



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ A SPOTŘEBNÍ CHEMIE

INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY

SYMETRICKÁ GRUPA, JEJÍ REPREZENTACE A APLIKACE V MOLEKULÁRNÍ A KVANTOVÉ CHEMII

SYMMETRIC GROUP, ITS REPRESENTATION AND APPLICATIONS IN MOLECULAR AND
QUANTUM CHEMISTRY

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Lenka Krchová

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. RNDr. Miroslav Kureš, Ph.D.

BRNO 2020

Zadání bakalářské práce

Číslo práce: FCH-BAK1518/2019 Akademický rok: 2019/20
Ústav: Ústav fyzikální a spotřební chemie
Studentka: **Lenka Krchová**
Studijní program: Chemie a chemické technologie
Studijní obor: Chemie pro medicínské aplikace
Vedoucí práce: **doc. RNDr. Miroslav Kureš, Ph.D.**

Název bakalářské práce:

Symetrická grupa, její reprezentace a aplikace v molekulární a kvantové chemii

Zadání bakalářské práce:

Cílem práce je poskytnout srozumitelný úvod do základů teorie konečných grup a jejich reprezentací, s důrazem na symetrickou grupu a dále uvést využití této grupy v molekulární a kvantové chemii. Student by se měl důvěrně seznámit s technikami teorie grup a jejich aplikacemi v popisu symetrií. Pokud jde o reprezentace, měl by dobře zvládnout aparát Youngových tabulek. Uvedené by měl být schopen prezentovat a následně využít ve své další odborné práci.

Termín odevzdání bakalářské práce: 31.7.2020:

Bakalářská práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí bakalářské práce.

Lenka Krchová
student(ka)

doc. RNDr. Miroslav Kureš, Ph.D.
vedoucí práce

prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.
vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2020

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Předmětem bakalářské práce je studium symetrických grup, jejich reprezentace a aplikace v molekulární chemii. Nejprve jsou představeny jednotlivé pojmy z algebry, které jsou nutné k vymezení pojmu grupy. Pro snadnou orientaci jsou doplněny obrázky. Grupy jsou zasazeny do širších algebraických struktur. Pro přehlednost je přiloženo schéma a konkrétní příklady.

Z grup je podrobně vysvětlena grupa permutací s důrazem na symetrické grupy. Ty jsou demonstrovány na příkladu otáčení rovnostranného trojúhelníku a čtverce.

Následuje kapitola reprezentace konečných grup. Jsou zavedeny základní pojmy teorie reprezentací. Pojmy jsou ilustrovány na několika příkladech, konkrétně reprezentace grupy v různých dimenzích.

Práce pokračuje užitím aparátu Youngových diagramů a tabulek. Ty jsou zavedeny a na příkladech demonstrováno jejich užití při práci s permutacemi.

Poslední část teorie je věnována operátorům, jejich zavedení a práci s nimi. Práce ukazuje využití tohoto teoretického aparátu při řešení konkrétních zadání z kvantové chemie

ABSTRACT

The subject of this bachelor thesis is the study of the symmetric groups, their representation and application in molecular chemistry. At first, the particular terms from the algebra are defined, which are necessary to define the concept of a group. Many of them are supplemented by pictures for clarity and better understanding. Then, the algebraic structures, which are accompanied by clear schemes and concrete examples, are explained. Also, the symmetric groups are demonstrated on the example of the square and triangle. After that, the reader gets into the chapter about the representation of final groups where the structure of the work is similar. First, the relevant terms are defined and then the author focuses on Young's diagrams. These are meticulously described, few examples are mentioned and so is their working procedure. The last part of the bachelor thesis is dedicated to the operators in quantum chemistry, their principles and functions for two and three particles. This too is accompanied by examples.

KLÍČOVÁ SLOVA

Grupa, symetrická grupa, reprezentace grup, Youngovy tabulky, operátory, symetrizátor, antisymetrizátor

KEYWORDS

Group, symmetric group, representation of group, Young's tableaux, operators, symetrizator, antisymetrizator

KRCHOVÁ, Lenka. *Symetrická grupa, její reprezentace a aplikace v molekulární a kvantové chemii*. Brno, 2020. Dostupné také z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/119954>. Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie. Vedoucí práce doc. RNDr Miroslav Kureš, Ph.D.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracovala samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citovala. Bakalářská práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího bakalářské práce a děkana FCH VUT.

.....

Podpis studenta

PODĚKOVÁNÍ

Ráda bych poděkovala doc. RNDr. Miroslavu Kurešovi, Ph.D. za odborné vedení, cenné rady a trpělivost. Díky jeho kvalitnímu přístupu byla naše spolupráce zcela bezproblémová.

OBSAH

1	Úvod.....	7
2	Teorie	8
2.1	Základní pojmy.....	8
2.2	Algebraické struktury	12
2.2.1	Permutace	15
3	Symetrické grupy	17
4	Reprezentace konečných grup.....	21
4.1	Youngovy diagramy	23
4.1.1	Standardní Youngovy tabulky.....	24
4.1.2	Rekonstrukce původní permutace zadané Youngovou tabulkou	25
4.1.3	Určování počtu standardních tabulek daného tvaru – metoda háků (hoček) ..	26
4.1.4	Stanovení dimenze ireducibilních reprezentací.....	27
4.1.5	Nalezení maticové reprezentace symetrické grupy S_4	28
4.1.6	Příklad reprezentace grupy S_3 :	30
4.2	Operátory	34
5	Aplikace teorie grup v kvantové chemii	36
5.1	Úvod do kvantové chemie částic	36
5.2	Charakterizace stavu dvou částic.....	37
5.3	Charakterizace stavu tří částic	38
6	Závěr.....	40
7	Seznam použité literatury	41

1 ÚVOD

V bakalářské práci jsem se naučila pracovat s matematickým aparátem, který se začal rozvíjet v polovině 19. století. Nejprve při studiu algebraických rovnic, pak byl rozšířen zejména Felixem Christianem Kleinem do geometrie. Arthur Cailey do matematiky vnesl pojem abstraktní grupa – pracoval i s jinými grupami, než s grupami permutací. Je autorem multiplikačních tabulek, které ve své práci používám k názornému vysvětlení pojmů. Základní soubory prací z teorie grup, byly napsány na přelomu 19. a 20. století. Tabulky zavedl již v roce 1900 matematik Alfred Young jako pomůcku při studiu matic, které reprezentují permutace. Tedy ve stejném roce, kdy Max Planck formuloval hypotézu kvantování energie.

Grupy se dají klasifikovat, třídít a provádět s nimi různé operace. Reprezentace grup se úzce pojí s kvantovou chemií, která popisuje objekty pomocí vektorů. Jednotlivé objekty teorie (např. částice) jsou prvky reprezentace grupy. Jak konkrétně využít teorii například při studiu částicové fyziky, v chemii pro popis molekul symetrií se snažím naznačit v této práci.

V práci ukazuji matematické postupy, které vychází z Schenstedovy korespondence. Ta se používá od konce 30. let 20. století a aktuálnost tématu dokládá i fakt, že reprezentace grupy lze využít i v informatice a to například v kódování nebo zpracování obrazu.

Vede k výpočtům a pochopení vztahů v kvantové chemii. Ilustruji to na příkladech dvoučásticového a tříčásticového systému.

Speciální permutační grupy, takové, kde grupovou operací je operace symetrie umožňují jednoduše popsat prostorovou symetrii molekul. Její znalost je zásadní při studiu fullerenů nebo opticky aktivních látek. Znalost tvarů molekul, jejich symetrie nebo asymetrie je zásadní v biologii nebo farmacii.

V práci se zaměřuji na operaci symetrie rotace podle osy. S použitím grup na jednotlivých příkladech popisují symetrii a závěry z ní plynoucí. Ukazuji, jak je možno grupy reprezentovat maticemi nebo tabulkami a tím zjednodušit hledání závěrů pomocí matematických operací s maticemi.

Cílem práce je seznámit se s algebrou algebraických struktur, která se v základním kurzu matematiky na naší škole neučí a použít ji k popisu symetrických molekul nebo při studiu kvantových vlastností částic.

2 TEORIE

2.1 Základní pojmy

Nejprve objasníme pojmy z teorie grup. Informace uvedené v textu jsou směřovány čtenáři, který je seznámen se základy matematiky.

První část je věnována připomenutí základní terminologie abstraktní algebry, které jsou nutné k zavedení algebraických struktur, jejich rozlišení s důrazem na grupy. Proto definuji kartézský součin pouze pro dvě množiny a zavádím binární relace, jejich vlastnosti, pojem zobrazení a binární operace. Definice jsou ilustrovány grafy a obrázky. Pro názornost jsou zvoleny i komentáře.

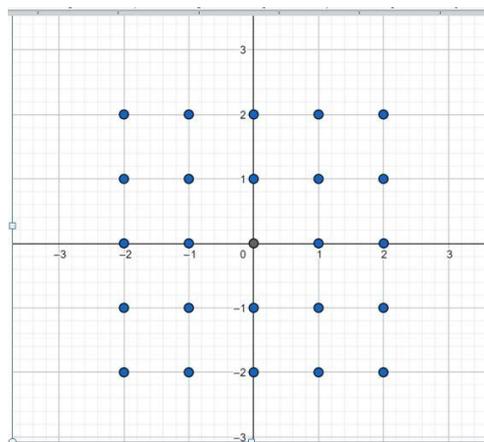
Definice číslo 1: Kartézský součin dvou množin:

Kartézským součinem $A \times B$ neprázdné množiny A a neprázdné množiny B (v tomto pořadí) nazýváme množinu právě těch uspořádaných dvojic $[a, b]$, kde $a \in A$ a $b \in B$.

Definice číslo 2: Binární relace na množině:

Každou podmnožinu R kartézského součinu $A \times B$ nazýváme binární relací z množiny A do množiny B .

