath\varphi S_{\boldsymbol{a}}}$, gde je $S_{\boldsymbol{a}}$ hermitski operator ugaonog momenta oko orta $\boldsymbol{a}$; naime, nešto kasnije će biti pokazano da su generatori rotacija u koordinatnoj reprezentaciji (§ A.2.1) povezani sa ugaonim momentima, $S_{\boldsymbol{a}} = -\imath\hbar D(l_{\boldsymbol{a}})$, analogno vezi impulsa i generatora translacija.

Na taj način je pitanje konstrukcije reprezentacija grupe rotacija svedeno na odredjivanje reprezentacija odgovarajuće Lijeve algebre ugaonih momenata. Rezultat je dobro poznat: sve ireducibilne reprezentacije se karakterišu jednim polucelim brojem $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$, svaka od njih je $2l+1$ dimenzionalna, a u ireducibilnim potprostorima ugaoni momenti su kompletne opservable sa nedegenerisanim svojstvenim vrednostima $l, l-1, \dots, -l+1, -l$. Ovo je, znači, dijagonala operatora ugaonog momenta u svojstvenom bazisu, a standardno se u fizici za bazis reprezentovanja uzima svojstveni bazis z-komponente. Pokazuje se i da se svaka ireducibilna reprezentacija jednoznačno može zadati preko kvadrata ugaonog momenta. Naime, operator kvadrata ugaonog momenta, $S^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{3} S_i^2$, u potprostoru ireducibilne reprezentacije l deluje kao konstantni operator $l(l+1)\hbar^2 I$.

Eksponenciranjem dijagonalne forme uočava se da rotaciju za 2π reprezentuje jedinični element samo za celobrojno l, te su samo takve reprezentacije prave reprezentacije $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, dok su polucelobrojne reprezentacije dvoznačne. Znajući da sve rotacije za isti ugao odredjuju jednu klasu konjugacije, na isti način, eksponenciranjem, dobija se karakter ireducibilne reprezentacije:

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \frac{\sin(\frac{2l+1}{2}\varphi)}{\sin\frac{\varphi}{2}}.$$

Pošto su karakteri realni, nema reprezentacija treće vrste (u odnosu na kompleksnu konjugaciju), a test sa karakterima, ili direktno razmatranje pokazuju da su polucelobrojne reprezentacije nužno pseudorealne (*II* vrste), dok se celobrojne mogu dobiti i u realnoj formi (*I* vrste).

U koordinatnoj reprezentaciji operatori rotacija su zadati sa $D(R)f(\boldsymbol{x}) = f(R^{-1}\boldsymbol{x})$. Za rotacije oko $z$ose je $D(R_{\varphi \boldsymbol{e}_z})f(\boldsymbol{x}) = f(x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi, -x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi, x_3)$, pa za odgovarajući generator važi $D(l_3)f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial}{\partial\varphi}(D(R_{\varphi \boldsymbol{e}_z})f(\boldsymbol{x}))|_{\varphi=0} = (x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1})f(\boldsymbol{x})$. Na isti način se i za ostale generatore nalazi $D(l_i) = \sum_k \epsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}$, i identifikacija ovih operatora sa ugaonim momentima je očigledna: $S_{\boldsymbol{a}} = -\imath\hbar D(l_{\boldsymbol{a}})$. Uslov pripadnosti stanja $f(\boldsymbol{x})$ l-tom ireducibilnom potprostoru, $D(R)f(\boldsymbol{x}) = D^{(l)}(R)f(\boldsymbol{x})$, najčešće se izražava na nivou generatora. Koristeći pomenuto svojstvo kvadrata ugaonog momenta, nalazi se (u sfernim koordinatama) $\sum_{i=1}^{3} D^2(l_i)f(\boldsymbol{x}) = (\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})f(\boldsymbol{x}) = -l(l+1)f(\boldsymbol{x})$. Rešenja ove diferencijalne jednačine su sferni harmonici $Y_l^m(\theta,\varphi)$ sa celobrojnim l (pomnoženi proizvoljnom funkcijom radijalne koordinate), a istovremeno zadovoljavaju i jednačinu $S_3 f(\boldsymbol{x}) = m\hbar f(\boldsymbol{x}) = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}f(\boldsymbol{x})$, tj. $D(R_{\varphi \boldsymbol{e}_z})f(\boldsymbol{x}) = e^{-\imath m\varphi}f(\boldsymbol{x})$.

Klebš-Gordanove serije nadjenih ireducibilnih reprezentacija,

$$D^{(l)}(\mathrm{SU}(2)) \otimes D^{(l')}(\mathrm{SU}(2)) = \sum_{l''=|l-l'|}^{l+l'} D^{(l'')}(\mathrm{SU}(2)),$$

daju dobro poznato pravilo slaganja ugaonih momenata, a u odgovarajućim selekcionim pravilima se lako prepoznaje održanje ugaonog momenta.

Sada se mogu odrediti ireducibilne reprezentacije za $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$. Svaka celobrojna reprezentacija $D^{(l)}(\mathrm{SO}(3,\mathbb{R}))$ daje običnim metodom dve reprezentacije $D^{(l,\pm)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R}))$: $D^{(l,\pm)}(R) = D^{(l)}(R)$ i $D^{(l,\pm)}(PR) = \pm D^{(l)}(R)$. Medjutim, za polucelobrojne, dakle dvoznačne, reprezentacije grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, na isti način se nalazi da prostornoj inverziji odgovaraju oba operatora $\pm I_{2l+1}$, tako da se dobija samo jedna dvoznačna reprezentacija grupe $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$: elementu PR se pridruži isti par operatora kao i elementu $R \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$.

2.1.3 Euklidova grupa

Ireducibilne reprezentacije Euklidove grupe se lako odredjuju na osnovu izvedenih reprezentacija podgrupa rotacija i translacija, indukcijom sa Abelove invarijantne podgrupe T^3. Reprezentacije proširene Euklidove grupe se zatim mogu naći indukcijom sa Euklidove grupe (podgrupa indeksa 2).

Kako je $D^{(\boldsymbol{k})}((R^{-1}|0)(I|\boldsymbol{t})(R|0)) = D^{(\boldsymbol{k})}(I|R^{-1}\boldsymbol{t}) = e^{-\imath\boldsymbol{k}(R^{-1}\boldsymbol{t})} = e^{-\imath(R\boldsymbol{k})\boldsymbol{t}} = D^{(R\boldsymbol{k})}(I|\boldsymbol{t})$, orbita ireducibilne reprezentacije $D^{(\boldsymbol{k})}(T^3)$ je sfera radijusa $|\boldsymbol{k}| = k$. Uzimajući za predstavnika orbite vektor $k\boldsymbol{a}$ ($\boldsymbol{a}$ je proizvoljni ort), mala grupa za $k > 0$ postaje je semidirektni proizvod grupe T^3 sa grupom svih rotacija oko $\boldsymbol{a}$, tj. $\boldsymbol{C}_\infty = \mathrm{SO}(2)$ (§ 2.2.1). Njene ireducibilne reprezentacije su $A_m(R_{\varphi\boldsymbol{e}_z}) = e^{-\imath m\varphi}$. U slučaju $k = 0$ mala grupa je cela Euklidova grupa, te se dobija serija reprezentacija odredjena već poznatim ireducibilnim reprezentacijama grupe rotacija. Tako su ireducibilne reprezentacije Euklidove grupe karakterisane parom (k, m) za $k > 0$ i $m = 0, \pm1, \ldots$, a za $|\boldsymbol{k}| = 0$, parom $(0, l)$, $l = 0, 1, \ldots$. Ukoliko se razmatra natkrivajuća grupa, m i l uzimaju i polucele vrednosti.

U koordinatnoj reprezentaciji, kao što je već pokazano, translacije i rotacije su generisane impulsima i ugaonim momentima. Tako $\boldsymbol{k}$ odredjuje impuls sistema, a m projekciju ugaonog momenta na $\boldsymbol{k}$. Stoga su u ireducibilnom potprostoru $(k \neq 0, m)$ Euklidove grupe stanja $|\,\boldsymbol{k}m\,\rangle$ sa istom kinetičkom energijom centra masa (tj. istom apsolutnom vrednošću ukupnog impulsa $|\boldsymbol{P}| = k\hbar$) i projekcijom ugaonog momenta na $\boldsymbol{k}$ jednakoj $m\hbar$. Za $k = 0$ je u pitanju sistem čiji centar masa miruje, pa je ukupni ugaoni moment jednak unutrašnjem, i odredjen indeksom l (u okviru klasične teorije ovo je moguće samo za višečestični sistem).

Za slobodni jednočestični sistem je ugaoni moment jednak nuli, tako da se odgovarajući ireducibilni potprostor odredjuje uslovom $\boldsymbol{P}^2 = k^2\hbar^2$. U koordinatnoj reprezentaciji ovo postaje Šredingerova jednačina slobodne čestice bez spina: $(\nabla^2 + k^2)f(\boldsymbol{x}) = 0$.

Kada je reč o proširenoj Euklidovoj grupi, treba uočiti da impuls sistema menja znak pri prostornoj inverziji, dok ugaoni moment ostaje isti. Zbog toga projekcija ugaonog momenta na $\boldsymbol{k}$ menja znak. To znači da će dve reprezentacije grupe $T^3 \wedge \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, sa istim k i suprotnim $m \neq 0$ dati jednu reprezentaciju Euklidove grupe; u slučaju kada je $m = 0$, reprezentacija $(k, 0)$ daje dve reprezentacije Euklidove grupe. Konačno, kada je $k = 0$, i reprezentacija suštinski odredjena reprezentacijom rotacione grupe, rezultati su opisani u prethodnom poglavlju.

2.2 Molekuli: tačkaste grupe

Za razliku od ostalih diskretnih sistema, grupe simetrije linearnih molekula sadrže beskonačno elemenata. Zbog toga će se one posebno proučiti.

2.2.1 Linearni molekuli

Linearni molekul ima beskonačnu grupu simetrije [3], jer je nepromenjen pri svim rotacijama $R(\phi)$ oko ose molekula (z-osa). Sve te rotacije čine grupu $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$, koja se u fizici molekula označava sa $\boldsymbol{C}_\infty$. Ostali elementi grupe moraju ostavljati z-osu invarijantnom. To mogu biti refleksija σ_v u vertikalnoj ravni, refleksija σ_h u horizontalnoj (xy) ravni, rotacija U za π oko horizontalne ose. Kako je $\sigma_h\sigma_v = U$, postojanje dve od ove tri simetrije povlači i treću. Konjugovanje σ_v rotacijom $R(\phi)$ daje refleksiju u vertikalnoj ravni koja sa početnom ravni gradi ugao ϕ, te ako u grupi postoji jedna vertikalna ravan simetrije, onda su tu i sve ostale vertikalne ravni. Isto važi i za horizontalne ose rotacije.

Na taj način su klasifikovane grupe simetrija linearnih molekula: $\boldsymbol{C}_\infty$, $\boldsymbol{C}_{\infty v} = \boldsymbol{C}_\infty \wedge \{e, \sigma_v\}$, $\boldsymbol{C}_{\infty h} = \boldsymbol{C}_\infty \otimes \{e, \sigma_h\}$, $\boldsymbol{D}_\infty = \boldsymbol{C}_\infty \wedge \{e, U\}$ i $\boldsymbol{D}_{\infty h} = \boldsymbol{C}_{\infty v} \otimes \{e, \sigma_h\}$. Struktura ovih grupa omogućava jednostavnu konstrukciju ireducibilnih reprezentacija (unitarne su, jer su sve grupe kompaktne).

$\boldsymbol{C}_\infty$ je Abelova grupa, ireducibilne reprezentacije su joj jednodimenzionalne, te uslov homomorfizma daje $D(R(\phi)) = e^{-\imath m\phi}$; iz periodičnosti, $R(2\pi) = e$, sledi da je m ceo broj. Prema tome, ireducibilne reprezentacije ove grupe su $A_m(R(\phi)) = e^{-\imath m\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Indukcijom se sada lako nalaze reprezentacije grupa $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ i $\boldsymbol{D}_\infty$. Kako su ove grupe izomorfne, njihove reprezentacije su jednake, ali se različito označavaju. Pošto je $\sigma_v R(\phi)\sigma_v = R(-\phi)$, σ_v-konjugovana reprezentacija $A_m(\boldsymbol{C}_\infty)$ je $A_{-m}(\boldsymbol{C}_\infty)$. Zato je reprezentacija $A_0(\boldsymbol{C}_\infty)$ samokonjugovana i daje dve reprezentacije grupe $\boldsymbol{C}_{\infty v}$. To su $A_0(\boldsymbol{C}_{\infty v})$ i $B_0(\boldsymbol{C}_{\infty v})$. Ostale, dvočlane, orbite daju dvodimenzionalne reprezentacije E_m. Kod grupe $\boldsymbol{D}_\infty$ jednodimenzionalne reprezentacije se označavaju sa A_0^+ i A_0^- (umesto A_0 i B_0). Reprezentacije grupe $\boldsymbol{C}_{\infty h}$ se dobijaju direktno iz reprezentacija $\boldsymbol{C}_\infty$, jer je u pitanju direktni proizvod grupa. To su $A_m^\pm(\boldsymbol{C}_{\infty h})$. Slično, koristeći strukturu direktnog proizvoda grupe $\boldsymbol{D}_{\infty h}$, nalaze se njene ireducibilne reprezentacije: $A_0^\pm(\boldsymbol{D}_{\infty h})$, $B_0^\pm(\boldsymbol{D}_{\infty h})$ i $E_m^\pm(\boldsymbol{D}_{\infty h})$.

Oznake reprezentacija su uskladjene sa fizičkim sadržajem dobrih kvantnih brojeva sistema sa takvim simetrijama. Tako je m projekcija ugaonog momenta na z-osu, A, odnosno B odražavaju parnost u odnosu na vertikalnu refleksiju, dok $+$ i $-$ karakterišu parnost u odnosu na promenu smera z-ose. Klebš-Gordanove serije se lako nalaze, i preko Vigner-Ekartvog teorema dobijena selekciona pravila ukazuju na zakone održanja (projekcije ugaonog momenta i svih pomenutih parnosti). Najveća dimenzija ireducibilnih reprezentacija je 2, te je to maksimalna degeneracija indukovana simetrijom.

2.2.2 Nelinearni molekuli

Tačkaste grupe simetrija nelinearnih molekula su konačne. Njihova klasifikacija pokazuje da ima 7 beskonačnih serija i sedam posebnih grupa [3].

Aksijalne tačkaste grupe su one koje ostavljaju z-osu invarijantnom, i one čine pomenutih 7 serija. To su: $\boldsymbol{C}_n$ (ciklična grupa generisana sa $C_n = R(\frac{2\pi}{n})$) reda n, $\mathbf{S}_{2n} = \boldsymbol{C}_n + C_{2n}\sigma_h$ (ciklična grupa sa generatorom $C_{2n}\sigma_h$) reda $2n$, $\boldsymbol{C}_{nv} = \boldsymbol{C}_n \wedge \{e, \sigma_v\}$ reda $2n$, $\mathbf{D}_n = \boldsymbol{C}_n \wedge \{e, U\}$ reda $2n$, $\boldsymbol{C}_{nh} = \boldsymbol{C}_n \otimes \{e, \sigma_h\}$ reda $2n$, $\mathbf{D}_{nh} = \boldsymbol{C}_{nv} \otimes \{e, \sigma_h\}$ reda $4n$ i $\mathbf{D}_{nd} = \boldsymbol{C}_{nv} + U'\boldsymbol{C}_{nv}$ (U' je horizontalna osa na simetrali izmedju ravni vertikalnih refleksija u $\boldsymbol{C}_{nv}$) reda $4n$.

Ostalih sedam grupa su: $\mathbf{T}$, grupa rotacionih simetrija pravilnog tetraedra (reda 12), $\mathbf{T}_d$ grupa svih simetrija tetraedra (reda 24), $\mathbf{T}_h = \mathbf{T} \otimes \{e, P\}$ (reda 24), $\mathbf{O}$ grupa rotacionih simetrija kocke (reda 24), $\mathbf{O}_h = \mathbf{O} \otimes \{e, P\}$ grupa svih simetrija kocke (reda 48), $\boldsymbol{Y}$ grupa rotacionih simetrija ikosaedra (reda 60) i $\boldsymbol{Y}_h = \boldsymbol{Y} \otimes \{e, P\}$ grupa svih simetrija ikosaedra (reda 120). U gornjim relacijama P je prostorna inverzija.

Reprezentacije se odredjuju standardnim metodima indukcije. Za aksijalne grupe rešenje daje hijerarhija ovih grupa: $\boldsymbol{C}_n$ i $\boldsymbol{S}_{2n}$ su ciklične, $\boldsymbol{C}_{nv}$, $\boldsymbol{D}_n$ i $\boldsymbol{C}_{nh}$ imaju $\boldsymbol{C}_n$ kao podgrupu indeksa 2, a $\boldsymbol{C}_{nv}$ je podgrupa indeksa 2 u $\boldsymbol{D}_{nh}$ i $\boldsymbol{D}_{nd}$. Stoga se reprezentacije odredjuju direktno, ili indukcijom (§ A.2.8) sa podgrupe indeksa 2 u najviše dva koraka. Slično je i sa $\mathbf{T}$, $\mathbf{O}$ i $\boldsymbol{Y}$ (reprezentacije preostalih grupa se zatim lako nalaze).

U svim ovim slučajevima ponovo se nalaze selekciona pravila koja iskazuju održanja projekcije ugaonog momenta na z osu. Zbog konačnosti grupe, iste su reprezentacije kod kojih se kvantni broj m razlikuje za umnožak reda ose, n. To se manifestuje i u formalnom obliku zakona održanja: kvantni brojevi se sabiraju po modulu n. Selekciona pravila su $m + m' \doteq m''$, sa značenjem $m'' = m + m' + zn$ (z je ceo broj), i govori se o održanju *kvazi-ugaonog momenta*. Slično je i sa ostalim osama, kao i različitim parnostima (refleksije, inverzije i rotacije za π).

2.3 Kristali: prostorne grupe

Zajednička odlika simetrija svih kristala [4] je postojanje trodimenzionalne diskretne translacione grupe T. Ortogonalna simetrija nije ista za različite kristale, te se u fizici čvrstog stanja, uglavnom, razmatra translaciona invarijantnost, a samo proučavanja neke odredjene kristalne strukture uključuju celu prostornu grupu.

2.3.1 Translaciona grupa i rešetke

Kao što je rečeno, translaciona grupa kristala je diskretna Abelova grupa, generisana sa tri linearno nezavisna vektora iz $\mathbb{R}^3$. Ti vektori $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ i $\boldsymbol{a}_3$, odredjuju translacije $(\ I\ |\boldsymbol{a}_i\ )$, koje generišu beskonačne ciklične grupe $T_i = \{(\ I\ |z_i\boldsymbol{a}_i\ ) \mid z_i \in \mathbb{Z}\}$, te je $T = \otimes_{i=1}^3 T_i$. Svaki element grupe T se stoga može izraziti kao $(\ I\ |\boldsymbol{z}\ ) = (\ I\ |z_1\boldsymbol{a}_1 + z_2\boldsymbol{a}_2 + z_3\boldsymbol{a}_3\ )$, tj. odredjen je trojkom celih brojeva (z_1, z_2, z_3).

Delovanjem grupe T na neku tačku u $\mathbb{R}^3$ (npr. koordinatni početak) dobija se skup periodično rasporedjenih tačaka u $\mathbb{R}^3$. Ta orbita se naziva *rešetka* sa *periodima* $\boldsymbol{a}_i$. Paralelepiped sa stranicama $\boldsymbol{a}_i$ naziva se *elementarna ćelija* rešetke.

Izbor perioda nije jednoznačan. Da bi se odredile mogućnosti izbora različitih perioda rešetke [21], najjednostavnije je napisati periode $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ i $\boldsymbol{a}_3$, reprezentovane u nekom bazisu $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3\}$ prostora $\mathbb{R}^3$, kao kolone matrice $[\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{x}\}}$. Ako je S operator prelaska iz početnog bazisa rešetke u novi bazis $\boldsymbol{a}'$, tj. $\boldsymbol{a}'_i = S\boldsymbol{a}_i$, važi $[\boldsymbol{a}']_{\{\boldsymbol{x}\}} = [S]_{\{\boldsymbol{x}\}}[\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{x}\}}$. Posebno, u slučaju kada se za bazis reprezentovanja uzme početni bazis perioda, matrica $[\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{a}\}}$ je jedinična matrica, tj. $[\boldsymbol{a}']_{\{\boldsymbol{a}\}} = [S]_{\{\boldsymbol{a}\}}$. Ako se zahteva da vektori novog bazisa budu vektori rešetke, to samo znači da je $[\boldsymbol{a}']_{\{\boldsymbol{a}\}}$, pa time i $[S]_{\{\boldsymbol{a}\}}$ celobrojna matrica. Konačno, da bi i vektori $\boldsymbol{a}'_i$ činili bazis rešetke, mora važiti $[\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{a}'\}} = [S^{-1}]_{\{\boldsymbol{a}'\}}$, tj. i $[S^{-1}]_{\{\boldsymbol{a}'\}}$ je celobrojna matrica. No, poznato je da se operator prelaska u početnom i konačnom bazisu reprezentuje istim matricama, tj. $[S^{-1}]_{\{\boldsymbol{a}'\}} = [S^{-1}]_{\{\boldsymbol{a}\}}$, pa, ako i samo ako su i vektori $\boldsymbol{a}'_i$ bazis rešetke, važi da su i $[S]_{\{\boldsymbol{a}\}}$ i $[S^{-1}]_{\{\boldsymbol{a}\}}$ celobrojne matrice. Dakle, postoji bijektivna veza izmedju različitih izbora perioda i grupe $\mathrm{GL}(3,\mathbb{Z})$ ($\mathrm{GL}(3,\mathbb{Z}) < \mathrm{GL}(3,\mathbb{R})$).

Determinanta celobrojne matrice je očigledno celobrojna, pa kako je determinanta inverzne matrice jednaka inverznoj determinanti matrice, sledi da za elemente $\mathrm{GL}(3,\mathbb{Z})$ važi $\det S = \pm 1$. Pri tome, pošto determinanta ne zavisi od bazisa reprezentovanja, ovo mora važiti u svakom bazisu $\mathbb{R}^3$ (mada tada S ne mora biti reprezentovan celobrojnom matricom). Ako se uoči da u Dekartovom (*Descartes*) bazisu $\boldsymbol{e}_i$ važi da je $\det[\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{e}\}} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]$ (mešoviti proizvod) zapremina početne elementarne ćelije, a $\det[\boldsymbol{a}']_{\{\boldsymbol{e}\}} = \det[S\boldsymbol{a}]_{\{\boldsymbol{e}\}}$ zapremina konačne elementarne ćelije, postaje jasno da nezavisno od izbora perioda elementarna ćelija ima uvek istu zapreminu.

Translaciona grupa je direktni proizvod tri beskonačne ciklične grupe, i njene ireducibilne reprezentacije se lako nalaze. Za cikličnu grupu T_i generisanu translacijom $(I|\boldsymbol{a}_i)$, ireducibilne reprezentacije su $D^{(k_i)}(\ I \mid z_i\boldsymbol{a}_i\ ) = e^{-\imath k_i z_i \boldsymbol{a}_i}$, gde je k_i bilo koji kompleksni broj. Unitarne reprezentacije se dobijaju za realno k_i. Pri tome su $D^{(k_i)}(T_i)$ i $D^{(k_i+\frac{2\pi}{a_i}m_i)}(T_i)$ ekvivalentne za svako $m_i \in \mathbb{Z}$, te se sve reprezentacije nalaze za $k_i \in (-\frac{\pi}{\boldsymbol{a}_i}, \frac{\pi}{\boldsymbol{a}_i}]$. To znači da će reprezentacije cele translacione grupe biti oblika $D^{(\boldsymbol{k})}(\ I\ |\boldsymbol{z}\ ) = e^{-\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{z}}$, za $\boldsymbol{k} = k_1\boldsymbol{b}_1 + k_2\boldsymbol{b}_2 + k_3\boldsymbol{b}_3$. U poslednjoj relaciji $\boldsymbol{b}_i$ su vektori:

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]}, \quad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]}, \quad \boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]}.$$

Oni čine bazis tzv. *inverzne rešetke*, a njima obrazovana elementarna ćelija odredjuje neekvivalentne reprezentacije grupe T: $\boldsymbol{k}+\mathbf{K}$ daje istu reprezentaciju kao $\boldsymbol{k}$, ako je $\mathbf{K} = z_1\boldsymbol{b}_1 + z_2\boldsymbol{b}_2 + z_3\boldsymbol{b}_3$ vektor inverzne rešetke.

Umesto elementarnih ćelija rešetke i inverzne rešetke, najčešće se koriste *Vigner-Zajcova (Wigner, Seits) ćelija*, odnosno *Briluenova zona (Brillouin)*. To su oblasti iste zapremine kao i elementarne ćelije, i obuhvataju tačke kojima je uočeni čvor najbliži (tj. ograničene su ravnima koje polove duži povučene iz koordinatnog početka do najbližih tačakac (inverzne) rešetke, a ortogonalne su na njih). Svojstvo da imaju simetriju jednaku ortogonalnoj simetriji kristala daje im prednost pri konstrukciji ireducibilnih reprezentacija prostornih grupa. Takodje, u skladu sa opštim zaključima iz § 1.2, svojstvene vrednosti hamiltonijana koji opisuje sistem sa translacionom simetrijom rešetke, označene su dobrim kvantnim brojevima $\boldsymbol{k}$, te postaju funkcija (hiperpovrši) na Briluenovoj zoni, $E_{\boldsymbol{k},t_{\boldsymbol{k}}}$. Tako se formiraju *energijske zone*, karakteristične za fiziku kristala.

Često se uvode *Born-fon Karmanovi periodični uslovi*: grupa T_i se pretvara u konačnu cikličnu grupu reda N_i zahtevom da je $(\ I \mid z_i\boldsymbol{a}_i\ )^{N_i} = (\ I \mid N_i z_i \boldsymbol{a}_i\ ) = (\ I \mid 0\ )$. Fizičko obrazloženje se nastoji naći u nesumnjivoj konačnosti kristala i tumačenju Born-fon Karmanove periodičnosti kao opisu jednakih uslova na granicama kristala. Sigurno je, medjutim, da se ovim uslovima opisuje rešetka na trodimenzionalnom torusu (objekt topološki neekvivalentan kristalu), što može dovesti do prividnih problema, ili artefakata teorije. Sa druge strane, jasno je da realna konačnost kristala čini rezultate dobijene korišćenjem beskonačnih grupa aproksimativnim, pri čemu se može očekivati povećana greška pri opisu pojava vezanih za efekte granica (površinski fenomeni).

Ako je $D(T)$ neka reprezentacija translacione grupe, projektor ireducibilne reprezentacije $D^{(\boldsymbol{k})}(T)$ je $P^{(\boldsymbol{k})} = \frac{1}{|T|}\sum_{\boldsymbol{z}} e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{z}} D(I|\boldsymbol{z})$. U koordinatnoj reprezentaciji, komponenta funkcije iz potprostora $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}$ ireducibilne reprezentacije $D^{(\boldsymbol{k})}(T)$ nalazi se delovanjem grupnog projektora $\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = P^{(\boldsymbol{k})} f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{|T|}\sum_{\boldsymbol{z}} e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{z}} f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z}) = e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$, gde je $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{z}} e^{\imath\boldsymbol{k}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{r})} f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z})$. Funkcije $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ su invarijantne pod dejstvom translacija (svodi se na permutovanje sabiraka). Time je pokazan *Blohov teorem* [29], da se svaka funkcija koja se transformiše po reprezentaciji $\boldsymbol{k}$ (tj. važi $D(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = e^{-\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{z}}\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r})$) može predstaviti kao ravni talas $e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ ($\boldsymbol{k}$ je u Briluenovoj zoni) pomnožen periodičnom funkcijom $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$.

Stvorena je mogućnost da se, umesto samih funkcija, razmatraju njihovi translaciono invarijantni faktori. Tako, u slučaju translacione grupe, uobičajena redukcija dinamičkog problema (tj. svojstvenog problema operatora H) u višestruke ireducibilne potprostore $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}$ dobija specifičan oblik: nalazi se niz (za svako $\boldsymbol{k}$ u Briluenovoj zoni) jednačina za periodične funkcije $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$, pa samim tim i svojstvene vrednosti postaju funkcije od $\boldsymbol{k}$, čime se realizuje pomenuta slika energijskih zona kristala. Takodje, periodičnost funkcija $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ dozvoljava razvoj u Furijeov (*Fourier*) red, $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{K}} f_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}} e^{\imath\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}}$ (sumira se po vektorima rešetke), i zadavanje ili modeliranje talasnih funkcija preko Furijeovih koeficijenata $f_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}}$. Ovo je poreklo izražavanja ili definisanja mnogih veličina preko Furijeovih koeficijenata, uobičajenog u fizici kristala. U § 3.3 i § 5.4 su, na primerima fonona i elektrona u kristalima, ilustrovane nabrojane tipične posledice translacione simetrije.

Zbog jednodimenzionalnosti ireducibilnih reprezentacija, lako se nalaze Klebš-Gordanove serije: $D^{(\boldsymbol{k})}(T)\otimes D^{(\boldsymbol{k}')}(T) = D^{(\boldsymbol{k}'')}(T)$, gde je $\boldsymbol{k}'' \doteq \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{K}$ (jednakost do na vektor inverzne rešetke). Iz Vigner-Ekartove teoreme sledi da je $\langle\ \boldsymbol{k}''\lambda_{\boldsymbol{k}''}|V^{\boldsymbol{k}'\lambda_{\boldsymbol{k}'}}|\boldsymbol{k}\lambda_{\boldsymbol{k}}\ \rangle = 0$, ako nije ispunjeno $\boldsymbol{k}'' \doteq \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$. U fizici kondenzovanog stanja $\boldsymbol{k}\hbar$ se interpretira kao *kvazi-impuls* nekog podsistema u kristalu, te poslednja relacija postaje održanje kvazi-impulsa; eventualni nenulti vektor $\boldsymbol{K}$ je posledica činjenice da je sam kvazi-impuls odredjen do na vektor rešetke (procesi kod kojih je $\boldsymbol{K}=0$ nazivaju se *direktni*).

2.3.2 Kristalni sistemi

Podgrupa ortogonalne grupe koja ostavlja neku rešetku invarijantnom mora biti konačna tačkasta grupa, i naziva se *holoedrija* ili singonija. Periodičnost rešetke ograničava skup holoedrija. Naime, ako rotacija za ugao ϕ ostavlja invarijantnom rešetku, u bazisu perioda mora biti celobrojna matrica, pa je i njen trag, $1 + 2\cos(\phi)$, celobrojan. Odavde sledi da ugao rotacije (po definiciji manji ili jednak π) može biti samo oblika $\frac{2\pi}{n}$ za $n = 1, 2, 3, 4, 6$ ($R(2\pi) = R(0)$ za $n = 1$). Tako se nalaze ukupno 32 tačkaste grupe koje mogu biti simetrije rešetke, *kristalografske tačkaste grupe*: $\boldsymbol{C}_1$, $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_4$, $\boldsymbol{C}_6$, $\boldsymbol{C}_{2v}$, $\boldsymbol{C}_{3v}$, $\boldsymbol{C}_{4v}$, $\boldsymbol{C}_{6v}$, $\boldsymbol{S}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{C}_i$, $\boldsymbol{S}_4$, $\boldsymbol{S}_6$, $\boldsymbol{C}_{1h} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{C}_s$, $\boldsymbol{C}_{2h}$, $\boldsymbol{C}_{3h}$, $\boldsymbol{C}_{4h}$, $\boldsymbol{C}_{6h}$, $\boldsymbol{D}_2$, $\boldsymbol{D}_3$, $\boldsymbol{D}_4$, $\boldsymbol{D}_6$, $\boldsymbol{D}_{2h}$, $\boldsymbol{D}_{3h}$, $\boldsymbol{D}_{4h}$, $\boldsymbol{D}_{6h}$, $\boldsymbol{D}_{2d}$, $\boldsymbol{D}_{3d}$, $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{T}_h$, $\boldsymbol{T}_d$, $\boldsymbol{O}$ i $\boldsymbol{O}_h$(treba uočiti da grupe istog geometrijskog smisla nisu posebno uračunate: $\boldsymbol{D}_1 = \boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{C}_{1h} = \boldsymbol{C}_{1v}$, $\boldsymbol{D}_{1h} = \boldsymbol{C}_{2v}$ i $\boldsymbol{D}_{1d} = \boldsymbol{C}_{2h}$; reč je o grupama koje su medjusobno konjugovane podgrupe $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$).

Ako je $\boldsymbol{a}$ vektor rešetke, onda je to i $-\boldsymbol{a}$, te je prostorna inverzija simetrija rešetke, a kandidati za holoedriju su samo grupe koje sadrže inverziju. Takodje je moguće pokazati da invarijantnost rešetke na $\boldsymbol{C}_3$ povlači i invarijantnost na $\boldsymbol{C}_{3v}$. Slično važi i za parove $\boldsymbol{C}_4$ i $\boldsymbol{C}_{4v}$, odnosno $\boldsymbol{C}_6$ i $\boldsymbol{C}_{6v}$; kao posledica ovoga invarijantnost na transformacije iz $\boldsymbol{S}_6$, $\boldsymbol{C}_{4h}$ i $\boldsymbol{C}_{6h}$ povlači postojanje simetrija $\boldsymbol{D}_{3d}$, $\boldsymbol{D}_{4h}$ i $\boldsymbol{D}_{6h}$, respektivno. Tako je preostalo svega 7 holoedrija: $\boldsymbol{S}_2$, $\boldsymbol{C}_{2h}$, $\boldsymbol{D}_{2h}$, $\boldsymbol{D}_{4h}$, $\boldsymbol{D}_{6h}$, $\boldsymbol{D}_{3d}$ i $\boldsymbol{O}_h$, tj. 7 *kristalnih sistema* sa ukupnom simetrijom $T \wedge P_H$, gde je P_H holoedrija sistema. Holoedrije su parcijalno uredjen skup [4, 8] u odnosu na relaciju $A < B$ (podgrupa), pri čemu je uredjenje dato na sledeći način:

$$\begin{array}{ccccccccc} & & & & \boldsymbol{D}_{6h} & > & \boldsymbol{D}_{3d} & & \\ & & & & \vee & & \vee & & \\ \boldsymbol{O}_h & > & \boldsymbol{D}_{4h} & > & \boldsymbol{D}_{2h} & > & \boldsymbol{C}_{2h} & > & \boldsymbol{S}_2 \end{array}$$

Pri istoj holoedriji P_H, moguće je formirati različite rešetke pogodnim izborom T (tj. perioda). Za ekvivalentne se mogu smatrati one koje se neprekidnim deformacijama, bez smanjivanja simetrije u medjupoložajima, mogu preslikati jedna u drugu; to znači da se nakon odredjenih homotetičnih preslikavanja mogu dovesti do poklapanja elementom grupe $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$. Ispostavlja se da ne moraju sve biti ekvivalentne. Tako se iz 7 kristalnih sistema dobija 14 neekvivalentnih *Braveovih (Bravis) rešetki*.

2.3.3 Prostorne grupe

Do sada su razmatrane samo simetrije translacionih rešetki u odnosu na ortogonalne transformacije. Dobijeni su kristalni sistemi i Braveove rešetke. Jasno je da su simetrije Braveove rešetke sve transformacije nastale uzastopnim primenama elemenata iz P_H i T, pa kako je presek ovih grupa samo jedinični element, a T ostaje invarijantna pri konjugaciji elementima iz P_H, grupa simetrije Braveove rešetke je $S_H = T \wedge P_H$.

Medjutim, ovim se ne iscrpljuju moguće grupe simetrije pravog kristala. Kod njih se, pored geometrijskog rasporeda, mora računati i sa simetrijama fizičkih svojstava atoma u tačkama rešetke; dalje, kod kristala atomi nisu rasporedjeni samo u tačkama rešetke: translaciona invarijantnost dozvoljava da različiti (ili jednaki) atomi u kristalu formiraju više medjusobno transliranih, ali jednakih, Braveovih rešetki. Tako se pojedini atomi nalaze u unutrašnjosti elementarne ćelije (neke od pronadjenih Braveovih rešetki). U ovom smislu se za Braveove rešetke kaže da su "prazne". Ukupna simetrija ovakvog kristala očigledno sadrži sve translacije rešetke, ali je njena ortogonalna podgrupa manja, a neki od ortogonalnih elemenata mogu biti simetrije kristala tek u kombinaciji sa translacijama.

Svaki kristal jednoznačno odredjuje svoju translacionu grupu simetrije T, a svaka takva grupa daje kristalnu rešetku i njenu simetriju P_H. Pored ovoga, realni kristal zadaje i svoju grupu svih geometrijskih transformacija, prostornu grupu kristala, S. Jasno je da hrupa S sadrži sve čiste translacije, tj. T je njena podgrupa. Pri tome, ako je $(\ R \mid \boldsymbol{r}\ )$ proizvoljni element grupe S, a $(\ I \mid \boldsymbol{z}\ )$ neki element iz T, zbog zatvorenosti grupnog množenja je i konjugovani element $(\ R \mid \boldsymbol{r}\ )(\ I \mid \boldsymbol{z}\ )(\ R \mid \boldsymbol{r}\ )^{-1} = (\ I \mid R\boldsymbol{z}\ )$ iz S. Dobijeni element $(\ I \mid R\boldsymbol{z}\ )$ je čista translacija, te mora pripadati grupi T, što znači da je translaciona podgrupa invarijantna u S, ali i da ortogonalni faktor R bilo kog elementa grupe S održava rešetku, odnosno da je element grupe P_H. Skup svih takvih ortogonalnih elementa, koji kombinovani sa nekom translacijom daju simetriju kristala, čini grupu (što se lako proverava), tzv. *izogonalnu* tačkastu grupu, P_I. Ona je očigledno podgrupa u P_H, ali ni jedna ni druga u opštem slučaju nisu simetrije kristala.

Kako je $P_I < P_H$, 32 kristalografske tačkaste grupe se mogu rasporediti po holoedrijama, tako da se svaka pridruži najmanjoj holoedriji čija je podgrupa. Pomenuto uredjenje holoedrija omogućava jednoznačnost rasporedjivanja, čime se dobijaju ukupno 32 *kristalne klase* unutar 7 sistema. Način konstrukcije grupe P_I (izostavljanjem translacionih delova u elementima prostorne grupe), ukazuje na činjenicu da, iako P_I nije simetrija kristala, mogu postojati karakteristike kristala koje se ne menjaju pri transformacijama ove grupe: to su one osobine koje zavise samo od pravaca u kristalu, a ne i od detalja rasporeda atoma duž tih pravaca. Time se uvodi ekvivalencija smerova duž kojih je raspored atoma kristala isti do na translaciju, a P_I se pojavljuje kao grupa simetrije smerova, pošto svaki smer preslikava u njemu ekvivalentne. Često se smatra da su osobine koje zavise samo od smerova u kristalu *makroskopske*, i u tom smislu se kaže da P_I opisuje makroskopske simetrije [4].

Ako je $R \in P_I$, tada postoji vektor $\boldsymbol{r}$ takav da je $(\ R \mid \boldsymbol{r}\ ) \in S$. Time je odredjen tačno jedan koset $(\ R \mid \boldsymbol{r}\ )T = \{(\ R \mid \boldsymbol{r} + \boldsymbol{z}\ )\}$ translacione podgrupe u S. U njemu se nalazi tačno jedan predstavnik $(\ R \mid \boldsymbol{f}_R\ )$, takav da je $\boldsymbol{f}_R$ vektor iz unutrašnjosti elementarne ćelije kristala (za neko $\boldsymbol{z}$ je $\boldsymbol{f}_R = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{z}$). Ukoliko je $\boldsymbol{f}_R \neq 0$, R nije simetrija kristala, a $\boldsymbol{f}_R$ se tada naziva *frakciona translacija*; tako se nalaze *zavojne ose* $(\ C_n \mid \boldsymbol{f}\ )$ i *klizne ravni* $(\ \sigma \mid \boldsymbol{f}\ )$.

Sa druge strane, pošto je T invarijantna podgrupa, množenje koseta je dobro definisano: $(\ R \mid \boldsymbol{f}_R\ )T(\ R' \mid \boldsymbol{f}_{R'}\ )T = (\ RR' \mid \boldsymbol{f}_R + R\boldsymbol{f}_{R'}\ )T = (\ RR' \mid \boldsymbol{f}_{RR'}\ )T$. Način množenja ortogonalnih faktora je isti kao kod P_I, pa je jasno da je P_I faktor-grupa: $P_I = S/T$.

Postaje jasno da translaciona i izogonalna tačkasta grupa, zajedno sa frakcionim translacijama odredjuju prostornu grupu. Različitim izborima frakcionih translacija se u jednoj kristalnoj klasi nalaze kristali različitih simetrija. Uz relaciju po kojoj su dve prostorne grupe ekvivalentne ako su medjusobno konjugovane podgrupe u Euklidovoj grupi, nalazi se ukupno 230 neekvivalentnih

Tabela 2.1: Prostorne grupe: dati su kristalni sistemi, broj Braveovih rešetki i holoedrija, P_H, svakog od njih, kao i odgovarajuće kristalne klase, tj. izogonalne tačkaste grupe, P_I (sa brojem prostornih grupa svake klase).

	Sistem	BR	P_H	P_I
1	Triklinični	1	$\boldsymbol{S}_2$	$\boldsymbol{C}_1(1), \boldsymbol{S}_2(1)$
2	Monoklinični	2	$\boldsymbol{C}_{2h}$	$\boldsymbol{C}_{1h}(4), \boldsymbol{C}_2(3), \boldsymbol{C}_{2h}(6)$
3	Rombični	4	$\boldsymbol{D}_{2h}$	$\boldsymbol{C}_{2v}(22), \boldsymbol{D}_2(9), \boldsymbol{D}_{2h}(28)$
4	Tetragonalni	2	$\boldsymbol{D}_{4h}$	$\boldsymbol{S}_4(2), \boldsymbol{D}_{2d}(12), \boldsymbol{C}_4(6), \boldsymbol{C}_{4h}(6), \boldsymbol{C}_{4v}(12), \boldsymbol{D}_4(10), \boldsymbol{D}_{4h}(20)$
5	Romboedarski	1	$\boldsymbol{D}_{3d}$	$\boldsymbol{C}_3(4), \boldsymbol{S}_6(2), \boldsymbol{C}_{3v}(6), \boldsymbol{D}_3(7), \boldsymbol{D}_{3d}(6)$
6	Heksagonalni	1	$\boldsymbol{D}_{6h}$	$\boldsymbol{C}_{3h}(1), \boldsymbol{D}_{3h}(4), \boldsymbol{C}_6(6), \boldsymbol{C}_{6h}(2), \boldsymbol{C}_{6v}(4), \boldsymbol{D}_6(6), \boldsymbol{D}_{6h}(4)$
7	Kubni	3	$\boldsymbol{O}_h$	$\boldsymbol{T}(5), \boldsymbol{T}_h(7), \boldsymbol{T}_d(6), \boldsymbol{O}(8), \boldsymbol{O}_h(10)$

prostornih grupa, svrstanih u 32 klase (tabela 2.1). Za sve njih je zajedničko da im je translaciona podgrupa invarijantna, a odgovarajuća faktor-grupa je izomorfna izogonalnoj grupi. Ako je i izogonalna grupa podgrupa prostorne grupe, odnosno, ako su sve frakcione translacije jednake 0, struktura prostorne grupe je $S = T \wedge P_I$, i kaže se da je S *simorfna* (ukupno ih je 73).

Invarijantnost translacione podgrupe omogućava nalaženje ireducibilnih reprezentacija prostornih grupa indukcionim metodom (§ A.2.8). Orbite reprezentacija translacione grupe, tzv. *zvezde*, vektori su Briluenove zone koji se jedan u drugi preslikavaju elementima izogonalne grupe. Za opšti položaj vektora $\boldsymbol{k}$ (u unutrašnjosti Briluenove zone, izvan ravni i osa simetrije) ireducibilne reprezentacije grupe T, mala grupa je samo translaciona podgrupa T, a red orbite jednak $|P_I|$. Za $\boldsymbol{k} = 0$, mala grupa je S, a orbita je reda 1. Izmedju ovih krajnjih slučajeva, postoje i vektori specijalnog položaja (*Lifšicove tačke*): mala grupa je neka podgrupa u S, a red orbite jednak indeksu ove podgrupe. Kada se za svaku orbitu odredi predstavnik i njegova mala grupa, potrebno je naći njene dozvoljene ireducibilne reprezentacije, pa iz njih indukovati ireducibilne reprezentacije S.

Postupak odredjivanja dozvoljenih reprezentacija je glavna poteškoća u ovom algoritmu [22]. U slučaju simorfnih grupa, mala grupa S' je semidirektni proizvod T i neke podgrupe P izogonalne grupe. Dozvoljene reprezentacije S' se nalaze kao direktni proizvodi predstavnika orbite sa tzv. *malim reprezentacijama*, tj. ireducibilnim reprezentacijama P. Jasno, i kod nesimorfnih grupa S' je neka prostorna grupa sa istom translacionom podgrupom, i izogonalnom grupom P koja je podgrupa P_I. Ispostavlja se da je procedura u izvesnom smislu slična opisanoj kod simorfnih grupa, samo se kao male reprezentacije pojavljuju projektivne reprezentacije (§ A.2.7, [11]), odnosno ireducibilne reprezentacije natkrivajuće grupe za P. Dimenzije ireducibilnih reprezentacija prostornih grupa su 1, 2, 3, 4, 6 ili 8.

Iz same induktivne procedure sledi da je jedan od indeksa koji prebrojavaju reprezentacije prostorne grupe vektor Briluenove zone $\boldsymbol{k}$, odnosno indeks orbite sa koje se vrši indukcija. Stoga je jasno da će se nakon odredjivanja Klebš-Gordanovih serija ponovo ispostaviti selekciona pravila održanja kvazi-impulsa. Na sličan način, mada nešto komplikovanije dolazi se i do održanja veličina vezanih za izogonalnu grupu (ugaoni moment, parnosti).

2.4 Slojevi: planarne grupe

Kod sistema koji su translatorno periodični u dva pravca, simetrije se klasifikuju na isti način kao i za kristale. Zbog toga, kao i zbog za sada male primene u fizici čvrstog stanja, ove grupe će biti samo kratko razmotrene. Najjednostavnije ih je shvatiti kao podgrupe prostornih grupa. Kako ista planarna grupa može biti podgrupa u različitim prostornim grupama, sve trodimenzionalne holoedrije koje se razlikuju samo po translacijama u pravcu izvan razmatrane ravni planarne grupe, dovode do iste dvodimenzionalne holoedrije (isto se odnosi i na odgovarajuće Braveove rešetke).

Sve izogonalne grupe moraju zadovoljavati isti uslov za red glavne ose kao i kod kristala, te se mogu dobiti kao podgrupe prostornih grupa. Tako se dobija ukupno 10 tačkastih grupa $\boldsymbol{C}_n$ i $\boldsymbol{C}_{nv}$ (za $n = 1, 2, 3, 4, 6$). Ostale tačkaste grupe ili na isti način kao pobrojane deluju u ravni dvodimenzionalne rešetke (xOy), te se svode na pobrojane, ili ne ostavljaju ravan invarijantnom (te ne mogu biti simetrije). Kandidati za holoedrije su sve grupe koje sadrže inverziju u ravni, a to je operacija C_2. Kada se, zbog razloga iznetih u § 2.3.2, odbace $\boldsymbol{C}_3, \boldsymbol{C}_4$ i $\boldsymbol{C}_6$, preostaju holoedrije $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{C}_{2v}$, $\boldsymbol{C}_{4v}$ i $\boldsymbol{C}_{6v}$. Trodimenzionalne holoedrije koje ostavljaju ravan invarijantnom, deluju u njoj kao neka od pobrojanih grupa. Na isti način, sužavanjem delovanja prostornih grupa u ravan, nalazi se ukupno 80 planarnih grupa: monoklinični sistem (holoedrija $\boldsymbol{C}_2$, 7 grupa), rombični ($\boldsymbol{C}_{2v}$, 41), tetragonalni ($\boldsymbol{C}_{4v}$, 16) i heksagonalni ($\boldsymbol{C}_{6v}$, 16).

2.5 Polimeri: linijske grupe

Kao što je pomenuto, sistem periodičan u jednom pravcu može biti polimer, nanotuba (slika na naslovnoj strani) ili podsistem strukture periodične u 2 ili 3 pravca (npr. spinski podsistem trodimenzionalnog kristala može imati periodičnost samo u jednom pravcu). Ipak, nezavisno od njegove prirode, u ovom odeljku će svaki takav sistem biti nazivan *polimer*.

