

Федеральное агентство по науке и инновациям
Федеральное государственное научное учреждение
«Научно-исследовательский радиофизический институт»

Препринт № 522

**ЛЕКЦИИ ПО ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ
КОНЕЧНЫХ ГРУПП.**

III. ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ И ИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Г. М. Жислин

Нижний Новгород 2009

Жислин Г. М. Лекции по теории представлений конечных групп. III. Точечные группы и их представления // Препринт НИРФИ № 522. — Нижний Новгород: НИРФИ, 2009. 43 с.

В работе изучаются основные группы симметрии молекул. Для каждой из этих групп мы проводим разбиение на классы сопряженных элементов и строим неприводимые представления. Изложенный материал (вместе с нашими предыдущими результатами [1, 2]) позволяет решать задачи о разрешенных и запрещенных переходах, о классификации состояний молекул по симметрии и т. д.

Работа поддержана грантом РФФИ 08-01-00209

VIII. Точечные группы и их представления*

Нет ничего практичнее, чем хорошая теория.

Э. Кондон

Введение

В настоящей работе изучаются точечные группы симметрии молекул: C_n , C_{nh} , C_{nv} , D_n , D_{nd} , D_{nh} , T , T_d , O , O_d . Для каждой из этих групп мы проводим разбиение на классы сопряженных элементов, строим неприводимые представления и — в большинстве случаев — приводим примеры функций, принадлежащих этим представлениям. Содержание работы дает возможность решать ряд практических задач физики твердого тела: в частности, для молекул различной симметрии находить разрешенные и запрещенные переходы [2], проводить классификацию по симметрии электронных состояний молекул и т. д.

Материал данной работы примыкает к [1, 2], где изучалась общая теория представлений конечных групп, но с весьма ограниченным числом примеров и приложений. Поэтому для тех, кто интересуется конечными группами и их представлениями — но равнодушен к симметрии молекул — эта работа дает неплохую возможность проверить и закрепить знание общей теории и освоить технику работы с представлениями конечных групп.

В тексте приведены задания для самостоятельной работы, выполнение которых будет полезно для овладения изложенным материалом.

* Мы продолжаем нумерацию глав [1, 2].

§8.1. Определения. Сопряженные элементы групп и подгрупп

п.1. Точечными группами мы назовем конечные подгруппы полной группы вращений $O(3)$. Напомним [2], что группа $O(3)$ есть прямое произведение $O(3) = O^+(3) \times W$ группы чистых вращений $O^+(3) = \{C_\ell(\varphi) \mid \forall \ell, \forall \varphi\}$ и группы инверсий $W = \{e, i\}$. Здесь и далее $C_\ell(\varphi)$ — вращение на угол φ около ориентированной оси ℓ , проходящей через начало координат, и положительные значения φ отсчитываются против часовой стрелки, если смотреть с конца единичного вектора, направленного по оси ℓ ; i — инверсия, e — единичный элемент (тождественное преобразование). Таким образом, по определению, $O(3) = \{g \mid g = C_\ell(\varphi), C_\ell(\varphi)i, C_\ell(\varphi) \in O^+(3)\}$. В связи с этим полезно заметить, что произведение $C_\ell(\pi)i$ есть отражение σ_h в плоскости, перпендикулярной к оси ℓ и проходящей через начало координат. Чтобы доказать это, выберем правую систему координат так, чтобы ось z была направлена по оси ℓ , а плоскость отражения совпала с плоскостью xy . Тогда, обозначив через $r = (x, y, z)$ координаты произвольной точки из R^3 , имеем

$$iC_\ell(\pi)r = iC_z(\pi)r = i(-x, -y, z) = (x, y, -z) = \sigma_h r,$$

т. е. $iC_\ell(\pi) = \sigma_h$. Отсюда следует равенство

$$i = C_\ell(\pi) \sigma_h. \quad (8.1)$$

Поэтому

$$C_\ell(\varphi + \pi) i = C_\ell(\varphi + 2\pi) \sigma_h = C_\ell(\varphi) \sigma_h. \quad (8.2)$$

Произведение $C_\ell(\varphi) \sigma_h$ называется зеркальным поворотом на угол φ около оси ℓ и обозначается через $S_\ell(\varphi)$. Из сказанного видно, что

$$O(3) = \{g \mid g = C_\ell(\varphi), S_\ell(\varphi) \forall \ell, \forall \varphi\}.$$

Поэтому точечные группы своими элементами могут иметь только повороты $C_\ell(\varphi)$ и зеркальные повороты $S_\ell(\varphi)$ (и, конечно, отражения σ_h , ибо $\sigma_h = S_\ell(0)$). Обсудим теперь классы сопряженных элементов групп $O^+(3)$ и $O(3)$. Согласно [1], для группы $O^+(3)$ это $K(\varphi) = \{C_\ell(\varphi) \mid \forall \ell\}$, для группы $O(3)$ это те же классы $K(\varphi)$, что для $O^+(3)$, и, кроме того, классы $K(\varphi)i = \{C_\ell(\varphi)i \mid \forall \ell\}$. В силу (8.1) $K(\varphi)i = \{S_\ell(\varphi + \pi) \mid \forall \ell\}$. Пусть $K_s(\varphi) = \{S_\ell(\varphi) \mid \forall \ell\}$. Так как углы φ любые, то

$$\{K(\varphi)i \mid \forall \varphi\} = \{K_s(\varphi) \mid \forall \varphi\}.$$

Таким образом, классы сопряженных элементов группы $O(3)$ — это классы $K(\varphi)$ обычных поворотов $C_\ell(\varphi)$ и классы $K_s(\varphi)$ зеркальных поворотов $S_\ell(\varphi)$ на фиксированный угол φ , где класс определяется значением φ . Отметим, что так как в каждый класс входят повороты (или зеркальные повороты) около *любых* осей, то для $\forall \ell$

$$K(\varphi) \ni C_{-\ell}(\varphi) = C_\ell(-\varphi) = C_\ell(2\pi - \varphi)$$

и

$$K_s(\varphi) \ni S_{-\ell}(\varphi) = S_\ell(-\varphi) = S_\ell(2\pi - \varphi).$$

п.2. Обсудим теперь, что происходит с классами сопряженных элементов группы $O(3)$ при переходе к подгруппе G . Известно [1], что при переходе к подгруппе классы сопряженных элементов могут только дробиться. Поэтому нас будет интересовать, в каком случае два элемента g, f из G , лежавшие в одном классе в $O(3)$, останутся в одном классе в G . Чтобы выяснить это, возьмем произвольный элемент $f \in G$ и опишем множество всех элементов

$$g_h = hfh^{-1} \quad \forall h \in G, \quad (8.3)$$

сопряженных с f . Рассмотрим сначала случай $f = C_\ell(\varphi)$, т.е. случай, когда f есть вращение на угол φ около оси ℓ . Выберем систему координат x, y, z так, чтобы положительное направление оси z совпало с направлением оси ℓ , и чтобы единичные

вектора e_1, e_2, e_3 , направленные соответственно по осям ox, oy, oz (рис. 8.1), образывали правую тройку. Согласно [1], $g_h \in K(\varphi)$. Вращение g_h переводит в себя точки hM при $\forall M \in \ell$,

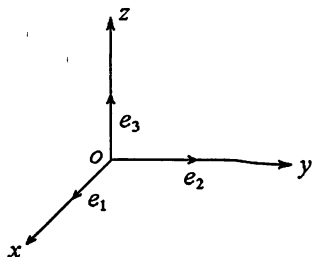


Рис. 8.1

ибо $g_h hM = h f h^{-1} hM = h f M = hM$. Значит g_h — вращение около оси $\ell' = \pm h\ell$. Для определенности всегда считаем $\ell' = h\ell$, т.е. ℓ' имеет направление вектора he_3 . В силу (8.3) мы можем рассматривать матрицу $\|g_h\|$ оператора g_h как матрицу оператора $f = C_\ell(\varphi)$, записанную в базисе $e'_i = h^{-1}e_i, i = 1, 2, 3$. Поэтому g_h есть вращение на угол $\varphi' = \varphi$ или $\varphi' = -\varphi$ около оси ℓ' . Здесь $\varphi' = \varphi$,

если векторы e'_1, e'_2, e'_3 образуют правую тройку, и $\varphi' = -\varphi$ в противном случае.

п.3. Детализуем результаты п.2¹. Если $h \in O^+(3)$, то оператор h^{-1} всегда переводит правую тройку e_1, e_2, e_3 в правую тройку $e'_1, e'_2, e'_3, e'_i = h^{-1}e_i$ (ибо вращение h поворачивает базисный репер e_1, e_2, e_3 как целое). Значит в этом случае g_h — вращение на угол $\varphi' = \varphi$ около оси $\ell' = h\ell$. Если $h \in O(3) \setminus O^+(3)$, т.е. $h = h_0 i$, где $h_0 \in O^+(3)$, то векторы $e'_j = h^{-1}e_j = -h_0^{-1}e_j, j = 1, 2, 3$, образуют левую тройку, так как $h_0^{-1}e_1, h_0^{-1}e_2, h_0^{-1}e_3$ — правая тройка. Поэтому, если в (8.3) h — зеркальный поворот, то g_h — вращение на угол $\varphi' = -\varphi$ (около оси $\ell' = h\ell$).

Пусть теперь f — зеркальный поворот на угол φ около оси ℓ . В этом случае g_h (см. (8.3)) также зеркальный поворот (например, потому, что $\det \|g_h\| = \det \|f\| = -1$, а для вращений $\omega \in O^+(3)$ выполняется $\det \|\omega\| = +1$). Если точка $M = M(0, 0, z) \in \ell$, т.е. M лежит на оси z , и $M' = hM$, то $g_h M' = h f h^{-1} hM = h f M = -hM$. Значит оператор g_h действует на

¹ При ссылках на пункты того же параграфа мы указываем только номер пункта, а ссылки на пункты другого параграфа даются с номером этого параграфа. Скажем, п.8.3.1 — это п.1 §8.3 и т.д.

точки M' оси $\ell' = h\ell$ как оператор отражения $\sigma_h = \sigma_h(\ell')$ и поэтому g_h — зеркальный поворот около оси ℓ' . Для такого вывода мы используем не только равенство $g_h M' = -M'$, но и тот факт, что g_h — зеркальный поворот, ибо равенство $g_h M' = -M'$ выполняется и для вращений g_h на угол π около оси, перпендикулярной к прямой $h\ell$ в точке $(0, 0, 0)$. Как и ранее за направление ℓ' примем направление вектора he_3 . Далее, поскольку в базисе e_1, e_2, e_3 матрица оператора g_h совпадает с матрицей $\|f\|$, то g_h — зеркальный поворот на угол $\varphi' = \pm\varphi$, где знак перед φ зависит от h . Как и выше убеждаемся, что $\varphi' = \varphi$ если h — чистое вращение, и $\varphi' = -\varphi$ если h — зеркальный поворот.

п.4. Приведем примеры применения результатов пп.2,3. Эти примеры будут использоваться в дальнейшем.

1. Пусть $g = C_{a_2}(\varphi)$, $g_- = g^{-1} = C_{a_2}(-\varphi) = C_{a_2}(2\pi - \varphi)$, элемент $f = C_{a_1}(\varphi) \in G$ и $\exists h$, $h \in G$ так, что $a_2 = ha_1$ (здесь и далее a_1, a_2 — произвольные оси и φ — любой фиксированный угол). Тогда, если $h \in O^+(3)$, то $g = hfh^{-1}$, то есть $g \in G$ и $g \sim f$ в G ; если h — зеркальный поворот, то $g_- = hfh^{-1}$, то есть $g_- \in G$ и $g_- \sim f$ в G . Действительно, согласно п.3 элемент $g' := hfh^{-1}$ есть поворот около оси ha_1 на угол φ , если $h \in O^+(3)$, или на угол $(-\varphi)$, если $h \in O(3) \setminus O^+(3)$. Поэтому $g' = g$ или $g' = g_-$ в зависимости от h .

