D : A : G K D B N C ? > ? J : E V G U M C G B < ? J K B L ? L

B G K L B L M N L B A B D B

D : N ? > J : L ? H J ? L B Q ? K D N H B C A B D B

E D : f b g h , \ : . K D m l m , a X n . \ G I j h r b g

L ? H J B ¥ J M I I B ? ? I J B E H @ ? G B Y

D H G K I ? D E L ? D P B C A : > : Q B

D Z a Z – g 2015

M > D 512.54::538.9(07)
; ; D 22.144:22.314
: 62

Принято на заседании кафедры теоретической физики
Протокол № 10 от 8 мая 2015 года

J _ p _ g a – _ g l
академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор D. F. K Z e b o h \

: f b g h \ E. D.
: 62 L _ h j b y j m i i b _ _ i j b e h ` _ g b y. D h g k i _ d l p b b Z ^ Z q b / Л.К. Аминов, А.С. Кутузов, Ю.Н. Прошин. – Казань: Казан. ун-т, 2015. – 123 с.

В пособии излагаются основы теории групп и их представлений, рассматриваются точечные группы симметрии, группа вращений, пространственные группы и их неприводимые представления. Материал в основном представлен в форме краткого конспекта; более подробно изложены некоторые физические приложения теории групп. По каждому разделу курса имеются задачи, которые либо дополняют и иллюстрируют теоретическую часть, либо помогают овладеть стандартными приемами, встречающимися в приложениях.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов физических специальностей классических университетов, а также для всех интересующихся теорией симметрии (теорией групп) и ее физическими приложениями.

СОДЕРЖАНИЕ

< \ _ ^ _ g b _

«Симметрия является той идеей, посредством которой человек на протяжении веков пытался постичь и создать порядок, красоту и совершенство».

«Насколько я могу судить, все априорные утверждения физики имеют своим источником симметрию».

Герман Вейль

Симметрия, гармония – это наиболее общие понятия, идеи, выработанные в процессе познания человечеством окружающего мира и своего места в нем. Они включают повторяемость событий во времени и в пространстве, сохранение свойств объектов при различных преобразованиях, движениях и, в конечном счете, сами законы природы. Эти идеи и понятия нашли воплощение в самых разных сторонах деятельности людей – науке, искусстве, ремеслах. Достаточно отметить математические формулировки множества единообразных объектов, повторяемость узоров орнаментов при трансляциях, поворотах, отражениях, ритмичность работы машин и т.п. Наиболее четким математическим отображением идеи симметрии служит теория групп, имеющая дело с самыми различными множествами преобразований. Подробно о развитии идеи симметрии и ее математическом оформлении, различных проявлениях симметрии и ее нарушений в природе и искусстве рассказал выдающийся математик Г. Вейль в своем последнем труде – лекциях о симметрии (Вейль Г. Симметрия. М.: Наука, 1968).

Самым известным приложением теории групп в доквантовой физике является описание симметрии кристаллов. К 1830 году, когда возник математический термин «группа», относится и вывод Гесселем 32-х кристаллографических классов. Вывод Федоровым и Шенфлисом в 1891 году 230 пространственных групп считается шедевром анализа. Но в XIX-м веке физическая и математическая ветви теории групп развивались практически независимо друг от друга. Широкое внедрение группового аппарата в физику началось вскоре после создания квантовой механики и связано оно с именами Г. Вейля, Е. Вигнера, Г. Бете, Ю. Рака и многих других известных математиков и физиков.

Возможности применения теории групп сильно расширились в связи с тем, что состояния в квантовой механике, в отличие от классической, задаются векторами в абстрактном гильбертовом пространстве, а преобразования симметрии представляются унитарными (или антиунитарными) преобразованиями этого пространства. Было выявлено, что группа симметрии квантовомеханической системы и ее неприводимые представления могут быть использованы для классификации энергетического спектра и стационарных состояний системы, вычислений матричных элементов и расчетов по теории возмущений. Представление гамильтониана в виде суммы последовательно убывающих членов, учитывающих все более тонкие взаимодействия в системе, на языке теории групп означает постепенное понижение симметрии, переход от исходной группы высокой симметрии к ее подгруппам. При таком подходе оказывается возможным проследить за генеалогией уровней энергии системы и ее стационарных состояний, и он широко используется в теории атомных и ядерных спектров, спектров молекул и твердых тел. Без больших изменений его можно использовать для рассмотрения спектров других наблюдаемых величин. В теории спектров элементарных частиц решается скорее обратная задача: по имеющимся спектрам (или их кусочкам) угадать симметрию, объединяющую различные частицы. Потребности физики стимулировали развитие целого ряда крупных направлений математической теории групп, таких как канонические формы неприводимых представлений различных групп, теория коэффициентов Клебша-Гордона, унитарные представления некомпактных групп Ли, различные расширения групп Пуанкаре. Первые значительные результаты в этих направлениях были получены как раз физиками.

Как видно, для успешного применения идей симметрии помимо знакомства с общими понятиями теории групп и их представлений необходимо достаточно подробно знать часто встречающиеся в физике конкретные группы симметрии. В число последних входят группы, описывающие «геометрию» систем: группа вращений в трехмерном пространстве, лежащая в основе атомной спектроскопии, различные ее конечные подгруппы («точечные группы симметрии»), описывающие внешнюю симметрию молекул и кристаллов, группа перестановок одинаковых частиц. Особое место в этом ряду занимает симметрия относительно обращения времени, привносящая в физику антиунитарные преобразования.

Схема практического использования теории групп во многих задачах довольно проста: описание симметрии системы, составление приводимого представления на множестве состояний системы, рассматриваемых в данной задаче, разложение его на неприводимые составляющие с помощью операторов проектирования и, при необходимости, расчеты матричных элементов на полученных проектированием симметричных состояниях.

Настоящее пособие составлено на основе курса лекций, которые в течение многих лет читались профессором кафедры теоретической физики Л.К. Аминовым для студентов-физиков Казанского университета. В пособии излагаются основы теории групп и их представлений, рассматриваются точечные группы симметрии, группа вращений, пространственные группы и их неприводимые представления. Отдельный раздел посвящен некоторым физическим приложениям теории групп. Материал в основном представлен в форме краткого конспекта; более подробно изложены темы, по которым выполняются лабораторные задания, в частности, расчеты компонент тензоров, инвариантных относительно некоторых групп, расчеты нормальных координат и молекулярных орбиталей симметричных молекул и др. В приложениях приведены справочные сведения, необходимые для выполнений этих заданий. По каждому разделу курса имеются задачи, которые либо дополняют и иллюстрируют теоретическую часть, либо помогают овладеть стандартными приемами, встречающимися в приложениях теории.

В пособие включен также ряд дополнительных сведений, сравнительно редко встречающихся в учебниках по теории групп для физиков. Нам представляется целесообразным хотя бы кратко познакомить студентов с некоторыми выдающимися результатами абстрактной математической теории групп – классификацией конечных групп, алгебр Ли, изоморфизмом алгебр Ли и матричных алгебр. Эти вопросы лишь частично излагаются на лекциях и рассчитаны, скорее, на пробуждение интереса к чтению дополнительной литературы. Несколько подробнее рассматриваются групповая алгебра и коммутаторные алгебры представлений. Эти понятия придают внутреннее единство всей теории представлений и ее приложениям. Гамильтониан квантовомеханической системы является элементом коммутаторной алгебры представления соответствующей группы симметрии, и вид матрицы его в подходящей системе координат определяется леммой Шура. На указанных понятиях основан и фундаментальный вывод Шура о связи полной линейной группы и группы перестановок.

Предполагается, что читатель знаком с основами линейной алгебры, в частности, свойствами унитарных и эрмитовых операторов и матриц, а также элементами квантовой механики.

Конспект лекций Л.К. Аминова впервые был издан в Казанском университете в 1998году под названием «Теория симметрии». Позже была издана вторая часть (2000). Расширенная и дополненная версия была переиздана в издательстве «Институт компьютерных исследований» в 2002году. Необходимость появления настоящего пособия, исправленного и частично переработанного, связана с разработкой авторами электронного образовательного ресурса для курса с таким названием, читаемого в магистратуре Института физики Казанского университета, а также с изменением учебного плана для бакалавриата «Физика», содержащего курс по теории симметрии.

1. Hkgh\gu_ ihgylby l_hjbb]jmii. Ijbf_ju]jmii

1.1 Hij_^_e_gb_]jmiiu

Группа – множество G, на котором определена бинарная групповая операция (***«умножение»***), сопоставляющая каждой паре элементов $a, b \in G$ определенный элемент $c \in G$, $ab = c$. Умножение подчиняется аксиомам (1) ***ассоциативности*** $(ab)c = a(bc)$; (2) в группе имеется ***единичный элемент*** $e \in G$, $ae = ea = a$; (3) для каждого элемента $a \in G$ существует ***обратный*** ему элемент $a^{-1} \in G$, $aa^{-1} = a^{-1}a = e.$ Группа называется ***абелевой*** (*коммутативной*), если для любых $a, b \in G$ имеет место $ab = ba.$ Множество $H \subset G$ называется ***подгруппой*** группы G, если оно замкнуто относительно заданной на G операции умножения.

В зависимости от числа элементов множества G (точнее, от его мощности) различают группы конечные, бесконечные дискретные, непрерывные и смешанные непрерывные. Число элементов конечной группы называют ее ***порядком***. Элементы бесконечной дискретной группы можно перенумеровать с помощью натурального ряда чисел или любого счетного множества символов. Элементы непрерывной группы задаются посредством конечного числа непрерывно меняющихся параметров. Группа называется ***компактной***, если ее параметры пробегают ограниченные интервалы значений. В ***смешанных группах*** некоторые параметры пробегают дискретный (в частности, конечный) набор значений.

1.2 Ijbf_ju]jmii

Группой является совокупность элементов линейного пространства L_n со сложением векторов в качестве групповой операции (в частности, множество всех вещественных чисел, комплексных чисел). Роль единицы группы играет нулевой вектор, обратный элемент для вектора a – противоположный вектор $-a$. Группа абелева, непрерывная n-параметрическая ($2n$ в комплексном случае), некомпактная.

$\mathrm{GL}(n, R)$ [$\mathrm{GL}(n, C)$] – группа всех неособенных линейных операторов (матриц) в вещественном (R) или комплексном (C) пространстве L_n с умножением операторов в качестве групповой операции. Группа некоммутативна (если $n \neq 1$), непрерывная n^2-параметрическая ($2n^2$ в комплексном случае), некомпактная. ***Унитарная группа*** $\mathrm{U}(n)$ – подгруппа $\mathrm{GL}(n, C)$ – определяется n^2 независимыми параметрами; группа компактная. ***Унитарная унимодулярная группа*** $\mathrm{SU}(n) \subset \mathrm{U}(n)$ (матрицы с определителем 1) – (n^2-1)-параметрическая.

Группа вращений в трехмерном евклидовом пространстве $SO(3,R)$ (другие обозначения O_3^+, R_3) – непрерывная трехпараметрическая компактная группа; одна из возможных параметризаций – с помощью трех углов Эйлера. Полная ортогональная группа в трех измерениях $O(3,R)$ (или O_3) служит примером смешанной группы – три непрерывных параметра (углы Эйлера) дополняются четвертым параметром, принимающим два значения (скажем, + и –) и различающим собственные и несобственные вращения.

Группа движений евклидова пространства – совокупность преобразований, не меняющих расстояния между любыми двумя точками; помимо вращений включает параллельные переносы точек.

Группа трансляций бесконечной кристаллической решетки – бесконечная дискретная абелева группа. В качестве элементов группы можно рассматривать векторы трансляций $a(m, n, k) = ma_1 + na_2 + ka_3$, где m, n, k – любые целые числа; a_1, a_2, a_3 определяют ***элементарные трансляции***, параллелепипед, построенный на них, является ***элементарной ячейкой кристалла***.

Симметрическая группа n-ой степени P_n – группа всех перестановок n объектов (чисел) – конечная группа порядка n! Произведение двух перестановок – результат последовательного проведения этих перестановок (в порядке справа налево):

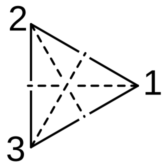
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ b_1 & b_2 & \dots & b_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ b_{a_1} & b_{a_2} & \dots & b_{a_n} \end{pmatrix}.$$

Перестановки можно записывать в одну строчку, в виде произведения независимых ***циклов***: рядом с каждым числом в цикле ставится то число, на место которого переходит первое; цикл замыкается числом, переходящим на место числа, открывающего цикл. Например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 & 6 \end{pmatrix} \equiv (135)(24)(6).$$

Число объектов в цикле называется его ***длиной***, циклы длины 1, как правило, не выписываются. Перестановка, затрагивающая только два числа, называется ***транспозицией***; она представляется одним циклом длины два. Запись перестановок неоднозначна: в полной записи можно как угодно переставлять столбцы, циклы можно начинать с любого из содержащихся в нем чисел, независимые циклы можно переставлять. Переход к обратному элементу достигается перестановкой рядов в двухрядной записи. Всякую перестановку можно представить в виде произведения транспозиций (задача 24). Число множителей в таком произведении определяет ***четность перестановки***. Подгруппа P_n, составленная только из четных перестановок, называется ***знакопеременной группой*** A_n.

Важную роль в различных приложениях играют так называемые ***точечные группы симметрии*** – группы самосовмещений конечных геометрических фигур. Они являются подгруппами ортогональной группы O_3. Так, группа n-го порядка C_n состоит из поворотов около некоторой оси на углы, кратные $2\pi/n$. В качестве объекта с такой симметрией можно представить себе коническую шестеренку с n наклонными зубцами. Группа симметрии правильной треугольной пирамиды, C_{3v}, содержит шесть элементов: единичный E, поворот C_3 на 120° (для определенности против часовой стрелки, считая ось направленной от основания к вершине пирамиды), поворот C_3^2 на 240° (равносильный повороту на 120° по часовой стрелке), отражения $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$ относительно плоскостей, проходящих через высоту и вершины 1, 2, 3 основания пирамиды (нумерация, для определенности, против часовой стрелки, см. рис.).



Подробное перечисление точечных групп приводится в конце раздела.

1.3 l h j h ` ^ Z x s bf g h ` _ k l \wZe _ f _ g l l

Целые степени любого элемента группы определяются следующим образом:

$$a^n = aa...a \ (n \text{ раз}), \quad a^{-n} = a^{-1}a^{-1}...a^{-1}, \quad a^0 = e.$$

Очевидно при этом, что $a^n a^m = a^{n+m}$, и множество $\{a^n\}$ образует подгруппу, называемую ***циклической подгруппой***, порожденной элементом a. Порядок циклической подгруппы называют также ***порядком элемента*** a – это наименьшая степень, при возведении в которую элемента a получается единица: $a^r = e$. Так, циклическая группа C_n образована элементом n-го порядка C_n.

В общем случае некоторое множество элементов группы $\{x_1, x_2, ..., x_r\}$ называется ***порождающим множеством***, или системой образующих группы, если произвольный элемент группы может быть представлен в виде произведения $g = x_i x_j \ldots$, составленного из элементов этого множества и обратных к ним. Образующие элементы группы связаны множеством соотношений вида $x_i x_j \ldots = x_k x_l \ldots$. ***Определяющими соотношениями*** группы называют минимальную совокупность таких соотношений, из которых все остальные можно получить в качестве следствия. В группе C_{3v} наименьшее порождающее множество состоит из двух элементов, например, $C_3, \sigma^{(1)}$, связанных определяющими соотношениями $C_3^3 = E$, $\sigma^{(1)2} = E$, $\sigma^{(1)}C_3 = C_3^2\sigma^{(1)}$.

1.4 L _ h j _ fEZZ] j Z g ` Z

Пусть H подгруппа группы G, a – произвольный элемент группы. Множество $aH = \{ah;\ h \in H\}$ называется ***левым смежным классом*** группы G по подгруппе H, образованным элементом a. Смежный класс содержит столько же элементов, что и подгруппа; если $a \notin H$, то все элементы класса отличны от элементов подгруппы, тогда как $hH = H$ для любого $h \notin H$. Очевидно, в качестве «образующего» может выступать любой элемент класса, $aH = ahH$. Если в группе остался элемент b, не содержащийся ни в H, ни в aH, можно образовать класс bH, не имеющий общих элементов с H и aH и т.д. В результате группа представляется в виде объединения непересекающихся смежных классов:

$$G = H + aH + bH + \ldots$$

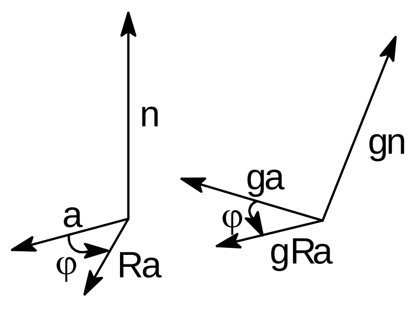
Число слагаемых в этой «сумме» (r) называется ***индексом подгруппы*** H в группе G. Для конечной группы порядка n и подгруппы H порядка m мы получаем соотношение $n = mr$ и ***теорему Лагранжа***: порядок подгруппы является делителем порядка группы.

В группе C_{3v} подгруппа C_3 обладает индексом 2, а три отражения составляют смежный класс по этой подгруппе.

1.5 D e Z k k u h i j y ` _ g g u o e _ f _ g l

Элементы группы a и b называются ***сопряженными*** друг другу, если в группе найдется элемент g такой что $a = gbg^{-1}$. Множество сопряженных друг другу элементов группы образует ***класс***, и группа может быть представлена как объединение непересекающихся классов сопряженных элементов. Порядки сопряженных элементов совпадают, единичный элемент группы сам по себе образует класс, в абелевых группах любой элемент сам по себе образует класс сопряженных элементов.

Элементом, сопряженным к повороту в группе (или подгруппе) движений евклидова пространства, является поворот на такой же по величине угол около оси, получаемой из исходной оси в результате преобразования, осуществляющего сопряжение: $gR(\mathrm{n},\varphi)g^{-1} = R(\hat{g}\mathrm{n}, \pm\varphi)$ (см. рис.). Угол поворота в правой части равенства берется со знаком «–», если

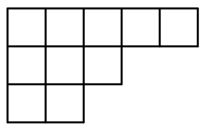


преобразование $\hat{g}$ меняет правый винт на левый. Аналогично, сопряженным к отражению в плоскости элементом является также отражение, трансляции сопряжена трансляция на такой же по величине вектор и т.д., т.е., сопряженные пространственные преобразования однотипны. Напротив, два однотипных преобразования сопряжены друг другу, если в группе имеется преобразование, переводящее соответствующие элементы симметрии (оси, плоскости) друг в друга. Так, в группе C_{3v} повороты C_3, C_3^2 сопряжены, поскольку отражение (любое из трех) переводит ось вращения в себя, но меняет направление поворота. Три отражения сопряжены друг другу, так как их плоскости переводятся друг в друга поворотами (или отражениями в другой плоскости).

Сопряженным к перестановке элементом является перестановка с той же циклической структурой. В полной группе перестановок P_n для любых двух элементов с одинаковой циклической структурой найдется перестановка, сопрягающая их:

$$(a_1 a_2 \ldots a_i)(a_{i+1} \ldots a_j)\ldots = g(b_1 b_2 \ldots b_i)(b_{i+1} \ldots b_j)\ldots g^{-1}, \quad g = \begin{pmatrix} b_1 & \ldots & b_i & b_{i+1} & \ldots & b_j & \ldots \\ a_1 & \ldots & a_i & a_{i+1} & \ldots & a_j & \ldots \end{pmatrix},$$

так что общее число классов сопряженных элементов определяется числом возможных циклических структур для перестановок данной степени. ***Циклическая структура*** (ν) однозначно определяется указанием числа циклов всех возможных длин от 1 до n, $(1^{\nu_1} 2^{\nu_2} \ldots n^{\nu_n})$, или разбиением ($\lambda$) числа n в упорядоченную сумму целых неотрицательных чисел: $\nu_1 + \nu_2 + \ldots + \nu_n = \lambda_1$, $\nu_2 + \ldots + \nu_n = \lambda_2$, $\ldots$, $\nu_n = \lambda_n$, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$, $\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_n = n$. Разбиения наглядно изображаются ***схемами Юнга*** – упорядоченным расположением n клеток (см. рис.)



λ_1
λ_2
λ_3

1.6 B g \ Z j b Z g l g h^] j m i i u= h f h f h j n b a] j m i i

Подгруппа $H' = gHg^{-1}$ называется ***сопряженной*** с подгруппой H. Если $H' = H$ для всех $g \in G$, подгруппа H называется ***инвариантной*** (нормальным делителем группы G). ***Простые группы*** не имеют нетривиальных ($H \neq e, G$) нормальных делителей. ***Полупростые группы*** не имеют абелевых нормальных делителей. Правые и левые смежные классы группы по инвариантной подгруппе совпадают: $aH = Ha$. Отсюда вытекает, что произведения элементов двух таких классов aH, bH (взятых в определенном порядке) все входят в один и тот же класс abH, что позволяет на множестве классов определить операцию группового умножения $aH \cdot bH = abH$. В результате множество классов становится группой, G/H, называемой ***фактор-группой*** группы G по инвариантной подгруппе H. Пример: подгруппа C_3 в группе C_{3v} инвариантна, два смежных класса по этой подгруппе образуют фактор-группу второго порядка.

Две группы G и G^* ***изоморфны***, если между их элементами можно установить взаимно-однозначное соответствие $g \leftrightarrow g^*$, сохраняющее операцию умножения: $(ab)^* = a^*b^*$. Изоморфное отображение группы на себя называется ***автоморфизмом***; например, $a^* = gag^{-1}$ (***внутренний автоморфизм***). Более общим является понятие ***гомоморфизма*** групп; группа G гомоморфна на группу G^*, $G \to G^*$, если между элементами этих групп можно установить соответствие $g \to g^*$ (однозначное в одном направлении), сохраняющее операцию умножения, $(ab)^* = a^*b^*$. Элемент g^* называют ***образом*** g, а g – ***прообразом*** g^*. Нетрудно убедиться, что при гомоморфизме (и изоморфизме) единичный элемент отображается на единичный, а обратный элемент – на обратный к его образу, $a^{-1} \to (a^*)^{-1}$. Множество $N \subset G$ прообразов единичного элемента e^* группы G^* называется ***ядром гомоморфизма*** $G \to G^*$. ***Основная теорема о гомоморфизме***: ядро N гомоморфизма $G \to G^*$ является инвариантной подгруппой группы G, а фактор-группа G/N изоморфна G^*. Для доказательства достаточно убедиться в том, что любой элемент смежного класса aN отображается на один и тот же элемент a^*.

Пример гомоморфизма группы $\mathrm{GL}(n)$: $\hat{A} \to \det\hat{A}$ (отображение на мультипликативное множество всех чисел, отличных от нуля); ядро гомоморфизма – группа $\mathrm{SL}(n)$.

1.7 Ijyfh_ijhba_^_gbmi i

Прямое произведение можно формально определить для любых двух (и более) групп G и G' как множество пар $G \times G' = \{ (g, g') \}$ со следующим законом группового умножения: $(a, a')(b, b') = (ab, a'b')$. Разбиение прямого произведения групп на классы сопряженных элементов предопределяется соответствующим разбиением перемножаемых групп: если $\{a\}$ – класс группы G, $\{a'\}$ – класс группы G', то множество пар $\{ (a, a') \}$ является классом $G \times G'$. Множества пар $\{ (g, e') \}$, $\{ (e, g') \}$ являются инвариантными подгруппами $G \times G'$, изоморфными, соответственно, G и G'. Любая пара элементов этих подгрупп коммутирует, а любой элемент всей группы однозначно представляется в виде произведения элементов подгрупп: $(a, a') = (a, e')(e, a') = (e, a')(a, e')$. Таким образом, всякая группа, содержащая две (и более) подгруппы с указанными свойствами, может рассматриваться как прямое произведение этих подгрупп. Например, $C_6 = C_3 \times C_2$, $O_3 = O_3^+ \times C_i$, где C_i – группа инверсии.

1.8 L_hj_fZweb

Структура группы определяется операцией умножения – правилом, сопоставляющим любой паре элементов (в том числе одинаковых) третий элемент группы. Для конечных групп структура наглядно представляется таблицей умножения («доской Кэли»), в каждой клетке которой указан результат умножения элементов, стоящих в начале соответствующего ряда (левый множитель) и столбца. Таблица умножения группы C_{3v}:

E	C_3	C_3^2	$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$
C_3	C_3^2	E	$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$
C_3^2	E	C_3	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$
$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$	E	C_3	C_3^2
$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$	C_3^2	E	C_3
$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	C_3	C_3^2	E

Короче структура может быть задана системой образующих и определяющими соотношениями между ними. Любой элемент группы простого порядка обязательно имеет тот же порядок, т.е., такая группа может быть только циклической. Группа четвертого порядка помимо циклической может обладать структурой, в которой все неединичные элементы – второго порядка (***четверная группа*** типа $C_2 \times C_2$). Группы шестого порядка могут иметь две различные структуры: циклическую и структуру группы C_{3v}. Пять различных структур возможны для групп восьмого порядка (см. задачу 23).

Из таблицы умножения группы вытекает, что в результате умножения элементов группы, расположенных в определенном порядке [верхняя строчка таблицы – $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$], слева на какой либо элемент группы a получается строчка $(aa_1, aa_2, \ldots, aa_n)$, в которой те же элементы расположены в другом порядке (переставлены). Таким образом, каждому элементу группы сопоставляется перестановка n предметов: $a \to \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_n \\ aa_1 & aa_2 & \ldots & aa_n \end{pmatrix}$, причем нетрудно убедиться в том, что произведению элементов группы отвечает произведение соответствующих перестановок. Сказанное формулируется как ***теорема Кэли***: всякая группа порядка n изоморфна некоторой подгруппе симметрической группы n-й степени P_n. Эти подгруппы содержат только «правильные» перестановки, представляемые в виде произведения независимых циклов одинаковой длины.

1.9 L h q _ q g]ý m i i uk b f f _ l j b b

Элементами точечной ***симметрии*** могут быть ось симметрии, плоскость симметрии, центр симметрии. ***Порядок оси*** – наибольший из порядков поворотов, совершаемых около этой оси. ***Зеркальный поворот*** – комбинация поворота с отражением в плоскости, перпендикулярной оси поворота: $S(\varphi) = C(\varphi)\sigma_h = \sigma_h C(\varphi)$. Отражение в плоскости и инверсия являются частными случаями зеркальных поворотов: $S_1 = \sigma_h$, $S_2 = C_2\sigma_h = I$. Отметим, что произведение двух зеркальных поворотов является чистым поворотом, произведение зеркального поворота на поворот является зеркальным поворотом. В частности, $\sigma_v\sigma_{v'} = C(2\varphi)$ – поворот около линии пересечения плоскостей v' и v, φ – угол между плоскостями, отсчитываемый от плоскости v'. Отсюда можно получить и результат умножения поворота на отражение в плоскости, проходящей через ось поворота: $\sigma_v = C(2\varphi)\sigma_{v'}$. Кроме того, $\sigma_v C(\varphi)\sigma_v = C(-\varphi)$, с примером такого соотношения мы уже сталкивались при рассмотрении группы C_{3v}. Когда повороты около оси на противоположные углы сопряжены друг другу, ось называют ***двусторонней***.

Перечислим возможные точечные группы симметрии:

1. Циклические группы C_n (в пределе C_∞); объекты с такой симметрией обладают лишь одной осью n-го порядка.

2. Циклические группы S_{2n} (зеркально-поворотная ось четного порядка). Частный случай – группа инверсии S_2 (другое обозначение: C_i).

3. Абелевы группы $C_{nh} = C_n \times C_s$. Элементы симметрии – ось n-го порядка, плоскость отражения, а при n четном и центр симметрии. При n нечетном группа циклическая, с образующей $S_n = C_n\sigma_h$. Частный случай $C_{1h} \equiv C_s$.

4. Группы симметрии правильных n-угольных пирамид C_{nv}. Элементы симметрии – ось n-го порядка и n плоскостей, проходящих через ось и отстоящих друг от друга на углы, кратные π/n. При $n > 2$ группа неабелева; каждая пара взаимно-обратных поворотов образует класс сопряженных элементов; при нечетном n все отражения входят в один класс, а при n четном они разбиваются на два класса по $n/2$ отражений в плоскостях, связанных друг с другом поворотами C_n.

5. Группы D_n содержат в дополнение к группе C_n повороты на $180°$ около n осей второго порядка, перпендикулярных к «главной» оси и расположенных под углами π/n друг к другу. Группы D_n и C_{nv} изоморфны.

6. Группы симметрии правильных n-угольных призм $D_{nh} = D_n \times C_{1h}$. Элементы симметрии – ось n-го порядка, n перпендикулярных ей осей второго поряд-

ка, n плоскостей отражения, проходящих через главную ось и одну из осей второго порядка, плоскость отражения, содержащая оси второго порядка, при n четном имеется также центр симметрии. Число классов сопряженных элементов вдвое больше, чем в группе D_n.

7. Группы D_{nd} получаются в результате добавления к осям симметрии группы D_n n плоскостей, проходящих через главную ось и биссектрисы углов между соседними осями второго порядка. Нетрудно убедиться в том, что произведение отражения в плоскости и поворота на угол π около оси, расположенной под углом φ к плоскости есть зеркальный поворот на угол 2φ около главной оси (см. задачу 41). Таким образом, элементы симметрии здесь такие: зеркально-поворотная ось $2n$-го порядка, n эквивалентных друг другу (вне зависимости от четности n) осей второго порядка, n эквивалентных плоскостей, а при n нечетном еще и центр симметрии. Симметрией D_{nd} обладает, например, фигура, полученная из двух одинаковых правильных n-угольных призм, сложенных основаниями, поворотом одной из них около общей оси на угол π/n.

8. Группы симметрии правильных многогранников – тетраэдра (T, T_d), октаэдра (куба) (O, $O_h = O \times C_i$), икосаэдра (додекаэдра) (Y, $Y_h = Y \times C_i$). Группы T, O, Y содержат только поворотные элементы. Укажем классы сопряженных элементов некоторых групп (число элементов класса и типичный элемент): $T(E, 4C_3, 4C_3^2, 3C_2)$, $T_d(E, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d)$, $O(E, 8C_3, 3C_4^2, 6C_4, 6C_2)$, $O_h(E, 8C_3^2, 3C_4^2, 6C_4, 6C_2, I, 8S_6, 3\sigma_h, 6S_4, 6\sigma_d)$, $Y(E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2)$. Отметим, что оси третьего порядка в группе T односторонние, а в группе T_d двусторонние из-за наличия отражений в плоскостях, проходящих через эти оси. Группы T_d и O изоморфны. В кристаллографии приходится встречаться еще с группой $T_h = T \times C_i$.

Число точечных кристаллографических групп ограничено 32-мя (см. раздел 6). Это всевозможные подгруппы групп O_h и D_{6h}, и их таблицы умножения, таким образом, содержатся в таблицах умножения групп O_h и D_{6h}, приведенных в приложении 2.