Grafická interpretace definice číslo 1 a 2:



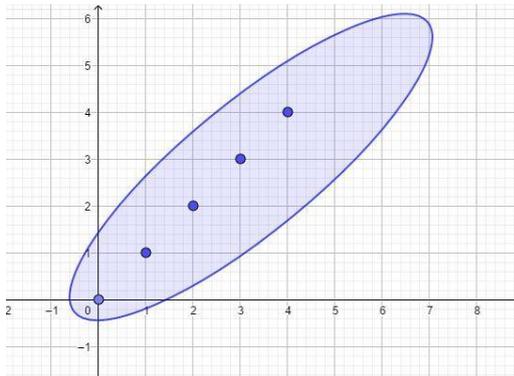
Obrázek číslo 1: Kartézský součin

Definice číslo 3: Vlastnosti binárních relací.:

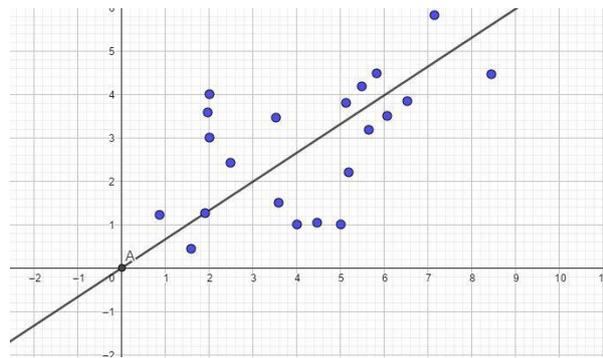
Jestliže R je libovolná relace na množině A a $x, y, z \in A$, říkáme, že binární relace R je na množině A

- 1) Reflexivní – právě když pro $\forall x \in A$ platí $x R x$
- 2) Symetrická – právě když z každého přiřazení $x R y$ plyne $y R x$
- 3) Antisymetrická – právě když z každých dvou přiřazení $x R y, y R x$ plyne $x=y$
- 4) Tranzitivní – právě když z každých dvou přiřazení $x R y, y R z$ plyne $x R z$

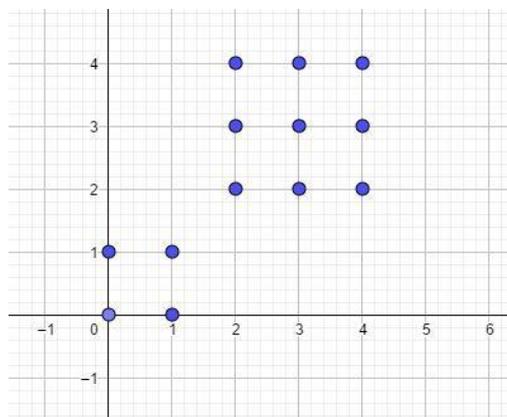
Grafická interpretace definice 3:



Obrázek číslo 2a: Reflexivní relace



Obrázek číslo 2b: Symetrická relace

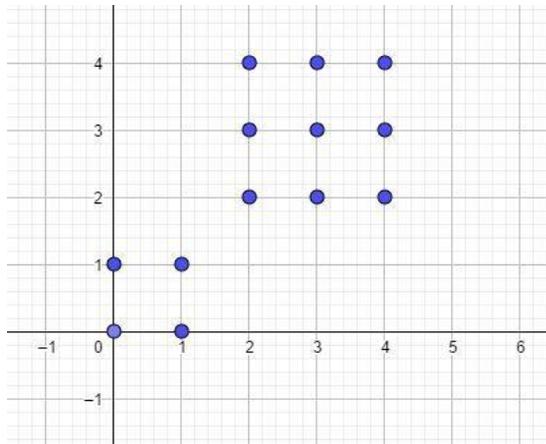


Obrázek číslo 2c: Tranzitivní relace $[4,3]$
 $R [3,5] \rightarrow [4,5]$

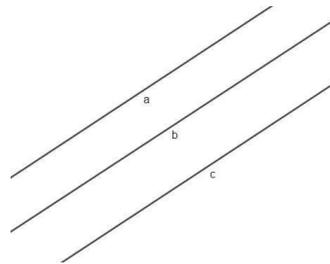
Definice číslo 4: Relace ekvivalence:

Binární relaci nazýváme ekvivalencí, právě když je reflexivní, symetrická a tranzitivní.

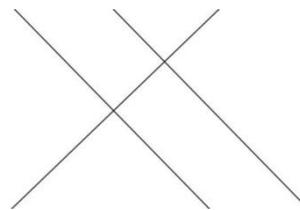
Grafická intepretace k definici číslo 4:



Obrázek číslo 3a: Relace ekvivalence



Obrázek číslo 3b: Přímky a, b, c



Obrázek číslo 3c: Relace není ekvivalence

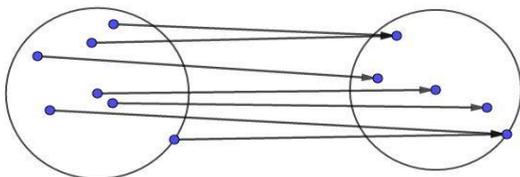
Komentář k obrázkům číslo 3a, 3b, 3c:

Je-li přímka a rovnoběžná s přímkou b a přímka b rovnoběžná s přímkou c , pak přímka a je rovnoběžná s přímkou c . Binární relace rovnoběžnost přímek v rovině je tedy ekvivalencí na této množině.

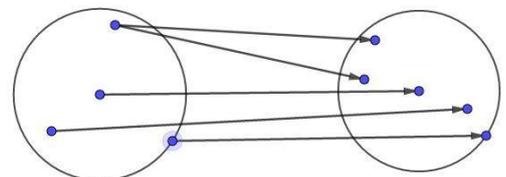
Definice číslo 5: Zobrazení

Zobrazením f z množiny A do množiny B ($A \neq \emptyset$, $B \neq \emptyset$) nazýváme binární relaci (f), o níž platí, že každému prvku $x \in A$ je přiřazen nejvýše jeden takový prvek $y \in B$, že $[x,y] \in f$. Zobrazení má tu vlastnost, že jestliže $[x_1,x_2], [x_1,x_2] \in f$ a $x_1=x_2$, pak $y_1=y_2$.

Grafická interpretace definice 5:



Obrázek číslo 4a: Zobrazení



Obrázek číslo 4b: Není zobrazení

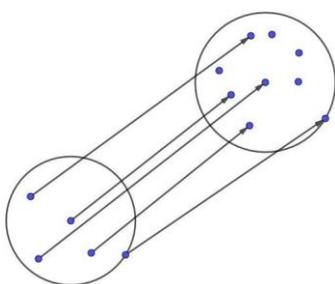
Definice číslo 6: Druhy zobrazení:

Zobrazení f z množiny A do množiny B , právě když vzorem zobrazení f je množina

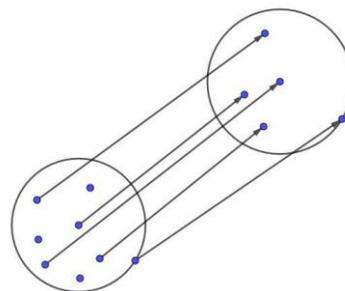
$$A \cdot f^{-1}(B) = A \wedge f(A) \subseteq B$$

- 1) Injektivní (prosté) zobrazení f z množiny A do množiny B , právě tehdy když pro každé dva různé prvky $x_1, x_2 \in f^{-1}(B)$ platí $f(x_1) \neq f(x_2)$.
- 2) Surjektivní - zobrazení f z množiny A na množinu B , právě když obrazem zobrazení f je množina B
- 3) Bijektivní - prosté surjektivní zobrazení nazýváme bijektivní zobrazení.

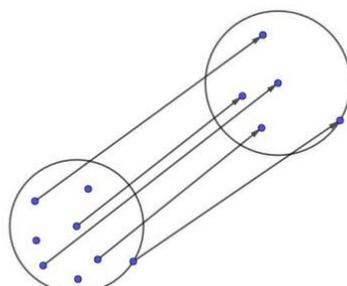
Grafická interpretace vlastností zobrazení



Obrázek číslo 5a: Injektivní zobrazení



Obrázek číslo 5b: Bijektivní zobrazení



Obrázek číslo 5c: Surjektivní zobrazení

Komentář k obrázku číslo 5a, 5b, 5c.:

Pro bijektivní zobrazení platí, že každý bod množiny K má právě jeden obraz v množině L a každý bod z množiny L má právě jeden vzor v množině K .

Definice číslo 7: Binární operace:

Binární operaci nazýváme zobrazení $M^2 \Rightarrow M$ ($a, b, a \circ b \in M$)

Komentář k definici číslo 7:

Libovolné uspořádané dvojici prvků z množiny M jednoznačně určuje prvek z množiny M , ten se nazývá výsledek operace.

Příklady operací: násobení, sčítání, porovnávání, otáčení, zrcadlení. [1][2][3]

2.2 Algebraické struktury

Grupa je chápána jako množina objektů, jejíž individuální vlastnosti jsou navzájem svázané. Díky tomu o množině hovoříme jako o celku, ne o jeho individuálních prvcích.

Historicky se teorie grup rozvinula v polovině 19. století. A. Cayley studoval další grupy, nejen grupy permutací jako jeho předchůdci J. L. Lagrange, P. Ruffini a E. Galois. V Brně se ve 20. století o rozvoj teorie grup zasloužil akademik Borůvka (pojem grupoid). [4][5]

Definice číslo 8: Algebraická struktura (algebra)

Značení: $K = (K, f)$

Algebraickou strukturou nazýváme neprázdnou množinu K , na které je definována aspoň jedna binární operace f .

V práci se zabýváme algebraickými strukturami s jednou binární operací.

Příklady algebraických struktur s jednou binární operací uvádím ve schématu číslo 1. Grupoid, pologrupa, monoid, grupa, Abelův grupoid, Abelova pologrupa, Abelův monoid, Abelova grupa

Komentář k definici číslo 8:

Pokud je operace f binární operací, nazýváme danou algebraickou strukturou grupoid. Podle vlastností operací definujeme komutativní (Abelův) grupoid, pologrupu a grupoid s neutrálním prvkem. V práci budu užívat multiplikativní značení pro operaci. Neutrální prvek budeme označovat e .