Совершенно аналогичная ситуация имеет место и для зеркальных поворотов. Пусть $g = S_{a_2}(\varphi)$, $g_- = g^{-1} = S_{a_2}(-\varphi) = S_{a_2}(2\pi - \varphi)$, элемент $f = S_{a_1}(\varphi) \in G$ и $\exists h$, $h \in G$, так, что $a_2 = ha_1$. Тогда, если $h \in O^+(3)$, то $g = hfh^{-1}$; если $h \in O(3) \setminus O^+(3)$, то $g_- = hfh^{-1}$. Отметим, что $g_- = g$ при $\varphi = \pi$ и поэтому в данном случае $g \sim f$ в G независимо от свойств h , но, разумеется, при условии $a_2 = ha_1$.

2. Пусть $g_- = C_z(-\varphi) \equiv C_z(2\pi - \varphi)$ и группа G содержит вращение $f = C_z(\varphi)$ и отражение σ_{v_1} относительно плоскости v_1 , содержащей ось z . Положим $g' = \sigma_{v_1} f \sigma_{v_1}$. Тогда согласно п.3 g' есть вращение на угол $(-\varphi)$ около оси z , т.е. $g = g_-$. Кстати, равенство $g' = g_- = C_z(-\varphi)$ легко проверяется непосредственно.

Выберем координаты x, y, z так, чтобы плоскость xz совпала с v_1 . Тогда $\|f\| = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\|\sigma_{v_1}\| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ и, значит, $\|g\| = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, т. е. $g' = C_z(-\varphi)$.

3. Пусть отражение σ_{v_1} из группы G то же самое, что в примере 2, $h = C_z(\varphi) \in G$ и $g' = h\sigma_{v_1}h^{-1}$. Выберем систему координат так же, как в примере 2. Так как $\sigma_{v_1} = S_y(0)$ — зеркальный поворот около оси y на угол $\psi = 0$, то в силу п.3 g' — зеркальный поворот около оси hy на угол $\psi = 0$, т. е. $g' = S_{hy}(0)$. Ясно что g' — отражение $\sigma_{v'}$ относительно плоскости v' , перпендикулярной к оси hy и содержащей ось z . Очевидно $v' = C_z(\varphi)v_1$. Таким образом, сопряженным элементом к σ_{v_1} является отражение $\sigma_{v'}$ относительно плоскости v' , полученной из v_1 вращением на угол φ около оси z .

4. Пусть $f = C_z(\varphi) \in G$ и $h = C_{a_1}(\pi) \in G$, где ось a_1 перпендикулярна к оси z . Выберем систему координат так, чтобы плоскость xy содержала a_1 . Пусть $g' = hfh^{-1}$. Согласно п.1, g' есть вращение на угол φ около оси $hz = -z$. Но $C_{-z}(\varphi) = C_z(-\varphi)$ и значит $g' = C_z(-\varphi) = f^{-1}$. Таким образом $f \sim f^{-1}$. Обсудим теперь, что представляет из себя элемент $g = fhf^{-1}$. Согласно п.2 $g = C_a(\pi)$, где ось a получена из оси a_1 вращением на угол φ около оси z : $a = fa_1$. Таким образом в этом случае вращения $C_a(\pi)$ и $C_{a_1}(\pi)$ сопряжены в G .

В заключение только для иллюстрации нашего общего подхода приведем пример с очевидным результатом. Пусть $f = C_z(\varphi)$, σ_h — отражение относительно плоскости, перпендикулярной к оси z , и $g' = \sigma_h f \sigma_h$. Тогда, согласно п.2, g' есть вращение относительно оси $z' = \sigma_h z = -z$ на угол $(-\varphi)$, то есть $g' = C_{-z}(-\varphi) = C_z(\varphi) = f$. Но это очевидно, ибо $\sigma_h f = f \sigma_h$ и значит $g' = f \sigma_h^2 = f$.

§8.2. Группы C_n, C_{nh}

п.1. В этом параграфе мы начинаем изучение конкретных точечных групп и их представлений. Простейшая точечная группа — C_n . Она состоит из поворотов $C_\ell \left(\frac{2\pi}{n} k \right)$ на углы $\frac{2\pi}{n} k$, $k = 0, 1, \dots, n-1$, вокруг фиксированной оси ℓ . Примем ось вращения ℓ за ось z и положим $C_n^1 = C_z \left(\frac{2\pi}{n} \right)$. Тогда $C_z \left(\frac{2\pi}{n} k \right) = C_n^k$ и мы можем записать

$$C_n = \left\{ C_z \left(\frac{2\pi}{n} k \right) \mid k = 0, 1, \dots, n-1 \right\} = \left\{ C_n^{k-1} \mid k = 1, 2, \dots, n \right\}.$$

Таким образом, C_n — циклическая подгруппа группы $O^+(3)$ порядка n . Если система имеет симметрию группы C_n , то говорят, что она обладает осью симметрии n -го порядка. Если n не является простым числом, например $n = m_1 m_2$, где $m_1, m_2 \geq 2$, то группа $C_n \supset C_{m_i}$ и ось n -го порядка одновременно является осью m_i -го порядка. Обычно под порядком оси понимается наибольший из её порядков.

Так как группа C_n — абелева, то она имеет n не эквивалентных неприводимых представлений и они одномерны. Рассмотрим одно из них. Пусть $C_n^1 \rightarrow \varepsilon$, где ε — какое-то число. Тогда $C_n^n = e \rightarrow \varepsilon^n = 1$, где e — единичный элемент группы C_n . Следовательно, $\varepsilon = \sqrt[n]{1}$. Таким образом, в качестве ε можно взять любой из корней $\varepsilon_k = e^{\frac{2\pi i}{n} k}$, $k = 0, 1, 2, \dots, n-1$, и каждое значение k определяет свое неприводимое представление. Пусть $\varepsilon_1 = e^{\frac{2\pi i}{n}}$. Обозначим через A_j тип неприводимого представления $g \rightarrow D_g^{(A_j)}$, $g \in C_n$, группы C_n , в котором $C_n^1 \rightarrow \varepsilon_1^{j-1}$. Тогда характеры всех неприводимых представлений группы C_n даются следующей таблицей 8.1,

Таблица 8.1

Тип предст. \ g	e	C_n^1	C_n^2	...	C_n^{n-1}	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	...	1	
A_2	1	ε_1	ε_1^2	...	ε_1^{n-1}	
A_3	1	ε_1^2	ε_1^4	...	ε_1^{n-2}	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	
A_n	1	ε_1^{n-1}	ε_1^{n-2}	...	ε_1	

где учтено, что $\varepsilon_1^n = 1$. Здесь и во всех таблицах далее столбцы — кроме первого и последнего — отвечают классам сопряженных элементов рассматриваемых групп (для C_n и вообще для абелевых групп каждый элемент группы образует класс), а строки, начиная со второй, — характерам неприводимых представлений (для одномерных представлений в строке записаны одномерные матрицы представления, равные значениям характеров). В первом столбце мы указываем типы неприводимых представлений, в последнем столбце $\psi(r)$ (при его наличии) в клетках каждой строки — если они заполнены — приведены примеры функций $\psi(r)$, $r = (x, y, z)$, принадлежащих неприводимому представлению, определенному в данной строке.

п.2. Рассмотрим подробнее группы C_2 и C_3 . Для $C_2 = \{e, C_2^1\}$ имеем

Таблица 8.2

Тип предст. \ g	e	C_2^1	$\psi(r)$
A_1	1	1	$z; xy$
A_2	1	-1	$x; y$

Используя проекторы $P^{(A_i)}$, отвечающие неприводимым пред-

ставлениям A_1, A_2 (см. [2, §2]), имеем

$$P^{(A_1)}\psi(x, y, z) = \frac{\psi(x, y, z) + \psi(-x, -y, z)}{2},$$

$$P^{(A_2)}\psi(x, y, z) = \frac{\psi(x, y, z) - \psi(-x, -y, z)}{2}.$$

Поэтому

$$P^{(A_2)}x = x, \quad P^{(A_2)}y = y, \quad P^{(A_1)}z = z, \quad P^{(A_1)}xy = xy \text{ и т. д.}$$

(Очевидно, что $P^{(A_1)} + P^{(A_2)} = I$ — как и должно быть.)

Отметим, что неприводимое представление группы C_2 одновременно является неприводимым представлением любой группы второго порядка, ибо все такие группы изоморфны C_2 . Таким образом, табл. 8.2 дает не только неприводимые представления группы C_2 , но также представления группы инверсий $W = \{e, i\}$ и группы отражений $C_s = \{e, \sigma_h\}$, однако для этих групп заполнение столбца $\psi(\tau)$ меняется.

Задание. Построить проекторы для неприводимых представлений групп W и C_s и привести примеры функций, принадлежащих неприводимым представлениям этих групп.

Переходим к группе $C_3 = \{e, C_3^1, C_3^2\}$. Для нее имеем

Таблица 8.3

Тип предст. \ g	e	C_3^1	C_3^2	$\psi(\tau)$
A	1	1	1	$z; \rho e^{\pm 3i\varphi}$
B_1	1	ε_1	ε_1^2	$x - iy = \rho e^{-i\varphi}$
B_2	1	ε_1^2	ε_1	$x + iy = \rho e^{i\varphi}$

Здесь (ρ, φ, z) — цилиндрические координаты произвольной точки $(x, y, z) \in R^3$.

Некоторые базисные функции представлений $D_g^{(\alpha)}$, $\alpha = A, B_1, B_2$ записаны в столбце $\psi(r)$. То, что эти функции принадлежат соответствующим представлениям, можно проверить с помощью проекторов $P^{(A)}$, $P^{(B_i)}$, а можно — используя одномерность всех представлений — просто посмотреть, как эти функции преобразуются под действием операторов T_g : $T_g\psi(r) = \psi(g^{-1}r)$, $g \in C_3$. Сделаем это при $g = C_3^k$. Имеем:

$$T_g \psi(\rho, \varphi, z) = \psi\left(\rho, \varphi - \frac{2\pi k}{3}, z\right).$$

Поэтому

$$T_g z = z, \quad T_g \rho e^{\pm 3i\varphi} = \rho e^{\pm 3i(\varphi - \frac{2\pi k}{3})} = \rho e^{\pm 3i\varphi}, \quad \text{т. е.}$$

$$z, \rho e^{\pm 3i\varphi} \in D_g^{(A)}.$$

Далее

$$T_g \rho e^{\mp i\varphi} = \rho e^{\mp i(\varphi - \frac{2\pi k}{3})} = \rho e^{\mp i\varphi} e^{\pm \frac{2\pi k}{3}}, \quad \text{т. е.}$$

$$\rho e^{-i\varphi} \in D_g^{(B_1)}, \quad \rho e^{+i\varphi} \in D_g^{(B_2)}.$$

Комплексно-сопряженные представления $D_g^{(B_1)}$ и $D_g^{(B_2)}$ иногда объединяют в одно двумерное приводимое представление, которое становится неприводимым при добавлении к оси 3-го порядка плоскости отражения (см. §8.3).

Задания.

