Considérer le groupe de transformations C_{3v}.

(i) Dériver la table des caractères des représentations irréductibles Γ_1, Γ_2, Γ_3.

Suggestion: Nous pouvons la calculer à partir des matrices des représentations irréductibles derivées dans la série 3. Nous pouvons aussi utiliser la relation

$$n_\mu n_\nu \chi^{(i)}(C_\mu)\chi^{(i)}(C_\nu) = l_i \sum_{\lambda=1}^{N_c} n_{\mu\nu\lambda} n_\lambda \chi^{(i)}(C_\lambda)$$

Solution

En utilisant le théorème de Burnside,

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i^2 = h,$$

où h est l'ordre du groupe, N_Γ est le nombre des représentations irréductibles et l_i est la dimension de la représentation $\Gamma^{(i)}$, on voit que pour $h = 6$, la seule possibilité est d'avoir deux représentations irréductibles $\Gamma^{(1)}$,$\Gamma^{(2)}$ de dimension 1 et une représentation irréductible $\Gamma^{(3)}$ de dimension 2.

Comme on a vu dans la Série 2, les classes du groupe $C_{3v} = \{E, S, S^{-1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ sont 3: $C_1 = \{E\}$, $C_2 = \{S, S^{-1}\}$, $C_3 = \{\sigma_i, i = 1, 2, 3\}$.

On doit donc remplir la table des caractères $\chi^{(i)}(C_\mu)$ $(i, \mu = 1, 2, 3)$

C_{3v}	C_1	C_2	C_3
$\Gamma^{(1)}$	$\chi^{(1)}(C_1)$	$\chi^{(1)}(C_2)$	$\chi^{(1)}(C_3)$
$\Gamma^{(2)}$	$\chi^{(2)}(C_1)$	$\chi^{(2)}(C_2)$	$\chi^{(2)}(C_3)$
$\Gamma^{(3)}$	$\chi^{(3)}(C_1)$	$\chi^{(3)}(C_2)$	$\chi^{(3)}(C_3)$

On appelle $\Gamma^{(1)}$ la représentation identique, pour laquelle on a evidemment $\chi^{(1)}(C_\mu) = 1, \forall\mu$. En plus on sait déjà que $\chi^{(2)}(C_1) = 1$

et $\chi^{(3)}(C_1) = 2$ parce que l'identité est représentée par 1 dans une représentation monodimensionnelle et par la matrice identité dans une représentation bidimensionnelle.

Pour trouver les autres caractères utilisons une des relations entre les classes dérivées dans la Série 2:

$$C_2 \cdot C_3 = 2C_3.$$

On sait que les coefficients $n_{\mu\nu\lambda}$ qui apparaissent dans les relations entre les classes

$$C_\mu \cdot C_\nu = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} C_\lambda$$

sont les mêmes qui apparaissent dans les relations entre les caractères

$$n_\mu n_\nu \chi^{(i)}(C_\mu)\chi^{(i)}(C_\nu) = l_i \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} n_\lambda \chi^{(i)}(C_\lambda),$$

où n_μ est la dimension de la classe C_μ et l_i la dimension de la représentation $\Gamma^{(i)}$.

Dans ce cas $n_{2,3,\lambda} = 2\delta_{\lambda,3}$ et on trouve

$$6\chi^{(i)}(C_2)\chi^{(i)}(C_3) = 6l_i\chi^{(i)}(C_3),$$

qui conduit a $\chi^{(i)}(C_3) = 0$ où $\chi^{(i)}(C_2) = l_i$. Pour $l_i = 1$, on a forcement $\chi^{(i)}(C_2) = 1$, parce que la matrice ne peut pas être singulière et, en utilisant la condition d'irréductibilité

$$h = \sum_\mu n_\mu \left|\chi^{(i)}(C_\mu)\right|^2$$

on trouve $\left|\chi^{(i)}(C_3)\right|^2 = 1$ et donc $\chi^{(2)}(C_3) = -1$. A l'aide du théorème d'orthogonalité par colonnes

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} \chi^{(i)*}(C_\mu)\chi^{(i)}(C_\nu) = \frac{h}{n_\mu}\delta_{\mu\nu},$$

appliqué à la première et à la deuxième colonne,

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} \chi^{(i)*}(C_1)\chi^{(i)}(C_2) = 0,$$

on voit que $\chi^{(3)}(C_2) = -1$. La condition d'irréductibilité nous donne enfin $\chi^{(3)}(C_3) = 0$.