Definice číslo 9: Vlastnosti binárních operací

1) Asociativní

Nechť máme neprázdnou množinu K , a její libovolné prvky k, l, m , potom binární operace f , pro kterou platí: $(k \circ l) \circ m = k \circ (l \circ m)$ nazýváme asociativní.

2) Komutativní

Nechť máme neprázdnou množinu K , a její libovolné prvky k, l , potom binární operace \circ , pro kterou platí: $(k \circ l) = (l \circ k)$ nazýváme komutativní.

3) S neutrálním prvkem

Nechť máme neprázdnou množinu K , a její libovolný prvek k . Potom binární operaci \circ , kde existuje prvek $e \in K$, pro který platí: $(k \circ e) = (e \circ k) = k$, nazýváme s neutrálním prvkem.

4) Inverzní prvek

Nechť máme neprázdnou množinu K , a její neutrální prvek e . Potom pro prvek $k \in K$ v binární operaci f existují prvky $k^{-1} \in K$, které se nazývají inverzní prvky, pokud platí::
 $(k \circ k^{-1}) = (k^{-1} \circ k) = e$

Komentář k definici číslo 9:

Uzavřenost operace plyne z definice binární operace.

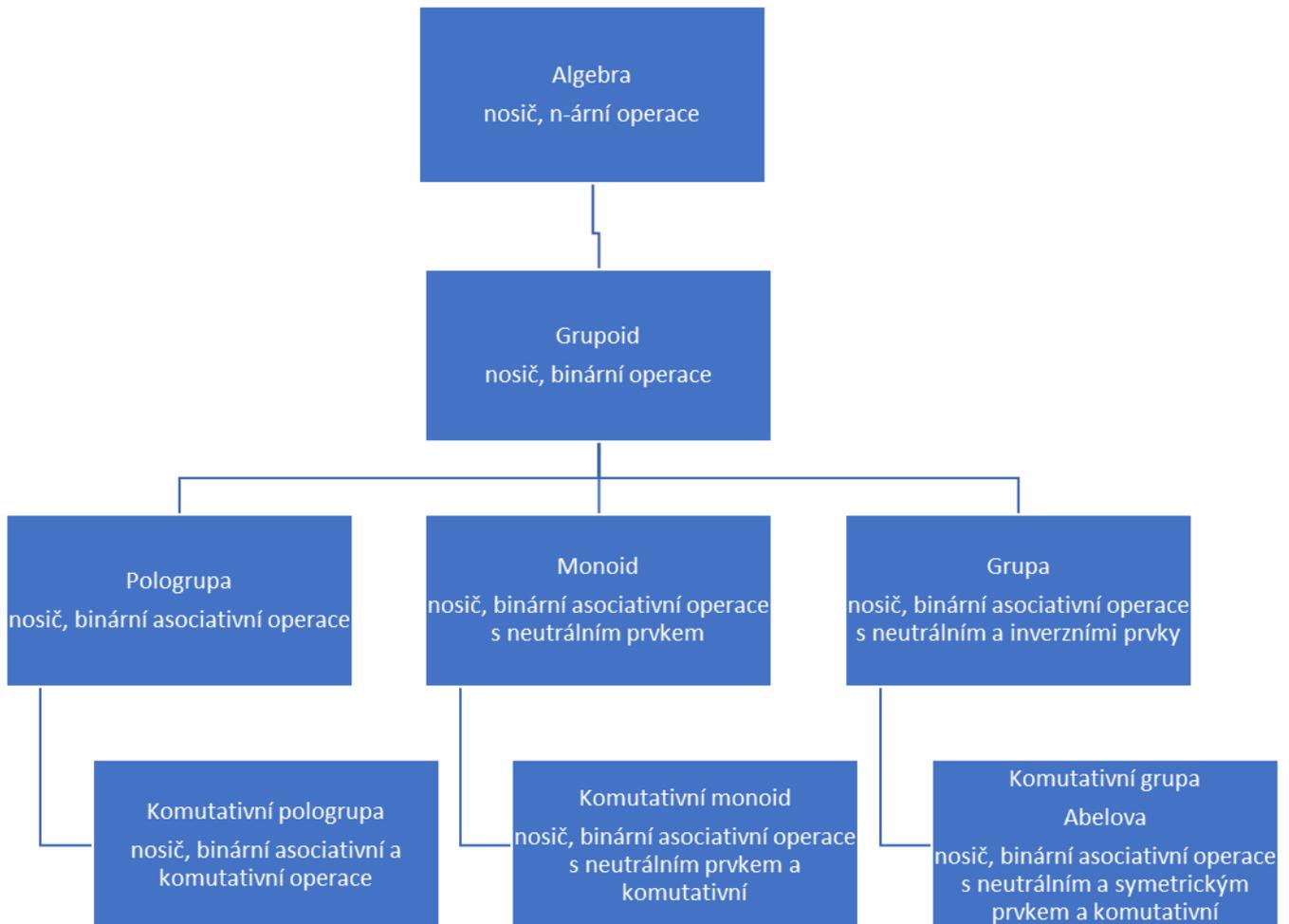
Definice číslo 10: Pologrupa

Pologrupa je algebraická struktura, jejíž binární operace je asociativní.

Definice číslo 11: Monoid

Monoid je pologrupa, v níž existuje jednotkový prvek

Schéma číslo 1: Schéma algebraických struktur



Pojem: Cayleyho tabulka (multiplikační)

Používá se k určování typu algebraické struktury. Předkládám ukázkou pro množinu $K = \{e, l, n, k, a\}$. V jednotlivých polích jsou výsledky binárních operací v záhlaví a předhlaví jsou prvky množiny K . V levém horním poli je značka operace.

Tabulka číslo 1: Multiplikační tabulka

o	e	l	n	k	a
e	e	l	n	k	a
l	l	n	k	a	e
n	n	k	a	e	l
k	k	a	e	l	n
a	a	e	l	n	k

Komentář k tabulce číslo 1:

Způsob hledání výsledků odpovídá hledání výsledků malé násobilky, proto název multiplikační. Snadno se dá odhalit neutrální prvek. Jeho řádek kopíruje záhlaví tabulky. Komutativní operace má multiplikační tabulku symetrickou podle hlavní diagonály. Je-li operace uzavřená, ve výsledkovém poli se objevují pouze prvky množiny K . Inverzní prvek je hledán pomocí prvku neutrálního v příslušném řádku. Inverzní prvek je odpovídající k danému neutrálnímu prvku v příslušném sloupci.

Určení vlastnosti binárních operaci: Pro všechny prvky a, b, c, e, a_1 z množiny M platí:

- 1) Asociativní – zákon pro operaci \circ : $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$
- 2) Komutativní – zákon pro operaci \circ : $a \circ b = b \circ a$
- 3) S neutrálním prvkem – zákon pro operaci \circ : $a \circ e = e \circ a = a$
- 4) Inverzní prvek – zákon pro operaci \circ : $a \circ a_1 = a_1 \circ a = e$

Tabulka číslo 2: Komutativní operace

o	a	b	c
a	c	a	b
b	a	c	a
c	b	a	c

Tabulka číslo 3: Neutrální prvek (prvek a)

o	a	b	c
a	a	b	c
b	b	a	a
c	c	a	a

Tabulka číslo 4: Inverze prvku a (prvek b je prvkem neutrálním, inverze k prvku a je prvek c)

o	a	b	c
a	a	a	b
b	a	b	c
c	b	c	c

Definice číslo 12: Grupa

Grupa je monoid, ve kterém ke každému prvku existuje inverzní prvek.

Komentář k definici č.12

Pokud je navíc grupová operace komutativní, jedná se o Abelovskou, neboli komutativní grupu.

Příklady grup:

1. Triviální grupa – grupa s jedním prvkem
2. Množina celých čísel (racionálních, reálných, komplexních) s operací sčítání jsou nekonečné komutativní grupy s neutrálním prvkem 0
3. Množina racionálních čísel (reálných, komplexních) bez nuly s operací násobení jsou nekonečné komutativní grupy s neutrálním prvkem 1
4. Grupy všech celých čísel modulo p , kde p je prvočíslo s operací sčítání
5. Zákryvová otočení čtverce kolem středu S
6. Otáčení obrazce o libovolný úhel
7. Grupy permutací

2.2.1 Permutace

Definice číslo 13: Permutace množiny K

Bijektivní zobrazení množiny K na sebe nazýváme permutace množiny K . Množinu všech permutací množiny K označujeme symbolem $S(K)$.

Komentář k definici 13:

$S(K)$ a operace skládání permutací je grupa. Nazýváme ji grupa permutací. Často se užívá značení S_n . Grupa (S_n, \cdot) se nazývá symetrická grupa stupně n . Její počet prvků se vypočítá $n!$.

Permutaci můžeme zadat následující tabulkou:

1	2	3	...	n
i_1	i_2	i_3	...	i_n

Tabulka číslo 5: Zadání permutace

Příklad konečné grupy S_3 : Počet prvků je $3!$, tedy 6. Jedná se o následující prvky.

e=	1	2	3
	1	2	3

k=	1	2	3
	2	3	1

l=	1	2	3
	3	1	2

m=	1	2	3
	1	3	2

n=	1	2	3
	3	2	1

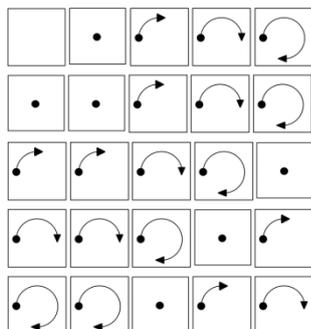
o=	1	2	3
	2	1	3

o	e	k	l	m	n	o
e	e	k	l	m	n	o
k	k	l	e	o	m	n
l	l	e	k	n	o	m
m	m	n	o	e	k	l
n	n	o	m	l	e	k
o	o	m	n	k	l	e

Závěr z tabulky: e je neutrální prvek, multiplikační tabulka S_3 není souměrná podle hlavní diagonály, tedy není komutativní. [2]

3 SYMETRICKÉ GRUPY

Užití symetrických grup je velmi vhodné ke studiu symetrických molekul. Symetrické operace, které můžeme s molekulou provádět, tvoří grupu. Je to způsobeno tím, že skládání dvou operací symetrie vzniká jediná symetrická operace, která je prvkem stejné grupy. [2][5] Jako demonstraci uvádíme otáčení čtverce o úhel 90° na grupě Z_4 .



