Exercice 1 *Caractères d'une représentation*

1. 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.

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 suivante:

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

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

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

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

Une autre manière de procéder et de remplir la première ligne et colonne qui sont triviales et d'appliquer le théorème d'orthogonalité pour trouver les 4 éléments restants.

2. 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 $\mathbf{r}$ se transforme avec les relations

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

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

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

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 raprésentations 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

$$b_1 = \frac{1}{6}(1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 1) = 1,$$

$$b_2 = \frac{1}{6}(1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot (-1) \cdot 1) = 0,$$

$$b_3 = \frac{1}{6}(1 \cdot 2 \cdot 3 + 2 \cdot (-1) \cdot 0 + 3 \cdot 0 \cdot 1) = 1.$$

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

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

3. 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

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