Finalement la table des caractères de C_{3v} est

C_{3v}	C_1	C_2	C_3
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	1	-1
$\Gamma^{(3)}$	2	-1	0

(ii) Considérer l'espace des fonctions avec vecteurs de base $\Psi_1(\vec{r}) = x^2$, $\Psi_2(\vec{r}) = y^2$, $\Psi_3(\vec{r}) = 2xy$. Considérer comme dans la série 3 les transformations données par

$$P_{R(u)}\Psi_\nu(\mathbf{r}) = \sum_\mu \Psi_\mu \Gamma_{\mu\nu}(u) \equiv \Psi_\nu(R^{-1}(u)\mathbf{r}), \forall u \in C_{3v},$$

Effectuer, à l'aide des caractères, la décomposition en représentations irréductibles de la représentation de dimension 3 ainsi definie.

Solution

Le premier pas est trouver les caractères de la représentation Γ. Pour faire ça, notons que calculer les matrices de la représentation **ne pas nécessaire**. Il suffit de calculer les **éléments diagonaux** d'une des matrice de chaque classe. Dans ce cas on a que le vecteur $\vec{r}$ se transforme avec les relations

$$R^{-1}(E)\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \tag{1}$$

$$R^{-1}(S)\vec{r} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$R^{-1}(\sigma_1)\vec{r} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Si on écrit $\Gamma(u)\Psi_i = \sum_j \Gamma_{ji}(u)\Psi_j$, on trouve immédiatement $\Gamma_{ii}(E) = 1$, $\forall i$; $\Gamma_{ii}(S) = 1/4$, pour $i = 1, 2$ et $\Gamma_{33}(S) = -1/2$; $\Gamma_{ii}(\sigma_1) = 1$, pour $i = 1, 2$ et $\Gamma_{33}(\sigma_1) = -1$.

Les caractères de Γ, qui a dimension l=3, sont donc $\chi(C_1) = l = 3$, $\chi(C_2) = 0$, $\chi(C_3) = 1$.

A partir de la table des caractères des rapŕesentations irréductibles trouvée dans le point (i), on peut trouver les coefficients b_i de la décomposition

$$\Gamma = b_1\Gamma^{(1)} \oplus b_2\Gamma^{(2)} \oplus b_3\Gamma^{(3)},$$

à l'aide de la relation

$$b_i = \frac{1}{h}\sum_\mu n_\mu \chi^{(i)}(C_\mu)\chi(C_\mu). \tag{4}$$

On a

$$\begin{aligned}
b_1 &= \frac{1}{6}(1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 1) = 1, \\
b_2 &= \frac{1}{6}(1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot (-1) \cdot 1) = 0, \\
b_3 &= \frac{1}{6}(1 \cdot 2 \cdot 3 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 3 \cdot 0 \cdot 1) = 1.
\end{aligned}$$

Donc la représentation Γ contient une fois la représentation identique et une fois la représentation bidimensionnelle $\Gamma^{(3)}$:

$$\Gamma = \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(3)}.$$

(iii) Considérer l'espace généré par les fonctions x^3, y^3, z^3, x^2y, x^2z, xy^2, xz^2, y^2z, yz^2, xyz. Sous la loi de transformation utilisée en (ii), ces fonctions génèrent une représentation de dimension 10. Trouver les caractères et sa décomposition en représentations irréductibles.

Solution

On peut appliquer la même méthode utilisée dans le point (ii). On sait comme se transforment x et y sous les transformations du groupe, et on sait que z est invariée, parce que le transformations agissent dans le plan xy.

Pour les éléments diagonaux on trouve

Ψ_i	$\Gamma_{ii}(E)$	$\Gamma_{ii}(S)$	$\Gamma_{ii}(\sigma_1)$
$\Psi_1 = x^3$	1	-1/8	-1
$\Psi_2 = y^3$	1	-1/8	1
$\Psi_3 = z^3$	1	1	1
$\Psi_4 = x^2y$	1	5/8	1
$\Psi_5 = xy^2$	1	5/8	-1
$\Psi_6 = x^2z$	1	1/4	1
$\Psi_7 = xz^2$	1	-1/2	-1
$\Psi_8 = y^2z$	1	1/4	1
$\Psi_9 = yz^2$	1	-1/2	1
$\Psi_{10} = xyz$	1	-1/2	-1

D'ici on calcule immediatement les caractères: $\chi(C_1) = 10$, $\chi(C_2) = 1$, $\chi(C_3) = 2$, et à l'aide de la relation 4, on trouve

$$\Gamma = 3\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + 3\Gamma^{(3)}.$$