Obrázek číslo 6: Otáčení čtverce o 90° , grupa Z_4

Definice číslo 14: Operace symetrie útvaru K

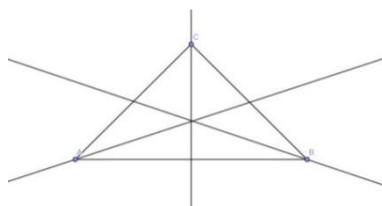
Permutace f množiny K se nazývá symetrie útvaru K , jestliže zachovává vzdálenosti.

Komentář k definici 14:

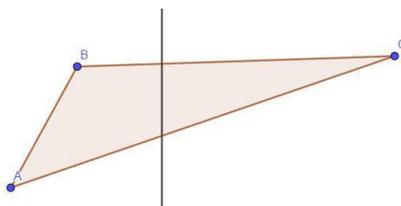
Objekt po provedení operace symetrie je nerozlišitelný od původního objektu. Složení dvou symetrií je symetrie, identická permutace množiny K je symetrie a inverzí permutace k symetrii f je symetrie. Tedy množina všech symetrií útvaru K , je grupa, vzhledem ke skládání permutací – nazývá se grupa symetrií útvaru K . Neuvažujeme všechny permutace množiny K , ale pouze některé z nich.

Je rozlišováno pět různých operací symetrie (identita, inverze, vlastní rotace, nevlastní rotace, zrcadlení). Operace symetrie bude vysvětlena na příkladu rovnostranného trojúhelníku a čtverce.

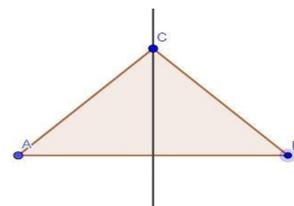
Příklad číslo 1 - rovnostranný trojúhelník



Obrázek číslo 6a



Obrázek číslo 6b



Obrázek číslo 6c

Komentář k obrázku 6a, 6b a 6c:

Při rotaci okolo osy procházejícím těžištěm, která je kolmá na jeho rovinu, se při otočení vždy o 120° , zobrazí trojúhelník sám na sebe. Tato osa se nazývá trojčetná a značí se C_3 .

Druhá možnost je otáčení okolo osy, která je shodná s těžnicí trojúhelníku, o 180° . Tyto osy jsou tedy tři, všechny dvojčetné, a značí se C_2 . Dohromady je tedy šest symetrií. Je pro ně sestavena multiplikační tabulka pro operaci skládání symetrií rovnostranného trojúhelníku.

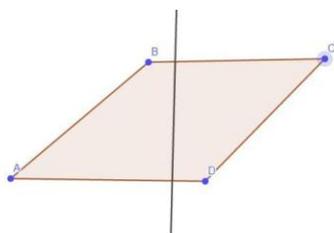
Tabulka číslo 6: Skládání symetrií rovnostranného trojúhelníku

\circ	C_3^3	C_3^1	C_3^2	C_2	C_2'	C_2''
C_3^3	C_3^3	C_3^1	C_3^2	C_2	C_2'	C_2''
C_3^1	C_3^1	C_3^2	C_3^3	C_2''	C_2	C_2'
C_3^2	C_3^2	C_3^3	C_3^1	C_2'	C_2''	C_2
C_2	C_2	C_2'	C_2''	C_3^3	C_3^1	C_3^2
C_2'	C_2'	C_2''	C_2	C_3^2	C_3^3	C_3^1
C_2''	C_2''	C_2	C_2'	C_3^1	C_3^2	C_3^3

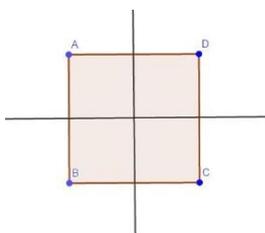
Komentář k tabulce číslo 6:

Operace obsahuje neutrální prvek, $C_3^3 = e$, ke každému prvku existuje prvek inverzní a lze postupně ukázat, že operace je na množině K asociativní. Díky tomu se jedná o nekomutativní grupu.

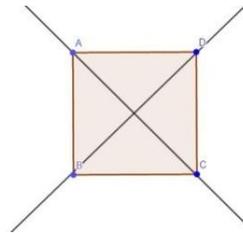
Příklad číslo 2 – čtverec



Obrázek číslo 7a



Obrázek číslo 7b



Obrázek číslo 7c

Komentář k obrázku 7a, 7b a 7c:

Při rotaci okolo osy procházejícím průsečíkem úhlopříček, kolmo k rovině čtverce, se při otočení o 90° , zobrazí čtverec sám na sebe. Osa C_4 . Okolo stejné osy lze otočit i o 180° , tedy existuje osa C_2 , která je totožná s osou C_4 . Další osy C_2 leží v úhlopříčkách a ve středních příčkách čtverce. Celkem jich je tedy 14. Oproti tomu je počet všech permutací dvojnásobný.

Definice číslo 15: Symetrická grupa množiny K

Symetrická grupa je grupa, jejímž nosičem je množina všech permutací dané množiny a operací je skládání permutací

Komentář k definici číslo 15:

Řád grupy permutací je $n!$.

Grupa D_3 symetrií rovnostranného trojúhelníku je totožná s S_3 . Obě grupy mají šest prvků. Oproti tomu grupa D_4 všech symetrií čtverce se liší od S_4 . [1][6][7][8]

Definice číslo 16: Dihedrální grupa:

Grupa D_n symetrií pravidelného n -úhelníku se nazývá dihedrální grupa stupně n .

Komentář k definici číslo 16:

Dihedrální grupa D_{2n} je symetrie pravidelného n -úhelníku. Prvky dihedrální grupy D_{2n} jsou otočení o úhel $2\pi/n$ okolo středu pravidelného n -úhelníku a překlopení okolo osy, která prochází jedním z vrcholů n -úhelníku. Z těch lze vytvořit $2n$ různých symetrií. Díky tomu D_{2n} obsahuje $2n$ prvků a je generována prvky rotace a překlopení. Takovou grupu nazýváme grupou cyklickou, neboť je generována svým prvkem.

Definice číslo 17: Cyklická grupa

Grupa G se nazývá cyklická, jestliže je generovaná nějakým svým prvkem.

Komentář k definici číslo 17:

Prvky cyklické grupy jsou otočení o úhel $2\pi/n$ okolo středu pravidelného n -úhelníku. Cyklická grupa může mít i více generátorů. V příkladu č. 1 existují tři generátory, v příkladu č. 2 existují 4 generátory. Cyklické grupy jsou grupy komutativní.

Reprezentace symetrických grup

- Přímý zápis permutací
- Zápis permutací pomocí cyklů
- Youngovy diagramy
- Ukázka přímého zápisu - prvek symetrické grupy
- Ukázka zápisu pomocí cyklů

1	2	3	4	5
1	5	4	3	2

1	2	3	4	5
1	5	4	3	2

Permutace lze rozložit na cykly: $(1), (2,5), (3,4)$.

Komentář k rozkladu na cykly:

Každá permutace je složením všech svých cyklů v libovolném pořadí. Každý cyklus má svou délku. Permutace, které mají jediný cyklus, se nazývají cyklické a jejich cyklus má délku n .

Definice číslo 18: Transpozice

Transpozice je permutace, která má jeden cyklus délky dvě a ostatní cykly délky jedna.

Definice číslo 19: Znaménko permutace P .

Znaménkem permutace P rozumíme číslo $sgn P$, pro které platí

$sgn P = (-1)^m$, kde m je počet transpozic.

Komentář k definici číslo 18 a 19:

Každou permutaci je možno složit z transpozic a to různými způsoby. Každé permutaci přiřazujeme hodnotu $+1$ nebo -1 , takzvané znaménko permutace. Znaménko ($sgn P$) je dáno vztahem $(-1)^{\text{počet inverzí permutace}}$

Určení parity permutace:

Permutace, jejíž $sgn P = 1$, se nazývá sudá, pokud $sgn P = (-1)$, nazýváme permutaci lichou.

Rozklad na transpozice není jednoznačný, ale parita permutace se vždy zachová. Paritu je možno určit pomocí rozkladu na transpozice. Každá transpozice má $sgn P$ rovno (-1) .

Vyměňují se pouze dva prvky.

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

P: (3 1), (3 2), (4 1), (4 2)

Počet inverzí $P = 4$, tedy $sgn P = (-1)^4$, její parita je sudá.

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

Q: (3 2)

Počet inverzí $Q = 1$, tedy $sgn Q = (-1)^1$, její parita je lichá.

4 REPREZENTACE KONEČNÝCH GRUP

Cílem je „přetransformovat“ grupovou strukturu do uchopitelnější lineární struktury. Konkrétně grupu S_n do grupy matic, jinak řečeno cílem je prvky grup reprezentovat maticemi. K tomu je nutné zavést lineární reprezentaci grupy. To je definováno pomocí homomorfismu (zobrazení jedné algebraické struktury do druhé, které zachovává veškerou strukturu), s využitím pojmu izomorfismus – což je zobrazení prosté (injekce).

Definice číslo 20: Reprezentace konečné grupy G

Nechť G je konečná grupa. Lineární reprezentaci grupy G ve vektorovém prostoru V definujeme jako homomorfismus $\rho: G \rightarrow GL(V)$, kde $GL(V)$ je grupa všech izomorfismů vektorového prostoru V do sebe.

Komentář k definici číslo 20:

Reprezentace konečných grup - všechny grupy, které jsou v práci uvažovány, jsou konečné a všechny vektorové prostory budou reálné (mohou být i komplexní) s konečnou dimenzí.

Obecně jde o působení matematické struktury na vektorovém prostoru, díky lineárním operátorům.

Rozměrem reprezentace rozumíme dimenzi vektorového prostoru V .