1. Проверить соотношения ортогональности для характеров представлений типов A, B_1, B_2 .
2. Рассмотреть представление группы C_3 , которое получается из представления $g \rightarrow D_g^{(\ell)}$, $g \in O^+(3)$ группы $O^+(3)$ при сужении его с $O^+(3)$ на C_3 , т. е. при $g \in C_3$, и разложить полученное (приводимое) представление группы C_3 на неприводимые (используя равенства

$$\chi_g^{(\ell)} = \text{Tr} D_g^{(\ell)} = \frac{\sin\left(\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\varphi\right)}{\sin\frac{\varphi}{2}} \text{ при } g \in K(\varphi).$$

3. Написать таблицу характеров неприводимых представлений группы C_4 и построить какие-либо базисные функции этих представлений.

п.3. Группа C_{nh} . По определению $C_{nh} = C_n \times C_s$, где содержащееся в C_s отражение σ_h есть отражение в плоскости, перпендикулярной к оси n -го порядка группы C_n . Группа C_{nh} — абелева. По определению

$$C_{nh} = \left\{ gg' \mid g = C_n^{k-1}, k = 1, 2, \dots, n, g' = e, \sigma_h \right\},$$

т. е. C_{nh} состоит из поворотов C_n^k и зеркальных поворотов $S_n^{(k)} = S_n \left(\frac{2\pi}{n} k \right) = C_n^k \sigma_h^2$. Если n — четное, то $C_n^{\frac{n}{2}} = C_n(\pi)$ и в силу (8.1) группа C_{nh} содержит инверсию.

Неприводимые представления группы C_{nh} суть прямые произведения $D_{gg'}^{(\alpha, \alpha')} = D_g^{(\alpha)} \times D_{g'}^{(\alpha')}$ неприводимых представлений $D_g^{(\alpha)}$ группы C_n (табл. 8.1) и представлений $D_{g'}^{(\alpha')}$ группы C_s , характеры которых даны в табл. 8.4:

Таблица 8.4

Тип предст. \ g	e	σ_h
A'_1	1	1
A'_2	1	-1

Построим таблицу характеров неприводимых представлений, например, для группы C_{3h} :

² Заметим, что в то время как $C_z \left(\frac{2\pi}{n} k \right) = (C_n^1)^k = C_n^k$ при $\forall k$, для зеркальных поворотов аналогичное равенство $S_n \left(\frac{2\pi}{n} k \right) = (S_n^1)^k = S_n^k$ справедливо только при нечетных k , ибо $(S_n^1)^k = C_n^k \sigma_h^k$, а $S_n \left(\frac{2\pi}{n} k \right) = C_n^k \sigma_h$.

Тип предст. \ g	C_3^0	C_3^1	C_3^2	σ_h	$C_3^1\sigma_h$	$C_3^2\sigma_h$	$\psi(r)$
(A, A'_1)	1	1	1	1	1	1	$\rho e^{\pm 3i\varphi}$
(B_1, A'_1)	1	ε_1	ε_1^2	1	ε_1	ε_1^2	$\rho e^{-i\varphi}$
(B_2, A'_1)	1	ε_1^2	ε_1	1	ε_1^2	ε_1	$\rho e^{+i\varphi}$
(A, A'_2)	1	1	1	-1	-1	-1	$z\rho e^{\pm 3i\varphi}$
(B_1, A'_2)	1	ε_1	ε_1^2	-1	$-\varepsilon_1$	$-\varepsilon_1^2$	$z\rho e^{-i\varphi}$
(B_2, A'_2)	1	ε_1^2	ε_1	-1	$-\varepsilon_1^2$	$-\varepsilon_1$	$z\rho e^{i\varphi}$

Что касается функций, принадлежащих соответствующим представлениям, то правильность заполнения столбца $\psi(r)$ можно проверить так же, как для таблиц 8.2, 8.3.

§8.3. Группы C_{nv}

п.1. Группа C_{nv} — группа симметрии квантовой системы Z , у которой есть ось симметрии n -го порядка и содержащая её плоскость симметрии. Пример такой квантовой системы — пирамида,

в основании которой — правильный n -угольник с тождественными атомами в вершинах, и высота которой попадает в центр окружности, описанной около n -угольника основания. В случае $n = 3$ в качестве Z можно рассматривать молекулу хлороформа CHCl_3 или

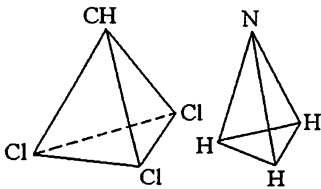


Рис. 8.2

аммиака NH_3 (рис. 8.2). Рассмотрение этих молекул показывает, что у них есть не одна плоскость симметрии (проходящая через ось 3-го порядка), а три. Докажем, что аналогичная ситуация

имеет место и в общем случае, т. е. что наличие одной плоскости симметрии v_1 приводит к существованию еще $(n - 1)$ плоскостей симметрии v_k , $k = 2, 3, \dots, n$, содержащих ось n -го порядка и образующих — каждая — углы $\frac{\pi}{n}$ с соседними плоскостями. Выберем направление оси z по оси симметрии, введем плоскости v_k как описано выше и обозначим через σ_{v_k} отражение относительно k -й плоскости. Выберем ось x так, чтобы плоскость v_1 совпала с координатной плоскостью xz . По определению, произведение $C_n^1 \sigma_{v_1} \in C_{nv}$. Покажем, что

$$\sigma_{v_2} = C_n^1 \sigma_{v_1}, \quad (8.4)$$

откуда будет следовать, что

$$\sigma_{v_k} = C_n^1 \sigma_{v_{k-1}} = C_n^{k-1} \sigma_{v_1}, \quad k = 2, 3, \dots, n, \quad (8.5)$$

и всё будет доказано. Пусть $M \in R^3$. Введя цилиндрические координаты ρ, φ, z точки M видим, что при любых вращениях C_n^k и любых отражениях σ_{v_i} координаты ρ и z не меняются. Поэтому проследим только за изменением угла φ под действием операторов в (8.4). Для этого достаточно рассмотреть проекцию $M'(\rho, \varphi)$ точки M на плоскость xy . Имеем (рис. 8.3)

$$\sigma_{v_2} M' = M'' \left(\rho, \frac{2\pi}{n} - \varphi \right),$$

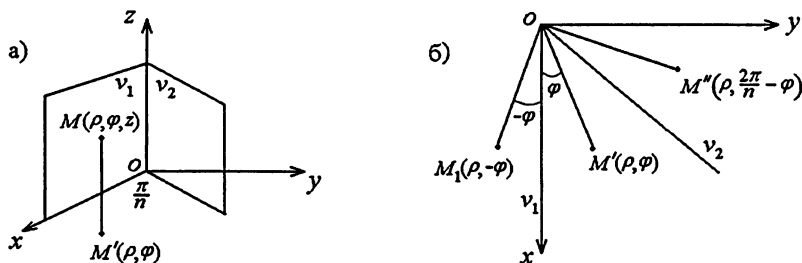


Рис. 8.3

$$\begin{aligned}\sigma_{v_1} M' &= M_1(\rho, -\varphi), \\ C_n^1 M_1 &= M'' \left(\rho, -\varphi + \frac{2\pi}{n} \right).\end{aligned}$$

Откуда и следует (8.4), а значит и (8.5). Так же, как (8.4), проверяется равенство

$$C_z(\varphi) \sigma_{v_1} = \sigma_{v_1} C_z(-\varphi) \quad (8.6)$$

откуда, полагая $\varphi = \frac{2\pi}{n} k$, имеем

$$C_n^k \sigma_{v_1} = \sigma_{v_1} C_n^{-k} \quad (8.7)$$

и

$$\text{а) } \sigma_{v_1} = C_n^{-k} \sigma_{v_1} C_n^{-k}, \quad \text{б) } C_n^k = \sigma_{v_1} C_n^{-k} \sigma_{v_1}. \quad (8.8)$$

Полезным является также равенство

$$\sigma_{v_k} = C_n^{-1} \sigma_{v_k} C_n^{-1}. \quad (8.9)$$

Чтобы его получить, применим оператор C_n^{-1} к (8.7). Тогда

$$\sigma_{v_k} = C_n^{k-1} \sigma_{v_1} = C_n^{-1} \sigma_{v_1} C_n^{-k},$$

где в силу (8.7)

$$\sigma_{v_1} C_n^{-k+1} C_n^{-1} = C_n^{k-1} \sigma_{v_1} C_n^{-1} = \sigma_{v_k} C_n^{-1}$$

и (8.9) доказано.

Покажем, что группа C_{nv} не содержит других элементов, кроме C_n^k и σ_{v_s} . В силу (8.5)–(8.7) для этого достаточно показать, что

$$\text{а) } \sigma_{v_i} \sigma_{v_s} = C_n^{i-s}, \quad \text{б) } \sigma_{v_i} C_n^s = \sigma_{v_{i-s}}, \quad (8.10)$$

где при $i - s \leq 0$ надо заменить $i - s$ на $n + i - s$. Доказательство равенств (8.10) почти очевидно. Используя (8.5) и (8.8б) имеем

$$\sigma_{v_i} \sigma_{v_s} = C_n^{i-1} \sigma_1 C_n^{s-1} \sigma_{v_1} = C_n^{i-1} C_n^{1-s} = C_n^{i-s}$$

и

$$\sigma_{v_i} C_n^s = C_n^{i-1} \sigma_{v_1} C_n^s = C_n^{i-1} C_n^{-s} \sigma_{v_1} = C_n^{i-s-1} \sigma_{v_1} = \sigma_{v_{i-s}}.$$

Таким образом, группа C_{nv} исчерпывается элементами C_n^{k-1}, σ_{v_k} , $k = 1, \dots, n$.

п.2. Найдем классы сопряженных элементов группы C_{nv} . В силу (8.8b) $C_n^k \sim C_n^{-k} = C_n^{n-k}$ и, следовательно, классы, содержащие вращения, суть

$$\{e\}, \{C_n^1, C_n^{n-1}\}, \{C_n^2, C_n^{n-2}\}, \dots,$$

где при четном n последний класс $\left\{C_n^{\frac{n}{2}}, C_n^{\frac{n}{2}}\right\}$ состоит из одного элемента $C_n^{\frac{n}{2}} = C_z(\pi)$. Найдем теперь классы сопряженных элементов, состоящие из отражений σ_{v_i} . Мы увидим, что при нечетном n все отражения $\sigma_{v_1}, \sigma_{v_2}, \dots, \sigma_{v_n}$ попадают в один класс, а при четном n имеются 2 класса:

$$K_\sigma = \{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots, \sigma_{n-1}\} \text{ и } K'_\sigma = \{\sigma_2, \sigma_4, \dots, \sigma_n\}.$$

Докажем это. В силу (8.5), (8.9)

$$\sigma_{v_{k+2}} = C_n^2 \sigma_{v_k} = C_n^1 \sigma_{v_k} C_n^{-1}, \quad (8.11)$$

т. е. всегда $\sigma_{v_{k+2}} \sim \sigma_{v_k}$. В силу этого при нечетном n

$$\sigma_{v_1} \sim \sigma_{v_3} \sim \sigma_{v_5} \sim \dots \sim \sigma_{v_n} \text{ и } \sigma_{v_2} \sim \sigma_{v_4} \sim \dots \sim \sigma_{v_{n-1}}.$$

Используя (8.11) с $k = n - 1$ видим, что $\sigma_{v_{n+1}} \sim \sigma_{v_{n-1}}$, но $\sigma_{v_{n+1}} = \sigma_{v_1}$ и, значит, при нечетном n выполняется $\sigma_{v_{n-1}} \sim \sigma_{v_1}$, откуда следует, что $\sigma_{v_1} \sim \sigma_{v_s}$ при $\forall s$, т. е. что при нечетном n классы K_σ и K'_σ объединяются в один класс. Покажем, что при четном n объединение классов не происходит. Для этого достаточно доказать, что $\sigma_{v_1} \not\sim \sigma_{v_2}$, т. е. что равенство

$$\sigma_{v_2} = g \sigma_{v_1} g^{-1} \quad (8.12)$$

не выполняется ни при каких $g \in C_{nv}$, т. е. при $g = C_n^k$ и $g = \sigma_{v_k}$ ни при каких k . Если $g = C_n^k$, то из (8.12) в силу (8.8b) получаем

$$C_n^1 \sigma_{v_1} = C_n^k \sigma_{v_1} C_n^{-k} = C_n^k C_n^k \sigma_{v_1}, \quad \text{т. е. } C_n^{2k-1} = e,$$

что при четном n невозможно.

