4.4 指標

4.4.1 表現の直交性定理

位数 r の群 G の，既約なユニタリー表現は次の直交関係を満たす

$$\sum_g \overline{D_{ij}^{(\alpha)}(g)} D_{kl}^{(\beta)}(g) = \frac{r}{d_\alpha}\delta_{ik}\delta_{jl}\delta_{\alpha\beta} \tag{4.24}$$

ただし,d_α は表現 α の次元.

証明の概要

$$M = \sum_g D^\alpha(g^{-1}) B D^\beta(g) \tag{4.25}$$

という行列を考える．ここに，$D^\alpha(g')$ をかけると

$$\begin{aligned} D^\alpha(g')M &= \sum_g D^\alpha(g'g^{-1})BD^\beta(g) = \sum_g D^\alpha(g'g^{-1})BD^\beta(gg'^{-1})D^\beta(g') \\ &= \sum_{g''} D^\alpha(g''^{-1})BD^\beta(g'')D^\beta(g') = MD^\beta(g') \end{aligned} \tag{4.26}$$

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

$$M_{jl} = \sum_g D_{ji}^\alpha(g^{-1}) D_{kl}^\beta(g) = 0 \tag{4.27}$$

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

$$M_{jl} = \sum_g D_{ji}^\alpha(g^{-1}) D_{kl}^\alpha(g) = c\delta_{jl} \tag{4.28}$$

ここで，トレースを取る．つまり $l = j$ として

$$左辺 = \sum_j M_{jj} = \sum_{g,j} D_{kj}^\alpha(g) D^\alpha(g^{-1}) = \sum_g D^\alpha(e)_{kl} = r\delta_{kl} \tag{4.29}$$

一方

$$右辺 = c\sum_j \delta_{jj} = cd_\alpha \tag{4.30}$$

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

4.4.2 指標

指標

$\chi^\alpha(g) = \mathrm{Tr}\{D^\alpha(g)\}$ を表現 D^α の**指標**と呼ぶ.

1. 指標は同じ類の元では同じ値をとる．trace の性質より

$$\mathrm{Tr}\{D^\alpha(aga^{-1})\} = \mathrm{Tr}\{D^\alpha(a)D^\alpha(g)D^\alpha(a)^{-1}\} = \mathrm{Tr}\{D^\alpha(g)\}. \tag{4.31}$$

   このような関数を**類関数**と呼ぶ.

2. 既約表現の指標は直交する．位数 r の群 G の指標は

$$\boxed{\sum_g \chi^{\alpha*}(g)\chi^\beta(g) = r\delta_{\alpha\beta} \qquad (4.32)}$$

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

$$\sum_{i=1}^{n_c} r_i\chi^{\alpha*}(c_i)\chi^\beta(c_i) = r\delta_{\alpha\beta} \tag{4.33}$$

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

$$\sum_g \chi^{\alpha*}(g)\chi(g) = \sum_{i=1}^{n_c} r_i\chi^{\alpha*}(c_i)(\sum_{\beta\in R}\chi^\beta(c_i)) = rn_\alpha \tag{4.34}$$

   n_α は，可約表現の中に現れる既約表現の数.

4.4.3 C_{3v} の指標

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

1. １次元表現 A_1（自明な１次元表現）の指標は，全ての元 $g \in C_{3v}$ に関して[10]これを $\chi^{A_1}(g)$ と書く:

$$\chi^{A_1}(g) = \mathrm{Tr}\{D^{A_1}(g)\} = 1 \tag{4.35}$$

   である.

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

$$\chi^{A_2}(e) = 1, \chi^{A_2}(c_3) = 1, \chi^{A_2}(\sigma_i) = -1 \tag{4.36}$$

   である.

3. 前節で得られた２次元表現 D^E の指標 χ^E は

$$\chi^E(e) = 2, \chi^E(c_3) = -1, \chi^E(\sigma_i) = 0 \tag{4.37}$$

   である.

[10] １次元の指標では，1×1 行列のトレースを取ることになるが，結局表現そのものである.