Для точечных кристаллографических групп (которые содержат повороты только второго, третьего, четвертого и шестого порядков) часто используются международные обозначения, в которых вначале указываются порядки главных осей поворотов (ось Z), при этом ***инверсионно-поворотная*** ось обозначается чертой над цифрой; наличие плоскости отражения, перпендикулярной оси, при необходимости отмечается символом */m* рядом с обозначением оси. Другие оси и плоскости указываются на втором и третьем местах (если имеется несколько эквивалентных осей или плоскостей, то указывается лишь одна из них). Примеры международных обозначений: $C_n \equiv n$, $C_i \equiv \bar{1}$, $C_s \equiv m$, $C_{2h} \equiv 2/m$, $D_2 \equiv 222$, $C_{2v} \equiv mm2$, $D_{2h} \equiv mmm$, $C_{4h} \equiv 4/m$, $S_4 \equiv \bar{4}$, $D_4 \equiv 422$, $D_{2d} \equiv \bar{4}2m$, $C_{4v} \equiv 4mm$, $D_{4h} \equiv 4/mmm$, $C_{3i} = S_6 \equiv \bar{3}$, $C_{3h} = S_3 \equiv \bar{6}$, $D_{3d} \equiv \bar{3}m$, $D_{3h} \equiv \bar{6}2m$, $T \equiv 23$, $T_h \equiv m3$, $O \equiv 432$, $T_d \equiv \bar{4}3m$, $O_h \equiv m3m$. Из различных возможных обозначений (например, $\bar{6}$ и $3/m$ для C_{3h}) выбираются наиболее простые. В кубических системах за ось Z выбирается одна из трех взаимно-перпендикулярных осей симметрии четвертого (для тетраэдров второго) порядка.

1.10 G _ d h l h j ŭ h_ i h e g b l _ e vkġ u ^ _ g t

Приведем определения некоторых важных понятий теории групп, сравнительно редко встречающихся в физической литературе.

• ***Полугруппа*** – множество, замкнутое относительно умножения, удовлетворяющего лишь условию ассоциативности.

• ***Центр группы*** $\{z\} = Z \subset G$ – множество элементов, коммутирующих со всеми элементами группы: $zg = gz$. Центр – абелева инвариантная подгруппа.

• ***Нормализатор подмножества*** $M \subset G$ – совокупность элементов $a \in G$, которые удовлетворяют соотношению $aM = Ma$.

• ***p-группа*** – группа порядка $p^к$, где p – простое, $к$ – любое целое число. Аналогично определяются (p, q)- , (p, q, r)-группы. Так, P_5 – (2, 3, 5)-группа.

• ***Коммутатор элементов*** группы a и b: $[a, b] = a^{-1}b^{-1}ab$.

• ***Коммутант группы*** – подгруппа $G' \subset G$, порожденная всеми коммутаторами. Так, C_3 – коммутант C_{3v}. Если $G' = G$, то G – ***совершенная группа***.

• Группа G называется ***разрешимой***, если ее ***производный ряд*** $G \supset G' \supset (G')' \supset \ldots$ завершается («стабилизируется») подгруппой e.

• ***Нормальный ряд группы*** – последовательность подгрупп $G \supset N_1 \supset N_2 \supset \ldots e$, в которой каждый член является нетривиальным нормальным делителем предыдущего. Группа оказывается разрешимой при наличии у нее нормального ряда, у которого все фактор-группы N_i / N_{i+1} абелевы.

• Группа G преобразований некоторого множества Ω называется ***транзитивной***, если для любых $\alpha, \beta \in \Omega$ найдется элемент $g \in G$ такой, что $\hat{g}\alpha = \beta$.

• ***Свободная группа ранга*** r – порождена множеством r элементов, не связанных никакими определяющими соотношениями.

• Группа G является ***полупрямым произведением*** подгрупп A и B, $G = AB$, если любой элемент группы может быть представлен в виде $g = ab$, $a \in A$, $b \in B$, $A \bigcap B = e$, A – инвариантная подгруппа G. Группа B ($\sim G/A$) изоморфна подгруппе автоморфизмов A: $b \to bAb^{-1}$. Полупрямыми произведениями являются евклидова группа, группа Пуанкаре (в них A – подгруппа трансляций).

• ***Сплетение*** группы A с помощью группы B (порядка n), $A \wr B$, – полупрямое произведение групп $A^n = A \times A \times \ldots \times A$ и B, причем действие элементов B на элементы A^n определяется по правилу $b(a_1, a_2, \ldots, a_n)b^{-1} = (a_{1'}, a_{2'}, \ldots, a_{n'})$, где $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & n \\ 1' & 2' & \ldots & n' \end{pmatrix}$ – перестановка, соответствующая b по теореме Кэли.

• Пусть G непрерывная r-параметрическая группа: $g(p_1, \ldots, p_r) \equiv g(p) \in G$, $[g(p)]^{-1} = g(p')$, $g(a)g(b) = g(c)$, $p' = p'(p)$, $c = c(a, b)$. Если p' и c – аналитические функции своих аргументов, то G – r-***параметрическая группа Ли***.

• Существует исчерпывающий список конечных простых групп, включающий знакопеременные группы степени не меньше 5, группы типа Ли и 26 так называемых спорадических групп (Горенстейн, 1985).Группы типа Ли являются аналогами над конечными полями комплексных групп Ли. ***Классификационная теорема*** гласит: если G – конечная простая группа, то она изоморфна одной из простых групп указанного списка.

AZ^Zq]bZa^_1em

1. Образуют ли группу следующие множества матриц, если в качестве группового умножения взять обычное умножение матриц?

   $a)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}, \prod a_{jj} \neq 0, \qquad b)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0, \qquad c)\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}.$

2. Показать, что $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$.
3. Доказать, что пересечение любого числа подгрупп – подгруппа.
4. Доказать, что все элементы группы, перестановочные с данным элементом a (нормализатор a), образуют подгруппу.
5. Пусть все неединичные элементы группы имеют порядки, равные 2. Доказать, что группа абелева.

6. Пусть a – элемент конечной группы порядка n. Вычислить a^n.
7. Доказать, что всякая бесконечная группа имеет бесконечное множество подгрупп.
8. Доказать, что если $b \in aH$, то $bH = aH$ (H – подгруппа).
9. Доказать, что элементы xy и yx сопряжены.
10. Доказать, что число элементов в классе сопряженных с a элементов равно n/m, где n – порядок группы, m – порядок нормализатора a.
11. Доказать, что в любой группе подгруппа индекса 2 является нормальным делителем.
12. Доказать, что центр группы является инвариантной подгруппой.
13. Могут ли абелевы группы быть простыми?
14. Показать, что инвариантная подгруппа содержит вместе с элементом a весь класс сопряженных a элементов.
15. Пусть порядок конечной группы делится на простое число p. Доказать, что в группе имеются элементы порядка p.
16. Привести примеры автоморфизмов, отличных от $a \to bab^{-1}$.
17. Доказать, что если существуют гомоморфизмы $G \to G^*$ и $G^* \to G^{**}$, то существует гомоморфизм $G \to G^{**}$.
18. Доказать, что все гомоморфизмы простой группы, за исключением $G \to e^*$, являются изоморфизмами.
19. Доказать, что отображение $a \leftrightarrow a^{-1}$ является автоморфизмом тогда и только тогда, когда группа коммутативна.
20. Доказать, что фактор-группа G/Z некоммутативной группы G по ее центру является нециклической.
21. Может ли прямое произведение нетривиальных групп ($\neq e$) быть простой группой?
22. Доказать, что прямое произведение двух конечных циклических групп со взаимно-простыми порядками является циклической группой.
23. Выяснить возможные структуры групп восьмого порядка.
24. Показать, что всякую перестановку можно представить в виде произведения транспозиций.
25. Найти все элементы группы P_n, перестановочные с циклом $(123..n)$.
26. Доказать, что если разложение перестановки p на независимые циклы состоит из циклов длин $m_1, m_2, \dots, m_k$, то порядок p равен наименьшему общему кратному чисел $m_1, m_2, \dots, m_k$.

27. Доказать, что четность перестановки $p \in P_n$ равна $(-1)^{n-m}$, где m – число циклов, на которые распадается перестановка.
28. Доказать, что множество транспозиций (12), (23),…, $(n-1, n)$ порождает группу P_n.
29. Доказать, что две перестановки (12), $(12\ldots n)$ порождают P_n.
30. Разбить группу P_5 на классы сопряженных элементов.
31. Разбить знакопеременную группу A_4 (подгруппа четных перестановок группы P_4) на классы сопряженных элементов.
32. Перечислить подгруппы, сопряженные P_3 в группе P_4.
33. Показать, что в группе вращений коммутируют между собой только вращения вокруг одной и той же оси или повороты на π около взаимно-перпендикулярных осей.
34. Разбить на классы сопряженных элементов унитарные группы $U(n)$.
35. Показать, что преобразование $C(\varphi)\,I$ является зеркальным поворотом.
36. Показать, что группа самосовмещений многогранника, имеющего n вершин, изоморфна некоторой подгруппе P_n.
37. Найти подгруппу самосовмещений правильного n-угольника в группе всех движений плоскости.
38. Пусть фигура Ф состоит из всех точек плоскости, имеющих целые координаты в некоторой прямоугольной системе координат. Найти подгруппу самосовмещений Ф и описать ее подгруппы четвертого порядка.
39. Найти наименьшее множество элементов, порождающих группу D_n.
40. Показать, что все элементы группы октаэдра O порождаются поворотами вокруг осей четвертого порядка.
41. Показать, что главная ось группы D_{nd} есть зеркально-поворотная ось порядка $2n$.

2. Линейные представления групп

2.1 Определение представлений

Линейным представлением группы G называется гомоморфизм $G \to \Gamma$ $[g \to \hat{D}_\Gamma(g)]$, где $\Gamma = \{\hat{D}_\Gamma(g)\}$ – группа неособенных линейных операторов, действующих в некотором пространстве L_n, или соответствующих им матриц. ***Размерность представления*** (n) – размерность пространства L_n (порядок матриц). Изоморфное отображение $G \to \Gamma$ называется ***точным представлением***. Два представления Γ и Γ' одинаковой размерности называются ***эквивалентными***, если имеется хотя бы один неособенный линейный оператор (матрица) S (мы не всегда используем значок ˆ для обозначения оператора) такой, что $\hat{D}_{\Gamma'}(g) = S\hat{D}_\Gamma(g)S^{-1}$ для всех $g \in G$. Эквивалентные матричные представления можно рассматривать как представления одними и теми же операторами, записанными в разных базисах. ***Унитарные представления*** – представления унитарными операторами (матрицами).

Представление Γ называется ***приводимым***, если имеется нетривиальное подпространство $L_m \subset L_n$, инвариантное относительно всех операторов $\hat{D}_\Gamma(g)$. В противном случае представление называется ***неприводимым*** (НП). Матрицы приводимых представлений в базисе ($e_1, \ldots, e_m, e_{m+1}, \ldots, e_n$), где ($e_1, \ldots, e_m$) – базис L_m, имеют «приведенный» вид:

$$\hat{D}_\Gamma(g) = \begin{pmatrix} \hat{D}_1(g) & \hat{D}_3(g) \\ 0 & \hat{D}_2(g) \end{pmatrix}.$$

Приводимое представление индуцирует два представления меньшей размерности: Γ_1, $g \to \hat{D}_1(g)$; Γ_2, $g \to \hat{D}_2(g)$. Представление Γ называется ***вполне приводимым*** (***разложимым***), если пространство L_n распадается в прямую сумму двух или более инвариантных относительно всех $\hat{D}_\Gamma(g)$ подпространств, в каждом из которых индуцируются неприводимые представления. В подходящем базисе (составленном из базисов инвариантных подпространств) матрица такого представления имеет вид «прямой» суммы матриц, соответственно, Γ называют ***суммой*** НП, $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \ldots$.

2.2 Разложение приводимых представлений

Приводимые унитарные представления вполне приводимы, поскольку унитарное пространство можно записать в виде прямой суммы подпространства L_m

и его ортогонального дополнения $L_m^{\perp}$, а из инвариантности L_m относительно унитарных операторов вытекает и инвариантность $L_m^{\perp}$. Представления конечных групп унитарны: в пространстве, где действуют операторы $\hat{D}(g)$, можно определить скалярное произведение таким образом, что эти операторы будут сохранять его, $\{\hat{D}(g)x, \hat{D}(g)y\} = \{x, y\}$. Достаточно положить $\{x, y\} = \sum_g (\hat{D}(g)x, \hat{D}(g)y)$, где (x, y) – произвольное исходное скалярное произведение. «Старое» скалярное произведение сохраняется операторами $S\hat{D}S^{-1}$, где S – матрица перехода от любого ортонормированного по-новому базиса f_i, $\{f_i, f_j\} = \delta_{ij}$, к базису e_i, ортонормированному по-старому: $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$, $Sf_i = e_i$. Для доказательства удобно дважды воспользоваться соотношением $(Sx, Sy) = \{x, y\}$, которое легко получается, если разложить x и y по координатам: $x = \sum_i \xi^i f_i$, $y = \sum_i \eta^j f_j$.

Сказанное выше сводит исследование представлений конечных групп к нахождению их неэквивалентных унитарных НП.

Утверждение об унитарности представлений (а также приводимые ниже соотношения ортогональности матричных элементов и характеров НП) можно распространить и на непрерывные компактные группы, заменяя сумму по группе $\sum_g F(g)$ «инвариантным» интегралом $\int F(g)dg = \int F(g_0 g)dg$. Фактически это интеграл по параметрам группы (в конечных пределах!) с некоторой весовой функцией: $\int F(g)dg = \int F(p_1, \ldots, p_r)\rho(p_1, \ldots, p_r)dp_1 \ldots dp_r$.

2.3 E _ f f ZR m j Zb _ _k e _ ^ k l \ b y

Лемма Шура: если $XD^{(\alpha)}(g) = D^{(\beta)}(g)X$ для двух неприводимых представлений Γ_α и Γ_β (любой группы), то либо $X = 0$, либо X – неособенная квадратная матрица, и тогда Γ_α эквивалентно Γ_β. Доказательство: матрица X содержит $n_\alpha = \dim \Gamma_\alpha$ столбцов и n_β строчек и (линейно) отображает векторы n_α-мерного пространства с базисом $\{e_i\}$ на векторы n_β-мерного. Транспонированную матрицу $\tilde{X}$ можно рассматривать как отображение n_β-мерного пространства на n_α-мерное. При $n_\alpha > n_\beta$ векторы $\{Xe_i\}$ линейно зависимы, т.е., существуют ненулевые векторы $x = \sum_i \xi^i e_i$ такие, что $Xx = 0$. Эти векторы образуют подпространство в $L_{n\alpha}$, которое по условию леммы оказывается инвариантным относительно всех $D^{(\alpha)}$; в силу неприводимости Γ_α оно обязано совпадать со всем пространством, и, следовательно, $X = 0$. При $n_\alpha < n_\beta$ из тех же соображений $\tilde{X} = 0$, т.е., снова $X = 0$. При $n_\alpha = n_\beta$ векторы $\{Xe_i\}$ не обязательно линейно зависимы, но тогда X – неособенный оператор.

Следствие (***вторая лемма Шура***): если $XD^{(\alpha)}(g) = D^{(\alpha)}(g)X$ для всех $g \in G$, то $X = \lambda E$ – скалярная матрица. (Если X – неособенная матрица, то $X - \lambda E$, где λ – собственное значение X, особенная, а поэтому $X - \lambda E = 0$.) Отсюда вытекает важный вывод для абелевых групп: все НП абелевых групп одномерны.

Рассмотрим конечную группу G (порядка g) и ее НП Γ_α и Γ_β. Пусть M_{ij} – прямоугольная матрица, в которой только один элемент (в i-й строчке и j-м столбце) отличен от нуля и равен 1. Матрица

$$X = \frac{1}{g}\sum_g D^{(\beta)}(g) M_{ij} D^{(\alpha)}(g^{-1})$$

удовлетворяет условию леммы Шура (а при $\alpha = \beta$ – условию следствия из нее); поэтому можно написать $X = \lambda_{ij}\delta_{\alpha\beta}E$, полагая, что $\alpha \neq \beta$ означает неэквивалентность представлений Γ_α и Γ_β. Расписывая это матричное равенство по элементам, получим соотношение:

$$\frac{1}{g}\sum_g D_{li}^{(\beta)}(g) D_{jk}^{(\alpha)}(g^{-1}) = \lambda_{ij}\delta_{\alpha\beta}\delta_{lk}.$$

Полагая здесь $\alpha = \beta$, $l = k$ и суммируя по k, находим $\lambda_{ij} = \delta_{ij}/n_\alpha$; подстановка этого выражения в приведенное выше равенство приводит к ***соотношению ортогональности для матричных элементов НП***. Для унитарных представлений $D(g^{-1}) = \tilde{D}(g)^*$ (звездочка здесь означает комплексное сопряжение, а тильда – транспонирование), и поэтому соотношение ортогональности можно представить в виде

$$\frac{1}{g}\sum_g D_{kj}^{(\alpha)}(g)^* D_{li}^{(\beta)}(g) = \frac{1}{n_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{kl}\delta_{ji}. \qquad (2.1)$$

2.4 O Z j Z d l i j j _ ^ k l Z \ e _ g b

Характер элемента g в представлении Γ: $\chi_\Gamma(g) = \mathrm{Sp}D_\Gamma(g)$. Характеры сопряженных элементов совпадают, $\chi_\Gamma(aga^{-1}) = \chi_\Gamma(g)$, и можно говорить о ***характере класса*** сопряженных элементов. ***Характер представления*** Γ – совокупность характеров элементов группы (классов) в этом представлении. Характеры эквивалентных представлений совпадают. Из (2.1) вытекают ***соотношения ортогональности для характеров НП***:

$$\frac{1}{g}\sum_g \chi^{(\alpha)}(g)^* \chi^{(\beta)}(g) = \delta_{\alpha\beta},$$

или (для конечных групп)

$$\frac{1}{g}\sum_i m_i \chi_i^{(\alpha)*}\chi_i^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}, \tag{2.2}$$

где m_i – число элементов класса K_i. Вследствие этого, число неэквивалентных НП группы не превышает числа классов k (как будет показано в дальнейшем, совпадает с ним). Действительно, число ненулевых векторов

$$\chi^{(\alpha)} = \left(\sqrt{\frac{m_1}{g}}\chi_1^{(\alpha)}, \ldots, \sqrt{\frac{m_k}{g}}\chi_k^{(\alpha)}\right),$$

ортогональных друг другу согласно (2.2), не превышает размерности пространства.

Однозначность разложения вполне приводимого представления по неприводимым:

$$\Gamma = \sum_\alpha N_\alpha \Gamma_\alpha \Rightarrow \chi_\Gamma(g) = \sum_\alpha N_\alpha \chi^{(\alpha)}(g), \quad N_\alpha = \frac{1}{g}\sum_i m_i \chi_{\Gamma i}\chi_i^{(\alpha)*}. \tag{2.3}$$

$$\frac{1}{g}\sum_g \left|\chi_\Gamma(g)\right|^2 = \sum_\alpha N_\alpha^2. \tag{2.4}$$

Критерием неприводимости представления Г служит обращение правой части (2.4) в единицу.

2.5 J_]meyjgh_ ij_^klZ\e_gb_]jmiiu

Регулярное представление конечной группы: $g_s \to G_s$, где матрица G_s определяется соотношением

$$(g_s g_1, g_s g_2, \ldots, g_s g_g) = (g_{s1}, g_{s2}, \ldots, g_{sg}) = (g_1, g_2, \ldots, g_g)G_s,$$

т.е., $(G_s)_{ki} = \delta_{k,\,si}$. Характер регулярного представления: $\chi_{\text{reg}}(e) = g$, $\chi_{\text{reg}}(a \neq e) = 0$. Разложение на НП: согласно (2.3), $N_\alpha = n_\alpha = \dim \Gamma_\alpha$. Отсюда вытекают важные ***соотношения Бернсайда***:

$$g = \chi_{\text{reg}}(e) = \sum_\alpha N_\alpha \chi^{(\alpha)}(e) = \sum_\alpha n_\alpha^2, \quad \sum_\alpha n_\alpha \chi^{(\alpha)}(a \neq e) = 0. \tag{2.5}$$

Например, группа T имеет 4 класса сопряженных элементов, а значит и 4 неэквивалентных НП, размерности которых связаны соотношением (2.5): $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 = 12$, т.е., имеются три одномерных и одно трехмерное НП.

2.6 Dhfie_dkgh-khijy`_ggu_ ij_^klZ\e_gby

Комплексно-сопряженные представления: $\Gamma = \{D(g)\}$ и $\Gamma^* = \{D^*(g)\}$; $\chi_{\Gamma^*} = \chi_\Gamma^*$. Если Г – НП, то Г* – тоже НП. Если характер Г вещественный, то Г и Г* эквивалентны. Для эквивалентных НП Г и Г* $D(g) = SD^*(g)S^{-1} = SS^*D(g)(S^*)^{-1}S^{-1}$, и, согласно лемме Шура, $SS^* = \lambda E$. Для унитарных Г матрица S может быть выбрана унитарной (задача 5), и тогда $S = \lambda \tilde{S}$, откуда $\lambda = \pm 1$. При $\lambda = 1$, $S = \tilde{S}$ представление Г называется ***потенциально-вещественным***, оно эквивалентно вещественному [с вещественными матрицами $D(g) = D^*(g)$]. Если U – матрица преобразования к вещественной матрице D': $D' = U^{-1}DU = (U^{-1}DU)^*$, то $D = (U\tilde{U})D^*(U\tilde{U})^{-1}$, т.е., матрица U находится решением уравнения $U\tilde{U} = S$. Отсюда видно, что ***псевдовещественные представления*** ($S = -\tilde{S}$) никаким эквивалентным преобразованием не могут быть приведены к вещественному виду. Сумма комплексно-сопряженных представлений $\Gamma + \Gamma^*$ всегда может быть приведена к вещественному виду: если $D_\Gamma(g) = D_1(g) + iD_2(g)$, где $D_1(g)$ и $D_2(g)$ – вещественные матрицы, то

$$S\begin{pmatrix} D_\Gamma(g) & 0 \\ 0 & D_\Gamma^*(g) \end{pmatrix} S^{-1} = \begin{pmatrix} D_1(g) & D_2(g) \\ -D_2(g) & D_1(g) \end{pmatrix}, \qquad S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} E & iE \\ iE & E \end{pmatrix},$$

где E – единичная матрица порядка размерности Г.

Представление, ***сопряженное*** Г: $\tilde{\Gamma}$, $g \to \tilde{D}_\Gamma(g^{-1})$. Для унитарных представлений $\Gamma^* = \tilde{\Gamma}$.

2.7 Ijyfh_ijhba_^_igjb_^klZ\e_]gjbmciiu

Прямое произведение пространств $L_n \times L_m$ определяется как линейная оболочка множества билинейных комбинаций $\{xy\}$, где $x \in L_n$, $y \in L_m$. Если $\{e_i\}$, $\{f_j\}$ – базисы L_n и L_m, соответственно, то произвольный элемент $z \in L_n \times L_m$ однозначно может быть представлен в виде $z = \sum_{ij} \zeta^{ij} e_i f_j$, т.е., множество пар $\{e_i f_j\}$ служит ***естественным базисом*** в произведении пространств, размерность которого оказывается равной произведению размерностей сомножителей, $\dim L_n \times L_m = nm$. ***Прямое произведение операторов*** A и B, действующих в L_n и L_m, соответственно, определяется как линейный оператор на $L_n \times L_m$, причем $(A \times B)xy = (Ax)(By)$. Матрица $A \times B$ в базисе $\{e_i f_j\}$ является «прямым произведением» матриц A и B в базисах $\{e_i\}$ и $\{f_j\}$, соответственно:

$$(A \times B)_{i'j',ij} = A_{i'i} B_{j'j}.$$

Если L_n и L_m – унитарны (в них определены скалярные произведения), то скалярное произведение в $L_n \times L_m$ определяется условиями $(xy, x'y') = (x, x')(y, y')$ и линейности (антилинейности) по аргументам. Тогда, если $\{e_i\}$ и $\{f_j\}$ – ортонормированные базисы, то $\{e_i f_j\}$ – ортонормированный базис в $L_n \times L_m$.

Прямое произведение представлений группы Γ_1, $g \to D_1(g)$ и Γ_2, $g \to D_2(g)$:

$\Gamma_1 \times \Gamma_2$, $g \to D_1(g) \times D_2(g)$. Если Γ_1 и Γ_2 – унитарны, то $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ также унитарное представление. Характер прямого произведения представлений:

$$\chi_{\Gamma_1 \times \Gamma_2}(g) = \chi_{\Gamma_1}(g)\chi_{\Gamma_2}(g). \qquad (2.6)$$

Понятие прямого произведения очевидным образом обобщается на любое число сомножителей. В частности, каждое представление порождает ***тензорное представление*** любого ранга r в соответствующем пространстве: $\Gamma \times \Gamma \times \ldots \times \Gamma$ (r раз). Тензорное пространство (ранга r) распадается в сумму подпространств, обладающих определенной симметрией относительно перестановок (r-ой степени), инвариантных относительно тензорного представления.

Например, тензор второго ранга является суммой симметричного и антисимметричного тензоров; соответственно, квадрат представления Γ приводится к сумме симметризованного и антисимметризованного квадратов:

$$\Gamma \times \Gamma = \Gamma^2 = [\Gamma^2] + \{\Gamma^2\}.$$

Если L_n – пространство действия представления Γ, $g \to D(g)$, с базисом $\{e_i\}$, то пространством действия представления Γ^2, $g \to D(g) \times D(g)$ служит $L_n^{(1)} \times L_n^{(2)}$ с базисом $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)}\}$. Базисом подпространства симметричных тензоров служит набор $n(n+1)/2$ векторов $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)} + e_j^{(1)} e_i^{(2)}\}$, а базисом для антисимметричных тензоров – набор $n(n-1)/2$ векторов $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)} - e_j^{(1)} e_i^{(2)}\}$. Простые расчеты приводят к следующим характерам:

$$\chi_{[\Gamma^2]} \equiv [\chi_\Gamma^2(g)] = \tfrac{1}{2}\chi_\Gamma^2(g) + \tfrac{1}{2}\chi_\Gamma(g^2), \qquad \{\chi_\Gamma^2(g)\} = \tfrac{1}{2}\chi_\Gamma^2(g) - \tfrac{1}{2}\chi_\Gamma(g^2). \qquad (2.7)$$

2.8 l j _ ^ k l Z \ e _ g b y f h] h j h b a \ _ ^ _ g b y i i

Построение представлений прямого произведения групп по представлениям перемножаемых групп: пусть $G \to \Gamma$, $D(g)$ в L_n, $G' \to \Gamma'$, $D'(g')$ в L_m; тогда $G \times G' \to \Gamma \times \Gamma'$, $(aa') \to D(a) \times D'(a')$ в $L_n \times L_m$. Характер $\chi_{\Gamma \times \Gamma'}(aa') = \chi_\Gamma(a)\,\chi_{\Gamma'}(a')$. Если Γ и Γ′ – НП, то $\Gamma \times \Gamma'$ – НП группы $G \times G'$. Для конечных групп это следует из критерия неприводимости.

2.9 F _ l h ^ _ l _ \ u q b k e _ g b Z y j Z d l _ j h \ d h g _ q g] j m i i

Представим класс K_i как объединение элементов: $K_i = a_{i1} + a_{i2} + \ldots + a_{im_i}$. Очевидно, $bK_ib^{-1} = K_i$, $b \in G$. В сумме $K_i K_j = K_j K_i = \sum_{ts} a_{it} a_{js}$ каждый элемент $a_{it'} a_{js'} = a_{kr'}$ входит вместе со всем классом сопряженных элементов K_k, ибо $ba_{kr'}b^{-1} = ba_{it'}b^{-1}ba_{js'}b^{-1} \in K_i K_j$. Таким образом, $K_i K_j$ составлено из классов:

$$K_i K_j = \sum_k c(ijk) K_k. \qquad (2.8)$$

Положительные целые числа $c(ijk)$ в этих соотношениях называются ***структурными коэффициентами группы***. Пусть $G \to \Gamma_\alpha$, $g \to D^{(\alpha)}(g)$, тогда $K_i \to D_i = b_i E$ (следствие леммы Шура), $\mathrm{Sp} D_i = m_i \chi_i = b_i n_\alpha$, $\sum_i m_i |\chi_i|^2 = g$, поэтому $n_\alpha^2 = g(\sum_i |b_i|^2/m_i)^{-1}$. Согласно (2.8)

$$b_i b_j = \sum_k c(ijk) b_k . \tag{2.9}$$

Решение этой системы уравнений дает возможные наборы $b_i^{(\alpha)}$, а с ними и наборы характеров $\chi_i^{(\alpha)}$. Например, для группы C_{3v} ($K_1 = e$, $K_2 = C_3 + C_3^2$, $K_3 = \sigma^{(1)} + \sigma^{(2)} + \sigma^{(3)}$); $b_1 = 1$, $b_2^2 = 2b_1 + b_2$, $b_3^2 = 3b_1 + 3b_2$, $b_2 b_3 = 2b_3$; характеры трех НП: $\Gamma_1(1, 1, 1)$;$\Gamma_2(1, 1, -1)$; $\Gamma_3(2, -1, 0)$.

Из (2.9) и (2.5) следует, что

$$\sum_\alpha \chi_i^{(\alpha)} \chi_j^{(\alpha)} m_i m_j = \sum_{k\alpha} c(ijk) m_k n_\alpha \chi_k^{(\alpha)} = c(ij1) g;$$

$K_1 = e$, $c(ij1) = m_i \delta_{i'j}$, где класс $K_{i'}$ состоит из элементов, обратных элементам K_i, $\chi_{i'} = \chi_i^*$, $m_{i'} = m_i$. Таким образом,

$$\sum_\alpha \chi_i^{(\alpha)*} \chi_j^{(\alpha)} \sqrt{m_i m_j / g^2} = \delta_{ij} . \tag{2.10}$$

Отсюда вытекает, что число классов сопряженных элементов не превышает числа неэквивалентных НП, т.е., совпадает с ним (ср. §2.4).

2.10 > j m] bf_ l h ^ \u q b k e _ gobZyj Z d l _ j l

При наличии инвариантной подгруппы N имеет место гомоморфизм $G \to G/N$, в силу которого представления фактор-группы одновременно являются представлениями исходной группы.

Составление характеров для группы по характерам НП произвольных ее подгрупп (***теорема Фробениуса***): $H \subset G$, $\varphi^{(\nu)}$ – характеры НП H, тогда

$$\chi_j = \frac{g}{m_j h} \sum_\tau m_{j\tau} \varphi_{j\tau}^{(\nu)} \tag{2.11}$$

– характер (вообще говоря, приводимого) представления G. Здесь j_τ – индексы классов H, элементы которых в группе G входят в один класс K_j. ($\chi_k = 0$, если элементы класса K_k не содержатся в подгруппе H.) Доказательство: каждое НП $G \to \Gamma_\alpha$ является представлением (приводимым) H, поэтому $\chi_i^{(\alpha)} = \sum a_{\alpha\nu} \varphi_{i1}^{(\nu)} = \sum a_{\alpha\nu} \varphi_{i2}^{(\nu)} = \ldots$ для классов $K_i \subset G$, содержащих элементы H. В силу (2.10)

$$\sum_\alpha \chi_j^{(\alpha)*} \chi_i^{(\alpha)} = \sum_{\alpha\nu} a_{\alpha\nu} \chi_j^{(\alpha)*} \varphi_{i\tau}^{(\nu)} = \frac{g}{m_i} \delta_{ij},$$

и, умножая на $\varphi_{i\tau}^{(\mu)*} m_{i\tau}$ и суммируя по $i\tau$, получаем (2.11), где $\chi_j = \sum_\alpha a_{\alpha\nu}\, \chi_j^{(\alpha)}$ ($a_{\alpha\nu}$ – целые числа).