Triviální reprezentací rozumíme takovou reprezentaci, kde všem prvkům grupy je přiřazena identita na V (jednotková reprezentace). Reprezentací je nekonečně mnoho na různých rozměrných prostorech. Na jednom prostoru můžou být různé reprezentace. Mnohé z nich lze převádět mezi sebou (ekvivalence) nebo rozložit na méně rozměrné (ireducibilita a reducibilita).

Definice číslo 21: Podreprezentace

Podreprezentace ρ_w reprezentace ρ grupy G je reprezentace, kde W je invariantní prostor V , při působení G .

Komentář k definici 21:

Podreprezentace je sama o sobě vektorovým prostorem s definovanou akcí G . Je tedy i reprezentací G .

Definice číslo 22: Ireducibilní reprezentace

Říkáme, že reprezentace je ireducibilní, pokud jejími jedinými podreprezentacemi je nulová reprezentace a samotný vektorový prostor.

Komentář k definici číslo 22:

Při působení grupy na vektorovém prostoru se může stát, že určitý netriviální podprostor zůstává nezměněn. Podprostor, který se nemění při působení G na V , se nazývá invariantní podprostor. Pokud neobsahuje žádný další invariantní podprostor, pak jde o ireducibilní invariantní podprostor a příslušnou reprezentaci nazýváme ireducibilní reprezentací. Každá ireducibilní reprezentace konečné grupy má konečnou dimenzi.

Definice číslo 23: Věrná reprezentace

Nechť G je konečná grupa. Věrná reprezentace grupy G ve vektorovém prostoru V je izomorfismus $\rho: G \rightarrow GL(V)$, kde $GL(V)$ je grupa všech monomorfismů (injektivní monomorfismus) vektorového prostoru V do sebe.

Komentář k definici číslo 23:

Každému prvku grupy přiřazujeme různý operátor na V . Všechny ireducibilní reprezentace symetrické grupy S_n , lze získat pomocí struktur známých Youngových diagramů.

4.1 Youngovy diagramy

Definice číslo 24: Youngův diagram, užívá se též pojem Ferrerův diagram. Youngův diagram je tabulka sestávající z řádků postupně nerostoucí délky.

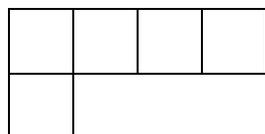
Komentář k definici číslo 24:

V Youngově diagramu nemůže být širší řádek za užším. K rozkladu na Youngovy diagramy lze využít rozklad permutací na cykly. Například pro pět prvků mohou nastat následující příklady.

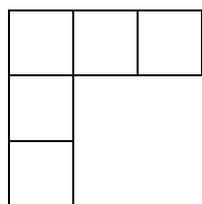
Příklad Youngových diagramů pro pět prvků:



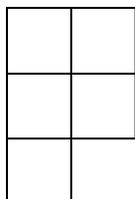
Cyklus délky 5 [5]



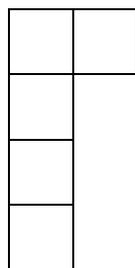
Cyklus délky 4 a cyklus délky 1 [4,1]



[3,1²]



[2²,1]



[2,1³]



[1⁵]

Komentář: Jedná se o úlohu, kolika způsoby lze rozložit číslo na sčítance v nerostoucím pořadí. Například jeden celočíselný rozklad čísla 5 na pět částí je $5 = 2+1+1+1$. Protože se v něm vyskytuje jedna dvojka a tři jedničky, lze psát $(2\ 1^3)$

4.1.1 Standardní Youngovy tabulky

Schenstedova korespondence je bijekcí mezi množinou permutací a množinou jednotlivých uspořádaných dvojic (tabulky mají stejný tvar). Schenstedova korespondence je tvořena induktivním způsobem.

Zvolíme si permutaci $\pi = 3\ 5\ 7\ 6\ 2\ 1\ 4$. Postupně bude tvořena Youngova tabulka, kde čísla mají vzrůstající tendenci v řádcích i sloupcích. Čísla se umísťují podle pořadí v permutaci. Platí, že když následující umísťované číslo je větší než číslo předešlé, zařadí se ve stejném řádku za původní číslo. Pokud je umísťované číslo menší, zařadí se do buňky čísla vyššího a původní číslo se posune o jeden řádek níž ve stejném sloupci.

Tímto způsobem se zařadí všechna čísla permutace. Vznikne Youngova tabulka s rostoucími čísly v řádcích a sloupcích (tj. standardní Youngova tabulka).

3	3	5	3	5	7	3	5	6	2	5	6	1	5	6	1	4	6
			7			3			7			2			2	5	
						7						3			3		
												7			7		

Díky známému mechanismu sestavení Youngových tabulek můžeme sestavit tabulku, má totožný tvar jako vytvořená Youngova tabulka, která bude vypovídat o pořadí obsazených buněk. V praxi se tabulka označuje τ . Její nejmenší hodnota indikuje buňku, která byla obsazena jako první. Největší hodnotu nalezneme v buňce, která byla obsazena jako poslední. Tento postup se jmenuje Schenstedova korespondence a je nezbytný pro rekonstrukci zadané permutace.

1	2	3	
4	7		
5			
6			τ

4.1.2 Rekonstrukce původní permutace zadané Youngovou tabulkou

Zadaná permutace: $\pi = 3\ 5\ 7\ 6\ 2\ 1\ 4$. Souběžně jsou tvořeny dvě tabulky. První tabulka (ζ) je standardní. Je konstruována tak, že čísla jsou vkládána postupně, aby v každém řádku i sloupci byla rostoucí posloupnost. Jestliže následující číslo nelze k stávajícímu posloupnosti připojit, tak se zvětší počet řádků.

Druhá tabulka zaznamenává pořadí, ve kterém daná buňka byla obsazena (tabulka τ). Důležité je najít ze sestavených tabulek původní zadanou permutaci. Ke konstrukci použijeme Schenstedovu korespondenci.

Postup je následující: v druhé tabulce (tabulka τ) najdeme buňku s největší hodnotou. Sloupec, ve kterém se buňka nachází, označíme s . Tutéž buňku najdeme v první tabulce. Její hodnotu označíme h . Dále nalezneme v sloupci $s-1$ největší číslo a , takové, že a je menší než h . Číslo a vyměníme za číslo h .

Algoritmus opakujeme, dokud nevyměníme číslo b z prvního sloupce první tabulky. Toto číslo b je prvním číslem hledané permutace.

Grafické znázornění:

1	4	6
2	5	
3		
7		

1	2	3
4	7	
5		
6		

 τ

Algoritmus je v literatuře popsán jako Schenstedovo mazání ve sloupcích. Hodnotu buňky označíme x . Buňky s čísly x a a vymažeme z obou tabulek a v takto redukovaných znovu aplikujeme Schenstedovo mazání ve sloupcích, dokud nebudou obě tabulky prázdné. Tím získáme všech n čísel permutace.

1	2	3
4	7	
5		
6		

 τ

1	2	3
4	7	
5		
6		

1	4	6
2	5	
3		
7		

První krok – hledání čísla 3

1	2	3
2		
5		
7		

1	2	3
4	7	
5		
6		

 τ

Druhý krok – hledání čísla 5

V prvním kroku vyhledáme nejvyšší možné číslo v tabulce τ (jedná se o hodnotu 7), následně se naleznou odpovídající číslo v Youngově tabulce (číslo 5). Pokračujeme tak, že se naleznou ve sloupci nalevo největší menší číslo, než je námi nalezená hodnota. V našem případě se jedná o číslo 3. Toto číslo je zároveň prvním číslem rekonstruované permutace. V druhém kroku opakujeme algoritmus – v tabulce τ máme nyní největší možné číslo 6, to odpovídá číslu 7 v prvním sloupci. Největší menší číslo je tudíž číslo 5 a je druhým prvkem permutace. To samé opakujeme dále a nalezneme, že dalším číslem je číslo 7. Máme tudíž permutaci 3,5,7. Tímto způsobem se dostaneme až k poslednímu číslu permutace.

Youngovy tabulky lze rozlišit do tří typů

1. Youngova tabulka – Youngův diagram, který má n buněk a vyplňuje se čísly od 1 do n , čísla se neopakují
2. Standardní Youngova tabulka – Tabulka, ve které jsou čísla seřazena vzestupně ve všech v řádcích a sloupcích
3. Normální Youngova tabulka – Je speciální případ standardní Youngovy tabulky, ve které jsou čísla napsána v pořadí zleva doprava a shora dolů

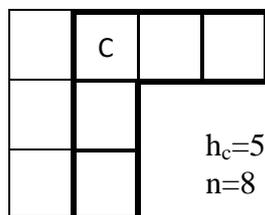
Youngovy standardní tabulky umožňují popsat a nalézt ireducibilní reprezentace grupy S_n .

4.1.3 Určování počtu standardních tabulek daného tvaru – metoda háků (hokejek)

K danému typu tabulky vytvoříme stejný typ tabulky a do jejích buněk napíšeme počet tzv. hokejek, respektive háků. K danému rozkladu pak počet standardních tabulek určíme ze vzorce

$$d_\lambda = \frac{n!}{\prod_{c \in \lambda} h_c}$$

Hák H_c je složený z buněk, které jsou od vyznačené buňky c napravo z buňky c a z buněk, které se nachází pod buňkou c . Délka háku (hokejky) h_c je počet buněk, které hák tvoří.



4.1.4 Stanovení dimenze ireducibilních reprezentací

Každému Youngovu schématu o délkách $l_1, l_2 \dots l_r$ odpovídá jedna ireducibilní reprezentace $D^{[\lambda]}$ grupy S_n . Dimenze ireducibilní reprezentace je dána počtem standardních Youngových tabulek. Značí se $d^{[\lambda]}$

Příklad

[3]

1	2	3
---	---	---

3	2	1
---	---	---

$$d_\lambda = \frac{3!}{6} = 1$$

$$D^{[3]} = 1$$

$$\prod hc = 6$$

[2 1]

1	2
3	

3	1
1	

1	3
2	

$$d_\lambda = \frac{3!}{3} = 2$$

$$D^{[2\ 1]} = 2$$

$$\prod hc = 3$$

[1³]

1
2
3

3
2
1

$$d_\lambda = \frac{3!}{6} = 1$$

$$D^{[1^3]} = 1$$

$$\prod hc = 6$$

Počet ireducibilních reprezentací je dán počtem možných rozkladů čísla n (dosud není znám explicitní vzorec pro tento počet).