Periodičnost povlači beskonačnost polimera duž pravca periodičnosti (z-osa), te je polimer beskonačni niz konačnih identičnih jedinica, *monomera*. Oni su pravilno rasporedjeni duž z-ose: n-ti se iz $(n-1)$-og dobija istom transformacijom $z = (R|\mathbf{v})$ kao $(n+1)$-i monomer iz n-tog. Ako se neki od monomera proglasi za početni, svi ostali se, sukcesivnim dejstvom z, mogu dobiti iz njega. Na taj način se ispostavlja da u grupi geometrijskih simetrija L polimera postoji jedna beskonačna ciklična, pa time i Abelova grupa, Z, čiji su elementi stepeni generatora z. Medjutim, i sam monomer može biti simetričan, te su simetrije iz L kombinacije (proizvodi) simetrije rasporedjivanja monomera (grupa Z) i unutrašnje simetrije monomera P (neka od tačkastih grupa) [24].

Generator z, svakako, vrši translaciju duž z-ose, te je njegov oblik $z = (R|v)$ (tj. $\mathbf{v} = v\boldsymbol{e}_z \neq 0$), pri čemu ortogonalna transformacija mora ostaviti z-osu invarijantnom. Takve su $R(\phi)$, σ_v, σ_h i U. Bez obzira na v, elementi $(\sigma_h|v)$ i $(U|v)$ ne mogu biti generatori beskonačne ciklične grupe (kvadrat im je jedinični element grupe). Kako je polimer invarijantan i na neku translacionu podgrupu, postoji stepen generatora z koji je čista translacija, te je ϕ racionalni deo od 2π. Uzimanjem minimalne ovakve translacije za jedinicu dužine, mogući generatori grupa rasporedjivanja su $(C_q^r|\frac{1}{q})$ (r je nenegativni ceo broj, manji od q i uzajamno prost sa q) i $(\sigma_v|\frac{1}{2})$. Prvi generator definiše grupu *zavojne ose*, $\boldsymbol{q}_r$ (beskonačna familija grupa), a drugi grupu *klizne ravni*, $\boldsymbol{T}_c$. Čisto translaciona podgrupa $\boldsymbol{T}$ je specijalan slučaj zavojne ose sa $r = 0$.

Ako je P' tačkasta grupa simetrije izolovanog monomera, samo njeni elementi koji z-osu ostavljaju invarijantnom mogu biti elementi ukupne grupe simetrije L. Ovi elementi čine aksijalnu tačkastu podgrupu $P = P' \cap \boldsymbol{D}_{\infty h}$.

Tabela 2.2: Linijske grupe: za sve familije linijskih grupa navedena je internacionalna oznaka, različite faktorizacije i izogonalna tačkasta grupa P_I. (n je red glavne ose u P_I). $\boldsymbol{T}_{cd}$ označava grupu sa kliznom ravni koja je simetrala vertikalnih ravni refleksije iz drugog faktora. Kod grupa 1. i 5. uvek se može uzeti $q > n$ (broj p iz internacionalne oznake je funkcija n, q i r).

	Internacionalni simbol		Faktorizacije	P_I
	n parno	n neparno		
1	$\boldsymbol{L}q_p$		$\boldsymbol{q}_r \otimes \boldsymbol{C}_n$	$\boldsymbol{C}_q$
2	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})$	$\boldsymbol{L}\overline{n}$	$\boldsymbol{T} \wedge \boldsymbol{S}_{2n}$	$\boldsymbol{S}_{2n}$
3	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})$	$\boldsymbol{L}n/m$	$\boldsymbol{T} \wedge \boldsymbol{C}_{nh}$	$\boldsymbol{C}_{nh}$
4	$\boldsymbol{L}(2n)_n/m$		$(\mathbf{2n})_1\boldsymbol{C}_{nh} = (\mathbf{2n})_1\boldsymbol{S}_{2n}$	$\boldsymbol{C}_{2nh}$
5	$\boldsymbol{L}q_p22$	$\boldsymbol{L}q_p2$	$\boldsymbol{q}_r \wedge \boldsymbol{D}_n$	$\boldsymbol{D}_q$
6	$\boldsymbol{L}nmm$	$\boldsymbol{L}nm$	$\boldsymbol{T} \otimes \boldsymbol{C}_{nv} = \boldsymbol{C}_{nv} \wedge \boldsymbol{T}_{cd}$	$\boldsymbol{C}_{nv}$
7	$\boldsymbol{L}ncc$	$\boldsymbol{L}nc$	$\boldsymbol{C}_n \wedge \boldsymbol{T}_c$	$\boldsymbol{C}_{nv}$
8	$\boldsymbol{L}(2n)_nmc$		$\boldsymbol{C}_{nv} \wedge (\mathbf{2n})_1 = \boldsymbol{C}_{nv} \wedge \boldsymbol{T}_{cd}$	$\boldsymbol{C}_{2nv}$
9	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})2m$	$\boldsymbol{L}\overline{n}m$	$\boldsymbol{T} \wedge \boldsymbol{D}_{nd} = \boldsymbol{T}_c \wedge \boldsymbol{D}_{nd}$	$\boldsymbol{D}_{nd}$
10	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})2c$	$\boldsymbol{L}\overline{n}c$	$\boldsymbol{T}_c\boldsymbol{S}_{2n} = \boldsymbol{T}_{cd}\boldsymbol{D}_n$	$\boldsymbol{D}_{nd}$
11	$\boldsymbol{L}n/mmm$	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})2m$	$\boldsymbol{T} \wedge \boldsymbol{D}_{nh} = \boldsymbol{T}_c\boldsymbol{D}_{nh}$	$\boldsymbol{D}_{nh}$
12	$\boldsymbol{L}n/mcc$	$\boldsymbol{L}(\overline{2n})2c$	$\boldsymbol{T}_c\boldsymbol{C}_{nh} = \boldsymbol{T}_c\boldsymbol{D}_n$	$\boldsymbol{D}_{nh}$
13	$\boldsymbol{L}(2n)_n/mcm$		$(\mathbf{2n})_1\boldsymbol{D}_{nh} = (\mathbf{2n})_1\boldsymbol{D}_{nd} = \boldsymbol{T}_c\boldsymbol{D}_{nh} = \boldsymbol{T}_c\boldsymbol{D}_{nd}$	$\boldsymbol{D}_{2nh}$

Kako je svaka simetrija kompozicija elemenata iz podgrupa Z i P, cela grupa je proizvod $L = ZP$, što znači da mora važiti $ZP = PZ$. Analizom ovog uslova za svaku od familija $Z = \boldsymbol{T}, \boldsymbol{q}_r, \boldsymbol{T}_c$ i svaku aksijalnu tačkastu grupu $P = \boldsymbol{C}_n, \boldsymbol{S}_{2n}, \boldsymbol{C}_{nv}, \boldsymbol{C}_{nh}, \boldsymbol{D}_n, \boldsymbol{D}_{nd}, \boldsymbol{D}_{nh}$, mogu se dobiti sve linijske grupe i to u faktorisanoj formi. Pri tome neke grupe imaju više različitih faktorizacija, te se ukupno nalazi 13 beskonačnih familija linijskih grupa, navedenih u tabeli (2.2).

Kao i kod prostornih grupa, translaciona podgrupa je invarijantna podgrupa linijske grupe, i odgovarajuća faktor-grupa je izomorfna izogonalnoj grupi P_I. P_I se može dobiti zanemarivanjem translacionih delova elemenata linijske grupe. Vidi se da su simorfne familije 2, 3, 6, 9,11, kao i 1 i 5 za $r = 0$.

Iredecibilne reprezentacije linijskih grupa se mogu dobiti metodom opisanim kod prostornih grupa. Postupak se može značajno pojednostaviti korišćenjem činjenice da su grupe familije 1. direktni proizvodi cikličnih grupa, te se njihove ireducibilne (jednodimenzionalne) reprezentacije lako nalaze. Grupe familija 2-8 imaju grupu familije 1 kao podgrupu indeksa 2, dok su i same takve podgrupe u ostalim familijama. Prema tome, jednostavni postupak indukcije sa podgrupe indeksa 2 može se u potpunosti sprovesti za sve linijske grupe.

Dobijene reprezentacije slične su reprezentacijama prostornih grupa: ponovo se karakterišu indeksom k vezanim za translacionu podgrupu, koji uzima vrednosti iz Briluenove zone (to je sada jednodimenzionalni interval), te indeksima koji potiču od tačkaste grupe (projekcija ugaonog momenta na z-osu, i različite parnosti). Odgovarajuća selekciona pravila odražavaju očuvanje kvazi-momenata i parnosti. Iz opisanog postupka konstrukcije jasno je da su dimenzije reprezentacija linijskih grupa 1, 2 i 4.

2.6 Magnetne simetrije

Česta simetrija sistema i relevantnih jednačina, vremenska inverzija, zbog svog fizičkog sadržaja, ima nešto drugačije implikacije u odnosu na do sada proučene simetrije, a u okviru kvantno-mehaničkog formalizma zahteva raličit tretman.

2.6.1 Vremenska inverzija

Vignerov teorem (§ B.2) dozvoljava da kvantno-mehanički operatori pridruženi simetrijama budu i antiunitarni [5, 18]. Najvažnija operacija reprezentovana antiunitarno je *vremenska inverzija*, θ. Naime, ako je θ simetrija sistema, operator Θ, koji nju reprezentuje, komutira sa H, a za svako stanje važi $\Theta|\ x,t\ \rangle = U(-t)\Theta|\ x,0\ \rangle$. Evolucija $U(t)$ zadovoljava relaciju $\Theta U(t) = U(-t)\Theta$, tj. $\Theta e^{\frac{\imath}{\hbar}Ht} = e^{-\frac{\imath}{\hbar}Ht}\Theta$. Kompatibilnost ove relacije[4] i komutacije sa H moguća je samo ako je Θ antiunitarni operator. θ ostavlja prostorne koordinate nepromenjenima $\Theta\boldsymbol{q}\Theta^\dagger = \boldsymbol{q}$, te komutira sa svim prostornim transformacijama, i mora važiti $\Theta D(R|\boldsymbol{a})\Theta^\dagger = D(R|\boldsymbol{a})$. Ponovo zahvaljujući antiunitarnosti Θ, ovo je saglasno sa očiglednim zahtevima da pri vremenskoj inverziji impulsi i ugaoni momenti (generatori rotacija i translacija) menjaju znak: $\Theta\boldsymbol{p}\Theta^{-1} = -\boldsymbol{p}$ i $\Theta\boldsymbol{l}\Theta^{-1} = -\boldsymbol{l}$.

Drugo značajno svojstvo vremenske inverzije, involutivnost ($\theta^2 = e$), ima za posledicu da Θ^2 ne može menjati pravac vektorima (time ni fizičko stanje sistema), tj. $\Theta^2 = cI$. Uslov antiunitarnosti odmah daje ograničenje: $c = \pm 1$. Ako je $\Theta^2 = I$, u $\mathcal{H}$ se može naći bazis čiji su elementi realni vektori u smislu da zadovoljavaju jednakosti $\Theta|\ i\ \rangle = |\ i\ \rangle$ (npr. ako je $|\ x\ \rangle$ proizvoljan vektor, onda je $|\ x\ \rangle + \Theta|\ x\ \rangle$ realan). Operator Θ se svodi na kompleksno konjugovanje kolona u ovom bazisu, dok su operatori koji komutiraju sa Θ u istom bazisu reprezentovani realnim matricama. U slučaju da je $\Theta^2 = -1$ ne postoji realni bazis, ali je svakom vektoru $|\ x\ \rangle$ njemu konjugovani $\Theta|\ x\ \rangle$ ortogonalan $(\langle\ x\ |(\Theta|\ x\ \rangle) = 0)$. Stoga se u svakom

[4] Pokušaj da se Θ shvati kao unitarni operator dovodi do antikomutacije sa hamiltonijanom; kao posledica, svojstvene energije bi se javljale u parovima suprotnog znaka, što bi protivurečilo ograničenosti odozdo i nezavisnosti od pravca brzina.

invarijantnom potprostoru za Θ može naći bazis sastavljen od parova konjugovanih vektora. Takav potprostor je očigledno parnodimenzionalan, a linearni operatori koji komutiraju sa Θ, u bazisu $\{|\, x_1 \rangle, \dots, |\, x_n \rangle, \Theta|\, x_1 \rangle, \dots, \Theta|\, x_n \rangle\}$ imaju oblik $\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$ (a i b su odgovarajuće podmatrice dimenzije n). Kao rezultat gornjih razmatranja, operator Θ se može predstaviti u obliku $\Theta = TK$, gde je T unitarni, a K antiunitarni operator kompleksne konjugacije u nekom bazisu. Pri tome iz $\Theta^2 = \pm I$ i $K^2 = I$ sledi $TT^* = \pm I$ (kompleksna konjugacija matrica u bazisu definisanom operatorom K).

Ako je G neka grupa prostornih transformacija (ili nekih drugih koje komutiraju sa θ), pomoću $D(G)$ ireducibilno reprezentovana u $\mathcal{H}$, iz osobina $D(G)$ sledi [12] način reprezentovanja θ. Naime, komutativnost na nivou grupe prenosi se na reprezentacije: $D(g) = \Theta D(g)\Theta^\dagger = TD^*(g)T^\dagger$. Šurove leme (§ A.2.2) odmah daju za slučaj reprezentacija treće vrste (§ A.3) da je $T = 0$. Ako je $D(G)$ reprezentacija prve vrste, u nekom bazisu je $D(g) = \Theta D(g)\Theta^\dagger = TD(g)T^\dagger$, te je $T = e^{\imath\phi} I$ i $TT^* = I$. Obrnuto, ako je $TT^* = I$, reprezentacija $R(g) = (T + e^{\imath\alpha} I)^{-1} D(g)(T + e^{\imath\alpha} I)$ (za svako α za koje je $T + e^{\imath\alpha} I$ nesingularan) je ekvivalentna sa $D(g)$ i realna. Stoga je jasno da slučaj $TT^* = -I$ odgovara reprezentacijama *II* vrste, kada $\Theta^2 = TT^*$ (ali ne i T) komutira sa $D(G)$ i zadovoljava Šurovu lemu. Sledi da su ireducibilni potprostori reprezentacija druge vrste, ma koje grupe, parnodimenzionalni, a u njima za operator vremenske inverzije važi $\Theta^2 = -I$.

Neka je $D(G)$ reducibilna realna reprezentacija, i $\mathcal{H}'$ jedan realno ireducibilni potprostor. Za reprezentacije prve vrste, ovaj potprostor je ireducibilan, a za reprezentacije *II* i *III* vrste može se razložiti na par ireducibilnih $\mathcal{H}^{(\mu)}$ i $\mathcal{H}^{(\mu)*}$ (očigledno iste dimenzije). U poslednjem slučaju u $\mathcal{H}'$ se može naći bazis u kome je redukovana reprezentacija $D'(G)$ razložena: $D'(g) = \begin{pmatrix} D^{(\mu)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(\mu)*}(g) \end{pmatrix}$. Izborom $T' = \begin{pmatrix} 0 & e^{\imath\varphi} I_\mu \\ e^{\imath\varphi} I_\mu & 0 \end{pmatrix}$, nalazi se operator $\Theta' = T'K_0$ koji komutira sa $D'(G)$ i važi $\Theta^2 = I'$. Pokazano je da je u prostorima reprezentacija prve vrste uvek moguće zadovoljiti ove uslove, te je direktni zbir $\oplus\Theta'$ takodje involutivni operator koji komutira sa $D(G)$: ako je $D(G)$ realna reprezentacija, vremenska inverzija se može reprezentovati antiunitarnom involucijom. Uslov komutativnosti $D(G)$ sa H dovodi do redukovanja H u ireducibilnim potprostorima. Tako se u $\mathcal{H}'$ za reprezentacije prve vrste redukovani operator H' može predstaviti realnom matricom (sa realnim svojstvenim vektorima), dok je za reprezentacije *II* i *III* vrste, u bazisu razlaganja na par ireducibilnih reprezentacija, $H' = \begin{pmatrix} H_\mu & 0 \\ 0 & H_\mu^* \end{pmatrix}$ (blok-dijagonalnost zbog komutacije sa $D(G)$, a konjugovanost blokova zbog komutacije sa Θ).

U orbitalnom prostoru su sve reprezentacije rotacione grupe celobrojne, znači realne, a sve reprezentacije translacione grupe (osim jedinične) su treće vrste, ali se javljaju u kompleksno konjugovanim parovima. Stoga je u orbitalnom prostoru vremenska inverzija reprezentovana involutivnim operatorom, te je moguće identifikovati je sa kompleksnom konjugacijom u nekom bazisu. Medjutim, u spinskom prostoru, za polucelobrojni spin se nalaze reprezentacije grupe SU(2) druge vrste, te se u bazisu u kome je S_z dijagonalno, iz zahteva $\Theta \boldsymbol{S} \Theta^\dagger = \boldsymbol{S}$ nalazi $\Theta = e^{\imath\pi S_y} K$ (za celobrojni spin je $(e^{\imath\pi S_y} K)^2 = 1$ i zadržava se ista definicija). Znači da su kod sistema invarijantnog na vremensku inverziju, a polucelog spina, svi invarijantni potprostori za

Θ, uključujući i svojstvene potprostore hamiltonijana, parno degenerisani. Ova pojava se naziva *Kramersova degeneracija* [26]. Treba uočiti da uslov $\Theta^2 = -I$ koincidira sa činjenicom da se kod polucelobrojnih reprezentacija rotacija za 2π, tj. jedinična transformacija kao i θ^2 reprezentuje i sa I i sa $-I$; zapravo nužnost ovakvog reprezentovanja vremenske inverzije je i proistekla iz zahteva kompatibilnosti sa dvostruko natkrivenom grupom rotacija.

2.6.2 Magnetne grupe

Pod magnetnom grupom simetrije sistema podrazumeva se grupa simetrije sistema čiji su elementi nastali kombinovanjem prostornih transformacija i vremenske inverzije [21, 12]. Zahvaljujući tome što je θ involucija koja komutira sa prostornim simetrijama, svaka magnetna grupa M sadrži grupu čisto prostornih simetrija G kao podgrupu indeksa 2. Pri tome su moguća dva slučaja: ako je θ simetrija sistema (npr. u hamiltonijanu nema magnetnih polja niti vremenske zavisnosti potencijala), tada je $M = G \otimes \{e, \theta\} = G + \theta G$; druga je mogućnost da θ nije simetrija, ali da postoji neka prostorna transformacija s, tako da je sistem invarijantan na θs (naravno, $s \notin G$ inače bi i θ bila simetrija), i tada je $M = G + \theta s G$. U prvom slučaju se magnetna grupa naziva *sivom*, a u drugom *crno-belom*. Crno-bela grupa je izomorfna grupi $G + sG$ prostornih transformacija. Tako se za svaku grupu prostornih transformacija G nalazi familija magnetnih grupa, u kojoj su jedna siva $G1' = G \otimes \{e, \theta\}$, i crno-bele $G(H) = H + \theta s H$ za svaku podgrupu H indeksa dva u G ($G(H)$ su izomorfne sa G).

Zbog navedenih specifičnosti vremenske inverzije, ulogu reprezentacija magnetnih grupa preuzimaju koreprezentacije (§ A.3): koset sa predstavnikom θs je reprezentovan antiunitarno. Ireducibilne koreprezentacije definišu simetrijske osobine vektora i operatora, dok njihova dimenzija odredjuje degeneraciju pojedinih svojstvenih potprostora hamiltonijana. U punoj analogiji sa načinom na koji unitarno reprezentovane grupe odredjuju standardne tenzore, te moguće osobine fizičkih sistema date simetrije, mogu se koristiti magnetne grupe i njihove koreprezentacije. Posebno u slučajevima kada se razmatraju spinski sistemi, vremenska inverzija postaje netrivijalna operacija, i koristi se za odredjivanje mogućih fero- ili antiferomagnetnih uredjenja. Konstrukcija ireducibilnih koreprezentacija metodom $*$-indukcije koristi ireducibilne reprezentacije prostornog dela magnetne grupe, i u slučajevima da su one *II* i *III* vrste dobijene koreprezentacije su dvostruke dimenzije (čime se omogućuje jednoznačno predstavljanje elemenata). Sa stanovišta čisto prostornih simetrija, dodatne degeneracije pojedinih svojstvenih energija izgledaju kao slučajne.

Magnetne grupe i njihove koreprezentacije su odredjene za sve klase geometrijskih simetrija. Tako, odredjene su 24 beskonačne familije [21] aksijalnih tačkastih grupa (medju njima 7 sivih) i 11 (5) posebnih magnetnih grupa (vezane za grupe $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{T}_d$, $\boldsymbol{T}_h$, $\boldsymbol{O}$, $\boldsymbol{O}_h$). Od njih su 90 (32) magnetne kristalografske tačkaste grupe koje odredjuju klase za 1421 (230 sive) magnetnu prostornu grupu [22]. Slično, postoji 68 (13) beskonačnih familija magnetnih linijskih grupa [24].

2.7 Dvostruke grupe

Poznati fizički argumenti doveli su do toga da se za sisteme sa polucelobrojnim spinom razmatraju reprezentacije grupe SU(2), koje su dvoznačne (odnosno projektivne) kada se interpretiraju kao reprezentacije grupe rotacija, tj. do efektivnog korišćenja dvostruko natkrivajuće grupe SU(2) kao grupe rotacija. Ova posledica netrivijalne povezanosti grupe rotacija mora se uzeti u obzir pri razmatranju spinskih sistema sa diskretnim simetrijama, i odgovarajuće dvoznačne reprezentacije se nalaze potpuno analogno, uvodjenjem dvostrukih grupa [3, 8]. Takve reprezentacije se, alternativno, mogu posmatrati i kao projektivne, na način objašnjen u § 2.1.2.

Ako je $P_+ < \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ neka tačkasta grupa čistih rotacija ($\boldsymbol{C}_n$, $\boldsymbol{D}_n$, $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{O}$ ili $\boldsymbol{Y}$), homomorfizam h (2.1) njoj pridružuje podgrupu $P^d \stackrel{\mathrm{def}}{=} h^{-1}(P_+)$ u SU(2). P_+^d sadrži element $-I_2$, i pri tome je za svaku rotaciju C_n ispunjeno $(h^{-1}(C_n))^n = -I_2$. Reprezentacije ove grupe se moraju koristiti za spinske sisteme; kao i kod rotacione grupe, neke od njih su obične reprezentacije P_+, a neke su dvoznačne. Za ostale tačkaste grupe, dvostruke grupe se konstruišu iz dvostrukih grupa rotacionih podgrupa, na isti način na koji su i same razmatrane grupe izvedene iz podgrupa. Naime, sve ostale tačkaste grupe P_- su ili oblika $P_- = P_+ + PRP_+$ ili $P_- = P_+ + PP_+ = P_+ \otimes \{e, P\}$, gde je $P_+ < \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, $R \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \setminus P_+$, a P prostorna inverzija. U prvom slučaju je $P' = P_+ + RP_+ \cong P_-$ podgrupa u $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, i P_-^d je izomorfno sa P'^d, a u drugom je P_-^d izomorfno direktnom proizvodu P_+^d sa grupom reda 2.

Dvoznačne reprezentacije, odnosno dvostruke grupe, ostalih geometrijskih simetrija nalaze se analogno, na osnovu strukture relevantnih grupa: izogonalne tačkaste grupe se zamenjuju dvostrukim grupama. Za sada su poznate, bar u standardnoj literaturi, dvostruke kristalografske tačkaste grupe i dvostruke prostorne grupe.

Način na koji vremenska inverzija kombinovana sa prostornim simetrijama daje magnetne grupe, primenjuje se i na dvostruke grupe prostornih simetrija. Na taj način se dobijaju dvostruke magnetne grupe koje omogućuju potpuno korišćenje prostornih simetrija i vremenske inverzije pri analizi sistema sa polucelim spinom. Za sada su poznati rezultati za kristalografske tačkaste i prostorne grupe (tj. klasifikacija i koreprezentacije odgovarajućih magnetnih dvostrukih grupa).

2.8 Identične čestice: permutacije

Fizički očigledan zahtev da kod sistema sa N identičnih čestica njihove permutacije ne mogu proizvesti opservabilne efekte, uvodi permutacionu grupu S_N kao dodatnu grupu simetrije. Konsekventna, a ipak veoma jednostavna, primena metoda teorije grupa u ovom slučaju predstavlja jednu od najlepših ilustracija suštinskog značaja simetrije u fizici.

S_N je grupa reda $N!$, čiji se svaki element može predstaviti kao kompozicija odredjenog broja *transpozicija*, najjednostavnijih permutacija koje medjusobno permutuju samo dve čestice, ne menjajući ostale. Stoga se kao podgrupa indeksa 2 javlja grupa A_N, svih parnih permutacija (kompozicije parnog broja transpozicija), i može se izvršiti razlaganje na kosete $S_N = A_N + \tau A_N$, gde je τ bilo koja transpozicija. Posledica je da S_N ima *alternirajuću* reprezentaciju,

$A^-(\pi) \stackrel{\text{def}}{=} (-1)^\pi$ (uobičajeno je istim slovom obeležiti i permutaciju i njenu parnost). Poslednja značajna grupno-teorijska činjenica je da su jedinična, $A^+(S_N)$, i alternirajuća, $A^-(S_N)$, jedine jednodimenzionalne reprezentacije svake permutacione grupe.

Ako je $\mathcal{H}$ jednočestični prostor stanja, sa bazisom $\{|\,1\,\rangle,\ldots,|\,n\,\rangle\}$, kvantna mehanika a priori zahteva da se sistem N čestica opisuje u $\mathcal{H}^N$ (N-ti tenzorski stepen). U nekorelisanom bazisu

$$|\,i_1,\ldots,i_N\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,i_1\,\rangle_1 \otimes \ldots \otimes |\,i_N\,\rangle_N,\ i_1,\ldots,i_n = 1,\ldots,n, \tag{2.2}$$

permutacija π čestica se manifestuje kao permutacija njihovih stanja, čime definiše reprezentujući operator $D(\pi)|\,i_1,\ldots,i_N\,\rangle = |\,i_{\pi 1},\ldots,i_{\pi N}\,\rangle$. Ova reprezentacija S_N nije ireducibilna; simetrični i antisimetrični potprostor su višestruki ireducibilni potprostori $\mathcal{H}^N_\pm$ reprezentacija $A^\pm(S_N)$, te su njihovi projektori, tzv. *simetrizator* i *antisimetrizator*, $P^\pm = \frac{1}{N!}\sum_\pi (\pm)^\pi D(\pi)$. Zahtev neopservabilnosti dejstva permutacije znači da se fizički relevantna stanja transformišu po jednodimenzionalnim reprezentacijama ove grupe, odnosno da su iz potprostora $\mathcal{H}^N_+$ ili $\mathcal{H}^N_-$. Pri tome, za $|\,+\,\rangle$ iz $\mathcal{H}^N_+$ i $|\,-\,\rangle$ iz $\mathcal{H}^N_-$, transpozicije τ preslikava $|\,x\,\rangle = \alpha|\,+\,\rangle + \beta|\,-\,\rangle$ u vektor neproporcionalan sa $|\,x\,\rangle$, time i fizički različit. Očigledno, superpozicija stanja različite parnosti nije dozvoljena, te je relevantni prostor samo $\mathcal{H}^N_+$ ili $\mathcal{H}^N_-$. Bozoni su sistemi opisani simetričnim potprostorom, dok se antisimetrizuju fermioni. Ispostavlja se da, u okviru relativističke kvantne teorije, uslov lokalnosti (§ 2) odredjuje da je spin bozona celobrojan, a fermiona polucelobrojan [27]. Treba napomenuti da je permutaciona simetrija, za razliku od do sada razmatranih, zadata kao grupa simetrija stanja, te je (fizička) invarijantnost stanja uzrokovala sužavanje početnog prostora $\mathcal{H}^N$, tzv. superselekciju jednog potprostora. Sledi da se operatori koji imaju fizički smisao moraju redukovati u ovim potprostorima, što odmah dovodi do njihove invarijantnosti pri permutacijama čestica.

Oblik (anti)simetrizatora daje niz čisto simetrijskih rezultata relevantnih za kvantni opis identičnih čestica. Svaki vektor $|\,x\,\rangle = |\,i_1,\ldots,i_N\,\rangle$ bazisa (2.2) zadaje n-torku *brojeva popunjenosti* $\boldsymbol{p}(x) = (p_1(x),\ldots,p_n(x))$: $p_k(x)$ je broj pojavljivanja stanja $|\,k\,\rangle$ medju jednosčestičnim stanjima $|\,i_1\,\rangle,\ldots,|\,i_N\,\rangle$ od kojih je formiran $|\,x\,\rangle$; Jasno je da je $p_k(x) \geq 0$ i $\sum_{k=0}^n p_k(x) = N$.

Očigledno, operatori $D(\pi)$ bazisni vektor $|\,x\,\rangle$ preslikavaju u vektore sa istim brojevima popunjenosti. Zato su matrični elementi $D_{xx'}(\pi)$ jednaki 0 ukoliko je $\boldsymbol{p}(x) \neq \boldsymbol{p}(x')$, pa isto važi i za matrične elemente (anti)simetrizatora. Skalarni proizvod vektora nastalih (anti)simetrizacijom nekorelisanih stanja $|\,x\,\rangle$ i $|\,x'\,\rangle$ je $\langle\,x\,|P^\pm P^\pm|\,x'\,\rangle = \langle\,x\,|P^\pm|\,x'\,\rangle$, tj. jednak je matričnom elementu projektora. Stoga su svi (anti)simetrizovani vektori sa različitim brojevima popunjenosti medjusobno ortogonalni.

Sa druge strane, ako je $\boldsymbol{p}(x) = \boldsymbol{p}(x')$, postoji permutacija ρ za koju je $D(\rho)|\,x\,\rangle = |\,x'\,\rangle$. Zato za projekcije važi

$$P^\pm|\,x'\,\rangle = \frac{1}{N!}\sum_\pi (\pm)^\pi D(\pi\rho)|\,x\,\rangle = (\pm)^\rho P^\pm|\,x\,\rangle, \tag{2.3}$$

tj. (anti)simetrizacijom svih vektora bazisa (2.2) sa istim brojevima popunjenosti dobija se isti vektor (do na znak kod fermiona). Prethodni zaključak, o ortogonalnosti tako dobijenih stanja, pokazuje da se prostori $\mathcal{H}^N_\pm$ mogu dobiti na sledeći način: za svaki mogući izbor brojeva popunjenosti $\boldsymbol{p}$ odredi se jedan vektor $|\,x\,\rangle$ bazisa (2.2), takav da je $\boldsymbol{p}(x) = \boldsymbol{p}$. (Anti)simetrizacijom vektora $|\ x\ \rangle$ se nalazi vektor $|\ \boldsymbol{p}\ \rangle_\pm$. Za različite $\boldsymbol{p}$ ovi vektori su medjusobno ortogonalni i obrazuju $\mathcal{H}^N_\pm$.

Konačno, da bi se odredila dimenzija bozonskog i fermionskog prostora, treba odrediti linearno nezavisne vektore $|\ \boldsymbol{p}\ \rangle$; oni su medjusobno ortogonalni, pa je dovoljno odrediti koliko ih je nenultih. Kako su matrični elementi $D(\pi)$ ili 1 ili 0, skalarni proizvod $\langle\ x\ |P^+|\ x\ \rangle = \frac{1}{N!}\sum_\pi \langle\ x\ |D(\pi)|\ x\ \rangle$ je uvek različit od nule (jer ne može doći do poništavanja sabiraka, a $\langle\ x\ |D(e)|\ x\ \rangle = 1$). Tako, za svaki izbor $\boldsymbol{p}$ postoji tačno jedan nenulti vektor $|\ \boldsymbol{p}\ \rangle_+$ u $\mathcal{H}^N_+$, pa je $\dim \mathcal{H}^N_+ = \binom{N+n-1}{N}$. U slučaju fermiona treba uočiti da, ukoliko je neko $p_k(x)$ veće od 1 (npr. $i_1 = i_2 = k$), postoji bar jedna transpozicija koja permutuje samo čestice u istom stanju (npr. prvu i drugu), te ne menja vektor $|\ x\ \rangle$. Za antisimetrizovani vektor $P^-|\ x\ \rangle$ se nalazi iz (2.3) $\langle\ x\ |P^-|\ x\ \rangle = \langle\ x\ |P^- D(\rho)|\ x\ \rangle = -\langle\ x\ |P^-|\ x\ \rangle = 0$. Stoga su nenulti vektori $|\ \boldsymbol{p}\ \rangle_-$ samo oni sa brojevima popunjenosti 0 ili 1, njih ukupno $\dim \mathcal{H}^N_- = \binom{n}{N}$. Ovo je zapravo simetrijsko objašnjenje *Paulijevog principa*. U oba slučaja normiranjem nenultih vektora $|\ \boldsymbol{p}\ \rangle_\pm$ nalazi se tzv. *bazis brojeva popunjenosti*.

Glava 3

NORMALNE MODE

Harmonijsko oscilovanje je jedan od osnovnih vidova dinamike svakog sistema. Mogućnost njegovog egzaktnog opisa i u klasičnoj i u kvantnoj teoriji uzrokovala je da se i složeni dinamički problemi svode na približni oscilatorni. Baš ta tehnika, harmonijske aproksimacije[1], u korenu je (kvazi)-čestične interpretacije, koju, uskladjujući svoj komplikovani aparat sa iskustvom, a posteriori nudi kvantna teorija (postavlja se i pitanje fizičkog značenja poznatih rezultata bez poziva na ovu aproksimaciju, npr. u slučaju da harmonijski problem nije egzaktno rešiv). U tom smislu razmatranje harmonijskih oscilacija (bez obzira na sadržaj koji im je pridružen) čini osnovu svake fizičke teorije, te plodno ugradjivanje simetrijskih tehnika u ovaj problem ima dalekosežni značaj.

3.1 Harmonijski potencijal

Složeni fizički sistem, sastavljen od n atoma (pod atomima se podrazumevaju gradivni elementi tog sistema koji se pojavljuju kao elementarni na datom nivou razmatranja, tj. mogu biti i joni ili molekuli, elektroni itd.), opisan je $6n$-dimenzionalnim faznim prostorom u klasičnoj mehanici [1]; u kvantnoj mehanici tome odgovara orbitalni Hilbertov prostor sa po $3n$ koordinata i impulsa u osnovnom skupu opservabli. Svakom atomu pridružuju se po tri Dekartova orta u konfiguracionom i impulsnom prostoru, čime se nalazi bazis celog prostora:

$$\{|\ \mathbf{q}, \alpha i\ \rangle, |\ \mathbf{p}, \alpha i\ \rangle \mid \alpha = 1, ..., n; i = 1, 2, 3\}. \tag{3.1}$$

Time vektor $\sum_{\alpha i}(q_{\alpha i}|\ \mathbf{q}, \alpha i\ \rangle + p_{\alpha i}|\ \mathbf{p}, \alpha i\ \rangle)$ iz faznog prostora postaje kolona koordinata $\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = (q_{11}, \dots p_{n3})^T$. Bazis (3.1) je odabran tako da su zadovoljene *kanonične komutacione relacije*[2]

$$[q_{\alpha i}, q_{\beta j}] = [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0, \quad [q_{\alpha i}, p_{\beta j}] = c\delta^{\alpha}_{\beta}\delta^{i}_{j}$$

[1] $\chi\alpha\rho\mu o\nu\eta$ ili $\chi\alpha\rho\alpha$ znači radost, veselje.

[2] Radi kompaktnog zapisivanja izraza u klasičnoj i kvantnoj teoriji, u ovoj glavi će biti korišćene unekoliko nestandardne oznake. U klasičnoj mehanici [,] označava Puasonovu (*Poisson*) zagradu, $c = 1$ i $\hbar = 1$, a u kvantnoj je [,] operatorski komutator, $c = \imath$, a $\hbar$ je Plankova konstanta.

Pri kanonskim transformacijama, promena bazisa u konfiguracionom prostoru praćena je kontragredijentnom promenom bazisa impulsnog prostora, i obratno.

Ako se položaj stabilne ravnoteže sistema, tj. minimuma potencijalne energije, odabere za koordinatni početak, koordinata $q_{\alpha i}$ je otklon atoma α od ravnotežnog položaja u $i-$tom pravcu. Razvojem potencijala u red po ovim pomerajima, zaključno sa kvadratnim članovima (*harmonijska aproksimacija*), za hamiltonijan sistema nalazi se (iz hamiltonijana se uvek mogu izostaviti konstantni sabirci, a prvi izvodi potencijala u tački ravnoteže nestaju, te nedostaju $V(0)$ i linearni članovi):

$$H=\frac{1}{2}\sum_{\alpha i}\frac{1}{m_\alpha}p_{\alpha i}^2+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta ij}V^{\alpha i}_{\beta j}q_{\alpha i}q_{\beta j}=\frac{1}{2}\,(\,q,\quad p\,)\,\boldsymbol{H}\begin{pmatrix}q\\ p\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{H}=\begin{pmatrix}V & 0\\ 0 & M^{-1}\end{pmatrix}, \tag{3.2}$$

gde je matrica $V=(V^{\alpha i}_{\beta j})=(\frac{\partial^2 V(0)}{\partial q_{\alpha i}\partial q_{\beta j}})$ simetrična i nenegativna (jer je u pitanju minimum potencijala), dok je $M=(M^{\alpha i}_{\beta j})=(m_\alpha\delta^\alpha_\beta\delta^i_j)$ pozitivna matrica. Na ovaj način hamiltonijan je zadat matricom $\boldsymbol{H}$.

Ukoliko bi matrica V bila dijagonalna, ceo sistem bi se mogao razmatrati kao skup $3n$ neinteragujućih linearnih harmonijskih oscilatora, sa dobro poznatim svojstvima i u klasičnoj i u kvantnoj teoriji. Pošto je simetrična i pozitivna ona se može dijagonalizovati razmatranjem problema u svojstvenom bazisu. No, zbog obavezne kanoničnosti, prelazak na svojstveni bazis u konfiguracionom je i transformacija u impulsnom prostoru, čime tek obezbedjena dijagonalnost V može značiti pojavu nedijagonalnih članova u kinetičkoj energiji. Da bi se to izbeglo pribegava se promeni skalarnog proizvoda: novi skalarni proizvod u impulsnom prostoru zadaje se pozitivnom dijagonalnom matricom M^{-1} kao metrikom. Bazisni vektori $\mid \mathbf{p},\alpha i\ \rangle$ ostaju ortogonalni, ali ne i normirani, te se normiraju, množenjem sa $\sqrt{m_\alpha}$. Kanoničnost transformacije se obezbedjuje uvodjenjem M kao metrike u konfiguracionom prostoru. Na taj način kinetička energija odredjuje metriku celog faznog prostora, a time i ortonormirani bazis:

$$\{\mid \mathbf{Q},\alpha i\ \rangle=\frac{1}{\sqrt{m_\alpha}}\mid \mathbf{q},\alpha i\ \rangle,\quad \mid \mathbf{P},\alpha i\ \rangle=\sqrt{m_\alpha}\mid \mathbf{p},\alpha i\ \rangle\mid \alpha=1,...,n;i=1,2,3\}. \tag{3.3}$$

Tačka sa koordinatama $\begin{pmatrix}q\\ p\end{pmatrix}$ u bazisu (3.1) se u bazisu (3.3) reprezentuje kolonom $\begin{pmatrix}Q\\ P\end{pmatrix}$, sa koordinatama $Q_{\alpha i}=\sqrt{m_\alpha}q_{\alpha i}$, $P_{\alpha i}=\frac{1}{\sqrt{m_\alpha}}p_{\alpha i}$. Uz pomoć *dinamičke matrice*

$$W=M^{-\frac{1}{2}}VM^{-\frac{1}{2}},\quad W^{\alpha i}_{\beta j}=\frac{1}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}V^{\alpha i}_{\beta j},$$

koja je, kako se lako proverava, nasledila simetričnost i nenegativnost od V, (3.2) postaje:

$$H=\frac{1}{2}\,(\,Q,\quad P\,)\,\boldsymbol{H}_M\begin{pmatrix}Q\\ P\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{H}_M=\begin{pmatrix}W & 0\\ 0 & I\end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

Invarijantnost jedinične matrice (impulsni prostor) pri transformacijama sličnosti obezbedjuje dijagonalnost kinetičke energije nakon promene bazisa. Prema tome, treba odrediti svojstveni bazis za W, odakle se nalazi i kompletan bazis faznog prostora:

$$\{|\ \mathbf{Q},\omega_k l\ \rangle, |\ \mathbf{P},\omega_k l\ \rangle \mid l=1,...,n_k, \sum_k n_k = 3n\}, \quad W|\ \mathbf{Q},\omega_k l\ \rangle = \omega_k^2 |\ \mathbf{Q},\omega_k l\ \rangle.$$

U koordinatama Q_{ki}, P_{ki} ovog bazisa hamiltonijan dobija poznatu formu (u kvantnoj teoriji kompleksna konjugacija postaje adjungovanje):

$$H = \frac{1}{2}\sum_{ki}(P_{ki}^2 + \omega_k^2 Q_{ki}^2) = \frac{1}{2}\sum_{ki}\hbar\omega_k(b_{ki}^* b_{ki} + b_{ki} b_{ki}^*). \tag{3.5}$$

Drugi izraz je u koordinatama bazisa

$$\{|\ \mathbf{b},ki\ \rangle = \sqrt{\hbar}\frac{|\ \mathbf{Q},\omega_k i\ \rangle - \imath\omega_k|\ \mathbf{P},\omega_k i\ \rangle}{\sqrt{2\omega_k}}, \quad |\ \mathbf{b}^*,ki\ \rangle = \sqrt{\hbar}\frac{|\ \mathbf{Q},\omega_k i\ \rangle + \imath\omega_k|\ \mathbf{P},\omega_k i\ \rangle}{\sqrt{2\omega_k}}\}. \tag{3.6}$$

Pri tome su zadovoljene *bozonske komutacione relacije*

$$[b_{ki}, b_{lj}^*] = b\delta_l^k\delta_j^i, \quad [b_{ki}, b_{lj}] = [b_{ki}^*, b_{lj}^*] = 0$$

($b = -\imath$ i $b = 1$ u klasičnoj i kvantnoj mehanici). Vektori svojstvenog bazisa odredjuju nezavisne načine kretanja sistema kao celine, jer su linearne kombinacije vektora različitih atoma, i zato se nazivaju *normalne mode*. Kada je sistem u ravnotežnom položaju, sve normalne koordinate su jednake nuli, te nenultost neke od njih može da se shvati kao ekscitacija sistema. Dinamika sistema u okolini ravnotežnog položaja se svodi na nezavisno pobudjivanje pojedinih normalnih ekscitacija. Zato se normalne ekscitacije u nekim fizičkim teorijama nazivaju *elementarnim česticama* ili *kvazi-česticama*, a stanje minimuma, kada ovih nema, *vakuum*. Kada prilikom kvantizacije bozonske koordinate postanu operatori $b_{ki}^\dagger$ i b_{ki}, hamiltonijan ima dobro poznati oblik $H = \sum_{ki}\hbar\omega_k(b_{ki}^\dagger b_{ki} + \frac{1}{2})$, a ekvidistantnost svojstvenih vrednosti pojedinih sabiraka ($\hbar\omega_k(n_{ki}+\frac{1}{2})$, $n_{ki} = 0,1,...$) opravdava čestičnu sliku: iz stanja $|\ \ldots, n_{ki}, \ldots\ \rangle$, operator $b_{ki}^\dagger$ prevodi sistem u stanje $|\ \ldots, n_{ki}+1, \ldots\ \rangle$, kreirajući iz vakuuma bozon energije $\hbar\omega_k$.

3.2 Primena simetrije

Odredjivanje normalnih moda zahteva rešavanje svojstvenog problema matrice W, a time i $\boldsymbol{H}$, jer je u impulsnom prostoru bazis odredjen kanoničnošću. Ranije (§ 1) je pokazano kako poznavanje simetrije sistema takav zadatak uprošćava, ponekad čak i potpuno rešava.

Za primenu grupno-teorijskih metoda [6] osnovno je uočiti da se konfiguracioni prostor $\mathcal{H}_q = \mathbb{R}^{3n}$ može shvatiti kao prostor $\mathbb{R}^n$, u kome svaki vektor apsolutnog bazisa opisuje jednu česticu, pri čemu svaka čestica unosi prostor $\mathbb{R}^3$, u kome se opisuje njen položaj. Na taj način je $\mathcal{H}_q = \mathbb{R}^n \otimes \mathbb{R}^3$ (ovakve konstrukcije se nazivaju raslojeni prostori, u smislu da svakoj čestici odgovara sloj $\mathbb{R}^3$ ukupnog prostora). Bazisi $\{|\ \mathbf{q},\alpha i\ \rangle = |\ \alpha\ \rangle|\ i\ \rangle\}$ i $\{|\ \mathbf{Q},\alpha i\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha}}|\ \alpha\ \rangle|\ i\ \rangle\}$ su nekorelisani bazisi ovog proizvoda. Sve isto važi i za impulsni prostor $\mathcal{H}_p$, te je fazni prostor $\mathcal{H} = \mathcal{H}_q \oplus \mathcal{H}_p = \mathbb{R}^n \otimes (\mathbb{R}^3 \oplus \mathbb{R}^3)$. Sada je lako uočiti da se geometrijske transformacije koje ostavljaju sistem nepromenjenim, mogu faktorisati tako da jedan faktor odražava preslikavanje medju različitim atomima (naravno, iste vrste), odnosno predstavlja permutaciju sistema, a drugi opisuje transformaciju u $\mathbb{R}^3$ na standardni način (polarno-vektorska reprezentacija i za koordinate i za impulse). Tako elementu g grupe simetrije G sistema odgovara u $\mathcal{H}_q$ (i u $\mathcal{H}_p$) ortogonalna matrica $D^d(g) \stackrel{\text{def}}{=} D^P(g) \otimes D^v(g)$, $D^d(g)|\ \mathbf{Q}, \alpha i\ \rangle = \sum_{\beta j} D^{P\beta}_{\ \alpha}(g) D^{vj}_{\ i}(g)|\ \mathbf{Q}, \beta j\ \rangle$, tj. $D^{d\beta j}_{\ \alpha i}(g) = D^{P\beta}_{\ \alpha}(g) D^{vj}_{\ i}(g)$. $D^P(G)$ je permutaciona reprezentacija G, koja opisuje dejstvo grupe na atomima datog sistema, dok je $D^v(G)$ polarno-vektorska reprezentacija G, koja daje geometrijsku interpretaciju elemenata grupe i ne zavisi od sistema.

Na ovaj način formirana *dinamička reprezentacija* grupe G, komutira sa M i V, pa i sa W. Dalje sledi obična procedura odredjivanja standardnog svojstvenog bazisa. Za svaku ireducibilnu reprezentaciju koja se pojavljuje pri razlaganju $D^d(G)$, odredi se grupni projektor $P_1^{(\mu)}$ i njegova oblast likova $\mathcal{H}_{q1}^{(\mu)}$. U tim potprostorima W se redukuje, pa se rešava svojstveni problem matrice $W(\mu 1) = P_1^{(\mu)} W$, i nalazi standardni svojstveni bazis u $\mathcal{H}_q$:

$$\{|\ \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\ \rangle \mid \mu = 1, ..., s; t_\mu = 1, ..., a_\mu; m = 1, ..., n_\mu\} \quad W|\ \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\ \rangle = \omega^2(\mu t_\mu)|\ \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\ \rangle.$$

Kanoničnošću je, kao i do sada, odredjen bazis $|\ \mathbf{P}, \mu t_\mu m\ \rangle$ u $\mathcal{H}_p$.

U gornjem postupku su korišćene kompleksne reprezentacije grupe G, te je, implicitno, umesto prostora $\mathbb{R}^{3n}$, konfiguracija opisivana u kompleksifikovanom prostoru $\mathbb{C}^{3n}$, i uvedeno $3n$ suvišnih stepeni slobode (jer je skupovno $\mathbb{C}^{3n} = \mathbb{R}^{6n}$). Treba zapaziti da vektori $|\ \mathbf{P}, \mu t_\mu m\ \rangle$, zbog kontragredijentnosti promene, obrazuju potprostor reprezentacije $D^{(\mu)^*}(G)$ u impulsnom prostoru. Koordinate i impulsi, $Q_{\mu t_\mu m}$ i $P_{\mu t_\mu m}$, ne moraju biti realni, te skalarni proizvod (3.4) postaje:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mu, t_\mu, m} (P^*_{\mu t_\mu m} P_{\mu t_\mu m} + \omega^2(\mu t_\mu) Q^*_{\mu t_\mu m} Q_{\mu t_\mu m}),$$

gde su $Q^*_{\mu t_\mu m}$, $Q_{\mu t_\mu m}$, $P^*_{\mu t_\mu m}$ i $P_{\mu t_\mu m}$ nezavisne promenljive. Sa druge strane, već iz postavke problema, tj. izraza (3.5), sledi da je moguće naći realne koordinate. Na jeziku teorije grupa rešenje ovog prividnog problema je u realnosti reprezentacije $D^d(G)$ (§ 2.6.1):

(*i*) ako je $D^{(\mu)}(G)$ realna reprezentacija (*I* vrste), onda je $W(\mu 1)$ simetrična matrica, pa su i odgovarajući svojstveni vektori realni, tako da se pomeraji izražavaju realnim koordinatama;

(*ii*) ako je $D^{(\mu)}(G)$ pseudorealna reprezentacija (*II* vrste), tada je a_μ parno, degeneracija svojstvenih vrednosti hermitskog operatora $W(\mu 1)$ je parna, i može se odabrati bazis koji je realan, na isti način, i sa istim posledicama kao

(*iii*) u slučaju kada je $D^{(\mu)}(G)$ kompleksna reprezentacija (*III* vrste) i važi da je $a_\mu = a_{\mu^*}$, a $W(\mu 1) = W^*(\mu^* 1)$ (sa μ^* je označena reprezentacija konjugovana μ-toj). Kako su i $W(\mu 1)$ i $W(\mu^* 1)$ hermitski operatori, sa realnim svojstvenim vrednostima, iz poslednje relacije sledi da su im svojstvene vrednosti iste, a da su odgovarajući svojstveni vektori, reprezentovani u bazisu (3.3), kompleksno konjugovani: $\langle\ \mathbf{Q}, \alpha i|\ \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\ \rangle = \langle\ \mathbf{Q}, \alpha i|\ \mathbf{Q}, \mu^* t_{\mu^*} m\ \rangle^*$ za $t_\mu = t_{\mu^*}$.