Если H – инвариантная подгруппа группы G, $h \to d(h)$ – некоторое ее представление (γ), то $h \to d_g(h) = d(ghg^{-1})$, $g \in G$ также является представлением (задача 2), которое называется ***сопряженным*** к γ относительно G. Если исходное представление неприводимо, то неприводимы и сопряженные к нему представления. Совокупность неэквивалентных друг другу сопряженных НП называют ***орбитой** H **относительно группы*** G. Имеет место следующая теорема:

Пусть Γ – НП G. При ограничении подгруппой H Γ разлагается по НП подгруппы H γ_α, принадлежащим одной и той же орбите, причем каждое γ_α встречается в разложении одинаковое число раз (m, ***кратность орбиты***).

Можно построить все НП группы G, исходя из НП ее нормального делителя H. Мы рассмотрим такие построения на примере пространственных групп и группы Пуанкаре, обладающих абелевыми инвариантными подгруппами трансляций.

2.11 NZdlbq_kdh_ jZaeh`_gb_ ijb\h^bfh]h ij_^klZ\e_g

Фактическое разложение (вполне) приводимого представления $\Gamma = \{D(g)\} = \sum_\alpha N_\alpha \Gamma_\alpha$ по неприводимым – нахождение «канонического» базиса $\{e_i^{(\alpha t)}\}$ в пространстве L, где это представление осуществляется; индекс $t = 1,\ldots,N_\alpha$ различает одинаковые НП, i – индекс «строчки» НП, $i = 1, 2,\ldots,n_\alpha$;

$$\hat{D}(g)e_j^{(\alpha t)} = \sum_i D_{ij}^{(\alpha)}(g)e_i^{(\alpha t)}, \tag{2.12}$$

$D^{(\alpha)}(g)$ – матрица НП Γ_α , вид которой можно наперед фиксировать.

Неоднозначность канонического базиса: пусть U – любой невырожденный оператор, коммутирующий со всеми $D(g)$; тогда $e'^{(\alpha t)}_i = Ue_i^{(\alpha t)}$ – тоже канонический базис. Вид матрицы U в каноническом базисе определяется леммой Шура: U – прямая сумма N_α-строчных блоков

$$\begin{pmatrix} b_{11}\hat{E} & \ldots & b_{1N_\alpha}\hat{E} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ b_{N_\alpha 1}\hat{E} & \ldots & b_{N_\alpha N_\alpha}\hat{E} \end{pmatrix}, \tag{2.13}$$

где b_{ij} – произвольные числа. Как видно, в общем случае переход от одного канонического базиса к другому осуществляется невырожденными преобразованиями

$$e'^{(\alpha t)}_k = \sum_{t'=1}^{N_\alpha} b_{t't}e_k^{(\alpha t')} \tag{2.14}$$

одновременно для всех $k = 1, 2,\ldots,n_\alpha$.

При известном $e_1^{(\alpha t)}$ остальные $e_i^{(\alpha t)}$ устанавливаются однозначно при помощи операторов «поворота»:

$$e_i^{(\alpha t)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{i1}^{(\alpha)*}(g) \hat{D}(g) e_1^{(\alpha t)}. \tag{2.15}$$

В качестве $e_1^{(\alpha 1)}, e_1^{(\alpha 2)}, \ldots, e_1^{(\alpha N_\alpha)}$ согласно (2.14) можно взять любые N_α независимых векторов, полученных «проектированием» произвольных $x \in L$:

$$e_1'^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{11}^{(\alpha)*}(g) \hat{D}(g) x = \sum_t x(\alpha t, 1) e_1^{(\alpha t)}. \tag{2.16}$$

При необходимости эти векторы можно ортогонализовать и нормировать.

Операторы проектирования $P_i^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{ii}^{(\alpha)*}(g) \hat{D}(g)$, порождают инвариантные относительно $\{U\}$ подпространства $L_i^{(\alpha)} \subset L$, где $L_i^{(\alpha)}$ – линейная оболочка $\{e_i^{(\alpha 1)}, e_i^{(\alpha 2)}, \ldots, e_i^{(\alpha N_\alpha)}\}$:

$$\begin{gathered} x \in L, \quad x = \sum_{\alpha i t} x(\alpha t, i) e_i^{(\alpha t)} = \sum_{\alpha i} x_i^{(\alpha)} = \sum_\alpha x^{(\alpha)}, \\ x_i^{(\alpha)} = P_i^{(\alpha)} x; \quad x^{(\alpha)} = \sum_i x_i^{(\alpha)} = \sum_i P_i^{(\alpha)} x = P^{(\alpha)} x, \end{gathered} \tag{2.17}$$

$$P^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g \chi^{(\alpha)*}(g) \hat{D}(g). \tag{2.18}$$

$P^{(\alpha)}$ – ***оператор проектирования*** на подпространство $L^{(\alpha)} = L_1^{(\alpha)} + \ldots + L_{n_\alpha}^{(\alpha)}$, инвариантное как относительно операторов $\{U\}$, так и относительно $\{D(g)\}$.

Отметим, что операторы $P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{ij}^{(\alpha)*}(g) \hat{D}(g)$ обладают свойством $P_{ij}^{(\alpha)} P_{kl}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} P_{il}^{(\alpha)}$.

2.12 W e _ f _ g]ljum i i h \ hZce] _ [j u

Матричная алгебра [Г] – линейная оболочка матриц $D(g)$, осуществляющих представление $G \to \Gamma$ группы G. Для конечной группы $[\Gamma] = \{\alpha^1 D(g_1) + \ldots + \alpha^g D(g_g)\}$, где α^i – всевозможные числа. Множество [Г] замкнуто относительно трех определенных на нем операций (сложение, умножение, умножение на число) и потому является ***алгеброй*** – частью полной матричной алгебры $\{M_n\}$ соответствующего порядка. Матричная алгебра [Г] приводима или неприводима вместе с порождающим ее представлением Г.

Всевозможные матричные алгебры [Г] в случае конечных групп удобно считать матричными представлениями (отображениями, сохраняющими основные операции) ***абстрактной групповой алгебры*** [G] (группового кольца):

$$[G] = \{x = \sum_{a \in G} \xi(a)a\}; \quad [G] \to [\Gamma], \quad x \to \sum \xi(a)D(a).$$

Как видно, любая функция на группе может рассматриваться как элемент групповой алгебры. Правило умножения элементов алгебры:

$$\sum \zeta(c)c = z = xy = \sum_{ab} \xi(a)\eta(b)ab = \sum_{a} \xi(a) \sum_{c} \eta(a^{-1}c)c,$$
$$\zeta(c) = \sum_{a} \xi(a)\eta(a^{-1}c) = \sum_{b} \xi(cb^{-1})\eta(b). \tag{2.19}$$

Регулярное представление групповой алгебры: $x \to G_x$ на [G], $G_x y = xy$. Двоякая роль алгебры [G] в регулярном представлении – 1) совокупность преобразований, 2) линейное пространство – поле действия этих преобразований.

Коммутаторная алгебра {A} некоторого множества матриц {L}: $A \in$ {A}, если $AL = LA$ для всех $L \in$ {L}. Коммутаторной алгеброй НП Γ (и алгебры [Γ]) согласно лемме Шура является множество λE, где λ – любое число.

Полная приводимость регулярного представления G означает разложимость алгебры [G] на подпространства B, инвариантные относительно умножения на элементы алгебры ($b \in$ B, если для любого $x \in$ [G] $xb \in$ B, B – «***левый идеал***» алгебры [G]). Процесс расщепления обрывается на «***минимальных***» ***идеалах***, соответствующих НП [G]:

$$[G] = B_1 \oplus \ldots \oplus B_f. \tag{2.20}$$

Согласно (2.20) любой элемент алгебры $x = x_1 + \ldots + x_f$, $x_i \in B_i$, в том числе

$$e = e_1 + \ldots + e_f. \tag{2.21}$$

Производящие идемпотенты: $xe_i = x_i$, $e_i e_j = e_i \delta_{ij}$, $be_i = b$ ($b \in$ B); $e_1, \ldots, e_f$ – ***взаимно нормальные примитивные идемпотенты*** (не допускают дальнейшего разложения).

Центр алгебры Z: $z \in$ Z, если $zx = xz$ для любого $x \in$ [G]. Центр, как функция классов сопряженных элементов:

$$g \in G, \quad z = \sum \zeta(a)a = gzg^{-1} = \sum \zeta(a)gag^{-1} = \sum \zeta(g^{-1}ag)a, \quad \zeta(a) = \zeta(gag^{-1}) = \zeta(i),$$

откуда

$$z = \sum_{i} \zeta(i)K_i, \quad K_i = a_{i1} + a_{i2} + .. + a_{im_i}, \tag{2.22}$$

$\{K_i\}$ – базис центра. В частности, $K_i K_j = \sum_k c(ijk)K_k$ (см. формулу (2.8)).

Взаимосвязь групповой алгебры и коммутаторной алгебры $\{U\}$ произвольного представления Γ: прообраз $P_i^{(\alpha)} \in$ [Γ] в [G], $\hat{D}_{ii}^{(\alpha)}(.) = \frac{n_\alpha}{g} \sum D_{ii}^{(\alpha)*}(g)g$, является производящим идемпотентом типа введенных равенством (2.21), он порождает минимальный идеал $\{\widehat{D}_{ij}^{(\alpha)}(.)\}$ (задача 29).

AZ^ZqjbZ a^_2em

1. Пусть $\{a^n\}$ – бесконечная циклическая группа. Показать, что отображение $a^n \to \begin{pmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ является представлением. Является ли это представление вполне приводимым?
2. Пусть H – инвариантная подгруппа G, $h \to d(h)$ – некоторое ее представление. Убедиться, что отображение $h \to d_g(h) = d(ghg^{-1})$, $g \in G$ также является представлением H. Доказать, что совокупность элементов g, для которых $d_g \propto d$, образует подгруппу.
3. Найти все НП циклической группы порядка n.
4. Пусть $g \to D(g)$ – приводимое представление, действующее в пространстве L, а $L_1 \subset L$ – инвариантное подпространство, преобразующееся по НП Γ_1. Доказать, что если некоторый оператор B коммутирует со всеми операторами $D(g)$, то подпространство, состоящее из векторов Bx_1, $x_1 \in L_1$, инвариантно и преобразуется по Γ_1.
5. Пусть унитарные НП $D_1(g)$ и $D_2(g)$ эквивалентны: $D_1(g) = AD_2(g)A^{-1}$. Доказать, что оператор $A/(\det A)^{1/n}$ – унитарный. n – размерность НП.
6. Доказать, что произведение НП на одномерное представление неприводимо.
7. Пусть Γ_1, Γ_2, Γ_3 – НП группы G. Доказать, что кратности, с которыми Γ_1^* содержится в $\Gamma_2 \times \Gamma_3$, Γ_2^* содержится в $\Gamma_1 \times \Gamma_3$ и Γ_3^* содержится в $\Gamma_1 \times \Gamma_2$, равны между собой.
8. Доказать, что произведение двух НП размерности n_1 и n_2, $n_1 > n_2$, не могут содержать представления размерности меньшей, чем n_1/n_2.
9. Доказать, что если каждый элемент группы сопряжен своему обратному, то каждое представление группы сопряжено самому себе.
10. Пусть $K_{i'}$ – класс сопряженных элементов, обратных элементам класса K_i. Показать, что для произвольных НП Γ_μ и Γ_ν имеют место равенства: $\sum_i m_i \chi_i^{(\mu)} \chi_{i'}^{(\nu)} = g\delta_{\mu\nu}$.
11. Показать, что для НП конечных групп имеют место соотношения (Фробениуса-Шура):

$$\frac{1}{g}\sum_{g}\chi(g^2)=\begin{cases}1, & \text{если } D(g) \text{ вещественное;}\\ -1, & \text{если } D(g) \text{ псевдовещественное;}\\ 0, & \text{если } D(g) \text{ и } D^*(g) \text{ неэквивалентны.}\end{cases}$$

12. Доказать, что прямым умножением НП конечной группы G на НП конечной группы G' можно получить все НП группы $G \times G'$.
13. Вычислить $\sum_{g} D_{ij}^{(\alpha)}(g)$.
14. Если $\chi_{\Gamma} = \chi_{\Gamma'}$, то представления Γ и Γ' эквивалентны. Доказать.
15. Вычислить $[\chi_{\Gamma}^{3}(g)]$ и $\{\chi_{\Gamma}^{3}(g)\}$.
16. Пусть $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$. Разложить на части Γ^2, $[\Gamma^2]$, $\{\Gamma^2\}$, $[\Gamma^3]$, $\{\Gamma^3\}$.
17. Показать, что неприводимая матричная алгебра $[\Gamma_\alpha]$ совпадает с полной алгеброй матриц порядка n_α.
18. Что представляет собой коммутаторная алгебра матричной алгебры $[\Gamma]$, если а) $\Gamma = \Gamma_\alpha + \Gamma_\beta$, б) $\Gamma = 2\Gamma_\alpha$ (Γ_α и Γ_β – неэквивалентные НП)? Описать коммутаторную алгебру в случае, если Γ_α – одномерное представление.
19. Составить регулярное представление алгебры $[\Gamma_\alpha]$ при $n_\alpha = 2$.
20. Какая связь существует между регулярным представлением группы и регулярным представлением групповой алгебры?
21. Пусть $[\alpha]$ – алгебра с единицей (например, $[\Gamma]$). Доказать, что единственными линейными преобразованиями на $[\alpha]$, коммутирующими со всеми преобразованиями $Ax = ax$, $a \in [\alpha]$, являются преобразования вида $B'x = xb$.
22. Написать матрицу преобразования B' из предыдущей задачи для алгебры $[\Gamma_\alpha]$ с $n_\alpha = 2$.
23. Рассмотрим следующее взаимно-однозначное отображение пространства $[G]$ на себя: $x = \sum\xi(a)a \leftrightarrow \hat{x} = \sum\xi(a^{-1})a$. Пусть $z = xy$. Показать, что $\hat{z} = \hat{y}\hat{x}$. Как выглядит рассматриваемое отображение для элементов группы G?
24. Пусть $B = \{b\}$ – левый идеал алгебры $[G]$. Проверить, что $\{\hat{b}\} = \hat{B}$ является правым идеалом.
25. Является ли центр группового кольца его идеалом?
26. Доказать, что $\sum_{\alpha ij} n_\alpha D_{ij}^{(\alpha)*}(g) D_{ij}^{(\alpha)}(r) = g\delta(g, r)$.
27. Написать составные характеры C_{3v}, исходя из характеров НП C_3.
28. Найти орбиты группы C_3 относительно группы C_{3v}.
29. Проверить идемпотентность элемента $\hat{D}_{ii}^{(\alpha)}(.) \in [G]$. Доказать, что он порождает левый идеал $\{\hat{D}_{ij}^{(\alpha)}(.)\}$.

3. =jmiiZjZs_gbc

3.1 H^ghhkgjµZs_gby

Группа C_∞ – непрерывная абелева однопараметрическая компактная группа. Пространство параметров – отрезок (кольцо) $(-\pi, \pi)$. Инвариантный интеграл по группе (f – однозначная функция на группе, т.е., периодическая функция от φ):

$$\int f(g)dg = \int f(\varphi)d\varphi = \int f(\varphi + \varphi_0)d\varphi.$$

Непрерывные однозначные представления: $\chi(\varphi)\chi(\varphi') = \chi(\varphi + \varphi')$. Дифференцируем по φ' и полагаем затем $\varphi' = 0$: $\chi'(\varphi) = \chi(\varphi)A$, $A = d\chi/d\varphi\,|_{\varphi = 0}$ – ***инфинитезимальный оператор*** представления (для НП – число). Для «унитарных» однозначных НП $A = im$, m – целое число. При m нецелых возникают т.н. ***многозначные представления*** (***двузначные*** при m полуцелых и т.д.).

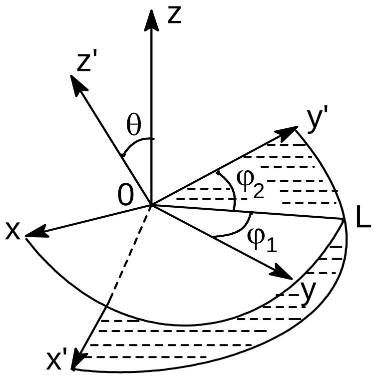
Группа $C_{\infty v}$ ($\propto D_\infty$) – смешанная непрерывная группа. Пространство группы – два отрезка $(-\pi, \pi)$. Один из них (обозначим индексом +) соответствует элементам подгруппы C_∞, а другой (–) элементам смежного класса $\sigma_v C_\infty$, где σ_v – любое из отражений. Классы сопряженных элементов: E, $C(\pm\varphi)$, σ. НП $C_{\infty v}$ одно- и двумерны: операция σ_v объединяет два НП C_∞, $\chi^{(m)}$ и $\chi^{(-m)} = \chi^{(m)*}$, $m \neq 0$, в одно НП, $D^{(m)}$ с характером 2, $2\cos(m\varphi)$, 0; одномерные НП – Σ^+ и Σ^- (1,1,–1). В отсутствии других НП можно убедиться непосредственным вычислением матрицы $D(\sigma_v)$ в базисе, в котором все $D(\varphi)$ диагональны. Операция усреднения по группе выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{g}\sum f(g) \to \frac{1}{4\pi}\sum_{k=\pm}\int_0^{2\pi} f(\varphi, k)d\varphi. \qquad (3.1)$$

3.2 =jmiiZjZs_gb\clj_of_jghljh kljZgkl\

Обозначения группы: $SO(3,R) \equiv R_3 \equiv O_3^+$. ***Пространство группы*** – сфера радиуса π, в которой концы любого диаметра считаются одной точкой. Каждая точка L отвечает вращению около оси OL на угол $|OL|$. Классу поворотов на угол φ отвечает поверхность сферы радиуса φ. Некоторые параметризации элементов R_3: а) (ξ_1, ξ_2, ξ_3) – декартовы координаты соответствующей точки пространства группы, б) $(\alpha, \theta, \varphi)$ – сферические координаты той же точки, в) $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$, $0 \le \varphi_1, \varphi_2 < 2\pi$, $0 \le \theta < \pi$ – ***углы Эйлера*** (см. рисунок ниже). При помощи углов Эйлера произвольное вращение сводится к последовательности трех поворотов около осей координат:

$$g(\varphi_1,\theta,\varphi_2)=g_{z'}(\varphi_2)\,g_{OL}(\theta)\,g_z(\varphi_1)=g_{OL}(\theta)\,g_z(\varphi_2)\,g_{OL}^{-1}(\theta)\,g_{OL}(\theta)\,g_z(\varphi_1)=$$
$$=g_z(\varphi_1)\,g_y(\theta)\,g_z^{-1}(\varphi_1)\,g_z(\varphi_2)\,g_z(\varphi_1)=g(0,\,0,\varphi_1)\,g(0,\theta,\,0)g(0,\,0,\varphi_2). \qquad (3.2)$$



Выражение матрицы поворота $g(\varphi_1,\theta,\varphi_2)$ через углы Эйлера:

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2\cos\theta-\sin\varphi_1\sin\varphi_2 & -\cos\varphi_1\sin\varphi_2\cos\theta-\sin\varphi_1\cos\varphi_2 & \cos\varphi_1\sin\theta \\ \sin\varphi_1\cos\varphi_2\cos\theta+\cos\varphi_1\sin\varphi_2 & -\sin\varphi_1\sin\varphi_2\cos\theta+\cos\varphi_1\cos\varphi_2 & \sin\varphi_1\sin\theta \\ -\cos\varphi_2\sin\theta & \sin\varphi_2\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \qquad (3.3)$$

Для определения инвариантного интеграла на группе необходимо найти ***инвариантную плотность*** $\rho(p_1,p_2,p_3)$ такую, что

$$\rho(p_1,p_2,p_3)\Delta p_1\Delta p_2\Delta p_3=\Delta g=\Delta(g_0 g)=\rho(p'_1,p'_2,p'_3)\Delta p'_1\Delta p'_2\Delta p'_3,$$

где $g(p_1^0,\,p_2^0,\,p_3^0)$ – произвольно выбранное вращение, $(p'_1,\,p'_2,\,p'_3)=$ $=(p_1^0,\,p_2^0,\,p_3^0)(p_1,\,p_2,\,p_3)$. Отсюда:

$$\rho(p_1,\,p_2,\,p_3)=\rho(p'_1,\,p'_2,\,p'_3)\left|\frac{\partial(p'_1,\,p'_2,\,p'_3)}{\partial(p_1,\,p_2,\,p_3)}\right|. \qquad (3.4)$$

Поскольку ρ определяется с точностью до умножения на произвольную постоянную, можно задаться произвольным $\rho(e)=\rho_0$. Тогда

$$\rho(p_1,\,p_2,\,p_3)=\rho_0\left|\frac{\partial(p'_1(\mathrm{p}^0,\mathrm{p}),\,p'_2(\mathrm{p}^0,\mathrm{p}),\,p'_3(\mathrm{p}^0,\mathrm{p}))}{\partial(p_1,\,p_2,\,p_3)}\right|_{(\mathrm{p}^0)=(\mathrm{p})^{-1}}. \qquad (3.5)$$

Несколько громоздкий непосредственный расчет через углы Эйлера приводит к результату (задача 4):

$$\left|\frac{\partial(\varphi'_1,\theta',\varphi'_2)}{\partial(\varphi_1,\theta,\varphi_2)}\right|=\frac{\sin\theta}{\sin\theta'},\quad \rho(\varphi_1,\theta,\varphi_2)=\sin\theta\,, \qquad (3.6)$$

так что

$$\int f(g)dg=\int f(g_0g)dg=\int f(gg_0)dg=\int f(\varphi_1,\theta,\varphi_2)\sin\theta\,d\varphi_1 d\theta\, d\varphi_2. \qquad (3.7)$$

Здесь мы воспользовались тем, что инвариантная плотность как лево-, так и правоинвариантна: $dg=d(g_0g)=d(gg_0)$. Это общее для компактных групп Ли утверждение для группы вращений можно проверить непосредственным расчетом. Инвариантная плотность в других параметрах:

$$dg = 2(1-\cos\alpha)\sin\theta\, d\alpha\, d\theta\, d\varphi\ , \qquad \int dg = 8\pi^2 . \tag{3.8}$$

3.3 G _ i j b \ h ^ b f u j _ ^ k l Z \ e _ g b y g j m i i u \ j Z s _ g b (

Рассмотрим некоторое непрерывное унитарное представление группы вращений:

$$\hat{D}(t\xi)\hat{D}(s\xi) = \hat{D}((t+s)\xi), \qquad \hat{D}(0) = \hat{E}\ .$$

Дифференцируя по s и полагая затем $s = 0$:

$$\frac{d}{dt}\hat{D}(t\xi) = (\hat{A}_1\xi_1 + \hat{A}_2\xi_2 + \hat{A}_3\xi_3)\hat{D}(t\xi), \quad \hat{A}_i = \frac{\partial\hat{D}(\xi)}{\partial\xi_i}\Big|_{\xi=0},$$

где $\hat{A}_i$ – ***инфинитезимальный оператор***, отвечающий параметру ξ_i. Таким образом, каждое непрерывное представление полностью определяется своими инфинитезимальными операторами:

$$\hat{D}(\xi_1,\xi_2,\xi_3) = \exp(\hat{A}_1\xi_1 + \hat{A}_2\xi_2 + \hat{A}_3\xi_3) = \exp(-i\hat{J}_1\xi_1 - i\hat{J}_2\xi_2 - i\hat{J}_3\xi_3),\ \hat{J}_i = i\hat{A}_i\ , \tag{3.9}$$

или через углы Эйлера, используя (3.2):

$$\hat{D}(\varphi_1,\theta,\varphi_2) = \exp(-i\hat{J}_3\varphi_1)\exp(-i\hat{J}_2\theta)\exp(-i\hat{J}_3\varphi_2). \tag{3.10}$$

Для унитарных представлений A_i – антиэрмитовы, J_i – эрмитовы. Соотношения коммутации инфинитезимальных операторов:

$$e^{A_2\varepsilon}e^{A_1}e^{-A_2\varepsilon} = e^{A_1\cos\varepsilon - A_3\sin\varepsilon}, \qquad e^{A_2\varepsilon}A_1e^{-A_2\varepsilon} = A_1\cos\varepsilon - A_3\sin\varepsilon\ . \tag{3.11}$$

Сравнивая члены первого порядка по ε , находим:

$$[J_1, J_2] = iJ_3,\ \ [J_2, J_3] = iJ_1,\ \ [J_3, J_1] = iJ_2. \tag{3.12}$$

Для НП тройка инфинитезимальных операторов также неприводима, т.е., не существует нетривиальных подпространств, инвариантных относительно всех трех операторов J_i.

Вычисление матриц инфинитезимальных операторов.

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2, \quad [J_+, J_3] = -J_+, \quad [J_-, J_3] = J_-, \quad [J_+, J_-] = 2J_3. \tag{3.13}$$

Выбираем ортонормированный базис, в котором диагонален J_3:

$$J_3 f_m = m f_m,\ \ J_- f_m = \alpha_m f_{m-1},\ \ J_+ f_{m-1} = \beta_m f_m'\ .$$

Пусть l – наибольшее собственное значение J_3, $J_+f_l = 0$, $\beta_{l+1} = 0$. Тогда цепочка векторов, полученных последовательным применением оператора понижения J_-, $f_l, f_{l-1}, f_{l-2}, \ldots$, инвариантна относительно тройки операторов J_i (доказывается по индукции). Отсюда вытекает $\alpha_m = \beta_m{}^*$ и, как результат действия оператора $[J_+, J_-] = 2J_3$ на эти векторы – цепочка равенств $|\alpha_m|^2 - |\alpha_{m+1}|^2 = 2m$, позволяющая последовательно вычислить коэффициенты α_m:

$$\alpha_m = (f_{m-1}, J_- f_m) = e^{i\varphi_m}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}. \tag{3.14}$$

Подходящим выбором фаз базисных векторов можно обратить все φ_m в нуль, после чего базис (***канонический базис***) оказывается определенным с точностью до общего фазового множителя. Из (3.14) вытекает, что $\alpha_{l+1} = 0$ и $\alpha_{-l} = 0$, т.е., цепочка векторов $f_l, f_{l-1}, \ldots$ обрывается на f_{-l}. Так как $-l = l-N$, N – целое, то ***вес НП*** l – либо целое, либо полуцелое число. Размерность представления $r = 2l + 1$. Эквивалентность НП одинакового веса следует из эквивалентности соответствующих инфинитезимальных операторов.

Тождественное представление $D^{(l=0)}(g) = 1$ является единственным одномерным представлением группы вращений. ***Векторное представление*** $D^{(1)}$ – автоморфизм группы. Канонический базис векторного представления:

$$f_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y),\quad f_0 = e_z\,,\quad f_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y).$$

Матрица НП для поворота около оси z: $D^{(l)}_{mm'}(00\varphi) = e^{-im\varphi}\delta_{mm'}$. ***Характеры НП группы вращений***:

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \sin(l + \tfrac{1}{2})\varphi \,/\, \sin\tfrac{1}{2}\varphi\,. \tag{3.15}$$

Неприводимые представления группы вращений целого порядка могут быть реализованы на сферических функциях: линейная оболочка сферических функций l-го порядка,

$$\begin{gathered}\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}\,,\quad Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Theta_{lm}(\theta),\quad \Theta_{l,-|m|} = (-1)^m\Theta_{l|m|}\,,\\ \Theta_{lm} = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta\frac{d^m P_l(\cos\theta)}{d(\cos\theta)^m},\quad P_l(x) = \frac{1}{2^l\, l!}\frac{d^l(x^2-1)^l}{dx^l}\,,\end{gathered} \tag{3.16}$$

инвариантна относительно вращений. Здесь $\hat{l}^2$ – угловая часть оператора Лапласа. Матрица поворота на угол ε в базисе Y_{lm}:

$$\hat{D}(00\varepsilon)Y_{lm} = Y_{lm}(\theta,\varphi-\varepsilon) = e^{-im\varepsilon}Y_{lm}\,,\quad D_{mm'}(00\varepsilon) = e^{-im\varepsilon}\delta_{mm'}\,.$$

Как видно, рассматриваемое представление есть НП веса l, т.е., любое НП целого веса фактически может быть реализовано на сферических функциях, которые при выбранных в (3.16) знаках и образуют канонический базис НП.

Здесь мы воспользовались следующим определением преобразования функций при изменении аргумента (ср. раздел 4):

$$\hat{D}(g)f(\mathbf{r}) = f(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}).$$

Рассмотрим поворот на бесконечно малый угол $\omega = |\boldsymbol{\omega}|$, где вектор $\boldsymbol{\omega}$ направлен вдоль оси поворота. Функция $f(\mathbf{r})$ претерпевает бесконечно малое изменение:

$$D(\boldsymbol{\omega})f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) - (\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot\nabla f(\mathbf{r}) = [1 - \boldsymbol{\omega}\cdot(\mathbf{r}\times\nabla)]\, f(\mathbf{r}).$$

Таким образом, инфинитезимальные операторы представления группы вращений на пространстве функций имеют вид:

$$\mathbf{J} = -i(\mathbf{r}\times\nabla), \qquad J_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \ldots$$

При j полуцелом $D^{(j)}(0,0,2\pi) = -E$; но поворот на угол 2π эквивалентен тождественному элементу, и, таким образом, нарушается требование однозначности отображения $g \to D^{(j)}(g)$. Можно несколько расширить понятие представлений и рассматривать указанные отображения при полуцелых j как ***двузначные представления***. Представление веса 1/2:

$$D^{(1/2)}(\varphi_1,\theta,\varphi_2) = \exp\left[-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\varphi_1\right]\exp\left[-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\theta\right]\exp\left[-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\varphi_2\right] =$$

$$= \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi_1+\varphi_2}{2}} & -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi_1-\varphi_2}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi_1-\varphi_2}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi_1+\varphi_2}{2}}\end{pmatrix}. \qquad (3.17)$$

Матрица $D^{(1/2)} \in SU(2)$, причем любая матрица группы $SU(2)$ может быть представлена в форме (3.17) и таким образом сопоставлена с некоторым вращением. Рассмотрим подробнее связь групп R_3 и $SU(2)$.

3.4 = h f h f h j n b â Ÿ m f _ j g h m g b l Z j g m h ^ m e y] j g m i i u g Z] j m i i m j Z s _ g b c

Произвольный элемент группы $SU(2)$ записывается в виде:

$$u(\alpha,\beta) = \begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta^* & \alpha^*\end{pmatrix}, \qquad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \qquad (3.18)$$

Произвольная эрмитова матрица с нулевым следом имеет вид:

$$h = \begin{pmatrix}z & x - iy\\ x + iy & -z\end{pmatrix} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z, \qquad \det h = -(x^2 + y^2 + z^2), \qquad (3.19)$$

x, y, z вещественны, σ_i – ***матрицы Паули***. Матрица $h' = uhu^+$ также эрмитова, обладает нулевым следом, $\det h' = -(x'^2 + y'^2 + z'^2) = \det h$, а матричные элементы x', y', z' линейно зависят от x, y, z, $\mathbf{r}' = R(u)\mathbf{r}$. Поскольку матрица $R(u)$ осуществляет преобразование вещественных векторов (x, y, z) с сохранением квадратичной формы, она является ортогональной матрицей. $\det R(u) = +1$, так как $\det R(u)$ является непрерывной функцией аргументов α, β, любое значение (α, β) может быть достигнуто непрерывным движением от единичного элемента, а $\det R(e) = 1$. $R(u_1u_2) = R(u_1)R(u_2)$. Множество $\{R(u)\}$ охватывает не часть, а всю группу вращений. Проще всего это установить, рассматривая матрицы $u_1(e^{i\varphi/2}, 0)$ и $u_2(\cos(\theta/2), -\sin(\theta/2))$. $R(u_1) = R(0,0,\varphi)$, $R(u_2) = R(0,\theta,0)$, а согласно (3.2) любой поворот может быть скомбинирован из вращений около осей z и y.