Далее, если $g = \sigma_{v_k}$, то из (8.12) в силу (8.4), (8.5), (8.10) следует

$$\sigma_{v_2} = \sigma_{v_k} \sigma_{v_1} \sigma_{v_k} \equiv C_n^{k-1} C_n^{k-1} \sigma_{v_1},$$

т. е. $C_n^1 = C_n^{2k-2}$, или $C_n^{2k-3} = e$, что невозможно, так как n — четное. Значит, при четном n классы K_σ и K'_σ не объединяются в один. Таким образом мы полностью определили классы сопряженных элементов группы C_{nv} при $\forall n$. Согласно сказанному, например, в группе

$$C_{4v} = \{g \mid g = e, C_4^1, C_4^2, C_4^3, \sigma_{v_1}, \sigma_{v_2}, \sigma_{v_3}, \sigma_{v_4}\}$$

существует 5 классов сопряженных элементов:

$$\{e\}, \{C_4^1, C_4^3\}, \{C_4^2\}, \{\sigma_{v_1}, \sigma_{v_3}\}, \{\sigma_{v_2}, \sigma_{v_4}\}.$$

Мы провели подробный анализ разбиения группы C_{nv} на классы сопряженных элементов не используя результаты §8.1, так как нашей целью была определенная тренировка читателя; если же применить выводы §8.1, то в силу п.8.1.3 $\sigma_{v_1} \sim \sigma_{v'} \equiv \sigma_{v_3}$ (ибо $v' = v_3 = C_n^1 v_1$), $C_z(-\varphi) \sim C_z(\varphi)$ и т. д.

п.3. Изучим представления группы $C_{3v} = \{e, C_3^1, C_3^2, \sigma_{v_1}, \sigma_{v_2}, \sigma_{v_3}\}$. У нее имеется 3 класса сопряженных элементов: $\{e\}$, $\{C_3^1, C_3^2\}$, $\{\sigma_{v_1}, \sigma_{v_2}, \sigma_{v_3}\}$ и, значит, 3 не эквивалентных неприводимых представления. В силу первой теоремы Бернсайда два из них — $D_g^{(A_1)}$, $D_g^{(A_2)}$ — одномерные и одно — $D_g^{(E)}$ — двумерное. Таблица характеров этих представлений выглядит так:

Таблица 8.6

Тип предст. \ g	e	C_3^1, C_3^2	$\sigma_{v_1}, \sigma_{v_2}, \sigma_{v_3}$	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	$z, \rho (e^{3i\varphi} + e^{-3i\varphi})$
A_2	1	1	-1	$\rho (e^{3i\varphi} - e^{-3i\varphi})$
E	2	-1	0	$\mathcal{L} \{ \rho e^{i\varphi}, \rho e^{-i\varphi} \}$

где $\mathcal{L}\{f_1, f_2\}$ — линейная оболочка функций f_1, f_2 . Обсудим заполнение табл. 8.6. Представление $D_g^{(A_1)}$ — тождественное, поэтому характеры равны единице. В представлении $D_g^{(A_2)}$ в втором столбце 1 ($= \dim D_g^{(A_2)}$), в третьем — тоже 1, ибо если $C_3^1 \rightarrow a$, то $C_3^2 \rightarrow a^2 = a$, так как элементы C_3^1, C_3^2 — в одном классе, т. е. $a^2 - a = 0$. В четвертом столбце должна быть или +1 или -1, так как при $\sigma_{v_i} \rightarrow b, \sigma_{v_i}^2 = e \rightarrow 1 = b^2$, т. е. $b = \pm 1$, но +1 не подходит, так как в этом случае мы имели $D_g^{(A_2)} = D_g^{(A_1)}$. Поэтому пишем (-1).

Наконец, в представлении типа E во втором столбце пишем 2 ($= \dim D_g^{(E)}$), а заполнение 3-го и 4-го столбцов получаем из следствия первой теоремы Бернсайда:

$$\chi_g^{(A_1)} + \chi_g^{(A_2)} + 2\chi_g^{(E)} = 0, \quad g \neq e.$$

Поясним заполнение столбца $\psi(r)$ в табл. 8.6. Мы используем для этого в качестве “исходника” столбец $\psi(r)$ в табл. 8.3. Функция $\psi(r) = z$ не меняется при преобразованиях $T_g, g \in C_{3v}$, и, значит, $z \in D_g^{(A_1)}$. Функции $\rho e^{\pm 3i\varphi} \notin D_g^{(A_1)}$ (хотя они и инвариантны для преобразований $T_g, g = C_3^1, C_3^2$), так как под действием оператора $T_{\sigma_{v_1}}$ они переходят друг в друга. Поэтому, если мы возьмем их сумму, то она инвариантна для $T_{\sigma_{v_1}}$, а значит и для $T_{\sigma_2}, T_{\sigma_3}$ (объясните, почему). Следовательно, сумма $\rho (e^{3i\varphi} + e^{-3i\varphi}) \in D_g^{(A_1)}$. Из тех же соображений следует, что разность $\rho (e^{3i\varphi} - e^{-3i\varphi})$ принадлежит представлению $D_g^{(A_2)}$. Далее, представления $D_g^{(B_1)}$

и $D_g^{(B_2)}$ группы C_3 объединяются в одно представление группы C_{3v} в том смысле, что каждая из функций $f_1 = \rho e^{-i\varphi}$, $f_2 = \rho e^{i\varphi}$ под действием операторов $T_{\sigma_{v_1}}$ переходит в другую и, значит, пространство $L = \mathcal{L}\{f_1, f_2\}$

- 1) инвариантно для операторов T_g , $g \in C_{3v}$,
- 2) не содержит инвариантных одномерных подпространств.

Задание. Докажите, что утверждения 1), 2) верны.

В силу 1), 2) представление $g \rightarrow T_g$ в L неприводимо и, значит, имеет тип E . Так как $f_1 = \rho e^{i\varphi} = x + iy$, $f_2 = \rho e^{-i\varphi} = x - iy$, то $x = \frac{f_1 + f_2}{2} \in D_g^{(E)}$, $y = \frac{f_1 - f_2}{2i} \in D_g^{(E)}$.

Задание. Найти разрешенные и запрещенные переходы (см. [2, §7.2, 7.3]) для квантовой системы с симметрией C_{3v} под действием

а) электрического дипольного момента: возмущающий оператор $Q = r = (x, y, z)$;

б) магнитного дипольного момента: возмущающий оператор Q_0 имеет относительно преобразований из $O(3)$ ту же симметрию, что оператор

$$Q = (Q_1, Q_2, Q_3) = [r \times r'] = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ x & y & z \\ x' & y' & z' \end{pmatrix},$$

который мы и рассматриваем в качестве возмущения.

Замечание. Для нахождения симметрии компонент

$$Q_x = yz' - zy', \quad Q_y = x'z - xz', \quad Q_z = xy' - yx'$$

вектора Q относительно преобразований группы C_{3v} можно воспользоваться проекторами $P^{(A_i)}$, $i = 1, 2$, и $P^{(E)}$, однако кое-что можно сообразить и без них. Например, Q_z есть векторное произведение векторов (x, y) и (x', y') ; поэтому функция Q_z инвариантна относительно любых вращений около оси z и, в частности, относительно операторов T_g , $g \in C_3^k$, $k = 1, 2$. В то же время $T_{\sigma_1} Q_z = -Q_z$ и, значит, $Q_z \in D_g^{(A_2)}$.

§8.4. Группы D_n , D_{nh}

п.1. D_n — группа симметрии системы Z , имеющей ось симметрии ℓ n -го порядка и перпендикулярную к ней ось a_1 2-го порядка. Пример системы Z с симметрией D_n — это прямоугольная призма, в вершинах которой расположены тождественные атомы, а в основании — правильный n -угольник. Рассмотрение таких призм для конкретных значений n (случай $n = 4$ см. на рис. 8.4) показывает, что кроме оси a_1 система Z будет иметь еще $(n - 1)$ осей a_i , $i = 2, 3, \dots, n$, второго порядка, причем все оси a_i располагаются в одной плоскости, перпендикулярной к ℓ и проходящей через центр призмы, и угол между a_i и a_{i+1} равен $\frac{\pi}{n}$.

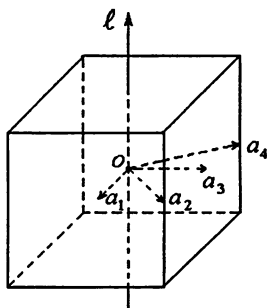


Рис. 8.4

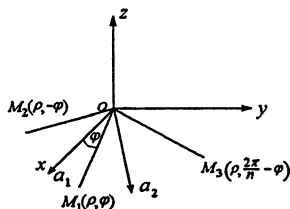


Рис. 8.5

Докажем, что такая ситуация имеет место в общем случае, т. е. при произвольном n . Выберем систему координат, направив ось z по оси n -го порядка, а ось x — по оси a_1 . Проведем луч a_2 в плоскости xy так, что угол между a_1 и a_2 равен $\frac{\pi}{n}$ и покажем, что

$$C_{a_2}(\pi) = C_n^1 C_{a_1}(\pi). \quad (8.13)$$

Для проверки (8.13) применим операторы обеих частей (8.13) к произвольной точке $M(\rho, \varphi, z)$, где ρ, φ, z — цилиндрические координаты. Тогда z перейдет в $(-z)$, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ не изменится и нам остается проследить только за изменением угла φ . Рассмотрим точку $M_1(\rho, \varphi)$ — проекцию M на плоскость xy . Тогда (см. рис. 8.5)

$$C_{a_1} M_1 = M_2(\rho, -\varphi), \quad C_n^1 M_2 = M_3 \left(\rho, -\varphi + \frac{2\pi}{n} \right),$$

т. е.

$$C_n^1 C_{a_1}(\pi) M = \left(\rho, \frac{2\pi}{n} - \varphi, -z \right).$$

С другой стороны $C_{a_2} M_1(\rho, \varphi) = M_3 \left(\rho, \frac{2\pi}{n} - \varphi \right)$ и значит (8.13) доказано. Поэтому $C_{a_2}(\pi) \in D_n$. Если $n \geq 3$, то, приняв ось a_2 за исходную, мы доказываем, что $C_{a_3}(\pi) = C_n^1 C_{a_2}(\pi) = C_n^2 C_{a_1}(\pi) \in D_n$, где ось a_3 лежит в плоскости xy и образует угол $\frac{\pi}{n}$ с осью a_2 , и т. д. Таким образом мы можем утверждать, что $D_n \supset \{C_n^{k-1}, C_{a_k}(\pi), k = 1, 2, \dots, n\}$. Теперь можно доказать отсутствие в D_n других элементов кроме C_n^k и $C_{a_k}(\pi)$ и разбить D_n на классы сопряженных элементов. Это делается абсолютно так же, как для группы C_{nv} , если повторить имевшиеся там рассуждения, заменяя всюду σ_{v_k} на $C_{a_k}(\pi)$. Далее у оператора $C_{a_k}(\pi)$ аргумент π опускаем, полагая $C_{a_k} = C_{a_k}(\pi)$.