Drugim rečima, kako je dinamička reprezentacija realna, a početni hamiltonijan invarijantan na vremensku inverziju, radi se sa ireducibilnim koreprezentacijama magnetne grupe $G \otimes \{e, \theta\}$. Stoga se za reprezentacije *II* i *III* vrste može uzeti realni ali ne i standardni svojstveni bazis u $\mathcal{H}_q^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_q^{(\mu^* t_\mu)}$ za W, a zatim kanoničnošću dopuniti i bazisom u $\mathcal{H}_p^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu^* t_\mu)}$:

$$\begin{aligned} \mid \mathbf{Q},\mu t_\mu m, r\,\rangle &= \frac{\mid \mathbf{Q},\mu t_\mu m\,\rangle + \mid \mathbf{Q},\mu^* t_\mu m\,\rangle}{\sqrt{2}} \quad , \quad \mid \mathbf{Q},\mu t_\mu m, i\,\rangle = \frac{\mid \mathbf{Q},\mu t_\mu m\,\rangle - \mid \mathbf{Q},\mu^* t_\mu m\,\rangle}{-\sqrt{2}\imath}, \\ \mid \mathbf{P},\mu t_\mu m, r\,\rangle &= \frac{\mid \mathbf{P},\mu t_\mu m\,\rangle + \mid \mathbf{P},\mu^* t_\mu m\,\rangle}{\sqrt{2}} \quad , \quad \mid \mathbf{P},\mu t_\mu m, i\,\rangle = \frac{\mid \mathbf{P},\mu t_\mu m\,\rangle - \mid \mathbf{P},\mu^* t_\mu m\,\rangle}{\sqrt{2}\imath}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

U ovako definisanom bazisu vektori pomeranja su realni, i hamiltonijan je:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{I}\sum_{t_\mu m}(P^2_{\mu t_\mu m} + \omega^2(\mu t_\mu)Q^2_{\mu t_\mu m}) + \frac{1}{2}\sum_{II,III}{}'\sum_{t_\mu m}\sum_{l=r,i}(P^2_{\mu t_\mu ml} + \omega^2(\mu t_\mu)Q^2_{\mu t_\mu ml}) =$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sum_{I}\sum_{t_\mu m}\omega(\mu t_\mu)(b^*_{\mu t_\mu m}b_{\mu t_\mu m} + b_{\mu t_\mu m}b^*_{\mu t_\mu m}) + \frac{\hbar}{2}\sum_{II,III}{}'\sum_{t_\mu ml}\omega(\mu t_\mu)(b^*_{\mu t_\mu ml}b_{\mu t_\mu ml} + b_{\mu t_\mu ml}b^*_{\mu t_\mu ml})$$

(oznakom $\sum'$ istaknuto je da se sumira po polovini skupa kompleksnih reprezentacija – *II* i *III* vrste). Drugi izraz je u bazisu $\{\mid \mathbf{b}, \mu t_\mu m\,\rangle, \mid \mathbf{b}^*, \mu t_\mu m\,\rangle\}$ za realne, odnosno $\{\mid \mathbf{b}, \mu t_\mu m, r\,\rangle$, $\mid \mathbf{b}^*, \mu t_\mu m, r\,\rangle$, $\mid \mathbf{b}, \mu t_\mu m, i\,\rangle$, $\mid \mathbf{b}^*, \mu t_\mu m, i\,\rangle\}$ kod kompleksnih reprezentacija. Treba uočiti da kod kompleksnih reprezentacija vektori sa indeksom r (ili i) ne obrazuju ireducibilni potprostor, te bazis nije standardni. Medjutim, koordinate $b_{\mu t_\mu m,r}, b^*_{\mu t_\mu m,r}$ (isto za i) zadovoljavaju bozonske komutacione relacije.

Zbog kontragredijentnosti reprezentovanja u impulsnom i konfiguracionom prostoru, koordinate u bazisu tipa (3.6), formirane direktno od vektora standardnog bazisa, ne bi imale ni odgovarajuće simetrijske osobine, niti bi zadovoljavale bozonske relacije. Stoga se za kompleksne reprezentacije uvodi u $\mathcal{H}_q^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_q^{(\mu^* t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu^* t_\mu)}$ bazis:

$$\begin{aligned} \{\mid \mathbf{b}, \mu t_\mu m\,\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}}\mid \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\,\rangle - \imath\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}}\mid \mathbf{P}, \mu^* t_\mu m\,\rangle, \\ \mid \mathbf{b}^*, \mu t_\mu m\,\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}}\mid \mathbf{Q}, \mu^* t_\mu m\,\rangle + \imath\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}}\mid \mathbf{P}, \mu t_\mu m\,\rangle, \\ \mid \mathbf{b}, \mu^* t_\mu m\,\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}}\mid \mathbf{Q}, \mu^* t_\mu m\,\rangle - \imath\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}}\mid \mathbf{P}, \mu t_\mu m\,\rangle, \\ \mid \mathbf{b}^*, \mu^* t_\mu m\,\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}}\mid \mathbf{Q}, \mu t_\mu m\,\rangle + \imath\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}}\mid \mathbf{P}, \mu^* t_\mu m\,\rangle\,\}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Tek u koordinatama bazisa (3.8), hamiltonijan dobija formu (3.5) (uz promenjeni sadržaj oznaka):

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mu t_\mu m}\hbar\omega(\mu t_\mu)(b^*_{\mu t_\mu m}b_{\mu t_\mu m} + b_{\mu t_\mu m}b^*_{\mu t_\mu m}).$$

Pošto je $Q_{\mu t_\mu m} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}}(b_{\mu t_\mu m}+b^*_{\mu^* t_\mu m})$ i $P_{\mu t_\mu m} = \imath\sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}}(b^*_{\mu t_\mu m}-b_{\mu^* t_\mu m})$, lako se proveravaju bozonske komutacione relacije. Vidi se da se kompleksno konjugovane koordinate transformišu po konjugovanim reprezentacijama, te nije moguće razdvojiti konjugovane ireducibilne potprostore. Konačno, dok kreacioni operatori u prethodnom hamiltonijanu povezuju različite ireducibilne reprezentacije, u poslednjem indukuju kompleksne pomeraje. Zbog korišćenja ovakvih koordinata u tzv. kanoničnom kvantovanju, govori se o nesaglasnosti simetričnih koordinata i kanoničnog kvantovanja.

Niz svojstava dinamičke reprezentacije čini da je jedan od najznačajnijih koraka u ovom postupku, njeno nalaženje i redukcija, iznenadjujuće jednostavan. Pre svega, matrice $D^d(g)$ mogu imati nenulte elemente samo na mestima koja povezuju atome iste vrste (inače ne bi održavale sistem nepromenjenim), a dijagonalni elementi su im različiti od nule samo za atome koji ostaju nepokretni pri datoj operaciji. Preciznije, $D^P_{\alpha\beta}(g) = \delta_{\beta,g\alpha}$ pa se u izrazu za redukciju $D^d(G) = \sum_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$ nalazi:

$$a_\mu = \frac{1}{\mid G \mid}\sum_g \chi^{(\mu)*}(g)\chi^d(g), \quad \chi^d(g) = n(g)\chi^v(g).$$

$n(g) = \chi^P(g)$ je broj atoma nepokretnih pri transformaciji g, a $\chi^v(g)$ je karakter polarno-vektorske reprezentacije koji se lako izračunava. Za translacije je $\chi^v(\ I\ |\boldsymbol{z}\ ) = 3$, jer ne menjaju vektore. Kod rotacije za ugao φ je $\chi^v(R(\varphi)) = 1 + 2\cos(\varphi)$, a za proizvod inverzije i rotacije je $\chi^v(PR(\varphi)) = -1 - 2\cos(\varphi)$. Očigledno, ako transformacija g nema nepokretnih tačaka u $\mathbb{R}^3$, ona a priori pomera sve atome, pa je $\chi^d(g) = n(g) = 0$. Tako, za $R\boldsymbol{t} = \boldsymbol{t}$ element $(R|\boldsymbol{t})$ sadrži i translaciono dejstvo, i nezavisno od razmatranog sistema je $\chi^d(R|\boldsymbol{t}) = 0$ (nenultost vektora $\boldsymbol{t}$ ne obezbedjuje translaciono delovanje celog elementa: npr. za $\boldsymbol{t} = t\boldsymbol{e}_z$ i $R = \sigma_h$, kada je $R\boldsymbol{t} = -\boldsymbol{t}$, ceo element $(\sigma_h|t\boldsymbol{e}_z)$ je refleksija u horizontalnoj ravni $z = \frac{t}{2}$).

Drugo važno svojstvo dinamičke reprezentacije je posledica disjunktnosti orbita dejstva grupe G na datom sistemu. Potprostor dobijen kao konfiguracioni (ili fazni) prostor orbite je invarijantni potprostor celog konfiguracionog (faznog) prostora. Stoga se dinamička reprezentacija redukuje u potprostorima orbita, te predstavlja zbir dinamičkih reprezentacija orbita sistema (svojstvo nasledjeno od permutacione $D^P(G)$). Izvedeni zaključak inspiriše nalaženje svih neekvivalentnih orbita u $\mathbb{R}^3$ odredjene grupe, te razmatranje vibracija proizvoljnih sistema te simetrije.

Dinamička reprezentacija opisuje sva odstupanja sistema od ravnotežnog položaja: vibracije, translacije i rotacije. Translacije i rotacije opisuju kretanja sistema kao celine (npr. kretanje centra masa), te ih treba izdvojiti da bi se posmatrali samo unutrašnji stepeni slobode. Pomeranja nastala translacijama, odnosno rotacijama transformišu se po polarno- i aksijalno-vektorskoj reprezentaciji, te se dozvoljene translacione, odnosno rotacione mode transformišu po odgovarajućim ireducibilnim komponentama ovih reprezentacija, i te komponente treba izbaciti iz dinamičke reprezentacije da bi preostale mode opisivale vibracije. Kod konačnih sistema postoji svih 6 translacionih i rotacionih moda ako su nelinearni, a za linearne sisteme kao rotacione mode treba razmatrati samo aksijalne vektore ortogonalne na osu simetrije. Kod beskonačnih sistema rotacione mode se ne mogu pojaviti (jer na dovoljnoj udaljenosti od ose rotacije to ne bi bila mala odstupanja od ravnotežnog položaja), osim kod kvazi-jednodimenzionalnih (ali ne linearnih) sistema, kada postoji moda rotacije oko ose sistema. Pri rešavanju svojstvenog problema dinamičke matrice izolovanog sistema, dozvoljene translacione i rotacione mode se prepoznaju po nultim frekvencijama, jer tada hamiltonijan harmonijskog oscilatora opisuje takva kretanja.

Na primer, izolovani sistem, sa interakcijom $V = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta}(r_{\alpha\beta})$ (dvočestična, zavisi samo od rastojanja $r_{\alpha\beta} = ||\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta||$ medju parovima atoma) invarijanatan je na rotacije i translacije celog sistema. Odgovarajući član drugog reda [28] u razvoju ovog potencijala oko ravnotežnog položaja $\boldsymbol{R}_\alpha$ je $\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{d^2V_{\alpha\beta}(R_{\alpha\beta})}{dr^2_{\alpha\beta}}(\frac{\boldsymbol{R}_{\alpha\beta}}{R_{\alpha\beta}}(\boldsymbol{q}_\alpha - \boldsymbol{q}_\beta))^2$, što znači da su koeficijenti razvoja (3.2) izraženi relacijom

$$V^{\alpha i}_{\beta j} = \begin{cases} -V_{\alpha\beta}\frac{R^i_{\alpha\beta}R^j_{\alpha\beta}}{R^2_{\alpha\beta}}, & \text{za } \alpha \neq \beta, \\ \sum_\gamma V_{\alpha\gamma}\frac{R^i_{\alpha\gamma}R^j_{\alpha\gamma}}{R^2_{\alpha\gamma}}, & \text{za } \alpha = \beta. \end{cases}$$

Da su translaciona i rotaciona pomeranja svojstveni vektori dinamičke matrice za nultu svojstvenu vrednosti može direktno proveriti. Naime, pri translacionoj modi se svi atomi pomeraju za isti vektor, npr. $\boldsymbol{a}$, te je u prostoru pomeraja ona izražena vektorom $\sum_{\alpha i} a_i| \mathbf{q}, \alpha i\ \rangle$; uslov da je za proizvoljno $\boldsymbol{a}$ ona svojstveni vektor V za nultu svojstvenu vrednost, svodi se na $\sum_\alpha V^{\beta j}_{\alpha i} = 0$ za svako i, j i β, koji je uvek ispunjen, kako se vidi iz oblika izvedenih koeficijenata $V^{\alpha i}_{\beta j}$. Slično je i sa rotacionim modama, koje zbog oblika rotacije $R(\varphi) = e^{A\varphi}$, gde je A kososimetrična matrica, imaju oblik $\varphi\sum_{\alpha ij} A^i_j R_{\alpha j}| \mathbf{q}, \alpha i\ \rangle$. Zahtev da su takva pomeranja svojstveni vektori dinamičke matrice za svojstvenu vrednost 0 ekvivalentan je uslovu $\sum_\alpha(R_{\alpha j}V^{\beta k}_{\alpha i} - R_{\alpha i}V^{\beta k}_{\alpha j}) = 0$ za svako β, i, j i k, što je takodje zadovoljeno u razmatranom slučaju.

3.3 Normalne mode kod kristala

U prethodnom tekstu (§ 2.3.1) je objašnjeno da je translaciona periodičnost osnovna odlika kristalne strukture, i da je translaciona grupa, T, svakako podgrupa grupe simetrije kristala. Takodje je pomenuto da se u fizici kondenzovanog stanja najčešće koristi samo ova podgrupa, jer se tako mogu dobiti rezultati koji važe za sve kristale [29], a preciznija razmatranja, koja zahtevaju korišćenje cele prostorne grupe, ostavljaju se za konkretna proučavanja [30, 31].

Sve ireducibilne reprezentacije ove grupe su parametrizovane vektorima iz Briluenove zone, sve su kompleksne, osim za $\boldsymbol{k} = 0$ (jedinična) i nekih reprezentacija na obodu zone (alternirajuće), i važi $D^{(\mathbf{k})*}(T) = D^{(-\mathbf{k})}(T)$. Stoga će izrazi biti pisani kao da su u pitanju samo kompleksne reprezentacije (samim tim se podrazumeva i sumiranje po polovini Briluenove zone — $\frac{BZ}{2}$).

Da bi se primenio metod opisan u prethodnom poglavlju, potrebno je neke oznake prilagoditi konkretnoj situaciji. Tako će indeks atoma α biti zamenjen dvostrukim indeksom $\boldsymbol{z}\alpha$, gde prvi deo oznake ukazuje u kojoj elementranoj ćeliji se nalazi posmatrani atom α. $\boldsymbol{z}$ je vektor sa koordinatama $z_i = 0, ..., N_i-1$, a $\alpha = 1, ..., r$ prebrojava r atoma u ćeliji. Vidi se da je ukupan broj atoma[3] $n = Nr$, gde je $N = N_1N_2N_3$. Bazis (3.3) postaje $|\ \mathbf{Q}, \boldsymbol{z}\alpha i\ \rangle$, i dinamička reprezentacija

[3]U stvari, konačan red translacione grupe, $|T| = N$, nametnut je samo da bi se izbegla razmatranja vezana za normiranje vektora: ona nisu vezana za simetriju, a daju iste rezultate, što se vidi i u odsustvu N u konačnim

je definisana sa:

$$D^d(\ I\ |\boldsymbol{l}\ )|\ \mathbf{Q},\boldsymbol{z}\alpha i\ \rangle = |\ \mathbf{Q},(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{z})\alpha i\ \rangle.$$

Matrice i karakteri reprezentacije su:

$$D^{d\boldsymbol{z}\alpha i}_{\boldsymbol{z}'\alpha' i'}(\ I\ |\boldsymbol{l}\ ) = \delta^{\boldsymbol{z}}_{\boldsymbol{z}'+\boldsymbol{l}}\delta^{\alpha}_{\alpha'}\delta^{i}_{i'} \quad \chi^d(\ I\ |\boldsymbol{l}\ ) = 3Nr\delta_{\boldsymbol{l},0}, \tag{3.9}$$

pa je razlaganje na ireducibilne komponente:

$$D^d(T) = \sum_{\boldsymbol{k}} 3rD^{(\boldsymbol{k})}(T).$$

Sledi da su svi potprostori $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}_q$ $3r-$dimenzionalni (indeks m je nepotreban, jer su sve ireducibilne reprezentacije jednodimenzionalne). Lako je proveriti da su vektori

$$\{|\ \mathbf{Q},\mathbf{k}\alpha i\ \rangle = \sqrt{N}P^{(\mathbf{k})}|\ \mathbf{Q},0\alpha i\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{z}} e^{\imath\mathbf{kz}}|\ \mathbf{Q},\mathbf{z}\alpha i\ \rangle \mid \alpha = 1,\dots,r; i = 1,2,3\}$$

ortonormirani, te čine bazis u $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}_q$. Zbog translacione simetrije sistema $D^d(T)$ komutira sa V i W. Na osnovu toga se iz (3.9) nalazi $W^{\boldsymbol{z}\alpha i}_{\boldsymbol{z}'\alpha' i'} = W^{\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}'\alpha i}_{0\alpha' i'}$. U gornjem bazisu W je u redukovanoj formi. Naime, kako je $\langle\ \mathbf{Q},\mathbf{k}\alpha i\ |W|\ \mathbf{Q},\mathbf{k}'\alpha' i'\ \rangle = \sum_{\mathbf{z}} e^{-\imath\mathbf{kz}}W^{\mathbf{z}\alpha i}_{0\alpha' i'}\delta^{\mathbf{k}}_{\mathbf{k}'}$, u $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}_q$ se W redukuje u: $W^{\alpha i}_{\alpha' i'}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\mathbf{z}} e^{-\imath\mathbf{kz}}W^{\mathbf{z}\alpha i}_{0\alpha' i'}$.

Rešavanjem svojstvenog problema se nalaze svojstvene vrednosti $\omega^2_t(\mathbf{k})$ (uočava se da je $\omega_t(\boldsymbol{k}) = \omega_t(-\boldsymbol{k})$, jer je $W(\boldsymbol{k}) = W^*(\boldsymbol{k})$) i standardni svojstveni bazis $\{|\ \mathbf{Q},\mathbf{k}t\ \rangle \mid \mathbf{k}\in BZ, t = 1,...3r\}$ (t nije potrebno indeksirati jer uvek uzima istih $3r$ vrednosti). U koordinatama ovog bazisa hamiltonijan je:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{kt}(P^*_{\mathbf{k}t}P_{\mathbf{k}t} + \omega^2_t(\mathbf{k})Q^*_{\mathbf{k}t}Q_{\mathbf{k}t}).$$

Da bi se ovaj oblik sveo na sistem harmonijskih oscilatora, koriste se ranije opisani metodi za reprezentacije *III* vrste: ili se u realnom bazisu (3.7) nalazi

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\frac{\mathrm{BZ}}{2}}\sum_{t}\sum_{l=r,i}(P^2_{\mathbf{k}tl} + \omega^2_t(\mathbf{k})Q^2_{\mathbf{k}tl}) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\frac{\mathrm{BZ}}{2}}\sum_{t}\sum_{l=r,i}\omega_t(\mathbf{k})(b^*_{\mathbf{k}tl}b_{\mathbf{k}tl} + b_{\mathbf{k}tl}b^*_{\mathbf{k}tl}),$$

ili, češće, u bazisu (3.8) smenom $Q_{\boldsymbol{k}t} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_t(\boldsymbol{k})}}(b_{\boldsymbol{k}t} + b^*_{-\boldsymbol{k}t})$, $P_{\boldsymbol{k}t} = \imath\sqrt{\frac{\omega_t(\boldsymbol{k})}{2}}(b^*_{\boldsymbol{k}t} - b_{-\boldsymbol{k}t})$, prelazi na hamiltonijan

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}t}\omega_t(\mathbf{k})(b^*_{\mathbf{k}t}b_{\mathbf{k}t} + b_{\mathbf{k}t}b^*_{\mathbf{k}t}).$$

Prilikom kvantizacije, u fizici čvrstog stanja poslednji izraz opisuje energiju termalnih pobudjenja rešetke, odnosno kvazi-čestice, *fonone*, kreirane operatorima $b^\dagger_{\boldsymbol{k}t}$.

Iz čisto fizičkih razloga je jasno da se pri maloj promeni $\boldsymbol{k}$ mora očekivati neprekidna promena svojstvenih frekvencija $\omega_t(\boldsymbol{k})$, čime se za fiksirano t dobijaju krive (hiperpovrši) zavisnosti ω_t nad

izrazima. Moguće je i pozivanje na Born-fon Karmanove uslove, ali je iz istih razloga nebitno.

Briluenovom zonom, tzv. *vibracione grane*. One su manifestacija translacione simetrije, odnosno specijalan slučaj energijskih zona (§ 2.3.1, § 5.4). Već je napomenuto da kod kristala postoje 3 translacione mode, koje se transformišu po jediničnoj reprezentaciji $\boldsymbol{k} = 0$ (razmatra se samo translaciona grupa!), te je očigledno frekvencija $\omega = 0$ trostruko degenerisana. One tri grane $\omega_t(\boldsymbol{k})(t = 1, 2, 3)$ koje u centru Briluenove zone imaju $\omega_t(0) = 0$ nazivaju se *akustičke*, a ostale $(t = 4, \dots 3r)$ *optičke*. Naime, za $\boldsymbol{k} = 0$ kod svih ćelija kristala se vrši isti poremećaj, ali kod akustičkih moda unutar ćelije nema poremećaja, ćelija se pomera kao celina (odlika translacija) kao kod zvučnih talasa, dok je kod optičkih grana pomeranje ćelije praćeno i vibracijama atoma unutar nje. Jasno je već iz ovih razmatranja, da bi u slučaju korišćenja cele prostorne grupe kristala, indeks t bio povezan sa ireducibilnim reprezentacijama grupe simetrije ćelije (naravno, posredno, preko indukovanih reprezentacija prostorne grupe).

3.4 Analiza rezultata

Dobijena klasifikacija normalnih moda se neposredno odražava na spektre atoma i molekula. Kada se u harmonijski potencijal uvrste tipične mase atoma i konstante interakcija, ispostavlja se da frekvencije na ovaj način dobijenih oscilacija odgovaraju infracrvenom delu spektra svetlosti, te se, pošto su znatno niže od energija elektronskih prelaza, lako prepoznaju u ovom delu spektra. Standardnim metodom prelaz se opisuje pomoću interakcije, u ovom slučaju sa elektromagnetnim talasima. Nakon analize pojedinih članova ovako dobijenog ukupnog hamiltonijana, proizilazi da se u prvoj, tzv. *dipolnoj*, aproksimaciji [2], važnoj za jednofotonske (time i najverovatnije) procese, može kao osnovni razmatrati hamiltonijan (3.2), uz perturbaciju koja ima tenzorska svojstva polarnog vektora (proporcionalna je dipolnom momentu sistema). Da bi se odredila selekciona pravila, treba ispitati Klebš-Gordanove koeficijente za ireducibilne komponente reprezentacije $D^v(G)$. Smatrajući da je osnovno stanje sistema potpuno simetrično, tj. odgovara jediničnoj reprezentaciji, Vigner-Ekartov teorem za pobudjeno stanje u dipolnoj aproksimaciji dozvoljava samo mode sa transformacionim osobinama reprezentacije $D^v(G)$ (njenih ireducibilnih komponenti). Takve mode se nazivaju *aktivne*.

Prethodno opisani metod se lako uopštava na druge fizičke probleme. Obično se tada menja samo "unutrašnji" prostor, tj. zavisno od problema, umesto $\mathbb{R}^3$ kod mehaničkih kretanja, može se svakom atomu pridružiti neki drugi prostor, $\mathcal{H}_{in}$. To povlači i promenu reprezentacije grupe simetrije: analogon polarno vektorske reprezentacije postaje reprezentacija $D^{in}(G)$ u $\mathcal{H}_{in}$.

Na primer, kada je reč o spinskim uredjenjima, svakom atomu se pridružuje odredjeni spin, a ukupni potencijal interakcije je u Hajzenbergovom modelu $V = -\sum_{\alpha\beta} J_{\alpha\beta}\boldsymbol{S}_\alpha \cdot \boldsymbol{S}_\beta$. $\mathcal{H}_{in}$ je reprezentativni ireducibilni prostor grupe rotacija u kome deluju operatori spina, a $D^v(G)$ se zamenjuje odgovarajućom reprezentacijom grupe u ovom prostoru (translacije se i dalje reprezentuju jediničnim operatorima). Permutaciona reprezentacija je nepromenjena. Dobijene normalne mode spinskih talasa se nazivaju *magnoni*. U ovom slučaju delovanje vremenske inverzije može biti komplikovanije nego kod oscilatornih moda (kada se svodilo na konjugaciju), te je važno koristiti magnetnu grupu simetrije i njene koreprezentacije.

Još jedan primer ovakve konstrukcije će biti pomenut kod razmatranja elektronskih stanja u molekulima i kristalima (§ 5.3): sa svakog atoma bira se odredjeni vektorski prostor elektronskih stanja atoma, pa se od tako dobijenih stanja konstruišu jednoelektronska stanja celog molekula (kristala).

Invarijantnost potencijala u Hajzenbergovom metodu na unutrašnje rotacije, rotacije spinskih operatora, uvodi dodatnu unutrašnju simetriju. Proučavanje svih simetrija takvih sistema daje tipičan primer gradijentne teorije; kako savremena formulacija koristi pojmove diferencijalne geometrije, ta pitanja neće biti razmatrana (mada će implicitno neki pojmovi biti uvedeni razmatranjem adijabatskog metoda, § 5.1).

Glava 4

NARUŠENJE SIMETRIJE

Medju najimpresivnije uspehe koncepta simetrije u fizici spada jedinstveno objašnjenje niza naizgled sasvim raznorodnih pojava kojima je zajednička karakteristika narušena simetrija. Pod tim se podrazumeva da je grupa simetrije osnovnog (najpovoljnijeg) stanja sistema prava podgrupa grupe simetrije hamiltonijana.

4.1 Invarijantni funkcionali

Neka je $\mathcal{H}$ realni prostor u kome grupa G deluje svojom reprezentacijom $D(G) = \sum_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$. *Funkcional* (realni) na $\mathcal{H}$, tj. preslikavanje $F : \mathcal{H} \to \mathbb{R}$, je *invarijantan* ako je $F(D(g)| x \rangle) = F(| x \rangle)$ za svako $| x \rangle \in \mathcal{H}$ i $g \in G$. Funkcional je *diferencijabilan* u $| x \rangle \in \mathcal{H}$, ako je za svaki ort $| y \rangle \in \mathcal{H}$ realna funkcija realne promenljive ε, $F(| x \rangle + \varepsilon | y \rangle)$ diferencijabilna za dovoljno malo $|\varepsilon|$.

Važno je uočiti da se ne zahteva linearnost preslikavanja. Slično, ne traži se ni diferencijabilnost odredjenog reda, mada se to može učiniti, što anticipira korišćenje "dovoljno glatkih" funkcionala. Najjednostavnije je smatrati da je pretpostavljena beskonačna diferencijabilnost.

Ako je u $\mathcal{H}$ zadat skalarni proizvod, čest primer funkcionala je kvadrat d_2-norme vektora: $F(| x \rangle) = \langle x | x \rangle = \sum_i \xi_i^2$, gde su ξ_i koordinate vektora $| x \rangle$ u nekom ortonormiranom bazisu. Jasno, kao i u navedenom primeru, izborom bazisa u $\mathcal{H}$ svaki funkcional postaje zapravo funkcija koordinata vektora $F(\xi_1, \dots, \xi_n)$, tj. preslikavanje iz $\mathbb{R}^n$ u $\mathbb{R}$, diferencijabilna kod diferencijabilnih funkcionala. Istovremeno, dejstvo grupe $D(g)| x \rangle = | x' \rangle$ se dobija u matričnom obliku $\xi_i' = \sum_j D_{ij}(g)\xi_j$, pa je uslov invarijantnosti

$$F(\xi_1, \dots, \xi_n) = F(\xi_1', \dots, \xi_n') = F(\sum_j D_{1j}(g)\xi_j, \dots, \sum_j D_{nj}(g)\xi_j).$$

Kod kompleksnih prostora se uvode realne koordinate, što se čini dekompleksifikacijom i dovodi do nezavisnosti koordinata ξ_i i ξ_i^*. I u ovom slučaju se kao primer može uzeti kvadrat norme vektora.

Diferencijabilnost funkcionala omogućuje razvoj u Tejlorov (*Taylor*) red. U okolini $| x_1 \rangle$ se nalazi

$$F(|\ x_1\ \rangle+\varepsilon|\ x\ \rangle)=F(|\ x_1\ \rangle)+\varepsilon\sum_i C_i^{[1]}\xi_i+\varepsilon^2\sum_{ij}C_{ij}^{[2]}\xi_i\xi_j+\dots, \tag{4.1}$$

gde je $C_i^{[1]}\stackrel{\mathrm{def}}{=}\frac{\partial F(|\ x_1\ \rangle)}{\partial\xi_i}$ i $C_{ij}^{[2]}\stackrel{\mathrm{def}}{=}\frac{1}{2}\frac{\partial^2 F(|\ x_1\ \rangle)}{\partial\xi_i\partial\xi_j}$. Jasno, svi tenzori $C^{[r]}$ su simetrični za permutacije indeksa.

Invarijantnost funkcionala nameće odredjene uslove na koeficijente u razvoju. Biće razmotren slučaj kada je $|\ x_1\ \rangle$ nepokretna tačka grupe, $D(g)|\ x_1\ \rangle=|\ x_1\ \rangle$ (tj. $|\ x_1\ \rangle$ je iz potprostora jedinične reprezentacije $\mathcal{H}^{(1)}$). Ako je $D(g)|\ x\ \rangle=|\ x'\ \rangle$, iz (4.1) se nalazi:

$$F(D(g)(|\ x_1\ \rangle+\varepsilon|\ x\ \rangle))=F(|\ x_1\ \rangle)+\varepsilon\sum_i C_i^{[1]'}\xi_i'+\varepsilon^2\sum_{ij}C_{ij}^{[2]'}\xi_i'\xi_j'+\dots.$$

Da bi funkcional bio invarijantan, svaki stepen mora biti takav (različitog su reda po ε). Drugim rečima, koordinate se pojavljuju kroz homogene invarijantne polinome odredjenog stepena (u navedenim primerima koordinate obrazuju kvadratni invarijantni polinom za grupu $\mathrm{O}(n,\mathbb{R})$, odnosno $\mathrm{U}(n)$, u okolini koordinatnog početka kao nepokretne tačke). Zaključak je da se diferencijabilni invarijantni funkcional može razviti u sumu invarijantnih homogenih polinoma grupe G.

Nezavisno od invarijantnosti funkcionala, iz poslednje jednakosti, kada se ξ' izraze preko početnih koordinata, vidi se da se u svakom stepenu razvoja javlja odgovarajući tenzorski stepen reprezentacije $D(G)$. Medjutim, nakon delovanja na koordinate, zbog njihovog komutiranja, nesimetrične komponente nestaju (često ekvivalentno obrazloženje je da nesimetrični deo nestaje zbog kontrakcije tenzora obrazovanog koordinatama sa simetričnim tenzorom koeficijenata), pa se, pri dejstvu grupe, svaki stepen u razvoju transformiše po simetričnom stepenu (§ A.2.5) reprezentacije $D(G)$. Da bi funkcional sa nenultim članom r-tog stepena bio invarijantan, u razlaganju simetričnog r-tog stepena reprezentacije $D(G)$ mora postojati jedinična reprezentacija. Ovim je dobijen i algoritam konstrukcije funkcionala sa traženim svojstvima: u vektorskom prostoru S_r, nad monomima r-tog stepena koordinata, definiše se delovanje grupe G reprezentacijom $[D^r(G)]$ (simetrični r-ti stepen reprezentacije $D(G)$); potprostor $S_r^{(1)}$ likova grupnog projektora za jediničnu reprezentaciju u S_r je skup svih invarijantnih polinoma r-tog stepena. Ako polinomi $\{p_i^{[r]}\mid i=1,...,a_1^{[r]}\}$ čine bazis u $S_r^{(1)}$, $\quad r=1,2,...$, najopštiji oblik funkcionala sa zadatim svojstvima je

$$F(|\ x_1\ \rangle+\varepsilon|\ x\ \rangle)=F(|\ x_1\ \rangle)+\sum_r\varepsilon^r\sum_{i=1}^{a_1^{[r]}}A_i^{[r]}p_i^{[r]}. \tag{4.2}$$

Izborom linearne kombinacije invarijantnih polinoma različitih stepena definiše se jedan invarijantni funkcional.

Kada se nadje invarijantni polinom drugog stepena, može se odrediti standardni svojstveni bazis $\{|\ \mu t_\mu m\ \rangle\}$ u $\mathcal{H}$. To se čini metodom opisanim ranije (§ 3, harmonijski potencijal je i bio jedan kvadratni invarijantni funkcional na konfiguracionom prostoru), tj. dijagonalizacijom simetrične matrice $C^{[2]}$ iz (4.1). I sada se može koristiti realni bazis (kod reprezentacija *II* i *III* vrste spajaju se medjusobno konjugovane ireducibilne reprezentacije u jednu reducibilnu, čime se dobijaju fizičke ili realne ireducibilne reprezentacije grupe G). Član drugog stepena postaje suma kvadrata po realnim koordinatama realnih reprezentacija (jedini invarijantni polinom). Invarijantni polinomi prvog stepena mogu biti obrazovani samo koordinatama vektora iz potprostora $\mathcal{H}^{(1)}$ (sve ostale koordinate se menjaju pri delovanju grupe). Tako, u standardnom svojstvenom bazisu, gde je $|\, x \,\rangle = \sum_{\mu t_\mu m} \xi_{\mu t_\mu m} |\, \mu t_\mu m \,\rangle$, izraz (4.2) postaje

$$F(|\, x_1 \,\rangle + \varepsilon |\, x \,\rangle) = F(|\, x_1 \,\rangle) + \varepsilon \sum_{t_1}^{a_1} A^{[1]}_{1t_1} \xi_{1t_1} + \varepsilon^2 \sum_{\mu t_\mu} A^{[2]}_{\mu t_\mu} \sum_m \xi^2_{\mu t_\mu m} + \sum_{r>2} \varepsilon^r \sum_{i=1}^{a_1^{[r]}} A^{[r]}_i p^{[r]}_i. \quad (4.3)$$

Naravno, koeficijenti $A^{[2]}_{\mu t_\mu}$ su svojstvene vrednosti matrice $C^{[2]}$ i odgovaraju svojstvenim frekvencijama iz prethodne glave, ali ne moraju u opštem slučaju biti nenegativni, ako nikakav dodatni uslov (poput uslova minimuma u § 3) nije pretpostavljen.

4.2 Ekstremum invarijantnog funkcionala

Da bi nepokretna tačka $|\, x_1 \,\rangle$ bila stacionarna za funkcional (4.3), dovoljno je da se anuliraju članovi prvog stepena po ε. Pri tome je u pitanju lokalni minimum funkcionala, ako su svi koeficijenti $A^{[2]}_{\mu t_\mu}$ pozitivni (ili nulti, ali uz dodatne uslove za više stepene).

Za fiziku su značajna ekstremalna svojstva funkcionala pri kretanju duž pravca vektora odredjene simetrije [32], odnosno kada je $|\, x \,\rangle = |\, x, \mu t_\mu \,\rangle = \sum_m \xi_{\mu t_\mu m} |\, \mu t_\mu m \,\rangle$ iz standardnog potprostora $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$. Pretpostaviće se da je $\mu \neq 1$, odnosno da je mala grupa $G_{|\, x \,\rangle}$ vektora $|\, x \,\rangle$ prava podgrupa grupe G (ne razmatraju se kretanja ka drugoj nepokretnoj tački). Jasno je da se svi invarijantni polinomi sada formiraju samo od koordinata $\xi_{\mu t_\mu m}$. Članovi prvog reda nestaju bez ikakvih dodatnih uslova na izbor invarijantnih polinoma (tj. nezavisno od koeficijenata $A^{[r]}_{i_r}$), i ispostavlja se da je u svim takvim pravcima svaki invarijantni funkcional stacionaran u svakoj nepokretnoj tački. U ostalim stepenima preostaju samo invarijantni polinomi formirani od koordinata $\xi_{\mu t_\mu m}$ datog stepena. Tako, ako je $|\, x, \mu t_\mu \,\rangle$ normirani vektor (norma ne utiče na razmatranja), (4.3) postaje

$$F(|\, x_1 \,\rangle + \varepsilon |\, x \,\rangle) = F(|\, x_1 \,\rangle) + \varepsilon^2 A^{[2]}_{\mu t_\mu} + \sum_{r>2} \varepsilon^r \sum_{i=1}^{a_1^{[r\mu]}} A^{[r]}_i p^{[r\mu]}_i,$$

gde polinomi $\{p^{[r\mu]}_i \mid i = 1, \dots, a_1^{[r\mu]}\}$ obrazuju potprostor jedinične reprezentacije u prostoru monoma r-tog stepena od koordinata $\xi_{\mu t_\mu m}$.

U slučaju da $[D^{(\mu)^r}]$ ne sadrži jediničnu reprezentaciju ($a_1^{[r\mu]} = 0$), nema invarijantnih polinoma r-tog stepena formiranih od koordinata μ-te reprezentacije, i r-ti stepen u razvoju (4.3) nestaje (samo u okolini nepokretne tačke i pri kretanju u pravcu $|\, x \,\rangle$). Za svaki parni stepen i svaku ireducibilnu reprezentaciju postoji invarijantni polinom: kvadrat norme vektora, $\sum_m \xi^2_{\mu t_\mu m}$, je (jedina) kvadratna invarijanta svake ireducibilne reprezentacije, pa je njegov stepen uvek invarijanta, i to parnog stepena. Zato simetrija može anulirati samo neparne stepene kod nekih reprezentacija (tj. $a_1^{[r\mu]} = 0$ može važiti samo za r neparno kod nekih reprezentacija; tako je za $r = 1$ za svako $\mu \neq 1$ bilo ispunjeno $a_1^{[1\mu]} = 0$). Ako je $A^{[2]}_{\mu t_\mu}$ pozitivan (negativan), $|\ x_1\ \rangle$ je minimum (maksimum) za dati pravac, a ako je jednak 0, moraju se razmatrati stepeni višeg reda da bi se odredio tip stacionarne tačke. Na primer, ako je $A^{[2]}_{\mu t_\mu} = 0$ i postoje članovi trećeg reda, u pitanju je prevojna tačka, a ako ih nema, razmatra se znak četvrtog stepena razvoja. Treba pomenuti i mogućnost da funkcional duž nekog pravca bude konstantan, tj. da se razvoj svede na konstantni član: $F(|\ x_1\ \rangle + \varepsilon|\ x\ \rangle) = F(|\ x_1\ \rangle)$. Tipičan primer su translacione i rotacione mode u harmonijskom potencijalu. Jasno je da u tom slučaju $|\ x_1\ \rangle$ nije ekstremalna tačka.

Već sada je moguće uočiti značaj invarijantnih polinoma pri opisu dinamike sistema sa poznatom simetrijom. Njihovo odredjivanje je relativno komplikovano, a odgovarajuća matematika (razvijena u ovom veku) je nedavno dala važan rezultat [33, 34]: za svaku reprezentaciju kompaktne grupe postoji konačan skup $\{p_i(\xi_1,\ldots,\xi_n)|i = 1,\ldots,q\}$ invarijantnih polinoma po koordinatama reprezentacije, tzv. *integralni bazis*, takav da je svaki invarijantni polinom istovremeno polinom po ovom skupu: $P(\xi_1,\ldots,\xi_n) = P(p_1,\ldots,p_q)$. To znači da je, u principu, moguća klasifikacija invarijantnih funkcionala preko integralnih bazisa. Nažalost, dokaz nije konstruktivan, tako da algoritam njihovog nalaženja predstavlja poseban problem čija težina zavisi od strukture grupe i dimenzije reprezentacije [36].

4.3 Narušena simetrija

Pod simetrijom vektora u $\mathcal{H}$ se podrazumeva grupa stanja (§ 1), tj. mala grupa tog vektora pri dejstvu G reprezentacijom $D(G)$. Dakle, simetriju tačke $|\ x\ \rangle \in \mathcal{H}$ opisuje grupa $G_{|\ x\ \rangle} \stackrel{\text{def}}{=} \{g \in G \mid D(g)|\ x\ \rangle = |\ x\ \rangle\}$. Ukoliko je $G_{|\ x\ \rangle}$ prava podgrupa u G, reprezentacija $D(G)$ se ne redukuje u linealu nad $|\ x\ \rangle$, no sužena $D(G) \downarrow G_{|\ x\ \rangle}$ se redukuje i deluje kao jedinična reprezentacija. Isto važi i za vektor $|\ x_1\ \rangle + \varepsilon|\ x\ \rangle$.

Neka je, kao u prethodnom odeljku, odredjen standardni bazis i $|\ x\ \rangle = |\ x, \mu t_\mu\ \rangle \in \mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$. U prostoru $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ operatori $D(G)$ se redukuju i deluju kao reprezentacija $D^{(\mu)}(G)$, pa se u linealu nad $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ sužena reprezentacija $D^{(\mu)}(G) \downarrow G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle}$ redukuje u jediničnu reprezentaciju. Stoga je u relacijama kompatibilnosti $D^{(\mu)}(G) \downarrow G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle} = \sum_\nu a^\mu_\nu D^{(\nu)}(G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle})$, koeficijent a^μ_1 pozitivan.

U ovom kontekstu se često uvodi pojam *epikernela* reprezentacije $D^{(\mu)}(G)$ za potprostor $\mathcal{H}^{(\mu)'}$ (ireducibilnog potprostora $\mathcal{H}^{(\mu)}$) [35]. To je maksimalna podgrupa $\mathrm{Ek}(G, \mathcal{H}^{(\mu)'})$ grupe G, takva da na nju sužena ireducibilna reprezentacija $D^{(\mu)}(G)$ ostavlja nepokretnima sve vektore potprostora $\mathcal{H}^{(\mu)'}$. Kernel reprezentacije je epikernel za ceo prostor te reprezentacije: $\ker(D^{(\mu)}(G)) = \mathrm{Ek}(G, \mathcal{H}^{(\mu)})$ (ovo je razlog za naziv epikernel). Na osnovu definicije je $G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle} = \mathrm{Ek}(G, \mathrm{spann}(|\ x, \mu t_\mu\ \rangle))$. Takodje treba zapaziti da potprostor $\mathcal{H}^{(\mu)'}$ ne mora biti jednodimenzionalan, te u tom smislu epikernel predstavlja uopštenje pojma male grupe vektora. Ono je potrebno u nešto široj teoriji, a obuhvata slučaj kada $G_{|\ x\ \rangle}$ ostavlja neizmenjenim i vektore izvan lineala nad $|\ x\ \rangle$, te je automatski epikernel za višedimenzionalni potprostor.

Sve tačke na pravoj $|\ x_1\ \rangle + \alpha|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ imaju simetriju $G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle}$, te je početak kretanja iz $|\ x_1\ \rangle$

po pravcu $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ praćen trenutnim (dakle prekidnim) smanjenem simetrije od G u $G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle}$. Ukoliko je $\mathcal{H}$ prostor stanja nekog fizičkog sistema, govori se o *narušenju simetrije* sistema. Pri tome se epikerneli različitih ireducibilnih reprezentacija grupe G pojavljuju kao moguće nove grupe simetrije stanja, i nalaženjem svih epikernela svih ireducibilnih reprezentacija grupe G dobijaju se sve grupe simetrije koje sistem može imati u različitim stanjima.

Iz konstrukcije standardnog bazisa sledi da su vektori pridruženi nejediničnim ireducibilnim reprezentacijama grupe G, ortogonalni na svaku nepokretnu tačku grupe, pa i na $|\ x_1\ \rangle$. No, nakon početka kretanja u smeru $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ neki od vektora iz standardnog bazisa u $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ više nisu ortogonalni na trenutno stanje, a skalarni proizvodi su proporcionalni odstupanju od nepokretne tačke: $\langle\ \mu t_\mu m\ |(|\ x_1\ \rangle + \varepsilon|\ x, \mu t_\mu\ \rangle) = \varepsilon\langle\ \mu t_\mu m|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$.

4.4 Spontano narušenje simetrije

Posebno je značajna mogućnost da sistem spontano napusti nepokretnu tačku, narušavajući simetriju bez spoljne intervencije. Takav proces, tzv. *spontano narušenje simetrije*, objašnjava pojavu sistema kod kojih je simetrija osnovnog (dakle, varijaciono najpovoljnijeg) stanja manja od simetrije hamiltonijana [3, 37].

U teoriju se uvodi invarijantni funkcional na skupu stanja (npr. potencijalna energija u klasičnoj mehanici je funkcional na faznom prostoru), koji diktira dinamiku sistema u smislu da su njegove tačke minimuma upravo ravnotežna (ili stacionarna) stanja (ona u kojima sistem ostaje ako je izolovan). Nepokretna tačka je, kako je pokazano, stacionarna za sve pravce narušenja simetrije, a ako je koeficijent $A^{[2]}_{\mu t_\mu}$ negativan, postaje maksimum, pa je sistem nestabilan za odstupanja u smeru $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ iz $\mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$: spontano napušta stanje $|\ x_1\ \rangle$, evoluira u smeru $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$, i zaustavlja se u nekom lokalnom minimumu na ovom putu, ili, ako usput naidje na neki drugi ekstremum, skreće po novom pravcu.

Neka je $|\ y\ \rangle = |\ x_1\ \rangle + \alpha|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ lokalni minimum funkcionala na trajektoriji u smeru $|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$. Zbog svoje invarijantnosti, funkcional mora imati ista ekstremalna svojstva i za svaki vektor na orbiti vektora $|\ y\ \rangle$, tj. na skupu vektora $G|\ y\ \rangle = \{D(g)|\ y\ \rangle \mid g \in G\}$. Poznato je da se ovaj skup dobija delovanjem predstavnika koseta male grupe $G_{|\ y\ \rangle} = G_{|\ x,\mu t_\mu\ \rangle}$ na $|\ y\ \rangle$. Dakle, sve ove tačke su minimumi funkcionala i sve su oblika $|\ x_1\ \rangle + \alpha D^{(\mu)}(g)|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$. Stoga u $|\ x_1\ \rangle$ funkcional podjednako dozvoljava kretanje ka svim tačkama orbite, i sistem *slučajno* (pošto je izolovan) kreće ka jednom od minimuma. Sa stanovišta funkcionala, cela orbita je sastavljena od ekvivalentnih minimuma, te, ukoliko su ovi povezani, funkcional dozvoljava slobodan prelazak iz jednog u drugi (u kvantnoj mehanici tunel efekat omogućava i prelazak izmedju razdvojenih minimuma, dajući mu nenultu verovatnoću). Tako, kada se medju predstavnicima koseta male grupe može naći neprekidan skup (tj. ako je *prostor koseta* $G/G_{|\ y\ \rangle}$ mnogostrukost nenulte dimenzije), funkcional dozvoljava slobodno kretanje po ovim neprekidnim delovima orbita (npr. ako je mala grupa invarijantna, a faktor-grupa neka Lijeva grupa G', što je sigurno ispunjeno ako je $G = G_{|\ y\ \rangle} \otimes G'$).