Связь между НП унитарной группы и группы вращений: 1) все НП R_3 являются НП $SU(2)$; 2) $D^2(-e) = E$, $D(-e) = \lambda E$ (лемма Шура), т.е., $D(-e) = \pm E$ («четные» и «нечетные» НП $SU(2)$). Четные НП $SU(2)$ оказываются собственными НП R_3, а нечетные – двузначными НП.

Если рассматривать элементы $SU(2)$ и R_3, соседние с единичным (***инфинитезимальные группы***), то между ними можно установить взаимно-однозначное соответствие (изоморфизм). Но свойства инфинитезимальных операторов представлений (эрмитовость, соотношения коммутации) вполне определяются свойствами группы вблизи единичного элемента. Это означает, что построения пункта 3.3 дают полный набор инфинитезимальных матриц НП $SU(2)$.

Установим связь между пространствами групп $SU(2)$ и R_3. Пусть $\alpha = a_1 + ia_2$, $-\beta = b_1 + ib_2$, тогда $a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$, т.е., пространство $SU(2)$ – поверхность четырехмерной сферы радиуса 1, причем диаметрально противоположные точки сферы соответствуют противоположным по знаку матрицам u, единичному элементу отвечает точка (1000). Пространство R_3 получится, если взять полусферу $a_1 > 0$ и отождествить диаметрально противоположные точки разреза. Классам сопряженных элементов $SU(2)$ отвечают в пространстве группы сечения гиперплоскостями $a_1 = \mathrm{const}$ (задача 6). Вместо зависимых параметров a_1, a_2, b_1, b_2 удобно ввести параметры α, θ, φ:

$$a_1 = \cos\frac{\alpha}{2},\quad a_2 = \sin\frac{\alpha}{2}\cos\theta,\quad b_1 = \sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\sin\varphi,\quad b_2 = \sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\cos\varphi \tag{3.20}$$

$$(0 \le \alpha < 2\pi,\ 0 \le \theta < \pi,\ 0 \le \varphi < 2\pi),$$

в которых легко узнать параметры группы вращений, только расширен предел изменения α. Инвариантная плотность в этих параметрах дается соотношением (3.8).

3.5 Ijhba_^_gb_ Gl\y jjmiiu\jZs_gbc (bebSU(2)) bbojZaeh`_gb_

Пусть $D^{(j)}$, $D^{(j')}$ – НП с каноническими базисами e_m, $f_{m'}$; естественный базис для произведения $D^{(j)}\times D^{(j')}$ – $\{e_m f_{m'}\}$. Выразим инфинитезимальные операторы J_k произведения $D^{(j)}\times D^{(j')}$ через инфинитезимальные операторы перемножаемых представлений, используя (3.9):

$$\exp\left(-i\sum_k J_k \xi_k\right) = \exp\left(-i\sum_k j_k \xi_k\right)\times \exp\left(-i\sum_k j'_k \xi_k\right) .$$

Разлагая в ряд по ξ_k и сравнивая члены первого порядка по ξ_k, получим $J_k = j_k \times e' + e \times j'_k$, или короче $J_k = j_k + j'_k$. Этот результат сразу обобщается на произведение большего числа (не обязательно даже неприводимых) представлений $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times \ldots \times D^{(j_n)}$ («***сложение моментов***»):

$$J_k = j_{1k} + j_{2k} + \ldots + j_{nk}. \tag{3.21}$$

Здесь j_{ik} – сокращенная запись оператора

$$e_1 \times \ldots \times e_{i-1} \times j_{ik} \times e_{i+1} \times \ldots$$

Для двух НП: $J_3 e_m f_{m'} = (m + m')\, e_m f_{m'}$. Рассмотрим линейную оболочку векторов

$$e_j f_{j'}, \quad J_- e_j f_{j'}, \quad J_-^2 e_j f_{j'}, \ldots$$

Согласно построению пункта 3, на этом подпространстве осуществляется НП $D^{(j+j')}$. В дополнительном подпространстве (ортогональном дополнении) максимальное собственное значение J_3 равно $j + j' - 1$, к нему относится только один собственный вектор, перпендикулярный $J_- e_j f_{j'}$, и последовательно действуя на этот вектор оператором J_-, можно выделить НП $D^{(j+j'-1)}$. Окончательно

$$D^{(j)} \times D^{(j')} = D^{(j+j')} + D^{(j+j'-1)} + \ldots + D^{(|j-j'|)}. \tag{3.22}$$

Простой подсчет убеждает, что число собственных векторов J_3, относящихся к собственным значениям $|j - j'|$, …, 0, одинаково, поэтому в (3.22) ряд обрывается на $D^{(|j-j'|)}$. Фактически мы описали процедуру получения канонического базиса для представления $D^{(j)} \times D^{(j')}$. Коэффициенты разложения векторов канонического базиса по естественному базису называются ***коэффициентами Клебша-Гордона***.

На тензорах в трехмерном пространстве осуществляются ***тензорные представления***: $D^{(1)} \times D^{(1)} \times \ldots \times D^{(1)}$. Их ***ранг*** равен числу «множителей». Более фундаментальную роль играют ***спинорные представления*** $D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} \times \ldots \times D^{(1/2)}$, охватывающие как одно-, так и двузначные представления группы вращений.

3.6 Kibghjы kibghjgыj__^klZ\e_g

Согласно определению, ***спинор r-го ранга*** – элемент r-кратного произведения двумерного унитарного пространства на себя, по существу, обычный тензор на двумерном комплексном пространстве. Особенность спинора обусловлена необходимостью связать его с реальным трехмерным пространством и вращениями. Поскольку единице R_3 отвечают две матрицы $\pm e \in SU(2)$, то спиноры нечетного ранга, как объекты физического пространства, оказываются определенными лишь с точностью до знака.

Из спиноров второго ранга можно составить одно инвариантное относительно $SU(2)$ подпространство $L_1 \sim e_+ e'_- - e_- e'_+$ $(D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} = D^{(0)} + D^{(1)})$, причем для спиноров вида $\xi\eta$, где ξ, η – спиноры первого ранга, этот инвариант (проекция на L_1) пропорционален ($\xi^{\pm} \equiv \xi^{\pm 1/2}$)

$$\xi^+\eta^- - \xi^-\eta^+ = \varepsilon_{ik}\xi^i\eta^k, \quad \varepsilon_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.23}$$

Ковариантные компоненты спинора ξ:

$$\xi_i = \varepsilon_{ik}\xi^k = -\varepsilon_{ki}\xi^k, \quad \xi^i = \varepsilon^{ik}\xi_k, \quad \varepsilon^{ik} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Введенный таким образом «метрический» тензор ε_{ik} позволяет свободно переходить от контравариантных к ковариантным и смешанным компонентам спинора любого ранга и производить операции свертки спиноров по любым парам индексов.

Симметричные спиноры: $\xi^{P(i_1 i_2 \ldots i_r)} = \xi^{i_1 i_2 \ldots i_r}$, P – любая перестановка индексов $i_1, i_2, \ldots, i_r$. Из определения вытекает, что любой симметричный спинор выражается через следующие $r+1$ спинор:

$$\psi_j = e_+^{(1)} e_+^{(2)} \ldots e_+^{(2j)}, \quad \psi_{j-1} = \frac{1}{\sqrt{2j}} \left(e_-^{(1)} \ldots e_-^{(2j)} + \ldots + e_-^{(1)} e_+^{(2)} \ldots e_+^{(2j)} \right), \ldots$$
$$\psi_m = \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j)!}} \left(e_+^{(1)} \ldots e_+^{(j+m)} e_-^{(j+m+1)} \ldots e_-^{(2j)} + \ldots \right) \ldots \tag{3.24}$$

Подпространство симметричных спиноров инвариантно относительно $SU(2)$. Базис (3.24) является каноническим базисом НП веса j:

$$J_3\psi_m = \left(\frac{j+m}{2} - \frac{j-m}{2} \right)\psi_m = m\psi_m,$$

$$J_-\psi_m = \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j)!}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m-1)!(j-m+1)!}} (j-m+1)\psi_{m-1} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\psi_{m-1}$$

(здесь фактор $j - m + 1$ представляет собой отношение числа слагаемых в выражении $J_-\psi_m$ к числу слагаемых ψ_{m-1}). Таким образом, все НП SU(2) (и R_3) фактически осуществляются симметричными спинорами.

3.7 F Z l j b p u g _ i j b \ h ^ b f u o _ ^ k l Z \ e _ g b c m i i u \ j Z s _ g b c

Предварительно отметим формальную аналогию между спинорами r-го ранга $\xi = \xi^{i_1 i_2 \ldots i_r} e_{i_1}^{(1)} e_{i_2}^{(2)} \ldots e_{i_r}^{(r)}$ и r-линейными формами над (e_+, e_-) (с коэффициентами $\xi^{i_1 i_2 \ldots i_r}$). Симметричным спинорам соответствуют симметричные формы или полиномы r-й степени (формально отбрасываются верхние индексы $e_i^{(k)}$):

$$\xi \leftrightarrow \sum_m \xi^{\overbrace{+ + \ldots +}^{j+m}\overbrace{- - \ldots -}^{j-m}} \frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!} (e_+)^{j+m} (e_-)^{j-m},$$

$$\psi_j \leftrightarrow e_+^{2j}, \ldots, \psi_m \leftrightarrow \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} e_+^{j+m} e_-^{j-m} \ldots$$

Поэтому для написания канонических матриц НП группы вращений достаточно выяснить, как преобразуются при вращениях друг через друга $2j + 1$ полиномов типа ψ_m:

$$D(\alpha, \beta)\psi_m = \sum_{m'} D_{m'm}(\alpha, \beta)\psi_{m'} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} (\alpha e_+ - \beta^* e_-)^{j+m} (\beta e_+ + \alpha^* e_-)^{j-m} =$$

$$= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} \sum_{\kappa\kappa'} \binom{j+m}{\kappa} \binom{j-m}{\kappa'} \alpha^{j+m-\kappa} (-\beta^*)^{\kappa} \alpha^{*\, j-m-\kappa'} \beta^{\kappa'} (e_+)^{j+m-\kappa+\kappa'} (e_-)^{j-m-\kappa'+\kappa}.$$

Можно считать, что κ, κ' пробегают по всем целым числам с учетом того, что факториалы отрицательных чисел обращаются в ∞. Далее вместо κ' вводится новый индекс суммирования $m' = m - \kappa + \kappa'$, и окончательно:

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta) = \tag{3.25}$$
$$= \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\kappa!(j+m-\kappa)!(m'-m+\kappa)!(j-m'-\kappa)!} \alpha^{j+m-\kappa} \alpha^{*\, j-m'-\kappa} \beta^{m'-m+\kappa} \beta^{*\,\kappa}.$$

Соотношение (3.25) выражает матрицы НП через ***параметры Кэли-Клейна*** α, β. Равенства (3.17) и (3.20) позволяют выразить их через углы Эйлера (φ_1, θ, φ_2) и параметры (α, θ, φ):

$$D_{m'm}^{(j)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa - m + m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\kappa!(j+m-\kappa)!(m'-m+\kappa)!(j-m'-\kappa)!} \times$$
$$\times \left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{2\kappa + m' - m} \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{2j + m - m' - 2\kappa} e^{-im'\varphi_1} e^{-im\varphi_2}. \tag{3.26}$$

Соотношения ортогональности для матричных элементов:

$$\int D^{(j_1)*}_{m'm}(g) D^{(j_2)}_{n'n}(g)\,dg = \frac{\int dg}{2j_1+1}\delta_{j_1 j_2}\delta_{m'n'}\delta_{mn}, \tag{3.27}$$

где интегрирование ведется по пространству параметров группы SU(2). Если подинтегральная функция четная, $f(\alpha, \beta) = f(-\alpha, -\beta)$, т.е., если $2j_1$, $2j_2$ оба четные или нечетные, интеграл разбивается на две равные половины, иными словами, он представляет собой просто удвоенный интеграл по пространству параметров группы R_3. Соотношения ортогональности для характеров удобнее всего записываются через параметры $(\alpha, \theta, \varphi)$, поскольку $\chi(g) = \chi(\alpha)$:

$$\int \chi^*_j(g)\chi_{j'}(g)\,dg = 8\pi\int_0^{2\pi} \chi^*_j(\alpha)\chi_{j'}(\alpha)(1-\cos\alpha)\,d\alpha = 16\pi^2\delta_{jj'}\ . \tag{3.28}$$

При совпадении четности $2j$ и $2j'$ интеграл можно брать в пределах $(0, \pi)$.

Матричные элементы (3.26) называются ***обобщенными сферическими функциями***. Обычные сферические функции легко получить из них следующим образом:

$$\hat{D}(\varphi_1, \theta, \varphi_2)Y_{jm}(\vartheta, \alpha) = Y_{jm}\left((\vartheta', \alpha') = g^{-1}(\vartheta, \alpha)\right) = \sum_{m'} D^{(j)}_{m'm}(\varphi_1, \theta, \varphi_2)Y_{jm'}(\vartheta, \alpha).$$

Полагая $\varphi_1 = \alpha$, $\theta = \vartheta$, находим $(\vartheta', \alpha') = (0, -\varphi_2)$ и, по определению сферических функций, $Y_{jm}(0, -\varphi_2) = \delta_{m0}\sqrt{(2j+1)/4\pi}$. Умножая обе части полученного равенства на $D^{(j)*}_{km}(\alpha, \vartheta, \varphi_2)$ и суммируя по m, находим:

$$Y_{jm}(\vartheta, \alpha) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}D^{(j)*}_{m0}(\alpha, \vartheta, \varphi_2). \tag{3.29}$$

3.8 D h w n n b p b _Dgd u [F Z h j ^ h g Z

Согласно определению п. 3.5:

$$e^{(j_3)}_{m_3} = \sum_{m_1 m_2} S^{(j_1 j_2)}_{m_1 m_2, j_3 m_3} e^{(j_1)}_{m_1} e^{(j_2)}_{m_2},$$

или

$$|j_1 j_2 j_3 m_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3\rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \quad m_1 + m_2 = m_3 \tag{3.30}$$

Последнее соотношение получается из

$$|j_1 j_2 j_3 j_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3\rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$j_3 - m_3$-кратным применением оператора j_-, а коэффициенты $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3\rangle$

находим с учетом равенства $j_+\left|j_1j_2j_3j_3\right\rangle=0$. Отсюда вытекает рекуррентное соотношение

$$0=\left\langle j_1m_1j_2m_2\middle|j_1j_2j_3j_3\right\rangle\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}+$$

$$+\left\langle j_1m_1+1j_2m_2-1\middle|j_1j_2j_3j_3\right\rangle\sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}$$

и

$$\left\langle j_1m_1j_2m_2\middle|j_1j_2j_3j_3\right\rangle=C(j_1j_2j_3)\delta_{m_1+m_2\,j_3}(-1)^{j_1-m_1}\sqrt{\frac{(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!}{(j_1-m_1)!(j_2-m_2)!}},$$

$$C(j_1j_2j_3)=\left\langle j_1j_1j_2j_3-j_1\middle|j_1j_2j_3j_3\right\rangle\sqrt{\frac{(j_1+j_2-j_3)!}{(2j_1)!(j_2+j_3-j_1)!}}.$$

Коэффициент C находим из условия нормированности вектора $\left|j_1j_2j_3j_3\right\rangle$. Возникающую при этом сумму легко вычислить, используя равенства

$$\binom{\alpha+\beta}{n}=\sum_m\binom{\alpha}{m}\binom{\beta}{n-m}=\sum_m(-1)^m\binom{m-1-\alpha}{m}\binom{\beta}{n-m},\qquad(3.31)$$

первое из которых получается путем сравнения коэффициентов при x^n в обеих частях равенства $(1+x)^\alpha(1+x)^\beta=(1+x)^{\alpha+\beta}$ (α и β не обязательно положительные целые числа), а второе – следующей заменой биномиальных коэффициентов:

$$\binom{\alpha}{n}=\frac{\alpha(\alpha-1)\ldots(\alpha-n+1)}{n!}=(-1)^n\frac{(n-1-\alpha)\ldots(1-\alpha)(-\alpha)}{n!}=(-1)^n\binom{n-1-\alpha}{n}.$$

Фаза коэффициента C (а с ним и всей системы канонических векторов $\left|j_3m_3\right\rangle$) произвольна, и мы положим

$$C(j_1j_2j_3)=\sqrt{\frac{(2j_3+1)!(j_1+j_2-j_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!(j_1-j_2+j_3)!(j_2+j_3-j_1)!}}.$$

Применяя, наконец, к вектору $\left|j_1j_2j_3j_3\right\rangle$ оператор

$$(J_-)^{j_3-m_3}=(j_{1-}+j_{2-})^{j_3-m_3}=\sum_k\binom{j_3-m_3}{k}j_{1-}^k\,j_{2-}^{j_3-m_3-k},$$

получим после некоторых преобразований

$$\left\langle j_1m_1j_2m_2\middle|j_1j_2j_3m_3\right\rangle=\qquad(3.32)$$

$$=\delta_{m_1+m_2,m_3}\sqrt{\frac{(2j_3+1)(j_1+j_2-j_3)!(j_1-m_1)!(j_2-m_2)!(j_3+m_3)!(j_3-m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!(j_1+j_3-j_2)!(j_2+j_3-j_1)!(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!}}\times$$

$$\times\sum_k(-1)^{j_1-m_1-k}\frac{(j_1+m_1+k)!(j_2+j_3-m_1-k)!}{k!(j_3-m_3-k)!(j_1-m_1-k)!(j_2-j_3+m_1+k)!}.$$

Вследствие ортогональности матрицы коэффициентов Клебша-Гордона имеют место следующие равенства:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \langle j_1 j_2 j_3 m_3 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle, \tag{3.33}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3' m_3' \rangle = \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'},$$
$$\sum_{j_3 m_3} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}. \tag{3.34}$$

3.9 3j- k b f \ h e b b ok \ h c k l \ Z

Комплексно-сопряженные НП эквивалентны друг другу: $\hat{D}^{(j)*}(g)\hat{C}^{(j)} = \hat{C}^{(j)}\hat{D}^{(j)}(g)$, или, для инфинитезимальных операторов, $\hat{J}_i^{(j)*}\hat{C}^{(j)} = -\hat{C}^{(j)}\hat{J}_i^{(j)}$. Применяя это соотношение сначала к повороту около оси z $(i = 3)$, находим $C_{mn}^{(j)} = c_m^j \delta_{m,-n}$. Вычисляя матричный элемент $(m, -m-1)$ в равенстве $J_- C = -CJ_+$, находим: $c_{m+1}^j = -c_m^j$. Выбирая $c_j^j = 1$, имеем

$$C_{mn}^{(j)} = (-1)^{j-m}\delta_{m,-n}; \quad D_{m'm}^{(j)*}(g) = (-1)^{m-m'} D_{-m'-m}^{(j)}(g). \tag{3.35}$$

Отметим, что $C_{mn}^{(1/2)} = \varepsilon_{mn}$ (см. (3.23)).При целых j матрица $C^{(j)}$ симметрична, при полуцелых антисимметрична, соответствующие представления, согласно п. 2.6, потенциально-вещественны и псевдовещественны.

В соотношении $D^{(j_1)}(g) \times D^{(j_2)}(g) = S^{-1}\left(\sum D^{(j_3')}(g)\right)S$ возьмем матричный элемент $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 |$, $| j_1 m_1' j_2 m_2' \rangle$, затем умножим обе части на $D_{m_3 m_3'}^{(j_3)*}(g)$ и проинтегрируем по группе:

$$\int D_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(g) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(g) D_{m_3 m_3'}^{(j_3)*}(g) dg = \frac{\int dg}{2j_3+1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | j_3 m_3' \rangle.$$

Пользуясь (3.35)и вводя 3j-символы

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 - m_3 \rangle, \tag{3.36}$$

получаем симметричное относительно j_1, j_2, j_3 соотношение

$$\int D_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(g) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(g) D_{m_3 m_3'}^{(j_3)}(g) dg = \int dg \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix}. \tag{3.37}$$

Полагая $m_i' = m_i$, находим отсюда, что перестановка любых двух столбцов 3j-символа может лишь изменить знак этого символа. Фактически имеют место следующие свойства симметрии 3j-символов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} =$$
$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \tag{3.38}$$

Доказательство осуществляется при помощи вытекающих из (3.37) равенств

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_1+j_3 & -j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ -j_1+j_3 & j_1 & -j_3 \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ j_1 & -j_3 & -j_1+j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_1-j_3 & j_3 \end{pmatrix}$$

простым подсчетом знаков правых $3j$-символов по формулам (3.32), (3.36). Более сложные свойства симметрии $3j$-символов получил Редже (задача 15). Из (3.34) вытекают соотношения ортонормировки. Некоторые частные значения $3j$-символов:

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}, \qquad \begin{pmatrix} j & k & j \\ -j & 0 & j \end{pmatrix} = \frac{(2j)!}{\sqrt{(2j-k)!(2j+k+1)!}}. \tag{3.39}$$

3.106j- b9j- k b f \ h e u

$6j$-символы возникают при рассмотрении произведения трех НП: $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j_3)}$. Поскольку $D^{(j)}$ может входить в это произведение несколько раз, канонический базис определяется неоднозначно. Если $D^{(j)} \in D^{(j_{12})} \times D^{(j_3)}$, где $D^{(j_{12})} \in D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$, то можно однозначно определить векторы

$$\left|(j_1 j_2) j_{12} j_3 jm\right\rangle = \sum_{m_i} \left\langle j_1 m_1 j_2 m_2 \middle| j_{12} m_{12} \right\rangle \left\langle j_{12} m_{12} j_3 m_3 \middle| jm \right\rangle \left| j_1 m_1 \right\rangle \left| j_2 m_2 \right\rangle \left| j_3 m_3 \right\rangle \tag{3.40}$$

Если $D^{(j)} \in D^{(j_1)} \times D^{(j_{23})}$, где $D^{(j_{23})} \in D^{(j_2)} \times D^{(j_3)}$, то аналогично

$$\left| j_1 (j_2 j_3) j_{23} jm \right\rangle = \sum_{m_i} \left\langle j_1 m_1 j_{23} m_{23} \middle| jm \right\rangle \left\langle j_2 m_2 j_3 m_3 \middle| j_{23} m_{23} \right\rangle \left| j_1 m_1 \right\rangle \left| j_2 m_2 \right\rangle \left| j_3 m_3 \right\rangle \tag{3.41}$$

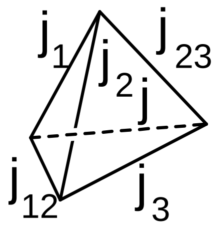
Векторы двух канонических базисов (3.40) и (3.41) связаны соотношением вида (2.14) при помощи унитарной матрицы $\hat{b}$ (здесь оба базиса ортонормированы, роль t, t' играют j_{12} и j_{23}). $6j$-символ определяется через матричные элементы этой матрицы:

$$\left\langle (j_1 j_2) j_{12} j_3 j \middle| j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \right\rangle =$$
$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3+j} \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}. \tag{3.42}$$

Составляя скалярное произведение векторов (3.40) и (3.41), суммируя по m и производя некоторые преобразования (перестановки столбцов в 3j-символах, изменение знаков m), получим выражение 6j-символа через 3j-символы:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} = \sum_{\text{все } m} (-1)^{\sum_i (j_i - m_i)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ -m_1 & m_2 & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_{23} \\ m_3 & -m_2 & m_{23} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} j_1 & j & j_{23} \\ m_1 & m & -m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ -m_3 & -m & -m_{12} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Для того чтобы 6j-символ отличался от нуля, согласно этой формуле должны выполняться соотношения треугольника для троек j, указанных в качестве верхних рядов 3j-символов. Из этой же формулы вытекают свойства симметрии 6j-символов: они не меняются при любой перестановке столбцов символа и перестановке верхних и нижних аргументов любых двух столбцов. Все эти свойства можно наглядно представить себе, изобразив 6j-символ в виде тетраэдра (см. рис.). Другое выражение 6j-символа через 3j-символы получается после подстановки в соотношение типа (2.14),



$$\left| j_1(j_2j_3)j_{23}jm \right\rangle = \sum_{j_{12}} \left\langle (j_1j_2)j_{12}j_3 j \right| j_1(j_2j_3)j_{23} j \rangle \left| (j_1j_2)j_{12}j_3 jm \right\rangle, \quad (3.44)$$

выражений (3.40), (3.41), сравнения коэффициентов при $\left| j_1m_1j_2m_2j_3m_3 \right\rangle$ в обеих частях равенства и ряда несложных преобразований:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \quad (3.45)$$

$$= \sum_{m_4m_5m_6} (-1)^{j_4+j_5+j_6-m_4-m_5-m_6} \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{pmatrix}.$$

Это выражение удобно использовать для получения явной формулы 6j-символа. Полагая $m_1 = j_1$, $m_2 = -j_2$ и подставляя выражения 3j-символов (3.36), находим:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \sum_z \frac{(-1)^z (z+1)!\,\Delta(j_1j_2j_3)\Delta(j_1j_5j_6)\Delta(j_4j_2j_6)\Delta(j_4j_5j_3)}{\left[\begin{array}{c} (z-j_1-j_2-j_3)!(z-j_1-j_5-j_6)!(z-j_4-j_2-j_6)!\times \\ \times(z-j_4-j_5-j_3)!(j_1+j_2+j_4+j_5-z)!\times \\ \times(j_2+j_3+j_5+j_6-z)!(j_3+j_1+j_4+j_6-z)! \end{array} \right]}. \quad (3.46)$$

где

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(b+c-a)!}{(a+b+c+1)!}}.$$

Вследствие ортогональности матрицы $\langle (j_1 j_2) j_{12} j_3 j | j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \rangle$ имеем

$$\sum_{j_{12}} (2j_{23}+1)(2j_{12}+1) \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j'_{23} \end{Bmatrix} = \delta(j_{23}, j'_{23}). \qquad (3.47)$$

Наконец, рассматривая последовательно три схемы связи трех моментов (трех НП), находим:

$$\sum_{j_{23}} (2j_{23}+1)(-1)^{j_{23}+j_{12}+j_{31}} \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j & j_{23} \\ j_2 & j_3 & j_{31} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j & j_{31} \\ j_3 & j_1 & j_{12} \end{Bmatrix}. \qquad (3.48)$$

9j-символы связаны с матрицами перехода между каноническими базисами $|(j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} jm\rangle$ и $|(j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} jm\rangle$ следующим соотношением:

$$\langle (j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} j | (j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} j \rangle =$$
$$= \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}. \qquad (3.49)$$

Выражение через 3j-символы получается точно так же, как и для 6j-символов:

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_{\text{все } m} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ m_{11} & m_{12} & m_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ m_{11} & m_{21} & m_{31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}. \qquad (3.50)$$

Свойства симметрии 9j-символа вытекают из этого равенства: при нечетной перестановке строк или столбцов 9j-символ умножается на $(-1)^J$, где J – сумма всех аргументов символа. При четной перестановке и транспонировании символ не меняется. Выражение через 6j-символы:

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} =$$
$$= \sum_x (-1)^{2x}(2x+1) \begin{Bmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ j_{32} & j_{33} & x \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ j_{21} & x & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ x & j_{11} & j_{12} \end{Bmatrix}. \qquad (3.51)$$

Оно легко получается, если последовательно перейти от базиса $|(j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} jm\rangle$ к базису $|(j_1 j_2) j'_{12} (j_3 j_4) j'_{34} jm\rangle$ при помощи равенства (3.44) и результат умножить на $|(j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} jm\rangle$. Отметим, что здесь, как и в ряде предыдущих преобразований, следует иметь в виду соотношение

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j_2 j_1 j m \rangle, \tag{3.52}$$

соответствующее перестановке столбцов $3j$-символа, так что, например,

$$|(j_2 j_3) j_{23} j_1 j\rangle = |j_1 (j_2 j_3) j_{23} j\rangle (-1)^{j_1+j_{23}-j}.$$

3.11 IhegZy hjlh]hgZevgZy]jmiiZ. Ilj_ob af_j_gbyo

Полная ортогональная группа: $O_3 = O_3^+ \times C_i = O_3^+ + I\,O_3^+$. Пространство группы – две сферы радиуса π. НП O_3 – $D^{(l+)}$ и $D^{(l-)}$ – четные и нечетные представления (l – целое!), $D^{(l+)}(gI) = D^{(l+)}(g) = D^{(l)}(g)$, $g \in O_3^+$. Можно ввести абстрактную группу $SU(2)\times i$, имеющую вдвое больше НП, чем $SU(2)$ – $D^{(j+)}$, $D^{(j-)}$. Группа $SU(2)\times i$ гомоморфна на $O_3^+\times C_i$ с ядром $(e, -e)$. Поэтому имеет место следующее соответствие представлений $SU(2)\times i$ и O_3 при полуцелых j:

$$gI \to D^{(j+)}(\pm gi) = \pm D^{(j)}(g), \qquad gI \to D^{(j-)}(\pm gi) = \mp D^{(j)}(g).$$

Иными словами, двузначные представления O_3 те же, что и у O_3^+.