4.1.5 Nalezení maticové reprezentace symetrické grupy S_4

Podle Younga konstruujeme maticovou reprezentaci pro transpozice $(i, i+1)$ grupy S_n .
Je uveden příklad trojrozměrné reprezentace S_4 pro $l = [3, 1]$.

- Počet standardních tabulek
- Další krok je užití Yamanouchiho kódování v sestupném pořadí.
- Konstrukce matic pro transpozici $(1,2)$

Pravidla vyplňování:

1. Transpozice má stejné Yamanouchiho kódy, pak napíšeme do příslušného řádku matice na hlavní diagonálu jedničku, ostatní místa budou vyplněna nulami.
2. Jsou-li kódy transpozice ve stejném sloupci, zapíšeme na hlavní diagonálu -1. Ostatní místa budou vyplněna nulami.

$$D^{[3,1]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \dots \{2 \ 1 \ 1 \} \\ \dots \{1 \ 2 \ 1 \} \\ \dots \{1 \ 1 \ 2 \} \end{array}$$

- Konstrukce pro transpozice (2,3)
 1. Pravidla vyplňování (1. – 2. pro transpozice (1,2)) platí i pro tento typ
 2. Když prvky permutací neleží ve stejném řádku nebo sloupci, vyplňujeme hodnoty. Kde r^{-1} je délka háku pro danou buňku. Hodnoty jsou vyplněny do průsečíků 2 řádků a 2 sloupců označených Youngových tabulek.

$$D_{(2,3)}^{[3,1]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -r & \sqrt{1-r^2} \\ \sqrt{1-r^2} & r \end{pmatrix}$$

- Konstrukce pro transpozice (3,4)
 1. Aplikace výše zmíněných pravidel

$$D_{(3,4)}^{[3,1]} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{8}}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -r & \sqrt{1-r^2} \\ \sqrt{1-r^2} & r \end{pmatrix}$$

4.1.6 Příklad reprezentace grupy S_3 :

V tabulce je uvedeno skládání permutací pomocí cyklů a pak je ukázáno na třech vybraných buňkách, skládání pomocí lineárních reprezentací.

Tabulka číslo 7: Skládání permutací pomocí cyklů

	(1) (2 3)	(2) (1 3)	(3) (1 2)	(1 2 3)	(1 3 2)	(1) (2) (3)
(1) (2 3)	(1) (2) (3)	(2) (1 3)	(1 2) (3)	(1 3 2)	(1 2 3)	(1) (2) (3)
(2) (1 3)	(1 2 3)	(1) (2) (3)	(1 3 2)	(1) (2 3)	(1 2) (3)	(2) (1 3)
(3) (1 2)	(1 2 3)	(1 2 3)	(1) (2) (3)	(2) (1 3)	(1) (2 3)	(3) (1 2)
(1 2 3)	(2) (1 3)	(3) (1 2)	(1) (2 3)	(1 2 3)	(1) (2) (3)	(1 2 3)
(1 3 2)	(3) (1 2)	(1) (2 3)	(2) (1 3)	(1) (2) (3)	(1 3 2)	(1 3 2)
(1) (2) (3)	(1) (2 3)	(2) (1 3)	(3) (1 2)	(1 2 3)	(1 3 2)	(1) (2) (3)

Jedná se o obdobnou tabulku s *tabulkou číslo 1*. Nyní je vyjádřena jako skládání cyklů. V předchozím případě se jedná o ukázkou multiplikativní tabulky prvků. V obou tabulkách je možné nalézt neutrální prvek.

Volba reprezentace pro $n = 2$

$$\Phi((\text{id})) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Phi((2\ 3)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Phi((1\ 2)) = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Phi((1\ 2\ 3)) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Phi((1\ 3\ 2)) = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Phi((1\ 3)) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Příklad číslo 1:

$$a=(2\ 3)$$

$$b=(1\ 3\ 2)$$

Skládání je možno převést na násobení matic

$$a*b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (1\ 3)$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Phi(b) \quad \Phi(a) \quad \Phi(a\ b)$$

Vzniklá matice Φ (a b) odpovídá výše zmíněnému skládání cyklů $a*b$. (viz. tabulka číslo 7)

Příklad číslo 2:

$$a=(1 \ 2 \ 3)$$

$$b=(1 \ 3)$$

$$a*b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (1 \ 2)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Příklad číslo 3: Jiná volba reprezentace v dimenzi, podle počtu transpozic

$$\text{Není transpozice } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Je transpozice } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ize i obráceně

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Všechny zmíněné příklady jsou reprezentace. V příkladu číslo tři se jedná o reprezentaci, která není věrná a je irecidibilní.

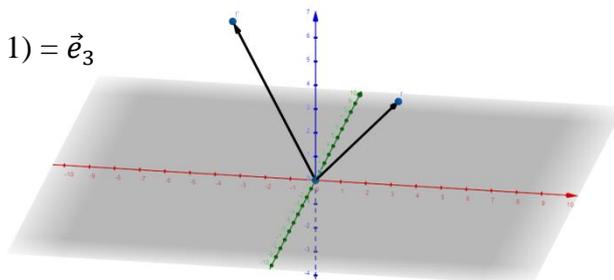
Příklad číslo 4: Reprezentace pro $n=3$

$$\text{Ortonormální báze: } (1, 0, 0) = \vec{e}_1, (0, 1, 0) = \vec{e}_2, (0, 0, 1) = \vec{e}_3$$

Příklad číslo 5: Otočení okolo osy z o 180° (π)

$$(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, z), \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\text{Reprezentace pro } n=3: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Obrázek číslo 8: Grafické znázornění příkladu 4

Příklad číslo 6: Otočení o úhel α v rovině

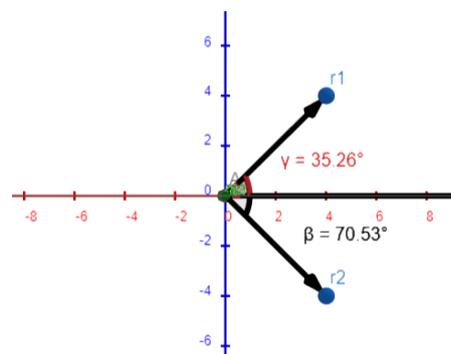
$$\vec{r}_1 = (x_1, y_1) = (r \cdot \cos \beta, r \cdot \sin \beta)$$

$$\vec{r}_2 = (x_2, y_2) = (r \cdot \cos(\alpha - \beta), r \cdot \sin(\alpha - \beta))$$

$$x_2 = x_1 \cdot \cos \alpha + y_1 \cdot \sin \alpha$$

$$y_2 = -x_1 \cdot \sin \alpha + y_1 \cdot \cos \alpha$$

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$



Obrázek číslo 9: Grafické znázornění příkladu 6

K úpravě rovnic byly použity vzorce:

$$\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cdot \cos \beta + \sin \alpha \cdot \sin \beta$$

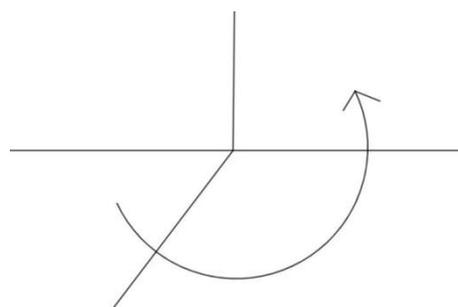
$$\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cdot \cos \beta - \cos \alpha \cdot \sin \beta$$

Reprezentace pro $n = 2$: $\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$

Příklad číslo 7: Otočení v rovině xy o úhel α - příklad ireducibilní reprezentace

$$\text{Reprezentace pro } n=3 \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Zvýrazněný obdélník je ireducibilní



Obrázek číslo 10: Grafické znázornění příkladu 7

Příklad číslo 8:

Cyklické grupy

Symetrie pětiúhelníku vepsaného do kružnice

$$\vec{e}_1 (1, 0), \vec{e}_2 (0, 1)$$

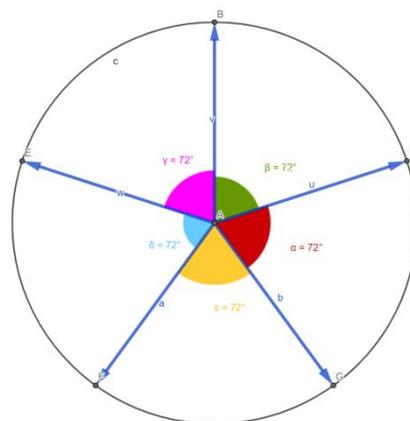
$$\begin{pmatrix} \cos 0 & \sin 0 \\ -\sin 0 & \cos 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \dots \text{identita}$$

$$\begin{pmatrix} \cos 72 & \sin 72 \\ -\sin 72 & \cos 72 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0,31 & 0,95 \\ -0,95 & 0,31 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos 144 & \sin 144 \\ -\sin 144 & \cos 144 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0,81 & 0,59 \\ -0,59 & -0,81 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos 216 & \sin 216 \\ -\sin 216 & \cos 216 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -0,81 & -0,59 \\ -0,59 & -0,81 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos 288 & \sin 288 \\ -\sin 288 & \cos 288 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0,31 & -0,95 \\ 0,95 & 0,31 \end{pmatrix}$$