U okolini novog minimuma ranija razmatranja se mogu ponoviti, no umesto grupe G mora se koristiti mala grupa $G_{|\ y\ \rangle}$ ($G_{|\ y\ \rangle} < G$, pa je funkcional i dalje invarijantan). Ceo prostor je sada dekomponovan na ireducibilne potprostore $\mathcal{H}^{(\nu t_\nu)}$ male grupe i za odstupanja u pravcu $\mathcal{H}^{(\nu t_\nu)}$ nalazi se $F(|\ y\ \rangle + \varepsilon|\ x, \nu t_\nu\ \rangle) = F(|\ y\ \rangle) + \varepsilon^2 A_{\nu t_\nu} \sum_n \xi^2_{\nu t_\nu n} + \ldots$

4.5 Fazni prelazi

Značajno mesto u fizici čvrstog stanja je posvećeno različitim aspektima opisivanja faznih prelaza. Pri promeni nekih parametara sistema (npr. sniženju temperature), kristal sa prostornom grupom G pri prolasku kroz neku kritičnu vrednost ovih parametara menja strukturu, tako da je G' njegova nova prostorna grupa (na isti način, u zavisnosti od problema se razmatraju i magnetne ili dvostruke grupe). Istovremeno, srednja vrednost neke opservable Q, koja je bila 0 pre prelaza, postaje nenulta. Ta fizička veličina se naziva *parametar poretka*. Landauvljeva teorija opisuje neprekidne fazne prelaze na nivou spontanog narušenja simetrije [4, 36].

$\mathcal{H}$ je skup stanja sistema, preciznije, realni prostor svih opservabli, koji sadrži skup statističkih operatora. Skalarni proizvod je $(A, B) = \mathrm{Tr}(AB)$ (operatori su hermitski). Konačno, slobodna energija je funkcional invarijantan u odnosu na prostornu grupu G, a ravnotežna, stabilna stanja kristala su tačke minimuma slobodne energije. Sa T su označeni termodinamički parametri sistema, kao što su temperatura, pritisak ili spoljašnje polje. Njihova neprekidna promena odredjuje krivu u prostoru parametara, a fazni prelaz nastaje kada je na krivoj *kritična tačka* $T = T_c$.

Pre prolaska kroz T_c, oblast T_-, sistem je bio u nepokretnoj tački ρ_1; u njoj slobodna energija ima minimum. I u samoj kritičnoj tački stanje ρ_1 je stabilno. Medjutim, nakon prolaska kroz T_c (oblast T_+) ρ_1 više nije stabilno stanje, već se sistem menja i novo stanje ima simetriju G'. Termodinamički parametri ulaze u opis sistema preko koeficijenata $A^{[r]}_{i_r}$, koji tako postaju funkcije $A^{[r]}_{i_r}(T)$; u okviru razmatranog modela se pretpostavlja neprekidnost ovih funkcija. U najjednostavnijem slučaju (uopštenje je pravolinijsko), parametar poretka je odredjeni element, Q, standardnog bazisa u prostoru opservabli; to znači da ostale opservable standardnog bazisa, koje su pre prelaza imale nultu srednju vrednost, zadržavaju ovu vrednost i neposredno posle prelaza. Nulta srednja vrednost do trenutka prelaza, $\mathrm{Tr}(Q\rho_1)$, koja pri prelazu postaje nenulta, ukazuju da sistem evoluira po pravcu $\rho_1 + \varepsilon Q$ (u skladu sa poslednjim rezultatom § 4.3). Dakle, ako je $Q \in \mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$, pre tačke prelaza je $A^{[2]}_{\mu t_\mu}(T_-) > 0$, a nakon $A^{[2]}_{\mu t_\mu}(T_+) < 0$. Time se dobija jednačina $A^{[2]}_{\mu t_\mu}(T_c) = 0$ za parametre kritične tačke, koja definiše hiperpovrš razgraničenja faza. Da bi sistem i u T_c bio stabilan u ρ_1, potrebno je da se u T_c anulira treći stepen razvoja (jer je drugi stepen 0, kao što je upravo pokazano). Ako bi se to ostvarilo na isti način kao i za drugi red, anuliranjem koeficijenata, dimenzija hiperpovrši koja u prostoru termodinamičkih parametara razdvaja faze bila bi za dva manja od dimenzije prostora parametara, i mogla bi se zaobići. Stoga se član trećeg stepena anulira simetrijskim uslovom: simetrični treći stepen reprezentacije parametra poretka ne sadrži jediničnu reprezentaciju. Konačno, minimalnost ρ_1 u T_c zahteva da član četvrtog stepena bude pozitivan.

Pošto je reč o diskretnim grupama, diskretna je i orbita novih, ekvivalentnih ravnotežnih položaja. Kao što je rečeno, kristal slučajno odabira neki od njih. Kod dovoljno velikih kristala ovo se manifestuje pojavom *kristalnih domena*, oblasti kristala u kojima je odabran isti minimum orbite. Usrednjeno po svim ovakvim minimumima, takav kristal je zadržao početnu simetriju, dok svaki domen ima simetriju male grupe, tj. epikernela.

U ovom kontekstu se mogu postaviti dva zadatka. *Landauvljev problem* traži da se odredi grupa simetrije nove faze, ako se zna parametar poretka i početna grupa G (npr. poznato je da je prelaz feromagnetni, pa je parametar poretka odgovarajuća ireducibilna komponenta aksijalnog vektora). Rešenje se sastoji u odredjivanju epikernela ireducibilne reprezentacije parametra poretka, i medju njima je i tražena podgrupa. *Inverzni Landauvljev problem* je odredjivanje parametra poretka pri poznatim grupama stare i nove faze. Sada je potrebno ispitati koje ireducibilne reprezentacije početne grupe kao jedan od epikernela imaju novu grupu. Pri tome se ne uzimaju u obzir one reprezentacije koje u simetričnom trećem stepenu sadrže jediničnu reprezentaciju. Parametar poretka je neka od fizičkih veličina sa tenzorskim osobinama jedne od preostalih reprezentacija.

Ugradjivanjem dodatnih, specifičnih fizičkih zahteva Landauvljeva teorija se može iskoristiti i za nove predikcije. Za ilustraciju će biti pomenut tzv. *Lifšicov uslov*. Dodatno se zahteva da nova faza bude prostorno homogena, tj. da parametar poretka ne zavisi od koordinate, što je ekvivalentno uslovu da mu je gradijent jednak nuli. Očigledno, u funkcional slobodne energije se moraju uneti i komponente gradijenta, te potpuno analogna procedura razvoja, nakon kratkog pravolinijskog razmatranja, daje grupno-teorijski prevod postavljenog zahteva: antisimetrični kvadrat reprezentacije parametra poretka ne sme da sadrži komponente zajedničke sa polarno-vektorskom reprezentacijom početne grupe. Na sličan način se uvode razmatranja samerljivih i nesamerljivih faza, kristalnih defekata, solitonskih rešenja itd. Poseban značaj ima veza kritičnih indeksa faznih prelaza sa simetrijom, koja se uspostavlja preko invarijantnih polinoma u okviru simetrijskog modeliranja slobodne energije [36].

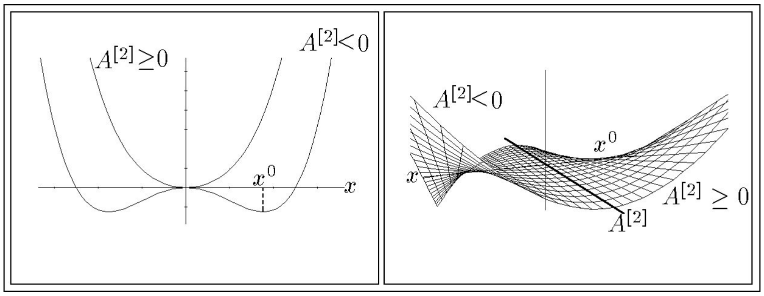
4.6 Teorije četvrtog stepena

Teorije sa spontanim narušenjem simetrije najčešće uvode invarijantni funkcional preko potencijala najjednostavnijeg, *standardnog* oblika (tzv. φ^4 teorije [37, 38]):

$$F(|\, x\,\rangle) = A^{[2]}x^2 + A^{[4]}x^4, \tag{4.4}$$

(x je norma vektora $|\, x\,\rangle$). Izraz (4.4) se može shvatiti i kao Tejlorov razvoj nekog komplikovanijeg potencijala invarijantnog na grupu $\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$ ($\mathrm{U}(n)$ u kompleksnom slučaju) u okolini $|\, x_1\,\rangle = 0$, koji je nepokretna tačka ove grupe (nulti stepen je ignorisan, jer fizički sadržaj teorije ne zavisi od njega). Istovremeno, to je invarijantni polinom četvrtog stepena za identičnu reprezentaciju ovih grupa (za matrične grupe je sama grupa svoja reprezentacija, § A.2.1), koja je ireducibilna.

Ako je $\{|\, i\,\rangle | i = 1,\dots,n\}$ ortonormirani bazis, i $|\, x\,\rangle = \xi_n|\, n\,\rangle$, potencijal postaje $F(\xi_n) = A^{[2]}\xi_n^2 + A^{[4]}\xi_n^4$. Prvi i drugi izvod su $F'(\xi_n) = (2A^{[2]} + 4A^{[4]}\xi_n^2)\xi_n$ i $F''(\xi_n) = 2A^{[2]} + 12A^{[4]}\xi_n^2$. Tačka $|\, x_1\,\rangle = 0$ je stacionarna (prvi izvod je jednak 0 za $\xi_n = 0$), a da bi bila maksimum, što uzrokuje narušenje simetrije, dovoljno je da je $A^{[2]}$ negativno (sl. 4.1). Tada je sledeći ekstremum u pravcu kretanja (duž vektora $|\, x\,\rangle$) u $\xi_n^0 = \sqrt{-\frac{1}{2}\frac{A^{[2]}}{A^{[4]}}}$. To je tačka minimuma, jer u ξ_n^0 drugi izvod ima vrednost $-4A^{[2]} > 0$.



Slika 4.1: Potencijal $F(|\, x\,\rangle) = A^{[2]}x^2 + A^{[4]}x^4$ kao funkcija od x i $A^{[2]}$ (desno), i pri dve fiksirane vrednosti $A^{[2]}$ kao funkcija od x (levo): kada je $A^{[2]} \geq 0$, tačka $x = 0$ je minimum, a za $A^{[2]} < 0$ je maksimum, što uzrokuje nestabilnost sistema i prelazak u stanje minimuma $x^0 = \sqrt{-\frac{1}{2}\frac{A^{[2]}}{A^{[4]}}}$.

Oblik funkcionala u okolini ove tačke se nalazi zamenom $\xi_n = \xi_n^0 + \eta$ u (4.4):

$$F(\eta) = -\frac{{A^{[2]}}^2}{4A^{[4]}} - 2A^{[2]}\eta^2 +$$

$$+\sqrt{-8A^{[2]}A^{[4]}}(\sum_{i=1}^{n-1}\xi_i^2)\eta + \sqrt{-8A^{[2]}A^{[4]}}\eta^3 + A^{[4]}(\sum_{i=1}^{n-1}\xi_i^2)^2 + 2A^{[4]}(\sum_{i=1}^{n-1}\xi_i^2)\eta^2 + A^{[4]}\eta^4.$$

U teoriji polja koeficijent uz kvadrat polja se izjednačava sa polovinom kvadrata mase (kvazi)-čestice reprezentovane tim poljem; kvadratni članovi se pripisuju neinteragujućim, slobodnim česticama, a članovi višeg reda interakciji. Tako, izraz (4.4) opisuje n čestica, iste mase $m_\xi = \sqrt{2A^{[2]}}$, koje se pod delovanjem grupe transformacija $\mathrm{SO}(n,\mathbb{R})$ ($\mathrm{U}(n)$) transformišu jedna u drugu (tzv. multiplet). Ako kvadrat mase postane negativan, ceo sistem je nestabilan, i prelazi u stabilno stanje, koje opisuje jednu elementarnu česticu mase $m_\eta = 2\sqrt{-A^{[2]}}$ u interakciji sa bezmasenim *Goldstonovim (Goldstone) bozonima* $\xi_1, ..., \xi_{n-1}$.

Da bi se objasnio smisao gornjeg zaključka, treba uočiti da je smer n-tog vektora uzet potpuno proizvoljno, tj. da je bilo koji vektor iz potprostora početnih čestica (početni potprostor $\mathbb{R}^n$ ili $\mathbb{C}^n$, u kome je dejstvo ortogonalne ili unitarne grupe definisano) mogao biti korišćen sa istim rezultatom. Samim tim je jasno da je nadjeni minimum neprekidno degenerisan: orbitu istog minimuma čini sfera S^{n-1}. Malu grupu svakog minimuma čini grupa $\mathrm{SO}(n-1,\mathbb{R})$ ("rotacije" u potprostoru ortogonalnom na pravac minimuma). Dakle, dok je početna grupa imala $\frac{n(n-1)}{2}$ generatora, nova ih ima $\frac{(n-1)(n-2)}{2}$, a preostalih $n-1$ eksponenciranjem daju kosete male grupe, koji iz datog minimuma generišu celu orbitu — sferu (slični zaključi se dobijaju i za unitarne grupe). Stoga su kretanja po ovoj sferi slobodna, tj. njima definisane pobude, (kvazi)-čestice, nemaju kvadratni (maseni) član potencijala, i to su upravo Goldstonovi bozoni.

4.7 Adijabatičnost i Jan-Telerov efekat

Pri opisivanju složenih fizičkih sistema, tehnička (računska) nemogućnost da se dobijene jednačine tačno reše, obično se prevazilazi različitim aproksimacijama. Za razliku od aproksimacija vezanih za konkretne probleme, *adijabatska aproksimacija* je jedno od opštih mesta fizike.

Kad god se uoči da se sistem sastoji od dva podsistema, pri čemu jedan od njih ("laki"), prati promene drugog ("teški"), prvo se razmatra problem "lakog" podsistema, tako što se eksplicitno, kroz potencijal, ugradjuje zavisnost od stanja "teškog" podsistema. Pri fiksiranom stanju $|\ x\ \rangle$ "teškog", ovo je potencijal $V_{|\ x\ \rangle}$ "lakog" podsistema. Njegove minimalne tačke su stabilna stanja "lakog" podsistema za zadato stanje "teškog", i time funkcija stanja "teškog" podsistema. Aproksimacija se sastoji u tome da se ukupna evolucija izmeni tako da se pri kretanju "teškog" podsistema ne narušava stabilnost "lakog": izbacuju se oni članovi koji u okolini $|\ x\ \rangle$ mogu dovesti do prelaska iz minimuma potencijala $V_{|\ x\ \rangle}$ u neku neminimalnu tačku potencijala $V_{|\ x'\ \rangle}$. Drugim rečima, "laki" sistem se pri promeni "teškog" trenutno stabilizuje. Kvantnomehanička formulacija ovog postupka biće precizirana u sledećoj glavi, a ovde će se analizirati neke osobine sistema sa ovakvim svojstvom.

Prostor stanja je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_T$. Evolucija je odredjena ukupnim potencijalom (invarijantni funkcional na celom prostoru):

$$V(|\ x\ \rangle, |\ y\ \rangle) = V_L(|\ y\ \rangle) + V_T(|\ x\ \rangle) + V_{LT}(|\ x\ \rangle, |\ y\ \rangle),$$

gde je $V_{LT}(|\ x\ \rangle, |\ y\ \rangle)$ potencijal interakcije, dok su $V_T(|\ x\ \rangle)$ i $V_L(|\ y\ \rangle)$ potencijali izolovanih podsistema. Grupa simetrije sistema je G (presek simetrija potencijala). Delovanje grupe je dato direktnim proizvodom podsistemskih reprezentacija: $D(G) = D_L(G) \otimes D_T(G)$.

Adijabatičnost pretpostavlja da dinamiku "lakog" sistema odredjuje potencijal $V(|\ x_1\ \rangle, |\ y\ \rangle)$, koji je, za fiksirano $|\ x_1\ \rangle$ funkcional na $\mathcal{H}_L$. Neka je $|\ y_1, \nu t_\nu\ \rangle \in \mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$ jedna tačka minimuma. Cela njena orbita se sastoji od ekvivalentnih minimuma, i oni, zbog ireducibilnosti reprezentacije $D^{(\nu)}(G)$, obrazuju $\mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$ (§ A.2.2). Sada je jasno da aproksimacija zanemaruje dinamiku koja pri promeni stanja "teškog" podsistema izvodi "laki" iz $\mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$. Stoga su važna samo odstupanja od $|\ y_1, \nu t_\nu\ \rangle$ unutar ovog potprostora, tj. pri kretanju "teškog" podsistema $|\ x_1\ \rangle + \varepsilon|\ x, \mu t_\mu\ \rangle$ novo stabilno stanje "lakog" podsistema je oblika $|\ y_1, \nu t_\nu\ \rangle + \eta \sum_n \eta_{\nu t_\nu n}|\ \nu t_\nu n\ \rangle$. Kako je "laki" podsistem, zbog adijabatičnosti stalno u stabilnom stanju, važi

$$V(|\ x_1\ \rangle + \varepsilon|\ x, \mu t_\mu\ \rangle, |\ y_1, \nu t_\nu\ \rangle + \eta \sum_n \eta_{\nu t_\nu n}|\ \nu t_\nu n\ \rangle) =$$

$$V(|\ x_1\ \rangle, |\ y_1, \nu t_\nu\ \rangle) + \eta^2 \sum_{nn'} C_{nn'}(\varepsilon)\eta_{\nu t_\nu n}\eta_{\nu t_\nu n'} + \dots$$

Stabilnost "teškog" podsistema je uslovljena naknadnim razvojem po ε, pa se za vodeći član iz prethodne jednakosti nalazi $\eta^2\varepsilon \sum_{nn'm} C_{nn'm}\eta_{\nu t_\nu n}\eta_{\nu t_\nu n'}\xi_{\mu t_\mu m}$. Polinom linearan po ε se transformiše po reprezentaciji $[D^{(\nu)^2}(G)] \otimes D^{(\mu)}(G)$. Stoga je sistem nestabilan za odstupanja "teškog" podsistema u pravcu $\mathcal{H}_T^{(\mu)}$, ako postoji invarijantni polinom linearan po $\xi_{\mu t_\mu m}$ i kvadratan po $\eta_{\nu t_\nu n}$, tj. ako navedeni proizvod reprezentacija sadrži jediničnu reprezentaciju. Dakle, ako se $D^{(\mu)}(G)$ sadrži u $[D^{(\nu)^2}(G)]$ (uslov ekvivalentan prethodnom zbog realnosti reprezentacija), "teški" sistem će preći u stanje niže simetrije. Ukoliko je $D^{(\nu)}$ jednodimenzionalna (tj. "laki" sistem je u nedegenerisanom stanju), simetrični kvadrat je jedinična reprezentacija, te su moguća odstupanja samo u pravcu nepokretnih tačaka u $\mathcal{H}_T$, dakle, bez narušenja simetrije.

U prethodnom izrazu μ je bilo koja iz reprezentacija u razvoju $D_T(G)$, a ν neka od ireducibilnih komponenti $D_L(G)$. Sistem je *adijabatski nestabilan* ako u simetričnom kvadratu svake ireducibilne reprezentacije njegove grupe simetrije postoji bar jedna nejedinična ireducibilna komponenta $D_T(G)$. Ako je "teški" podsistem adijabatski nestabilan, ma kakav bio "laki" podsistem, simetrija G "teškog" se narušava čim je "laki" degenerisan. Medjutim, i u novom stanju, cela procedura bi se mogla ponoviti, samo bi se umesto G razmatrala grupa $G_{|\, x,\mu t_\mu\, \rangle}$, odgovarajući epikernel za $D^{(\mu)}$, i njene reprezentacije. Ako uslov adijabatske nestabilnosti važi i za epikernele, njihove epikernele itd., simetrija se narušava sve dok "laki" sistem ne predje u stanje jednodimenzionalne reprezentacije aktuelne grupe simetrije "teškog" sistema, tj. dok se ne izgubi degeneracija "lakog" podsistema.

Razmatranje potencijala "lakog" sistema u slojevima, $V(|\, x_1\, \rangle, |\, y\, \rangle)$, ne predstavlja aproksimaciju, već samo prilagodjavanje budućoj aproksimaciji. S druge strane, zabrana napuštanja pojedinih ireducibilnih potprostora u $\mathcal{H}_L$ jeste aproksimacija. Opravdanost zavisi od problema (ispostavlja se da je važan odnos masa, pa odatle i upotrebljeni "atributi").

Sledeći ideju Lava Landaua [3], Jan i Teler su pokazali [39] da su nelinearni molekuli vibraciono nestabilni u degenerisanim elektronskim stanjima (pri tome se ne računa Kramersova degeneracija, vezana za nelinearno reprezentovanu vremensku inverziju § 2.6.1). Naime, pokazali su da simetrični kvadrat svake fizički ireducibilne višedimenzionalne reprezentacije svake tačkaste grupe konačnog reda sadrži neku od ireducibilnih komponenti vibracione reprezentacije molekula sa takvom simetrijom. Jasno je da joni uzimaju ulogu "teškog" sistema, a elektroni "lakog", te je $D_T(G)$ dinamička reprezentacija jonskog sistema. Translacione i rotacione mode se ne razmatraju, jer je ukupni sistem izolovan, tj. invarijantni funkcional je konstantan duž pravaca ovakvih pomeranja, te odgovarajući članovi odsustvuju u prvom, kao i ostalim stepenima razvoja, i ne mogu dovesti do nestabilnosti. To znači da kod molekula uvek postoji neka vibraciona (ne translaciona ili rotaciona) nesimetrična (odgovara nejediničnoj reprezentaciji) normalna moda, koja će se u ukupnom potencijalu pojaviti u prvom stepenu razvoja, i samim tim destabilizovati jone u molekulu, menjajući im relativni položaj uz smanjivanje simetrije. Kako je epikernel tačkaste grupe opet tačkasta grupa, dolazi do opisanog narušenja simetrije sve do potpunog cepanja elektronskih nivoa na nedegenerisane: tek tada nastaje stabilno stanje molekula. Isto svojstvo je pokazano za linijske grupe [25], odnosno polimere, dok za ostale beskonačne sisteme (uključujući kristale) postoje samo pojedinačne, pre svega eksperimentalne potvrde [40]. Iako je naglašeno da je reč o aproksimativnom tretmanu, odnos masa elektrona i jona čini izvedene zaključke praktično tačnim, a eksperimentalno su lako uočljivi.

Glava 5

ELEKTRONSKI NIVOI MOLEKULA I KRISTALA

U fizici višečestičnih sistema nije mogućce rešiti dinamički problem egzaktno, pa se pristupa nizu aproksimacija, medju kojima se prva, adijabatska ili Born-Openhajmer(*Oppenheimer*) ova, sastoji u razdvajanju elektronskog i jonskog sistema.

5.1 Adijabatski model u kvantnoj mehanici

Sasvim opšta ideja adijabatskog ponašanja složenih sistema [7, 3], razmotrena u prethodnoj glavi, dala je brojne važne rezultate kroz kvantno-mehaničke primene. To ukazuje na potrebu za preciznim kvantnim formalizmom relevantnih pojmova [41].

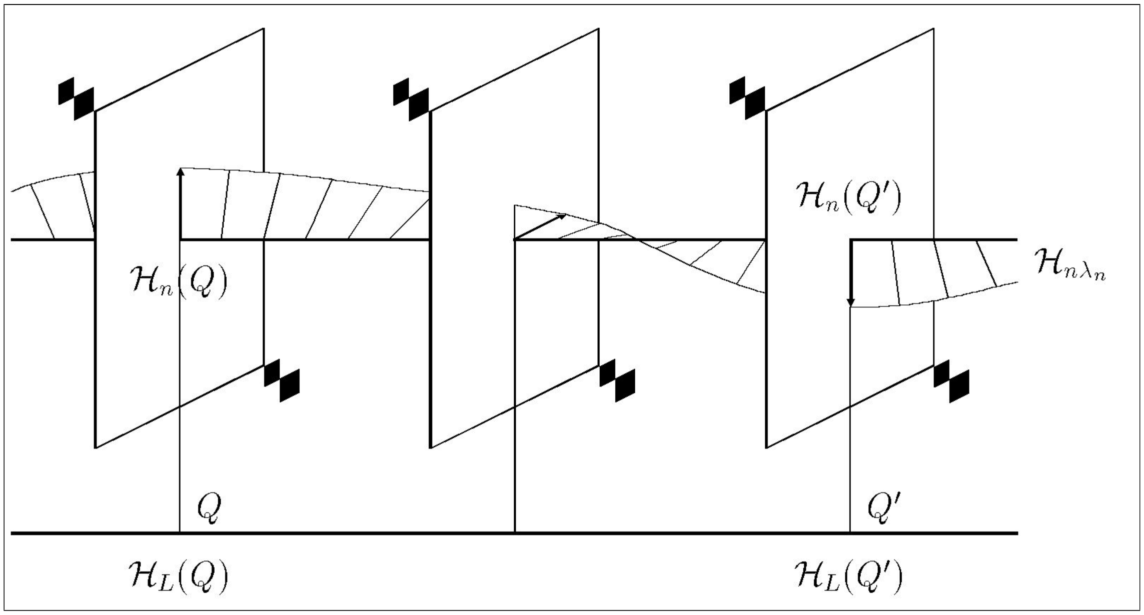
Pošto je reč o složenom sistemu, čiji su podsistemi "laki" i "teški", totalni prostor stanja je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_T$. Evolucija je odredjena hamiltonijanom:

$$H = T_L \otimes I_T + I_L \otimes T_T + V,$$

gde su sa T označene kinetičke, a sa $V = V_L \otimes I_T + I_L \otimes V_T + V_{LT}$ potencijalne energije. Neka je $\hat{Q}$ operator koordinate (zapravo skup svih koordinata) "teškog" sistema, dakle kompletna opservabla u $\mathcal{H}_T$ (njene svojstvene vrednosti, Q, jednoznačno odredjuju odgovarajuća stanja "teškog" podsistema). $\hat{Q}$ komutira sa svim potencijalima i sa T_L: $V_T = \int_Q V_T(Q) |\ Q\ \rangle\langle\ Q\ | dQ$ (spektralna forma), $V_{LT} = \int_Q V_{LT}(Q) |\ Q\ \rangle\langle\ Q\ | dQ$ (sada je $V_{LT}(Q)$ operator u $\mathcal{H}_L$).

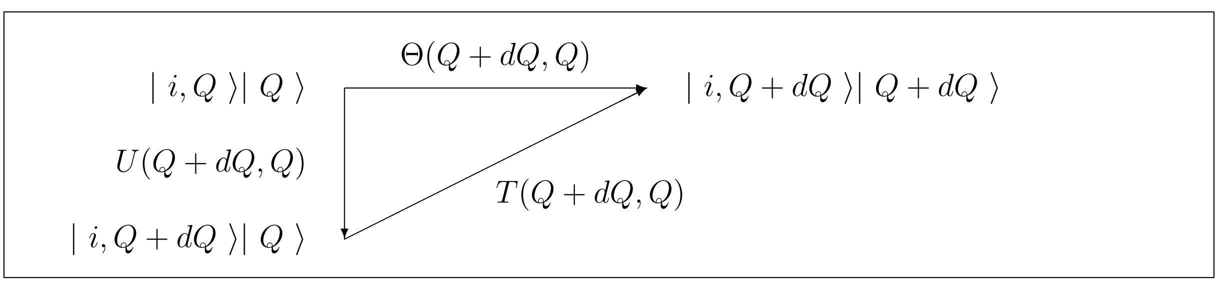
Ceo prostor se može shvatiti kao ortogonalni zbir potprostora $\mathcal{H}_L(Q) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_L \otimes |\ Q\ \rangle$ (u stvari proizvod $\mathcal{H}_L$ i jednodimenzionalnog lineala nad $|\ Q\ \rangle$): $\mathcal{H} = \oplus_Q \mathcal{H}_L(Q)$. Svaki od ovih potprostora je izomorfan sa $\mathcal{H}_L$ i invarijantan za operator $H_L = T_L \otimes I_T + V$, koji se u tom "vertikalnom sloju" redukuje u $H_L(Q) |\ Q\ \rangle\langle\ Q\ |$, gde je $H_L(Q) \stackrel{\text{def}}{=} T_L + V_L + V_{LT}(Q) + V_T(Q) I_L$ operator u $\mathcal{H}_L$. Rešavanjem svojstvenog problema za $H_L(Q)$ nalaze se spektralna forma $H_L(Q) = \sum_n \epsilon_n(Q) P_n(Q)$, svojstveni ortonormirani bazis $\{|\ n\lambda_n, Q\ \rangle\}$ i svojstveni potprostori $\mathcal{H}_{Ln}(Q)$. n-ta svojstvena vrednost je funkcija Q, kao nekog spoljnjeg parametra (slika 5.1).

Familija operatora $H_L(Q)$ generiše familiju svojstvenih bazisa $\{|\ n\lambda_n, Q\ \rangle\}$: za svaku vrednost Q odredjen je jedan bazis u $\mathcal{H}_L$. Istovremeno je u celom prostoru odredjen zajednički svojstveni



Slika 5.1: Razlaganje prostora $\mathcal{H}$ na vertikalne potprostore $\mathcal{H}_L(Q)$. Vektori $\mid n\lambda_n, Q\rangle\mid Q\rangle$ u različitim tačkama Q obrazuju horizontalni potprostor $\mathcal{H}_{n\lambda_n}$.

ortonormirani bazis za H_L i $\hat{Q}$ ($[\hat{Q}, H_L] = 0$): $\{\mid Q\rangle\mid n\lambda_n, Q\rangle\}$ sa svojstvenim vrednostima $\epsilon_n(Q)$ i Q, respektivno. Značajno je da ovaj bazis, tzv. *adijabatski bazis*, mada nekorelisan, nije proizvod dva bazisa iz $\mathcal{H}_L$ i $\mathcal{H}_T$. Zbog prirodne neprekidnosti $H_L(Q)$ po Q, vektore $\mid n\lambda_n, Q\rangle$ moguće je odabrati tako da pri promeni Q stalno ostaju svojstveni vektori operatorske funkcije $H_L(Q)$ za vrednost $\epsilon_n(Q)$. Na taj način se dobija horizontalni potprostor $\mathcal{H}_{n\lambda_n}$ u $\mathcal{H}$: to je potprostor nad vektorima $\{\mid n\lambda_n, Q\rangle\mid Q\rangle \mid \forall Q\}$, izomorfan sa $\mathcal{H}_T$ (izomorfizam je $\mid Q\rangle \mapsto \mid n\lambda_n, Q\rangle\mid Q\rangle$). Ortogonalnim sabiranjem horizontalnih potprostora jednoznačno se definišu horizontalni slojevi $\mathcal{H}_n = \oplus_{\lambda_n}\mathcal{H}_{n\lambda_n}$.



Slika 5.2: Razlaganje pomeranja $\Theta(Q+dQ, Q) = e^{-dQ\frac{\partial}{\partial Q}}$ iz Q za dQ celog sistema na pomeranje $U(Q+dQ, Q) = e^{\frac{\imath}{\hbar}A(Q)dQ}$ "lakog" i $T(Q+dQ, Q) = e^{\frac{-\imath}{\hbar}dQP_T}$ "teškog" podsistema.

U odnosu na uobičajeni izbor "fiksiranog" bazisa u $\mathcal{H}$ (proizvod bazisa iz $\mathcal{H}_T$ sa fiksiranim bazisom u $\mathcal{H}_L$), adijabatski bazis dovodi do značajnih razlika pri reprezentovanju. U različitim tačkama Q i Q', odgovarajući bazisi u $\mathcal{H}_L$ se povezuju unitarnim operatorom prelaska $\mid i, Q'\rangle =$

$U(Q',Q)|\, i,Q\, \rangle$. Stoga je infinitezimalno pomeranje celog sistema za dQ generisano operatorom $\frac{\partial}{\partial Q}$, tj. prelaz $|\, i,Q\, \rangle|\, Q\, \rangle \mapsto |\, i,Q+dQ\, \rangle|\, Q+dQ\, \rangle$ nije više vezan isključivo za "teški" sistem; zapravo, infinitezimalno pomeranje samog "teškog" sistema, generisano njegovim impulsom P_T, sada je, zbog interakcije sa "lakim" sistemom, samo deo ukupne promene (slika 5.2.). Tako se dolazi do relacije

$$|\, i,Q+dQ\, \rangle|\, Q+dQ\, \rangle = T(Q+dQ,Q)U(Q+dQ,Q)|\, i,Q\, \rangle|\, Q+dQ\, \rangle.$$

Najniži članovi u razvoju daju $\{I+(\frac{\partial}{\partial Q}+\frac{\imath}{\hbar}A(Q))dQ\}|\, i,Q\, \rangle|\, Q\, \rangle$, gde je $A(Q)$ hermitski operator u $\mathcal{H}_L$ nastao pri diferenciranju U. Poredjenje sa uobičajenom konstrukcijom operatora impulsa, kao generatora translacija, pokazuje da impuls "teškog" sistema sada ima oblik $P_T = P_T^0 + A$. Za $A=0$ bi $P_T^0 = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial Q}$ bio uobičajeni izvodni operator impulsa (u "fiksiranom" bazisu); njegov fizički sadržaj, generalisani impuls za pomeranja duž Q, objašnjava i pojavu člana $A(Q)$: kompenzovanjem promene "lakog" sistema iz $|\, i,Q\, \rangle$ u odgovarajuće stanje $|\, i,Q+dQ\, \rangle$, dobija se impuls teškog sistema. Sa druge strane P_T^0 se redukuje u horizontalnim slojevima, jer ne menja komponentu iz lakog potprostora (indeks i ostaje nepromenjen). Pojava nenultog kompenzujućeg operatora A je vezana za izbor bazisa (u "fiksiranom" bazisu je $A=0$), a time i za interakciju podsistema, jer je bazis odredjen hamiltonijanom; zato se u rečnicima drugih oblasti fizike A opisuje kao *hamiltonijanska koneksija*.

Značaj gornjeg rezultata je u tome da pomeranja "teškog" sistema u adijabatskoj reprezentaciji dobijaju i "vertikalnu" komponentu (zbog nenultosti A), što može dovesti do prelaza izmedju horizontalnih slojeva. Ovo ima neposredne posledice i na ukupnu dinamiku. Ubačena kroz kinetičku energiju "teškog" sistema, hamiltonijanska koneksija uzrokuje neinvarijantnost horizontalnih slojeva za H, tj. vremenska evolucija dovodi do prelaza iz jednog horizontalnog sloja u drugi. Preciznije, u T_T se može izdvojiti $T_T^0 = \frac{{P_T^0}^2}{2M}$; kao i P_T^0, ne razdvajajući dinamiku "teškog" i "lakog" sistema, T_T^0 se redukuje u horizontalnim slojevima. Tako je $T_T = T_T^0 + \Lambda$, gde ostatak Λ dozvoljava vertikalna pomeranja (tačan izraz za Λ preko A i izvoda može se lako naći). Λ je jedini član hamiltonijana koji u adijabatskom bazisu povezuje različite horizontalne slojeve, onemogućujući potpunu separaciju promenljivih na "lake" i "teške".

Adijabatska *aproksimacija* zabranjuje mogućnost prelaza iz jednog u drugi horizontalni sloj[1]. Stoga se u Λ odbacuju svi delovi koji povezuju različite slojeve, tj. zamenjuje se operatorom $\Lambda^0 = \sum_n \int_Q P_n(Q)\Lambda(Q)P_n(Q)|\, Q\, \rangle\langle\, Q\, |dQ$. Uobičajeno ju je uvesti tako što se A, pa i Λ, potpuno zanemari, a zatim uračunava perturbativno; u prvom redu se u obzir uzimaju samo odsečci perturbacije u pojedinim slojevima istih svojstvenih vrednosti, pa je adijabatičnost perturbativnog metoda automatski ispunjena (ovakva aproksimacija je nešto grublja nego što zahteva izvorni adijabatski uslov). Osnovni hamiltonijan $H^o = T_T^0 + H_L$ se redukuje u potprostorima $\mathcal{H}_{n\lambda_n}$, i u njima deluje kao $H_n^o = T_T^0 + \epsilon_n$, uz $\epsilon_n = \int_Q \epsilon_n(Q)P_n(Q)|\, Q\, \rangle\langle\, Q\, |dQ$. Razumljivo je da se $H_L(Q)$ obično razmatra kao hamiltonijan "lakog" sistema u polju "teškog" (u položaju Q), pa u tom smislu svojstveni vektori $|\, n\lambda_n, Q\, \rangle$ postaju stacionarna stanja "lakog" sistema. Žargonom pomenute interpretacije, osnovni hamiltonijan (koji se upravo zahvaljujući aproksimaciji redu-

[1] $\alpha\delta\iota\alpha\beta\alpha\tau o\varsigma$ znači neprelazan, nepregaziv.

kuje u horizontalnim slojevima) za svako n opisuje dinamiku "teškog" sistema u *adijabatskom potencijalu* $\epsilon_n(Q)$.

Na taj način je dobijen algoritam za primenu adijabatske aproksimacije. Prvo se reši svojstveni problem "lakog" sistema u polju "teškog", čime se dobijaju svojstvene energije $\epsilon_n(Q)$ i svojstveni vektori $| n\lambda_n, Q \rangle$, u funkciji položaja "teškog" sistema. Zatim se razmatra "teški" sistem u polju $\epsilon_n(Q)$, za svako n, čime se dobija stacionarni bazis i energije osnovnog hamiltonijana. Konačno, ukoliko se zahteva preciznije rešenje, perturbacioni metod uračunava za svako Q i n perturbaciju $P_n(Q)\Lambda P_n(Q)$. Treba napomenuti da je gornje razmatranje poznato i pod nazivom Born-Openhajmerova aproksimacija. U različitim oblastima fizike je faktorizacija istog tipa dovela do objašnjenja pojave tzv. *geometrijske* ili *Berijeve (Berry) faze* [42] korišćenjem diferencijalno-geometrijskog aparata gradijentnih teorija. Često se uvodi dodatna, Bornova aproksimacija. Ako bi se znalo osnovno stanje "teškog" sistema, tj. neki ravnotežni položaj, ceo postupak bi se ponovio, samo za potencijale $V_T(Q)$ i $V_{LT}(Q)$ uzete u okolini tog ravnotežnog položaja. Naravno, u tom kontekstu preostaje razmatranje "lakog" sistema.

5.2 Primena simetrije

Operator kinetičke energije bilo kakve čestice komutira sa svim geometrijskim transformacijama, tj. transformiše se po jediničnoj reprezentaciji euklidske grupe. Stoga simetriju uvek odredjuju potencijali. Pretpostavka adijabatičnosti, tj. uslov da "laki" sistem prati ponašanje "teškog", povlači da je ukupna grupa simetrije odredjena potencijalom "teškog" sistema. Ovo se manifestuje kroz uvek ispunjeni zahtev da potencijali zavise samo od relativnih položaja komponenti "lakog" sistema (tj. V_L, ima euklidsku grupu simetrije) i položaja "teškog" sistema (V_{LT} i V_T). Stoga je simetrija ukupnog sistema, kada je "teški" u položaju Q, odredjena geometrijom ovog položaja. Neka je to grupa G_Q.

Svi potencijali interakcije u razmatranom problemu su sadržani u $H_L(Q)$, te je on invarijantan na delovanje grupe G_Q dato reprezentacijom $D_L(G_Q)$. Odmah je jasno da su svojstveni potprostori $\mathcal{H}_{Ln}(Q)$ invarijantni za delovanje grupe, te se može naći standardni svojstveni bazis $| \mu t_\mu m, Q \rangle$ za svojstvenu vrednost $\epsilon_{\mu t_\mu}(Q)$. Posebno važni primeri ovakve primene simetrije biće razmotreni u narednim odeljcima, a sada će pažnja biti posvećena ukrštanju energijskih nivoa.

Iz opštih razmatranja prethodnog odeljka sledi da su konfiguracije "teškog" sistema u kojima se ukrštaju energijski nivoi "lakog" sistema svojevrsni singulariteti adijabatskog potencijala. U njima je povećana degeneracija, tako da se, strogo govoreći, horizontalni slojevi mogu definisati samo izuzimajući ove tačke. Ispostavlja se da su konsekvence ukrštanja nivoa značajne: takve konfiguracije imaju simetriju veću od okolnih. Samim tim su kritične tačke adijabatskog potencijala, te dozvoljavaju narušenje simetrije. Naime, što je Q simetričniji položaj, simetrijom indukovana degeneracija je veća, dolazi do spajanja više energija $\epsilon_{\nu t_\nu}(Q')$ za različite reprezentacije grupa okolnih, niskosimetričnih položaja Q', što se manifestuje kao ukrštanje energijskih nivoa.

Landau je ukazao na nemogućnost ukrštanja više adijabatskih potencijala iste reprezentacije

[3]. Neka je $G_{Q'} < G_Q$ grupa simetrije niskosimetrične konfiguracije Q' u okolini Q. Nivo $\epsilon_{\mu t_\mu}(Q)$ se pri kretanju ka Q' cepa ako je $D^{(\mu)}(G_Q) \downarrow G_{Q'}$ reducibilna reprezentacija. Neka su ν i ν' dve reprezentacije $G_{Q'}$ koje se javljaju u suženoj, a odgovarajući standardni podbazisi $\{| \nu t_\nu n \rangle\}$ i $\{| \nu' t_{\nu'} n' \rangle\}$. U ovom bazisu matrica perturbacije $\Lambda(Q)$ je $\begin{pmatrix} \Lambda_{\nu\nu}(Q) & \Lambda_{\nu\nu'}(Q) \\ \Lambda_{\nu'\nu}(Q) & \Lambda_{\nu'\nu'}(Q) \end{pmatrix}$. U Λ ne figuriše nikakvo spoljašnje polje, tj. zavisi od promenljivih samog sistema, te mu simetrija nije manja od G: transformiše se po jediničnoj reprezentaciji ove grupe. Vigner-Ekartov teorem tada daje da su $\Lambda_{\nu\nu}(Q)$ i $\Lambda_{\nu'\nu'}(Q)$ zapravo jedinične matrice pomnožene istim brojem (jer se nivoi spajaju). Vandijagonalne podmatrice su jednake nuli, osim ako je $\nu = \nu'$, kada su, takodje, skalarne. To znači da, ukoliko u osnovnom hamiltonijanu i dolazi do spajanja nivoa dve ekvivalentne reprezentacije, perturbacija ukida ovu degeneraciju, i nivoi se ne ukrštaju.

5.3 Molekularne orbitale

Adijabatska i Bornova aproksimacija se veoma uspešno primenjuju u proučavanju elektronskog sistema u molekulima. Razlog dobrog eksperimentalnog potvrdjivanja je velika razlika u masama elektrona i jona, što je, kako se pokazuje, kriterijum primenljivosti aproksimacije. Tako je adijabatska aproksimacija dovoljna za objašnjenje vezivanja atoma u molekule (najniži adijabatski potencijal $\epsilon(Q)$ ima minimum u nekom konačnom Q, pa je to ravnotežna konfiguracija molekulskih atoma), uočen je Jan-Telerov efekat, itd. Medju najvećim uspesima kvantne mehanike u teoriji molekula je objašnjenje hemijske veze i elektronskih spektara [43, 44].

U toj teoriji se smatra da je položaj jona već poznat i fiksiran, te se proučava samo elektronski podsistem. Standardni pristup kvantne mehanike, izvanredno potvrdjen kod elektronskih spektara atoma, razmatra jednoelektronska stanja, koja se zatim redom popunjavaju elektronima. Smatra se da u stvaranju hemijske veze učestvuju elektroni sa najdaljih (pre svega nepopunjenih) ljuski pojedinih atoma, slabije vezani za jezgro atoma.

Da bi se odredile jednoelektronske molekularne orbitale, potrebno je rešiti svojstveni problem operatora $H_e = H_e(Q)$, za ravnotežni položaj jezgara Q. Naravno, i ovo je prekomplikovan zadatak, pa se pristupa dodatnim aproksimacijama. Čest početni korak je Rejli-Ricov varijacioni metod (§ 1.7): odredjuju se molekularne orbitale u linealu $\mathcal{H}^{AO} < \mathcal{H}_e(Q)$ nad atomskim orbitalama sa kojih potiču elektroni (variraju se koeficijenti u kombinacijama). Očigledno važnu ulogu ima dodatna pretpostavka delimične *lokalizacije veza*, aproksimacija kojom se definiše poreklo elektrona u razmatranoj vezi, a time pojedinim molekulskim orbitalama pridružuju relevantni atomi i njihove, atomske, orbitale. Obično su to parovi atoma, kada se govori o *lokalizovanoj vezi*, no, kod složenih molekula, mogu biti i veći delovi, u krajnjem slučaju, ceo molekul. Što je veći broj atoma uzet u obzir rezultati su tačniji, no bledi, za hemiju arhetipska slika medjusobno direktno povezanih atoma. Kriterijum kako lokalizovati orbitalu je fenomenološki, a dobijeni rezultati, poredjenjem sa eksperimentom ili eventualnim tačnijim računom, mogu opravdati izbor.

Primena simetrije u okviru Rejli-Ricovog metoda je u opštim crtama već objašnjena (§ 1.7). Izborom grupe atoma i relevantnih orbitala fiksiran je potprostor $\mathcal{H}^{AO}$, sa projektorom P, u $\mathcal{H}_e(Q)$. Samim tim je definisan operator $H^{AO} = PH_eP$, koji pored faktičkog izolovanja uočene grupe atoma, aproksimira dodatno H_e zadržavajući samo pojedine delove interakcije (odsečci u $\mathcal{H}^{AO}$). Atomske orbitale, $|\ i\ \rangle$, nisu ortogonalne, javljaju se integrali prepokrivanja, S_{ij}, i dobija se varijaciona jednačina (1.4), za $h_{ij} = \langle\ i\ |H_e|\ j\ \rangle$. G je grupa simetrije uočenog dela molekula. Zajedno sa odredjenom atomskom orbitalom $|\ i\ \rangle$, u $\mathcal{H}^{AO}$ ulaze i ostale dobijene transformacijama grupe iz nje, čime se automatski obezbedjuje invarijantnost potprostora $\mathcal{H}^{AO}$ i formira reprezentacija $D^{AO}(G)$, analogno dinamičkoj reprezentaciji (§ 3.2). j-ta atomska orbitala atoma α, uzeta za formiranje molekularne orbitale, je $|\ \alpha, n_j l_j m_j\ \rangle$. Indeksi su kvantni brojevi Kulonove interakcije (u uglovnom delu atomskog prostora to je sferni harmonik $Y^{l_j}_{m_j}$), i u odnosu na grupu $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ vektor se transformiše po ireducibilnoj reprezentaciji težine l_j i parnosti $(-1)^{l_j}$. Pisanjem u formi proizvoda, $|\ \alpha, n_j l_j m_j\ \rangle = |\ \alpha\ \rangle|\ n_j l_j m_j\ \rangle$, dejstvo elementa grupe postaje $D^P(g)|\ \alpha\ \rangle D^{(l_j,(-1)^{l_j})}(g)|\ n_j l_j m_j\ \rangle$, i sve tako dobijene orbitale (istog ili drugih atoma) su u $\mathcal{H}^{AO}$. Ponovo se može govoriti o permutacionom dejstvu na atome i delovanju u "unutrašnjem" prostoru sfernih harmonika. Medjutim, za tačkastu grupu $G < \mathrm{O}(3,\mathbb{R})$, sužena reprezentacija $D^{(l,(-1)^l)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R})) \downarrow G$ ne mora biti ireducibilna, i ceo ireducibilni prostor sfernih harmonika ne mora se uzeti u razmatranje (mada se to najčešće čini iz praktičnih razloga). Tako je dobijen bazis atomskih orbitala, samim tim i reprezentacija $D^{AO}(G)$, te su stvoreni svi preduslovi za standardnu proceduru.

U ovom kontekstu važnu ulogu ima Hikelova aproksimacija, u kojoj se bazis odabranih atomskih orbitala smatra ortonormiranim, tj. $S_{ij} = \delta_{ij}$ (odbacuju se svi "integrali prepokrivanja", čime se dobija svojstveni problem matrice h; da je bazis ortonormiran, ova matrica bi bila reprezentaciona matrica za H^{AO}, tako da se uvedenom pretpostavkom h i H^{AO} izjednačuju), dok se H^{AO} modelira: dijagonalni elementi su energije elektrona u odgovarajućim atomskim orbitalama *Kulonovi integrali*, a nedijagonalni, tzv. *integrali rezonanci*, predstavljaju interakciju pojedinih orbitala, i brzo opadaju sa rastojanjem medju atomima (stoga se smatraju nenultim samo za atomske orbitale koje formiraju vezu). Grubost višestrukih aproksimacija je unekoliko kompenzovana eksplicitnim korišćenjem simetrije kroz izbor jednakih matričnih elemenata za ekvivalentne parove atomskih orbitala, što objašnjava kvalitativno, ipak, dobre rezultate.