3.12 >\magZqgu_ ^klZ\e_gby_ qg]jmii

Каждой подгруппе $G \subset O_3^+$ отвечает подгруппа $G' \subset SU(2)$, гомоморфная на G с ядром $(e, -e \equiv q)$ – ***двойная точечная группа*** для G. Часть ее НП совпадает с НП G, а остальные являются ***двузначными НП*** G. Для обозначения элементов G' воспользуемся малыми символами c_n. В качестве новых элементов фигурируют q («поворот на 2π») и $c_n q = q\,c_n$, причем $(c_n, c_n q) \to C_n$. Рассмотрим, например, элементы двойной группы октаэдра O': e, q, $c_2^{(z)} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$,

$c_2^{(z)} q$ ($= i\sigma_z$, ***матрица Паули***), $c_2^{(y)} = -i\sigma_y$, $c_2^{(x)} = -i\sigma_x$ и т.п. В общем, безразлично, которую из двух матриц $\pm c_n$ обозначить через c_n. Для определенности через c_n будем обозначать матрицу, имеющую в подходящем базисе в унитарном пространстве вид $\begin{pmatrix} \exp(-i\pi/n) & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/n) \end{pmatrix}$, так что $c_n^n = q$, $c_n^{-1} = c_n^{n-1} q$. Соотношение сопряженности $C_n = C_m C_n' C_m^{-1}$ перепишется в двойной группе с учетом указанного соглашения в виде $c_n = c_m c_n' c_m^{-1}$, так что каждый класс сопряженных поворотов (при $n \neq 2$) имеет прообразом в двойной группе два класса. Остается решить вопрос о сопряженности элементов c_2 и c_2^{-1} (в группе $SU(2)$ они не совпадают, но имеют одинаковый нулевой след). Условие сопряженности,

$c_2 = gc_2qg^{-1}$, будучи записано в системе координат, где $c_2 = -i\sigma_z$, приводит к следующему виду матрицы $g = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\gamma) \\ -\exp(i\gamma) & 0 \end{pmatrix}$. Такая матрица соответствует повороту на π около некоторой оси, перпендикулярной z. Таким образом, необходимым (и достаточным) условием сопряженности элементов c_2 и c_2^{-1} в G' является наличие оси второго порядка, перпендикулярной оси C_2. Окончательно разбиение группы O′ на классы сопряженных элементов выглядит так:

$$\mathrm{O}'\colon e,\ q,\ \{8\,c_3\},\ \{8\,c_3q\},\ \{3\,c_4^2,\ 3c_4^2q\},\ \{6\,c_4\},\ \{6\,c_4q\},\ \{6\,c_2,\ 6c_2q\}.$$

Элементы $c_4^{(z)}$ и $c_4^{(-z)}$ обратны друг к другу, т.е. $c_4^{(-z)} = c_4^{(z)3}q$, поэтому класс $\{6c_4\}$ можно написать и в виде $\{3\,c_4,\ 3c_4^3q\}$; аналогично $\{8\,c_3\} = \{4\,c_3,\ 4c_3^2q\}$ и т.п. НП G' можно найти регулярными способами, изложенными в разделе 2. O′ имеет 8 НП, 5 из них совпадают с обычными НП O, остальные 3 (два двумерных и одно четырехмерное) – нечетные (двузначные для O), в них q отображается на $-E$, соответственно $D(c_n q) = -D(c_n)$, $\chi(c_n q) = -\chi(c_n)$, откуда, в частности, сразу вытекает, что $\chi(c_2) = -\chi(c_2) = 0$. Одно из двумерных НП, Γ_6 – это автоморфизм O′, и характеры его находятся по формуле (3.15): $(2, -2,\ 1, -1,\ 0,\ \sqrt{2},\ -\sqrt{2},\ 0)$. Второе двумерное представление, $\Gamma_7 = \Gamma_6 \times \Gamma_2$, а характер четырехмерного представления Γ_8: $(4, -4, -1,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0)$ $\chi^{(8)}(c_4) = 0$, иначе мы могли бы получить неэквивалентное $\Gamma'_8 = \Gamma_8 \times \Gamma_2$; $\chi^{(8)}(c_3)$ находим из соотношений ортогональности.

Двойная группа для $G \times \mathrm{C_i}$ – $G' \times \mathrm{i}$; если группа G не содержит инверсии, но содержит другие зеркальные преобразования, $C_n I$, то $C_n I \to (c_n i,\ c_n q i)$. Заметим, что $\sigma^2 = (c_2 i)^2 = q$, $\sigma^{-1} = \sigma q = c_2^{-1} i$, и условием сопряженности элементов σ и σ^{-1} служит опять наличие оси второго порядка, лежащего в плоскости отражения. Пример – двойная группа $\mathrm{T'_d}$: e, q, $\{8c_3\}$, $\{8\,c_3q\}$, $\{3\,c_2,\ 3c_2q\}$, $\{6\,s_4\}$, $\{6\,s_4q\}$, $\{6\sigma,\ 6\sigma q\}$. НП $\mathrm{T'_d}$ те же, что и у O′.

3.13 = j m i i uE bb Z e] _ [jEi b

Связь между группами Ли преобразований и их инфинитезимальными операторами (образующими алгебры Ли), рассмотренная в этой главе на примере группы вращений, универсальна. Каждой группе Ли соответствует своя алгебра Ли, обозначаемая так же, как и группа, но малыми буквами ($\mathrm{SU}(n) \to \mathrm{su}(n)$). Приведем здесь лишь некоторые определения, теоремы, примеры, относящиеся к этому предмету.

Алгебра Ли – векторное пространство L, на котором для любой пары элементов задано ***умножение Ли*** $[X, Y]$, удовлетворяющее аксиомам

(1) линейности: $[\alpha X + \beta Y, Z] = \alpha[X, Z] + \beta[Y, Z]$ (α, β – вещественные или комплексные числа),

(2) антисимметричности: $[X, Y] = -[Y, X]$,

(3) $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$ (***тождество Якоби***).

Пусть $\{e_i\}$ – базис L, $[e_j, e_k] = c^i_{jk} e_i$. Числа c^i_{jk} называются ***структурными константами*** алгебры Ли. Примеры алгебр Ли:

Полная комплексная линейная алгебра Ли $\mathrm{gl}(n, C)$ – множество всех комплексных $n \times n$ матриц с коммутаторами в качестве умножения Ли, $[X, Y] = XY - YX$. Подмножество матриц с нулевым следом образует подалгебру $\mathrm{sl}(n, C)$ (или A_{n-1}).

Пусть $\Phi(x, y)$ – невырожденная билинейная форма в m-мерном комплексном пространстве V_m. Множество линейных преобразований в V_m, удовлетворяющих условию

$$\Phi(Xx, y) + \Phi(x, Xy) = 0,$$

образуют алгебру Ли L. Если форма Φ симметрическая, то L называется ***ортогональной алгеброй Ли*** $\mathrm{o}(m, C)$ (B_n при $m = 2n + 1$, D_n при $m = 2n$). Если Φ – кососимметрическая форма и $m = 2n$, то L – ***симплектическая алгебра*** $\mathrm{sp}(n, C)$ (или C_n). A_n, B_n, C_n, D_n – классические комплексные алгебры Ли.

Комплексное расширение V_{C} вещественного векторного пространства V: множество всех элементов вида $z = x + iy$, $x, y \in V$. ***Овеществление комплексного пространства*** V_{C} с базисом $e_1, \ldots, e_n$: вещественное пространство с базисом $e_1, \ldots, e_n, ie_1, \ldots, ie_n$; $z = z^k e_k = (\mathrm{Re}\, z^k)\, e_k + (\mathrm{Im}\, z^k)\, (ie_k)$.

Представление алгебры L в линейном пространстве H – гомоморфизм $X \to D(X)$ на множество линейных операторов в H, так, что

$$\alpha X + \beta Y \to \alpha D(X) + \beta D(Y), \qquad [X, Y] \to D(X)D(Y) - D(Y)D(X).$$

Теорема Адо. Всякая алгебра Ли над полем комплексных чисел изоморфна некоторой матричной алгебре. Это значит, что всякую абстрактную алгебру Ли можно рассматривать как подалгебру полной линейной алгебры $\mathrm{gl}(n, C)$.

Подалгебра $N \subset L$ называется ***идеалом***, если множество произведений $[L, N]$ принадлежит N. Алгебра Ли L проста, если она не имеет нетривиальных идеалов (отличных от $\{0\}$ и L) и $[L, L] \neq 0$. Четыре последовательности A_n, $n \geq 1$; B_n, $n \geq 2$; C_n, $n \geq 3$; D_n, $n \geq 4$ и пять так называемых исключительных алгебр (G_2, F_4,

E_6, E_7, E_8) составляют все неизоморфные простые комплексные алгебры Ли.

С каждой простой комплексной алгеброй Ли связывается последовательность простых вещественных алгебр Ли. Укажем некоторые классические простые вещественные алгебры Ли:

- $\mathrm{su}(n)$ – алгебра всех косоэрмитовых матриц порядка n со следом 0.
- $\mathrm{so}(n)$ – алгебра Ли всех вещественных кососимметрических матриц порядка n.
- $\mathrm{so}(p,q)$ – алгебра Ли вещественных матриц порядка $p+q$ вида $\begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ X_2^{\mathrm{T}} & X_3 \end{pmatrix}$, где X_1, X_3 – кососимметрические матрицы порядка p и q соответственно, X_2 – произвольно.

Между алгебрами Ли существуют изоморфизмы (перечисление см. Барут и Рончка, 1980). В этой главе установлен изоморфизм $\mathrm{su}(2) \propto \mathrm{so}(3)$. Существует изоморфизм $\mathrm{sl}(2,C) \propto \mathrm{so}(3,1)$.

Группы преобразований G можно рассматривать как поверхности в N-мерном пространстве, при этом касательные пространства в единице группы отождествляются с алгебрами Ли $\mathfrak{g}$. Касательные пространства составляются из векторов, касательных к любым кривым $A(t) \in G$, проходящим через единицу $[A(0) = e]$, т.е., векторов $\dot{A}(t)\big|_{t=0}$, называемых еще векторами скорости. Рассмотрим ниже некоторые примеры.

Полная линейная группа $\mathrm{GL}(n, R)$ – область в n^2-мерном линейном пространстве $\mathrm{M}(n, R)$ вещественных матриц n-го порядка (область – открытое множество, вместе с любой точкой пространства включает все достаточно близкие к ней точки). Евклидова метрика в $\mathrm{M}(n, R)$ определяется так: если $A = (a_j^i)$, то

$$|A|^2 = \sum_{ij} |a_j^i|^2 = \mathrm{Sp}(A\tilde{A})$$

(комплексным аналогом является метрика $|A|^2 = \mathrm{Sp}(A^+A)$). Окрестность единицы определим как множество матриц A, для которых $|A - E| < 1$. Пусть X – любая матрица из $\mathrm{M}(n, R)$. Кривая $A(t) = E + tX$ при малых t принадлежит окрестности единицы и лежит в $\mathrm{GL}(n, R)$. При этом $A(0) = E$, $\dot{A}(0) = X$, т.е., касательное пространство совпадает с полной алгеброй $\mathrm{M}(n, R)$, являющейся алгеброй Ли $\mathrm{gl}(n, R)$ относительно коммутаторов матриц.

Группа $\mathrm{SL}(n, R)$ задается одним уравнением $\det A = 1$ и представляет собой гиперповерхность в $\mathrm{M}(n, R)$, целиком лежащую в области $\mathrm{GL}(n, R)$. В окрестности единицы

$$\frac{d}{dt}\det(E + tX)\Big|_{t=0} = \mathrm{Sp}X = 0,$$

и касательное пространство в единице совпадает с совокупностью всех матриц со следом 0. Размерность его равна n^2-1 и совпадает с размерностью гиперповерхности.

Группа $\mathrm{O}(n, R)$ задается системой $n(n+1)/2$ уравнений $\sum_k a_k^i a_k^j = \delta^{ij}$ (или $\tilde{A}A = E$). Касательные векторы в единице удовлетворяют условию $\frac{d}{dt}(\tilde{A}A)\big|_{t=0} = \tilde{X} + X = 0$, т.е., касательное пространство совпадает с пространством всех кососимметрических матриц, также являющихся алгеброй Ли по отношению к коммутированию.

Экспоненциальное отображение алгебр Ли на соответствующую группу Ли: если $X \in \mathrm{g}$ [$\mathrm{gl}(n, R)$, $\mathrm{o}(n)$, $\mathrm{u}(n)$ и т.п.], то $\exp X \in G$ [$\mathrm{GL}(n, R)$, $\mathrm{O}(n)$, $\mathrm{U}(n)$ и т.п.]. В некоторой окрестности начала координат g (единицы группы G) это отображение взаимно однозначно. В некоторых случаях [например, $\mathrm{GL}(n, C)$] экспоненциальное отображение покрывает всю группу. В целом же отображение $X \to \exp X$ может не быть взаимно-однозначным и даже не покрывать всю группу [например, $\mathrm{GL}(n, R)$].

A Z ^ Z q j b Z a ^ _ 3e m

1. Убедиться в том, что следующие пары функций преобразуются согласно НП группы $C_{\infty v}$: x, y; xz, yz; x^2-y^2, xy.
2. Найти НП группы $D_{\infty h}$.
3. Убедиться в том, что вращение с углами Эйлера $(\pi-\varphi_2, \theta, \pi-\varphi_1)$ обратно вращению $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$.
4. Рассчитать инвариантную плотность для R_3 через углы Эйлера.
5. Разложить произвольную функцию $f(x, y, z)$ по неприводимым функциям группы вращений.
6. Что представляет собой сечение пространства группы $\mathrm{SU}(2)$ трехмерной гиперплоскостью $b_2 = 0$; $a_1 = \mathrm{const}$? Рассмотреть последовательность сечений гиперплоскостями $a_1 = c$ при $0 \le c \le 1$, сравнить результат с пространством группы R_3.
7. Осуществить фактическое разложение представления $D^{(j)} \times D^{(1/2)}$.
8. Составить таблицы разложения тензорных и спинорных представлений различных рангов.

9. Показать, что ковариантные спиноры преобразуются согласно представлению $D^{(1/2)*}$.

10. Вычислить $D^{(l)}_{m0}(\alpha,\theta,\varphi)$ при $l = 0, 1, 2$ и проверить выполнение соотношения (3.29).

11. Вычислить коэффициенты Клебша-Гордона $(j\,m\,{}^1\!/\!_2\,m' \,|\, JM)$ по общей формуле (3.32). Сравнить с результатом решения задачи 7.

12. Найти матрицу перехода от канонического НП $D^{(j)}(g)$ к вещественному представлению при j целом.

13. Найти связь между параметрами (ξ_1, ξ_2, ξ_3) и (α, β).

14. Показать, что функция $\Psi_0 = \sum\limits_m \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \psi^{(j_1)}_{m_1}\psi^{(j_2)}_{m_2}\psi^{(j_3)}_{m_3}$ инвариантна относительно вращений.

15. Рассмотрим следующий однородный полином:

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix}^J = \sum_{\substack{\Sigma a=\Sigma b=\Sigma c=J \\ a_i+b_i+c_i=J}} K_J \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} u_1^{a_1}u_2^{a_2}u_3^{a_3}v_1^{b_1}v_2^{b_2}v_3^{b_3}w_1^{c_1}w_2^{c_2}w_3^{c_3}.$$

а) Установить свойства симметрии коэффициентов K_J при перестановке строк, столбцов и транспонировании. Выписать в явном виде аналитическое выражение этих коэффициентов.

б) Показать, что

$$K_J \begin{pmatrix} j_1-m_1 & j_2-m_2 & j_3-m_3 \\ j_1+m_1 & j_2+m_2 & j_3+m_3 \\ j_2+j_3-j_1 & j_1+j_2-j_3 & j_1+j_2-j_3 \end{pmatrix} \sqrt{(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!}\,\times$$

$$\times\sqrt{(j_3-m_3)!(j_3+m_3)!(j_2+j_3-j_1)!(j_3+j_1-j_2)!(j_1+j_2-j_3)!} = f(J)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}.$$

в) Введем обозначение

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} j_1-m_1 & j_2-m_2 & j_3-m_3 \\ j_1+m_1 & j_2+m_2 & j_3+m_3 \\ j_2+j_3-j_1 & j_1+j_2-j_3 & j_1+j_2-j_3 \end{bmatrix}.$$

Каковы свойства симметрии $3j$-символа в новом обозначении? Выписать в старом обозначении новые свойства симметрии $3j$-символа.

г) Пользуясь выражением для коэффициента K_J, написать новую разновидность аналитической формулы $3j$-символа.

16. Вычислить следующие $6j$-символы:

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 0 & c & b \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b+\frac{1}{2} \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b-\frac{1}{2} \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b-1 \end{Bmatrix},$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b+1 \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c & b \end{Bmatrix}.$$

17. Вывести формулу (3.47).

18. Вычислить $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & c \\ f & f & 0 \end{Bmatrix}$.

19. Доказать, что в гомоморфизме $G \to G^*$ 1) подгруппа $H \subset G$ отображается на подгруппу $H^* \subset G^*$, 2) множество всех элементов $H \subset G$, которые отображаются на подгруппу $H^* \subset G^*$, является подгруппой.

20. Найти двузначные представления групп C_∞, $C_{\infty v}$.

21. Найти характеры двузначных НП групп D_2, D_4, D_{2d}.

4. G_dhlhjbabq_kijbeh`_gbyhjbbjmii

4.1 <ebygkbff_ljbgZnbabq_kdoh_ckldZbklZee

Макроскопические свойства кристаллов определяются тензорами различных рангов в трехмерном пространстве: скалярами (плотность, температура и т.п.), векторами (неиндуцированная электрическая поляризация), тензорами второго ранга (диэлектрическая проницаемость, электропроводность, теплопроводность), третьего ранга (пьезоэлектрические модули), четвертого ранга (модули упругости) и т.д.

Если провести с кристаллом эксперимент, затем осуществить поворот (или зеркальный поворот) образца из точечной группы кристалла *K* (т.е., кристаллического класса, см. раздел 6) и повторить эксперимент, то результат эксперимента не изменится. Это можно сформулировать в виде ***принципа Неймана***: группа симметрии любого физического свойства кристалла включает точечную группу *K* этого кристалла.

Тензор *r*-го ранга $\tilde{\lambda}$ под действием элементов группы *K* преобразуется согласно приводимому представлению $\Gamma_v \times \Gamma_v \times \ldots \times \Gamma_v = \Gamma_v^r$, где Γ_v – трехмерное векторное представление группы, и пусть разложение на НП имеет вид:

$$\Gamma_v^r = N_1\Gamma_1 + N_2\Gamma_2 + \ldots \tag{4.1}$$

где Γ_1 – тождественное (инвариантное) представление. Инвариантность тензора относительно преобразования из группы *K* означает, что он лежит в N_1-мерном подпространстве, на котором осуществляется НП Γ_1. Иными словами, инвариантный тензор имеет N_1 линейно независимых компонент. Математический аппарат, развитый в предыдущих разделах, позволяет найти как число N_1, так и сами инвариантные тензоры путем проектирования с помощью операторов $P^{(1)} = \frac{1}{g}\sum_{g\in K}\hat{D}_{\Gamma_v^r}(g)$ (ср. (2.18)). Часто для установления связей между компонентами тензора явно используются условия инвариантности тензора:

$$\tilde{\lambda} = \hat{D}_{\Gamma_v^r}(g)\tilde{\lambda}, \quad g \in K, \tag{4.2}$$

которые расписываются по компонентам с использованием наиболее удобных систем координат.

Рассмотрим для примера кубический кристалл с $K = O$, $\Gamma_v = \Gamma_4$ (трехмерное НП группы октаэдра), $\Gamma_4^2 = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$, т.е., тензор второго ранга имеет лишь один кубический инвариант:

$$\tilde{\lambda}^{(1)} = \frac{1}{g}\sum[\hat{D}^{(4)}(g)\times\hat{D}^{(4)}(g)]\,\tilde{\lambda};\quad \lambda_{ik}^{(1)} = \frac{1}{g}\sum_{gi'k'} D_{ii'}^{(4)}(g)\,D_{kk'}^{(4)}(g)\,\lambda_{i'k'} = \frac{1}{3}\delta_{ik}\,\mathrm{Sp}\tilde{\lambda}.$$

Здесь мы воспользовались соотношением ортогональности матричных элементов НП (2.1).

Если тензор обладает той или иной симметрией относительно перестановок индексов, то для получения разложения (4.1)оказываются полезными формулы вида

$$[(\Gamma_a + \Gamma_b)^2] = [\Gamma_a^2] + [\Gamma_b^2] + \Gamma_a \times \Gamma_b, \tag{4.3}$$

вытекающие из соотношений (2.7). Так, тензор модулей упругости $\tilde{\lambda}$, определяемый соотношением $F = \frac{1}{2}\sum \lambda_{ijkm}u_{ij}u_{km}$ (F – свободная энергия, u_{ij} – тензор деформаций), симметричен по первой и второй парам индексов, а также относительно перестановок этих пар. Поэтому компоненты этого тензора преобразуются по представлению группы вращений

$$[[D^{(1)2}] \times [D^{(1)2}]] = [(D^{(2)} + D^{(0)})^2] = [D^{(2)2}] + D^{(2)} + D^{(0)} = D^{(4)} + 2D^{(2)} + 2D^{(0)}.$$

Здесь мы использовали также соотношение

$$[D^{(j)2}] = D^{(2j)} + D^{(2j-2)} + D^{(2j-4)} + \ldots,$$

которое можно получить, например, рассматривая симметрию соответствующих коэффициентов Клебша-Гордона. Таким образом, существует два независимых инвариантных относительно всех вращений (в том числе и несобственных) тензора. Базисные тензоры четвертого ранга:

$$e_i\, e_j\, e_k\, e_l \equiv e_{ij}\, e_{kl} \equiv e_{ijkl}.$$

Симметричные тензоры второго ранга, расщепленные как $D^{(2)} + D^{(0)}$:

$$e_{xx} + e_{yy} + e_{zz};\qquad (2e_{zz} - e_{xx} - e_{yy})/\sqrt{3},\quad e_{xx} - e_{yy},\quad e_{xy} + e_{yx},\quad e_{xz} + e_{zx},\quad e_{yz} + e_{zy}.$$

Изотропные тензоры λ:

1) $(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) =$

$$= e_{xxxx} + e_{yyyy} + e_{zzzz} + e_{xxyy} + e_{yyxx} + e_{zzxx} + e_{xxzz} + e_{yyzz} + e_{zzyy},$$

2) $1/3(2e_{zz} - e_{xx} - e_{yy})(2e_{zz} - e_{xx} - e_{yy}) +$

$$+ (e_{xx} - e_{yy})(e_{xx} - e_{yy}) + (e_{xy} + e_{yx})(e_{xy} + e_{yx}) + \ldots =$$

$$= 4/3(e_{xxxx} + e_{yyyy} + e_{zzzz}) - 2/3(e_{xxyy} + e_{yyxx} + e_{zzxx} + e_{xxzz} + e_{yyzz} + e_{zzyy}) +$$

$$+ (e_{xyxy} + e_{yxxy} + e_{xyyx} + e_{yxyx} + e_{xzxz} + e_{xzzx} + e_{zxxz} + e_{zxzx} + e_{yzyz} + e_{zyyz} + e_{yzzy} + e_{zyzy}).$$

С понижением симметрии число инвариантов (или независимых компонент тензора) возрастает. Например, для кубических систем появляется еще один инвариант, поскольку $D^{(4)}$ содержит единичное представление группы O_h. Инвариантный полином несложно найти проектированием:

$$P^{(1)}_{\text{куб}}\left(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4\right) = \sum_{g\in \mathrm{O_h}} D(g)P_{40} \sim x^4 + y^4 + z^4 - (3/5)r^4.$$

Проектируемый полином инвариантен относительно подгруппы $\mathrm{D_{4h}}$ с осью четвертого порядка вдоль z, и удобно при суммировании по группе расположить элементы в порядке, соответствующем разбиению на смежные классы по подгруппе:

$$\mathrm{O_h} = \mathrm{D_{4h}} + C_3\,\mathrm{D_{4h}} + C_3^2\,\mathrm{D_{4h}}.$$

Инвариантному полиному соответствует полностью симметричный тензор:

$$2(\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz}) - (\mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzyy}) -$$
$$- (\mathbf{e}_{xyxy} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xyyx} + \mathbf{e}_{yxyx} + \mathbf{e}_{xzxz} + \mathbf{e}_{xzzx} + \mathbf{e}_{zxxz} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyyz} + \mathbf{e}_{yzzy} + \mathbf{e}_{zyzy}),$$

ортогональный полученным выше изотропным тензорам. В качестве трех независимых кубически-инвариантных тензоров можно также выбрать следующие более простые:

$$\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz}, \qquad \mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{zzyy},$$

$$\mathbf{e}_{xyxy} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xyyx} + \mathbf{e}_{yxyx} + \mathbf{e}_{xzxz} + \mathbf{e}_{zxxz} + \mathbf{e}_{xzzx} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyyz} + \mathbf{e}_{yzzy} + \mathbf{e}_{zyzy},$$

однако в них не выделены изотропные части.

4.2 G h j f Z e v g d h _ [Z g k b y f _ l j b q g u o e _ d m

Рассмотрим малые колебания механических систем (молекул), состоящих из n частиц (атомов). Геометрия молекулы в каждый момент времени характеризуется вектором ρ в $3n$-мерном «пространстве смещений» – совокупностью смещений всех атомов из положений равновесия: $\rho = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n)$. Естественные координаты системы – совокупность декартовых компонент смещений $\mathbf{r}_i$, соответствующий базис $(X_1, Y_1, Z_1, \ldots)$, так что

$$\rho = \sum_{i=1}^{n}(x_iX_i + y_iY_i + z_iZ_i) \equiv \sum_{i\alpha} x_{i\alpha}X_{i\alpha}.$$

Здесь $\alpha = 1, 2, 3$ соответствуют x, y, z-координатам. При преобразованиях симметрии молекулы смещение ρ переходит в некоторое другое возможное смещение той же молекулы, $\rho' = D(g)\rho$. В (ортогональном) представлении Γ, $g \to D(g)$, выделяются инвариантные части, соответствующие поступательному и вращательному движению молекулы, так что $\Gamma = \Gamma_{\text{пост}} + \Gamma_{\text{вр}} + \Gamma_{\text{кол}}$.

Энергия системы

$$H = T + V = \frac{1}{2}\sum_{i\alpha,j\beta}(m_i\dot{x}_{i\alpha}^2 + k_{i\alpha,j\beta}x_{i\alpha}x_{j\beta}) = \frac{1}{2}(\dot{\rho}, \hat{T}\dot{\rho}) + \frac{1}{2}(\rho, \hat{V}\rho), \qquad (4.4)$$

где $\hat{T}$ и $\hat{V}$ – симметричные операторы, соответствующие положительноопределенным квадратичным формам T и V. Невырожденным линейным преобразованием

$$q_l = \sum_{i\alpha} c_{l,i\alpha} x_{i\alpha} \tag{4.5}$$

H приводится к диагональному виду

$$H = \frac{1}{2}\sum_l (\dot{q}_l^2 + \omega_l^2 q_l^2). \tag{4.6}$$

Здесь q_l – ***нормальные координаты***. Движение системы, при котором отлична от нуля только координата q_l, называется ***нормальным колебанием*** с собственной частотой ω_l. Если к частоте ω относятся r разных колебаний, она называется ***r-кратной частотой***, а соответствующие колебания ***вырожденными***.

Преобразование (4.5) в общем случае (если не все массы одинаковы) неортогонально, но преобразование от ***приведенных координат*** $x'_{i\alpha} = x_{i\alpha}\sqrt{m_i}$ к q_l ортогонально, ибо оно сохраняет квадратичную форму $\sum_{i\alpha} \dot{x}'^2_{i\alpha}$. Если задать скалярное произведение соотношением $(X'_{i\alpha}, X'_{j\beta}) = \delta_{i\alpha, j\beta}$, то $\hat{T} = 1$, а Q_l – собственный вектор оператора V, относящийся к собственному значению ω_l^2.

Три вектора, описывающие смещение молекулы как целой вдоль направлений x, y, z: $Q_\alpha(\text{пост}) \sim \sum_i X_{i\alpha}$. Ортогональность вектора смещения $\rho = \sum x_{i\alpha} X_{i\alpha}$ векторам Q_α означает, что при таком смещении центр тяжести молекулы остается на месте: $(\rho, Q_\alpha) \sim \sum_i m_i x_{ia} = 0$. Вектор смещения, соответствующий вращению молекулы около направления на (малый) угол $| \quad |$: $\mathrm{Q} \sim \sum_i [\quad \times \mathrm{R}_i]$, где радиус-вектор R_i определяет равновесное положение i-го атома относительно центра вращения, который целесообразно совместить с центром тяжести молекулы. Ортогональность $(\rho, \mathrm{Q}(\quad)) = \sum_i m_i (\mathrm{r}_i [\quad \times \mathrm{R}_i]) = \quad \sum_i m_i ([\mathrm{R}_i \times \mathrm{r}_i]) = 0$ означает, что при смещении ρ не возникает момент импульса молекулы.

Молекулу со смещением $\rho' = \hat{D}(g)\rho$ можно рассматривать как результат поворота g всей молекулы с исходным смещением ρ. Это действие эквивалентно изменению системы координат и не вызывает изменения энергии системы, так что $(\rho, V\rho) = (\rho', V\rho')$, и

$$D(g)VD(g^{-1}) = V. \tag{4.7}$$

Отсюда вытекает соотношение

$$V\hat{D}(g)O_k = \omega_k^2 \hat{D}(g)O_k, \tag{4.8}$$

т.е., нормальные координаты, связанные друг с другом преобразованиями симметрии, относятся к одной частоте. Можно сказать и так: преобразования $\hat{D}(g)$ связывают друг с другом лишь координаты, относящиеся к одной и той же частоте. Таким образом, пространство смещений молекулы расщепляется на инвариантные относительно $\hat{D}(g)$ подпространства, каждое из которых соответствует колебаниям с определенной частотой ω_i. Это означает разложение $\Gamma_{колеб}$:

$$\Gamma_{кол} = \Gamma_\alpha(\omega_1) + \Gamma_\beta(\omega_2) + \ldots \tag{4.9}$$

Индуцированные представления $\Gamma(\omega_i)$, как правило, неприводимы; приводимость $\Gamma(\omega_i)$ означала бы возможность дальнейшего расщепления, $\Gamma(\omega_i) = \Gamma'(\omega_i) + \Gamma''(\omega_i)$, и ее можно было бы трактовать как случайное вырождение колебаний из двух или более подпространств, не связанных преобразованиями $\hat{D}(g)$.

Соотношение (4.9) говорит о том, что каждую частоту нормальных колебаний и соответствующие этой частоте нормальные координаты можно классифицировать индексом НП группы симметрии молекулы. Проведя разложение (4.9), можно предсказать число различных (отвлекаясь от возможности случайного вырождения) частот, их тип (НП) и кратность вырождения (размерность НП). Фактическое разложение $\Gamma_{кол}$ позволяет указать форму колебаний типа Γ_α, если Γ_α входит в $\Gamma_{кол}$ только один раз. В противном случае процедура проектирования, используемая при таком разложении, позволяет получить лишь так называемые ***координаты симметрии*** – смеси однотипных колебаний.

Для установления числа различных частот системы (типов нормальных колебаний) вычислим характеры представлений Γ, $\Gamma_{кол}$. Если атом с i-го места под действием операции симметрии переходит на j-ое место, то $D(g)\rho_i = \rho_j$, где ρ_i – смещение системы, при котором из положения равновесия выведен только i-ый атом. Поэтому диагональные матричные элементы в естественном базисе отличны от нуля только для тех $X_{i\alpha}$, которые отвечают атомам, остающимся на месте. Отсюда для поворота на угол φ около некоторой оси и зеркального поворота получим, соответственно:

$$\chi_\Gamma(C(\varphi)) = N_C(1 + 2\cos\varphi), \qquad \chi_\Gamma(S(\varphi)) = N_S(-1 + 2\cos\varphi), \tag{4.10}$$

где N_C и N_S – число атомов, остающихся на местах при этих преобразованиях. Характер представления $\Gamma_{пост}$:

$$\chi_{пост}(C(\varphi)) = 1 + 2\cos\varphi, \qquad \chi_{пост}(S(\varphi)) = -1 + 2\cos\varphi. \tag{4.11}$$

Базис (ненормированный) этого представления: $Q_{t\alpha} = \sum_i X_{i\alpha}$. Базис представления $\Gamma_{\text{вр}}$ состоит из трех аксиальных векторов $Q_{r\alpha} = \sum_i [\ \ _\alpha \times \mathrm{R}_i]$, где $\ \ _\alpha$ – три независимых вектора поворота. Характер представления $\Gamma_{\text{вр}}$:

$$\chi_{\text{вр}}(C(\varphi)) = 1 + 2\cos\varphi, \quad \chi_{\text{вр}}(S(\varphi)) = 1 - 2\cos\varphi. \tag{4.12}$$

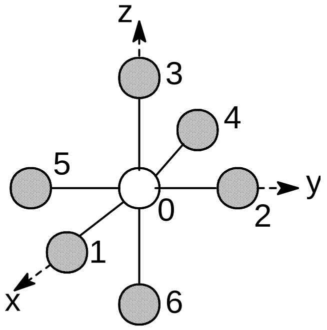
Отметим, что для линейных молекул представление $\Gamma_{\text{вр}}$ двумерно, и в характерах (4.12) следует опустить 1. Сравнивая (4.10) – (4.12), получаем характер колебательного представления:

$$\chi_{\text{кол}}(C(\varphi)) = (N_C - 2)(1 + 2\cos\varphi), \quad \chi_{\text{кол}}(S(\varphi)) = N_S(-1 + 2\cos\varphi). \tag{4.13}$$

В частности, $\chi_{\text{кол}}(I) = -3N_I$, $\chi_{\text{кол}}(\sigma) = N_\sigma$ (число атомов в плоскости отражения).