Obrázek číslo.11: Pětiúhelník vepsaný do kružnice

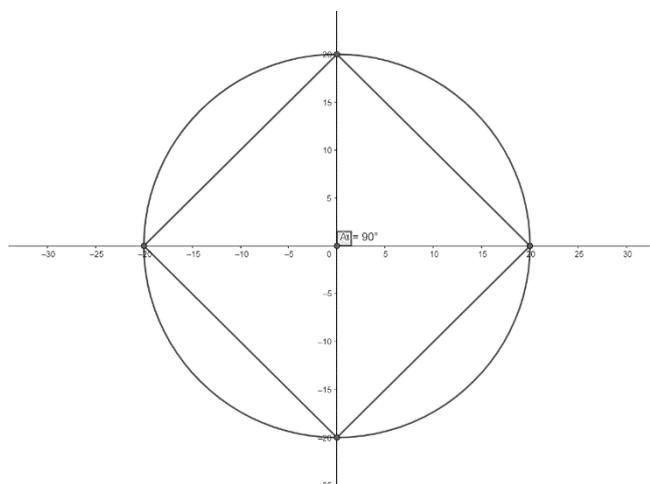
Příklad číslo 9: Symetrie čtverce

$$\begin{pmatrix} \cos 0 & \sin 0 \\ -\sin 0 & \cos 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{2} & \sin \frac{\pi}{2} \\ -\sin \frac{\pi}{2} & \cos \frac{\pi}{2} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos \pi & \sin \pi \\ -\sin \pi & \cos \pi \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{3\pi}{2} & \sin \frac{3\pi}{2} \\ -\sin \frac{3\pi}{2} & \cos \frac{3\pi}{2} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$



Obrázek číslo 12: Symetrie čtverce

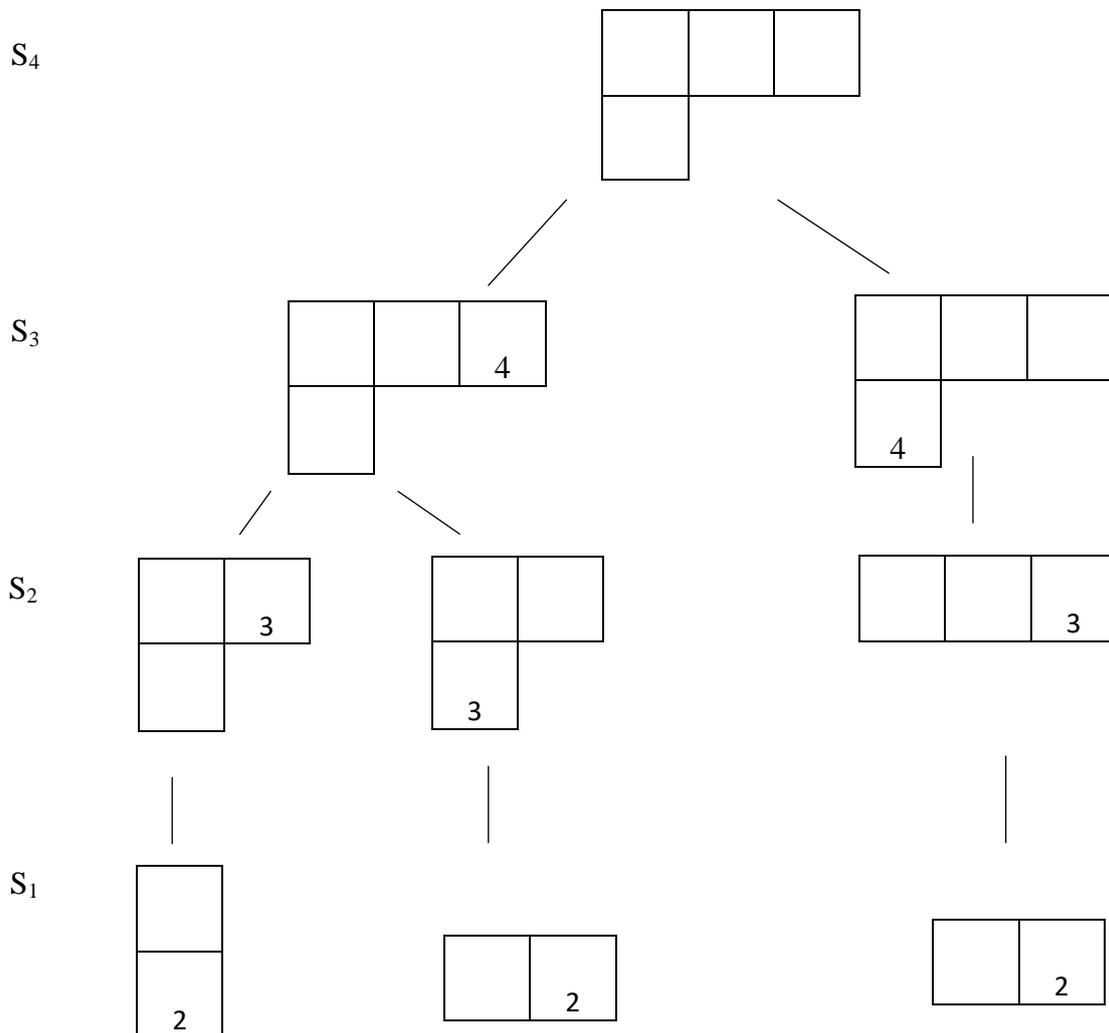
Každou permutaci lze rozložit na cykly. Délka cyklu se značí d . Například permutace

$P = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 6 & 5 \end{pmatrix}$ lze zapsat jako $P = (1\ 2\ 3)(4)(5\ 6)$. To odpovídá $\omega_1 = 3$,

$\omega_2 = 1$, $\omega_3 = 2$. Libovolnou permutaci lze sestavit z cyklů délky 2, tedy z transpozic.

$P = (1\ 3), (1\ 2)$ a $(5\ 6)$. V prvních dvou cyklech je první prvek stejný, proto je pořadí transpozic podstatné.

Příklad číslo 10: Reprezentace $D^{[3,1]}$ grupy S_4 . Rozklad na direktivní součet irecidubilních reprezentací $S_m(m)$



Irecidubilní reprezentace $D^{[3,1]}$ grupy S_4 je trojrozměrná. Počet standartních schémat udává dimenzi $n_{[\lambda]}$ reprezentace $D^{[\lambda]}$.

4.2 Operátory

Užívají se v kvantové chemii (mechanice). Operátory působí například na funkce, permutace apod. Jako příklad uvedu působení operátoru permutace \hat{P} . $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ na funkci f .

$$\hat{P}f(x, y, z) = f(y, z, x).$$

Každé měřitelné veličině je v kvantové chemii přiřazen operátor. Například:

1. Operátor celkové energie systému se nazývá Hamiltonián. Značí se \hat{H} . Jeho tvar je konkrétně dán formou potenciální energie.
2. Operátor $\hat{x} = x$
3. Operátor parity permutace δ_p , kde $\delta_p = 1$ když je P sudá a $\delta_p = -1$ když P je lichá.

4. Pro δ_p platí: $\delta_p = (-1)^{\text{množství inverzí}} = (-1)^{\text{součet délek cyklů } P} = (-1)^{\text{množství cyklů liché délky}} = (-1)^k$, kde k je počet transpozic.
 5. Symetrizátor $\hat{S} = \frac{1}{n!} \sum_P P$
 6. Antisymetrizátor $\hat{A} = \frac{1}{n!} \sum_P \delta_p P$
- Stupněm permutace rozumíme počet inverzí permutaci.

Příklad číslo 11: $P = (2, 1, 3)$. Počet inverzí v permutaci je stupeň permutace. $S_p = 1$, platí $\delta_p = (-1)^{S_p}$.

S operátory lze provádět operace – například sčítání, násobení.

$$\begin{array}{ll} \text{Sčítání} & \hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \\ & \widehat{Cf} = \widehat{Af} + \widehat{Bf} \end{array} \qquad \text{Násobení:} \qquad \hat{C}f = \hat{A}(\widehat{Bf})$$

Proto druhá mocnina operátoru je $\hat{A}^2 = \hat{A} * \widehat{Bf}$

Pro operátor $\hat{P} \in S_n$ platí například:

1. $\hat{P} * \hat{S} = \hat{S}$
2. $\hat{P} * \hat{A} = \hat{A} * \hat{P} = \widehat{\delta_p} * \hat{A}$
3. $\hat{S}^2 = S$
4. $\hat{A}^2 = A$

5 APLIKACE TEORIE GRUP V KVANTOVÉ CHEMII

5.1 Úvod do kvantové chemie částic

Matematický aparát nastíněný v práci lze využít k popisu kvantových stavů částic. Se závěry výpočtů pracuje celá chemie, včetně biochemie, tedy to umožňuje chápat podstatu samotného života.

Předpovědi z toho plynoucí se zdají podivné i filosofům, přesto v experimentech teorie zcela obstála. Početní operace se týkají subatomového světa.

Atom je slovo, které pochází z řečtiny, v překladu znamená dále nedělitelný. Na počátku 20. století nikdo nevěděl, jak jsou elektrony, objevené 1897 Thomsonem, uspořádány v atomech a jak se tam chovají. V roce 1911 Ernest Rutherford navrhl model jádra a elektronového obalu.

Jádra jsou ve své podstatě složitější než atomy. Jsou směsicí protonů a neutronů a silové působení mezi nimi nelze jednoduše popsat Coulombovou silou, jako působení mezi jádrem a elektrony. Až od roku 1926 v souvislosti s vývojem kvantové mechaniky byly mnohé otázky zodpovězeny (objev de Broglieho vln). Ve třicátých letech dvacátého století si řada vědců myslela, že struktura hmoty je vyřešena. K pochopení atomu stačil proton, elektron a neutron a kvantová teorie uměla vysvětlit radioaktivitu α i strukturu atomu. Na konci třicátých let začalo období objevů nových částic, které trvá dodnes.

Částice se zejména vytvářejí při srážkách mezi protony nebo elektrony, urychlenými na vysoké energie ve známých urychlovačích (např.: CERN, Fermilab).

Dnes známe několik stovek částic a různě je třídíme. Jeden ze systémů je rozděluje na *mezony, baryony a leptony*. Od roku 1964 se předpokládá, že mezony a baryony jsou dále složeny z *kvarků*. Kvarky dosud nebyly prokazatelně pozorovány jako volné částice. Základní kvarky jsou tři *u, d, s*. Všechny mezony a baryony jsou jejich vhodnou kombinací. Způsob kombinace pro dvě a tři částice je popsán dále v práci.