Najvažniji primer su lokalizovane veze, izmedju parova atoma; one su najjače, a samo elektroni koji ne mogu da stanu u ove osnovne orbitale (po dva na svaku) rasporedjuju se u manje lokalizovane veze (za veće grupe atoma). Relevantna grupa simetrije je $\mathbf{C}_{\infty v}$ (par različitih atoma) ili $\mathbf{D}_{\infty h}$ (par jednakih atoma). Molekularne orbitale se stoga mogu transformisati po jednodimenzionalnim (σ-elektroni) ili dvodimenzionalnim (π-elektroni) reprezentacijama ovih grupa. Dodatno, u zavisnosti od grupe, može se naglasiti parnost u odnosu na refleksije u ravni molekula (tj. razlikovati reprezentacije A_0 i B_0 kod σ-veze različitih atoma), i ravan ortogonalnu na osu molekula ($A_0^{\pm}, B_0^{\pm}, E^{\pm}_{m,-m}$) za jednake atome. Očigledno je kod svih dvoatomskih molekula dobar kvantni broj $|m|$ zapravo projekcija ugaonog momenta na osu molekula. Svaki orbitalni elektronski nivo sa $|m| > 0$ je dvostruko degenerisan $m = \pm|m|$, što sledi iz dvodimenzionalnosti odgovarajućih reprezentacija. Za kompletno objašnjenje elektronskih orbitala potrebno je voditi računa i o spinu, kako elektrona, tako i jezgara, što ovde neće biti učinjeno (jer bi trebalo izvoditi dvoznačne reprezentacije navedenih grupa), a svodi se na slaganje projekcija komponenti svih ugaonih momenata na z-osu. Jasno, opšte pravilo je da se pri slaganju $|m_1|$ i $|m_2|$ nalaze po jedanput projekcije $|m_1|+|m_2|$ i $||m_1|-|m_2||$, što se lako proverava nalaženjem Klebš-Gordanovih serija ireducibilnih reprezentacija pomenutih grupa.

5.4 Elektronske zone kristala

Kao i kod molekula, kod kristala se smatra da je ravnotežni položaj jona Q poznat, te se pristupa formiranju jednoelektronskih nivoa. Razmatra se opšti slučaj kristala, što dozvoljava korišćenje samo translacione grupe T.

Bez obzira na način konstrukcije, jednoelektronske orbitale se transformišu po ireducibilnim (jednodimenzionalnim) reprezentacijama $D^{(\boldsymbol{k})}(\ I\ |\boldsymbol{z}\ ) = e^{-\imath \boldsymbol{k}\boldsymbol{z}}$, te se, Blohovim teoremom (§ 2.3.1) traženje kristalnih orbitala svodi na odredjivanje odgovarajućih funkcija $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}$. Zapravo, višestruki ireducibilni potprostor $\boldsymbol{k}$-te reprezentacije $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}_e(Q)$, može se shvatiti kao $e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\mathcal{H}^{(0)}_e(Q)$. Stoga, za svako $\boldsymbol{k}$ u $\mathcal{H}^{(0)}_e(Q)$ treba odrediti funkcije $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}$, tako da $e^{\imath\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}(\boldsymbol{r})$ budu svojstveni vektori za H_e. Direktno se utvrdjuje da je jednačina koju treba da zadovolje periodične funkcije $u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}(\boldsymbol{r})$

$$(H_e + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2)u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}(\boldsymbol{r}) = \epsilon u^{(0)}_{\boldsymbol{k}t}(\boldsymbol{r}).$$

Na ovaj način je svojstveni problem jednoelektronskog hamiltonijana u celom $\mathcal{H}_e(Q)$ pretvoren u familiju svojstvenih problema u $\mathcal{H}^{(0)}_e(Q)$.

Kao i obično, nemoguće je egzaktno rešiti zadatak, pa se pristupa različitim aproksimacijama. Kada su važni oni elektroni koji se skoro slobodno kreću kroz kristal, tj. veoma slabo su vezani za pojedine atome, polazi se od orbitala potpuno delokalizovanih elektrona. U tom slučaju se ukupni potencijal V može zanemariti, pa naknadno perturbativno uračunati. Osnovni elektronski hamiltonijan postaje T_e, a svojstvena jednačina $(\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + \imath\boldsymbol{k})^2 + \epsilon)u^{(0)}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = 0$. Periodična rešenja ove jednačine su $u^{(0)}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{r}) = Ce^{\imath\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}}$ (C je konstanta normiranja), za svojstvenu vrednost $\epsilon_{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})^2$, gde je $\boldsymbol{K}$ vektor inverzne rešetke. Cela svojstvena funkcija je $\langle\ \boldsymbol{r}|\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ \rangle = Ce^{\imath(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{r}}$. Ovo se moglo očekivati, jer je reč o slobodnom elektronu (kristalno polje je zanemareno), sa svojstvenim ravnim talasima; jedina veza sa kristalom je klasifikacija ravnih talasa po vektorima Briluenove zone. Karakteristična slika energijskih zona (po jedna za svako $\boldsymbol{K}$) se dobija tako što se parabola $E(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2$ slobodne čestice periodično (sa periodima jednakim vektorima inverzne rešetke) vraća u Briluenovu zonu.

Nivoi $\epsilon_{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{k})$ su degenerisani (ista energija za isto $|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}|$), što znači da se popravke energije dobijaju rešavanjem svojstvenog problema matrice $\langle\ \boldsymbol{k}'\boldsymbol{K}'\ |V|\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ \rangle$ (indeksi idu po skupu vektora $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ iste dužine). Invarijantnost potencijala interakcije elektrona sa rešetkom pri grupnim transformacijama tada se manifestuje kroz perturbativni metod. Zbog jednostavnosti, posmatraće se jednodimenzionalna rešetka (uopštenje, iako potpuno jednostavno za shvatanje, nije lako precizno napisati). U tom slučaju su degenerisani nivoi $\epsilon_{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{k})$ i $\epsilon_{-\boldsymbol{K}}(-\boldsymbol{k})$. Odgovarajuća matrica je $\begin{pmatrix} \langle\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ |\ V\ |\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ \rangle & \langle\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ |\ V\ |\ -\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}\ \rangle \\ \langle\ -\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}\ |\ V\ |\ \boldsymbol{k}\boldsymbol{K}\ \rangle & \langle\ -\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}\ |\ V\ |\ -\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}\ \rangle \end{pmatrix}$. Dijagonalni elementi su medjusobno jednaki, i predstavljaju srednju vrednost potencijala. Sve dok $\boldsymbol{k}$ nije ekvivalentno sa $-\boldsymbol{k}$, nedijagonalni elementi su jednaki 0, jer su takvi Klebš-Gordanovi koeficijenti u Vigner-Ekartovom teoremu. To znači da dolazi do pomeranja cele zone za srednju vrednost potencijala. No, u posebnim položajima, kada je $\boldsymbol{k} = 0$ ili $\boldsymbol{k} = \frac{\pi}{a}$, i ekvivalentno sa $-\boldsymbol{k}$, vandijagonalni elementi ne nestaju, te dolazi do cepanja (§ 5.2) energijskog nivoa u tim tačkama spajanja ($\boldsymbol{k} = 0$ i na krajevima Briluenove zone). Ipak, ako T nije ukupna simetrija kristala, već je samo podgrupa neke prostorne grupe, $\boldsymbol{k}$ i $-\boldsymbol{k}$ mogu pripadati istoj višedimenzionalnoj reprezentaciji (predznaci $+$ i $-$ preuzimaju ulogu indeksa m u opštoj formi standardnog bazisa $\mid \mu t_\mu m \rangle$), pa se opet anuliraju, i ne dolazi do cepanja.

Prema tome, u opštem slučaju se nivoi u centru i na krajevima Briluenove zone razmiču, čime se stvara zona zabranjena za elektrone. U slici u kojoj elektroni redom popunjavaju dozvoljene energijske nivoe, postaje jasno da se može dogoditi da se popune svi nivoi ispod neke zabranjene zone (tj. Fermijev nivo je neposredno ispod zabranjene zone). Da bi se elektron pobudio, potrebno je da preskoči zabranjenu zonu, i kristal je dielektrik. Ukoliko je Fermijev nivo unutar dozvoljene zone, elektroni se lako pobudjuju, i kristal pokazuje metalna svojstva.

Metod aproksimativnog opisa jako vezanih elektrona (unutrašnje ljuske) potpuno je ekvivalentan onome opisanom kod molekula, osim što se primenjuje grupa T, i klasifikacija vrši po njenim ireducibilnim reprezentacijama, što ponovo dovodi do Blohovih funkcija $u^{(0)}_{\boldsymbol{k},t}(\boldsymbol{r})$. No, za razliku od slučaja slobodnih elektrona, kada Furijeov razvoj funkcije $u^{(0)}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{r})$, po vektorima rešetke (§ 2.3.1), očigledno sadrži samo jedan sabirak, u ovoj aproksimaciji će se pojaviti niz sabiraka. Jednom odredjene, ove funkcije obrazuju potprostor u $\mathcal{H}^{(0)}$. *Ortogonalizovani ravni talasi*, nastali oduzimanjem projekcije ravnih talasa na ovaj potprostor, a priori su bolja početna aproksimacija za slabo vezane elektrone nego sami ravni talasi.

Glava 6

ZADACI

6.1 Opšti principi

Zadatak 1 *U prostoru $L^2(\mathbb{R}^3)$ je* koordinatna reprezentacija *podgrupe G Euklidove grupe data sa $D(g)f(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} f(g^{-1}\boldsymbol{x})$. Dokazati da je $D(G)$ reprezentacija grupe G. Naći operatore kojima su predstavljene rotacije i translacije. Isto za Poincare-ovu grupu u $\mathbb{R}^4$.*

$D(g)D(g')f(\boldsymbol{x}) = D(g)f({g'}^{-1}\boldsymbol{x}) = f({g'}^{-1}g^{-1}\boldsymbol{x}) = f((gg')^{-1}\boldsymbol{x}) = D(gg')f(\boldsymbol{x})$. Euklidove transformacije su definisane sa $(\ R \mid \boldsymbol{a}\ )\boldsymbol{x} = R\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$.

Za translacije za a duž x-ose je $D(I|a\boldsymbol{e}_1)f(\boldsymbol{x}) = f(x_1 - a, x_2, x_3)$, pa je reprezent njihovog generatora $D(p_1)f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(x_1-a,x_2,x_3)}{\partial a}|_{a=0} = -\frac{\partial}{\partial x_1}f(\boldsymbol{x})$. Slično je i $D(p_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i}$, pa je $D(I|a\boldsymbol{e}_i) = e^{-a\frac{\partial}{\partial x_i}}$, i $D(I|\boldsymbol{a}) = e^{-\sum_i a_i \frac{\partial}{\partial x_i}}$.

Za rotacije je $D(R_{\phi\boldsymbol{e}_3}|0)f(\boldsymbol{x}) = f(\cos(\phi)x_1 + \sin(\phi)x_2, -\sin(\phi)x_1 + \cos(\phi)x_2, x_3)$. Dejstvo generatora je $D(l_3)f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial}{\partial\phi}f(\cos(\phi)x_1 + \sin(\phi)x_2, -\sin(\phi)x_1 + \cos(\phi)x_2, x_3)|_{\phi=0}$, tj. $D(l_3) = -(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1})$, te je $D(R_{\phi\boldsymbol{e}_3}|0) = e^{-(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1})\phi}$. Slično se nalazi i za ostale generatore.

Na isti način se u $\mathbb{R}^4$ nalazi reprezentacija Poincare-ove grupe.

Zadatak 2 *Ako se grupa simetrije sistema reprezentuje nekomutirajućim skupom operatora u $\mathcal{H}$, pokazati da postoje degenerisana stacionarna stanja.*

Neka su $D(g) = e^{\imath A}$ i $D(g') = e^{\imath A'}$ dva nekomutirajuća operatora reprezentacije, tj. A i A' su nekomutirajući hermitski operatori (reprezentacija je unitarna) koji su, zbog $[A, H] = [A', H] = 0$ integrali kretanja. Ako bi sve svojstvene vrednosti H bile nedegenerisane, njegov svojstveni bazis bi bio odredjen do na brojne konstante. Zbog komutiranja sa A i A' ovo bi bio i njihov svojstveni bazis, pa bi ovi operatori medjusobno komutirali, nasuprot polaznoj pretpostavci.

Zadatak 3 *Molekul A_4 se sastoji od četiri jednaka atoma postavljena u temena kvadrata (slika 6.1). Svakom atomu je pridružen jedan vektor bazisa prostora $\mathbf{R}^4$. Operatori koji taj bazis permutuju onako kao što geometrijske simetrije molekula permutuju atome, čine* permutacionu reprezentaciju molekula*. W je fizička veličina takva da matrični element W_{ij} njenog reprezenta* *u* $\mathbb{R}^4$ *zavisi samo od rastojanja atoma* i *i* j*. Odrediti svojstvene vrednosti i vektore operatora* W (Jun 1993.)

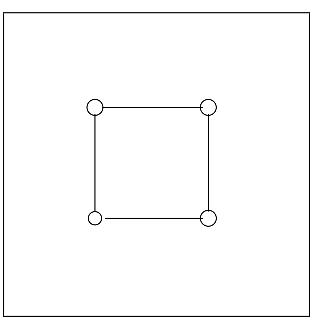
Za grupu simetrije sistema ovog molekula će biti uzeta grupa $\boldsymbol{C}_{4v}$ (to je samo podgrupa grupe svih geometrijskih simetrija $\boldsymbol{D}_{4h}$). W je četvorodimenzionalna matrica, čiji matriqni elementi zavise samo od rastojanja medju atomima, te su npr. njeni elementi W_{11} i W_{22} jednaki. Tako se nalazi da je najopštiji oblik ove matrice

$$W = \begin{pmatrix} a & b & c & b \\ b & a & b & c \\ c & b & a & b \\ b & c & b & a \end{pmatrix}.$$

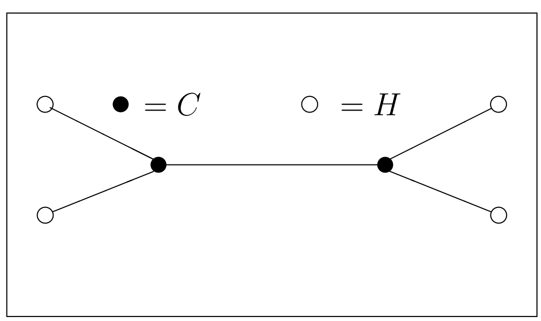
Direktno rešavanje svojstvenog problema ove matrice je prekomplikovan zadatak, no korišćenje simetrije ga znatno pojednostavljuje. Generatori grupe $\boldsymbol{C}_{4v}$ su reprezentovani matricama

$$D(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ova reprezentacija je reducibilna i, pomoću karaktera se pokazuje da je $D(C_{4v}) = A_0(C_{4v}) \oplus B_2(C_{4v}) \oplus E(C_{4v})$. Odgovarajući grupni projektori imaju zato jednodimenzionalne oblasti likova, i standardni bazis je jednoznačno odredjen (u fizičkom smislu jednoznačnosti): $\mid A_0 11 \rangle = \frac{1}{2}(1,1,1,1)^T$, $\mid B_2 11 \rangle = \frac{1}{2}(1,-1,1,-1)^T$, $\mid E11 \rangle = \frac{1}{2}(1,-\imath,-1,\imath)^T$, $\mid E12 \rangle = \frac{1}{2}(1,\imath,-1,-\imath)^T$. Oqigledno je da W komutira sa reprezentacijom, te se $D(\boldsymbol{C}_{4v})$ redukuje u svojstvenim potprostorima W, i postoji standardni bazis koji je svojstven za W. Pri tome, zbog uočene jednoznačnosti, to mora biti upravo nadjeni bazis, te preostaje samo da se delovanjem na njegove vektore operatorom W odrede svojstvene vrednosti: $w_{A_0 1} = a + c + 2b$, $w_{B_2 1} = a + c - 2b$, $w_{E1} = a - c$.



Slika 6.1: Molekul A_4.



Slika 6.2: Molekul C_2H_4.

Zadatak 4 *Molekul etilena* C_2H_4 *(slika 6.2) ima geometrijsku simetriju* $\boldsymbol{D}_{2h}$*. U prostoru* $\mathbb{R}^6$ *je jedan bazis pridružen atomima molekula, a matrični elementi operatora* W *zavise samo od rastojanja medju atomima. Rešiti svojstveni problem* W*. Uraditi isti zadatak ako su bazisni vektori aksijalni.*

Najopštiji oblik operatora W je

$$W = \begin{pmatrix} a & c & d & e & e & d \\ c & a & e & d & d & e \\ d & e & b & h & g & f \\ e & d & h & b & f & g \\ e & d & g & f & b & h \\ d & e & f & g & h & b \end{pmatrix}.$$

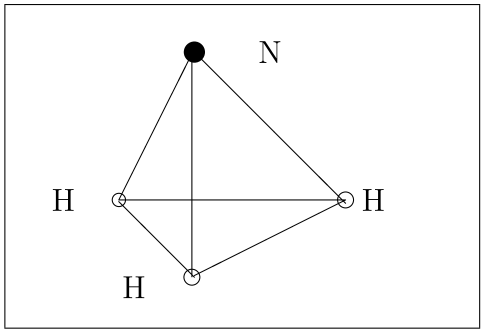
Dimenzija reprezentacije $D(\boldsymbol{D}_{2h})$, dobijene na način opisan u prethodnom zadatku je 6. Pokazuje se da se razlaže u obliku $D = 2A_0^+ + B_0^+ + 2A_1^+ + B_1^+$. Za reprezentacije tipa B, standardni bazis je jednoznačno odredjen i metod grupnih projektora daje $\mid B_0^+ 11 \rangle = \frac{1}{2}(0,0,1,-1,1,-1)^T$ i $\mid B_1^+ 11 \rangle = \frac{1}{2}(0,0,1,1,-1,-1)^T$. Za reprezentacije tipa A problem je nešto složeniji, jer se javljaju dva puta, tako da svaki standardni bazis ne mora biti i svojstveni za W, te se mora rešiti svojstveni problem u $\mathcal{H}_1^{(\mu)}$. Za prvu reprezentaciju se nalazi

$$P^{(A_0^+)} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Vidi se da vektori $\mid 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0,0,0,0)^T$ i $\mid 2 \rangle = \frac{1}{2}(0,0,1,1,1,1)^T$ čine bazis za $\mathcal{H}_1^{(A_0^+)}$. Kako se W redukuje u ovom potprostoru, može se naći dvodimenzionalna matrica $W^{(A_0^+)}$ koja ga reprezentuje u navedenom bazisu. Direktno iz osnovne formule reprezentovanja $W\mid i \rangle = \sum_{j=1}^{2} W_{ji}^{(A_0^+)}\mid j \rangle$, nalazi se $W^{(A_0^+)} = \begin{pmatrix} a+c & \sqrt{2}(d+e) \\ \sqrt{2}(d+e) & b+f+g+h \end{pmatrix}$. Sa druge strane, treba se podsetiti da je najopštiji oblik hermitskog dvodimenzionalnog operatora $H = a_0 I + a\sum_{i=1}^{3} a_i\sigma_i$ (Pauli-jeve matrice), gde su a_i komponente normiranog realnog vektora, a a i a_0 su proizvoljni realni brojevi. Za ovako napisan hermitski operator važi da su mu svojstvene vrednosti $E_\pm = a_0 \pm a$, a odgovarajući svojstveni vektori $\mid \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1\pm a_3)}}(1 \pm a_3, \pm a_1 \mp \imath a_2)^T$. Koristeći ove relacije lako se nalaze svojstvene vrednosti i vektori za $W^{(A_0^+)}$, a time i standardni svojstveni bazis u celom prostoru (ponavljanjem procedure za A_1^+).

Zadatak 5 *Hamiltonijan nekog podsistema u molekulu amonijaka NH_3 sa slike 6.3 je predstavljen matricom 4×4, čiji element H_{ij} odgovara inerakciji atoma i i j. Odrediti energijske nivoe i standardna stacionarna stanja (Februar 1994.).*

Zadatak 6 *Neka je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ prostor stanja fizičkog sistema sa grupom simetrije G, pri čemu u $\mathcal{H}_1$ grupa deluje identičnim preslikavanjima, a u $\mathcal{H}_2$ reprezentacijom $d(G)$. Odrediti oblik standardnog stacionarnog bazisa.*



Slika 6.3: Molekul NH_3.

Ako je $d(G) = \oplus_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$, jasno je da je reprezentacija u celom prostoru $D(G) = I(G) \otimes d(G) = |d_1| a_\mu D^{(\mu)}(G)$, a operatori grupe su $P^{(\mu)}_{ij} = \frac{n_\mu}{|G|} \sum_g d^{(\mu)*}_{ij}(g) I \otimes d(g)$. Odmah se vidi da su ireducibilni potprostori višestruki ($d_1 a_\mu$-struki), i pri tome direktni proizvodi: $\mathcal{H}^{(\mu)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}^{(\mu)}_2$. Svojstveni problem hamiltonijana se redukuje u $\mathcal{H}^{(\mu)}_1 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}^{(\mu)}_{2,1}$, te njegov standardni stacionarni bazis ima oblik $\{|\ \mu t_\mu n1\ \rangle | t_\mu = 1, \ldots, a_\mu, n = 1, \ldots, d_1\}$, uz $H|\ \mu t_\mu 1\ \rangle = E_{\mu t_\mu n}|\ \mu t_\mu n1\ \rangle$. Ovi vektori u opštem slučaju ne moraju biti nekorelisani, no ako je to slučaj, tj. $|\ \mu t_\mu n1\ \rangle = |\ n\ \rangle |\ \mu t_\mu 1\ \rangle$, vidi se iz oblika grupnih operatora da isto važi i za sve ostale vektore, $|\ \mu t_\mu nm\ \rangle = |\ n\ \rangle |\ \mu t_\mu m\ \rangle$. To je ispunjeno (tzv. teorem o separaciji varijabli) npr. za hamiltonijane koji su sami direktni proizvodi operatora u faktor-prostorima, ili uvek kada je $a_\mu = 1$.

Zadatak 7 *Koristeći prethodni zadatak odrediti standardni stacionarni bazis za sferno simetrični hamiltonijana u prostoru $L^2(\mathbb{R}^3)$.*

Kako je $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(0, \infty) \otimes L^2(S^2)$, a $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ u prvom (radijalnom) faktoru deluje trivijalno, a u drugom reprezentacijom $d(\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})) = \sum_{l=0}^{\infty} D^{(l)}(\mathrm{SO}(3, \mathbb{R}))$, ispunjeni su uslovi prethodnog zadatka, a i uslov nekorelisanosti. Dobijaju se standardni vektori $|\ n\ \rangle |\ lm\ \rangle$, gde su $|\ lm\ \rangle$ sferni harmonici $Y^l_m(S^2)$.

Zadatak 8 *Grupa $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ rotacija oko z-ose je podgrupa grupe svih rotacija $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$. Odrediti relacije kompatibilnosti.*

Ireducibilne reprezentacije grupe $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ su karakterisane maksimalnom težinom $l = 0, 1, \ldots$, dok su za Abel-ovu grupu $\mathrm{SO}(2, \mathbb{R})$ ireducibilne reprezentacije $A_m(R_\phi) = e^{\imath m\phi}$, $m = 0, \pm 1, \ldots$ Kao što je poznato iz teorije rotacione grupe, (ili teorije angularnog momenta), za svako l se pojavljuje $2l + 1$ (to je istovremeno i dimenzija reprezentacije $D^{(l)}(\mathrm{SO}(3, \mathbb{R}))$) vrednosti $m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$ te su relacije kompatibilnosti $a^l_m = 1$ za $|m| \leq l$ (inače 0), tj. $D^{(l)}(\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})) \downarrow \mathrm{SO}(2, \mathbb{R}) = \sum_{m=-l}^{l} A_m(\mathrm{SO}(2, \mathbb{R}))$.

Zadatak 9 *Objasniti cepanje elektronskih nivoa atoma vodonika pri popravkama (spin-orbit interakcija, magnetno polje).*

I spinski i orbitalni deo imaju istu grupu simetrije, $G = \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ (podrazumeva se prekrivanje grupom $SU(2)$ zbog konstrukcije reprezentacija), te u $\mathcal{H}_O$ i $\mathcal{H}_S$ deluju reprezentacije $D_O(G)$ i $D_S(G)$.

Dok se ovi "podsistemi" mogu smatrati nezavisnima, ukupni sistem je invarijantan na sve transformacije (g, g') (prvi element deluje u orbitalnom, a drugi u spinskom prostoru odgovarajućim reprezentacijama), tj. na grupu $G\times G$, a u $\mathcal{H}$ se formira reprezentacija $(D_S\otimes D_O)(G\times G)$. Njeni ireducibilni potprostori su proizvodi ireducibilnih potprostora u $\mathcal{H}_L$ i $\mathcal{H}_S$: $\mathcal{H}^{(l,s)} = \mathcal{H}_L^{(l)} \otimes \mathcal{H}_S^{(s)}$ (l i s su neke maksimalne težine ireducibilnih reprezentacija u faktor prostorima). Stoga je simetrijom uzrokovana (minimalna) degeneracija nivoa $(2l+1)(2s+1)$. Standardni bazis je $\mid nlm_l, s = \frac{1}{2}, m_s\ \rangle$ (n je kvantni broj iz orbitalnog prostora) za nivoe E_{nls}.

U slučaju interakcije, ne mogu se više vršiti nezavisne transformacije u faktor prostorima, već se simultano oba prostora transformišu istim elementom grupe. Tako se dobija ponovo grupa G kao "dijagonala" direktnog proizvoda $G\times G$ ($G = \{(g,g)\} < G\times G$). Potprostori $\mathcal{H}^{(l,s)}$ više nisu ireducibilni u odnosu na suženu reprezentaciju $D_L^{(l)} \otimes D_S^{(s)}(G\times G) \downarrow G = \sum_{j=|l-s|}^{l+s} D^{(j)}(G)$, što odgovara cepanju nivoa. Standardni bazis je $\mid nlsjm_j\ \rangle$, za nivoe E_{nlsj}.

Pri perturbaciji jakim magnetnim poljem duž z-ose, grupa simetrije se smanjuje na $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})\times \mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$, te se simetrijska degeneracija ukida; standardni bazis je $\mid nlm_l, sm_s\ \rangle$ za nivoe E_{nlm_l,sm_s}, što znači da dodatne perturbacije ne mogu simetrijski sniziti degeneraciju. Ako je polje slabo (tj. dominantna je spin-orbitalna interakcija, rezultujuća grupa je $\mathrm{SO}(2,\mathbb{R})$, i standardni bazis $\mid nlsjm_j\ \rangle$ odgovara za različite vrednosti m_j različitim nivoima E_{nlsjm_j}.

Zadatak 10 *Pokazati da iz kvantnih postulata (vektori istog pravca opisuju isto stanje i linearna kombinacija vektora stanja je stanje, tj. superpozicija), sledi da su sistemi identičnih podsistema ili simetrični ili antisimetrični pri permutacijama (tj. podsistemi su ili bozoni ili fermioni). Izvesti Pauli-jev princip iz simetrije.*

Fizički sistem sa N identičnih podsistema se opisuje u prostoru $\mathcal{H}^N \stackrel{\text{def}}{=} \underbrace{\mathcal{H}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}}_{N}$, gde je $\mathcal{H}$ prostor stanja podsistema. Ako je $\{\mid j\ \rangle | j = 1,\ldots,\mathrm{dim}\mathcal{H}\}$ bazis u $\mathcal{H}$, jedan (nekorelisani bazis) u $\mathcal{H}^N$ je

$$\{\mid j_1,\ldots,j_N\ \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mid j_1\ \rangle_1 \otimes\cdots\otimes \mid j_N\ \rangle_N | j_s = 1,\ldots,\mathrm{dim}\mathcal{H}; s = 1,\ldots,N\}.$$

U ovom bazisu se definišu operatori grupe S_N: $D(\pi)\mid j_1,\ldots,j_N\ \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mid j_{\pi^{-1}1},\ldots,j_{\pi^{-1}N}\ \rangle$. Tako se dobija reprezentacija $D(S_N)$ u $\mathcal{H}^N$, koja ne mora biti ireducibilna. Prirodni fizički zahtev nerazličivosti permutovanog i nepermutovanog stanja znači da je S_N grupa simetrije stanja, što u kvantnoj mehanici, preko postulata o pridruživanju pravca istom fizičkom stanju, uslovljava da samo vektori $\mid x\ \rangle$ za koje je $D(\pi)\mid x\ \rangle = \alpha(\pi)\mid x\ \rangle$ opisuju fizička stanja. Drugim rečima, fizička stanja pripadaju potprostorima jednodimenzionalnih (automatski ireducibilnih) reprezentacija grupe S_N u $\mathcal{H}^N$. Koeficijenti proporcionalnosti $\alpha(\pi)$ su upravo ove jednodimenzionalne reprezentacije. Dalje, ako se vektori $\mid x\ \rangle$ i $\mid y\ \rangle$, koji zadovoljavaju dobijeni uslov, transformišu po različitim jednodimenzionalnim reprezentacijama $\alpha(S_N)$ i $\beta(S_N)$, njihove linearne kombinacije se ne transformišu po jednodimenzionalnoj reprezentaciji (već po direktnom zbiru $\alpha(S_N)\oplus\beta(S_N)$; npr. $D(\pi)(|\,x\,\rangle+|\,y\,\rangle)=\alpha(\pi)|\,x\,\rangle+\beta(\pi)|\,y\,\rangle)$, tj. ne opisuju stanja. Stoga, da bi bio zadovoljen postulat superpozicije, za prostor stanja se može uzeti (višestruki) ireducibilni potprostor samo jedne jednodimenzionalne reprezentacije. On se dobija delovanjem grupnog projektora te jednodimenzionalne reprezentacije na $\mathcal{H}^N$.

Konačno, znajući da svaka grupa S_N (za $N>1$) ima samo dve jednodimenzionalne (ireducibilne) reprezentacije, simetričnu, $S(\pi)=1$, i antisimetričnu, $A(\pi)=(-1)^\pi$, sledi da je prostor stanja sistema identičnih čestica ili $S\mathcal{H}^N$ ili $A\mathcal{H}^N$; $S=\frac{1}{N!}\sum_\pi D(\pi)$ i $A=\frac{1}{N!}\sum_\pi(-1)^\pi D(\pi)$ su odgovarajući grupni projektori, *simetrizator* i *antisimetrizator*. Bozoni (fermioni) su sistemi kod kojih se vrši simetrizacija (antisimetrizacija).

Ako je $\dim\mathcal{H}=1$, tada je $A\mathcal{H}^N=0$ za svako $N>1$, što se lako proverava na osnovu relacije $\mathrm{Tr}A=\dim A\mathcal{H}$. U opštem slučaju, ako je $|\,x\,\rangle$ proizvoljni vektor iz $\mathcal{H}$, a $\mathcal{H}_x=\mathrm{span}|\,x\,\rangle$, to znači da je potprostor $\mathcal{H}_x^N$ u $\mathcal{H}^N$ dimenzije 0 (za $N>1$), tj. da više fermiona ne može biti u istom stanju. Na isti način se proverava i opštiji iskaz: ukoliko je $N>\dim\mathcal{H}$, važi da je $\mathrm{Tr}A=\dim A\mathcal{H}=0$, tj. ako je jednočestični prostor N dimenzionalan, ima smisla razmatrati najviše N-čestični sistem fermiona.

Zadatak 11 *Odrediti matricu simetrizatora i antisimetrizatora u direktnom proizvodu dva dvodimenzionalna prostora. Isto za dva trodimenzionalna i za tri dvodimenzionalna prostora.*

Kada je reč o dva prostora relevantna je grupa S_2, čiji su elementi identična permutacija e i transpozicija τ. Tako se grupni projektori nalaze kao $S=\frac{1}{2}(D(e)+D(\tau))$ i $A=\frac{1}{2}(D(e)-D(\tau))$.

U slučaju dvodimenzionalnog prostora bazis u $\mathcal{H}$ je $\{|\,1\,\rangle,|\,2\,\rangle\}$, a nekorelisani bazis u $\mathcal{H}^2$ je $\{|\,11\,\rangle,|\,12\,\rangle,|\,21\,\rangle,|\,22\,\rangle\}$. Identična permutacija je reprezentovana stoga jediničnom matricom I_4, dok je zbog

$$\tau:\{|\,11\,\rangle,|\,12\,\rangle,|\,21\,\rangle,|\,22\,\rangle\}\mapsto\{|\,11\,\rangle,|\,21\,\rangle,|\,12\,\rangle,|\,22\,\rangle\},$$

$D(\tau)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$, a $S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2&0&0&0\\0&1&1&0\\0&1&1&0\\0&0&0&2\end{pmatrix}$ i $A=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&1&-1&0\\0&-1&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix}$. Prvi projektor je trodimenzionalan, a drugi jednodimenzionalan. Bazisi u oblastima likova (tj. bozonskom i fermionskom prostoru) su $\{|\,11\,\rangle,\frac{1}{\sqrt{2}}(|\,12\,\rangle+|\,21\,\rangle),|\,22\,\rangle\}$ i $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\,12\,\rangle-|\,21\,\rangle)$, respektivno.

U trodimenzionalnom slučaju se analognom procedurom nalazi

$$S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2&0&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&1&0&0\\0&1&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&2&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&1&0\\0&0&1&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&0&2\end{pmatrix},\quad A=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&-1&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&-1&0&0\\0&-1&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&-1&0\\0&0&-1&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&-1&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}.$$

Bazisi bozonskog i fermionskog prostora su

$$\{|\ 11\ \rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 12\ \rangle + |\ 21\ \rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 13\ \rangle + |\ 31\ \rangle), |\ 22\ \rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 23\ \rangle + |\ 32\ \rangle), |\ 33\ \rangle\},$$

i $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 12\ \rangle - |\ 21\ \rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 13\ \rangle - |\ 31\ \rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|\ 23\ \rangle - |\ 32\ \rangle)\}$, respektivno.

Konačno u trostrukom proizvodu dvodimenzionalnih prostora se nalazi

$$S = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Bazis bozonskog prostora je

$$\{|\ 111\ \rangle, \frac{1}{\sqrt{3}}(|\ 112\ \rangle + |\ 121\ \rangle + |\ 211\ \rangle), \frac{1}{\sqrt{3}}(|\ 122\ \rangle + |\ 212\ \rangle + |\ 221\ \rangle), |\ 222\ \rangle\}.$$

Antisimetrizator je nulti operator, što je pomenuta grupno-teorijska formulacija Pauli-jevog principa.

Zadatak 12 *Neka je u $\mathcal{H}$ grupa G reprezentovana sa $D(G)$. Pokazati da se reprezentacija $D(G)\otimes D(G)$ generisana iz $D(G)$ u $\mathcal{H}^2$ redukuje u $S\mathcal{H}^2$ i $A\mathcal{H}^2$, gde su S i A simetrizator i antisimetrizator grupe S_2 iz prethodnog zadatka. Odrediti karaktere ovih reprezentacija.*

Dovoljno je proveriti da $D(G)\otimes D(G)$ komutira sa S i A. U nekorelisanom bazisu je:

$$S(D(g)\otimes D(g))|\ i_1, i_2\ \rangle = S\sum_{j_1 j_2} d_{j_1 i_1}(g) d_{j_2 i_2}(g)|\ j_1, j_2\ \rangle =$$

$$\sum_{j_1 j_2} d_{j_1 i_1}(g) d_{j_2 i_2}(g)\frac{|\ j_1, j_2\ \rangle + |\ j_2, j_1\ \rangle}{2} = \sum_{j_1 j_2}\frac{d_{j_1 i_1}(g) d_{j_2 i_2}(g) + d_{j_2 i_1}(g) d_{j_1 i_2}(g)}{2}|\ j_1, j_2\ \rangle =$$

$$\frac{1}{2}\sum_{j_1 j_2}(d_{j_1 i_1}(g) d_{j_2 i_2}(g) + d_{j_1 i_2}(g) d_{j_2 i_1}(g))|\ j_1, j_2\ \rangle = (D(g)\otimes D(g))S|\ i_1, i_2\ \rangle.$$

Na isti način se pokazuje i komutiranje sa antisimetrizatorom, odakle sledi da su svojstveni potprostori S i A invarijantni za $D(G)\otimes D(G)$. Odgovarajuće restrikcije $[D^2(G)]$ i $\{D^2(G)\}$ se nazivaju *simetrizovani* i *antisimetrizovani kvadrat reprezentacije* $D(G)$. Procedura se može na očigledan način uopštiti za bilo koji stepen.

Karakter dobijenih reprezentacija se nalazi po definiciji. Već je pokazano da su matrični elementi

$$[D^2(g)]_{j_1 j_2, i_1 i_2} = \frac{1}{2}(d_{j_1 i_1}(g) d_{j_2 i_2}(g) + d_{j_2 i_1}(g) d_{j_1 i_2}(g)),$$

$$\{D^2(g)\}_{j_1j_2,i_1i_2} = \frac{1}{2}(d_{j_1i_1}(g)d_{j_2i_2}(g) - d_{j_2i_1}(g)d_{j_1i_2}(g)),$$

pa je

$$[\chi^2(g)] = \frac{1}{2}((\mathrm{Tr}D(g))^2 + \mathrm{Tr}(D^2(g))) = \frac{1}{2}(\chi^2(g) + \chi(g^2)),$$
$$\{\chi^2(g)\} = \frac{1}{2}((\mathrm{Tr}D(g))^2 - \mathrm{Tr}(D^2(g))) = \frac{1}{2}(\chi^2(g) - \chi(g^2)).$$

Zadatak 13 *Za simetrizovani i antisimetrizovani kvadrat polarno-vektorske reprezentacije grupe* $\boldsymbol{C}_4$ *naći standardni bazis.*

U polarno-vektorskoj reprezentaciji generator grupe $\boldsymbol{C}_4$ reprezentovan je matricom $D^v(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. Tako se nalazi matrica generatora u direktnom kvadratu ove reprezentacije, a korišćenjem simetrizatora i antisimetrizatora iz prethodnih zadataka i generatori u traženim reprezentacijama:

$$D^{v^2}(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$[D^{v^2}(C_4)] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\{D^{v^2}(C_4)\} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Koristeći ove matrice nalazi se razvoj na ireducibilne reprezentacije:

D	e	C_4	C_4^2	C_4^3	Razlaganje
D^v	3	1	-1	1	$A_0 + A_1 + A_{-1}$
D^{v^2}	9	1	1	1	$3A_0 + 2A_1 + 2A_{-1} + 2A_2$
$[D^{v^2}]$	6	0	2	0	$2A_0 + A_1 + A_{-1} + 2A_2$
$\{D^{v^2}\}$	3	1	-1	1	$A_0 + A_1 + A_{-1}$

Nakon odredjivanja grupnih projektora za standardne bazise se nalazi:

$$S\mathcal{H} : \{\mid A_0 1 \,\rangle = \frac{\mid 11 \,\rangle + \mid 22 \,\rangle}{\sqrt{2}}, \mid A_0 2 \,\rangle = \mid 33 \,\rangle,$$

$$\mid A_1 1 \,\rangle = \frac{\mid 13 \,\rangle + \mid 31 \,\rangle - \imath \mid 23 \,\rangle - \imath \mid 32 \,\rangle}{2},$$

$$\mid A_{-1} 1 \,\rangle = \frac{\mid 13 \,\rangle + \mid 31 \,\rangle + \imath \mid 23 \,\rangle + \imath \mid 32 \,\rangle}{2},$$

$$\mid A_2 1 \,\rangle = \frac{\mid 11 \,\rangle - \mid 22 \,\rangle}{\sqrt{2}}, \mid A_2 2 \,\rangle = \frac{\mid 12 \,\rangle + \mid 21 \,\rangle}{\sqrt{2}}\};$$

$$A\mathcal{H} : \{\mid A_0 3 \,\rangle = \frac{\mid 12 \,\rangle - \mid 21 \,\rangle}{\sqrt{2}}, \mid A_1 2 \,\rangle = \frac{\mid 13 \,\rangle - \mid 31 \,\rangle - \imath \mid 23 \,\rangle + \imath \mid 32 \,\rangle}{2},$$

$$\mid A_{-1} 2 \,\rangle = \frac{\mid 13 \,\rangle - \mid 31 \,\rangle + \imath \mid 23 \,\rangle - \imath \mid 32 \,\rangle}{2}\}.$$

Zadatak 14 *Kaže se da je ireducibilna reprezentacija $D^{(\mu)}(G)$*

(i) prve vrste *ako je ekvivalentna nekoj reprezentaciji čije su sve matrice realne;*

(ii) druge vrste*, ako su joj karakteri realni ali nema ekvivalentni realni matrični oblik;*

(iii) treće vrste *ako joj karakter nije realan.*

Važi da je reprezentacija $\Delta^{(\mu)}(G)$ prve (druge, treće) vrste ako i samo ako $\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\chi^{(\mu)}(g^2)$ ima vrednost 1 (-1, 0). Za realnu reprezentaciju $D(G)$ se kaže da je fizički ireducibilna ako se ne može razložiti na realne podreprezentacije.

Odrediti matrice koje se dobijaju dekompleksifikacijom reprezentacija II i III vrste, i pokazati da se tako dobijaju fizički ireducibilne reprezentacije. Pokazati da se u simetrizovanom kvadratu svake fizički ireducibilne reprezentacije jedinična reprezentacija sadrži tačno jedanput.

Ako je u $\mathcal{H}^{(\mu)}$ bazis $\{x\} = \{x_1, \dots, x_n\}$, formiranjem realnih linearnih kombinacija nad bazisom $\{x\}_{\mathbb{R}} = \{x_1, \dots, x_n, \imath x_1, \dots, \imath x_n\}$ se dobija dekompleksifikovani prostor $\mathcal{H}_R^{(\mu)}$, koji je bijektivno povezan sa početnim. Stoga, svaki operator A iz $\mathcal{H}^{(\mu)}$ odredjuje operator $A_{\mathbb{R}}$ u $\mathcal{H}_{\mathbb{R}}^{(\mu)}$, a iz formule reprezentovanja $Ax_i = \sum_j A_{ji}x_j$ se odmah nalazi matrica operatora $A_{\mathbb{R}}$ u bazisu $\{x\}_{\mathbb{R}}$: $A_{\mathbb{R}} = \begin{pmatrix} \Re(A) & -\Im(A) \\ \Im(A) & \Re(A) \end{pmatrix}$. Lako se proverava da se dekompleksifikacijom reprezentacije grupe, ponovo dobija reprezentacija, čiji su karakteri dvostruki realni delovi karaktera početne reprezentacije. Odavde sledi da je $D^{(\mu)}_{\mathbb{R}}(G)$ realna reprezentacija, koja se nad kompleksnim poljem može razložiti u formi $D^{(\mu)}_{\mathbb{R}}(G) = D^{(\mu)}(G) \oplus D^{(\mu)^*}(G)$. Za reprezentaciju prve vrste to znači da je $D^{(\mu)}_{\mathbb{R}}(G)$ reducibilna i nad realnim poljem (jer se razlaže na dve jednake realne reprezentacije), a inače je dekompleksifikovana reprezentacija fizički ireducibilna. Do istog rezultata se stiže i transformacijom sličnosti: za $S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{\imath\alpha}I_n & -\imath e^{\imath\beta}I_n \\ -\imath e^{\imath\alpha}I_n & e^{\imath\beta}I_n \end{pmatrix}$, nalazi se $S^{-1}D^{(\mu)}_{\mathbb{R}}(g)S = \begin{pmatrix} D^{(\mu)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(\mu)^*}(g) \end{pmatrix}$.

Broj pojavljivanja jedinične reprezentacije u simetrizovanom kvadratu reprezentacije $D(G)$ jednak je $a_I = \frac{1}{2|G|}\sum_g\{\chi^2(g) + \chi(g^2)\}$. Ako je D reprezentacija prve vrste, samim tim je fizički ireducibilna, što znači da i prvi i drugi član sumiranjem daju $|G|$ i rezultat je 1. Za fizički ireducibilnu reprezentaciju nastalu dekompleksifikacijom ireducibilne reprezentacije $\chi^{(\mu)}$ druge ili treće vrste (karakter joj je $\chi^{(\mu)}_{\mathbb{R}}(g) = \chi^{(\mu)}(g) + \chi^{(\mu)^*}(g)$) nalazi se

$$a_I = \frac{1}{2|G|}\sum_g\{\chi^{(\mu)^2}(g) + \chi^{(\mu*)^2}(g) + 2\chi^{(\mu)}(g)\chi^{(\mu)^*}(g) + \chi^{(\mu)}(g^2) + \chi^{(\mu)^*}(g^2)\}.$$

Kod reprezentacija druge vrste, karakter je realan, tako da prva tri člana daju sumiranjem $4|G|$, a zahvaljujući testu iz uslova zadatka, druga dva člana $-2|G|$, tako da je rezultat opet 1. U slučaju reprezentacije treće vrste, samo treći član daje nenulti doprinos, sa istim konačnim rezultatom.

Zadatak 15 *Pokazati da je potprostor funkcija nad $\mathbb{R}^3$ obrazovan kvadratnim monomima koordinata invarijantan na delovanje grupe $\boldsymbol{C}_{4v}$, i da je dejstvo grupe u stvari simetrizovani kvadrat polarno vektorske reprezentacije. Naći standardni bazis.*

Bazis ovog prostora očigledno čine monomi $\psi_1 = x^2$, $\psi_2 = y^2$, $\psi_3 = z^2$, $\psi_4 = yz$, $\psi_5 = zx$, $\psi_6 = xy$. Znajući da je $C_4 : (x, y, z) \mapsto (y, -x, z)$ i $\sigma_x : (x, y, z) \mapsto (x, -y, z)$, nalazi se da je reprezentacija u pomenutom prostoru definisana generatorima:

$$D(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Poredjenjem sa rezultatima prethodnog zadatka, vidi se, nakon odredjivanja karaktera svih elemenata da je reč o simetrizovanom kvadratu polarno vektorske reprezentacije. Ovo je zapravo posledica činjenice da u $\mathbb{R}^3$ deluje D^v, i da koordinate komutiraju.

D	e	C_4	C_4^2	C_4^3	σ_x	$\sigma_x C_4$	$\sigma_x C_4^2$	$\sigma_x C_4^3$	Razlaganje
D^v	3	1	-1	1	1	1	1	1	$A_0 + E_1$
D	6	0	2	0	2	2	2	2	$2A_0 + A_2 + B_2 + E_1$

Za grupne projektore se nalazi (reprezentacija E je uzeta u formi koja se dobija indukcijom sa $\boldsymbol{C}_4$):

$$P^{(A_0)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{(A_2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P^{(B_2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(E)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{\imath}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\imath}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P_2^{(E)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\imath}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\imath}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

te je standardni bazis $|\, A_0 1\,\rangle \sim x^2+y^2$, $|\, A_0 2\,\rangle \sim z^2$, $|\, A_2\,\rangle \sim x^2-y^2$, $|\, B_2\,\rangle \sim xy$, $|\, E1\,\rangle \sim yz+\imath zx$, $|\, E2\,\rangle \sim -yz+\imath zx$.

Zadatak 16 *Pokazati da je potprostor obrazovan kvadratnim monomima koordinata u $\mathbb{R}^3$ invarijantan na delovanje grupe $\boldsymbol{C}_\infty$. U bazisu iz prethodnog zadatka odrediti matrice reprezentacije i grupnih projektora. Naći standardni bazis.*

Kako je $R^{-1}_{\varphi e_3} : (x,y,z) \mapsto (x\cos(\varphi)+y\sin(\varphi), -x\sin(\varphi)+y\cos(\varphi), z)$, nalazi se:

$$D(R^{-1}_{\varphi e_3}) = \begin{pmatrix} \cos^2(\varphi) & \sin^2(\varphi) & 0 & 0 & 0 & -\sin(\varphi)\cos(\varphi) \\ \sin^2(\varphi) & \cos^2(\varphi) & 0 & 0 & 0 & \sin(\varphi)\cos(\varphi) \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 2\sin(\varphi)\cos(\varphi) & -2\sin(\varphi)\cos(\varphi) & 0 & 0 & 0 & \cos^2(\varphi)-\sin^2(\varphi) \end{pmatrix}.$$

Karakter je $\chi(\varphi) = 2 + e^{\imath\varphi} + e^{-\imath\varphi} + e^{2\imath\varphi} + e^{-2\imath\varphi}$ i, znajući da su ireducibilne reprezentacije definisane sa $A_m(\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\imath m\varphi}$, reprezentacija se razlaže u formi $D = 2A_0 + A_1 + A_{-1} + A_2 + A_{-2}$. Odgovarajući grupni projektori su

$$P^{(A_0)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{(A_1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{\imath}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\imath}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P^{(A_{-1})} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{\imath}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\imath}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{(A_2)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{\imath}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\imath}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\imath & \imath & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$P^{(A_{-2})} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\imath}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{\imath}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \imath & -\imath & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

te je standardni bazis: $\mid A_0 1 \rangle \sim x^2 + y^2$, $\mid A_0 2 \rangle \sim z^2$, $\mid A_1 \rangle \sim yz + \imath zx$, $\mid A_{-1} \rangle \sim -yz + \imath zx$, $\mid A_2 \rangle \sim x^2 - y^2 - 2\imath xy$, $\mid A_{-2} \rangle \sim x^2 - y^2 + 2\imath xy$.