Отметим, что все представления и величины в этой задаче вещественны, поэтому встречающиеся при разложениях невещественные НП необходимо брать в паре с сопряженными НП, частоты колебаний для таких НП совпадают. При разложении полезно учесть, что молекула представляется в виде «слоев» эквивалентных атомов, сохраняющихся при преобразованиях симметрии, так что $\Gamma = \sum \Gamma_k$, где индекс k нумерует слои.

Пример – октаэдрическая молекула XY_6, $m_X = M$, $m_Y = m$, системы координат для всех атомов выберем идентичными (см. рис.). Группа симметрии системы $O_h = O \times C_i$ (характеры см. в приложении 2). Пространство смещений 21-мерно, характеры представлений $\Gamma_{\text{пост}}$, $\Gamma_{\text{вр}}$ и $\Gamma_{\text{кол}}$, вычисленные по формулам (4.10) – (4.12):



	E	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_2$	$6C_4$	I	$8S_6$	3σ	$6\sigma_d$	$6S_4$
$\chi_{\text{пост}}$	3	0	–1	–1	1	–3	0	1	1	–1
$\chi_{\text{вр}}$	3	0	–1	–1	1	3	0	–1	–1	1
$\chi_{\text{кол}}$	15	0	–1	1	1	–3	0	5	3	–1

Отсюда $\Gamma_{\text{пост}} = \Gamma_{4u}$, $\Gamma_{\text{вр}} = \Gamma_{4g}$, $\Gamma_{\text{кол}} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{5g} + 2\Gamma_{4u} + \Gamma_{5u}$ (здесь индекс g означает четное по отношению к инверсии неприводимое представление группы O_h, u – нечетное). Поступательному и вращательному движению в (4.6) соответствуют нулевые частоты. Кроме того, имеются шесть типов нормальных колебаний. Координаты симметрии (канонический базис), находим проектированием (2.16) или (2.18), причем полезно обратить внимание на следующее. Пусть ищется смещение, соответствующее четному НП $\Gamma_{\alpha g} = \Gamma_\alpha(O) \times \Gamma_1(C_i)$:

$$\rho^{(\alpha g)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_{g \in O_h} \chi^{(\alpha g)}(g)^* \hat{D}(g)\rho = \frac{n_\alpha}{g} \sum_{g \in O} \chi^{(\alpha)}(g)^* [\hat{D}(g) + \hat{D}(g)\hat{D}(I)]\rho =$$

$$= \frac{n_\alpha}{g} \sum_{g \in \mathrm{O}} \chi^{(\alpha)}(g)^* \hat{D}(g)\,[\rho + \hat{D}(I)\rho]. \qquad (4.14)$$

Таким образом, для нахождения четного (нечетного) относительно инверсии неприводимого смещения достаточно проектировать произвольное четное (нечетное) смещение оператором проектирования для подгруппы O.

Для НП, содержащихся в $\Gamma_{кол}$ по одному разу, координаты симметрии уже являются нормальными координатами. Поэтому в приводимом ниже наборе все координаты, за исключением тех, которые соответствуют Γ_{4u}, являются нормальными:

$$\Gamma_{1g}\colon\ Q_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(X'_1 - X'_4 + Y'_2 - Y'_5 + Z'_3 - Z'_6\right) = \frac{1}{\sqrt{6m}}\left(X_1 - X_4 + Y_2 - Y_5 + Z_3 - Z_6\right);$$

$$\Gamma_{3g}\colon\ Q_2 = \frac{1}{\sqrt{12m}}\left(2Z_3 - 2Z_6 - X_1 + X_4 - Y_2 + Y_5\right),\ Q_3 = \frac{1}{\sqrt{4m}}\left(X_1 - X_4 - Y_2 + Y_5\right);$$

$$\Gamma_{5g}\colon\ Q_4 = \frac{1}{\sqrt{4m}}(Z_2 - Z_5 + Y_3 - Y_6),\ Q_5 = \frac{1}{\sqrt{4m}}(X_3 - X_6 + Z_1 - Z_4),$$

$$Q_6 = \frac{1}{\sqrt{4m}}(Y_1 - Y_4 + X_2 - X_5);$$

$$\Gamma_{4u}\colon\ Q_7 = \frac{1}{\sqrt{12m}}(2X_1 + 2X_4 - X_2 - X_3 - X_5 - X_6),\ \ldots; \qquad (4.15)$$

$$\Gamma'_{4u}\colon Q_{10} = \frac{1}{\sqrt{6m(1 + 6m/M)}}[X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 - (6m/M)X_0],\ldots;$$

$$\Gamma_{5u}\colon\ Q_{13} = \frac{1}{\sqrt{4m}}(X_2 + X_5 - X_3 - X_6),\ Q_{14} = \frac{1}{\sqrt{4m}}(Y_3 + Y_6 - Y_1 - Y_4),$$

$$Q_{15} = \frac{1}{\sqrt{4m}}(Z_1 + Z_4 - Z_2 - Z_5);$$

$$\Gamma_{4u}(\text{пост})\colon\ Q_{16} = \frac{1}{\sqrt{6m + M}}(X_0 + X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6),\ldots;$$

$$\Gamma_{4g}(\text{вр})\colon\ Q_{19} = \frac{1}{\sqrt{4m}}\left(Z_2 - Z_5 - Y_3 + Y_6\right),\ Q_{20} = \frac{1}{\sqrt{4m}}\left(X_3 - X_6 - Z_1 + Z_4\right),$$

$$Q_{21} = \frac{1}{\sqrt{4m}}\left(Y_1 - Y_4 - X_2 + X_5\right).$$

Недостающие координаты представлений Γ_{4u} получаются из Q_7, Q_{10}, Q_{16} заменой в них X на Y и Z. При операциях $g \in \mathrm{O}$ координаты симметрии $Q_\alpha(\Gamma_3)$ преобразуются как $3z^2 - r^2$, $\sqrt{3}\,(x^2 - y^2)$, $Q_\alpha(\Gamma_4)$ как x, y, z и $Q_\alpha(\Gamma_5)$ как yz, xz, xy. Разбиение на слои выглядит здесь как $\Gamma = \Gamma_X + \Gamma_Y$. Из $\Gamma_X \propto \Gamma_{4u}$ и поступательного смещения слоя Y_6 скомбинированы координаты представлений Γ_{4u}(пост) и Γ'_{4u} в (4.15).

Матрица упругих постоянных V на базисных векторах Q_α диагональна за исключением блока, соответствующего представлениям Γ_{4u}. Этот блок, согласно (2.13)и свойству симметричности, имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_1\hat{E} & \lambda_2\hat{E} \\ \lambda_2\hat{E} & \lambda_3\hat{E} \end{pmatrix},$$

где E – единичная матрица третьего порядка, $\lambda_1 = (Q_7, VQ_7) = \ldots$, $\lambda_2 = (Q_7, VQ_{10}) = \ldots$ Частоты нормальных колебаний $\omega^2_{1,2}(\Gamma_{4u})$ находятся диагонализацией матрицы $\begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}$, и эта же процедура обеспечивает коэффициенты μ, ν, выражающие истинные нормальные координаты через координаты симметрии: $Q_7' = \mu Q_7 + \nu Q_{10}$. Частоты остальных нормальных колебаний задаются непосредственно элементами матрицы V. Например, $\omega^2(\Gamma_{1g}) = (Q_1, VQ_1)$, и, подставляя сюда выражение Q_1 через $X_{i\alpha}$ из (4.15), находим связь $\omega^2(\Gamma_{1g})$ с упругими постоянными $k_{i\alpha,j\beta} = (X_{i\alpha}, VX_{j\beta})$.

Инвариантность матрицы V и ортогональность матриц $D(g)$ приводят к соотношениям между различными матричными элементами: $k_{i\alpha,j\beta} = (D(g)X_{i\alpha}, VD(g)X_{j\beta})$. Отметим аналогию с предыдущим параграфом: тензор второго ранга $k_{i\alpha,j\beta}$ на $3n$-мерном пространстве смещений преобразуется по представлению $[\Gamma^2] = N_1\Gamma_1 + \ldots$ группы симметрии, содержит N_1 инвариантов группы, или независимых компонент тензора. Например, октаэдрическая молекула XY_6 имеет 11 несвязанных преобразованиями симметрии компонент:

$$k_1 = k_{0x\,0x} = k_{0y\,0y} = k_{0z\,0z},$$
$$k_2 = k_{0x\,1x} = k_{0y\,2y} = k_{0z\,3z} = k_{0x\,4x} = k_{0y\,5y} = k_{0z\,6z},$$
$$k_3 = k_{0x\,2x} = k_{0x\,5x} = k_{0x\,3x} = k_{0x\,6x} = k_{0y\,1y} = k_{0y\,4y} = \ldots,$$
$$k_4 = k_{1x\,1x} = k_{2y\,2y} = k_{3z\,3z} = k_{4x\,4x} = k_{5y\,5y} = k_{6z\,6z},$$
$$k_5 = k_{1y\,1y} = k_{1z\,1z} = k_{2x\,2x} = \ldots,$$
$$k_6 = k_{1x\,4x} = k_{2y\,5y} = k_{3z\,6z},$$
$$k_7 = k_{1y\,4y} = k_{1z\,4z} = k_{2x\,5x} = \ldots,$$
$$k_8 = k_{1x\,2x} = k_{1x\,5x} = k_{1x\,3x} = k_{1x\,6x} = k_{2y\,1y} = k_{2y\,4y} = \ldots,$$
$$k_9 = k_{1x\,2y} = -k_{1x\,5y} = k_{1x\,3z} = -k_{1x\,6z} = k_{2y\,3z} = -k_{2y\,6z},$$
$$k_{10} = k_{1y\,3y} = k_{2x\,3x} = k_{1z\,2z} = k_{1z\,5z} = \ldots,$$
$$k_{11} = k_{1y\,2x} = k_{1z\,3x} = -k_{1y\,5x} = \ldots$$

Остальные компоненты равны нулю. На упругие постоянные накладываются еще 4 условия, связанные с выделением поступательного и вращательного движений: $(Q_{16}, VQ_{16}) = (Q_7, VQ_{16}) = (Q_{10}, VQ_{16}) = (Q_{21}, VQ_{21}) = 0$. Или, после некоторых упрощений:

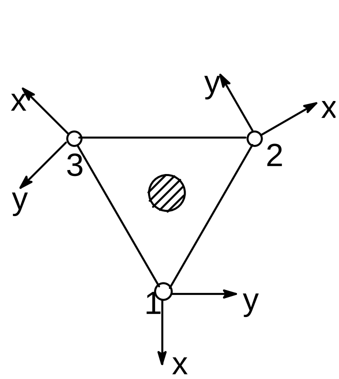
$$k_3 + k_5 + k_7 + 2k_8 + 2k_{10} = 0, \quad k_1 + 2k_2 + 4k_3 = 0,$$
$$k_2 + k_4 + k_6 + 4k_8 = 0, \quad k_5 - k_7 - 2k_{11} = 0.$$

Частоты колебаний и параметры λ:

$$\omega^2(\Gamma_{1g}) = (k_4 - k_6 + 4k_9)/m, \quad \omega^2(\Gamma_{3g}) = (k_4 - k_6 - 2k_9)/m,$$
$$\omega^2(\Gamma_{5g}) = (k_5 - k_7 + 2k_{11})/m = 4k_{11}/m, \quad \omega^2(\Gamma_{5u}) = (k_5 + k_7 - 2k_{10})/m;$$
$$\lambda_1 = (2k_4 + k_5 + 2k_6 + k_7 - 8k_8 + 2k_{10})/3m,$$
$$\lambda_3 = k_1(6m + M)/6mM, \quad \lambda_2 = 2(k_3 - k_2)(1 + 6m/M)^{1/2}/3m\sqrt{2}.$$

В молекулах с осевой симметрией представление Γ_k, соответствующее слою k, расщепляется на две части: $\Gamma_k = \Gamma_{kz} + \Gamma_{kxy}$, Γ_{kz} осуществляется смещениями атомов слоя вдоль оси симметрии z, а Γ_{kxy} – смещениями в перпендикулярной к z плоскости xy. Более того, «плоские» смещения атомов слоя в направлении линии, соединяющей атом с осью, при преобразованиях симметрии также переходят в аналогичные смещения других атомов слоя. В связи с этим может оказаться удобным использовать индивидуальные системы координат (xy) для атомов, в которых ось x направлена от оси симметрии, а ось y – перпендикулярно к этому направлению. Тогда $\Gamma_{kxy} = \Gamma_{kx} + \Gamma_{ky}$. Поступательные координаты всей молекулы комбинируются из поступательных координат слоев, а вращательные – из поступательных и вращательных координат слоев.

Характеры $\Gamma_{k\alpha}$ для отдельных слоев весьма простые. Так, слой атомов, занимающих общие положения (не на элементах симметрии) содержит g атомов, где g – порядок группы симметрии. Для такого слоя каждое представление $\Gamma_{k\alpha}$ совпадает с регулярным.



Рассмотрим молекулу NH_3 с симметрией C_{3v} (характеры НП группы C_{3v} приведены в разделе 2.9). Обозначим M массу атома N, m – массу H, ось z для всех атомов направлена вдоль оси C_3, оси x, y для атомов H выбраны в соответствии со сказанным выше и указаны на рис.; $x_0 \| x_1$, $y_0 \| y_1$. Имеем два слоя: N (1 атом) и H (3 атома). Характеры и разложения представлений $\Gamma_{k\alpha}$ очевидны:

$$\Gamma_{Nz} = \Gamma_{1(N)}(Z_0), \quad \Gamma_{Nxy} = \Gamma_{3(N)}(X_0, -X_0/2 + (\sqrt{3}/2)Y_0),$$
$$\Gamma_{Hz} = \Gamma_{1(Hz)}(Z_1 + Z_2 + Z_3) + \Gamma_{3(Hz)}(2Z_1 - Z_2 - Z_3,\ 2Z_2 - Z_3 - Z_1),$$
$$\Gamma_{Hx} = \Gamma_{1(Hx)}(X_1 + X_2 + X_3) + \Gamma_{3(Hx)}(2X_1 - X_2 - X_3,\ 2X_2 - X_3 - X_1),$$
$$\Gamma_{Hy} = \Gamma_{2(Hy)}(Y_1 + Y_2 + Y_3) + \Gamma_{3(Hy)}(Y_2 - Y_3,\ Y_3 - Y_1).$$

В скобках указаны базисные векторы НП (ненормированные), причем для каждого НП Γ_3 пара базисных векторов преобразуется подобно двум неортогональным векторам на плоскости, расположенным под углом 120°. Из $\Gamma_{1(N)}$ и $\Gamma_{1(Hz)}$ комбинируется одно «поступательное» представление Γ_1(пост.) с координатой $Q_7 = Z_0 + Z_1 + Z_2 + Z_3$ и одно колебательное Γ_1 с $Q_1 = (3m/M)Z_0 - Z_1 - Z_2 - Z_3$. $\Gamma_{1(Hx)}$ – колебательное представление Γ_1' с $Q_2 = X_1 + X_2 + X_3$, $\Gamma_{2(Hy)}$ – вращательное представление Γ_2 с $Q_{10} = Y_1 + Y_2 + Y_3$ (поворот молекулы около оси z). Из $\Gamma_{3(Hx)}$ и $\Gamma_{3(Hy)}$ комбинируется поступательное смещение слоя H в плоскости xy:

$$\Gamma_3(\text{пост.H}):\ 2X_1 - X_2 - \sqrt{3}Y_2 - X_3 + \sqrt{3}Y_3,\ 2X_2 - X_3 - \sqrt{3}Y_3 - X_1 + \sqrt{3}Y_1,$$

и колебательное представление Γ_3:

$$Q_3(\Gamma_3) = 2X_1 - X_2 - X_3 + \sqrt{3}(Y_2 - Y_3),\ Q_4(\Gamma_3) = 2X_2 - X_3 - X_1 + \sqrt{3}(Y_3 - Y_1).$$

В Q_3 атом 2 смещается перпендикулярно стороне 12 треугольника, атом 3 – навстречу ему перпендикулярно стороне 13; величины смещений всех атомов равны. Далее из Γ_{3N} и Γ_3(пост.H) комбинируется представление, соответствующее поступательному смещению всей молекулы:

$$\Gamma_3(\text{пост.}):\ Q_8 = 2X_0 + 2X_1 - X_2 - X_3 - \sqrt{3}(Y_2 - Y_3),$$
$$Q_9 = -X_0 + \sqrt{3}Y_0 + 2X_2 - X_3 - X_1 - \sqrt{3}(Y_3 - Y_1),$$

и ортогональная комбинация (промежуточная):

$$\Gamma_3(\text{пром.}):\ Q' = X_0 - (M/6m)[2X_1 - X_2 - X_3 - \sqrt{3}(Y_2 - Y_3)],$$
$$Q'' = -X_0 + \sqrt{3}Y_0 - (M/6m)[2X_2 - X_3 - X_1 - \sqrt{3}(Y_3 - Y_1)].$$

Наконец, из $\Gamma_{3(Hz)}$ и Γ_3(пром.) комбинируем Γ_3(вращ.) и второе колебательное Γ_3':

$$\Gamma_3(\text{вращ.}):\ Q_{11} = (6m/M)Q' - (a/h_0)(2Z_1 - Z_2 - Z_3),$$
$$Q_{12} = (6m/M)Q'' - (a/h_0)(2Z_2 - Z_3 - Z_1),$$

где a – расстояние от оси до атома H, h_0 – расстояние от центра тяжести молекулы до плоскости атомов H. Q_{11} соответствует повороту около оси, проходящей через центр тяжести параллельно y_1, Q_{12} – около оси, параллельной y_2.

$$\Gamma_3':\ Q_5 = (a/h_0)Q' + (1 + M/3m)(2Z_1 - Z_2 - Z_3),$$
$$Q_6 = (a/h_0)Q'' + (1 + M/3m)(2Z_2 - Z_3 - Z_1).$$

Матрица упругих постоянных в координатах $Q_1 - Q_6$ имеет вид

$$V = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{12} & h_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} & 0 & h_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{33} & 0 & h_{35} \\ 0 & 0 & h_{35} & 0 & h_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{35} & 0 & h_{55} \end{pmatrix}.$$

Диагонализация ее сводится к решению двух квадратных уравнений, в результате чего получаются частоты двух полносимметричных невырожденных колебаний типа Γ_1 и двух двукратно вырожденных колебаний типа Γ_3.

4.3 D e Z k k b n b d Z p b y g w _ j] b k l Z p b h g Z j g u o k h k l h y g b c \ Z g-l h \ h f _ o Z g b q _ k d b o k b k l _ f i h G l] j m i i u k b f f _ l j b b

Преобразование однозначных функций при преобразовании аргументов: пусть $x' = gx$ – взаимно-однозначное отображение, тогда, по определению

$$f'(x') = f(x), \text{ или } [D(g)f](gx) = f(x), \text{ или } [D(g)f](x) = f(g^{-1}x). \qquad (4.16)$$

Если $\{g\}$ – группа, то соответствие $g \to D(g)$ – линейное представление $\{g\}$ в функциональном пространстве (задача 5). Если якобиан (определитель) преобразования g равен ± 1, то представление $D(g)$ в гильбертовом пространстве унитарно:

$$(D(g)f, D(g)\varphi) = \int f^*(g^{-1}x)\varphi(g^{-1}x)\,dx = \int f^*(y)\varphi(y)\,dy = (f, \varphi).$$

Представление, порождаемое функцией f – реализуется на множестве $\{D(g)f\}$, $g \in G$. Разложение произвольной функции в сумму функций, преобразующихся как определенные строчки НП:

$$f = \sum_{\alpha i} f_i^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} f^{(\alpha)}, \qquad f_i^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{ii}^{(\alpha)}(g)^* \hat{D}(g) f. \qquad (4.17)$$

Если на функциях $\varphi_i^{(\alpha)}$ осуществляется представление Γ_α, то на функциях $\varphi_i^{(\alpha)*}$ осуществляется представление Γ_α^*.

Группа симметрии системы (гамильтониана): $G = \{g\}$, $H(gx) = H(x)$ (в шредингеровском представлении x – координаты, спиновые переменные). Инвариантность собственных подпространств H относительно группы симметрии:

$$H\psi_{ni} = E_n\psi_{ni}, \quad H(g^{-1}x)\psi_{ni}(g^{-1}x) = E_n\psi_{ni}(g^{-1}x), \quad HD(g)\psi_{ni} = E_nD(g)\psi_{ni}. \qquad (4.18)$$

Коммутирование гамильтониана с преобразованиями симметрии $D(g)$ (H – элемент коммутаторной алгебры для $[D(g)]$): $D(g)H\psi_{ni} = E_nD(g)\psi_{ni}$; сравнивая с (4.18), находим

$$D(g)H = HD(g) \tag{4.19}$$

применительно ко всем стационарным состояниям, а, значит, и для всего пространства состояний. Представление, которое осуществляется согласно (4.18) в собственном подпространстве гамильтониана H, как правило, является неприводимым, и индексы этого НП можно использовать для характеристики уровня и независимых собственных функций: E_α и $\psi_i^{(\alpha)}$, $H\psi_i^{(\alpha)} = E_\alpha \psi_i^{(\alpha)}$. Одинаковые НП различаются дополнительным индексом t: $E_{\alpha t}$. Приводимость представления в некотором собственном подпространстве H можно рассматривать как ***случайное вырождение*** состояний, не связанных преобразованиями симметрии.

Из квантовой механики известно, что перестановочность гамильтониана системы с эрмитовым оператором связана с сохранением во времени физической величины, описываемой указанным оператором. Если величина имела определенное значение в какой-то момент времени, то сохраняется это значение, и в любом случае не меняется со временем среднее значение величины. Таким образом, симметрия системы, выражающаяся в соотношениях (4.19), связана с некоторыми законами сохранения, Так, если система инвариантна относительно вращений (изотропна) в трехмерном пространстве, гамильтониан коммутирует со всеми операторами представления группы вращений в пространстве состояний, а, значит, и с эрмитовыми инфинитезимальными операторами J_α (§ 3.3). Физическая величина, сохранение которой связано с изотропностью системы, есть момент импульса, поэтому J_α с точностью до постоянного множителя следует отождествить с оператором момента импульса (углового момента) системы.

С симметрией относительно пространственных трансляций связан закон сохранения импульса системы, с симметрией относительно сдвигов во времени – закон сохранения энергии. Из дискретных симметрий отметим пространственную инверсию: если система инвариантна относительно инверсии, то имеет место закон сохранения четности.

4.4 Ijbf_g_gb_hjb]bjmiid\uqbke_gflZxjbqguwe_f_glh\

Определим ***неприводимые тензорные операторы*** $O_i^{(\alpha)}$, $i = 1, 2, \ldots, n_\alpha$:

$$D(g)\hat{O}_i^{(\alpha)}(x)D^{-1}(g) = \hat{O}_i^{(\alpha)}(g^{-1}x) = \sum_j D_{ji}^{(\alpha)}(g)\hat{O}_j^{(\alpha)}(x) \tag{4.20}$$

(запись преобразования операторов в форме $\hat{\hat{G}}\hat{O} = \hat{D}(g)\hat{O}\hat{D}(g^{-1})$ устанавливает связь представлений $g \to \hat{\hat{G}}$ и $g \to D(g)$ на пространстве операторов и пространстве функций, соответственно). Разложение произвольного оператора на неприводимые части аналогично (4.17). Матричные элементы неприводимых тензорных операторов на стационарных состояниях:

$$\begin{aligned}(\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)}\psi_k^{(\gamma)}) &= \frac{1}{g}\sum_g (D(g)\psi_i^{(\alpha)}, D(g)\hat{O}_j^{(\beta)}\psi_k^{(\gamma)}) = \\ &= \frac{1}{g}\sum_{gi'j'k'} D_{i'i}^{(\alpha)*}(g) D_{j'j}^{(\beta)}(g) D_{k'k}^{(\gamma)}(g)(\psi_{i'}^{(\alpha)}, \hat{O}_{j'}^{(\beta)}\psi_{k'}^{(\gamma)}).\end{aligned} \tag{4.21}$$

Но $$D_{j'j}^{(\beta)}(g) D_{k'k}^{(\gamma)}(g) = [D^{(\beta)}(g)\times D^{(\gamma)}(g)]_{j'k',jk} = [S^{-1}\sum_{\nu t} D^{(\nu t)}(g)\, S]_{j'k',jk},$$

где $\sum_{\nu t} D^{(\nu t)}(g)$ – приведенная форма матриц представления $\Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$. Поэтому

$$(\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)}\psi_k^{(\gamma)}) = \tfrac{1}{g}\sum_{i'j'k'}\sum_{\nu t l' l} S^{-1}_{j'k',\nu t l'} S_{\nu t l, jk}\sum_g D_{i'i}^{(\alpha)*}(g) D_{l'l}^{(\nu)}(g)(\psi_{i'}^{(\alpha)}, \hat{O}_{j'}^{(\beta)}\psi_{k'}^{(\gamma)}).$$

Правила отбора: матричный элемент (4.21) отличен от нуля только в том случае, если $\Gamma_\alpha \in \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$, или $\Gamma \in \Gamma_\alpha^* \times \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$. Отличные от нуля матричные элементы можно записать в виде:

$$(\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)}\psi_k^{(\gamma)}) = \sum_t S_{\alpha t i, jk}(\alpha t\|\beta\|\gamma), \tag{4.22}$$

$$(\alpha t\|\beta\|\gamma) = \frac{1}{n_\alpha}\sum_{i'j'k'} S^{-1}_{j'k',\alpha t i}(\psi_{i'}^{(\alpha)}, \hat{O}_{j'}^{(\beta)}\psi_{k'}^{(\gamma)}). \tag{4.23}$$

Величины $(\alpha t\|\beta\|\gamma)$, $t = 1, 2, \ldots, N_\alpha$ называют ***приведенными матричными элементами***. ***Коэффициенты Клебша-Гордона*** (группы G) – матричные элементы S, S^{-1}. ***Теорема Вигнера-Эккарта*** (4.22) утверждает: зависимость матричных элементов (4.21) от индексов строчек НП полностью определяется коэффициентами Клебша-Гордона, т.е., симметрией гамильтониана. Приведенные матричные элементы можно найти, вычисляя N_α обычных матричных элементов и решая систему (4.22) относительно $(\alpha t\|\beta\|\gamma)$. Теорема Вигнера-Эккарта чаще всего используется для группы вращений.

4.5 L _ h j b\y h a f m s _ g b c

Типичная ситуация: $H = H_0 + V$, G_0 – группа симметрии H_0, $G \subset G_0$ – группа симметрии H. Пусть Γ_α (НП G_0) как представление подгруппы G, разлагается по НП следующим образом: $\Gamma_\alpha = \sum_\nu N_{\alpha\nu}\gamma_\nu$. Тогда уровень $E(\Gamma_\alpha)$ невозмущенной системы расщепится на $\sum_\nu N_{\alpha\nu}$ подуровней $E_1(\gamma_1)$, …, $E_{N\alpha 1}(\gamma_1)$, $E_1(\gamma_2)$, … Для фактического вычисления энергии возмущенной системы следует диагонализовать матрицу $(\psi_i^{(\alpha)}, H\psi_k^{(\alpha)})$. В каноническом базисе (на функциях, преобразующихся по НП G), матрица H, как всякого элемента коммутаторной алгебры, определяется соотношением (2.13).

4.6 F_lh^he_dmeyjbj[blZe_

Молекулярными орбиталями обычно называют одноэлектронные состояния в молекулах и молекулярных комплексах. Широко используется представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций ***атомных орбиталей*** – одноэлектронных состояний (nlm) атомов, составляющих молекулу (метод МО ЛКАО):

$$\psi(\mathrm{r}) = \sum_{k,nlm} c_{nlm}^{(k)} \varphi_{nlm}^{(k)}(\mathrm{r} - \mathrm{R}_k), \tag{4.24}$$

где R_k – радиус-вектор ядра k-го атома. Набор атомных орбиталей ограничивают конечным числом (N) функций, например, внешними оболочками атомов («валентными» электронами). Такое ограничение сводит решение уравнения Шредингера для молекулы к диагонализации матрицы гамильтониана порядка N.

Если молекула обладает той или иной симметрией, то уровни энергии и стационарные МО классифицируются с помощью индексов НП группы симметрии молекулы G. Использование в качестве базиса при написании матрицы энергии функций, преобразующихся по НП группы симметрии, существенно упрощает эту матрицу, в связи с чем возникает проблема составления МО вида (4.24) с определенной симметрией. Множество функций (4.24) связано преобразованиями симметрии, и на нем реализуется представление Γ группы G. Разложение его на НП, $\Gamma = \sum N_\alpha \Gamma_\alpha$, указывает число N_α наборов МО (каждый из которых содержит n_α независимых состояний), реализующих НП Γ_α. Наборы эти можно получить, используя, как обычно, процедуру проектирования.

Разобьем молекулу на слои из эквивалентных атомов, переходящих друг в друга при преобразованиях симметрии. Атомные орбитали с данным l, относящиеся к выделенному слою (k), связываются преобразованиями симметрии только друг с другом, натягивая представление Γ_{kl} группы G. Таким образом, представление Γ расщепляется на части, $\Gamma = \sum \Gamma_{kl}$, и разложение его на неприводимые составляющие сводится к разложению представлений Γ_{kl}. Характер представлений Γ_{kl} рассчитывается по формулам

$$\chi_{kl}(C(\varphi)) = N_C^{(k)} \frac{\sin(l+\frac{1}{2})\varphi}{\sin(\varphi/2)}, \quad \chi_{kl}(S(\varphi)) = N_S^{(k)} (-1)^l \frac{\sin(l+\frac{1}{2})(\pi+\varphi)}{\sin((\pi+\varphi)/2)}, \tag{4.25}$$

где $N_C^{(k)}$ и $N_S^{(k)}$ – числа атомов k-го слоя, остающихся на месте при повороте $C(\varphi)$ и зеркальном повороте $S(\varphi)$, соответственно. Отметим, что при $l = 1$ формулы (4.25)переходят в (4.10).