Kvantová mechanika se v minulosti pojmenovávala jako mechanika vlnová. Slovo „kvantová“ vyjadřuje nelineární spojení jednotlivých energetických hladin. Přídavné jméno „vlnový“ odkazuje na podvojný charakter částic, které se za určitých podmínek mohou chovat jako vlny. Částice reprezentují objekty se známou hmotností, polohou a hybností. Jejich poloha a hybnost je dána konkrétním stavem částice. Pokud je známo momentální umístění (poloha) a hybnost, pomocí výpočtů lze vypočítat její trajektorii do blízké budoucnosti. Při pohybu částic v prostoru se přenáší hmota, při prostupu vln se přenáší energie. Jednotlivé vlně navíc nelze určit polohu. Nejdůležitější rozdíl je v tom, že vlny se dají skládat (interference).

Pokud je nutné v kvantové mechanice něco vypočítat, pravděpodobně se bude pracovat s komplexními čísly, operátory (zobrazení, kterým když je působeno na funkci, je získána funkce nová) a maticovými reprezentacemi operátorů. Výchozím bodem bude pravděpodobně Schrödingerova rovnice.

Na začátku 20. století bylo zavedeno několik postulátů, které byly v rozporu s klasickou mechanikou, nelze je dokázat, vychází pouze z experimentů a zkušeností.

V práci v kapitole 5.2 je popsán, pomocí operátorů, stav dvou částic – tedy například kvarky *u* (up) a *d* (down). V kapitole 5.3 je charakterizován stav tří částic, tedy přibyla charakteristika *s* (strange). Pojmenování pro tyto tři kvarky (stavy) nemají význam – jedná se o vhodné zvolené značky.[10][11][12]

5.2 Charakterizace stavu dvou částic

Díky výše zmíněnému, symetrizátor S a antisymetrizátor A fungují jako projekční operátory. V případě, že máme dva stavy částic – například dva stavy momentu hybnosti spinu – používá se označení u a d . Symetrizátor bude mít tvar

$$S_{12} = \frac{1}{2}(e + P_{12})$$

e představuje operátor identity grupy S_2 . Operátor S_{12} představuje symetrii ψ_N .

$$\psi_N = S_{12}\psi_N = \frac{1}{2} [ud + du]$$

Antisymetrizátor A_{12} má tvar $A_{12} = \frac{1}{2}(e - P_{12})$ a částečný symetrizátor je:

$$\psi_N = A_{12}\psi_N = \frac{1}{2} [ud - du]$$

Kombinace uu a dd jsou symetrické.

Tvar Youngovy tabulky $\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array}$ (respektive Ferrova diagramu) koresponduje s třídou dvou jednocyklů – $\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$ jedná se o identitu grupy S_2 . Jeho podrobnější rozpis můžeme zapsat jako: $uu + \frac{1}{2} [ud + du] + dd$.

Tvar odpovídá $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$ třídě jednoho dvoucyklu. Jedná se tedy o transpozici.

Díky tomu můžeme rozepsat jako: $\frac{1}{2} [ud - du]$.

Z toho vyplývá, že první typ Ferrerova diagramu představuje symetrický stav a druhý typ reprezentuje antisymetrický stav.

5.3 Charakterizace stavu tří částic

Na rozdíl od předchozí kapitoly, kde bylo pracováno se dvěma částicemi, nyní jsou uvažovány částice tři. Je nezbytné přidat třetí složku, která se označuje s (strange). Způsob zápisu je různý, pro potřeby práce bude využito zapisování u, d, s – jejich pořadí je 123.

Díky tomu existuje šest lineárně nezávislých funkcí, respektive $3!$. Tyto nezávislé lineární funkce, které byly získané permutováním, je možno přepsat jako odlišnou sadu lineárně nezávislých funkcí. Tyto funkce vycházejí ze symetrií. Nejprve bude uvedeno zcela symetrické uspořádání:

$$\begin{aligned} \psi^S = S_{123}\psi_N = S_{123}uds &= \frac{1}{3!} (e + P_{12} + P_{13} + P_{23} + P_{123} + P_{132})uds \\ &= \frac{1}{3!} (uds + dus + sdu + usd + dsu + sud) \end{aligned}$$

Tvar Ferrerova diagramu odpovídá třídě tří jednocyklů. $\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}$

Tento symetrický stav je možno nazývat inavriantním podprostorem grupy S_3 . Díky tomu generuje jednodimenziální identickou reprezentaci.

Antisymetrické uspořádání:

$$\begin{aligned} \psi^A = A_{123}\psi_N = A_{123}uds &= \frac{1}{3!} (e - P_{12} - P_{13} - P_{23} + P_{123} + P_{132})uds \\ &= \frac{1}{3!} (uds - dus - sdu - usd + dsu + sud) \end{aligned}$$

Opět je možné přiřadit tvar Youngova diagramu a to jeden trojcykl. $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$

Díky tomu je zmíněná funkce vektor v jiném jedno dimenziálním inavriantním podprostoru a generuje další jednorozměrné irecidubilní reprezentace S_3 . Za povšimnutí stojí, že se nejedná o ekvivalent identické reprezentace.

Existují čtyři další funkce, které mají smíšenou symetrii. Lze využít symetrizací uds a následně antisymetrizací pro dvě částice (lze i opačně, nebo s jednou částicí).

$$\psi_1 = A_{13}S_{12}\psi_N = A_{13} \frac{1}{2} (uds + dus) = \frac{1}{4} (uds - sdu + dus - sud)$$

$$\psi_2 = A_{23}S_{12}\psi_N = \frac{1}{4} (uds - usd + dus - dsu)$$

$$\psi_3 = S_{13}A_{12}\psi_N = \frac{1}{2}(e + P_{13})\frac{1}{2}(uds - dus) = \frac{1}{4}(uds + sdu - dus - sud)$$

$$\psi_4 = S_{23}A_{12}\psi_N = \frac{1}{4}(uds + usd - dus - dsu)$$

ψ_1 a ψ_2 formuje invariantní podprostor grupy S_3 :

$$\psi_1 = \frac{1}{4}(dus - dsu + uds - usd) = \psi_2$$

$$\psi_1 = -\psi_1$$

$$\psi_2 = \psi_1$$

$$\psi_2 = \frac{1}{4}(sdu - dsu + sud - usd) = \psi_2 - \psi_1$$

Podobně i ψ_3 a ψ_4 tvoří invariantní podprostor.

6 ZÁVĚR

Ve své bakalářské práci jsem se zabývala poznatky z teorie grup, které jsou využitelné v molekulární a kvantové chemii.

Nejprve jsem se seznámila se základním matematickým aparátem, který se v teorii grup používá a který není součástí předmětu matematika v bakalářském studiu mého oboru. Zaměřila jsem se na studium symetrických grup. V práci jsem popsala na příkladech symetrie čtverce a rovnostranného trojúhelníka jednu z pěti operací symetrie – rotaci okolo osy. Pro efektivnější práci se používají reprezentace grup. Po jejich vymezení jsem na příkladech uvedla různé reprezentace v dimenzi i reprezentace v různých dimenzích. Těžiště jsem viděla v reprezentaci grup permutací pomocí Fererrových diagramů a Youngových tabulek. To ilustruji na řadě příkladů.

Z matematického aparátu jsem se seznámila i s operátory a způsobem zápisu pomocí operátorů. Aplikovala jsem ho na vysvětlení energie v systému dvou a tří částic. Tento problém kvantové chemie jsem vysvětlila za použití poznatků, které jsem v celé práci budovala.

Práce mi umožnila aktivně používat další matematické metody pro studium molekul a kvantové chemie. Budu dále připravena studovat symetrie molekul a stereochemii, pochopit optickou aktivitu. To vyžaduje zaměřit se i na ostatní operace symetrie a pomocí nich studovat vlastnosti jednotlivých molekul.

7 SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] BARTSCH, Hans-Jochen. *Matematické vzorce*. 3., rev. vyd. Praha: Mladá fronta, 1996. ISBN 80-204-0607-7.
- [2] ROSICKÝ, Jiří. *Algebra*. Vyd. 4., přeprac. Brno: Masarykova univerzita, 2002. ISBN 80-210-2964-1..
- [3] RACHŮNEK, Jiří. *Grupy a kruhy*. Olomouc: Univerzita Palackého, 2005. ISBN 80-244-0998-4.
- [4] FIŠER, J., Úvod do molekulové symetrie (aplikace teorie grup v chemii); SNTL, Praha, 1980
- [5] *Didaktika symetrie molekul*. Brno, 1999. Diplomová práce. Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně. Vedoucí práce Doc. RNDr. Pavel Kubáček, CSc.
- [6] Goodman, Frederik M.: *Algebra: Abstract and Concrete*. [online] Edition 2.5. Semisimple Press. Iowa, 2006. [cit. Dne 2.4.2020]. Dostupné z: <<http://homepage.divms.uiowa.edu/~goodman/algebrabook.dir/download.htm>>.
- [7] Connell, Edwin H.: *Elements of Abstract and Linear Algebra*. [online]. Departments of Mathematics. University of Miami, 1999. [cit. Dne 3.4.2020]. Dostupné z: <<https://www.math.miami.edu/~ec/book/>>
- [8] BICAN, Ladislav. *Algebra (pro učitelské studium)* [online]. Praha: Academia, 2001 [cit. 2020-04-05]. ISBN 80-200-0860-8.
- [9] <http://photox.vscht.cz/files/kvantova-chemie-ver1.pdf>
- [10] *Introduction to Group Theory*. 2. Zurich, Switzerland: European Mathematical Society, 2008. ISBN 3037190418.
- [11] Pauncz, R. (1995). *The Symmetric Group in Quantum Chemistry*. Boca Raton: CRC Press, <https://doi.org/10.1201/9781351077224>
- [12] *Fyzika 5. část - Moderní fyzika*. 3. Brno: VUTIUM, 2006. ISBN 80-214-1868-0e