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

$$\sum n(c_i)\chi^E(c_i)\chi^{A_2}(c_i) = 1\cdot(2\cdot 1) + 2(-1\cdot 1) + 3(0\cdot -1) = 0 \tag{4.38}$$

さらに，自然な 3 次元の可約表現の指標を求めると，表現行列より

$$\chi^{(3)}(e) = 3, \chi^{(3)}(c_3) = 0, \chi^{(3)}(\sigma_i) = 1 \tag{4.39}$$

これも表に与えてある．

C_{3v} の指標の表

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

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

(4.40)

4.4.4 指標の 2 乗和と既約分解

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

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

指標の 2 乗和に関する定理

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

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = r\sum_\alpha (q^\alpha)^2 \tag{4.41}$$

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = \sum_g |\sum_\alpha q^\alpha \chi^\alpha(g)|^2 = \sum_g \sum_{\alpha,\beta} q^\alpha q^\beta \chi^{*\alpha}(g)\chi^\beta(g) = r\sum_{\alpha,\beta} q^\alpha q^\beta \delta_{\alpha\beta} \tag{4.42}$$

よって，関係式を得ることができた[11]．

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

4.5 正則表現

すべての既約表現を作りだす方法.

1. **正則表現**を
$$D_{ij}^{(R)}(g) \equiv \delta(g_i g g_j^{-1}) \tag{4.43}$$
で定義する．ただし，$\delta(e) = 1$ のデルタ関数.

2. 表現であること
$$[D^{(R)}(g)D^{(R)}(g')]_{ij} = \sum_k \delta(g_i g g_k^{-1})\delta(g_k g' g_j^{-1}) \tag{4.44}$$
このとき，右辺がゼロにならない g_k は
$$g_k = g_i g \quad , \quad g_k^{-1} = g' g_j^{-1} \tag{4.45}$$
が同時に成り立つとき．つまり，
$$g_i g g' g_j^{-1} = e \tag{4.46}$$
の時．これが唯一であることは，積の一意性から明らか．よって
$$[D(g)D(g')]_{ij} = D(gg')_{ij} \tag{4.47}$$
が成り立つ.

3. 正則表現の既約分解：
正則表現の指標
$$\chi^{(R)}(g) = r\delta(g) \tag{4.48}$$
よって
$$\boxed{\chi^{(R)}(e) = r \quad , \quad \chi^{(R)}(else) = 0 \qquad (4.49)}$$
一方，正則表現を既約表現に分解したとき，q^α を既約表現 D^α の縮退数として.
$$D^{(R)} = \sum q^\alpha D^{(\alpha)} \tag{4.50}$$
とすると，指標の直交性を使って
$$q^\alpha = \frac{1}{r}\sum_g \chi^{(R)}(g)\chi^\alpha(g) = \chi^\alpha(e) = d_\alpha \tag{4.51}$$
と書ける．つまり，正則表現は既約表現をその次数と同じ回数だけ含んでいる.

4. 既約分解のトレースをとることで,

$$\mathrm{Tr}\{D^{(R)}\} = \sum d^{\alpha}\mathrm{Tr}\{D^{(\alpha)}\} \quad \Rightarrow \quad \chi^{(R)}(g) = \sum d^{\alpha}\chi^{\alpha}(g) \tag{4.52}$$

よって,$g = e$ とすると次の関係が成り立つ：

群の位数と既約表現

既約表現の次数の 2 乗和が群の位数 r に等しい．つまり

$$r = \sum d_{\alpha}^2 \tag{4.53}$$

例えば C_3v, $d_\alpha = 2, 1, 1$ よって $r = 4 + 1 + 1 = 6$ である．

4.6 指標の第 2 種直交性

1. **Theorem** 指標の第 2 種直交性：群 G の指標 χ^α，類を $\mathbf{C}_i$ その代表元を c_i とすると

$$\sum_{\alpha} \chi^{\alpha}(c_i)\chi^{\alpha}(c_j) = \delta_{ij}\frac{r}{r_i} \tag{4.54}$$

ただし，r_i は類の元の数で和はすべての既約表現についてとる．

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

$$g\mathbf{C}_i = \mathbf{C}_i g \tag{4.55}$$

なので，ある表現をとると

$$D^{(\alpha)}(g)D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i)D^{(\alpha)}(g) \tag{4.56}$$