Задание. Доказать, что

- $D_n = \{g \mid g = C_n^{k-1}, C_{a_k}, k = 1, 2, \dots, n\}$;
- $C_n^k \sim C_n^{n-k}$ при $\forall k$;
- $C_{a_{k+2}} \sim C_{a_k}$ при $\forall k$;
- $C_{a_i} \sim C_{a_j}$ при $\forall i, j$ если n — нечетное;
- $C_{a_1} \not\sim C_{a_2}$ при четном n .

После того, как проверено равенство а) Задания, можно установить естественное взаимно-однозначное соответствие между

элементами групп C_{nv} и D_n :

$$C_n^k \leftrightarrow C_n^k, \quad \sigma_{v_i} \leftrightarrow C_{a_i}$$

и доказать, что оно является изоморфизмом (сделать это). Заметим, что после доказательства изоморфизма утверждения б)–е) Задания будут следовать автоматически из аналогичных утверждений для группы C_{nv} .

п.2. В качестве примеров групп D_n мы рассмотрим группы D_2 и D_4 (группа D_3 рассматривалась в [1, 2]). В интересах приложений элементы этих групп будем обозначать через β .

По определению $D_2 = \{\beta \mid \beta = e, C_2^1, C_{a_1}, C_{a_2}\}$, где $C_{a_i} = C_{a_i}(\pi)$, $C_2^1 = C_z(\pi)$. Выберем систему координат, направив оси x и y соответственно по осям a_1, a_2 , так что $C_{a_1} = C_x, C_{a_2} = C_y$. В силу (8.13)

$$C_y = C_2^1 C_x. \quad (8.14)$$

Согласно п.1 в группе D_2 имеется четыре класса сопряженных элементов и каждый класс состоит из одного элемента. (Данное утверждение следует напрямую и из первой теоремы Бернсайда — проверьте это.) Значит, группа D_2 имеет четыре неприводимых одномерных представления. Характеры (матричные элементы) этих представлений приведены в таблице 8.7:

Таблица 8.7

Тип предст. \ β	e	C_2^1	C_x	C_y	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	1	x^2
A_2	1	1	-1	-1	z
A_3	1	-1	-1	1	y
A_4	1	-1	1	-1	x

При заполнении таблицы мы учитываем, что $\beta^2 = e$ при $\forall \beta \in D_2$ и, значит, в таблице могут встречаться только числа ± 1 .

Полагая $C_2^1 = \pm 1$, $C_x = \pm 1$ и находя значения C_y из (8.14), мы получим все 4 неприводимых представления группы D_2 . Правильность заполнения столбца $\psi(r)$ легче всего проверить с помощью операторов T_β : $T_\beta\psi(r) = \psi(\beta^{-1}r)$, $\beta \in D_2$.

Задания.

1. Проверить правильность заполнения столбца $\psi(r)$ с помощью проекторов $P^{(A_i)}$, $i = 1, 2, 3, 4$.

2. Найти разрешенные и запрещенные переходы для молекул симметрии D_2 , если возмущающие операторы те же, что в задании п.8.3.3.

п.3. Рассмотрим группу D_4 . $D_4 = \{\beta \mid \beta = C_4^{k-1}, C_{a_k}, k = 1, 2, 3, 4\}$, где $C_4^1 C_z \left(\frac{2\pi}{4}\right)$, $C_{a_k} = C_{a_k}(\pi)$. Группа состоит из 8 элементов, которые, согласно п.1, разбиваются на 5 классов сопряженных элементов

$$\{e\}, \{C_4^1, C_4^3\}, \{C_4^2\}, \{C_{a_1}, C_{a_3}\}, \{C_{a_2}, C_{a_4}\}.$$

По второй теореме Бернсайда группа D_4 имеет 5 не эквивалентных неприводимых представлений. Пусть n_i — их размерности.

Так как $\sum_{i=1}^5 n_i^2 = 8$ (по первой теореме Бернсайда), то единственные возможные значения для n_i (с точностью до нумерации) — это $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$, $n_5 = 2$. Обозначим типы одномерных представлений через A_i , тип двумерного неприводимого представления — через E . Построим сначала таблицу характеров одномерных представлений (т. е. их матрицы). Так как C_4^1 и C_4^3 лежат в одном классе сопряженных элементов, то для одномерных представлений $C_4^1 \rightarrow d$, $C_4^3 \rightarrow d$. В то же время в силу гомоморфизма $C_4^3 \rightarrow d^3$. Из равенства $d^3 = d$ мы получаем $d = \pm 1$. Поэтому $C_4^2 \rightarrow 1$. Далее, так как $C_{a_1}^2 = e$, то $C_{a_1} \rightarrow \pm 1$. Используя равенство $C_{a_2} = C_4^1 C_{a_1}$ и задавая значения $C_{a_1} \rightarrow \pm 1$, $C_4^1 \rightarrow \pm 1$ мы получаем значения характеров (т. е. матричных элементов) всех одномерных представлений группы D_4 . Характер $\chi_\beta^{(E)}$ двумерного неприводимого представления находится из

следствия к первой теореме Бернсайда

$$2\chi_{\beta}^{(E)} + \sum_{i=1}^4 \chi_{\beta}^{(A_i)} = 0 \text{ при } \beta \neq e; \quad \chi_e^{(E)} = \dim D_{\beta}^{(E)} = 2.$$

В результате мы получим следующую таблицу:

Таблица 8.8

Тип предст. \ β	e	C_4^2	C_4^1, C_4^3	C_{a_1}, C_{a_3}	C_{a_2}, C_{a_4}	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	1	1	
A_2	1	1	1	-1	-1	
A_3	1	1	-1	-1	1	
A_4	1	1	-1	1	-1	
E	2	-2	0	0	0	

Задание. Построить какие-либо функции $\psi(r)$, принадлежащие представлениям $D_{\beta}^{(A_4)}$, $D_{\beta}^{(E)}$.

п.4. Группа D_{nh} . Группа D_{nh} — это группа D_n , куда добавлено отражение σ_h относительно плоскости, перпендикулярной к оси n -го порядка и содержащей все оси 2-го порядка. Примером системы, обладающей симметрией D_{nh} , является прямоугольная призма с тождественными атомами в вершинах и с правильным n -угольником в основании. Легко проверить, что отражение σ_h коммутирует с вращениями C_n^k и C_{a_i} . Поэтому можно записать, что группа D_{nh} есть прямое произведение групп D_n и C_s : $D_{nh} = D_n \times C_s$, где группа $C_s = \{e, \sigma_h\}$. Таким образом, D_{nh} содержит, во-первых, элементы группы D_n , и, во-вторых, элементы $C_n^{k-1}\sigma_h$, $C_{a_k}\sigma_h$, $k = 1, 2, \dots, n$. По определению, $C_n^{k-1}\sigma_h$ есть зеркальный поворот $S_n^{(k-1)}$ на угол $\frac{2\pi}{n}(k-1)$ около оси z , а произведение $C_{a_i}\sigma_h$ — это отражение σ_{v_i} относительно плоскости, содержащей ось a_i и ось z (проверить самостоятельно). Поэтому можно записать, что

$$D_{nh} = \left\{ g \mid g = C_n^{k-1}, S_n^{(k-1)}, C_{a_k}, \sigma_{v_k}, k = 1, 2, \dots, n \right\}.$$

Множество классов сопряженных элементов группы D_{nh} состоит (согласно [2]) из классов K_i сопряженных элементов группы D_n и классов $K_i\sigma_h$. Неприводимые представления группы D_{nh} суть прямые произведения неприводимых представлений групп D_n и C_s .

Задание.

1. Привести пример системы, имеющей симметрию группы D_n , но не обладающей симметрией группы D_{nh} (хотя бы для одного n , $n \geq 3$).
2. Построить таблицу характеров неприводимых представлений группы D_{4h} .

§8.5. Группа D_{nd}

п.1. Группа D_{nd} . Группа D_{nd} — это группа D_n , но с дополнительным элементом: отражением σ_{d_1} в плоскости d_1 , содержащей ось ℓ n -го порядка и биссектрису угла между осями второго порядка a_1, a_2 , перпендикулярными к ℓ и лежащими в одной плоскости. Так же, как в случае группы C_{nv} , убеждаемся, что в группу D_{nd} кроме отражения σ_{d_1} входят также $(n-1)$ отражений σ_{d_i} , $i = 2, \dots, n$ относительно $(n-1)$ плоскостей d_i , содержащих ℓ и имеющих двугранные углы $\frac{\pi}{n}$ между каждой парой соседних плоскостей. Значит,

$$D_{nd} \supset \left\{ C_n^{k-1}, C_{a_k}, \sigma_{d_k}, k = 1, 2, \dots, n \right\}.$$

Так как $D_{nd} \ni \sigma_{d_i}$, то $D_{nd} \ni \sigma_{d_i}\sigma_{d_j}, \sigma_{d_i}C_{a_s}, C_{a_s}\sigma_{d_i}, C_n^k\sigma_{d_i}, \sigma_{d_i}C_n^k$. Найдем эти произведения. Для этого выберем систему координат так, чтобы ось z совпала с ℓ , а ось x — с осью a_1 . Тогда так же, как при рассмотрении группы C_{nv} , легко устанавливается, что

$$\begin{aligned} C_n^k\sigma_{d_i} &= C_n^k C_n^{i-1}\sigma_{d_1} = \sigma_{i+k}, \\ \sigma_{d_i}C_n^k &= C_n^{i-1}\sigma_1 C_n^k = C_n^{i-k-1}\sigma_1 = \sigma_{i-k}, \\ \sigma_{d_i}\sigma_{d_j} &= C_n^{i-1}\sigma_{d_1} C_n^{j-1}\sigma_{d_1} = C_n^{i-1-j+1}(\sigma_{d_1})^2 = C_n^{i-j}, \end{aligned}$$

где $\sigma_{i+k} = \sigma_{i+k-n}$ при $i+k > n$ и $\sigma_{i-k} = \sigma_{i-k+n}$ при $i-k \leq 0$. Следовательно, произведения $C_n^k \sigma_{d_i}, \sigma_{d_i} C_n^k, \sigma_{d_i} \sigma_{d_j}$ не дают новых элементов группы D_{nd} . Вычислим $\sigma_{d_i} C_{a_s}$, используя (8.5), (8.6). Имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{d_i} C_{a_s} &= \sigma_{d_i} C_n^{s-1} C_{a_1} = C_n^{i-1} \sigma_{d_1} C_n^{s-1} C_{a_1} = \\ &= C_n^{i-1} C_n^{1-s} \sigma_{d_1} C_{a_1} = C_n^{i-s} \sigma_{d_1} C_{a_1}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Далее, пусть $M(\rho, \varphi, z) \in R^3$ — произвольная точка и $M'(\rho', \varphi', z') = \sigma_{d_1} C_{a_1} M(\rho, \varphi, z)$. Элементарные рассуждения показывают, что $\rho' = \rho, z' = -z$ и $\varphi' = \frac{\pi}{n} + \varphi$. Поэтому

$$\sigma_{d_1} C_{a_1} = S_{2n}^1 \quad (8.16)$$

и в силу (8.15), (8.16)

$$\sigma_{d_i} C_{a_s} M = M'' \left(\rho, \varphi + \frac{\pi}{n} + \frac{2\pi}{n} (i-s), -z \right) = S_{2n}^{(2(i-s)+1)} M.$$

Полагая $s = 1, i = 1, 2, \dots, n$ мы видим, что группа D_{nd} содержит n зеркальных поворотов $S_{2n}^k = S_{2n}^{(k)}, k = 1, 3, 5, \dots, 2n-1$. Разумеется, раз $S_{2n}^1 \in D_{nd}$, то $S_{2n}^k \in D_{nd}$ для любых k , а не только для нечетных, но для четных $k = 2s$ выполняется $S_{2n}^{2s} = C_n^s$, т.е. четные степени не дают новых элементов D_{nd} . Таким образом мы доказали, что группа D_{nd} состоит из следующих $4n$ элементов: $C_n^{k-1}, C_{a_k}, \sigma_{d_k}, S_{2n}^{2k-1}, k = 1, 2, \dots, n$. Далее нам иногда будет полезно учитывать, что группа D_{nd} может быть получена не только путем добавления к группе D_n отражения σ_{d_1} , но другим способом: добавлением к группе C_{nv} вращения C_{a_1} около оси a_1 , перпендикулярной к оси ℓ и содержащейся в бисектральной плоскости двугранного угла между плоскостями v_n и v_1 (проверьте это!).

