

物理数学3 homework 4

2016/10/24

1 非可換群

G を有限非可換群とし、 $a \in G$ の共役類を $S(a) \equiv \{g^{-1}ag | g \in G\}$ とする。

(1) 任意の a に対して $S(a)$ の元の数 $|S(a)|$ は群 G の位数 $|G|$ の約数であることを示せ。(ヒント: homework1 で現れた軌道・固定群定理を使えばよい。)

(2) G の中心は $Z(G) \equiv \{g \in G | S(g) = 1\}$ で定義される。 $|Z(G)| \leq \frac{1}{3}|G|$ であることを示せ。

小問 (1)(2) で示された共役類の性質、および既約表現と共役類の対応関係が 1:1 に対応していること、また指標表自身の性質 (直交性、完全性等) を用いて、次の問題を解け。

(3) 位数が最小の非可換群およびその指標表を求めよ。

(4) 位数が二番目に小さい非可換群およびその指標表を求めよ。(ヒント: 指標表に対応する群は同型の意味で唯一とは限らないことに注意せよ。)

2 水分子の振動モード

群の表現論は科学の幅広い分野に応用されている。特に、点群の表現論は分光法において不可欠な解析方法である。

例として、水分子の振動モード (赤外吸収とラマンスペクトルで探知できる) を考えよう。水分子 H_2O は C_{2v} 点群に属し、対称性は下のような指標表で特徴付ける。¹

	E	C_2	σ_v	σ'_v	基底
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	-1	-1	R_z
B_1	1	-1	1	-1	R_y, x
B_2	1	-1	-1	1	R_x, y

ここで z は z 方向の並進、 R_z は z 軸のまわりの回転である。水分子を構成する各原子の平衡位置からの変位を $[x_O, y_O, z_O, x_H, y_H, z_H, x_{H'}, y_{H'}, z_{H'}]$ とする、これらを基底にとると、対応する表現の行列は次のように与えられる。

$$E = \begin{bmatrix} I & O & O \\ O & I & O \\ O & O & I \end{bmatrix}, C_2 = \begin{bmatrix} Z_\pi & O & O \\ O & O & Z_\pi \\ O & Z_\pi & O \end{bmatrix}, \sigma_v = \begin{bmatrix} \sigma_{xz} & O & O \\ O & O & \sigma_{xz} \\ O & \sigma_{xz} & O \end{bmatrix}, \sigma'_v = \begin{bmatrix} \sigma_{yz} & O & O \\ O & \sigma_{yz} & O \\ O & O & \sigma_{yz} \end{bmatrix}.$$

ただし、 I と O はそれぞれ 3×3 単位行列と零行列を表わし、また

$$Z_\pi = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_{xz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_{yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

とする。以下では、この表現を Γ_{tot} と呼ぶ。

(1) この表現 Γ_{tot} の指標が

¹ここで、鏡面 σ_v は xz 平面であり、水分子の平面 σ'_v (yz 平面) と垂直することを仮定する。

	E	C_2	σ_v	σ'_v
Γ_{tot}	9	-1	1	3

で与えられることを示せ。

(2) Γ_{tot} を既約表現に分解すると、 $\Gamma_{\text{tot}} = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 3B_2$ であることを示せ。その中で分子全体の x, y, z 軸に対する並進と回転から由来する既約表現 $\Gamma_{\text{trans}} \oplus \Gamma_{\text{rot}} = A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 2B_2$ を除き、残る $\Gamma_{\text{vib}} = 2A_1 \oplus B_2$ は基準振動モード (normal mode of vibration) に対応する。