В качестве примера рассмотрим октаэдрическую молекулу XY_6, состоящую из двух слоев (X и Y_6), и ее орбитали, которые можно составить из (пяти) d-орбиталей центрального атома X и s-, p-орбиталей периферических атомов (лигандов) Y. Общее число независимых АО $N = 29$, 29-мерное представление Γ расщепляется на три части: $\Gamma = \Gamma_{Xd} + \Gamma_{Ys} + \Gamma_{Yp}$, характеры которых имеют вид:

O_h	E	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_4$	$6U_2$	I	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6S_4$	$6\sigma_d$
Γ_{Xd}	5	–1	1	–1	1	5	–1	1	–1	1
Γ_{Ys}	6	0	2	2	0	0	0	4	0	2
Γ_{Yp}	18	0	–2	2	0	0	0	4	0	2

откуда видно, что $\Gamma_{Xd} = \Gamma_{3g} + \Gamma_{5g}$, $\Gamma_{Ys} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{4u}$, $\Gamma_{Yp} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{4g} + \Gamma_{5g} + \Gamma_{5u} + 2\Gamma_{4u}$. Приведем некоторые ЛКАО (ненормированные), относящиеся к НП, используя общую систему координат для всех атомов и обозначая для краткости s- и p-орбитали k-го лиганда посредством s_k и $p_{k\alpha}$:

$$\Gamma_{1g}:\ \psi_s(1g) = s_1 + s_2 + s_3 + s_4 + s_5 + s_6,$$

$$\psi_p(1g) = p_{1x} - p_{4x} + p_{2y} - p_{5y} + p_{3z} - p_{6z}\ ;$$

$$\Gamma_{3g}:\ \psi_{s1}(3g) = 2s_3 + 2s_6 - s_1 - s_4 - s_2 - s_5\ ,$$

$$\psi_{s2}(3g) = \sqrt{3}\left(s_1 + s_4 - s_2 - s_5\right);$$

$$\psi_{p1}(3g) = 2p_{3z} - 2p_{6z} - p_{1x} + p_{4x} - p_{2y} + p_{5y}\ ,$$

$$\psi_{p2}(3g) = \sqrt{3}(p_{1x} - p_{4x} - p_{2y} + p_{5y});$$

$$\Gamma_{4u}:\ \psi_{s1}(4u) = s_1 - s_4,\quad \psi_{s2}(4u) = s_2 - s_5,\quad \psi_{s3}(4u) = s_3 - s_6$$

Отметим аналогию между функциями $\psi_p(1g)$, $\psi_{p1}(3g)$, $\psi_{p2}(3g)$ и нормальными координатами Q_1, Q_2, Q_3 (4.15).Точно также комбинации p-орбиталей лигандов, преобразующиеся по другим НП, содержащимся в Γ_{Yp}, аналогичны соответствующим координатам симметрии из (4.15).

29-мерная матрица энергии, будучи записана на найденных симметризованных МО, расщепляется на двумерный блок типа Γ_{1g}, два трехмерных блока типа Γ_{3g}, три двумерных блока типа Γ_{5g}, три трехмерных блока типа Γ_{4u}, а орбитали типа Γ_{4g} и Γ_{5u} уже являются собственными функциями гамильтониана.

Рассмотрим еще МО молекулы XY_3 с симметрией C_{3v}. Воспользуемся той же системой локальных координат, что и при нахождении симметрических координат в разделе 4.2. Тогда $\Gamma_{Ys} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Ypz} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Ypx} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Ypy} = \Gamma_2 + \Gamma_3$. Очевидно, три (ненормированные) орбитали типа Γ_1 следующие:

$$\Gamma_1:\ \psi_s(\Gamma_1) = s_1 + s_2 + s_3,\ \psi_{pz}(\Gamma_1) = p_{1z} + p_{2z} + p_{3z},\ \psi_{px}(\Gamma_1) = p_{1x} + p_{2x} + p_{3x}.$$

Орбиталь типа Γ_2: $\psi_{py}(\Gamma_2) = p_{1y} + p_{2y} + p_{3y}$. Орбитали типа Γ_3, преобразующиеся при операциях из группы C_{3v} друг через друга подобно двум векторам на плоскости, расположенным под углом 120°:

$$\Gamma_3:\ \psi_{s1}(\Gamma_3) = 2s_1 - s_2 - s_3,\ \psi_{s2}(\Gamma_3) = 2s_2 - s_1 - s_3;$$
$$\psi_{pz1}(\Gamma_3) = 2p_{1z} - p_{2z} - p_{3z},\ \psi_{pz2}(\Gamma_3) = 2p_{2z} - p_{1z} - p_{3z};$$
$$\psi_{px1}(\Gamma_3) = 2p_{1x} - p_{2x} - p_{3x},\ \psi_{px2}(\Gamma_3) = 2p_{2x} - p_{1x} - p_{3x};$$
$$\psi_{py1}(\Gamma_3) = p_{2y} - p_{3y},\ \psi_{py2}(\Gamma_3) = -p_{1y} + p_{3y}.$$

В методе МО нет видимых причин для предварительного комбинирования из симметризованных орбиталей «поступательных» или «вращательных» величин. Но, соответственно, не уменьшается и размерность матрицы гамильтониана, подлежащей диагонализации, тогда как размерность матрицы упругих постоянных молекулы после отделения поступательных и вращательных координат уменьшается на шесть.

4.7 We_f_gll_uhjbd bjbklZeebq_kdh]h

Рассмотрим ионы переходных металлов в молекулярных комплексах или кристаллах, где на них воздействуют электростатические поля, создаваемые окружающими ионами. Будем полагать, что потенциал поля удовлетворяет уравнению Лапласа. Это равносильно предположению, что источники поля удалены от рассматриваемого иона на расстояния, существенно превышающие его радиус. Тогда потенциал можно разложить по сферическим гармоникам в виде:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{kq} B_k^q r^k Y_{kq}(\theta,\varphi) = \sum_k V_k(\mathbf{r}). \qquad (4.26)$$

Условие вещественности потенциала накладывает на ***параметры кристаллического поля*** B_k^q ограничение: $B_k^{q*} = (-1)^k B_k^{-q}$, поскольку согласно (3.16) $Y_{kq}^* = (-1)^k Y_{k,-q}$. Множество функций $V(\mathbf{r})$ с различными коэффициентами B_k^q преобразуется при ортогональных преобразованиях по потенциально-вещественному представлению

$$D = D^{(0+)} + D^{(1-)} + D^{(2+)} + D^{(3-)} + D^{(4+)} + \ldots$$

В то же время, если позиция иона обладает симметрией, описываемой группой $G \subset O_3$, потенциал $V(\mathrm{r})$ должен быть инвариантом этой группы, и отыскание независимых (не связанных преобразованиями симметрии) параметров B_k^q сводится к выделению инвариантов (НП Γ_1) группы G из приводимого представления D.

Энергия иона в кристаллическом поле складывается из энергий отдельных электронов:

$$U = -e\sum_i V(\mathrm{r}_i),$$

и ее можно рассматривать как возмущение, определяющее, наряду с межэлектронным кулоновским ($H_{\text{кул}}$) и спин-орбитальным (H_{so}) взаимодействиями, структуру подуровней незаполненной основной (а при необходимости и ближайших возбужденных) электронной конфигурации атома.

Кристаллическое поле ***сильное***, если энергия U превосходит $H_{\text{кул}}$ и H_{so}; в этом случае в качестве первого этапа вычисляется расщепление уровней «внешних» орбиталей иона в кристаллическом поле, а затем учитывается влияние кулоновского и спин-орбитального взаимодействий. В сильных полях могут быть велики эффекты ковалентной связи атомов; их учет целесообразно проводить в рамках метода молекулярных орбиталей. В ***промежуточных*** полях, характерных для ионов группы железа, $H_{\text{кул}} > U > H_{\text{so}}$, и кристаллическое поле проявляется в расщеплении термов ^{2S+1}L конфигураций (L – полное орбитальное, S – спиновое квантовые числа). В ***слабых*** кристаллических полях (ионы редких земель) возникает штарковская структура уровней $^{2S+1}L_J$ свободных ионов (J – полный момент).

При вычислении матричных элементов оператора (4.26) на слэтеровских детерминантах, составленных из атомных орбиталей $|nlmm_s\rangle$, возникают одночастичные элементы типа $\langle n'l'm'|r^kY_{kq}|nlm\rangle$, отличные от нуля согласно правилам отбора (п. 4.4) лишь при $k \le |l + l'|$. Поэтому в (4.26) можно ограничиться слагаемыми с $k \le 4$, если рассматриваются конфигурации ионов, содержащие лишь s, p, d-электроны; при изучении редкоземельных ионов достаточно сохранить слагаемые с $k \le 6$. Слагаемое с $k = 0$ приводит лишь к общему сдвигу уровней энергии иона, и его также обычно опускают. Сферические гармоники до шестого порядка как функции декартовых координат выписаны в приложении 1.

Гамильтониан свободного иона инвариантен относительно пространственной инверсии, и каждое состояние конфигурации ($l_1l_2...l_n$) характеризуется определенной орбитальной четностью $(-1)^{l_1+l_2+\ldots+l_n}$. Поэтому, если рассматриваются матричные элементы потенциала лишь между состояниями одной конфигурации, в (4.26) можно ограничиться слагаемыми с четными k. Слагаемые с нечетными k, которые могут быть отличны от нуля, если группа симметрии G не содержит инверсию, приводят к перемешиванию конфигураций противоположной четности.

Составление инвариантов группы G из тензоров Y_{kq}, сводится к проектированию представлений $D^{(l)}$ группы вращений на единичное НП группы G. При наличии оси симметрии порядка n (= 2, 3, 4, 6 в кристаллах) направим ее вдоль z. Инвариантами группы C_n являются функции Y_{kq} с $q = 0, \pm n, \pm 2n, \pm 3n, \ldots$ Добавление оси симметрии (y) второго порядка, перпендикулярной z, уменьшает число инвариантов: относительно группы D_n инвариантны только комбинации $Y_{kq} + (-1)^{k+q} Y_{k-q}$ [для поворота на π около оси y: $D(0, \pi, 0)|jm\rangle = (-1)^{j+m}|j-m\rangle$] с теми же $q = 0, \pm n, \pm 2n, \ldots$ При четных k это $\mathrm{Re}\,Y_{kq}$, а при k нечетных – $\mathrm{Im}\,Y_{kq}$. Добавление к оси C_n плоскости симметрии (zx), проходящей через ось z, приводит к инвариантам $\mathrm{Re}\,Y_{kq}$ для любых k, ибо соответствующая операция представляется в виде $\sigma = IC_2(y)$. Таким образом, четный кристаллический потенциал до шестого порядка по r для групп C_{3v}, D_3, D_{3d} имеет вид:

$$V^{(+)}_{\mathrm{trig}} = B_2^0 r^2 Y_{20} + B_4^0 r^4 Y_{40} + B'^3_4 r^4 (Y_{43} - Y_{4-3}) + \\ + B_6^0 r^6 Y_{60} + B'^3_6 r^6 (Y_{63} - Y_{6-3}) + B'^6_6 r^6 (Y_{66} + Y_{6-6}).$$

Он содержит 6 независимых вещественных параметров в полном соответствии с разложением представлений $D^{(l+)}$ по НП этих групп [$D^{(2)} = \Gamma_1 + 2\Gamma_3$, $D^{(4)} = 2\Gamma_1 + \Gamma_2 + 3\Gamma_3$, $D^{(6)} = 3\Gamma_1 + 2\Gamma_3 + 4\Gamma_3$]. Нечетная часть потенциала для группы C_{3v} является линейной комбинацией инвариантов Y_{10}, Y_{30}, $Y_{33} - Y_{3-3}$, Y_{50}, $Y_{53} - Y_{5-3}$ (5 параметров). Для группы D_3 (2 параметра):

$$V^{(-)}(\mathrm{D}_3) = B'^3_3 i r^3 (Y_{33} + Y_{3-3}) + B'^3_5 i r^5 (Y_{53} + Y_{5-3}).$$

Для группы D_{3d}, естественно, $V^{(-)}(\mathrm{D}_{3d}) = 0$. При отражении в плоскости xy [$\sigma_h = C_2(z)I$] $D(\sigma_h) Y_{kq} = (-1)^{k+q} Y_{kq}$, и в качестве инвариантов группы C_{nh} выживают лишь сферические гармоники с четным q для четных k и нечетным q для нечетных k. Так, четные инварианты C_{3h}: Y_{20}, Y_{40}, Y_{60}, Y_{66}, Y_{6-6}, и $V^{(+)}$ содержит 5 параметров, нечетные инварианты: Y_{33}, Y_{3-3}, Y_{53}, Y_{5-3} (4 параметра).

Существует по одной инвариантной гармонике кубической группы (O, T_d, O_h) четвертого и шестого порядка, и четный кубический потенциал имеет следующий вид (в кубических осях):

$$U_{\text{куб}} = a\left(x^4+y^4+z^4-3r^4/5\right)+b\left[7(x^6+y^6+z^6)+210x^2y^2z^2-5r^6\right].$$

Для группы T_d имеется один инвариант третьей степени: xyz, нечетные инварианты группы O начинаются лишь с девятой степени.

4.8 F_lh^ wd\b\Ze_glguo hi_jZlhjh\

При вычислении матричных элементов используется ***теорема Вигнера-Эккарта*** (4.22),применительно к группе вращений она обычно записывается так:

$$\begin{gathered}\left(\psi_{m_1}^{(j_1)},\hat{O}_{m_2}^{(j_2)}\psi_{m_3}^{(j_3)}\right)=\left\langle j_2 j_3 j_1 m_1 \middle| j_2 m_2 j_3 m_3\right\rangle\frac{(-1)^{j_2-j_3+j_1}}{\sqrt{2j_1+1}}\left\langle j_1\middle\|O^{(j_2)}\middle\|j_3\right\rangle= \\ =(-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\left\langle j_1\middle\|O^{(j_2)}\middle\|j_3\right\rangle.\end{gathered} \tag{4.27}$$

Здесь приведенный матричный элемент определен несколько иначе, чем в (4.22). Теорема Вигнера-Эккарта является основой ***метода эквивалентных операторов***, часто используемого в теории атомных спектров и теории магнитного резонанса при вычислении матричных элементов между состояниями с заданным значением момента j. В этом методе полиномы от пространственных координат заменяются полиномами от компонент угловых моментов, обладающими теми же свойствами преобразования при поворотах:

$$O_m^{(j_1)}(x)\Rightarrow(j\|j_1\|j)O_m^{(j_1)}(j_x),\quad (j\|j_1\|j)=\left\langle j\middle\|O_x^{(j_1)}\middle\|j\right\rangle\Big/\left\langle j\middle\|O_{j_x}^{(j_1)}\middle\|j\right\rangle.$$

Поскольку полиномы от x, y, z соответствуют симметричным тензорам (представлениям симметричными тензорами), полиномы от j_x, j_y, j_z тоже должны быть полностью симметризованы, так что, например, полиному $r^4 = x^4 + y^4 + z^4 + 2x^2y^2 + 2x^2z^2 + 2y^2z^2$ отвечает

$$\begin{gathered} j_x^4+j_y^4+j_z^4+\tfrac{1}{3}\left(j_x^2j_y^2+j_y^2j_x^2+j_xj_y^2j_x+j_yj_x^2j_y+j_xj_yj_xj_y+j_yj_xj_yj_x\right)+\ldots= \\ =\hat{j}^2\hat{j}^2+\tfrac{1}{3}i\left([j_x,j_y]j_z+[j_y,j_z]j_x+[j_z,j_x]j_y\right)=j^2(j+1)^2-\tfrac{1}{3}j(j+1).\end{gathered}$$

В теории кристаллического поля приходится переходить к эквивалентным операторам, составленным из компонент орбитального момента электрона l (при расчетах одноэлектронных матричных элементов), из компонент суммарного орбитального момента L (при вычислениях, ограниченных состояниями одного терма), и из компонент полного момента J (при ограничении состояниями уровня SLJ редкоземельных ионов).

Установим связь между приведенными матричными элементами $(L\|O_k\|L)$ и $(J\|O_k\|J')$. В силу (4.27)

$$
(JM_J|O_k^q|J'M_{J'}) = (-1)^{J-M_J}\begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M_{J'} \end{pmatrix}(J\|O_k\|J') =
$$

$$
= \sum_{MM_SM'M_{S'}} (JM_J|LMSM_S)(LMSM_S|O_k^q|LM'SM_{S'})(LM'SM_{S'}|J'M_{J'}) =
$$

$$
= \sqrt{(2J+1)(2J'+1)}\,(L\|O_k\|L)\sum_{MM_SM'M_{S'}}(-1)^{L-M-M_J+M_{J'}}\begin{pmatrix} L & S & J \\ M & M_S & -M_J \end{pmatrix}\times
$$

$$
\times\begin{pmatrix} L & S & J' \\ M' & M_{S'} & -M_{J'} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} L & k & L \\ -M & q & M' \end{pmatrix}\delta_{M_SM_{S'}}.
$$

Последняя сумма может быть вычислена с учетом соотношения (3.45). В результате получим:

$$
(J\|O_k\|J') = (-1)^{L+S+J'+k}\sqrt{(2J+1)(2J'+1)}\begin{Bmatrix} J & k & J' \\ L & S & L \end{Bmatrix}(L\|O_k\|L).
$$

A Z ^ Z q j b Z a ^ _ 4 e m

1. Найти компоненты пьезоэлектрического тензора γ_{ikl} для кристалла с точечной группой T_d. Тензор γ определяется соотношением $P_i = \gamma_{ikl}\sigma_{kl}$, где P_i – вектор поляризации, σ_{kl} – симметричный тензор напряжений.
2. Указать возможные числа атомов в слоях молекулы с симметрией C_{3v} и D_{3d}.
3. Пусть взаимодействие атомов октаэдрической молекулы зависит только от расстояния между ними (центральные силы). Написать матрицу упругих постоянных и вычислить частоты нормальных колебаний.
4. Найти нормальные координаты тетраэдрической молекулы XY_4.
5. Проверить, что соответствие $g \to D(g)$, определенное равенством (4.16), является линейным представлением в пространстве функций.
6. В трехмерном евклидовом пространстве задана некоторая декартова система координат. Как преобразуются функции x, x^2, $\sin x$, $f'_x(x,y,z)$ при повороте около оси z на угол α?
7. Разбить функцию x^2 на части, преобразующиеся по НП группы октаэдра (оси координат направлены вдоль осей четвертого порядка).
8. Означает ли равенство (4.17), что в представлении, порождаемом функцией $f(x)$, каждое НП содержится не более, чем по одному разу?
9. Построить матрицы трех НП группы октаэдра на функциях $3z^2 - r^2$ и $\sqrt{3}(x^2 - y^2)$; x, y и z; yz, zx и xy.

10. Определить группу симметрии нерелятивистского гамильтониана для иона с зарядом Z и n электронами:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}.$$

11. Показать, что матрицы S, осуществляющие разложение представления $D^{(\beta)} \times D^{(\gamma)}$: $D^{(\beta)} \times D^{(\gamma)} = S^{-1}\left(\sum_{\nu t} D^{(\nu t)}\right)S$, определяются этим соотношением с точностью до умножения на элементы коммутаторной алгебры $[\sum D^{(\nu t)}]$.
12. Проверить ортогональность функций, преобразующихся по различным НП или как различные строчки одного НП.
13. Вычислить $\int \varphi_i^{(\alpha)}(x)\,dx$, если Γ_α – нетождественное представление.
14. Показать, что $\Gamma_\alpha \in \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$ тогда и только тогда, когда $\Gamma_1 \in \Gamma_\alpha^* \times \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$.
15. Найти правила отбора для электрических и магнитных дипольных переходов между уровнями системы, обладающей симметрией O_h.
16. На систему, обладающую симметрией группы O_h, наложено возмущение, которое понижает симметрию до группы а) D_{3d}, б) D_{2h}. Как расщепляются вырожденные уровни энергии системы под действием возмущения? Найти канонические базисы и написать матрицу возмущения для системы, обладающей тремя уровнями: $E(\Gamma_{4u}^1)$, $E(\Gamma_{4u}^2)$, $E(\Gamma_{5g})$.
17. Составить МО ЛКАО молекулы XY_4, преобразующиеся по НП группы T_d, из s-, p-, d-орбиталей атома X и s-, p-орбиталей лигандов.
18. Как расщепляются уровни атома с данными значениями полного момента $j = 1/2, 1, \ldots, 7/2, 4$ в поле с кубической симметрией O?
19. Определить волновые функции расщепленных уровней в предыдущей задаче.
20. Показать, что функция $\psi_m^{(j)}$ является собственной функцией оператора $j^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2$. Вычислить соответствующее собственное значение.
21. Найти потенциал кристаллического поля с тетрагональной симметрией.
22. Найти эквивалентные операторы для полиномов

$$P_2^0 = 3z^2 - r^2,\quad P_2^2 = x^2 - y^2,\quad P_4^0 = 35z^4 - 30r^2z^2 + 3r^4,$$
$$P_4^2 = (7z^2 - r^2)(x^2 - y^2),\quad P_4^3 = xz(x^2 - 3y^2),\quad P_4^4 = x^4 - 6x^2y^2 + y^4.$$

5. H[jZs_gb_ \j_f_gb

5.1 :glbmgblZjghklv h[jZs_gby \j_f_gb

Обращение времени θ (***обращение направления движения***) заключается в изменении всех скоростей (в том числе и скоростей «собственных вращений», спинов) системы на противоположные. Связь обращения времени и смещения во времени D_t:

$$\hat{D}_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \quad D_t\theta = c\theta D_{-t}\,, \quad |c| = 1. \tag{5.1}$$

Если θ является элементом симметрии системы (не меняет гамильтониана), то, как обычно,

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \rightarrow \quad \hat{H}\theta\psi_n = E_n\theta\psi_n\,, \tag{5.2}$$

и

$$|(\theta x, \theta y)| = |(x, y)| \tag{5.3}$$

(сохраняется вероятность перехода между преобразованными состояниями). Равенство (5.3) имеет место для нормированных векторов, но распространяется по определению и на все другие векторы. Из него вытекает, что если $\{e_i\}$ – ортонормированный базис гильбертова пространства, то $\{\theta e_i\}$ – такой же базис. Если $x = \sum_i \xi^i e_i$, то $\theta x = \sum_i \xi'^i\, \theta e_i$, причем $|\xi'^i| = |\xi^i|$. Поскольку каждому состоянию отвечает целый набор векторов с произвольными фазами, можно воспользоваться этим произволом так, чтобы оператор θ стал линейным или антилинейным. Пусть

$$\theta f_i = \theta(e_1 + e_i) = c_1\theta e_1 + c_i\theta e_i\,, \qquad |c_1| = |c_i| = 1.$$

Снабдим θe_1 фазой 1, θe_i – фазой c_i/c_1, θf_i – фазой c_1^{-1}, тогда для переопределенных состояний $\theta f_i = \theta e_1 + \theta e_i$. Умножая далее $\theta x = \sum_i \xi'^i\, \theta e_i$ на ξ^1/ξ'^1 (по модулю равное 1) и дополняя θx этой фазой, получим

$$\theta x = \xi^1\theta e_1 + \xi''^2\theta e_2 + \xi''^3\theta e_3 + \ldots, \qquad |\xi''^i| = |\xi'^i| = |\xi^i|.$$

Согласно (5.3), $|(x, f_i)| = |(\theta x, \theta f_i)|$, т.е., $|\xi^1 + \xi^i| = |\xi^1 + \xi''^i|$, или $\xi^{1*}\xi^i + \xi^1\xi^{i*} = \xi^{1*}\xi''^i + \xi^1\xi''^{i*}$. Умножая на ξ''^i и учитывая, что $|\xi''^i|^2 = |\xi^i|^2$, получим для ξ''^i квадратное уравнение:

$$\xi^{1*}(\xi''^i)^2 - (\xi^{1*}\xi^i + \xi^1\xi^{i*})\,\xi''^i + \xi^1|\xi^i|^2 = 0;$$

откуда $\qquad \xi''^i = \xi^i, \qquad$ либо $\qquad \xi''^i = \xi^{i*}(\xi^1/\xi^{1*}). \qquad$ (5.4)

В первом случае оператор θ оказывается линейным и унитарным, а во втором (после вторичного дополнения θx фазой ξ^{1*}/ξ^1) – антилинейным и антиунитарным:

$$\theta x = \sum_i \xi^{i*}\theta e_i, \quad \theta(\alpha x + \beta y) = \alpha^*\theta x + \beta^*\theta y, \quad (\theta x, \theta y) = \sum_i \xi^i \eta^{i*} = (x, y)^* = (y, x). \quad (5.5)$$

Применяя соотношение (5.1) к произвольному состоянию, разложенному по стационарным состояниям, $\Psi = \sum_n a_n\varphi_n$, и предполагая линейность оператора θ, мы придем к противоречию (неравенству), поэтому для оператора обращения времени может выполняться лишь вторая из возможностей (5.4), т.е., θ – антиунитарный оператор.

Оператор комплексного сопряжения меняет компоненты вектора (в любом базисе) на комплексно-сопряженные: $K\psi = \psi^*$, $K^2 = 1$. ***Нормальная форма антиунитарного оператора***: $\theta = UK$, где U – унитарный оператор.

$$\theta^2 = UKUK = UU^* = cE \;\rightarrow\; U = c\tilde{U} \;\rightarrow\; c = \pm 1, \theta^2 = \pm 1. \quad (5.6)$$

5.2 Различные представления оператора обращения времени

Существует два класса физических величин по отношению к обращению времени: для первого класса (например, координаты) вероятность определенного значения величины одинакова в состояниях ψ и $\theta\psi$, а для второго (скорости) – одинакова вероятность противоположных значений. Операторы соответственно удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям

$$\theta q = q\theta, \quad \theta p = -p\theta \quad (5.7)$$

(Т-четные и Т-нечетные операторы). В шредингеровском представлении, в котором оператор координаты соответствует просто умножению, а оператор импульса $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$, унитарный оператор U в $\theta = UK$ коммутирует с x, p_x, т.е., он не зависит ни от координат, ни от импульсов, и, если не учитывать спина, то можно положить

$$U = 1, \quad \theta = K, \quad \theta\psi = \psi^*. \quad (5.8)$$

Чтобы установить, как действует U на спиновые координаты, применим соотношение (5.7) ко всем спиновым операторам в обычном представлении ($s_{i\alpha} = \sigma_{i\alpha}/2$, i – «номер электрона»). Тогда

$$Us_{ix} = -s_{ix}U, \quad Us_{iz} = -s_{iz}U, \quad Us_{iy} = s_{iy}U. \quad (5.9)$$

Отсюда с точностью до фазы получаем $U = \sigma_{1y} \times \sigma_{2y} \times \ldots \times \sigma_{ny}$. Фазу выберем так, чтобы оператор U стал вещественным; тогда (опуская знак прямого умножения)

$$\theta = (-i)^n \sigma_{1y}\sigma_{2y}\ldots\sigma_{ny}K, \quad (5.10)$$

и $$\theta^2 = 1 \ (n \text{ – четное}), \qquad \theta^2 = -1 \ (n \text{ – нечетное}). \quad (5.11)$$

Поскольку $-i\sigma_y$ соответствует повороту на π около оси y в спиновом пространстве, (5.10)можно переписать еще в виде

$$\theta = D_S(0,\pi,0)K. \tag{5.12}$$

Аналогичное выражение:

$$\theta = D(0,\pi,0)K = \exp(-i\pi J_y)K, \tag{5.12а}$$

оказывается удобным при использовании JM-представления. Имея в виду соотношение $D^{(j)}_{m'm}(0,\pi,0) = \delta_{m',-m}(-1)^{j-m}$ (ср.(3.26)), можно записать:

$$\theta\sum_{JM} a_{JM}\left|JM\right\rangle = \sum_{JM} a^{*}_{JM}(-1)^{J-M}\left|J,-M\right\rangle. \tag{5.12б}$$

5.3 H i j _ ^ _ e _ gb i j _ ^ k l Z \ e _ ¸

Перестановочность оператора θ с операторами пространственных преобразований:

$$\theta I = I\theta, \quad \theta D(g) = D(g)\theta, \quad g \in \mathrm{SU(2)(R_3)}, \tag{5.13}$$

так как

$$D(0,\pi,0)D^*(g) = D(g)D(0,\pi,0).$$

Особенность полной группы операторов симметрии квантовомеханической системы, включающей обращение времени, заключается в том, что часть (половина) этих операторов являются антиунитарными:

$$G_\theta = G + \theta G, \quad G = \{D(g)\},$$

g – пространственные операции. Правила умножения операторов в группе определяются (5.13) и (5.11), в частности, $\theta D(g_1)\theta D(g_2) = -D(g_1 g_2)$, если система содержит нечетное число частиц с полуцелым спином.

Вследствие указанной особенности матрицы операторов G_θ не образуют представления этой группы, ибо обычное правило умножения матриц операторов имеет место только для линейных операторов. Для группы G_θ:

$$D(u_1u_2) = D(u_1)D(u_2), \quad D(ua) = D(u)D(a), \quad D(au) = D(a)D^*(u),$$
$$D(a_1a_2) = D(a_1)D^*(a_2), \quad u \in G,\ a \in \theta G. \tag{5.14}$$

Соответствие $g \to D(g)$, при котором матрицы $D(g)$ удовлетворяют уравнениям (5.14), называют ***копредставлением***. Эквивалентные копредставления:

$$\bar{D}(u) = S^{-1}D(u)S, \qquad \bar{D}(a) = S^{-1}D(a)S^{*}. \tag{5.15}$$

Приводимость и неприводимость определяются как для обычных представлений.

Неприводимые копредставления (НКП) могут быть как приводимыми, так и неприводимыми представлениями унитарной подгруппы. Здесь различаются три случая:

1) Если $D(u) \propto D^*(u) = C^{-1}D(u)C$, и $CC^* = D(\theta^2)$ $(= \pm 1)$, то НКП содержит только одно НП $D(u)$ унитарной подгруппы.

2) Если $D(u) \propto D^*(u)$, и $CC^* = -D(\theta^2)$, то НКП содержит $D(u)$ дважды.

3) Если $D(u)$ неэквивалентно $D^*(u)$, то НКП содержит $D + D^*$.

Доказательство. Пусть $\Delta(u)$ – НП G наименьшей размерности, содержащееся в НКП; базис $\Delta(u)$ – $e_1, e_2, \ldots, e_l$. Тогда $\theta e_1, \ldots, \theta e_l$ – базис НП $\Delta^*(u)$, а линейная оболочка $\{e_i, \theta e_i\}$ инвариантна относительно всех $u, a \in G_\theta$. Отсюда сразу вытекает, что, во-первых, возможны только указанные выше три типа разложения НКП по НП G, во-вторых, справедливо третье утверждение. Функции θe_i либо все выражаются через e_i, $L\{e_i, \theta e_i\} = L\{e_i\}$, либо все линейно независимы с $\{e_i\}$, поскольку в противном случае имелось бы подпространство меньшей, чем l, размерности $(L\{e_i, \theta e_i\} - L\{e_i\})$, инвариантное относительно $u \in G$. Если $\theta e_i = \sum D_{ij}(\theta)e_j$, то $\Delta^*(u) = D^{-1}(\theta)\Delta(u)D(\theta)$, т.е., с точностью до фазы $C = D(\theta)$, и $CC^* = D(\theta)D^*(\theta) = D(\theta^2)$. Если θe_i независимы от e_i, то в базисе $\{e_i, \theta e_i\}$ матрицы НКП $D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\theta^2) \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $D(u) = \begin{pmatrix} \Delta(u) & 0 \\ 0 & \Delta^*(u) \end{pmatrix}$, а в базисе $\{e_i, \hat{C}^{-1}\theta e_i\}$

$u \to \begin{pmatrix} \Delta(u) & 0 \\ 0 & \Delta(u) \end{pmatrix}$, $\theta \to \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\theta^2)\hat{C}^* \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$. Допуская, что $CC^* = \Delta(\theta^2)$, получим

$D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{C} \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$, но такая матрица может быть приведена ортогональным преоб-

разованием $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} & \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} & \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} \end{pmatrix}$, не меняющим вида $D(u)$, и мы возвращаемся к

случаю 1). Если же $CC^* = -\Delta(\theta^2)$, то $D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{C} \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$, и она может быть приве-

дена только при помощи комплексной матрицы S, и условие эквивалентности (5.15) при этом не будет удовлетворяться. Как видно, типы НКП полностью определяются свойствами неприводимых унитарных представлений.