п.2. Обсудим теперь вопрос о классах сопряженных элементов группы D_{nd} исходя зачастую из классов сопряженных элементов групп-“родителей”: D_n или C_{nv} . Во-первых, появляются классы пар зеркальных поворотов $\left\{ S_{2n}^{2k-1}, S_{2n}^{2n-2k+1} \right\}, k =$

$= 1, 2, \dots, 2k - 1 \leq n$ (при нечетном n последняя пара состоит из одинаковых элементов, т. е. образует одноэлементный класс $\{S_{2n}^n\}$). Это следует из равенства

$$S_z(\varphi)\sigma_{v_1} = \sigma_{v_1}S_z(-\varphi),$$

которое получается применением отражения σ_{v_1} к обеим частям соотношения (8.6). Во-вторых, как мы покажем далее, в группе D_{nd} по сравнению с группами C_{nv} и D_n происходит объединение некоторых классов сопряженных элементов этих групп в результате появления новых элементов. А именно, все элементы σ_{d_i} , $i = 1, \dots, n$, попадают в группе D_{nd} в один класс независимо от четности n , в то время как в C_{nv} отражения σ_{d_i} , $i = 1, 2, \dots, n$, попадали в один класс только при нечетном n , а при четном они образовывали два класса:

$$\{\sigma_{d_1}, \sigma_{d_3}, \dots, \sigma_{d_{n-1}}\} \text{ и } \{\sigma_{d_2}, \sigma_{d_4}, \dots, \sigma_{d_n}\}.$$

Аналогичная ситуация с вращениями C_{a_i} , $i = 1, \dots, n$. Эти вращения в группе D_{nd} попадают в один класс сопряженных элементов при любых n , в то время как в D_n они попадали в один класс только при нечетном n , а при четном n образовывали два класса:

$$\{C_{a_1}, C_{a_3}, \dots, C_{a_{n-1}}\} \text{ и } \{C_{a_2}, C_{a_4}, \dots, C_{a_n}\}.$$

То есть мы утверждаем, что в группе D_{nd} соотношения $\sigma_{d_i} \sim \sigma_{d_j}$ и $C_{a_i} \sim C_{a_j}$ выполняются при любых i и j независимо от n . Это утверждение об объединении соответствующих классов групп C_{nv} и D_n следует из соотношений $\sigma_{d_1} \sim \sigma_{d_2}$, $C_{a_1} \sim C_{a_2}$, которые основаны на равенствах

$$\sigma_{d_2} = C_{a_2}\sigma_{d_1}C_{a_2}, \quad C_{a_2} = \sigma_{d_1}C_{a_1}\sigma_{d_1}. \quad (8.17)$$

Задание. Доказать справедливость равенств (8.17).

Кроме упомянутых классов сопряженных элементов остаются классы $\{e\}$, $\{C_n^k, C_n^{n-k}\}$, $k = 1, 2, \dots, k \leq \frac{n}{2}$, где при четном n и $k = \frac{n}{2}$ класс $\{C_n^{\frac{n}{2}}, C_n^{\frac{n}{2}}\}$ состоит из одного элемента. Эти классы имелись в D_n (и в C_{nv}) и не могут объединиться между собой, так как они входили в разные классы группы $O(3)$.

Вопрос. Почему при четном n элемент $C_n^{\frac{n}{2}} = C_z(\pi)$ образует отдельный класс, а не входит в класс, содержащий вращения $C_{a_i} = C_{a_i}(\pi)$? Ведь в группе $O(3)$ все вращения на угол π находились в одном классе $K(\pi)$! Ответ обосновать.

Таким образом группа D_{nd} содержит $(n+3)$ класса сопряженных элементов: $\{e\}$, $\{\sigma_{d_1}, \dots, \sigma_{d_n}\}$, $\{C_{a_1}, \dots, C_{a_n}\}$, $\{C_n^k, C_n^{n-k}\}$, $k \leq \frac{n}{2}$, $\{S_{2n}^{2k-1}, S_{2n}^{2n-2k+1}\}$, $2k-1 \leq n$.

В качестве примера группы D_{nd} рассмотрим группу D_{2d} . Согласно п.1, группа содержит 8 элементов: $e, C_2^1, C_x(\pi), C_y(\pi), \sigma_{d_1}, \sigma_{d_2}, S_4^1, S_4^3$, которые распределены по 5 классам: $\{e\}$, $\{C_2^1\}$, $\{C_x, C_y\}$, $\{\sigma_{d_1}, \sigma_{d_2}\}$, $\{S_4^1, S_4^3\}$ (плоскости симметрии d_1, d_2 и оси симметрии второго порядка a_1, a_2 см. рис 8.6). Значит группа имеет 5 неприводимых представлений.

В силу первой теоремы Бернсайда из них 4 одномерных $D_g^{(A_i)}$, $i = 1, 2, 3, 4$, и одно двумерное $D_g^{(E)}$. Для нахождения матриц (одномерных) представлений типов A_i заметим, что если $S_4^1 \rightarrow d$, то $S_4^3 \rightarrow d^3$, где $d^3 = d$, ибо S_4^1 и S_4^3 находятся в одном классе. Поэтому $d = \pm 1$. Далее $C_2^1 = (S_4^1)^2 \rightarrow d^2 = 1$. Наконец, так как $\sigma_{d_i}^2 = e$, то $\sigma_{d_i} \rightarrow \pm 1$. Используя эти замечания и следующее из (8.16) равенство: $C_{a_1} = \sigma_{d_1} S_4^1$, мы легко определяем одномерные матрицы (характеры). Для определения характера $\chi_g^{(E)}$ двумерного представления E при-

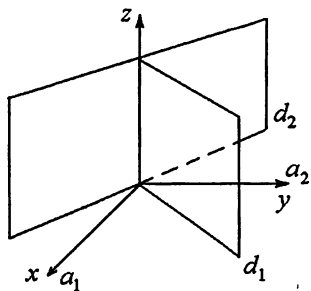


Рис. 8.6

меняем следствие первой теоремы Бернсайда

$$2\chi_g^{(E)} + \sum_{i=1}^4 \chi_g^{(A_i)} = 0, \quad g \neq e.$$

В результате получаем таблицу

Таблица 8.9

Тип предст. \ β	e	C_2^1	S_4^1, S_4^3	C_{e_1}, C_{e_2}	$\sigma_{d_1}, \sigma_{d_2}$	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	1	1	
A_2	1	1	1	-1	-1	
A_3	1	1	-1	1	-1	
A_4	1	1	-1	-1	1	
E	2	-2	0	0	0	

Задание 1. Определить, каким представлениям принадлежат компоненты вектора $r = (x, y, z)$ и компоненты оператора магнитного дипольного момента.

Задание 2. Найти разрешенные и запрещенные переходы для состояний с симметрией D_{2d} под действием оператора Q : $Q = \begin{vmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ x & y & z \\ x' & y' & z' \end{vmatrix}$.

§8.6. Группы тетраэдра T, T_d

п.1. Группа T . T — группа вращательной симметрии тетраэдра. Рассмотрим тетраэдр $Z = A_1A_2A_3A_4$ (рис. 8.7). Очевидно, тетраэдр имеет 4 оси симметрии 3-го порядка: это высоты a_i , $i = 1, 2, 3, 4$, опущенные из вершин A_i тетраэдра на противоположные грани (на рис. 8.7 мы обозначали лишь ось a_4). Направление каждой оси выберем от грани к вершине. Кроме того, в тетраэдре есть 3 оси 2-го порядка: это отрезки, соединяющие середины противоположных ребер. Если точку на середине ребра A_iA_j обозначить через M_{ij} , то оси второго порядка

это $a_{12} = M_{12}M_{34}$, $a_{13} = M_{13}M_{24}$, $a_{23} = M_{23}M_{34}$ (на рис. 8.7 проведена только ось a_{12}). Выбор направления для осей второго порядка не существен (объясните, почему). Таким образом, группа T содержит вращения $C_{a_i}^1 = C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} \right)$ и $C_{a_i}^2 = C_{a_i} \left(\frac{4\pi}{3} \right)$, $i = 1, 2, 3, 4$, отвечающие осям 3-го порядка; вращения $C_{a_{ij}} = C_{a_{ij}}(\pi)$, $(ij) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)$, отвечающие осям 2-го порядка, и единичный элемент e .

п.2. Найдем классы сопряженных элементов группы T . Так как все оси a_i переходят друг в друга под действием вращений из T ($a_2 = C_{a_4}^1 a_1$, $a_3 = C_{a_4}^2 a_1$, $a_4 = C_{a_2}^2 a_1$), то в силу п.8.1.1 повороты $C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right)$, $i = 1, 2, 3, 4$ (при фиксированном k) лежат в од-

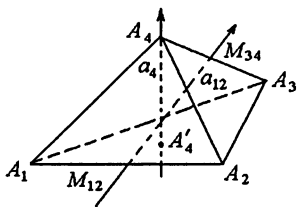


Рис. 8.7

ном классе сопряженных элементов группы T . Таким образом, мы получили 2 класса: при $k = 1$ и при $k = 2$. Отметим, что эти классы не могут объединиться, так как (в отличие, например, от группы D_3) элементы $C_{a_i}^1$ и $C_{a_i}^2 = C_{a_i}^{-1} = C_{-a_i}^1 = C_{a_i} \left(-\frac{2\pi}{3} \right)$ не могут попасть в один класс в T , ибо T не содержит вращения, переводящего ось a_i в $-a_i$. Аналогично поворотам $C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right)$, $i = 1, 2, 3, 4$, все повороты $C_{a_{ij}} = C_{a_{ij}}(\pi)$, $(ij) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)$, лежат в одном классе сопряженных элементов, ибо оси a_{12} , a_{13} , a_{23} переходят друг в друга при вращениях из T : $a_{23} = C_{a_4}^1 a_{12}$, $a_{13} = C_{a_4}^2 a_{12}$.

Поэтому у группы T имеется всего 4 класса сопряженных элементов:

$$\{a\}, \quad \{C_{a_i}^1, i = 1, 2, 3, 4\}, \quad \{C_{a_i}^2, i = 1, 2, 3, 4\}, \\ \{C_{a_{ij}}, (ij) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)\}.$$

Значит, у группы T существует всего 4 не эквивалентных неприводимых представления. Пусть n_i — их размерности. В силу первой теоремы Бернсайда $\sum_{i=1}^4 n_i^2 = 12$. Так как $n_1 = 1$ (тождественное представление), то $n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 = 11$. Единственное (с точностью до перестановки слагаемых) целочисленное решение этого уравнения — это $n_2 = n_3 = 1$, $n_4 = 3$. Таким образом, существует 3 одномерных представления — их типы обозначим через A_1, A_2, A_3 — и одно трехмерное — его тип обозначим через F . Характеры представлений группы T даны в табл. 8.10.