Zadatak 17 *Odrediti najopštiji potencijal oblika polinoma drugog stepena, tj. sve moguće vrednosti parametra* α *u* $V = \alpha + \sum_i \alpha_i x_i + \sum_{ij} \alpha_{ij} x_i x_j$, *(*$x_i$ *su Dekart-ove koordinate) za jednočestični sistem sa simetrijom* $\boldsymbol{C}_{4v}$. *(Novembar 1993.)*

Zadatak 18 *U nekom razmatranju se potencijal dvodimenzionalnog sistema aproksimira polinomom trećeg reda po koordinatama položaja sistema. Ako je grupa simetrije sistema* $\boldsymbol{C}_4$, *odrediti najopštiji oblik ovog potencijala (Jun-II, 1994.).*

Zadatak 19 *Napisati operator iz* $\mathbb{R}^3$ *kao linearnu kombinaciju standardnih tenzora grupe* $\boldsymbol{C}_4$ *koja u* $\mathbb{R}^3$ *deluje polarno-vektorskom reprezentacijom. Kakav je matrični oblik fizičke veličine koja karakteriše sistem, a povezuje dve polarno vektorske veličine (npr. tenzor provodnosti) u stanju sa ovom simetrijom? Kakvi su odgovori ako se zahteva simetričnost ili antisimetričnost matrice?*

Iz prethodnih zadataka se vidi da je $D^v(\boldsymbol{C}_4)$ realna reprezentacija, te je reprezentacija u operatorskom prostoru definisana sa $D^v(g) A D^{v^{-1}}(g)$, ekvivalentna sa $D^v \otimes D^{v^{T^{-1}}} = D^{v^2}$. Tako se mogu koristiti rezultati prethodnih zadataka. Pri tome bazisni vektor $\mid i \rangle\langle j \mid$ odgovara u ranijim oznakama vektoru $\mid ij \rangle$. Sledi da se proizvoljni operator T može napisati u obliku:

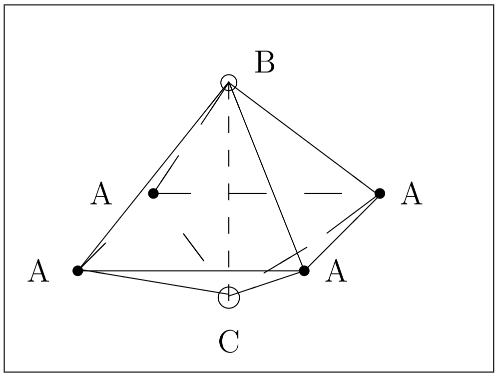
$$T = aT^{01} + bT^{02} + cT^{11} + dT^{-11} + eT^{21} + fT^{22} + \alpha T^{03} + \beta T^{12} + \gamma T^{-12}.$$

U matričnom obliku se dobija:

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(a+e) & \frac{1}{\sqrt{2}}(f+\alpha) & \frac{1}{2}(c+d+\beta+\gamma) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(f-\alpha) & \frac{1}{\sqrt{2}}(a-e) & \frac{i}{2}(c-d+\beta-\gamma) \\ \frac{1}{2}(c+d-\beta-\gamma) & \frac{i}{2}(c-d-\beta+\gamma) & b \end{pmatrix}.$$

Karakteristične fizičke veličine u stanju odredjene simetrije moraju biti skalari grupe simetrije stanja (inače sistem nema tu simetriju; npr. ako se promeni dipolni moment ili provodnost pri nekoj transformaciji, transformacija nije simetrija stanja, jer očigledno menja stanje). Stoga se transformišu po jediničnoj reprezentaciji. U opštem slučaju to znači da su svi koeficijenti osim a, b i α jednaki nuli. Kod simetričnih operatora je i $\alpha = 0$, a kod antisimetričnih su nule svi osim α.

Zadatak 20 *Molekul sa slike 6.4, sa grupom simetrije $\mathbf{C}_{4v}$ je elementarna ćelija nekog kristala. Odrediti može li takav kristal biti makroskopski feroelektrik ili feromagnetik, i ako može, u kom smeru dozvoljava spontano električno, odnosno magnetno polje (April 1994.).*



Slika 6.4: Molekul A_4BC.

Zadatak 21 *Vektor $\boldsymbol{r}$, koji spaja dve tačke u kristalu, se nakon zagrevanja kristala za 1K promenio za vektor $\mathbf{p}$. Smatrajući da postoji veza $\mathbf{p} = A\boldsymbol{r}$, odrediti oblik veličine A za kristal čija je izogonalna simetrija $\boldsymbol{C}_{4h}$* (Februar 1993.).

Zadatak 22 *Za grupu $\boldsymbol{C}_{4v}$ odrediti standardni bazis prostora operatora u ravni xy.*

U ovom prostoru, $\boldsymbol{C}_{4v}$ deluje reprezentacijom $D \sim E_1$ oblika ($\varphi = \frac{2\pi}{4}$, σ_x refleksija u ravni xz) $D(C_4^k) = \begin{pmatrix} \cos(k\varphi) & -\sin(k\varphi) \\ \sin(k\varphi) & \cos(k\varphi) \end{pmatrix}$, $D(\sigma_x C_4^k) = \begin{pmatrix} \cos(k\varphi) & -\sin(k\varphi) \\ -\sin(k\varphi) & -\cos(k\varphi) \end{pmatrix}$. Kako je reprezentacija realna, u prostoru operatora indukuje reprezentaciju ekvivalentnu sa E_1^2. Koristeći tablicu karaktera nalaze se ireducibilne komponente ove reprezentacije:

D	e	C_4	C_4^2	C_4^3	σ_x	$\sigma_x C_4$	$\sigma_x C_4^2$	$\sigma_x C_4^3$	Razlaganje
E_1^2	4	0	4	0	0	0	0	0	$A_0 + B_0 + A_2 + B_2$
$[E_1^2]$	3	-1	3	-1	1	1	1	1	$A_0 + A_2 + B_2$
$\{E_1^2\}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	B_0

Odavde je proizvoljni operator A linearna kombinacija standardnih tenzora: $A = aA^{(A_0)} + bA^{(B_0)} + cA^{(A_2)} + dA^{(B_2)}$. Da bi se oni odredili koristi se metod grupnih projektora. U ovom slučaju je grupni projektor definisan dejstvom na proizvoljni operator $P_i^{(\mu)} A \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_\mu}{|G|} \sum_g d_{i1}^{(\mu)} D(g) A D(g^{-1})$. Ako je $A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$, nalazi se (donji indeks projektora je nepotreban, jer su sve reprezentacije jednodimenzionalne): $P^{(A_0)}A = \begin{pmatrix} \alpha+\delta & 0 \\ 0 & \alpha+\delta \end{pmatrix}$, $P^{(B_0)}A = \begin{pmatrix} 0 & \beta-\gamma \\ \gamma-\beta & 0 \end{pmatrix}$, $P^{(A_2)}A = \begin{pmatrix} \alpha-\delta & 0 \\ 0 & \delta-\alpha \end{pmatrix}$, $P^{(B_2)}A = \begin{pmatrix} 0 & \beta+\gamma \\ \beta+\gamma & 0 \end{pmatrix}$. Tako se za bazisne vektore (normirane u odnosu na skalarni proizvod $(A,B) = \mathrm{Tr}(A^\dagger B)$) dobija: $A^{(A_0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $A^{(B_0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, $A^{(A_2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $A^{(B_2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, odakle je u početnom razvoju $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\delta)$, $b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta-\gamma)$, $c = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\delta)$, $d = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta+\gamma)$. Vidi se da su operatori simetrične reprezentacije simetriňe matrice, i isto za antisimetrične. Opšti oblik operatora koji opisuje osobinu fizičkog sistema simetričnog u odnosu na $\boldsymbol{C}_{4v}$ je $aA^{(A_0)}$.

Zadatak 23 *Odrediti selekciona pravila za sistem sa simetrijom $\boldsymbol{C}_{5v}$ pri perturbaciji koja je ireducibilni tenzor reprezentacije E_2. Nacrtati skicu mogućih prelaza* (April 1993).

6.2 Geometrijske simetrije

Zadatak 24 *Odrediti ireducibilne reprezentacije grupa $\boldsymbol{L}4 = \boldsymbol{T}_1 \otimes \boldsymbol{C}_4$, $\boldsymbol{L}4/m = \boldsymbol{T}_1 \wedge \boldsymbol{C}_{4h}$, $\boldsymbol{L}4cc = \boldsymbol{L}4 + (\sigma_v \mid \frac{1}{2})\boldsymbol{L}4$.*

a) Ireducibilne reprezentacije grupe $\boldsymbol{T}$ su poznate: ${}_kA(\ I\ |t\ ) = e^{-\imath kta}$, za $t = 0, \pm 1, \ldots$ i $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, a za grupu $\boldsymbol{C}_4$ su $A_m(C_4^s) = e^{\imath m s \alpha}$, gde je $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $m = -1, 0, 1, 2$ i $s = 0, 1, 2, 3$. Tako su sve reprezentacije grupe $\boldsymbol{L}4$ date sa ${}_kA_m(C_4^s \mid t) = e^{\imath m s \alpha - \imath kta}$.

b) Elementi grupe $\boldsymbol{C}_4$ komutiraju sa translacijama, te ulaze u malu grupu svake reprezentacije. Za horizontalne refleksije važi $(\sigma_h \mid 0)(\ I\ |t\ )(\sigma_h \mid 0) = (\ I\ |-t\ )$, te je ${}_kA_{(\sigma_h|0)}(\boldsymbol{T}) = {}_{-k}A(\boldsymbol{T})$. Dakle, zvezdu k čine $\pm k$. Za reprezentaciju ${}_0A(\boldsymbol{T})$ mala grupa je cela grupa, te su ireducibilne reprezentacije isto što i dozvoljene, koje se dobijaju kao direktni proizvodi:

$$ {}_0A_m^{\pm}(\sigma_h^i C_4^s \mid t) = (\pm)^i e^{\imath m s \alpha}, \quad i = 1, 2;\ m = -1, 0, 1, 2;\ s = 0, 1, 2, 3;\ t = 0, \pm 1, ... $$

Slično se iz ${}_{\frac{\pi}{a}}A(\boldsymbol{T}) = {}_{-\frac{\pi}{a}}A(\boldsymbol{T})$ nalazi:

$$ {}_{\frac{\pi}{a}}A_m^{\pm}(\sigma_h^i C_4^s \mid t) = (\pm)^{i+t} e^{\imath m s \alpha}, \quad i = 1, 2;\ m = -1, 0, 1, 2;\ s = 0, 1, 2, 3;\ t = 0, \pm 1, ... $$

Mala grupa svih ostalih orbita je $\boldsymbol{L}4$, i njene reprezentacije su već poznate. Stoga je preostalo da se na ove reprezentacije primeni indukcija do $\boldsymbol{L}4/m$. Rezultat je

$$ {}_kE_m(\sigma_h^i C_4^s \mid t) = e^{\imath m s \alpha} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^i \begin{pmatrix} e^{-\imath kta} & 0 \\ 0 & e^{\imath kta} \end{pmatrix}, k \in (0, \frac{\pi}{a}). $$

Uočiti pojavu redukovane Briluen-ove zone.

c) Pokušaj da se direktno iz translacionih indukcijom dobiju reprezentacije cele grupe nije uspešan, jer je mala grupa svake reprezentacije cela grupa, pa kako nije u pitanju semidirektni proizvod grupa, nema algoritma za nalaženje dozvoljenih reprezentacija. Ali, ako se uoči da je $\boldsymbol{L}4$ podgrupa indeksa 2, rešenje je jednostavno: ${}_kA_m((\sigma_v \mid \frac{1}{2})^{-1}(C_4^s \mid t)(\sigma_v \mid \frac{1}{2})) = {}_kA_{-m}(C_4^s \mid t)$. Za $m = 0, 2$ reprezentacije su samokonjugovane, te daju po dve reprezentacije cele grupe: ${}_kA_0(C_4^s \mid t) = {}_kB_0(C_4^s \mid t) = e^{-\imath kta}$, ${}_kA_0(\sigma_v C_4^s \mid t) = -{}_kB_0(\sigma_v C_4^s \mid t) = Ze^{-\imath kta}$. Z se nalazi iz uslova $Z^2 = {}_kA_m((\sigma_v \mid \frac{1}{2})^2) = e^{-\imath ka}$, tj. $Z = e^{-\imath ka/2}$. Slično, ${}_kA_2(C_4^s \mid t) = {}_kB_2(C_4^s \mid t) = (-1)^s e^{-\imath kta}$, ${}_kA_2(\sigma_v C_4^s \mid t) = -{}_kB_2(\sigma_v C_4^s \mid t) = (-1)^s e^{-\imath k(t+\frac{1}{2})a}$. Preostale orbite su dvočlane, te se za svako $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ nalazi ${}_kE_1(C_4^s \mid t) = e^{-\imath kta}\begin{pmatrix} e^{\imath s\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath s\alpha}\end{pmatrix}$ i ${}_kE_1(\sigma_v C_4^s \mid t) = e^{-\imath kta}\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath s\alpha-\imath ka} \\ e^{\imath s\alpha} & 0\end{pmatrix}$.

Zadatak 25 *Dokazati Bloh-ov teorem: svojstvene funkcije kristala su Bloh-ovog tipa* $\mid \boldsymbol{k}t_{\boldsymbol{k}}\rangle = \psi^{(\boldsymbol{k}t_{\boldsymbol{k}})}(\boldsymbol{r}) = e^{\imath \boldsymbol{kr}}u_{t_{\boldsymbol{k}}}(\boldsymbol{r})$, *gde je* $u_{t_{\boldsymbol{k}}}(\boldsymbol{r})$ *periodična funkcija u odnosu na vektore rešetke,* $u_{t_{\boldsymbol{k}}}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z}) = u_{t_{\boldsymbol{k}}}(\boldsymbol{r})$. *Ispitati šta ovaj rezultat znači u slučaju kada je u* $\mathcal{H}$ *moguće izabrati lokalizovani bazis (bazisne funkcije odgovaraju čvorovima rešetke).*

Zbog poznatog oblika ireducibilnih reprezentacija $\boldsymbol{T}$, vektor iz ireducibilnog potprostora $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}$ se transformiše po pravilu $D(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = e^{-\imath \boldsymbol{kz}}\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r})$. Kako je $e^{-\imath \boldsymbol{kr}} \neq 0$, može se pisati $\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = e^{\imath \boldsymbol{kr}}u(\boldsymbol{r})$, gde je $u(\boldsymbol{r})$ neka funkcija. Za odredjivanje njenih transformacionih svojstava dovoljno je znati da se proizvod funkcija (proizvod vektora) transformiše po direktnom proizvodu reprezentacija, te kako se $e^{\imath \boldsymbol{kr}}$ očigledno transformiše po $\boldsymbol{k}$-toj reprezentaciji kao i $\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r})$, $u(\boldsymbol{r})$ mora biti invarijantan ($\boldsymbol{k} = 0$). To se vidi i direktno: $D(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z}) = e^{\imath \boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z})}u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z})$, ali i $D(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = e^{-\imath \boldsymbol{kz}}\psi(\boldsymbol{k})(\boldsymbol{r}) = e^{-\imath \boldsymbol{kz}}e^{\imath \boldsymbol{kr}}u(\boldsymbol{r})$, pa je $u(\boldsymbol{r}) = u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{z})$.

Grupni projektori su $P^{(\boldsymbol{k})} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{z}} e^{\imath \boldsymbol{kz}}D(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )$. Njihov rang je $a_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{z}} e^{\imath \boldsymbol{kz}}\chi(\ I\ |\boldsymbol{z}\ )$. U pomenutom slučaju, lokalizacija znači da je $\chi(\boldsymbol{z}) = \chi(\ I\ |0\ )\delta_{0\boldsymbol{z}}$, pri čemu je $\chi(\ I\ |0\ ) = d_0N$, dimenzija $\mathcal{H}$. Tako je $a_{\boldsymbol{k}} = d_0$, i ne zavisi od $\boldsymbol{k}$. Zaključuje se da je razlaganje prostora stanja kristalnog sistema na ireducibilne potprostore translacione grupe $\mathcal{H} = \sum_{k\in BZ}\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})}$, gde je $\mathcal{H}^{(\boldsymbol{k})} = e^{\imath \boldsymbol{kr}}\mathcal{H}^{(0)}$.

6.3 Normalne mode

Zadatak 26 *Odrediti matricu projektora na potprostor jedinične reprezentacije simetrizovanog kvadrata dinamičke reprezentacije molekula sa n atoma i grupom simetrije G.*

Dinamička reprezentacija je $D^d(G) = D^P(G) \otimes D^V(G)$. U bazisu $\mid \mathbf{q}, \alpha i\ \rangle$ je $(D^d)^{\alpha i}_{\alpha' i'}(g) = \delta^{\alpha}_{g\alpha'}D^{Vi}_{i'}(g)$, te je matrica kvadrata ove reprezentacije $(D^{d^2})^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'} = \delta^{\alpha}_{g\alpha'}\delta^{\beta}_{g\beta'}D^{Vi}_{i'}(g)D^{Vj}_{j'}(g)$. Matrica simetrizatora je $S^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'} = \frac{1}{2}(\delta^{\alpha}_{\alpha'}\delta^{\beta}_{\beta'}\delta^{i}_{i'}\delta^{j}_{j'} + \delta^{\alpha}_{\beta'}\delta^{\beta}_{\alpha'}\delta^{i}_{j'}\delta^{j}_{i'})$, pa je simetrizovani kvadrat reprezentacije: $[D^{d^2}(g)]^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'} = \frac{1}{2}(\delta^{\alpha}_{g\alpha'}\delta^{\beta}_{g\beta'}D^{Vi}_{i'}(g)D^{Vj}_{j'}(g) + \delta^{\alpha}_{g\beta'}\delta^{\beta}_{g\alpha'}D^{Vi}_{j'}(g)D^{Vj}_{i'}(g))$. Projektor na potprostor jedinične reprezentacije je matrica $P^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'} = \frac{1}{|G|}\sum_g [D^{d^2}(g)]^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'}$.

Zadatak 27 *Odrediti sve invarijantne polinome II i III stepena od koordinata x, y, z euklidskog prostora za grupu $\boldsymbol{C}_{1h}$.*

U sledećoj tabeli su navedeni karakteri i razlaganja vektorske reprezentacije i njenih simetrizovanih kvadrata i kuba.

D	e	σ_h	Razlaganje
D^v	3	1	$2A^+ + A^-$
$[D^{v^2}]$	6	2	$4A^+ + 2A^-$
$[D^{v^3}]$	10	2	$6A^+ + 4A^-$

Iz tabele je jasno da postoji 4 nezavisna polinoma drugog stepena i 6 trećeg stepena. Pošto je matrica simetrizatora poznata, lako se nalazi grupni projektor jedinične reprezentacije grupe $\boldsymbol{C}_{1h}$ u simetrizovanom potprostoru kvadrata vektorske reprezentacije. Njegovi nenulti elementi su $p_{xx,xx} = p_{yy,yy} = p_{zz,zz} = 1$, $p_{xy,xy} = p_{xy,yx} = p_{yx,xy} = p_{yx,yx} = \frac{1}{2}$, pa se kao nezavisni polinomi mogu odabrati x^2, y^2, xy, z^2. Na isti način[1], ili neposrednim odbacivanjem monoma sa neparnim stepenom po z, se nalaze nezavisni invarijantni polinomi trećeg stepena: x^3, x^2y, xy^2, xz^2, y^3, yz^2.

Zadatak 28 *Odrediti najopštiji oblik kvadratnog potencijala diatomskog molekula sa nejednakim atomima.*

Grupa simetrije ovog molekula je $G = \boldsymbol{C}_{\infty v}$. Najopštiji harmonijski potencijal je stoga kvadratni polinom nad 6-todimenzionalnim konfiguracionim prostorom. Prema tome, potrebno je odrediti grupni projektor P jedinične reprezentacije u simetrizovanom kvadratu dinamičke reprezentacije ove grupe.

Pošto svi elementi G ostavljaju oba atoma nepokretnima, važi $D^P(g) = I_2, \forall g \in G$. Osim toga je $D(\sigma_x^s R(\varphi)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^s \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Zamenom se nalazi

$$P^{\alpha i,\beta j}_{\alpha' i',\beta' j'} = \frac{1}{8\pi} \sum_{s=0}^{1} \int_0^{2\pi} (\delta^{\alpha}_{\alpha'} \delta^{\beta}_{\beta'} D^{V i}_{i'}(\sigma_x^s R_\varphi) D^{V j}_{j'}(\sigma_x^s R_\varphi) + \delta^{\alpha}_{\beta'} \delta^{\beta}_{\alpha'} D^{V i}_{j'}(\sigma_x^s R_\varphi) D^{V j}_{i'}(\sigma_x^s R_\varphi)) d\varphi.$$

Tako su

$$P^{1i,2j}_{1i',2j'} = P^{2i,1j}_{2i',1j'} = \frac{1}{8\pi} \sum_{s=0}^{1} \int_0^{2\pi} D^{V2\,1i,2j}_{\ \ \ 1i',2j'}(\sigma_x^s R_\varphi) d\varphi,$$

$$P^{1i,2j}_{2i',1j'} = P^{2i,1j}_{1i',2j'} = \frac{1}{8\pi} \sum_{s=0}^{1} \int_0^{2\pi} D^{V2\,1i,2j}_{\ \ \ 1j',2i'}(\sigma_x^s R_\varphi) d\varphi,$$

[1] Sada se koriste matrice dimenzije 27, te je to 9 puta obimniji zadatak nego za drugi stepen. Stoga se može preporučiti kao teži zadatak da se razvije algoritam za jednostavno i brzo računanje ovih projektora, ili napravi odgovarajući računarski program.

$$P^{1i,1j}_{1i',1j'} = P^{2i,2j}_{2i',2j'} = P^{1i,2j}_{1i',2j'} + P^{1i,2j}_{2i',1j'}$$

jedini nenulti elementi. Direktnim računanjem se pokazuje da je

$$P^{11,21}_{11,21} = P^{11,21}_{12,22} = P^{12,22}_{11,21} = P^{12,22}_{12,22} = \frac{1}{2}P^{13,23}_{13,23} = \frac{1}{4},$$
$$P^{11,21}_{21,11} = P^{11,21}_{22,12} = P^{12,22}_{21,11} = P^{12,22}_{22,12} = \frac{1}{2}P^{13,23}_{23,13} = \frac{1}{4},$$

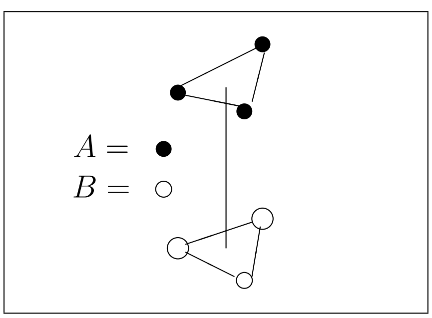
dok su ostali elementi jednaki nuli.

Lako se proverava da je zbir dijagonalnih elemenata (svi gornji indeksi jednaki odgovarajućim donjim) jednak 6, što se slaže sa proverom preko karaktera:

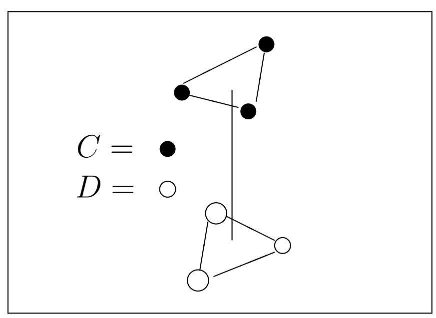
D	$R(\varphi)$	$\sigma_x R(\varphi)$	Razlaganje
D^v	$1 + 2\cos(\varphi)$	1	$A_0 + E_1$
$[D^{d^2}]$	$3 + 8\cos(\varphi) + 8\cos^2(\varphi) + 2\cos(2\varphi)$	5	$6A_0 + B_0 + 4E_1 + 3E_2$

Na kraju se ispitivanjem nenultih mesta projektora nalazi da su polinomi $x_1^2 + y_1^2, z_1^2, x_2^2 + y_2^2, z_2^2, x_1x_2 + y_1y_2, z_1z_2$, što znači da je najopštiji oblik harmonijskog potencijala ovog molekula linearna kombinacija ovih polinoma.

Zadatak 29 *Klasifikovati normalne mode molekula sa slike 6.5, simetrije $\boldsymbol{C}_{3v}$ (Februar 1993.).*



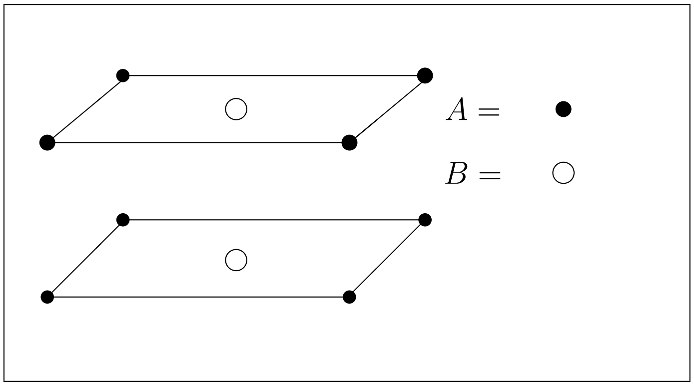
Slika 6.5: Molekul A_3B_3.



Slika 6.6: Molekul C_3D_3.

Zadatak 30 *Klasifikovati normalne vibracione mode molekula sa šest atoma: dva tipa atoma su na stranicama dva jednakostranična trougla paralelna xy-ravni, sa njenih različitih strana (slika 6.6). Prvi trougao ima teme u xz-ravni, a drugi je odnosu na prvi rotiran za π oko z-ose. (Jun 1993.)*

Zadatak 31 *Izvršiti simetrijsku klasifikaciju normalnih moda molekula sa slike 6.7 (Januar 1994.).*



Slika 6.7: Molekul A_8B_2.

Zadatak 32 *Izvršiti simetrijsku klasifikaciju vibracionih moda molekula amonijaka, slika 6.3 (Februar 1994.).*

Zadatak 33 *Odrediti normalne mode dvoatomskog sistema u potencijalu*

$$V(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}k\sum_{i=1}^{3}(q_{1i} - q_{2i})^2.$$

Odgovarajuća Hess-ova i dinamička matrica, V i W, su ($M = \sqrt{m_1 m_2}$):

$$\begin{pmatrix} k & 0 & 0 & -k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 & 0 & -k & 0 \\ 0 & 0 & k & 0 & 0 & -k \\ -k & 0 & 0 & k & 0 & 0 \\ 0 & -k & 0 & 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & -k & 0 & 0 & k \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{k}{m_1} & 0 & 0 & -\frac{k}{M} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k}{m_1} & 0 & 0 & -\frac{k}{M} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{k}{m_1} & 0 & 0 & -\frac{k}{M} \\ -\frac{k}{M} & 0 & 0 & \frac{k}{m_2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{k}{M} & 0 & 0 & \frac{k}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{k}{M} & 0 & 0 & \frac{k}{m_2} \end{pmatrix}.$$

Već je rečeno da je grupa simetrije ovakvog sistema $\boldsymbol{C}_{\infty v}$. Dinamička reprezentacija je (za permutacionu je $D^P(g) = I_2 \quad \forall g \in \boldsymbol{C}_{\infty v}$):

$$D^d(R(\varphi)) = \begin{pmatrix} c & -s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s & c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & -s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^d(\sigma_x R(\varphi)) = \begin{pmatrix} c & -s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -s & -c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & -s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -s & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

gde je $s = \sin\varphi$ i $c = \cos\varphi$. Dvodimenzionalne reprezentacije E_m su realne, i umesto uobičajenog oblika, da bi se dobile realne mode, biće korišćen:

$$E_m(R(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos m\varphi & -\sin m\varphi \\ \sin m\varphi & \cos m\varphi \end{pmatrix}, \quad E_m(\sigma_x R(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos m\varphi & -\sin m\varphi \\ -\sin m\varphi & -\cos m\varphi \end{pmatrix}.$$

Razlaganje dinamičke reprezentacije je $D^d = 2A_0 + 2E_1$, vektorske $D^v = A_0 + E_1$, aksijalno vektorske $D^a = B_0 + E_1$. Pri tome z-komponente aksijalnog i polarnog vektora obrazuju jednodimenzionalne reprezentacije, a E_1 je formirana od vektora ortogonalnih na z-osu.

Za grupne operatore se nalazi:

$$P^{(A)} = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix},\ P_1^{(E)} = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0 \end{pmatrix},\ P_2^{(E)} = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0 \end{pmatrix}.$$

Redukovane dinamičke matrice su:

$$W(A) = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&\frac{k}{m_1}&0&0&-\frac{k}{M}\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&-\frac{k}{M}&0&0&\frac{k}{m_2} \end{pmatrix},\ W(E1) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{k}{m_1}&0&0&-\frac{k}{M}&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ -\frac{k}{M}&0&0&\frac{k}{m_2}&0&0\\ 0&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0 \end{pmatrix}.$$

Nenulte frekvence i odgovarajući vektori su ($\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$):

$$|\ \mathbf{Q}, A1\ \rangle = (0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, -\sqrt{\frac{\mu}{m_2}}), \quad \text{za} \quad \omega(A1) = \sqrt{\frac{k}{\mu}},$$

$$|\ \mathbf{Q}, E11\ \rangle = (\sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, -\sqrt{\frac{\mu}{m_2}}, 0, 0), \quad \text{za} \quad \omega(E1) = \sqrt{\frac{k}{\mu}}.$$

Delovanjem na $|\ \mathbf{Q}, E1\ \rangle$ operatorom P_2^E nalazi se standardni vektor:

$$|\ \mathbf{Q}, E12\ \rangle = (0, \sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, -\sqrt{\frac{\mu}{m_2}}, 0).$$

Prvi vektor odgovara vibracijama duž ose molekula, a druga dva daju rotacione mode. Preostale translacione mode (duž z, x i y ose) odgovaraju vektorima nultih svojstvenih vrednosti:

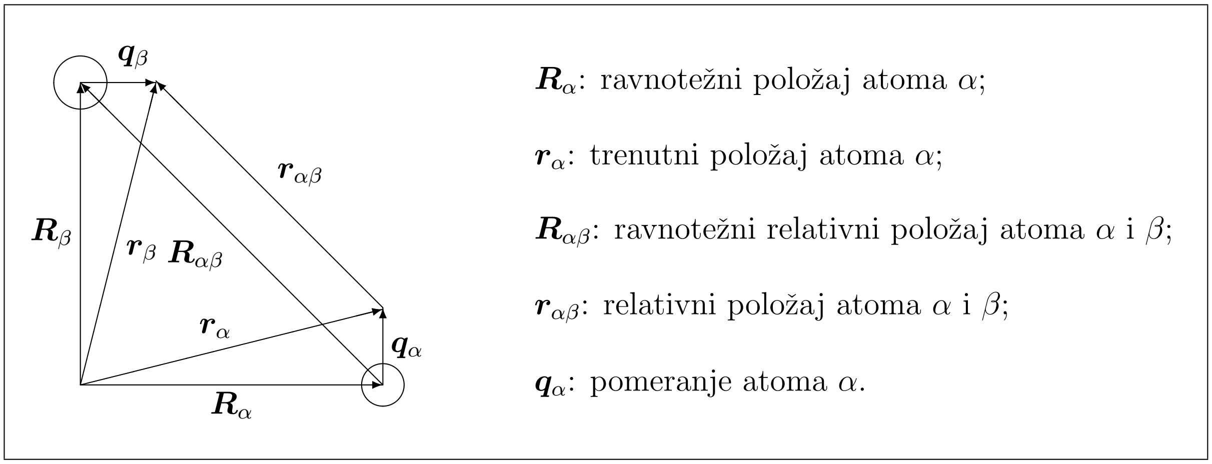
$$|\ \mathbf{Q}, A2\ \rangle = (0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_2}}),$$

$$|\ \mathbf{Q}, E21\ \rangle = (\sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_2}}, 0, 0),$$

$$|\ \mathbf{Q}, E22\ \rangle = (0, \sqrt{\frac{\mu}{m_1}}, 0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_2}}, 0).$$

Vidi se da mode pridružene rotacionim reprezentacijama imaju nenulte frekvence, što je manifestacija fakta da potencijal ne zavisi samo od dužine odstupanja od nekih ravnotežnih rastojanja (videti sledeći zadatak), i znači da nije reč o vibracionom potencijalu.

Zadatak 34 *Neka je višeatomski sistem izolovan, tj. njegov potencijal zavisi samo od relativnih položaja* $\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta$ *atoma. Neka je, dalje interakcija dvočestična, i odredjena samo rastojanjima atoma. Izračunati potencijal u harmonijskoj aproksimaciji (u okolini ekstremalne tačke, do drugog reda po odstupanjima od nje) i izraziti ga preko koordinata ekstremalne tačke i pomeranja od nje (*vibracioni potencijal*).*



Slika 6.8: Uz izvodjenje vibracionog potencijala.

Neka je $\boldsymbol{r}_{\alpha\beta} = \boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta$, trenutni relativni položaj atoma. Tada je $\frac{\partial r_{\alpha\beta}}{\partial r^i_\gamma} = \frac{r^i_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}}(\delta_{\alpha\gamma} - \delta_{\beta\gamma})$ (i prebrojava Dekart-ove koordinate odgovarajućih vektora). Iz uslova zadatka sledi da je $V = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} U^\alpha_\beta$, uz $U^\alpha_\beta = U^\beta_\alpha = U(r_{\alpha\beta})$. Vidi se da je $\frac{\partial U^\alpha_\beta}{\partial r^i_\gamma} = \frac{\partial U^\alpha_\beta}{\partial r_{\alpha\beta}}\frac{r^i_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}}(\delta_{\alpha\gamma} - \delta_{\beta\gamma})$ i $\frac{\partial^2 U^\alpha_\beta}{\partial r^i_\gamma \partial r^j_\delta} = \frac{\partial^2 U^\alpha_\beta}{\partial r^2_{\alpha\beta}}\frac{r^i_{\alpha\beta} r^j_{\alpha\beta}}{r^2_{\alpha\beta}}(\delta_{\alpha\gamma} - \delta_{\beta\gamma})(\delta_{\alpha\delta} - \delta_{\beta\delta}) + c\frac{\partial U}{\partial r}$. U okolini ekstremalne tačke $\boldsymbol{R}$ su članovi tipa $\frac{\partial U}{\partial r_\alpha}$ jednaki nuli, a drugi izvodi $\frac{\partial^2 U^\alpha_\beta(\boldsymbol{R})}{\partial R^i_\gamma \partial R^j_\delta} = \frac{\partial^2 U^\alpha_\beta}{\partial r^2_{\alpha\beta}}\frac{R^i_{\alpha\beta} R^j_{\alpha\beta}}{R^2_{\alpha\beta}}(\delta_{\alpha\gamma} - \delta_{\beta\gamma})(\delta_{\alpha\delta} - \delta_{\beta\delta})$, te se za vibracioni potencijal nalazi:

$$V = V(\boldsymbol{R}) + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta,\gamma\delta}\sum_{ij}\frac{\partial^2 U^\alpha_\beta(\boldsymbol{R})}{\partial r^2_{\alpha\beta}}\frac{R^i_{\alpha\beta} q^i_\gamma R^j_{\alpha\beta} q^j_\delta}{R^2_{\alpha\beta}}(\delta_{\alpha\gamma} - \delta_{\beta\gamma})(\delta_{\alpha\delta} - \delta_{\beta\delta}).$$

Nakon sumiranja i odbacivanja konstantnog člana dobija se oblik: $V = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} V^\alpha_\beta \frac{(\boldsymbol{R}_{\alpha\beta}\boldsymbol{q}_{\alpha\beta})^2}{R^2_{\alpha\beta}}$, uz $V^\alpha_\beta = \frac{\partial^2 U^\alpha_\beta(\boldsymbol{R})}{\partial r^2_{\alpha\beta}}$. Koeficijenti u Taylor-ovom razvoju su

$$V^{\alpha i}_{\beta j} = \frac{\partial^2 V(\boldsymbol{R})}{\partial q^i_\alpha \partial q^j_\beta} = \begin{cases} -V^\alpha_\beta \frac{R^i_{\alpha\beta} R^j_{\alpha\beta}}{R^2_{\alpha\beta}}, & \text{za } \alpha \neq \beta, \\ \sum_{\gamma(\neq\alpha)} V^\alpha_\gamma \frac{R^i_{\alpha\gamma} R^j_{\alpha\gamma}}{R^2_{\alpha\gamma}}, & \text{za } \alpha = \beta, \end{cases}$$

.

Zadatak 35 *Pokazati da iz invarijantnosti vibracionog potencijala na translacije i rotacije sledi da su odgovarajuće normalne frekvence jednake nuli, tj. da je reč o manifestaciji zakona održanja.*

Neka je $\boldsymbol{a} = (a^1, a^2, a^3)$ neki vektor iz $\mathbb{R}^3$, za koji se vrši translacija svakog od atoma. U konfiguracionom prostoru, toj translaciji se pridružuje vektor koji opisuje odstupanje od ravnotežnog položaja za $\boldsymbol{a}$ svih atoma istovremeno: $|\, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{a}\,\rangle = \sum_{\alpha i} a^i |\, \boldsymbol{q}, \alpha i\,\rangle$. Uslov da je to svojstveni vektor potencijala za svojstvenu vrednost nula, tj. vektor nul-potprostora matrice vibracionog potencijala, je $0 = \sum_{\alpha i \beta j} a^i V^{\alpha i}_{\beta j} |\, \boldsymbol{q}, \beta j\,\rangle$, u oznakama prethodnog zadatka. Zbog linearne nezavisnosti vektora bazisa pomeranja, odmah se dobija $\sum_{\alpha i} a^i V^{\alpha i}_{\beta j} = 0$. Ako to važi za svaku translaciju, ekvivalentan uslov je $\sum_{\alpha} V^{\alpha i}_{\beta j} = 0$. Sa druge strane, direktnim sumiranjem prethodnih izraza za $V^{\alpha i}_{\beta j}$ nalazi se isti rezultat.

Analogno translacijama, ako se rotacija napiše u obliku $U(\phi) = e^{\phi A}$, gde je A odgovarajući generator, tj. neki antisimetrični operator, nalazi se da su koordinate pomeranja pri rotaciji $\boldsymbol{q}_\alpha = U(\phi)\boldsymbol{R}_\alpha - \boldsymbol{R}_\alpha \approx \phi A \boldsymbol{R}_\alpha$, tj. $q^i_\alpha = \sum_j \phi A^i_j R^j_\alpha$. Ukoliko su ovakva pomeranja mala, što znači da je sistem konačan u ravni ortogonalnoj na osu rotacije, može se na isti način kao i za translacije iskoristiti razvoj V po odstupanjima. Uslov da je takvo kolektivno pomeranje iz nulpotprostora V za svaku rotaciju, tj. za svaku kososimetričnu matricu, daje $\sum_\alpha (R^j_\alpha V^{\alpha i}_{\beta k} - R^i_\alpha V^{\alpha j}_{\beta k}) = 0$, i ponovo se lako proverava da je to automatski zadovoljeno za koeficijente $V^{\alpha i}_{\beta j}$.

Zadatak 36 *Odrediti normalne mode dvoatomskog molekula sa različitim atomima.*

Prema izvedenom izrazu za potencijal ovakvog sistema se nalazi $V = \frac{1}{2}k(z_A - z_B)^2$ (ravnotežni položaji su na z-osi). Dinamička matrica je:

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{k}{m_A} & 0 & 0 & -\frac{k}{\sqrt{m_A m_B}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{k}{\sqrt{m_A m_B}} & 0 & 0 & \frac{k}{m_B} \end{pmatrix}.$$

Dinamička reprezentacija, i grupni projektori su već izvedeni u prethodnim zadacima.

Rezultat je jedna normalna vibraciona moda, frekvence $\sqrt{\frac{k}{\mu}}$, koja pripada reprezentaciji A_0, i ima svojstveni vektor $(0, 0, \sqrt{\frac{\mu}{m_A}}, 0, 0, -\sqrt{\frac{\mu}{m_B}})$.

Zadatak 37 *Odrediti normalne mode molekula vode.*

Grupa simetrije ovog molekula je $\boldsymbol{C}_{2v}$ sa ireducibilnim reprezentacijama (elementi grupe su $[e, C_2, \sigma_x, \sigma_x C_2]$):

$$A_0 = [1, 1, 1, 1], B_0 = [1, 1, -1, -1], A_1 = [1, -1, 1, -1], B_1 = [1, -1, -1, 1].$$

Vektorska reprezentacija je:

$$D^v = [I_3, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}],$$

a permutaciona:

$$D^p = [I_3, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}],$$

pa su matrice dinamičke reprezentacije:

$$D^d(e) = I_9,\ D^d(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$D^d(\sigma_x) = \mathrm{diag}(1, -1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, 1),$$

$$D^d(\sigma_y) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Na osnovu karaktera, $\chi^d = [9, -1, 3, 1]$, $\chi^v = [3, -1, 1, 1]$, $\chi^a = [3, -1, -1, -1]$, nalaze se komponente dinamičke, vektorske i aksijalne reprezentacije: $D^d = 3A_0 + B_0 + 3A_1 + 2B_1$, $D^v = A_0 + A_1 + B_1$, $D^a = B_0 + A_1 + B_1$. Konačno, $\chi^{vib} = [3, 1, 3, 1]$, i $D^{vib} = 2A_0 + A_1$.

Odgovarajući grupni projektori su:

$$P^{A_0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix},\ P^{B_0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P^{A_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix},\ P^{B_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Znajući ove rezultate, može se formirati vibracioni potencijal, i odrediti odgovarajuća odstupanja i njihove frekvencije.

Zadatak 38 *Odrediti normalne mode jednodimenzionalnog kristala sa jednim atomom mase m u elementarnoj ćeliji dužine a.*

Neka svaki atom interaguje sa s najbližih suseda. Potencijal za n-ti atom je $V_n = \frac{1}{2}\sum_{j=-s}^{s}\gamma_j(x_n - x_{n-j})^2$, te je totalni potencijal (mora se izbeći višestruko uračunavanje istih članova): $V = \frac{1}{2}\sum_n\sum_{j=1}^{s}\gamma_j(x_n - x_{n-j})^2$. Zbog translacione invarijantnosti i odsustva ostalih Dekart-ovih koordinata, dovoljno je naći samo V^{zx}_{0x} element hesijana (pošto je samo jedan atom u ćeliji nepotreban je njegov indeks): $V^{zx}_{0x} = \sum_{j=1}^{s}\gamma_j(2\delta^z_0 - \delta^z_j - \delta^z_{-j})$. Stoga je redukovana dinamička matrica u ireducibilnom potprostoru reprezentacije k: $W^x_x(k) = \sum_j 2\frac{\gamma_j}{m}(1 - \cos(kja))$. Prema tome, za svako k (iz BZ) je desna strana odgovarajuća svojstvena vrednost, tj. kvadrat frekvencije normalne mode. Vidi se da je $W^x_x(k) = W^x_x(-k)$, što je u skladu sa kompleksnošću reprezentacija (jednakost je *a priori* obezbedjena za realne reprezentacije $k = 0, \frac{\pi}{a}$). Očigledno je da postoji samo akustička grana ($W^x_x(0) = 0$). Odgovarajuće realne normalne koordinate su oscilatorne funkcije položaja atoma i longitudinalne su. Dobijene nulte frekvence za oscilovanja u pravcima z i y pripadaju translacionim modama. Rotacionih moda nema, jer je sistem duž x ose beskonačan, a jednodimenzionalan.

Zadatak 39 *Naći normalne mode jednodimenzionalnog kristala sa dva atoma masa m_1 i m_2 u elementarnoj ćeliji dužine a. Uračunati interakciju najbližih suseda. Ispitati ponašanje vibracionih grana za različite odnose masa.*

Sada je potencijal atoma u jednoj ćeliji dat sa $V_n = \frac{\gamma}{2}((x_{n,1} - x_{n-1,2})^2 + (x_{n,1} - x_{n,2})^2 + (x_{n,2} - x_{n+1,1})^2$, a ukupni

$$V = \frac{\gamma}{2}\sum_n((x_{n,1} - x_{n-1,2})^2 + (x_{n,1} - x_{n,2})^2) = \frac{\gamma}{2}\sum_n(2x^2_{n,1} - 2x_{n-1,2}x_{n,1} + 2x^2_{n,2} - 2x_{n,1}x_{n,2})$$

Tako se dobijaju hesijan i dinamička matrica:

$$V^m_0 = \gamma\begin{pmatrix} 2\delta^m_0 & -\delta^m_0 - \delta^m_1 \\ -\delta^m_0 - \delta^m_{-1} & 2\delta^m_0 \end{pmatrix}, \quad W^m_0 = \gamma\begin{pmatrix} \frac{2\delta^m_0}{m_1} & -\frac{\delta^m_0 + \delta^m_1}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{\delta^m_0 + \delta^m_{-1}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{2\delta^m_0}{m_2} \end{pmatrix}.$$

Ovaj rezultat omogućava nalaženje redukovane dinamičke matrice za svako k:

$$W(k) = \gamma\begin{pmatrix} \frac{2}{m_1} & -\frac{1+e^{\imath ka}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{1+e^{-\imath ka}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{2}{m_2} \end{pmatrix}.$$

Frekvence normalnih moda su $\omega^2_\pm(k) = \frac{\gamma}{\mu}(1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{\mu}{M}\sin^2(\frac{1}{2}ka)})$, gde je μ redukovana, a M ukupna masa elementarne ćelije. Na taj način su dobijene dve vibracione grane. Akustička je očigledno $\omega^2_-(k)$. Ponovo se javlja obavezna degeneracija za k i $-k$.

Neka je $m_1 = cm_2$, gde je $c \in (0,\infty)$ parametar odnosa masa. Sada je $\mu = \frac{c}{1+c}m_2$ i $M = (1+c)m_2$, pa je $\omega^2_{c\pm}(k) = \gamma\frac{1+c}{c}(1 \pm \sqrt{1-4\frac{c}{(1+c)^2}\sin^2(\frac{1}{2}ka)})$ (za $m_2 = 1$).

Kada je $c = 1$, tj. mase atoma su jednake, optička i akustička grana se spajaju na krajevima zone. Ovo je zapravo primer da ne uzimanje u obzir cele grupe dovodi do "slučajne" degeneracije. Naime, iz potencijala se vidi da je ista konstanta interakcije uzeta za atome iz iste i različitih ćelija, što govori (pošto su u pitanju kvalitativno isti parovi) da je i rastojanje medju njima implicitno smatrano jednakim. No, u slučaju da su i mase jednake, translacioni period postaje dvostruko manji, tj. u razmatranje nije uzeta cela translaciona grupa. Faktički, dobijen je rezultat iz prethodnog zadatka, ako se prepolovi zona.

Za slučaj da je c različito od 1, ova frekvenca se cepa, kao tipičan primer narušenja simetrije. Konačno, ako je c znatno veće od jedan, akustička grana se sve više približava k-osi, a optička postaje prava paralelna k-osi na visini $2\frac{\gamma}{m_2}$. Ovo se može shvatiti kao adijabatska separacija teškog sistema (atomi mase m_1), sporo oscilujućeg, i nezavisno oscilovanje lake podrešetke, uvek iste frekvence ($2\frac{\gamma}{m_2}$, što je granična frekvenca), kada laki atomi osciluju prateći samo teški atom iz iste ćelije. Zbog nepokretnosti teških atoma, i interakcije najbližih suseda sistem se svodi na niz molekula.

Zadatak 40 *Odrediti fononski spektar jednodimenzionalnog kristala sa dva atoma u osnovnoj ćeliji za interakciju dva najbliža suseda.*

Potencijal je (indeksi 1 i 2 prebrojavaju vrste atoma, a n je redni broj ćelije):

$$V(q) = \frac{1}{2}\sum_n (\gamma_1(q_{n,1} - q_{n-1,1})^2 + \gamma_2(q_{n,2} - q_{n-1,2})^2 + \gamma_-(q_{n,1} - q_{n-1,2})^2 + \gamma_+(q_{n,1} - q_{n,2})^2).$$

Tako se za matricu W nalazi:

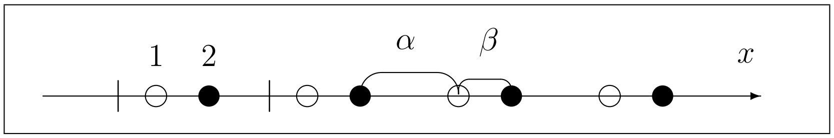
$$W_0^m = \begin{pmatrix} \frac{(2\gamma_1+\gamma_-+\gamma_+)\delta_0^m - \gamma_1\delta_1^m - \gamma_1\delta_{-1}^m}{m_1} & \frac{-\gamma_+\delta_0^m - \gamma_-\delta_1^m}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ \frac{-\gamma_+\delta_0^m - \gamma_-\delta_{-1}^m}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{(2\gamma_2+\gamma_-+\gamma_+)\delta_0^m - \gamma_2\delta_1^m - \gamma_2\delta_{-1}^m}{m_2} \end{pmatrix},$$

pa je:

$$W(k) = \begin{pmatrix} \frac{\gamma_-+\gamma_+-4\gamma_1\sin^2(\frac{k}{2})}{m_1} & -\frac{\gamma_++\gamma_-e^{\imath k}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{\gamma_++\gamma_-e^{-\imath k}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{\gamma_-+\gamma_+-4\gamma_2\sin^2(\frac{k}{2})}{m_2} \end{pmatrix}.$$

Rešavanjem svojstvenog problema ove matrice nalaze se frekvence oscilovanja : $\omega^2_\pm(k) = \frac{T}{2}(1 \pm \sqrt{1-4\frac{D}{T^2}})$, gde je T trag, a D determinanta $W(k)$. Treba zapaziti da se pri velikoj razlici u masama, npr. $m_2 \ll 1 \ll m_1$, može govoriti o sporom oscilovanju teških jona (sa malim frekvencama) i brzom oscilovanju lakih jona. Pri tome se kretanje lakih jona može, analizom $W_2^2(k)$ shvatiti kao samostalno kretanje u potencijalu $V = \frac{1}{2}\sum_n(\gamma_2(q_{n,2} - q_{n-1,2})^2 + (\gamma_+ + \gamma_-)q^2_{n,2})$, odnosno nezavisno oscilovanje lake podrešetke u srednjem polju zamrznute teške podrešetke, što je manifestacija adijabatskog ponašanja. Velika energija tih moda otežava njihovo pobudjivanje, te laki sistem ostaje u odredjenom vibracionom stanju pri oscilovanju teškog.