よって,

$$D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = \lambda \mathbf{1}_{d_\alpha} \tag{4.57}$$

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

$$\chi^{\alpha}(\mathbf{C}_i) = r_i\chi^{\alpha}(c_i) = \lambda d_\alpha \quad \text{where} \quad c_i \in \mathbf{C}_i, d_\alpha = \mathrm{Tr}\{\mathbf{1}_{d_\alpha}\} \tag{4.58}$$

よって λ について解いて () 代入すると

$$D^{(\alpha)}(\mathbf{C}_i) = \frac{r_i}{d_\alpha}\chi^{\alpha}(c_i)\mathbf{1}_{d_\alpha} \tag{4.59}$$

類演算子の積の関係から

$$D^{\alpha}(\mathbf{C}_i)D^{\alpha}(\mathbf{C}_j) = \sum c_{ij}^{k} D^{\alpha}(\mathbf{C}_k) \tag{4.60}$$

よって

$$\frac{r_i r_j}{d_\alpha^2}\chi^{\alpha}(c_i)\chi^{\alpha}(c_j) = \sum_{k} c_{ij}^{k}\frac{r_k}{d_\alpha}\chi^{\alpha}(c_k) \tag{4.61}$$

既約表現について和をとると

$$r_ir_j\sum_\alpha \chi^\alpha(c_i)\chi^\alpha(c_j)=\sum_\alpha\sum_k c_{ij}^k r_k(d_\alpha\chi^\alpha(c_k))=\sum_k c_{ij}^k r_k\chi^R(c_k)=c_{ij}^1 r_k\chi^R(e)=rr_k\delta_{ij} \tag{4.62}$$

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

まとめ

n_c を類の数，n_r を既約表現の数とすると．

(a) 指標の第 1 種直交性

$$\sum_i^{n_c} r_i\overline{\chi^\alpha(c_i)}\chi^\beta(c_i)=r\delta_{\alpha\beta} \tag{4.63}$$

よって，$\chi^\alpha(c_i)$ は n_r 個の互いに直交する n_c 次元ベクトル．

(b) 指標の第 2 種直交性

$$\sum_\alpha^{n_r}\overline{\chi^\alpha(c_i)}\chi^\alpha(c_j)=\frac{r}{r_i}\delta_{ij} \tag{4.64}$$

よって，$\chi^\alpha(c_i)$ は n_c 個の互いに直交する n_r 次元ベクトル．

(c) よって $n_c=n_r$：既約表現の数は類の数に等しい．

(d) すべての既約表現について，その表現の次数の 2 乗の和は位数に等しい

$$\sum_\alpha^{n_r} d_\alpha^2=r \tag{4.65}$$

4.7 積表現とクレプシュ・ゴルダン係数

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

1. **積表現**

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

$$\hat g\mathbf{a}_i=\sum_j\mathbf{a}_jD^\alpha(g)_{ji}\quad,\quad \hat g\mathbf{b}_k=\sum_l\mathbf{a}_jD^\beta(g)_{lk} \tag{4.66}$$

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

$$\hat g(\mathbf{a}_i\mathbf{b}_k)=(\hat g\mathbf{a}_i\hat g\mathbf{b}_k)=(\mathbf{a}_j\mathbf{b}_l)D^\alpha(g)_{ji}D^\beta(g)_{lk} \tag{4.67}$$

2. この積表現も，既約表現で分解できるはずである．既約表現の基底ベクトルを $\mathbf{e}_i^\alpha$ と呼ぶと

$$\mathbf{e}_k^\gamma = \sum_{ij} \mathbf{a}_i \mathbf{b}_j \langle \alpha, i; \beta, j | \gamma, k \rangle \tag{4.68}$$

この係数を**クレプシュ・ゴルダン係数**と呼ぶ.

3. 逆行列は

$$\sum_{\tilde{\gamma}k} \mathbf{e}_k^{\tilde{\gamma}} \langle \tilde{\gamma}, k | \alpha, i; \beta, j \rangle = \mathbf{a}_i \mathbf{b}_j \tag{4.69}$$

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