Таблица 8.10

Тип предст. \ β	e	$C_{a_{ij}},$ (ij)=(1,2),(1,3),(2,3)	$C_{a_i}^1,$ $i=1,2,3,4$	$C_{a_i}^2,$ $i=1,2,3,4$	$\psi(r)$
A_1	1	1	1	1	
A_2	1	1	ϵ	ϵ^2	
A_3	1	1	ϵ^2	ϵ	
F	3	-1	0	0	x, y, z

п.3. Поясним заполнение табл. 8.10. Вторая строка отвечает тождественному представлению (тип A_1). Займемся третьей строкой. Так же, как в п.8.2.1 устанавливаем, что $C_{a_{ij}} \rightarrow \pm 1$, ибо $C_{a_{ij}}^2 = e \rightarrow 1$, и что $C_{a_i}^1 \rightarrow \epsilon$, где $\epsilon^3 = 1$, т.е. возможны значения $\epsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}k}$, $k = 0, 1, 2$. Если положить $\epsilon = 1$, то условие ортогональности

$$\left(\chi_g^{(A_2)}, \chi_g^{(A_1)} \right)_T = 0. \quad (8.18)$$

не будет выполняться ни при $\chi_{C_{a_{ij}}}^{(A_2)} = 1$, ни при $\chi_{C_{a_{ij}}}^{(A_2)} = -1$. Поэтому $\epsilon \neq 1$. Возьмем $\epsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}$. Тогда $\chi_{C_{a_i}}^{(A_2)} = \epsilon$, $\chi_{C_{a_i}^2}^{(A_2)} = \epsilon^2$. Чтобы обеспечить выполнение (8.18) надо взять $\chi_{C_{a_{ij}}}^{(A_2)} = 1$. Для представления типа A_3 (4-я строка) из тех же соображений получим, что $\chi_{C_{a_i}^1}^{(A_3)} = \epsilon^2$, $\chi_{C_{a_i}^2}^{(A_3)} = \epsilon$ и $\chi_{C_{a_{ij}}}^{(A_3)} = 1$. Наконец, для представления

типа F характеры элементов T находятся из следствия к первой теореме Бернсайда:

$$3\chi_g^{(F)} + \sum_{j=1}^3 \chi_g^{(A_j)} = 0, \quad g \neq e.$$

Заполнение столбца $\psi(r)$ сопряжено с громоздкими выкладками, которые мы опускаем. Эти выкладки показывают, что, в частности, $x, y, z \in D_g^{(F)}$, $g \in T$.

п.4. Группа T_d . T_d — группа полной симметрии тетраэдра. Группа T_d получается путем добавления к 12-ти элементам группы T :

1) отражений $\sigma_{ij} = \sigma_{A_i A_j}$ относительно плоскостей v_{ij} , проходящих через ребра $A_i A_j$, $(i, j) = (1, 2), (1, 3), (1, 4), (2, 3), (2, 4), (3, 4)$, и середины противоположных ребер;

2) зеркальных поворотов $S_{a_{ij}}^1 = S_{a_{ij}}\left(\frac{\pi}{2}\right)$ на угол $\frac{\pi}{2}$ и $S_{a_{ij}}^3 = S_{a_{ij}}\left(\frac{3\pi}{2}\right)$ на угол $\frac{3}{2}\pi$ около осей второго порядка, $(i, j) = (1, 3), (1, 2), (2, 3)$.

Проверим, что добавленные преобразования действительно переводят тетраэдр в себя. Для отражений σ_{ij} это очевидно, так как плоскости v_{ij} являются плоскостями симметрии тетраэдра. Для зеркальных поворотов $S_{a_{ij}}^1, S_{a_{ij}}^3$ требуются пояснения. Рассмотрим для определенности, например, поворот $g = S_{a_{12}}^1$ (см. рис. 8.8).

Пусть $\sigma_{h_{12}}$ — отражение относительно плоскости, проходящей перпендикулярно к отрезку $M_{12}M_{34}$ через его середину. Тогда $g = \sigma_{h_{12}} C_{a_{12}}\left(\frac{\pi}{2}\right)$. Вращение $C_{a_{12}}\left(\frac{\pi}{2}\right)$ около оси a_{12} переведет ребро $A_4 A_3$ в положение $A'_4 A'_3$, а ребро $A_1 A_2$ в $A'_1 A'_2$, причем

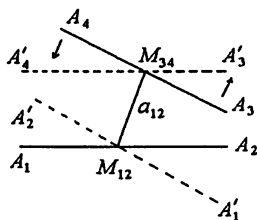


Рис. 8.8

$A'_4 A'_3 \parallel A_1 A_2$, $A'_1 A'_2 \parallel A_3 A_4$. Поэтому $\sigma_{h_{12}} A'_4 = A_1$, $\sigma_{h_{12}} A'_3 = A_2$, $\sigma_{h_{12}} A'_2 = A_4$, $\sigma_{h_{12}} A'_1 = A_3$. Следовательно,

$$gA_4 = A_1, \quad gA_3 = A_2, \quad gA_1 = A_3, \quad gA_2 = A_4$$

и значит $g \in T_d$. Поэтому $g^2, g^3 \in T_d$. Но $g^2 = S_{a_{12}}^2 = C_{a_{12}}(\pi) \in T \subset T_d$, т. е. этот элемент уже есть в T_d и его не надо добавлять. А элемент $S_{a_{12}}^3 \notin T$, т. е. его надо присоединить к T . Таким образом, около каждой оси 2-го порядка имеется два зеркальных поворота, входящих в группу полной симметрии тетраэдра.

Мы получили, что группа T_d полной симметрии тетраэдра содержит 24 элемента: e , $C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right)$, $k = 1, 2$, $i = 1, 2, 3, 4$, $C_{a_{ij}}(\pi)$, $S_{a_{ij}}^k \left(\frac{\pi}{2} \right)$, $k = 1, 3$, $(i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)$, σ_{ij} , $(i, j) = (1, 2), (1, 3), (1, 4), (2, 3), (2, 4), (3, 4)$. Покажем, что эти элементы исчерпывают множество преобразований симметрии тетраэдра. Для этого заметим, что любое преобразование g симметрии тетраэдра каким-то образом переставляет между собой тождественные атомы, находящиеся в его вершинах. Поэтому оно определяется какой-либо перестановкой $\begin{pmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ A_{s_1} & A_{s_2} & A_{s_3} & A_{s_4} \end{pmatrix}$ вершин тетраэдра. Следовательно, общее число таких преобразований не может быть больше, чем общее число таких перестановок — 4! Но в группе T_d мы уже указали 24 различных элемента и, значит, они исчерпывают всю группу. В частности, мы можем не проверять, не дают ли произведения найденных элементов из T_d друг на друга (или на элементы из T) какие-то новые элементы группы, ибо никаких иных преобразований симметрии тетраэдра по сравнению с 24-мя имеющимися мы не получим.

п.5. Разобьем группу T_d на классы сопряженных элементов. Так же, как для группы C_{3v} , устанавливается что для каждой оси a_i вращения $C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} \right)$ и $C_{a_i} \left(\frac{4\pi}{3} \right) = C_{-a_i} \left(\frac{2\pi}{3} \right)$ лежат в одном классе, ибо есть плоскость симметрии, содержащая эту ось. Далее, поскольку все оси a_i переходят друг в друга под дей-

ствием вращений из T (см. п.2), то все 8 элементов $C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right)$, $k = 1, 2$, $i = 1, 2, 3, 4$, попадают в один класс сопряженных элементов группы T_d . Три элемента $C_{a_{ij}}(\pi)$, как и в группе T , лежат в одном и том же классе. Как и в группе C_{3v} , отражения относительно трех плоскостей, содержащих общую ось 3-го порядка a_i , лежат в одном классе. Но каждая пара таких классов (отвечающих разным осям a_i) имеет общий элемент, например класс σ_{41} , σ_{42} , σ_{43} ($i = 4$) и класс σ_{14} , σ_{13} , σ_{12} ($i = 1$) имеют общий элемент $\sigma_{41} = \sigma_{14}$. Поэтому все 6 различных элементов σ_{ij} лежат в одном классе сопряженных элементов группы T_d . Рассмотрим, наконец, зеркальные повороты. Так как их оси переходят друг в друга при вращениях $C_{a_4} \left(\frac{2\pi}{3} \right)$, то зеркальные повороты $S_{a_{ij}}^k = S_{a_{ij}} \left(\frac{\pi}{2} k \right)$, $(i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)$ при фиксированном k , $k = 1$, или $k = 3$, будут сопряжены между собой. Одновременно при фиксированных (i, j) имеем $S_{a_{ij}}^1 \sim S_{a_{ij}}^3$ так как группа T_d содержит плоскость отражения, содержащую ось a_{ij} . Например, ось $a_{12} = M_{12}M_{34}$ содержится в плоскости $v_{43} = A_4A_3M_{12}$, отражение относительно которой σ_{43} лежит в T_d . Поэтому

$$S_{a_{12}}^3 = \sigma_{43} S_{a_{12}}^1 \sigma_{43}.$$

Следовательно, все 6 зеркальных поворотов попадают в один класс сопряженных элементов группы T_d . Таким образом, группа T_d разбивается на 5 классов сопряженных элементов

$$W_1 = \{e\}, \quad W_2 = \left\{ C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right), k = 1, 2, i = 1, \dots, 4 \right\},$$

$$W_3 = \left\{ C_{a_{ij}}(\pi), (i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3) \right\},$$

$$W_4 = \left\{ \sigma_{ij}, (i, j) = (1, 2), (1, 3), (1, 4), (2, 3), (2, 4), (3, 4) \right\},$$

$$W_5 = \left\{ S_{a_{ij}}^1, S_{a_{ij}}^3, (i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3) \right\}.$$

По второй теореме Бернсайда существует 5 не эквивалентных неприводимых представлений. Пусть n_i — их размерности. Так как $\sum_{i=1}^5 n_i^2 = 24$, где $n_1 = 1$, то единственными подходящими значениями n_i будут 1, 1, 2, 3, 3. Обозначим типы соответствующих неприводимых A_1, A_2, E, F_1, F_2 . Характеры этих представлений приведены в табл. 8.11:

Таблица 8.11

Тип предст. \ g	e	$C_{a_i} \left(\frac{2\pi}{3} k \right),$ 8 эл.	$C_{a_{ij}}(\pi),$ 3 эл.	$\sigma_{ij},$ 6 эл.	$S_{a_{ij}} \left(\frac{\pi}{2} k \right),$ 6 эл.
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	$\alpha_2 = 1$	$\alpha_3 = 1$	$\alpha_4 = -1$	$\alpha_5 = -1$
E	$\beta_1 = 2$	$\beta_2 = -1$	$\beta_3 = 2$	$\beta_4 = 0$	$\beta_5 = 0$
F_1	$\gamma_1 = 3$	$\gamma_2 = 0$	$\gamma_3 = -1$	$\gamma_4 = -1$	$\gamma_5 = 1$
F_2	$\delta_1 = 3$	$\delta_2 = 0$	$\delta_3 = -1$	$\delta_4 = 1$	$\delta_5 = -1$

Обсудим её заполнение. Так как $\alpha_2^2 = \alpha_2, \alpha_j^2 = 1, j = 3, 4$, и $\alpha_5^3 = \alpha_5$, то $\alpha_2 = 1, \alpha_j = \pm 1, j = 3, 4$, и $\alpha_5 = \pm 1$. Используя это и условие ортогональности $\left(\chi_g^{(A_2)}, \chi_g^{(A_1)} \right)_{T_d} = 0$, имеющее вид

$$1 + 8 + 3\alpha_3 + 6\alpha_4 + 6\alpha_5 = 0,$$

получаем, что $\alpha_3 = 1, \alpha_4 = \alpha_5 = -1$.