Zadatak 41 *Odrediti normalne mode jednodimenzionalnog lanca na slici 6.9. Mase atoma su m_1 i m_2; interaguju dva najbliža suseda (po jedan sa svake strane atoma, α i β su koeficijenti interakcije). Razmotriti slučajeve kada su atomi jednaki i na istom rastojanju, kao i granični slučaj kada je masa jednog atoma mnogo veća od mase drugog* (Novembar 1993.).



Slika 6.9: Interakcija najbliža dva suseda lanca sa dva atoma u ćeliji.

Potencijal je $V = \sum_n (V_{n1} + V_{n2})$, gde je $V_{n1} = \frac{\alpha}{2}(x_{n-1,2} - x_{n,1})^2 + \frac{\beta}{2}(x_{n,1} - x_{n,2})^2$, $V_{n2} = \frac{\alpha}{2}(x_{n+1,1} - x_{n,2})^2 + \frac{\beta}{2}(x_{n,1} - x_{n,2})^2$. Uobičajenom procedurom se nalazi dinamička matrica i njena redukovana submatrica u prostoru $\mathcal{H}^{(k)}$:

$$W^{z\alpha}_{0\beta} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{\alpha+\beta}{m_1}\delta_{z0} & -\frac{\alpha\delta_{z1}+\beta\delta_{z0}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{\alpha\delta_{z,-1}+\beta\delta_{z0}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{\alpha+\beta}{m_2}\delta_{z0} \end{pmatrix}, \ W(k) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{\alpha+\beta}{m_1} & -\frac{\alpha e^{-\imath kz}+\beta}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{\alpha e^{\imath kz}+\beta}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{\alpha+\beta}{m_2} \end{pmatrix}.$$

Za normalne frekvence se nalazi

$$\omega_{\pm}(k) = \frac{1}{2}\{\frac{\alpha+\beta}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2} \pm \sqrt{(\frac{\alpha+\beta}{2}\frac{m_1-m_2}{m_1 m_2})^2 + \frac{\alpha^2+\beta^2+2\alpha\beta\cos(ka)}{m_1 m_2}}\}.$$

6.4 Narušenje simetrije

Zadatak 42 *Odrediti moguće grupe simetrije niskosimetrične faze pri ekvitranslacionom faznom prelazu kristala sa simetrijom $\boldsymbol{C}_{3v}$ i $\boldsymbol{C}_{4v}$.*

Parametar poretka se ne može transformisati po reprezentaciji u čijem je simetrizovanom kubu A_0.

Za grupu $\boldsymbol{C}_{3v}$ (reprezentacije A_0, B_0, E_1) je zato jedini kandidat za reprezentaciju parametra poretka reprezentacija B_0 (simetrizovani kub E_1 je $A_0 + B_0 + E_1$). Njen jedini epikernel je $\boldsymbol{C}_3$, te nakon ekvitranslacionog faznog prelaza samo ova podgrupa može biti nova grupa simetrije. Inače, sve tri podgrupe $\{e, \sigma_v\}$ su epikerneli dvodimenzionalne reprezentacije.

Kod grupe $\boldsymbol{C}_{4v}$ simetrizovani kub nijedne reprezentacije (osim jedinične) ne sadrži jediničnu, te su sve dozvoljene. Epikernel reprezentacije B_0 je $\boldsymbol{C}_4$, reprezentacije A_1 je C^x_{2v}, za B_1 epikernel je $\boldsymbol{C}^d_{2v}$. Dvodimenzionalna reprezentacija ima za epikernele sve 4 podgrupe $\boldsymbol{C}_{1v}$.

Zadatak 43 *Za kristal koji u visokosimetričnoj fazi ima tačkastu grupu simetrije $\boldsymbol{C}_{4v}$, odrediti moguće grupe narušene simetrije pri faznom prelazu. Koje grupe preostaju ako se zahteva da u razvoju slobodne energije nema trećeg stepena iz simetrijskih razloga. Predložiti parametre poretka za dobijene prelaze (April 1993.).*

Tabela 6.1: Karakteri i razlaganje simetrizovanih kubova ireducibilnih reprezentacija $\boldsymbol{C}_{nv} \cong \boldsymbol{D}_{nv}$. Kvantni broj m uzima celobrojne vrednosti iz intervala $(1,(n-1)/2]$; $\alpha = \frac{2\pi}{n}$. Za grupe $\boldsymbol{D}_n$ oznake A_0, $A_{n/2}$, B_0 i $B_{n/2}$ treba zameniti sa A_0^+, $A_{n/2}^+$, A_0^- i $A_{n/2}^-$, respektivno. Celi broj μ je onaj od brojeva $\pm 3m \pmod n$ koji je iz intervala $[0,(n-1)/2]$, pa je $D_\mu = E_\mu$ za $\mu \neq 0, n/2$, $D_\mu = A_0 + B_0$ za $\mu = 0$ i $D_\mu = A_{n/2} + B_{n/2}$ za $\mu = n/2$.

D	C_n^s	$\sigma_x C_n^s$	Razlaganje
$[A_0^3]$	1	1	A_0
$[B_0^3]$	1	-1	B_0
$[A_{n/2}^3]$	$(-1)^s$	$(-1)^s$	$A_{n/2}$
$[B_{n/2}^3]$	$(-1)^s$	$-(-1)^s$	$B_{n/2}$
$[E_m^3]$	$2\cos(3ms\alpha) + 2\cos(ms\alpha)$	0	$D_\mu + E_m$

Zadatak 44 *Odrediti moguće izogonalne grupe simetrije nakon ekvitranslacionog faznog prelaza u kristalu sa visokotemperaturnom izogonalnom grupom simetrije $\boldsymbol{C}_{6v}$ (Jun-I, 1994.).*

Zadatak 45 *Odrediti moguće grupe simetrije niskosimetrične faze pri ekvitranslacionom faznom prelazu kristala sa simetrijom $\boldsymbol{C}_{4h}$.*

Karakteri ireducibilnih reprezentacija grupe su u tabeli. Kako su reprezentacije $A_1^\pm$ i $A_{-1}^\pm$ kompleksne i medjusobno konjugovane, od njih su formirane realne reprezentacije $E^\pm = A_1^\pm + A_{-1}^\pm$, te su njihovi karakteri i simetrizovani kubovi dati. Za jednodimenzionalne realne reprezentacije simetrizovani kub je jednak početnoj reprezentaciji.

D	e	C_4	C_4^2	C_4^3	σ_h	$\sigma_h C_4$	$\sigma_h C_4^2$	$\sigma_h C_4^3$	Ek	η
A_0^+	1	1	1	1	1	1	1	1	$\boldsymbol{C}_{4h}$	a_z
A_0^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$\boldsymbol{C}_4$	v_z
A_1^+	1	$\imath$	-1	$-\imath$	1	$\imath$	-1	$-\imath$	$\boldsymbol{C}_{1h}$	v_1
A_1^-	1	$\imath$	-1	$-\imath$	-1	$-\imath$	1	$\imath$	$\boldsymbol{S}_2$	a_1
A_{-1}^+	1	$-\imath$	-1	$\imath$	1	$-\imath$	-1	$\imath$	$\boldsymbol{C}_{1h}$	v_{-1}
A_{-1}^-	1	$-\imath$	-1	$\imath$	-1	$\imath$	1	$-\imath$	$\boldsymbol{S}_2$	a_{-1}
A_2^+	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$\boldsymbol{C}_{2h}$	$v_{\pm 1}^2, a_{\pm 1}^2$
A_2^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$\boldsymbol{S}_4$	$v_1 a_1, v_{-1} a_{-1}$
E^+	2	0	-2	0	2	0	-2	0	$\boldsymbol{C}_{1h}$	(v_x, v_y)
E^-	2	0	-2	0	-2	0	2	0	$\boldsymbol{S}_2$	(a_x, a_y)
$[E^{\pm^3}]$	4	0	-4	0	± 4	0	∓ 4	0		

Parametar poretka se ne može transformisati po reprezentaciji u čijem je simetrizovanom kubu A_0^+, pa pošto je $[E^{\pm^3}] = 2A_1^\pm + 2A_{-1}^\pm$, vidi se da sve nejedinične reprezentacije mogu odgovarati parametrima poretka. Komponente aksijalnih i polarnih vektora su v i a, pri čemu su standardne komponente $v_z = v_0$, $v_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_x \mp i v_y)$, $a_z = a_0$, $a_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x \mp i a_y)$.

Zadatak 46 *Odrediti moguće grupe simetrije niskosimetrične faze pri ekvitranslacionom faznom prelazu kristala sa simetrijom $\boldsymbol{D}_{2h}$. Za dozvoljene prelaze navesti primer parametra poretka.*

D	e	C_2	σ_x	$\sigma_x C_2$	σ_h	$\sigma_h C_2$	U_x	$U_x C_2$	Ek	η
A_0^+	1	1	1	1	1	1	1	1	$\boldsymbol{D}_{2h}$	a_z^2, v_z^2
A_0^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$\boldsymbol{C}_{2v}$	v_z
B_0^+	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$\boldsymbol{C}_{2h}$	a_z
B_0^-	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$\boldsymbol{D}_2$	$a_z v_z$
A_1^+	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$\boldsymbol{D}_{1h}$	v_x
A_1^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$\boldsymbol{D}_{1d}$	a_y
B_1^+	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$\boldsymbol{D}'_{1h}$	v_y
B_1^-	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$\boldsymbol{D}'_{1d}$	a_x

Gornja tabela daje ireducibilne reprezentacije, odgovarajuće epikernele i parametre poretka razmatrane grupe.

Zadatak 47 *Za molekul sa slike 6.4 proveriti adijabatsku nestabilnost (tj. Jahn-Teller-ov teorem) (April 1994.).*

6.5 Elektronski podsistemi

Zadatak 48 *Odrediti stacionarna stanja sistema dva harmonijska oscilatora, koji harmonijski interaguju i to tačno (koristeći normalne mode), a zatim, primeniti adijabatsku proceduru i analizirati aproksimaciju.*

Početni ukupni hamiltonijan je:

$$H = \frac{p^2}{2m} \otimes I_Q + I_q \otimes \frac{P^2}{2M} + I_q \otimes \alpha Q^2 + \beta Q q + \gamma q^2 \otimes I_Q.$$

Stabilnost sistema je obezbedjena uslovima $\alpha, \gamma, 4\alpha\gamma - \beta^2 > 0$. Normalne mode se odredjuju rešavanjem svojstvenog problema dinamičke matrice: $W = \begin{pmatrix} \frac{2\gamma}{M} & \frac{\beta}{\sqrt{mM}} \\ \frac{\beta}{\sqrt{mM}} & \frac{2\alpha}{m} \end{pmatrix}$. Uz oznaku $t = \frac{\frac{\gamma M - \alpha m}{\beta\sqrt{mM}}}{\sqrt{1 + \frac{\gamma M - \alpha m}{\beta\sqrt{mM}}}}$, rezultat je: $\omega_\pm^2 = \frac{2\alpha}{M} \pm \frac{\beta}{\sqrt{mM}}\sqrt{\frac{1\pm t}{1\mp t}}$, $|\ \mathbf{Q}, \pm\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{1\mp t} \\ \pm\sqrt{1\pm t}\end{pmatrix}$. Sistem postaje skup dva nezavisna harmonijska oscilatora: $H = \hbar\omega_+(n_+ + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_-(n_- + \frac{1}{2})$, sa koordinatnom reprezentacijom svojstvenih vektora $\Psi_{n_+,n_-}(Q_+, Q_-) = \psi_{n_+}(Q_+)\psi_{n_-}(Q_-)$ (Hermite-ove funkcije normalnih koordinata $Q_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q\sqrt{1\mp t} \pm q\sqrt{1\pm t})$).

U adijabatskom metodu rada se za svako Q razmatra hamiltonijan

$$H_q(Q) = \frac{p^2}{2m} + \alpha Q^2 + \beta Q q + \gamma q^2 = \frac{p^2}{2m} + \gamma(q + \frac{\beta}{2\gamma}Q)^2 + (\alpha - \frac{\beta^2}{4\gamma})Q^2$$

(Q sada nije operator). Uz oznake $\eta = \sqrt{\frac{\sqrt{2\gamma m}}{\hbar}}q$, $\xi = \frac{\beta}{2\gamma}\sqrt{\frac{\sqrt{2\gamma m}}{\hbar}}Q$ i $\omega = \sqrt{\frac{2\gamma}{m}}$ odgovarajući svojstveni problem ima rešenja $\epsilon_n(Q) = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) + (\alpha - \frac{\beta^2}{4\gamma})Q^2$, $< q|\, n, Q\, \rangle = \psi_n(\eta+\xi)$. Za različite Q svojstveni vektori nisu ortogonalni, već je $< n', Q'|\, n, Q\, \rangle = \sqrt{\frac{n'!2^n}{n!2^{n'}}}\xi'^{n-n'}L_{n'}^{n-n'}(-2\xi\xi')$ (uopšteni Laguerre-ov polinom).

Tako je matrični element ukupnog hamiltonijana u adijabatskom bazisu

$$H_{n',n}(Q',Q) = \delta_n^{n'}\{\delta(Q-Q')(\epsilon_n(Q) - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\delta(Q-Q')}{\partial Q}\}+$$

$$\delta_n^{n'}\delta(Q-Q')\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\beta^2}{4\gamma^2}\frac{\sqrt{2m\gamma}}{\hbar}(n+\frac{1}{2})+$$

$$\frac{\hbar^2}{M}\frac{\beta}{2\gamma}\sqrt{\frac{\sqrt{2m\gamma}}{\hbar}}(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n-1}^{n'} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n+1}^{n'})-$$

$$\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\beta^2}{4\gamma^2}\frac{\sqrt{2m\gamma}}{\hbar}\delta(Q-Q')(\frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}\delta_{n-2}^{n'} + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}\delta_{n+2}^{n'}).$$

Prva dva reda su dijagonalna u adijabatskom bazisu. Prvi se uzima kao osnovni hamiltonijan, a drugi kao pertubacija, a zajedno daju odsečak adijabatskog hamiltonijana u sloju $\boldsymbol{H}_n$. Ostali članovi imaju u ovom sloju nulte odsečke. Obratiti pažnju da član sa prvim izvodima po Q u oba prostora nema odsečka u ovom sloju, tj. ne utiče ni pri perturbacionom računu.

Konačno, rešenja osnovnog hamiltonijana su $E_{nN} = \hbar\Omega(N+\frac{1}{2})+\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ ($\Omega = \sqrt{\frac{2}{M}(\alpha - \frac{\beta^2}{4\gamma})}$). Iz koeficijenata uz odbačene članove se vidi da je aproksimacija dobra za veliku razliku masa, kao i da adijabatska popravka zadovoljava isti uslov. Ukoliko je to ispunjeno, razlike u nivoima teškog oscilatora su znatno manje od razlika u nivoima lakog, te se i na taj način, a posteriori, može opravdati metod.

Zadatak 49 *Neka je AB dvoatomski molekul. Odrediti moguće σ i π molekularne orbitale nastale od atomskih orbitala za $|\, X, n_X l_X m_X\, \rangle$ (X=A,B) za $l_X = 0, 1$, i odredjene vrednosti n_A i n_B.*

Poznato je da su za grupu $\boldsymbol{C}_{\infty v} = \boldsymbol{C}_\infty + \sigma_x \boldsymbol{C}_\infty$, ireducibilne reprezentacije A_0, B_0 i E_m. Redukcija relevantnih reprezentacija grupe $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ je $D^{(0+)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R})) \downarrow \boldsymbol{C}_{\infty v} = A_0(\boldsymbol{C}_{\infty v})$ i $D^{(1-)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R})) \downarrow \boldsymbol{C}_{\infty v} = A_0(\boldsymbol{C}_{\infty v}) + E_1(\boldsymbol{C}_{\infty v})$. Pri tome je standardni bazis za redukciju u poslednjem slučaju upravo bazis Dekart-ovih ortova (a e_z je bazisni vektor za A_0).

Svaki atom je jedna orbita dejstva grupe, tj. permutaciona reprezentacija je I_2 za sve elemente grupe, pa se atomske orbitale sa svakog atoma uzimaju nezavisno (u slučaju dvoatomskog molekula sa istim atomima u $\boldsymbol{H}^{AO}$ ulaze iste atomske orbitale oba atoma). Stoga je ukupna reprezentacija u $\boldsymbol{H}^{AO}$ direktni zbir reprezentacija D_A i D_B po kojima se transformišu orbitale sa atoma A i B. Na taj način uslovi zadatka sa stanovišta simetrije dozvoljavaju mogućnosti date u tabeli 6.2.

Umesto standardnih orbitala sfernih harmonika korišćene su njihove realne linearne kombinacije $|\, n1x, E1\, \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\, n11\, \rangle + |\, n1-1\, \rangle)$ i $|\, n1y, E1\, \rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(|\, n11\, \rangle - |\, n1-1\, \rangle)$, koje

Tabela 6.2: Orbitale molekula AB.

$(D_A(\mathrm{O}(3,\mathbb{R}))\oplus$	$D_B(\mathrm{O}(3,\mathbb{R})))\downarrow \boldsymbol{C}_{\infty v} =$	$D^{\sigma}_{AB}\oplus$	D^{π}_{AB}
$D^{(0+)}$ $\mid n_A 00, A\rangle$	$D^{(0+)}$ $\mid n_B 00, A\rangle$	$2A_0$ (α,β)	
$D^{(0+)}$ $\mid n_A 00, A\rangle$	$D^{(1-)}$ $\mid n_B 1x, E1\rangle$ $\mid n_B 1y, E2\rangle$ $\mid n_B 1z, A\rangle$	$2A_0+$ $(\alpha,0,0,\beta)$	E_1 $(0,\gamma,\delta,0)$
$D^{(0+)}$ $\mid n_A 00, A\rangle$	$D^{(0+)}+D^{(1-)}$ $\mid n_B 00, A\rangle$ $\mid n_B 1x, E1\rangle$ $\mid n_B 1y, E2\rangle$ $\mid n_B 1z, A\rangle$	$3A_0+$ $(\alpha,\beta,0,0,\gamma)$	E_1 $(0,0,\delta,\varepsilon,0)$
$D^{(1-)}$ $\mid n_A 1x, E1\rangle$ $\mid n_A 1y, E2\rangle$ $\mid n_A 1z, A\rangle$	$D^{(1-)}$ $\mid n_B 1x, E1\rangle$ $\mid n_B 1y, E2\rangle$ $\mid n_B 1z, A\rangle$	$2A_0+$ $(0,0,\alpha,0,0,\beta)$	$2E_1$ $(\gamma,\delta,0,\delta,\varepsilon,0)$
$D^{(1-)}$ $\mid n_A 1x, E1\rangle$ $\mid n_A 1y, E2\rangle$ $\mid n_A 1z, A\rangle$	$D^{(0+)}+D^{(1-)}$ $\mid n_B 00, A\rangle$ $\mid n_B 1x, E2\rangle$ $\mid n_B 1y, A\rangle$ $\mid n_B 1z, A\rangle$	$3A_0+$ $(0,0,\alpha,\beta,0,0,\gamma)$	$2E_1$ $(\delta,\varepsilon,0,0,\eta,\phi,0)$
$D^{(0+)}+D^{(1-)}$ $\mid n_A 00, A\rangle$ $\mid n_A 1x, E1\rangle$ $\mid n_A 1y, E2\rangle$ $\mid n_A 1z, A\rangle$	$D^{(0+)}+D^{(1-)}$ $\mid n_B 00, A\rangle$ $\mid n_B 1x, E1\rangle$ $\mid n_B 1y, E2\rangle$ $\mid n_B 1z, A\rangle$	$4A_0+$ $(\alpha,0,0,\beta,\gamma,0,0,\delta)$	$2E_1$ $(0,\varepsilon,\eta,0,0,\phi,\chi,0)$

odgovaraju standardnom bazisu realne reprezentacije E_1. U poslednjoj koloni tabele su navedeni vektori koji se transformišu po odgovarajućoj reprezentaciji, i to u bazisu $\boldsymbol{H}^{AO}$ iz prve dve kolone (u redosledu pojavljivanja). Metod grupnih projektora nije nužno primeniti, jer su reprezentacije u već redukovanoj formi. Uočava se da u molekularnim orbitalama pri izgradnji σ-veze mogu učestvovati atomske orbitale sa različitim l istog atoma (u slučajevima kada je reprezentacija orbitala tog atoma $D^{(0+)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R}))+D^{(1-)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R}))$). Ovo se naziva *hibridizacija atomskih orbitala*.

Zadatak 50 *Odrediti moguće σ i π molekularne orbitale nastale od atomskih orbitala za $l=0,1$ dvoatomskog molekula sa jednakim atomima, A_2.*

U grupi $\mathbf{D}_{\infty h}$ grupa $\boldsymbol{C}_\infty$ je podgrupa indeksa 4, i razlaganje na kosete je: $\mathbf{D}_{\infty h}=\boldsymbol{C}_\infty+\sigma_x\boldsymbol{C}_\infty+\sigma_h\boldsymbol{C}_\infty+\sigma_h\sigma_x\boldsymbol{C}_\infty$. Stoga je reprezentacije grupe dovoljno zadati za podgrupu, σ_x i σ_h,

Tabela 6.3: Orbitale molekula A_2. $c = \cos(\phi)$, $s = \sin(\phi)$.

D	$R(\phi)$	σ_x	σ_h	Razlaganje
D^P	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$A_0^+ + A_0^-$
D_1	1	1	1	A_0^+
D_2	$\begin{pmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$A_0^- + E_1^+$
D_3	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & -s & 0 \\ 0 & s & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$A_0^+ + A_0^- + E_1^+$

što će u daljem tekstu biti učinjeno.

Funkcional usrednjavanja je:

$$G(f) = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} (f(R(\phi)) + f(\sigma_x R(\phi)) + f(\sigma_h R(\phi)) + f(\sigma_h \sigma_x R(\phi)))\, d\phi,$$

pa je izraz za grupne projektore:

$$P_l^{(\mu)} = \frac{n_\mu}{8\pi} \int_0^{2\pi} (d_{l1}^{(\mu)*}(R(\phi)) D(R(\phi)) + d_{l1}^{(\mu)*}(\sigma_x R(\phi)) D(\sigma_x R(\phi)) +$$

$$d_{l1}^{(\mu)*}(\sigma_h R(\phi)) D(\sigma_h R(\phi)) + d_{l1}^{(\mu)*}(\sigma_h \sigma_x R(\phi)) D(\sigma_h \sigma_x R(\phi)))\, d\phi.$$

Zbog simetrije je jasno da se pri konstrukciji molekularne od atomskih orbitala, uzimaju iste orbitale oba atoma, tako da su mogući samo slučajevi $l_A = l_B = 0$, $l_A = l_B = 1$ a hibridizacijom se dozvoljava i kombinacija ovih slučajeva: $l_A = 0, 1$, $l_B = 0, 1$. Prema tome, ukupan prostor $\boldsymbol{H}^{AO}$ je u gornjim slučajevima direktni zbir $\boldsymbol{H}_1 \oplus \boldsymbol{H}_2$, gde su sabirci jednaki i u stvari su prostori reprezentacije D grupe $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$, gde je D jednako $D^{(0+)}$, $D^{(1-)}$ i $D^{(0+)} \oplus D^{(1-)}$, respektivno. Subdukcijom na $\mathbf{D}_{\infty h}$, nalazi se $D^{(0+)}(\mathrm{O}(3, \mathbb{R})) \downarrow \mathbf{D}_{\infty h} = A_0^+$, $D^{(1-)}(\mathrm{O}(3, \mathbb{R})) \downarrow \mathbf{D}_{\infty h} = A_0^- + E_1^+$, pa je u navedenim slučajevima $D_1 = A_0^+$, $D_2 = A_0^- + E_1^+$ i $D_3 = A_0^+ + A_0^- + E_1^+$.

Dejstvo grupe u $\boldsymbol{H}^{AO}$ je direktni proizvod permutacionog dejstva D^P i reprezentacije D. Tako se nalaze rezultati dati u tabeli 6.3. Matrice u reprezentacijama D_i^{AO} su, kao što je rečeno, direktni proizvodi $D^P \otimes D_i$, i lako se nalaze. Razlaganje ovih reprezentacija je: $D_1^{AO} = A_0^+ + A_0^-$, $D_2^{AO} = A_0^+ + A_0^- + E_1^+ + E_1^-$, $D_3^{AO} = 2A_0^+ + 2A_0^- + E_1^+ + E_1^-$.

Da bi se po simetriji klasifikovale molekularne orbitale, koriste se grupni projektori.

Reprezentacija D_1:

$$P_1^{A_0^+} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad P_1^{A_0^-} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix};$$

dve σ-orbitale (u bazisu $\{|\, n_1 000\,\rangle, |\, n_2 000\,\rangle\}$): $\sigma^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$, $\sigma^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)$.

Reprezentacija D_2:

$$P_2^{A_0^+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&\frac12&0&0&-\frac12\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&-\frac12&0&0&\frac12\end{pmatrix},\quad P_2^{A_0^-}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&\frac12&0&0&\frac12\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&\frac12&0&0&\frac12\end{pmatrix},$$

$$P_{2,1}^{E_1^+}=\begin{pmatrix}\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix},\quad P_{2,2}^{E_1^+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0\\\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$P_{2,1}^{E_1^-}=\begin{pmatrix}\frac12&0&0&-\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\-\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix},\quad P_{2,2}^{E_1^-}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0\\\frac12&0&0&-\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\-\frac12&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix};$$

u bazisu $\{|\ n_1 1x\ \rangle, |\ n_1 1y\ \rangle, |\ n_1 1z\ \rangle, |\ n_2 1x\ \rangle, |\ n_2 1y\ \rangle, |\ n_2 1z\ \rangle\}$ molekularne orbitale:
$|\ n_1 n_2 \sigma^{\pm}\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,1,0,0,\mp 1)$, $|\ n_1 n_2 \pi^{\pm}, 1\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,0,\pm 1,0,0)$,
$|\ n_1 n_2 \pi^{\pm}, 2\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,0,0,\pm 1,0)$.

Reprezentacija D_3:

$$P_3^{A_0^+}=\begin{pmatrix}\frac12&0&0&0&\frac12&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&\frac12&0&0&0&-\frac12\\\frac12&0&0&0&\frac12&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&-\frac12&0&0&0&\frac12\end{pmatrix},\quad P_3^{A_0^-}=\begin{pmatrix}\frac12&0&0&0&-\frac12&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&\frac12&0&0&0&\frac12\\-\frac12&0&0&0&\frac12&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&\frac12&0&0&0&\frac12\end{pmatrix},$$

$$P_{3,1}^{E_1^+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0&0&0\\0&\frac12&0&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&\frac12&0&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix},\quad P_{3,2}^{E_1^+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&\frac12&0&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\\0&\frac12&0&0&0&\frac12&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$P_{3,1}^{E_1^-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_{3,2}^{E_1^-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

molekularne orbitale u bazisu

$$\{\mid n_1 00\,\rangle, \mid n_1 1x\,\rangle, \mid n_1 1y\,\rangle, \mid n_1 1z\,\rangle, \mid n_2 00\,\rangle, \mid n_2 1x\,\rangle, \mid n_2 1y\,\rangle, \mid n_2 1z\,\rangle\}:$$

$$\mid n_1 n_2 \sigma^{\pm}\,\rangle = (\alpha, 0, 0, \beta, \pm\alpha, 0, 0, \mp\beta), \mid n_1 n_2 \pi^{\pm}, 1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, 0, 0, 0, \pm 1, 0, 0),$$

$$\mid n_1 n_2 \pi^{\pm}, 2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 1, 0, 0, 0, \pm 1, 0).$$

Treba zapaziti da u poslednjem slučaju σ-orbitale dozvoljavaju hibridizaciju, tj. mešaju se atomske orbitale istog atoma sa različitim l.

Zadatak 51 *Odrediti molekularne orbitale molekula sa tri jednaka atoma u temenima jednakostraničnog trougla. Smatrati da su molekularne orbitale linearne kombinacije atomskih s orbitala ($l = 0$).*

Tačkasta grupa simetrije molekula je $\boldsymbol{D}_{3h}$, no za ovu analizu je dovoljna $\boldsymbol{C}_{3v}$. Molekul je jedna orbita ove grupe, a s orbitale se transformišu po jediničnoj reprezentaciji $A(\boldsymbol{C}_{3v})$, tako da se D^{AO} svodi na permutacionu reprezentaciju.

D	C_3^s	$\sigma_1 C_3$	Razlaganje
D^P	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^s$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$A_0 + E$

Odgovarajući grupni operatori i molekularne orbitale u bazisu $\{\mid i, A\,\rangle | i = 1, 2, 3\}$, gde je $\mid i, A\,\rangle$ s orbitala i-tog atoma, su:

$$P^A = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \; P_1^E = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \; P_2^E = \frac{\sqrt{3}}{6}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & -1 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mid A\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)^T, \; \mid E, 1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2, -1, -1)^T, \; \mid E, 2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1)^T.$$

Iz razlaganja se vidi da će se pojaviti dva energetska nivoa, od kojih je jedan degenerisan. Najopštiji oblik matrice iz prostora atomskih orbitala koja komutira sa generatorima, pa time i sa celom grupom je $H = \begin{pmatrix} \varepsilon & a & a \\ a & \varepsilon & a \\ a & a & \varepsilon \end{pmatrix}$, pa modelni hamiltonijan prilagodjen simetriji mora biti predstavljen takvom hermitskom matricom (tj. a je realan broj). Ovo je u skladu sa intuitivnom slikom: ε je energija atomske orbitale (pre vezivanja u molekul), a vandijagonalni elementi potiču od interakcije orbitala, odnosno uticaja dodatnih jona (moraju biti medjusobno jednaki zbog simetričnog rasporeda atoma). Kako se ireducibilne reprezentacije javljaju samo po jedanput, standardni bazis je i svojstveni, te se delovanjem na njegove vektore nalaze svojstvene vrednosti: $E_A = \varepsilon + 2a$ i $E_E = \varepsilon - a$.

Zadatak 52 *Analizirati orbitale molekula vode, smatrajući ih za linearne kombinacije nepopunjenih atomskih orbitala.*

Grupa simetrije je $\boldsymbol{C}_{2v}$, a molekul se sastoji od dve orbite, $\{H_1, H_2\}$ i $\{O\}$, ove grupe. Za njih se atomske orbitale mogu birati nezavisno. Elektronske konfiguracije atoma vodonika i kiseonika su poznate, tako da u izgradnji hemijske veze u najgrubljoj aproksimaciji metoda MOLCAO učestvuju $\mid H_1, n=1, l=0, m=0\,\rangle, \mid H_2, 100\,\rangle, \mid O, 21i\,\rangle$ gde su i kvantni brojevi $m = 0, \pm 1$, ili, što će u nastavku biti korišćeno Dekart-ove koordinate $i = x, y, z$ (tj. podrazumevaju se realne linearne kombinacije sfernih harmonika). Tako je prostor stanja $\mathcal{H}^{AO}$ petodimenzionalan. Reprezentacija u $\mathcal{H}^{AO}$ je data matricama $D^{AO}(e) = I_5$, i za C_2, σ_x, σ_y (atomi vodonika su na x-osi) redom:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Razlaganje na ireducibilne reprezentacije daje $D^{AO} = 2A_0 + 2A_1 + B_1$, uz odgovarajuće grupne projektore $P^{A_0}, P^{A_1}, P^{B_1}$:

$$P^{A_0} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} P^{A_1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ (P^{B_1})_{ij} = \delta_{i4}\delta_{j4}.$$

Opšti oblik hermitske matrice koja komutira sa reprezentacijom D^{AO} se nalazi iz uslova komutacije sa generatorima C_2 i σ_x (ako komutira sa reprezentima generatora, komutira i sa celom reprezentacijom):

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_H & b & c & 0 & e \\ b & \varepsilon_H & -c & 0 & e \\ c^* & -c^* & \varepsilon_O & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_O & 0 \\ e^* & e^* & 0 & 0 & \varepsilon_O \end{pmatrix}.$$

U stvari, uslov komutacije dozvoljava da poslednja tri dijagonalna elementa budu različiti, no kako se može uzeti da su atomske orbitale sa istim n i l degenerisane, izvršeno je izjednačavanje iz fizičkih razloga (različitost je omogućena činjenicom da se reprezentacija $D^{(1,-)}(\mathrm{O}(3,\mathbb{R}))$, nakon sužavanja na $\boldsymbol{C}_{2v}$, redukuje na jednodimenzionalne). Sada se mogu naći redukovani hamiltonijani $P_1^{(\mu)}H$ i rešiti njihov svojstveni problem. Rezultati su (vektori su nenormirani): $E_{B_1} = \varepsilon_O$, $\mid B_1 \rangle = (0,0,0,1,0)^T$,

$$E_{A_0\pm} = \frac{1}{2}(\varepsilon_H + \varepsilon_O + b \mp \sqrt{(\varepsilon_H + \varepsilon_O + b)^2 + 8ee^*}),\ E_{A_1\pm} = \frac{1}{2}(\varepsilon_H + \varepsilon_O - b \mp \sqrt{(\varepsilon_H - \varepsilon_O - b)^2 + 8cc^*}),$$

$$\mid A_0, \pm \rangle = (1,1,0,0,\mp\frac{1}{2e}(\sqrt{(\varepsilon_H - \varepsilon_O + b)^2 + 8|e|^2} \pm (\varepsilon_H - \varepsilon_O + b)))^T,$$

$$\mid A_1, \pm \rangle = (1,-1,\mp\frac{1}{2c}(\sqrt{(\varepsilon_H - \varepsilon_O - b)^2 + 8|e|^2} \pm (\varepsilon_H - \varepsilon_O - b)),0,0)^T.$$

Zadatak 53 *Objasniti različite hemijske veze šestougaonog benzenovog prstena atoma ugljenika (April 1993.).*

Zadatak 54 *Odrediti elektronske nivoe molekula sa slike 6.1 u okviru metoda MOLCAO, pri čemu svaki atom učestvuje u izgradnji molekularne orbitale svojom atomskom orbitalom* 1*s (Januar 1994.).*

Dodatak A

PREGLED TEORIJE GRUPA

Dat je pregled osnovnih korišćenih pojmova teorije grupa i reprezentovanja. Ozbiljnije upoznavanje sa teorijom zahteva korišćenje specijalizovane literature [5, 13, 12, 11].

A.1 Opšta teorija

A.1.1 Definicija

Grupa je algebarska struktura odredjena nepraznim skupom G i operacijom množenja njegovih elemenata. Množenje je zatvoreno, asocijativno, ima jedinstveni neutralni element e, i svakom elementu g jednoznačno dodeljuje njemu inverzni element g^{-1}. Grupa je Abelova, ako za njene proizvoljne elemente važi $gh = hg$. Za svaki element $g \in G$ važi $gG \stackrel{\text{def}}{=} \{gh|h \in G\} = G$ i $Gg = G$ (*lema preuredjenja*).

Red grupe, $|G|$, je broj elemenata u skupu G. U konačnoj grupi (konačnog reda) postoje minimalni skupovi elemenata, tzv. *generatora grupe*, čiji monomi daju sve ostale elemente grupe. Osobine množenja su odredjene na ovakvom skupu *generatorskim relacijama*. U *cikličnoj grupi* su svi elementi stepeni jednog generatora. Najmanji prirodni broj n za koji je $g^n = e$, naziva se *red elementa* grupe.

A.1.2 Lijeve grupe

Lijeva grupa je istovremeno i glatka mnogostrukost, pri čemu su množenje i inverzija glatka preslikavanja sa $G \times G$, odnosno G, na G. *Lijeva algebra* grupe je tangentni prostor jediničnog elementa grupe sa množenjem koje je antisimetrično, bilinearno i zadovoljava Jakobijev identitet (zbir ciklično permutovanih proizvoda bilo koja tri elementa je 0). Vektori ove algebre, *generatori grupe*, eksponencijalnim preslikavanjem generišu strukturu grupe na datoj mnogostrukosti [5, 13].

Neka je za svako realno t definisan element $g(t)$ Lijeve grupe G, i pri tome važi $g(0) = e$ i $g(t)g(s) = g(t + s)$. Skup svih ovakvih elemenata je *jednoparametarska podgrupa*, $g(t)$. Elementi Lijeve algebre, tj. generatori grupe, bijektivno su povezani sa jednoparametarskim podgrupama.

A.1.3 Podgrupe i morfizmi

Podgrupa H je podskup u G, koji je i sam grupa sa istom operacijom: $G < H$. Presek dve podgrupe je podgrupa. Podgrupa H je *invarijantna*, $H \triangleleft G$, ako za svaki element $g \in G$ važi $gH = Hg$. Grupa G je *prosta* ako osim $\{e\}$ i G nema drugih invarijantnih podgrupa, a *poluprosta* ako joj invarijantne podgrupe (osim $\{e\}$) nisu Abelove.

Levi (desni) *koset* podgrupe H sa predstavnikom g je skup gH (Hg). Skup svih koseta G/H se naziva *prostor koseta*. Koseti gH i $g'H$ su jednaki ako i samo ako je $g' \in gH$, a inače su disjunktni (isto važi i za desne kosete); $g'g^{-1}$ množenjem bijektivno preslikava koset gH u $g'H$, pa je $|gH| = |g'H|$. *Transferzala* grupe u odnosu na podgrupu je skup predstavnika različitih koseta, $\{t_1, t_2, \ldots\}$, i mada nije jednoznačna, daje jednoznačno razlaganje grupe na kosete: $G = t_1H + t_2H + \ldots$ (+ označava disjunktnu uniju). Broj elemenata u transverzali je *indeks* podgrupe, $\frac{|G|}{|H|}$. Očigledno, red podgrupe deli red grupe (*Lagranžov teorem*).

Centralizator skupa $S \subset G$ je podgrupa $Z(S)$, čiji elementi komutiraju sa svakim elementom iz S. *Centar grupe* je invarijantna podgrupa $Z(G)$; jednak je grupi ako i samo ako je grupa Abelova. *Normalizator* skupa $S \subset G$ je podgrupa $N(S)$, čiji elementi komutiraju sa skupom S: $N(S) = \{g \in G | \forall s \in S \quad \exists s' \in S : \quad gs = s'g\}$.

Homomorfizam grupe G u grupu G' je preslikavanje $G \xrightarrow{f} G'$ za koje je $f(gh) = f(g)f(h)$. $f(G)$ je podgrupa u G', dok je $\ker f \stackrel{\text{def}}{=} \{g \in G | f(g) = e'\}$ invarijantna podgrupa u G. Homomorfizam je *epimorfizam*, *monomorfizam* i *izomorfizam*, ako je surjekcija, injekcija i bijekcija. Homomorfizam i izomorfizam se u slučaju $G' = G$ nazivaju *endomorfizam* i *automorfizam*. Izomorfizam je relacija ekvivalencije medju grupama.

Svaki element g grupe odredjuje jedan *unutrašnji automorfizam* ili *konjugaciju* grupe G: $C_g a \stackrel{\text{def}}{=} gag^{-1}$. Elementi a i b iz grupe su *konjugovani* ako za neko $g \in G$ važi $b = gag^{-1}$. Konjugacija je relacija ekvivalencije, a skupovi medjusobno konjugovanih elemenata su *klase konjugacije*. Jednočlane klase konjugacije čine elementi centra grupe. Red klase je delitelj reda grupe. Proizvod dve klase konjugacije sastoji se od celih klasa.

Ako je $H \subset G$, konjugovani skup $gHg^{-1} = \{ghg^{-1} | h \in H\}$ je podgrupa ako i samo ako je $H < G$. Invarijantna podgrupa je jednaka konjugovanim podgrupama i sadrži cele klase konjugacije. Proizvod dva koseta invarijantne podgrupe $H \triangleleft G$ je ponovo koset, pa je prostor koseta G/H grupa, tzv. *faktor-grupa* (kod konačnih grupa njen red je jednak indeksu podgrupe H). Lik $f(G)$ homomorfizma je izomorfan faktor-grupi $G/\ker f$, pri čemu se celi koset podgrupe $\ker f$ preslikava u isti element grupe $f(G)$.

A.1.4 Grupe transformacija

Grupa G je *grupa transformacija* na skupu X ako postoji homomorfizam G u grupu automorfizama X (permutacije skupa X koje održavaju njegovu eventualnu strukturu), $g \mapsto \pi(g)$. Kaže se i da G deluje na X, ili da je skup X jedan G-prostor. x je *nepokretna tačka* transformacije g, ako je $\pi(g)x = x$. *Mala grupa* (*stabilizator, grupa izotropije*) tačke $x \in X$ je podgrupa svih elemenata u G čije dejstvo ostavlja x neizmenjenim: $G_x \stackrel{\text{def}}{=} \{g \in G | \pi(g)x = x\}$. *Orbita* tačke x je skup $\Omega_x \stackrel{\text{def}}{=} Gx = \{y \in X | \exists g \in G \quad \pi(g)x = y\}$. Orbite su disjunktne ili jednake, i daju particiju skupa X. Elementi jednog koseta male grupe elementa x preslikavaju x u istu tačku orbite. Male grupe elemenata iste orbite su medjusobno konjugovane, a skup orbita sa istim malim grupama naziva se *stratus*. Relacija parcijalnog poretka medju podgrupama daje delimično uredjenje orbita i stratusa. Ako je ceo skup X jedna orbita (tj. za svaka dva elementa $x, x' \in X$ postoji g takvo da je $\pi(g)x = x'$), kaže se da grupa G deluje *tranzitivno* na X. Dejstvo je *efektivno*, odnosno *slobodno*, ako je π izomorfizam, odnosno, ako je ceo X stratus sa malom grupom $\{e\}$.

A.1.5 Proizvodi grupa

Direktni spoljašnji proizvod grupa G i G' je Dekartov proizvod $G \times G'$ u kome je množenje $(g_1, g_1')(g_2, g_2') \stackrel{\text{def}}{=} (g_1 g_2, g_1' g_2'), \quad \forall (g_1, g_1'), (g_2, g_2') \in G \times G'$; to je grupa reda $|G \times G'| = |G||G'|$. Klase u $G \times G'$ su direktni proizvodi po jedne klase iz G i iz G', pa je njihov broj jednak proizvodu brojeva klasa u G i G'.

Proizvod dve podgrupe $H, K < G$ je podgrupa ako one komutiraju, tj. $HK = KH$. Grupa G je *proizvod* svojih podgrupa H i K, ako važi $G = HK$. Proizvod je *slabi direktni*, ako je $H \cap K = e$, a *semidirektni*, $G = H \wedge K$, odnosno *unutrašnji direktni*, $G = H \otimes K$, ako je dodatno $H \triangleleft G$, odnosno $H, K \triangleleft G$. Uslov $G = HK$ povlači da za svaki element $g \in G$ postoje faktori $h \in H$ i $k \in K$ takvi da je $g = hk$, a uslov $H \cap K = e$ obezbedjuje jednoznačnost faktora.

A.2 Teorija reprezentovanja

A.2.1 Definicija

Reprezentacija grupe G u n-dimenzionalnom vektorskom prostoru $\mathcal{H}(F)$ je homomorfizam D grupe G u grupu $\mathrm{GL}(n, F)$. Reprezentacija je realna (kompleksna) ako je $F = \mathbb{R}$ ($F = \mathbb{C}$). Prostor i dimenzija reprezentacije su $\mathcal{H}(F)$ i n. Reprezentacija $D(G)$ u prostoru $\mathcal{H}(F)$ *ekvivalentna* je reprezentaciji $D'(G)$ u prostoru $\mathcal{H}'(F)$, ako postoji nesingularni operator $A : \mathcal{H}(F) \to \mathcal{H}'(F)$ takav da je za svaki element g grupe $D'(g) = AD(g)A^{-1}$. Ako je D monomorfizam, kaže se da je reprezentacija *verna*.

Neka je jednoparametarska podgrupa $g(t)$ Lijeve grupe G odredjena generatorom l i $D(G)$ neka reprezentacija grupe. Tada je $D(l) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial D(g(t))}{\partial t}|_{t=0}$ operator pridružen elementu Lijeve algebre, i skup svih takvih operatora je reprezentacija algebre. Pri tome je $D(g(t)) = e^{tD(l)}$.

Jedinična reprezentacija proizvoljne grupe je homomorfizam $I(G) = 1$. Matrična grupa je svoja verna reprezentacija: tzv. *identična reprezentacija*. *Regularna reprezentacija* (leva) grupe $G = \{g_1, \ldots, g_{|G|}\}$ je definisana permutacionim matricama $D^R_{ij}(g_k) = \delta(g_i g_j^{-1}, g_k)$. Reprezentacija je *unitarna* (*ortogonalna*) ako je $D(G)$ podgrupa u $\mathrm{U}(n)$ ($\mathrm{O}(n, \mathbb{R})$). Šur-Auerbahov teorem: svaka reprezentacija kompaktne grupe u euklidskom (unitarnom) prostoru ekvivalentna je ortogonalnoj (unitarnoj) .

A.2.2 Reducibilnost

$D(G)$ je *reducibilna reprezentacija* ako u $\mathcal{H}(F)$ postoji netrivijalni potprostor $\mathcal{H}'(F)$ invarijantan za sve operatore reprezentacije. Kod *ireducibilne reprezentacije* takav potprostor ne postoji. Jednodimenzionalne reprezentacije su ireducibilne. Reprezentacija je *razloživa* ako postoji dekompozicija $\mathcal{H}(F)$ na invarijantne potprostore $\mathcal{H}(F) = \oplus_i \mathcal{H}_i(F)$; u adaptiranom bazisu $D(g)$ je tada blok-dijagonalna matrica: blokovi $D_i(g)$ su i sami reprezentacije grupe, te je $D(G)$ direktni zbir $\oplus_i D_i(G)$. Svaka reducibilna reprezentacija kompaktne grupe je razloživa (Maškeov (*Masche*) teorem), pa se kod takvih grupa svaka reducibilna reprezentacija može izraziti preko ireducibilnih: $D(G) = \oplus_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$. Broj neekvivalentnih ireducibilnih reprezentacija konačne grupe jednak je broju klasa konjugacije.

Matrica koja komutira sa svim matricama jedne ireducibilne reprezentacije $D^{(\mu)}(G)$ je skalarna (prva Šurova lema). Sve ireducibilne reprezentacije Abelovih grupa su jednodimenzionalne. U ireducibilnoj reprezentaciji elementima centra grupe odgovaraju skalarne matrice. Ako su $D^{(\mu)}(G)$ i $D^{(\nu)}(G)$ dve neekvivalentne ireducibilne reprezentacije, pravougaona matrica M koja za svaki element grupe zadovoljava uslov $MD^{(\mu)}(g) = D^{(\nu)}(g)M$, mora biti nulta matrica (druga Šurova lema). Skup vektora dobijen dejstvom reprezentacije grupe na proizvoljni nenulti vektor ireducibilnog potprostora, obrazuje taj potprostor.

Ako je skup matričnih unitarnih neekvivalentnih ireducibilnih reprezentacija kompaktne grupe G zadat, važe *relacije ortogonalnosti*:

$$\frac{1}{\mid G \mid} \sum_{g \in G} d_{ji}^{(\mu)*}(g) d_{km}^{(\nu)}(g) = \frac{1}{n_\nu} \delta_{jk} \delta_{im} \delta_{\mu\nu}.$$

A.2.3 Karakteri

Karakter reprezentacije $D(G)$ je funkcija na grupi koja svakom elementu dodeljuje broj $\chi(g) \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}(D(g))$. Dimenzija reprezentacije jednaka je karakteru jediničnog elementa. Reprezentacije su ekvivalenetne ako i samo ako imaju jednake karaktere. Elementi iste klase konjugacije imaju iste karaktere. Važe relacije ortogonalnosti za karaktere ireducibilnih reprezentacija:

$$\frac{1}{\mid G \mid} \sum_{g \in G} \chi^{(\mu)*}(g) \chi^{(\nu)}(g) = \delta_{\mu\nu}.$$

Karakter reducibilne reprezentacije $D(G)$ jednak je sumi karaktera reprezentacija na koje se $D(G)$ može razložiti: ako je $D(G) = \oplus_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$, onda je $\chi(G) = \sum_\mu a_\mu \chi^{(\mu)}(G)$, a

$$a_\mu = \frac{1}{\mid G \mid} \sum_g \chi^{(\mu)*}(g) \chi(g).$$

Reprezentacija je ireducibilna ako i samo ako je $\frac{1}{|G|} \sum_g \chi^*(g) \chi(g) = 1$.