Нахождение характеров β_j, γ_j и $\delta_j, j = 2, 3, 4, 5$, не так просто. Покажем как в принципе можно найти эти характеры на примере представления $D_g^{(E)}$. Пусть $\chi_s^{(E)} = \beta_s$ — характер элементов класса W_s в представлении типа E . Тогда записывая условия ортогональности $\left(\chi_g^{(E)}, \chi_g^{(A_j)} \right)_{T_d} = 0, j = 1, 2$, и условие нормиров-

ки характера $\chi_g^{(E)}$ мы получим 3 уравнения с 4-мя неизвестными

$$\left. \begin{aligned} 2 + 8\beta_2 + 3\beta_3 + 6\beta_4 + 6\beta_5 &= 0, \\ 2 + 8\beta_2 + 3\beta_3 - 6\beta_4 - 6\beta_5 &= 0, \\ 4 + \sum_{j=2}^5 k_j \cdot |\beta_j|^2 &= 24, \end{aligned} \right\} \quad (8.19)$$

где k_j — число элементов в классе W_j . Для получения дополнительных условий на числа β_j мы воспользуемся результатом [3, с. 48]. Согласно [1, §1.3]

$$W_i W_j = \sum_{s=1}^5 b_{ij,s} W_s, \quad (8.20)$$

где $b_{ij,s}$ — целые числа. Пусть p — тип неприводимого представления $D_g^{(p)}$ группы T_d , $n_p = \dim D_g^{(p)}$, $\chi_s^{(p)}$ — характер элементов s -го класса в представлении $g \rightarrow D_g^{(p)}$, $g \in T_d$. Имеет место равенство

$$k_i k_j \chi_i^{(p)} \chi_j^{(p)} = n_p \sum_{s=1}^5 b_{ij,s} k_s \chi_s^{(p)},$$

связывающее между собой характеры разных классов в представлении $D_g^{(p)}$. Взяв $p = E$ мы получаем равенство

$$k_i k_j \beta_i \beta_j = 2 \sum_{s=1}^5 b_{ij,s} k_s \beta_s, \quad (8.21)$$

где $\beta_1 = 2$, $k_1 = 1$. Из (8.19) и (8.21) значения β_s могут быть найдены. Главная трудность — не столько решение уравнений (8.19), (8.21), сколько нахождение коэффициентов $b_{ij,s}$ в (8.20), ибо для этого надо знать таблицу умножения группы T_d . Мы не будем её строить, укажем лишь оптимальный способ её нахождения. Для этого надо установить естественное взаимно-однозначное соответствие между элементами $g \in T_d$ и перестановками вершин

тетраэдра, после чего достаточно проследить, как переставляются вершины тетраэдра произведением $\omega = gh$, $g, h \in T_d$, чтобы найти ω (используя установленное соответствие). Итак, из (8.19), (8.21) можно найти β_j . На аналогичном пути находятся числа γ_j и δ_j .

§8.7. Группы октаэдра O и O_d

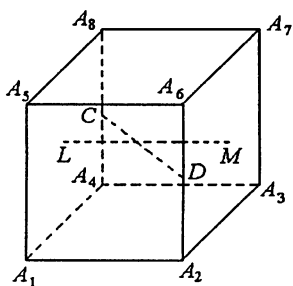


Рис. 8.9

ны: $A_1A_7, A_2A_8, A_3A_5, A_4A_6$. Таким образом группа O содержит 24 элемента: вращения

$$(C_4^1, C_4^2, C_4^3) \times 3, \quad (C_3^1, C_3^2) \times 4, \quad (C_2^1) \times 6$$

и единичный элемент.

Все оси одного порядка переходят друг в друга при вращениях из группы O и кроме того для каждой оси ℓ есть вращение $g \in O$ такое, что $g\ell = -\ell$. Поэтому мы легко можем указать классы сопряженных элементов группы O . Это $N_1 = \{e\}$, $N_2 = \{C_4^1, C_4^3 \mid 6 \text{ элементов}\}$, $N_3 = \{C_3^1, C_3^2 \mid 8 \text{ элементов}\}$, $N_4 = \{C_2^1 \mid 6 \text{ элементов}\}$, $N_5 = \{C_4^2 \mid 3 \text{ элемента}\}$.

Заметим, что повороты C_4^2 на угол π около осей 4-го порядка и повороты C_2^1 на угол π около осей 2-го порядка лежат в

разных классах сопряженных элементов группы O , так как эта группа не содержит вращения, переводящего какую-либо из этих осей в другую. Так как группа O имеет 5 классов сопряженных элементов и порядок её равен 24, то так же, как для группы T_d , убеждаемся, что у группы O имеется пять не эквивалентных неприводимых представлений: два одномерных $D_g^{(A_1)}$, $D_g^{(A_2)}$, одно двумерное $D_g^{(E)}$ и два трехмерных $D_g^{(F_1)}$, $D_g^{(F_2)}$. Для нахождения характеров этих представлений заметим (без доказательства), что группа O изоморфна группе T_d . Соответствие, дающее этот изоморфизм, устроено так³:

$$T_d \quad O$$

$$C_{a_i} \left(\frac{2\pi k}{3} \right) \leftrightarrow C_3^k$$

для каждой оси 3-го порядка;

$$C_{a_{ij}}(\pi) \leftrightarrow C_4^2$$

для каждой оси 2-го порядка в T_d и 4-го порядка в O ;

$$\sigma_{ij} \leftrightarrow C_2^1$$

для каждого отражения σ_{ij} в T_d и каждой оси 2-го порядка в O ;

$$S_{a_{ij}} \left(\frac{\pi}{2} k \right) \leftrightarrow C_4^k, \quad k = 1, 3$$

для каждой из трех осей 2-го порядка в T_d (являющихся осями 4-го порядка для зеркальных поворотов) и осей 4-го порядка в O . Поэтому таблицу характеров неприводимых представлений группы O можно получить из табл. 8.11 для группы T_d , если в ней классы W_s сопряженных элементов группы T_d заменить классами сопряженных элементов N_s группы O .

п.2. Группа O_d . O_d — группа полной симметрии куба. Мы можем её ввести как прямое произведение групп O и W : $O_d = O \times W$, где $W = \{e, i\}$. Это дает возможность построить классы сопряженных элементов и представления группы O_d стандартным способом. В частности, классы N'_j , N''_j сопряженных эле-

³ Мы указываем далее это соответствие только между классами сопряженных элементов групп T_d и O , не останавливаясь на соответствии между элементами внутри классов.

ментов группы O_d выражаются через классы N_j сопряженных элементов группы T_d равенствами

$$N'_j = N_j, \quad N''_j = N_j i, \quad j = 1, 2, \dots, 5.$$

Представляет интерес описать классы N''_j с использованием зеркальных поворотов около осей симметрии октаэдра и отражений в плоскостях симметрии. Чтобы получить такое описание мы заменим инверсию по формуле (8.1): $i = C_\ell(\pi)\sigma_h$, где ℓ — любая ось, проходящая через начало координат, а σ_h — отражение в плоскости, перпендикулярной к этой оси и тоже проходящей через начало координат. Тогда мы получим

$$\begin{aligned} N''_1 &= \{i\}, & N''_2 &= \{S_4^1, S_4^3 \mid 6 \text{ элементов}\}, \\ N''_3 &= \{S_6^1, S_6^5 \mid 8 \text{ элементов}\}, \\ N''_4 &= \left\{ \sigma_h \mid \begin{array}{l} 6 \text{ отражений относительно плоскостей,} \\ \text{перпендикулярных к осям 2-го порядка} \end{array} \right\}, \\ N''_5 &= \left\{ \sigma_{h'} \mid \begin{array}{l} 3 \text{ отражения, относительно плоскостей,} \\ \text{перпендикулярных к осям 4-го порядка} \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Поясним эти соотношения. $C_{LM}\left(\frac{2\pi}{4}k\right) \in N_2$, $k = 1, 3$. Взяв $i = C_{LM}(\pi)\sigma_h$ получим

$$\begin{aligned} C_{LM}\left(\frac{2\pi}{4} \cdot 3\right) i &= C_{LM}\left(\frac{10\pi}{4}\right) \sigma_h = C_{LM}\left(\frac{2\pi}{4}\right) \sigma_h = \\ &= S_{LM}\left(\frac{2\pi}{4}\right) \in N''_2, \\ C_{LM}\left(\frac{2\pi}{4}\right) i &= C_{LM}\left(\frac{6\pi}{4}\right) \sigma_h = C_{LM}\left(\frac{2\pi}{4} \cdot 3\right) \sigma_h = \\ &= S_{LM}\left(\frac{2\pi}{4} \cdot 3\right) \in N''_2. \end{aligned}$$

Далее, $C_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi k}{3} \right) \in N_3$, $k = 1, 2$. Взяв $i = C_{A_1A_7}(\pi)\sigma_h$, получим

$$\begin{aligned} C_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi}{3} \right) i &= C_{A_1A_7} \left(\frac{5\pi}{3} \right) \sigma_h = C_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi}{6} \cdot 5 \right) \sigma_h = \\ &= S_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi}{6} \cdot 5 \right) \in N_3'', \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{A_1A_7} \left(\frac{4\pi}{3} \right) i &= C_{A_1A_7} \left(\frac{7\pi}{3} \right) \sigma_h = C_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi}{6} \right) \sigma_h = \\ &= S_{A_1A_7} \left(\frac{2\pi}{6} \right) \in N_3''. \end{aligned}$$

Наконец, $C_{CD}(\pi) \in N_4$ и $C_{LM}(\pi) \in N_5$. Полагая $i = C_{CD}(\pi)\sigma_h$ и $i = C_{LM}(\pi)\sigma_{h'}$, имеем

$$C_{CD}(\pi)i = C_{CD}(2\pi)\sigma_h = \sigma_h \in N_4'', \quad C_{LM}(\pi)i = \sigma_{h'} \in N_5''.$$

Задание. С помощью прямых вычислений доказать, что любые целые степени зеркальных поворотов из классов N_2'' и N_3'' не дают новых элементов группы O .

Список литературы

1. Жислин Г. М. Лекции по теории представлений конечных групп (общая теория), ч. I // Препринт НИРФИ № 409. — Н. Новгород: НИРФИ, 1995. 44 с.
2. Жислин Г. М. Общая теория представлений конечных групп, ч. II. — Н. Новгород: Нижегородский гос. ун-т, 1995. 43 с.
3. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. — М.: Наука, 1967.

Оглавление

Введение	3
§8.1. Определения. Сопряженные элеметы групп и подгрупп.....	4
§8.2. Группы C_n , C_{nh}	9
§8.3. Группы C_{nv}	14
§8.4. Группы D_n , D_{nh}	21
§8.5. Группа D_{nd}	26
§8.6. Группы тетраэдра T , T_d	30
§8.7. Группы октаэдра O и O_d	38
Список литературы.....	42

Жислин Григорий Моисеевич

Лекции по теории представлений конечных групп.
III. Точечные группы и их представления

Подписано в печать 10.02.2009 г. Формат 60 × 84/16.

Бумага писчая. Объем 2,72 усл. п. л.

Тираж 50. Заказ 5580

Отпечатано в НИРФИ

Нижегород, ул. Большая Печерская, 25