A.2.4 Standardni bazis i grupni projektori

Prostor $\mathcal{H}$ reprezentacije $D(G)$ razlaže se u formi $\mathcal{H} = \oplus_\mu^s \mathcal{H}^{(\mu)}$, gde su $\mathcal{H}^{(\mu)} \stackrel{\text{def}}{=} \oplus_{t_\mu}^{a_\mu} \mathcal{H}^{(\mu t_\mu)}$ višestruki ireducibilni potprostori. *Standardni bazis* $\{|\ \mu t_\mu m\ \rangle | \mu = 1, \dots, s; t_\mu = 1, \dots, a_\mu; m = 1, \dots, n_\mu\}$ u $\mathcal{H}$ je bazis u kome je $D(G)$ blok-dijagonalno, sa unapred zadatim matricama ireducibilnih reprezentacija grupe:

$$D(g)|\ \mu t_\mu m\ \rangle = \sum_{m'} D^{(\mu)}_{m'm}(g)|\ \mu t_\mu m'\ \rangle.$$

Grupni operatori,

$$P^{(\mu)}_{mm'} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_\mu}{|G|} \sum_{g \in G} d^{(\mu)*}_{mm'}(g) D(g) = \sum_{t_\mu} |\ \mu t_\mu m\ \rangle\langle\ \mu t_\mu m'\ |,$$

su za $m = m'$ projektori na potprostore $\mathcal{H}^{(\mu)}_m \stackrel{\text{def}}{=} \text{span}\{|\ \mu t_\mu m\ \rangle | t_\mu = 1, \dots, a_\mu\}$. Projektor na potprostor $\mathcal{H}^{(\mu)}$ je $P^{(\mu)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_\mu}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\mu)*}(g) D(g)$.

A.2.5 Proizvodi

Direktni proizvod reprezentacija $D'(G)$ i $D''(G)$ je reprezentacija $\{D(g) \stackrel{\text{def}}{=} D'(g) \otimes D''(g) | g \in G\}$ u prostoru $\mathcal{H}' \otimes \mathcal{H}''$, sa karakterom $\chi(g) = \chi'(g)\chi''(g)$. Klebš-Gordanova serija je razlaganje direktnog proizvoda dve ireducibilne reprezentacije na ireducibilne komponente, i odredjuje za grupu karakteristične koeficijente $a^{\mu\nu}_\lambda$ u izrazu $D^{(\mu)}(G) \otimes D^{(\nu)}(G) = \oplus_\nu a^{\mu\nu}_\lambda D^{(\lambda)}(G)$. Klebš-Gordanovi koeficijenti su elementi matrice prelaska iz nekorelisanog proizvoda bazisa $\{|\ \mu m\ \rangle\}$ i $\{|\ \nu n\ \rangle\}$ u $\mathcal{H}^{(\mu)}$ i $\mathcal{H}^{(\nu)}$ u standardni bazis $\{|\ \mu\nu\lambda t_\lambda l\ \rangle\}$ prostora $\mathcal{H}^{(\mu)} \otimes \mathcal{H}^{(\nu)}$. Za ortonormirane bazise to su skalarni proizvodi $\langle\ \mu\nu\lambda t_\lambda l |\ \mu m, \nu n\ \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle\ \lambda t_\lambda l |\ \mu m\ \rangle \otimes |\ \nu n\ \rangle$; jednoznačno su (do na fazni faktor) odredjeni samo ako su koeficijenti Klebš-Gordanove serije $a^{\mu\nu}_\lambda$ manji od 2 (tj. ili 0 ili 1).

Ako je $\{|\ i\ \rangle\}$ bazis prostora $\mathcal{H}$ reprezentacije $D(G)$ grupe G, može se konstruistati $n-$ti direktni stepen reprezentacije: to je reprezentacija $D^n(G)$ definisana u prostoru $\underbrace{\mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_{n}$ delovanjem na vektore bazisa $D^n(g)(|\ i_1\ \rangle \dots |\ i_n\ \rangle) = (D(g)|\ i_1\ \rangle) \dots (D(g)|\ i_n\ \rangle)$. U istom prostoru je reprezentacija $\Delta(S_n)$ simetrične grupe S_n data izrazom $\Delta(\pi)(|\ i_1\ \rangle \dots |\ i_n\ \rangle) = |\ i_{\pi 1}\ \rangle \dots |\ i_{\pi n}\ \rangle$. Reprezentacija Δ nije ireducibilna (osim za $n = 1$), a njeni ireducibilni potprostori su invarijantni za operatore $D(G)$. Stoga se u njima $D(G)$ redukuje; redukovane repreprezentacije u simetričnom i antisimetričnom potprostoru grupe S_n (tj. u višestrukim ireducibilnim potprostorima jedinične i alternirajuće reprezentacije grupe S_n) nazivaju se *simetrični* i *antisimetrični* stepen reprezentacije $D(G)$ (oznake su $[D^n(G)]$ i $\{D^n(G)\}$, ili $[D^n(G)]_\pm$). Karakteri ovih reprezentacija, za stepene 2, 3 i 4 su [8]:

$$[\chi^2(g)]_\pm = \frac{1}{2}\chi^2(g) \pm \frac{1}{2}\chi(g^2), \quad [\chi^3(g)]_\pm = \frac{1}{6}\chi^3(g) \pm \frac{1}{2}\chi(g)\chi(g^2) + \frac{1}{3}\chi(g^3),$$

$$[\chi^4(g)]_\pm = \frac{1}{24}\chi^4(g) \pm \frac{1}{4}\chi^2(g)\chi(g^2) + \frac{1}{8}\chi^2(g^2) + \frac{1}{3}\chi(g^3)\chi(g) \pm \frac{1}{4}\chi(g^4).$$

A.2.6 Suženje

Restrikcija reprezentacije D grupe G na njenu podgrupu H je *sužena reprezentacija* podgrupe H: $D(G) \downarrow H$. Ova reprezentacija ne mora biti ireducibilna ni kada je $D(G)$ ireducibilna: $D^{(\mu)}(G) \downarrow H = \oplus a_\nu^\mu D^{(\nu)}(H)$ (*relacije kompatibilnosti* ireducibilnih reprezentacija grupe i podgrupe).

A.2.7 Projektivne reprezentacije

Projektivna reprezentacija $D(G)$ sa *faktor-sistemom* (ili *multiplikatorima*) $\{f(g,g') \in \mathbb{C} \,|\, g,g' \in G\}$, je preslikavanje D grupe G u skup operatora (matrica) $D(G) = \{D(g)|g \in G\}$, za koje važi $D(g)D(g') = f(g,g')D(gg')$.

Ukoliko je $f(g,g') = 1$ za svaki par g i g' iz G (*trivijalni* faktor-sistem), ovo je obična reprezentacija grupe G. Ireducibilnost, unitarnost i ekvivalencija projektivnih reprezentacija uvode se na isti način kao i za obične. Kompleksni brojevi $\{f(g,g')\}$ su faktor-sistem grupe G ako i samo ako je ispunjen uslov asocijativnosti, $f(g,h)f(gh,k) = f(g,hk)f(h,k)\,\forall g,h,k \in G$. Ako je $D(G)$ projektivna reprezentacija grupe G, i svaki reprezent $D(g)$ se pomnoži proizvoljnim, nenultim kompleksnim brojem $c(g)$, dobija se projektivna reprezentacija $D'(G) = \{c(g)D(g)|g \in G\}$ sa faktor-sistemom $f'(g,g') = \frac{c(g)c(g')}{c(gg')}f(g,g')$. Ovo je relacija ekvivalencije u skupu $F(G)$ svih faktor-sistema grupe G: $f \sim f'$ ako postoje kompleksni brojevi $c(g)$ takvi da je zadovoljena prethodna relacija. Za svaki faktor-sistem postoji njemu ekvivalentan *standardni*, za koji je $|f(g,g')| = 1$, a $f(e,g) = f(g,e) = 1$; odgovarajuća projektivna reprezentacija je ekvivalentna unitarnoj, pri čemu je $D(e) = I$.

Proizvod dva faktor-sistema f i f' je faktor-sistem $f''(g,g') \stackrel{\text{def}}{=} f(g,g')f'(g,g')$, pa je $F(G)$ Abelova grupa. Klasa ekvivalencije, $T(G)$, trivijalnog faktor-sistema je (invarijantna) podgrupa u $F(G)$, a *grupa multiplikatora* je faktor-grupa $M(G) = F(G)/T(G)$.

Za svaku klasu ekvivalencije faktor-sistema se konstruiše skup neekvivalentnih unitarnih ireducibilnih projektivnih reprezentacija grupe G (njihov broj ne mora biti jednak broju klasa konjugacije grupe). U slučaju izbora standardnog faktor-sistema, za neekvivalentne unitarne ireducibilne reprezentacije važe teoremi ortogonalnosti za matrične elemente i karaktere (elementi iste klase konjugacije mogu imati različite karaktere!).

Ako se grupa G' homomorfno preslikava na G, pri čemu je H kernel homomorfizma, postoji bijektivna veza izmedju koseta H u G' i elemenata G. Neka je svakom elementu g grupe G pridružen jedan predstavnik t_g koseta t_gH koji se preslikava u g. Onda je uslovom $t_{g_1}t_{g_2} = t_{g_1g_2}h(g_1,g_2)$ svakom paru elemenata $g_1,g_2 \in G$ pridružen element $h(g_1,g_2) \in H$. Reprezentacija $D'(G')$ grupe G' u kojoj je podgrupa H reprezentovana skalarnim matricama $D'(h) = f(h)I$ definiše projektivnu reprezentaciju $D(G) = \{D(g) \stackrel{\text{def}}{=} D'(t_g)|g \in G\}$ grupe G, sa faktor-sistemom $f(g_1,g_2) = f(h(g_1,g_2))$. Drugačiji izbor predstavnika koseta t_g daje ekvivalentni faktor-sistem. Ukoliko je H podgrupa centra grupe, svaka ireducibilna reprezentacija grupe G' daje ireducibilnu projektivnu reprezentaciju grupe G. Grupa $\tilde{G}$ je *natkrivajuća grupa* za G ako se svaka projektivna ireducibilna reprezentacija grupe G može na opisani način dobiti iz neke obične ireducibilne reprezentacije grupe $\tilde{G}$. Postoji *univerzalno natkrivajuća* grupa u kojoj je grupa multiplikatora

$M(G)$ izomorfna podgrupi H centra grupe $\tilde{G}$.

A.2.8 Indukcija

Indukovana reprezentacija [11] Δ (dimenzije n_Δ) podgrupe H na grupu G sa transverzalom $\{t_1 = e, t_2, \ldots\}$ je reprezentacija $D(G) = \Delta(H) \uparrow G$ data sa $D(g) = \sum_{pq} E_{pq} \otimes \Delta(h)\delta(t_p^{-1}gt_q, h)$, ($E_{pq}$ je matrica dimenzije $\frac{|G|}{|H|}$, kojoj je nenulti samo pq-ti element, jednak 1), tj. n_Δ-dimenzionalni pq-ti blok je različit od nule (i jednak $\Delta(h)$) ako i samo ako je $t_p^{-1}gt_q = h \in H$. Dimenzija indukovane reprezentacije je očigledno proizvod indeksa podgrupe H i n_Δ. Regularna reprezentacija je $D^R(G) = I(\{e\}) \uparrow G$.

Ako je H invarijantna podgrupa u G i $X = \{\Delta^{(\mu)}(H) | \mu = 1, 2, \ldots\}$ skup njenih ireducibilnih reprezentacija, G je grupa transformacija na X sa dejstvom $\Delta^{(\mu)}(h) \overset{g}{\mapsto} \Delta^{(\mu)}(g^{-1}hg) \overset{\text{def}}{=} \Delta_g^{(\mu)}(h)$, čime se dobija particija X na orbite reprezentacija. Ireducibilne reprezentacije iste orbite indukcIom na G daju ekvivalentne reprezentacije. Mala grupa G_μ reprezentacije $\Delta^{(\mu)}(H)$ je nadgrupa za H i one njene ireducibilne reprezentacije $D^{(\mu,\alpha)}(G_\mu)$ čije suženje na H daje višestruku reprezentaciju $\Delta^{(\mu)}(H)$ se nazivaju *dozvoljene reprezentacije*. Indukcija dozvoljene reprezentacije na G daje ireducibilnu reprezentacija $D^{(\mu,\alpha)}(G)$. Izborom po jedne reprezentacije sa svake orbite u X, odredjivanjem svih dozvoljenih reprezentacija odgovarajućih malih grupa i, konačno, njihovom indukcijom na G, dobija se kompletan skup neekvivalentnih ireducibilnih reprezentacija grupe G.

H je invarijantna podgrupa u G_μ. Izborom predstavnika koseta, $H_\mu = \sum_i t_i H$, svakom elementu k faktor-grupe $K = G_\mu/H$ se jednoznačno pridružuje element t_k. Za predstavnike koseta, kao elemente male grupe važi $\Delta_{t_k}^{(\mu)} = C^{-1}(k)\Delta^{(\mu)}(H)C(k)$, gde je $C(k)$ neki operator koji ostvaruje ekvivalenciju; elementu $k \in K$ je pridružen unitarni operator $C(k)$. Operatori $f(k,k') = C(kk')\Delta(t_{kk'})C(k')^{-1}C(k)^{-1}$ komutiraju sa $\Delta^{(\mu)}(H)$, te su skalarni, i odredjuju jedan faktor-sistem grupe K (§ A.2.7). Za svaku projektivnu ireducibilnu reprezentaciju $d^{(\alpha)}(K)$ tog faktor-sistema, dobija se jedna dozvoljena reprezentacija male grupe u obliku $D^{(\mu,\alpha)}(t_k h) = (C(k)\Delta^{(\mu)}(h)) \otimes d^{(\alpha)}(k)$; to su sve dozvoljene reprezentacije ove orbite. Ekvivalentno, može se uvesti natkrivajuća grupa, i njene ireducibilne reprezentacije koje odgovaraju istom faktor-sistemu. Niže će biti razmotrena dva specijalna slučaja.

Ako je $G = H + sH$ (H je podgrupa indeksa 2, pa je invarijantna i $s^2 \in H$), orbite njenih ireducibilnih reprezentacija su jednočlane ili dvočlane. U prvom slučaju takva reprezentacija $\Delta^{(\mu)}(H)$ daje dve neekvivalentne ireducibilne reprezentacije $D^{(\mu\pm)}(G)$: za $h \in H$) je $D^{(\mu\pm)}(h) = \Delta(\mu)(h)$ i $D^{(\mu\pm)}(sh) = \pm Z\Delta(\mu)(h)$, gde je Z operator koji zadovoljava relacije $Z^{-1}\Delta^{(\mu)}(h)Z = \Delta^{(\mu)}(s^{-1}hs)$ i $Z^2 = \Delta^{(\mu)}(s^2)$. U drugom slučaju reprezentacije orbite ($\Delta^{(\mu)}(H)$ i $\Delta_s^{(\mu)}(h)$) daju jednu ireducibilnu reprezentaciju grupe G dvostruke dimenzije:

$$D^{(\mu)}(h) = \begin{pmatrix} \Delta^{(\mu)}(h) & 0 \\ 0 & \Delta_s^{(\mu)}(h) \end{pmatrix}, \quad D^{(\mu)}(sh) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta^{(\mu)}(s^2)\Delta_s^{(\mu)}(h) \\ \Delta^{(\mu)}(h) & 0 \end{pmatrix}, \quad h \in H.$$

Ako je grupa G semidirektni proizvod $G = N \wedge H$, pri čemu je N Abelova grupa, ireducibilne reprezentacije $\Delta^{(\mu)}(N)$ grupe N su jednodimenzionalne, a njihove male grupe su $G_\mu = N \wedge H_\mu$, gde je $H_\mu < H$. Sve dozvoljene reprezentacije $D^{(\mu,\alpha)}(G_\mu)$ su $D^{(\mu,\alpha)}(nh) = \Delta^{(\mu)}(n)d^{(\alpha)}(h)$ ($n \in N$, $h \in H_\mu$), gde su $d^{(\alpha)}(H_\mu)$ sve ireducibilne reprezentacije H_μ.

Konačno, ako je $G = H \otimes K$, sve ireducibilne reprezentacije grupe G se nalaze u formi direktnih proizvoda reprezentacija $\{\Delta^{(\mu)}(H)\}$ i $\{\delta^{(\nu)}(K)\}$: $\Delta^{(\mu,\nu)}(h,k) = \Delta^{(\mu)}(h) \otimes \delta^{(\nu)}(k)$.

A.3 Kompleksna konjugacija reprezentacija

A.3.1 Konjugacija

Reprezentacija $D(G)$ u $\mathcal{H}$, u dualnom prostoru $\mathcal{H}^*$ definiše *kontragredijentnu reprezentaciju* $\phi(x) = (D'(g)\phi)(D(g)x)$, koja se u biortogonalnom bazisu reprezentuje kontragredijentnom matricom. U istom prostoru je *konjugovana (dualna) reprezentacija* $D^*(g)\phi_x = \phi_{D(g)x}$, u dualnom ortonormiranom bazisu reprezentovana konjugovanom matricom (ϕ_x je funkcional dualan vektoru x). Ove dve reprezentacije su ekvivalentne.

A.3.2 Koreprezentacije

U svakoj reprezentaciji $D(G)$ koja sadrži antiunitarne operatore, postoji podgrupa H indeksa 2 reprezentovana unitarnim operatorima, dok se njen koset sH reprezentuje antiunitarno, u obliku $D(sh) = \theta D(h)$, uz $\theta = D(s)$. Izborom bazisa nalazi se matrična forma $\theta = K_0 D_c(s)$ i $D(sh) = K_0 D_c(sh) = K_0 D_c(s) D_(h)$, gde je K_0 operator kompleksne konjugacije brojnih kolona u datom bazisu (antiunitaran, $K_0^2 = I$). Dok za operatore $D(g)$ važi uslov homomorfizma, za matrice $D_c(G) \stackrel{\text{def}}{=} \{D(h), D_c(sh) | h \in H\}$, tzv. *koreprezentacija* grupe [12], on postaje $D(hh') = D(h)D(h')$, $D_c(shh') = D_c(sh)D(h')$, $D_c(hsh') = D^*(h)D_c(sh')$, $D(shsh') = D_c^*(sh)D_c(sh)$. Uslov ekvivalentnosti reprezentacija, $D(g) = AD'(g)A^{-1}$ za svako g iz G, za koreprezentacije je $D(h) = AD'(h)A^{-1}$ i $D(s) = A^* D'_c(s) A^{-1}$, što se svodi na ekvivalenciju suženih reprezentacija $D(H)$ i $D'(H)$.

Ireducibilne koreprezentacije grupe G se konstruišu iz ireducibilnih reprezentacija podgrupe H metodom $*$-indukcije. Reprezentacija $\Delta_s^*(h) \stackrel{\text{def}}{=} \Delta^*(s^{-1}hs)$ je $*$-s-konjugovana reprezentaciji $\Delta(H)$. Ako je $\Delta_s^*(H) \sim \Delta(H)$ (jednočlana orbita) i $\Delta_s^*(H) = Z\Delta(H)Z^{-1}$, važi $ZZ^* = c_Z \Delta(s^2)$, gde je $c_Z > 0$ kod *reprezentacija prve vrste* i $c_Z < 0$ kod *reprezentacija druge vrste*. Ako je $\Delta_s^*(H) \not\sim \Delta(H)$, orbita je dvočlana, i to su *reprezentacije treće vrste*. Ireducibilna reprezentacija $\Delta(H)$ je *I*,*II* ili *III* vrste u odnosu na $*$-s-konjugaciju ako je

$$\frac{1}{|H|} \sum_{h \in H} \chi((sh)^2) = 1, -1, 0,$$

redom. Za $\Delta(H)$ *I* vrste, postoji unitarna matrica Z takva da je $\{\Delta(h), D_c(sh) = Z\Delta(h)\}$ ireducibilna koreprezentacija G. U druga dva slučaja se nalaze matrice ireducibilne koreprezentacije u obliku:

$$D(h) = \begin{pmatrix} \Delta(h) & 0 \\ 0 & \Delta^*(s^{-1}hs) \end{pmatrix}, D_c(sh) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(s^2) \\ I & 0 \end{pmatrix} D(h)$$

(I jedinična matrica dimenzije n_Δ). $*$-indukcijom sa svake orbite $*$-s-konjugacije po jedne ireducibilne koreprezentacije, odredjen je ceo skup ireducibilnih koreprezentacija grupe G.

U posebnom slučaju, kada s komutira sa svim elementima H i važi $s^2 = e$ je $G = H \otimes \{e, s\}$, a $*$-s-konjugacija se svodi na običnu konjugaciju. Reprezentacija $\Delta^{(\mu)}(H)$ je prve vrste ako je ekvivalentna realnoj reprezentaciji (time i svojoj konjugovanoj), druge vrste ako je ekvivalentna svojoj konjugovanoj, ali ne i nekoj realnoj reprezentaciji, a treće vrste ako nije ekvivalentna konjugovanoj reprezentaciji. Ireducibilna reprezentacija $\Delta^{(\mu)}(H)$ je prve (druge, treće) vrste ako i samo ako $\frac{1}{|H|}\sum_h \chi^{(\mu)}(h^2)$ ima vrednost 1 (-1, 0). Ukupan broj ireducibilnih reprezentacija prve i druge vrste jednak je broju ambivalentnih klasa. Ako je $\{x_1, \dots, x_n\}$ bazis prostora $\mathcal{H}(\mathbb{C})$ u kome je grupa reprezentovana matricama $\Delta(h) = \Delta_r(h) + \imath\Delta_i(h)$ (realni i imaginarni deo matrice), u bazisu $\{x_1, \dots, x_n, ix_1, \dots, ix_n\}$ dekompleksifikovanog $2n$-dimenzionalnog realnog prostora $\mathcal{H}_R$ se nalaze matrice $\Delta_R(h) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \Delta_r(h) & -\Delta_i(h) \\ \Delta_i(h) & \Delta_r(h) \end{pmatrix}$ *dekompleksifikovane reprezentacije*. Ako je $\Delta(H)$ reprezentacija prve vrste $\Delta_R(H)$ se može redukovati i nad kompleksnim i nad realnim poljem u obliku $\Delta_R(H) = 2\Delta(H)$. U slučaju reprezentacije *II* ili *III* vrste, $\Delta_R(H)$ se nad kompleksnim poljem redukuje u formi $\Delta_R(H) = \Delta(H) + \Delta^*(H)$, dok ireducibilnost $\Delta(H)$ povlači ireducibilnost $\Delta_R(H)$ nad realnim poljem. Stoga se skup *realnih* ili *fizički* ireducibilnih reprezentacija sastoji iz reprezentacija *I* vrste, i dekompleksifikovanih reprezentacija *II* i *III* vrste, tj. za svaku reprezentaciju *II* i svaki par konjugovanih reprezentacija *III* vrste dobija se po jedna realna ireducibilna reprezentacija, ekvivalentna sa $D^{(\mu)}(G) \oplus D^{(\mu)*}(G)$.

Realna matrična reprezentacija $D(G)$ u kompleksnom prostoru $\mathcal{H}$ ekvivalentna je ortogonalnom zbiru realnih ireducibilnih reprezentacija, te se kompleksne ireducibilne reprezentacije *II* i *III* vrste javljaju u konjugovanim parovima: u svakom potprostoru realne ireducibilne reprezentacije je $D(G)$ ili ireducibilna ili je ekvivalentna sa $D^{(\mu)}(G) \oplus D^{(\mu)*}(G)$.

Dodatak B

VIGNEROVI TEOREMI

Dodatak je posvećen matematičkim detaljima koji omogućuju korišćenje simetrije u kvantnoj mehanici na način izložen u glavnom tekstu. Nakon razmatranja fizičkih pretpostavki, dat je dokaz Vignerovog i Vigner-Ekartovog teorema.

B.1 Kvantna stanja i vektori

Jedan od uobičajenih iskaza u kvantnoj mehanici je da su stanja (misli se na "čista" stanja, a ne na opšti slučaj mešanih stanja) elementi nekog vektorskog prostora. Uz to se odmah naglašava da svi kolinearni vektori definišu isto stanje, a postulatom, potrebnim za statističku analizu, stanja se ograničavaju na normirane vektore. Stoga skup stanja zapravo i nije vektorski prostor, $\mathcal{H}$, već struktura u matematici poznata pod imenom projektivni prostor $P(\mathcal{H})$. Medjutim, pomalo iz tradicionalističkih, a pre svega iz tehničkih razloga (projektivni prostori su unekoliko komplikovaniji nego vektorski), kvantna mehanika eksplicitno koristi ceo $\mathcal{H}$; fizički zahtevi, vezani za verovatnoće, a realizovani kroz različite uslove normiranja, prećutno ispravljaju ovu sliku.

Postaje jasno da se simetrije moraju definisati kao grupe transformacija projektivnog prostora. Sama ideja simetrije nameće uslov da se pri takvim transformacijama opservabilni parametri sistema ne menjaju. Merljive veličine, budući izražene preko verovatnoća, ostaju invarijantne ako su moduli skalarnih proizvoda nepromenjeni pri transformacijama. Tako se uslov da je transformacija T simetrija sistema, svodi na $|(TX, TY)| = |(X, Y)|$, za svako $X, Y \in P(\mathcal{H})$ (kako je $P(\mathcal{H})$ izveden iz unitarnog prostora $\mathcal{H}$, skalarni proizvod treba shvatiti u smislu skalarnog proizvoda normiranih predstavnika pravaca; pošto moduo ne zavisi od izbora takvih predstavnika, celi izraz je funkcija pravaca).

Sa druge strane, sasvim opšta razmatranja (§ 1) zahtevaju da je simetrija data kao operator u vektorskom prostoru. Stoga se mora uspostaviti veza transformacija simetrije u $P(\mathcal{H})$ sa operatorima u $\mathcal{H}$, koja bi pratila osnovni prelazak sa $P(\mathcal{H})$ na $\mathcal{H}$ (tj. formiranje linearnih kombinacija elemenata iz $P(\mathcal{H})$). Ova procedura se može shvatiti i kao proširivanje domena transformacije T, a uslov održanja modula skalarnih proizvoda otklanja deo proizvoljnosti u ovom postupku.

B.2 Vignerov teorem

Traženu vezu uspostavlja sledeći stav [5, 15].

Teorem 3 *Neka je u $P(\mathcal{H})$ zadata transformacija simetrije T, tj. transformacija za koju važi $|(TX,TY)| = |(X,Y)|$, za svaki par pravaca $X, Y \in P(\mathcal{H})$. Tada postoji operator U koji proširuje dejstvo T na $\mathcal{H}$. Pri tome je U unitaran ili antiunitaran.*

Dokaz. Neka je u $\mathcal{H}$ zadat ortonormirani bazis $\{x\} = \{x_1, x_2, \ldots\}$, čiji se vektori mogu smatrati predstavnicima odgovarajućih pravaca $X_1, X_2, \ldots$. Stoga se iz delovanja simetrije T na njih formiraju novi pravci $TX_i = Y_i$, sa nekim izborom normiranih predstavnika y_i. Neka je U^0 proizvoljni operator u $\mathcal{H}$ za koji je $U^0 x_i = y_i$ (kako nikakva pretpostavka o linearnosti U^0 ne postoji, ovim U^0 nije potpuno definisan; prema tome nije jedinstven, a tome treba dodati i proizvoljnost u izboru y_i). Uslov skalarnih proizvoda daje $|(y_i, y_j)| = |(U^0 x_i, U^0 x_j)| = |(x_i, x_j)| = \delta_{ij}$, tj. $\{y_i\}$ je ortonormiran bazis u $\mathcal{H}$, bez obzira na izbor predstavnika i preostalo definisanje U^0.

Ako je $x = \sum_i \alpha x_i$, vektor $y \overset{\text{def}}{=} U^0 x = \sum_i \beta_i y_i$ zadovoljava relaciju $|\beta_i| = |\alpha_i|$ (jer je za simetrije $|(y_i, y)| = |(x_i, x)|$). Jedna od posledica je da, ako je x iz potprostora obrazovanog nekim od elemenata bazisa $\{x\}$, onda i y pripada potprostoru obrazovanom odgovarajućim elementima bazisa $\{y\}$ (npr. $x \in \operatorname{span}\{x_1, \ldots, x_p\}$ povlači $y \in \operatorname{span}\{y_1, \ldots, y_p\}$).

Nakon ovih opštih zaključaka za svaki operator koji na nekom bazisu deluje u skladu sa T, prelazi se na razmatranje mogućnosti izbora operatora sa odredjenim osobinama linearnosti. Prvi korak se sastoji u uskladjivanju delovanja na zbir vektora. Iz prethodnih stavova sledi da je $U^0(x_1 + x_i) = \beta_1^i y_1 + \beta_i y_i = \beta_1^i (y_1 + \gamma_i y_i)$, gde su β_1^i, β_i i γ_i brojevi jediničnog modula. Ako se izvrši novi izbor predstavnika pravaca, $z_1 = y_1, z_i = \gamma_i y_y$ $(i = 2, 3, \ldots)$, a medju svim operatorima U^0 odabere U za koji je $Ux_i = z_i$ i $U(x_1 + x_i) = \beta_1^i U^0(x_1 + x_i) = z_1 + z_i$, postaje jasno da je U homomorfizam u odnosu na sabiranje vektora bazisa.

Operator U se sada definiše delovanjem na proizvoljni vektor $x = \sum_i \alpha x_i$, tj. odredjivanjem koeficijenata u $Ux = \sum_i \beta_i z_i$. Pri tome se mora zadovoljiti izvedeni uslov $|\alpha_i| = |\beta_i|$. Ispostavlja se da fiksiranje β_1 na jedan od dva načina $\beta_1 = \alpha_1$ ili $\beta_1 = \alpha_1^*$ konzistentno odredjuje i sve ostale koeficijente. U prvom slučaju, iz $|(x_1 + x_i, x)| = |(z_1 + z_i, Ux)|$ sledi $|\alpha_1 + \alpha_i| = |\alpha_1 + \beta_i|$. Raspisivanjem kvadrata ovog izraza nalazi se jednačina $\alpha_1^* \beta_i^2 - (\alpha_1^* \alpha_i + \alpha_1 \alpha_i^*)\beta_i + \alpha_1 |\alpha_i|^2 = 0$ po β_i, sa rešenjima $\beta_i = \alpha_i$ i $\beta_i = \alpha_i^* \frac{\alpha_1}{\alpha_1^*}$. Prvo rešenje daje linearni operator: $U(\sum_i \alpha_i x_i) = \sum_i \alpha_i U x_i$. Potpuno analogno, u drugom slučaju se nalaze dva rešenja $\beta_i = \alpha_i^*$ i $\beta_i = \alpha_i \frac{\alpha_1^*}{\alpha_1}$, od kojih prvo definiše antilinearni operator $U(\sum_i \alpha_i x_i) = \sum_i \alpha_i^* U x_i$.

Konačno, početni uslov za skalarne proizvode neposredno povlači da je u (anti)linearnoj realizaciji U (anti)unitarni operator. *QED*

U zavisnosti od smisla konkretne transformacije uzima se unitarno ili antiunitarno operatorsko dejstvo simetrije u $\mathcal{H}$. Tako se ispostavlja da je vremenska inverzija nužno reprezentovana antiunitarno (§ 2.6.1). Slično, kod Lijevih grupa, zbog neprekidnosti, elementi iste komponente povezanosti moraju biti reprezentovani na isti način; stoga je komponenta jedinice, i sama Lijeva grupa, reprezentovana unitarno. Neposredna posledica je da su, kada se razmatra cela Euklidova grupa (čak i kod magnetnih grupa), rotacije i translacije unitarni operatori u $\mathcal{H}$.

B.3 Vigner-Ekartov teorem

Ako koeficijenti u Klebš-Gordanovim serijama grupe G zadovoljavaju uslov $a_\lambda^{\mu\nu} = 0, 1$, za istu grupu važi

Teorem 4 *Matrični element* $\langle\ \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b\ \rangle$ *je proporcionalan Klebš-Gordanovom koeficijentu* $\langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle$*, pri čemu koeficijent proporcionalnosti,* redukovani matrični element $(\alpha t_\alpha \mid\mid A^{(\mu t_\mu)} \mid\mid \beta t_\beta)$*, ne zavisi od* a*,* b *i* m*:*

$$\langle\ \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b\ \rangle = \langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle (\alpha t_\alpha \mid\mid A^{(\mu t_\mu)} \mid\mid \beta t_\beta).$$

Dokaz. Neka su $\mathcal{H}^{(\mu)}$ i $\mathcal{H}^{(\beta)}$ ireducibilni potprostori odgovarajućih reprezentacija grupe. Pri odredjivanju standardnog bazisa u $\mathcal{H}^{(\mu)} \otimes \mathcal{H}^{(\beta)}$, neki vektor v se projektuje pomoću jednodimenzionalnog projektora $P_{aa}^{(\alpha)}$ (za $a_{\mu\beta\alpha=1}$), pa se normirana projekcija (ako je nenulta) proglašava za $\mid \mu\beta\alpha a\ \rangle$. Ostali standardni vektori su $\mid \mu\beta\alpha a'\ \rangle = P_{a'a}^{(\alpha)} \mid \mu\beta\alpha a\ \rangle$. Ako su $\{\mid \mu t_\mu m\ \rangle\}$ i $\{\mid \beta t_\beta b\ \rangle\}$ standardni bazisi u $\mathcal{H}^{(\mu)}$ i $\mathcal{H}^{(\beta)}$, respektivno, jedan bazis u $\mathcal{H}^{(\mu)} \otimes \mathcal{H}^{(\beta)}$ je nekorelisani $\{\mid \mu t_\mu m\ \rangle \otimes \mid \beta t_\beta b\ \rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mid \mu m, \beta b\ \rangle\}$. Sigurno je da neki od njegovih elemenata ima nenultu projekciju pomoću $P_{aa}^{(\alpha)}$, te je $\mid \mu\beta\alpha a\ \rangle = C P_{aa}^{(\alpha)} \mid \mu m, \beta b\ \rangle$, gde je C konstanta normiranja, i razvijajući nekorelisani bazis po standardnom, nalazi se

$$\mid \mu\beta\alpha a\ \rangle = C P_{aa}^{(\alpha)} \sum_{\alpha' a'} \langle\ \mu\beta\alpha' a' | \mu m, \beta b\ \rangle \mid \mu\beta\alpha' a'\ \rangle = C \langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle \mid \mu\beta\alpha a\ \rangle,$$

tj. $\frac{1}{C} = \langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle$. Preostali vektori standardnog bazisa postaju:

$$\mid \mu\beta\alpha a'\ \rangle = C \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} d_{a'a}^{(\alpha)^*}(g) D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\beta)}(g) \mid \mu m, \beta b\ \rangle =$$

$$\sum_{m', b'} C \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} d_{a'a}^{(\alpha)^*}(g) d_{m'm}^{(\mu)}(g) d_{b'b}^{(\beta)}(g) \mid \mu m', \beta b'\ \rangle.$$

Uslov ortonormiranosti standardnog bazisa odmah daje

$$\langle\ \mu m', \beta b' | \mu\beta\alpha a'\ \rangle \langle\ \mu\beta\alpha a \mid \mu m, \beta b\ \rangle = \frac{1}{C} \langle\ \mu m', \beta b' | \mu\beta\alpha a'\ \rangle = \frac{n_\alpha}{|G|} \sum_{g \in G} d_{a'a}^{(\alpha)^*}(g) d_{m'm}^{(\mu)}(g) d_{b'b}^{(\beta)}(g).$$

Na osnovu poslednje relacije, ubacivanjem $I = D^{-1}(g) D(g)$ pre i posle operatora u matričnom elementu, korišćenjem unitarnosti reprezentacije, i sumiranjem po elementima grupe, nalazi se

$$\langle\ \alpha t_\alpha a \mid A_m^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b\ \rangle = \sum_{a' m' b'} d_{a'a}^{(\alpha)^*}(g) d_{m'm}^{(\mu)}(g) d_{b'b}^{(\beta)}(g) \langle\ \alpha t_\alpha a' \mid A_{m'}^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b'\ \rangle,$$

što je uz

$$(\alpha t_\alpha \mid\mid A^{(\mu t_\mu)} \mid\mid \beta t_\beta) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{n_\alpha} \sum_{a' m' b'} \langle\ \mu\beta\alpha a' \mid \mu m', \beta b'\ \rangle \langle\ \alpha t_\alpha a' \mid A_{m'}^{(\mu t_\mu)} \mid \beta t_\beta b'\ \rangle,$$

upravo iskaz teorema. *QED*

Dodatak C

Ireducibilne reprezentacije aksijalnih grupa

Ireducibilne reprezentacije aksijalnih grupa (grupe koje ostavljaju invarijantnom jednu osu) su navedene u narednim tabelama uz korišćenje oznaka uobičajenih u fizici molekula i čvrstog stanja. Najveća dimenzija ovih reprezentacija je 2, i za njih su dati i karakteri (označeni su malim slovima). Nakon 7 familija konačnih tačkastih grupa, sledi 5 Lie-jevih jednoparametarskih grupa. Za izomorfne parove grupa $\boldsymbol{C}_{nv}$ i $\boldsymbol{D}_n$, kao i $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ i $\boldsymbol{D}_\infty$ data je jedna tabela. U svim tabelama je $\alpha = \frac{2\pi}{n}$.

Tabela C.1: $\boldsymbol{C}_n$.

D	m	C_n^s
A_m	$(-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$	$e^{\imath m s \alpha}$

Tabela C.2: $\boldsymbol{S}_{2n}$. t je neparno.

D	m	C_n^s	$\sigma_h C_{2n}^t$
$A_m^\pm$	$(-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$	$e^{\imath m s \alpha}$	$\pm e^{\imath m t \frac{\alpha}{2}}$

Tabela C.3: $\boldsymbol{C}_{nh}$.

D	m	C_n^s	$\sigma_h C_n^s$
$A_m^\pm$	$(-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$	$e^{\imath m s \alpha}$	$\pm e^{\imath m s \alpha}$

Tabela C.4: $\boldsymbol{C}_{nv} \cong \boldsymbol{D}_n$. Dvodimenzionalne reprezentacije postoje samo za $n > 2$.

$D(\boldsymbol{C}_{nv})$		m	C_n^s	$\sigma_x C_n^s$
	$D(\boldsymbol{D}_n)$	m	C_n^s	$U_x C_n^s$
A_o/B_o	$A_o^{\pm}$	0	1	± 1
E_m		$(0, \frac{n}{2})$	$\begin{pmatrix} e^{\imath m s\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m s\alpha} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m s\alpha} \\ e^{\imath m s\alpha} & 0 \end{pmatrix}$
A_n/B_n	$A_{\frac{n}{2}}^{\pm}$	$\frac{n}{2}$	$(-1)^s$	$\pm(-1)^s$
e_m		$(0, \frac{n}{2})$	$2\cos(ms\alpha)$	0

Tabela C.5: $\boldsymbol{D}_{nd}$. Reprezentacije $E_m^{\pm}$ postoje samo za $n > 2$.

D	m	C_n^s	$\sigma_x C_n^s$	$U_d C_n^s$	$U_d \sigma_x C_n^s$
$A_o^{\pm}$	0	1	1	± 1	± 1
$B_o^{\pm}$	0	1	-1	± 1	∓ 1
$E_m^{\pm}$	$(0, \frac{n}{2})$	$\begin{pmatrix} e^{\imath m s\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m s\alpha} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m s\alpha} \\ e^{\imath m s\alpha} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m \frac{s-1}{2}\alpha} \\ e^{\imath m \frac{s-1}{2}\alpha} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} e^{\imath m \frac{s+1}{2}\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m \frac{s+1}{2}\alpha} \end{pmatrix}$
$E_{\frac{n}{2}}$	$\frac{n}{2}$	$(-)^s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$(-)^s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$(-)^s \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$(-)^s \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
e_m	$(0, \frac{n}{2})$	$2\cos(ms\alpha)$	0	0	$\pm 2\cos(m\frac{s+1}{2}\alpha)$
$e_{\frac{n}{2}}$	$\frac{n}{2}$	$2(-)^s$	0	0	0

Tabela C.6: $\boldsymbol{D}_{nh}$. Dvodimenzionalne reprezentacije postoje samo za $n > 2$.

D	m	C_n^s	$\sigma_x C_n^s$	$U_x C_n^s$	$\sigma_h C_n^s$
$A_o^{\pm}$	0	1	1	± 1	± 1
$B_o^{\pm}$	0	1	-1	± 1	∓ 1
$E_m^{\pm}$	$(0, \frac{n}{2})$	$\begin{pmatrix} e^{\imath m s\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m s\alpha} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m s\alpha} \\ e^{\imath m s\alpha} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m s\alpha} \\ e^{\imath m s\alpha} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} e^{\imath m s\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m s\alpha} \end{pmatrix}$
$A_{\frac{n}{2}}^{\pm}$	0	$(-)^s$	$(-)^s$	$\pm(-)^s$	$\pm(-)^s$
$B_{\frac{n}{2}}^{\pm}$	0	$(-)^s$	$-(-)^s$	$\pm(-)^s$	$\mp(-)^s$
e_m	$(0, \frac{n}{2})$	$2\cos(ms\alpha)$	0	0	$\pm 2\cos(ms\alpha)$

Tabela C.7: $\boldsymbol{C}_{\infty}$.

D	m	$R(\phi)$
A_m	$0, \pm 1, \ldots$	$e^{\imath m\phi}$

Tabela C.8: $\boldsymbol{C}_{\infty h}$.

D	m	$R(\phi)$	$\sigma_h R(\phi)$
$A_m^{\pm}$	$0, \pm 1, \ldots$	$e^{\imath m\phi}$	$\pm e^{\imath m\phi}$

Tabela C.9: $\boldsymbol{C}_{\infty v} \cong \boldsymbol{D}_{\infty}$.

$D(\boldsymbol{C}_{\infty v})$	$D(\boldsymbol{D}_{\infty})$	m / m	$R(\phi)$ / $R(\phi)$	$\sigma_x R(\phi)$ / $U_x R(\phi)$
A_o/B_o	$A_o^{\pm}$	0	1	± 1
E_m		$1,2,\ldots$	$\begin{pmatrix} e^{\imath m\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m\phi} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-\imath m\phi} \\ e^{\imath m\phi} & 0 \end{pmatrix}$
e_m		$1,2,\ldots$	$2\cos(m\phi)$	0

Tabela C.10: $\boldsymbol{D}_{\infty h}$.

D	m	$R(\phi)$	$\sigma_x R(\phi)$	$U_x R(\phi)$	$\sigma_h R(\phi)$
$A_o^{\pm}$	0	1	1	± 1	± 1
$B_o^{\pm}$	0	1	-1	± 1	∓ 1
$E_m^{\pm}$	$1,2,\ldots$	$\begin{pmatrix} e^{\imath m\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m\phi} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m\phi} \\ e^{\imath m\phi} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & e^{-\imath m\phi} \\ e^{\imath m\phi} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} e^{\imath m\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\imath m\phi} \end{pmatrix}$
e_m	$1,2,\ldots$	$2\cos(m\phi)$	0	0	$\pm 2\cos(m\phi)$

Bibliografija

[1] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика I: Механика*, Москва, Наука, 1988. 3.1

[2] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика II: Теория Поля*, Москва, Наука, 1988. 3.4

[3] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика III: Квантовая Механика*, Москва, Наука, 1989. 1, 1.7, 1.7, 2.2.1, 2.2.2, 2.7, 4.4, 4.7, 5.1, 5.2

[4] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика V: Статистическая Физика*, Москва, Наука, 1976. 2.3, 2.3.2, 2.3.3, 4.5

[5] E. P. Wigner, *Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, New York, Academic Press, 1959. 3, 2.1.2, 2.6.1, A, A.1.2, B.2

[6] E. P. Wigner, Gött. Nachricht. 133 (1930). 3.2

[7] J. von Neumann, E. P. Wigner, Phys. Z. **30** 467 (1929). 5.1

[8] Г. Я. Любарский, *Теория Групп и ее Применение в Физике*, Москва, Физматгиз, 1958. 1.2, 2.3.2, 2.7, A.2.5

[9] J. P. Elliot, P. G. Dawber, *Symmetry in Physics*, London, Macmillan, 1979. 3, 3

[10] S. Bhagavantam, T. Venkatarayudi, *Theory of Groups and its Applications to Physical Problems* Andhra University, Andhra, 1948. 3

[11] S. L. Altman, *Induced Representations in Crystals and Molecules*, Academic Press, London, 1977. 2.3.3, A, A.2.8

[12] L. Jansen, M. Boon *Theory of Finite Groups: Applications in Physics*, North Holland, Amsterdam, 1967. 5, 2.6.2, A, A.3.2

[13] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics*, Benjamin/Cummings, Reading, 1982. 2.1.2, A, A.1.2

[14] М. Б. Менский, *Пространство-время и концепция частиц (Метод индуцированных представлений*, Наука, Москва, 1976. 2

[15] V. Bargmann, J. Math. Phys. **5** 862 (1964) B.2

[16] А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва, 1973. 1.7

[17] F. Herbut, *Kvantna mehanika*, PMF, Beograd, 1984. 1

[18] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1970. 1.7, 2.6.1

[19] lat P. Curie, J. Physique **5** 289 (1894). 1.6

[20] C. J. Bradley, A. P. Cracknell, *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point and Space Groups*, Clarendon Press, Oxford, 1972. 3, 3

[21] T. Janssen, *Crystallographic Groups*, North-Holland, Amsterdam, 1973. 2.3.1, 2.6.2, 2.6.2

[22] О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления Федоровских групп*, Наука, Москва, 1986. 3, 2.3.3, 2.6.2

[23] M. Vujičić, I. B. Božović, F. Herbut, J. Phys. **A 10** 1271 (1977). 3

[24] M. Damnjanović, M. Vujičić, Phys. Rev. **B 25** 6987 (1982). 2.5, 2.6.2

[25] I. Milošević, M. Damnjanović, Phys. Rev. B 47 (1993). 4.7

[26] H. A. Kramers, Proc. Acad. Sci. Amst. **33** 959 (1930). 5

[27] C. Itzykson, J. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill, New York, 1980. 2.8

[28] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Press, Oxford, 1954. 3.2

[29] А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва, 1976. 2.3.1, 3.3

[30] A. A. Maradudin, S. H. Vosko, Rev. Mod. Phys. **40** 1 (1968). 3.3

[31] J. L. Birman, *Theory of Crystal Space Groups and Infra-Red and Raman Lattice Processes of insulating Crystals*, Springer, Berlin, 1974. 3.3

[32] L. Michel, Rev. Mod. Phys. **52** 617 (1980). 4.2

[33] M. Abud, G. Sartory, Ann. Phys. **150** 307 (1983). 4.2

[34] H. Kraft, *Geometrische Metoden in der Invariantentheorie*, Friedr. Vieweg& Sohn, Braunschweig, 1985. 4.2

[35] E. Ascher, J. Kobayashi, J. Phys. **C 10** 1349 (1977). 4.3

[36] Jу. А. Изюмов и В. Н. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва, 1984. 4.2, 4.5, 4.5

[37] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge, Cambridge University Press, 1987. 4.4, 4.6

[38] T.-P. Cheng, L.-F. Li, *Gauge Theory of Elementary Particle Physics*, Oxford, Clarendon, 1984. 4.6

[39] H. A. Jahn, E. Teller, Proc. Roy. Soc. **A 161** 220 (1937). 4.7

[40] И. Б. Берсукер и В. З. Полингер, *Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах*, Наука, Москва, 1983. 4.7

[41] C. A. Mead, Rev. Mod. Phys., **64** 51 (1992). 5.1

[42] A. Shapere, F. Wilczek, Eds. *Geometric Phases in Physics*, World Scientific, Singapoore, 1989. 9

[43] W. H. Flygare, *Molecular Structure and Dynamics*, Prentice-Hall, New Jersey, 1978. 5.3

[44] P. R. Bunker, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, Academic Press, New York, 1979. 5.3

Indeks

M. Damnjanović

ON THE SYMMETRY IN QUANTUM NONRELATIVISTIC PHYSICS

Abstract

The symmetry principles are, more or less explicitely, involved in all the branches of physics. This volume is one of the attempts to point out some of the main results based on symmetry, related to different disciplines of physics, and to empasize their common conceptual origin. This way, the symmetry appears to be one of the cornerstones of the contemporary physics. Nonrelativistic quantum mechanics, being the framework for the most of the investigation in physics today, turns out to be the natural formalisam underlying the presentation. Therefore, the nonrelativistic symmetries are highlighted, and used to treat the problems of the normal modes of the harmonic systems, symmetry breaking and, within the adiabatic approximation, electronic states in the molecules and crystals.