5.4 L _ h j _ fDZj Z f _ j k Z

Теорема Крамерса утверждает, что, если $\theta^2 = -1$, $H\theta = \theta H$, то каждый уровень энергии по крайней мере двукратно вырожден. Теорема вытекает из соотношений

$$(\psi_n, \theta\psi_n) = (\theta^2\psi_n, \theta\psi_n) = -(\psi_n, \theta\psi_n) = 0.$$

Состояния ψ и $\theta\psi$ при $\theta^2 = -1$ называются ***крамерсово-сопряженными состояниями***. Для Т-четных (q) и Т-нечетных (p) операторов:

$$(\psi, q\theta\psi) = 0, \quad (\psi, q\psi) = (\theta\psi, q\theta\psi), \quad (\psi, p\psi) = -(\theta\psi, p\theta\psi). \qquad (5.16)$$

5.5 l j Z \ b e Z hl[hjZ l j b q g u o we_f_glh\ k\yaZggku h[jZs_gb_f \j_f_gb

Рассмотрим «диагональный» матричный элемент (на функциях, относящихся к одному уровню): $Y_{ik,j} = (\psi_i^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)})$, причем $\Gamma_\alpha \infty \Gamma_\alpha^*$. Как мы видели в § 4.4, при пространственных операциях симметрии $Y_{ik,j}$ преобразуются согласно представлению $\Gamma_\alpha^2 \times \Gamma_\beta$. Вместо $Y_{ik,j}$ удобно рассмотреть матричные элементы $Z_{ik,j} = (\theta\psi_i^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)})$, линейно связанные с $Y_{ik,j}$:

$$Z_{ik,j} = (\theta O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)}, \theta^2\psi_i^{(\alpha)}) = \varepsilon_\theta\varepsilon_O(\theta\psi_k^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_i^{(\alpha)}) = \varepsilon_\theta\varepsilon_O Z_{ki,j},$$

где $\varepsilon_\theta = \pm 1$ при $\theta^2 = \pm 1$, $\varepsilon_O = \pm 1$ в зависимости от типа оператора O относительно обращения времени. Таким образом,

$$Z_{ik,j} = \frac{1}{2}(Z_{ik,j} + \varepsilon_\theta\varepsilon_O Z_{ki,j}),$$

т.е., матричные элементы $Z_{ik,j}$ фактически образуют базис представления $[\Gamma_\alpha^2] \times \Gamma_\beta$ или $\{\Gamma_\alpha^2\} \times \Gamma_\beta$ при $\varepsilon_\theta\varepsilon_O = +1$ или -1, соответственно. Поэтому правила отбора в этих случаях требуют, чтобы $\Gamma_\beta \in [\Gamma_\alpha^2]$ или $\Gamma_\beta \in \{\Gamma_\alpha^2\}$ вместо более широкого требования § 4.4 $\Gamma_\beta \in \Gamma_\alpha^2$. Отметим, что здесь Γ_α – не обязательно неприводимое представление; это может быть, например, неприводимое копредставление второго и третьего типов.

5.6 N h j f Z e b a f kfbgh\uo]ZfbevlhgbZgh\

Спиновые гамильтонианы используются для описания спектров систем с ограниченным числом $r = 2S + 1$ (S – «эффективный спин») состояний. С подобного рода системами приходится иметь дело, например, в магнитном резонансе; парамагнитные ионы в кристаллических полях часто обладают невырожденным основным орбитальным уровнем, удаленным от возбужденных уровней интервалом порядка сотен см$^{-1}$. Магнитные свойства системы определяются группой спиновых состояний иона, их расщеплением в кристаллическом и магнитном полях. В этом случае эффективный спин системы совпадает с истинным спином иона, что, собственно, и оправдывает название ***спиновый гамильтониан***.

Формально любой эрмитов оператор в r-мерном пространстве может быть представлен в виде конечной суммы «спиновых операторов» S_α и их степеней (симметризованных) до $r-1$ включительно:

$$\hat{H} = a_0 + a_\alpha S_\alpha + a_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta + \ldots \tag{5.17}$$

Диагонализованный оператор определяется r собственными значениями или числами a_z в выражениях

$$\hat{H}_\mathrm{d} = a_0 + a_z^{(1)} S_z + a_z^{(2)} S_z^2 + \ldots + a_z^{(r-1)} S_z^{r-1}.$$

Однако определенные конструктивные заключения о форме гамильтониана можно сделать лишь в случае, когда известны свойства преобразований «спиновых» состояний при преобразованиях в физическом пространстве и обращении времени. Гамильтониан системы упрощается при наличии той или иной симметрии, ибо он должен быть инвариантен относительно соответствующих поворотов, а также обращения времени с изменением знака внешнего магнитного поля. Если S – истинный спин, множество состояний его преобразуется по представлению $D^{(S)}$, и нечетные степени его компонент могут входить в гамильтониан лишь в комбинации с магнитным полем. Ограничиваясь линейными по магнитному полю членами и не учитывая общий сдвиг уровней спинового мультиплета, представим гамильтониан для спина $S=1$ (и $3/2$) в виде

$$\hat{H} = g_{\alpha\beta} H_\alpha S_\beta + D_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta,$$

где тензор $g_{\alpha\beta}$ и симметричный бесследный тензор $D_{\alpha\beta}$ должны быть инвариантами точечной группы симметрии позиции парамагнитного центра. В случае $S=2,\ 5/2$ добавляются слагаемые четвертого порядка по S_α, а при $S=3,\ 7/2$ – шестого. В нулевом магнитном поле спиновый гамильтониан является эквивалентным спиновым оператором для потенциала кристаллического поля. Матричные элементы кристаллического поля не обращаются точно в нуль, поскольку действующее как возмущение спин-орбитальное взаимодействие слегка примешивает к спиновым состояниям орбитальные состояния с той же симметрией.

Рассмотрим еще спиновые гамильтонианы для крамерсовых дублетов; в этом случае эффективный спин $S=1/2$, $\theta^2=-1$, и можно произвольно выбрать пару взаимно-ортогональных состояний ψ и $\theta\psi$ в качестве собственных векторов оператора S_z. Операторы S_x, S_y, S_z меняют знак при обращении времени, и гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = g_{\alpha\mu} H_\alpha S_\mu.$$

Произвол в выборе «ориентаций» в спиновом пространстве можно использовать для диагонализации «тензора» $g_{\alpha\mu}$ даже в отсутствие пространственной симметрии. «Спиновый» базис ψ, $\theta\psi$ можно менять с помощью унитарных преобразований из SU(2), однако сопоставлять их можно только с теми вращениями в физическом пространстве (группа R_3), которые принадлежат группе симметрии $G \subset R_3$ парамагнитного иона в отсутствие магнитного поля и относительно которых поэтому пространство $\{\psi, \theta\psi\}$ инвариантно. Повороты из R_3, не принадлежащие группе симметрии G, переводят состояния ψ, $\theta\psi$ в возбужденные состояния.

При наличии симметрии G гамильтониан должен быть инвариантен относительно соответствующих поворотов магнитного поля **H** и одновременных поворотов в двумерном пространстве. Последним отвечают трехмерные повороты «вектора» **S** и появляется возможность согласования «координат» в спиновом пространстве с системой координат физического пространства. Если Z – главная ось группы G порядка n, выберем функции ψ, $\theta\psi$ так, что $\hat{D}(C_n)\psi = e^{-i\alpha}\psi$, $\hat{D}(C_n)\theta\psi = e^{i\alpha}\theta\psi$ (α – половина угла поворота), тем самым фиксируя ось Z спинового пространства; $\sigma_3/2 = S_z$. При таком выборе $g_{z1} = g_{z2} = g_{xz} = g_{yz} = 0$. Если других преобразований симметрии нет, то остается произвол в выборе одной из осей 1, 2 (x, y) в спиновом пространстве. При наличии оси второго порядка, перпендикулярной к главной, выберем ее за ось Y, так что

$$\hat{D}(C_2^y)\psi = -\hat{D}(C_2^y)\theta\theta\psi = K\theta\psi, \qquad \hat{D}(C_2^y)\theta\psi = -K\psi,$$

т.е., в базисе $\{\psi, \theta\psi\}$ $\hat{D}(C_2^y) = -i\sigma_2$, и, таким образом, $D'(C_2^y)S_z = -S_z$, $D'(C_2^y)S_x = -S_x$. Тем самым тензор $g_{\alpha\mu}$ автоматически становится симметричным и диагональным; если же $n \geq 3$, то $g_{xx} = g_{yy} = g_{\|}$.

A Z ^ Z q j b Z a ^ _ 5e m

1. Каков вид оператора обращения времени в импульсном представлении (без учета спина)?
2. Показать, что матрицы антиунитарных операторов унитарны.
3. Показать, что матрица $D(\theta)$ симметрична или антисимметрична в зависимости от четности числа электронов.
4. Убедиться в том, что все неприводимые копредставления при наличии вращательной симметрии относятся к первому типу (иными словами, в этом

случае симметрия относительно обращения времени не приводит к дополнительному вырождению).

5. Исследовать неприводимые копредставления при наличии осевой симметрии (C_∞, $C_{\infty v}$).
6. Какие из следующих операторов являются Т-четными и Т-нечетными: $(s_1 \cdot s_2)(p \cdot r)$, $(r \cdot s)$, $(r \cdot s_1)(r \cdot s_2)$, $(p \times r) \cdot s$?
7. Возможен ли линейный эффект Штарка для систем, обладающих симметрией R_3, O, T_d?

6. IjhkljZgkl_ggu_ "jmiiu b bo ij_^klZ\e_gby

6.1 Hij_^_e_gb_ ijhkljZgkl_gghc "jmiiu

Произвольный элемент ***группы движений трехмерного евклидова пространства*** можно представить в виде $g = t_{\mathrm{a}}r = (\mathrm{a}\,|\,r)$, где t_{a} – трансляция на вектор a, r – простой или зеркальный поворот. Преобразование g называется ***винтовым вращением***, если r – простой поворот, а вектор a параллелен оси поворота, которую в этом случае называют ***винтовой осью***. ***Скользящее отражение*** – $g = t_{\mathrm{a}}\sigma$, когда Z параллельно плоскости отражения (***плоскости скольжения***). Сопряженные элементы (ср. §1.5):

$$gt_{\mathrm{a}}g^{-1} = t_{\hat{g}\mathrm{a}}, \qquad t_{\mathrm{a}}R(\mathrm{n},\varphi)t_{-\mathrm{a}} = R(\hat{t}_{\mathrm{a}}\mathrm{n},\varphi).$$

При этом надо иметь в виду, что $\hat{t}_{\cdot}\mathrm{a} = \mathrm{a}$ (начало вектора a не закреплено). Произведение элементов:

$$g_1 g_2 = (\mathrm{a}_1|r_1)(\mathrm{a}_2|r_2) = (\mathrm{a}_1 + \hat{r}_1\mathrm{a}_2|r_1 r_2). \tag{6.1}$$

Отметим еще, что поворот с последующей трансляцией на вектор, перпендикулярный оси, является поворотом около параллельной оси:

$$(\mathrm{a}|R(\mathrm{n},\varphi)) = R(\mathrm{n}',\varphi), \quad \mathrm{n}' = \hat{t}_{\mathrm{a}'}\mathrm{n}, \tag{6.2}$$

причем вектор сдвига a' повернут относительно a на угол $(\pi-\varphi)/2$ вокруг оси n, а по величине он равен $(a/2)\operatorname{cosec}(\varphi/2)$. Отражение в плоскости с последующей трансляцией на вектор a, перпендикулярный плоскости, является отражением в плоскости, отстоящей от исходной на $\mathrm{a}/2$. Эти замечания позволяют использовать в стандартном представлении элементов группы движений $g = t\,r$ множество поворотных элементов r, оставляющих неподвижной выделенную точку (начало координат). Группа движений оказывается полупрямым произведением подгруппы трансляций и ортогональной подгруппы.

Пространственные группы – группы самосовмещений бесконечных идеальных кристаллов; они являются подгруппами группы движений евклидова пространства. Основное свойство пространственных групп – наличие дискретной подгруппы трансляций $\mathrm{T} = \{t_{\mathrm{a}}\}$ на вектора $\mathrm{a} = m_1\mathrm{a}_1 + m_2\mathrm{a}_2 + m_3\mathrm{a}_3$ (m_i – целые числа). T – абелева группа с образующими $t_{\mathrm{a}_1}, t_{\mathrm{a}_2}, t_{\mathrm{a}_3}$; она изоморфна векторной группе $\mathrm{T} = \{\mathrm{a}\}$. Тройка a_1, a_2, a_3 – ***базисные векторы*** кристаллической решетки, параллелепипед, построенный на них, называется ***основным параллелепипедом*** (***элементарной ячейкой***). ***Решетка Бравэ*** – совокупность точек $t_{\mathrm{a}}O$

(***узлов Бравэ***), где O – произвольная точка. ***Простая кристаллическая решетка*** (один атом на элементарную ячейку) по форме совпадает с решеткой Бравэ; сложную кристаллическую решетку можно рассматривать как состоящую из вдвинутых одна в другую решеток Бравэ.

Произвол в выборе основного параллелепипеда: одно из ребер может быть направлено вдоль любого $\mathrm{a} \in \mathrm{T}$, одна грань может лежать в произвольной плоскости, содержащей a и $\mathrm{b} \neq \lambda \mathrm{a}$. Объем основного параллелепипеда $\Omega_0 = |\mathrm{a}_1(\mathrm{a}_2 \times \mathrm{a}_3)|$ не зависит от выбора базисных векторов (задача 5).

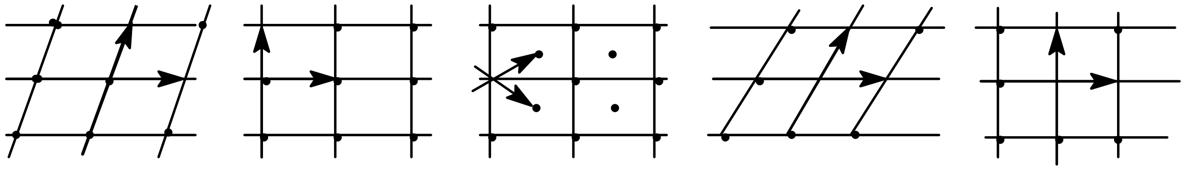
6.2 L b i u j _ r _ l h dj Z \ \

Точечная группа симметрии К решетки Бравэ (векторной группы Т) – совокупность поворотов и зеркальных поворотов (с центром на некотором узле), совмещающих решетку Бравэ с собой. Необходимое и достаточное условие того, что $r \in \mathrm{K}$ (***условие совместности*** поворотов и трансляций):

$$r\mathrm{a}_j = \sum_{i=1,2,3} r_{ij}\mathrm{a}_i\,, \quad r_{ij} \text{ – целые числа.} \tag{6.3}$$

Инверсия $I \in$ К. Возможные оси симметрии К: $n = 2, 3, 4, 6$. (Действительно, $\mathrm{Sp}\,r = 1 + 2\cos(2\pi/n)$, с другой стороны, согласно (6.3), это должно быть целое число.) Вместе с осью симметрии при $n = 3, 4, 6$ группа К содержит и плоскость отражения σ_v (задача 7). Эти замечания ограничивают число возможных групп К семью; ***кристаллические сингонии*** (системы векторных групп Т) характеризуются соответствующей группой К: ***триклинная*** Т (S_2), ***моноклинная*** М (C_{2h}), ***ромбическая*** (или ***ортогональная***) О (D_{2h}), ***ромбоэдрическая*** (или ***тригональная***) R (D_{3d}), ***тетрагональная*** (или ***квадратная***) Q (D_{4h}), ***гексагональная*** Н (D_{6h}), ***кубическая*** С (O_h).

Однотипные решетки Бравэ относятся к одной сингонии и могут быть получены друг из друга непрерывной деформацией без понижения симметрии. Решетки Бравэ можно получить прямым построением систем узлов в плоскостях, перпендикулярных «главной» оси и проходящих через две ближайшие точки на этой оси, после чего исследуется возможность размещения других плоскостей между этими двумя. Параллельные линии узлов (или плоскости узлов) изоморфны, поскольку могут быть получены друг из друга сдвигом на вектор решетки. Существует 5 типов плоских решеток, изображенных на рисунке ниже, относящихся к четырем плоским сингониям – C_2, C_{2v}, C_{4v}, C_{6v} (движениям плоскости). В пространственных решетках моноклинной сингонии плоско-



a) C_2 b) C_{2v} c) C_{2v} d) C_{6v} e) C_{4v}

сти, перпендикулярные оси C_2, выглядят подобно рис. а). Простая моноклинная решетка Γ_m получается, если между плоскостями, проведенными через ближайшие узлы на оси C_2, нет других плоскостей. В базоцентрированной решетке Γ_m^b посередине между этими двумя плоскостями размещается еще одна, причем ось C_2 может проходить через точки этой третьей плоскости, лежащие в центре ячейки или делящие пополам базисные векторы плоскости. Всего имеется 14 типов решеток Бравэ: Γ_t; Γ_m, Γ_m^b; Γ_o, Γ_o^b, Γ_o^v, Γ_o^f; Γ_q, Γ_q^v; Γ_c, Γ_c^v, Γ_c^f; Γ_{rh}; Γ_h, где нижний индекс означает сингонию. Интернациональная символика решеток включает обозначение группы К, которому предшествуют буквы P, F, I, A, B, C. Например, $\Gamma_t \equiv P\bar{1}$, $\Gamma_c^f \equiv Fm\bar{3}m$, $\Gamma_m^b \equiv A2/m$. Описание всех решеток, различные их обозначения см. в книге Ковалева (1986) (см. также Бир и Пикус, 1972). Для всех сингоний, за исключением гексагональной, вышеуказанное построение позволяет получить ***параллелепипед Бравэ***, обладающий симметрией сингонии К и ребра которого являются векторами решетки. Для ***простых решеток*** Бравэ (без верхних индексов, или первая буква P в международных обозначениях) параллелепипед Бравэ совпадает с элементарной ячейкой. В ***базоцентрированных решетках*** (индекс b, или A, B, C) имеются узлы в центрах двух противоположных граней параллелепипеда Бравэ, в ***гранецентрированных*** (f, F) – в центрах всех граней, в ***объемноцентрированных*** (v, I) – в центре параллелепипеда. Каждый тип решетки характеризуется параметрами, задающими размеры и углы соответствующего параллелепипеда Бравэ. Кубические решетки – однопараметрические (величина ребра куба), тригональные и тетрагональные решетки – двухпараметрические и т.д.

Понятие о ***подчинении систем***: система А подчиняет В (А $\to$ В), если $K_B \subset K_A$ и каждый тип решетки системы А может быть переведен в один из типов В бесконечно малой деформацией. Схема подчинения сингоний:

$$\begin{tikzcd} & D_{3d} \arrow[dr] & & & \\ O_h \arrow[ur] \arrow[r] & D_{4h} \arrow[r] & D_{2h} \arrow[r] & C_{2h} \arrow[r] & S_2 \\ & D_{6h} \arrow[ur] & & & \end{tikzcd}$$

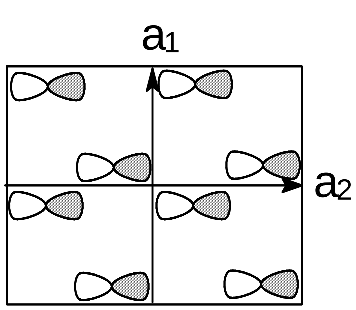
6.3 Djbkl Zeebq _dkedZbk_kGi _we_f_glZljjgZug_key

Пространственная группа сложных кристаллов может и не содержать некоторые элементы сингонии К. Так будет, если «молекула», помещенная в элементарную ячейку (или параллелепипед Бравэ), обладает симметрией ниже К. ***Кристаллическим классом*** называют подгруппу $F \subset$ К, элементы которой переводят каждое направление в кристалле в эквивалентное ему. Существует 32 кристаллических класса по числу подгрупп семи сингоний К. Они распределяются по сингониям по принципу («по одежке протягивай ножки»): F относится к К, если $F \subset$ К, но не содержится в подчиненной сингонии. Отметим, что классы сингонии D_{3d} должны быть повторены и в D_{6h}, поскольку D_{3d} не подчинено D_{6h}.

Сингонии	Классы
T, S_2	C_1, S_2
M, C_{2h}	C_2, C_s, C_{2h}
O, D_{2h}	C_{2v}, D_2, D_{2h}
Q, D_{4h}	C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_{2d}, D_4, D_{4h}
R, D_{3d}	C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}
H, D_{6h}	C_{3h}, C_6, C_{6h}, D_{3h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}
C, O_h	T, T_h, T_d, O, O_h

Кристаллический класс (группа симметрии направлений) определяет ***макроскопическую симметрию*** кристалла. В результате поворота (или зеркального поворота) $r \in F$ кристалл может и не совместиться с собой: решетка Бравэ, конечно, перейдет в себя, но «молекулы» в ячейках (эквивалентные точки) могут оказаться смещенными относительно исходных позиций, так что для совмещения кристалла поворот r необходимо дополнить «неэлементарной» трансляцией $t_{\cdot r}$.

Простой иллюстрацией ситуации является двумерный кристалл, изображенный на рисунке. Прямоугольная решетка относится к сингонии C_{2v}, но элементы группы C_2 и $\sigma^{(1)}$ (отражение относительно вертикальной линии) не входят в пространственную группу, поскольку здесь направления вправо и влево неэквивалентны. «Кристаллический класс» составляет подгруппа $(e, \sigma^{(2)})$, связывающая пары эквивалентных направлений, симметричных относительно отражения



в горизонтальной линии. Для самосовмещения кристалла после отражения необходимо совершить трансляцию на половину базисного вектора a_2.

Векторы $\cdot_r$ определены с точностью до вектора решетки, что позволяет выбрать их в виде:

$$\cdot_r = \alpha_r^1 \mathrm{a}_1 + \alpha_r^2 \mathrm{a}_2 + \alpha_r^3 \mathrm{a}_3, \qquad 0 \le \alpha_r^i < 1.$$

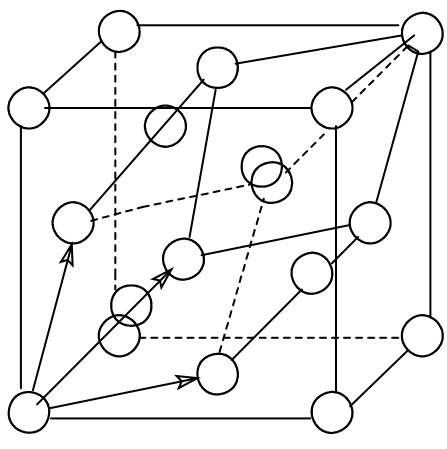
Таким образом, структура пространственной группы определяется типом решетки (базисными векторами, решеткой Бравэ), кристаллическим классом F, неэлементарными трансляциями $\cdot_r$, отвечающими каждому из элементов F.

$$\mathrm{G} = \mathrm{T} \oplus \sum_{r \ne e} t_{\cdot_r} r\, \mathrm{T}, \qquad \mathrm{G}/\mathrm{T} \infty \mathrm{F}. \tag{6.4}$$

Структура группы F накладывает определенные условия на векторы $\cdot_r$:

$$\cdot_{r_1 r_2} = \cdot_{r_1} + r_1 \cdot_{r_2} + \mathrm{a}, \qquad \mathrm{a} \in \mathrm{T}. \tag{6.5}$$

Эти условия ограничивают общее число пространственных групп до 230. Обозначаются пространственные группы символом класса F с верхним индексом, различающим тип решетки и набор неэлементарных трансляций для образующих элементов группы F. Например, C_s^1 соответствует кристаллу класса C_s с простой моноклинной решеткой и нулевой трансляцией $\alpha_\sigma = (000)$; C_s^2 – то же с трансляцией (½00); C_s^3 – кристалл класса C_s с базоцентрированной моноклинной решеткой и нулевой трансляцией α_σ, и т.д. Используются также международные обозначения – в символе решетки вращение n, сопровождаемое неэлементарной трансляцией вдоль оси вращения на $(p/n)\mathrm{a}_{||}$ (винтовое вращение; $\mathrm{a}_{||}$ – минимальный вектор решетки, направленный вдоль оси, p – целое число, $p < n$) снабжается индексом p. Плоскость скольжения обозначается буквами a, b, c, n, d вместо m в зависимости от направления неэлементарного вектора скольжения $\mathrm{a}_{||}$ по отношению к ребрам ячейки Бравэ. Так, $\mathrm{C}_\mathrm{s}^1 \equiv Pm$ (номер 6 из 230 групп), $\mathrm{C}_\mathrm{s}^2 \equiv Pb$ (7), $\mathrm{C}_2^2 \equiv P2_1$ (4), $\mathrm{C}_{2\mathrm{h}}^4 \equiv P2_1/m$ (11).



Рассмотрим подробнее пространственную группу O_h^7 ($\equiv Fd\bar{3}m$, №227); она описывает, например, структуру алмаза, изображенную на рисунке: кубическая гранецентрированная решетка (узлы помечены темными кружками) с основными векторами $\mathrm{a}_1 = (a/2)(110)$, $\mathrm{a}_2 = (a/2)(101)$, $\mathrm{a}_3 = (a/2)(011)$, a – ребро куба

Бравэ; объем элементарной ячейки $a^3/4$. В решетку вдвинута точно такая же решетка с узлами (светлые кружки), отстоящими от ближайших узлов исходной решетки на расстоянии в четверть пространственной диагонали куба [позиции $(a/4)(111)$]. Структура переходит в себя при всех преобразованиях подгруппы T_d (в качестве центральных точек можно выбрать как узлы решетки, так и центры кубов), тогда как инверсия относительно центра должна сопровождаться неэлементарной трансляцией $\alpha_I = (a/4)(111)$. Ввиду условия (6.5) ту же трансляцию мы должны приписать и остальным элементам группы O_h, входящим в смежный класс IT_d. Отметим, что можно воспользоваться соотношением (6.2) для переопределения системы векторов неэлементарных трансляций. Если, например, перенести центр на середину расстояния между узлами двух подрешеток, неэлементарная трансляция для инверсии обратится в нуль.

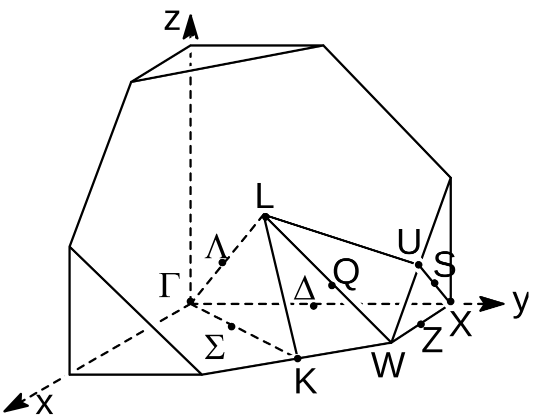
6.4 M g b l Z j g G _ l] j m i i u l j Z g k e y p

Абелева группа трансляций обладает лишь одномерными НП: $D_{\mathbf{k}}(\mathbf{a}) = \exp[-if(\mathbf{a})] = \exp[-i\mathbf{ka}]$, где вектор $\mathbf{k}$ определяется условиями $\mathbf{ka}_i = f(\mathbf{a}_i)$. Неоднозначность выбора $\mathbf{k}$: векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ соответствуют одному и тому же представлению, $D_{\mathbf{k}'} = D_{\mathbf{k}}$, если они отличаются на вектор $\mathbf{b}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{b}$, удовлетворяющий условиям $\mathbf{ba} = 2\pi m$ (m – целое) для всех $Z \in T$. Представим $\mathbf{b}$ в виде разложения по трем некомпланарным векторам: $\mathbf{b} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, где

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2. \tag{6.6}$$

Приведенные выше условия сводятся к требованию целочисленности координат (n_1, n_2, n_3) в этом базисе; векторы $\mathbf{b}$ образуют решетку, называемую ***обратной решеткой*** (по отношению к исходной решетке Бравэ). Неэквивалентные друг другу НП группы трансляций описываются векторами $\mathbf{k}$, лежащими в пределах элементарной ячейки обратной решетки.

Обычно вместо основного параллелепипеда в качестве ячейки выбирают т.н. ***зону Бриллюэна*** (первую) – совокупность векторов $\mathbf{k}$, которые нельзя укоротить добавлением какого-либо вектора обратной решетки. Для построения зон Бриллюэна «начальный» узел обратной решетки соединяют векторами со всеми другими узлами и через середину каждого вектора перпендикулярно ему проводят плоскость. Получающийся при этом внутренний многогранник и является первой зоной Бриллюэна. Аналогичное построение для прямой решетки дает т.н. ***ячейку Вигнера-Зейтца***. Очевидно, точечные симметрии обратной и прямой решетки совпадают: $K_{обр} = K$. Зона Бриллюэна обладает симметрией K (вся система векторов и плоскостей преобразованиями из K переводится в себя). Однако типы прямой и обратной решеток не обязаны совпадать; так, при обращении простой кубической решетки получается простая кубическая решетка,



гранецентрированная кубическая решетка переходит в объемноцентрированную, и наоборот. На рисунке изображена восьмая часть зоны Бриллюэна для кубических гранецентрированных кристаллов и отмечены некоторые характерные точки (в обозначениях Боукарта-Вигнера-Смолуховского). Элементарные векторы обратной решетки: $\mathrm{b}_1 = (2\pi/a)(11{-}1)$, $\mathrm{b}_2 = (2\pi/a)(1{-}11)$, $\mathrm{b}_3 = (2\pi/a)(-111)$; ребро элементарного куба $4\pi/a$. Отметим еще, что внешняя форма зоны Бриллюэна не полностью определяется типом решетки; зона может выглядеть по-разному в зависимости от степени вытянутости параллелепипедов Бравэ обратной решетки.

Каждая внутренняя точка зоны Бриллюэна отвечает вполне определенному НП группы трансляций кристаллической решетки D_{k}; в частности, центр зоны соответствует тождественному представлению $D_0(\mathrm{a}) = 1$. В этом отношении определенной особенностью обладают границы зоны, поскольку противоположные грани удалены друг от друга как раз на вектор решетки (a), и две точки k и $\mathrm{k}' = \mathrm{k} + \mathrm{a}$ на этих гранях эквивалентны друг другу в том смысле, что они отвечают одному и тому же НП: $D_{\mathrm{k}'}(\mathrm{a}) = D_{\mathrm{k}}(\mathrm{a})$. Могут оказаться эквивалентными и более чем две точки, лежащие на ребрах и вершинах многогранника, ограничивающего зону Бриллюэна.

6.5 L _ h j _ f;Zæ h o :

Теорема Блоха утверждает, что представление D_{k} группы трансляций осуществляется функцией $f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$ тогда и только тогда, когда она имеет вид:

$$f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}) = e^{i\mathrm{kr}} u_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}), \tag{6.7}$$

где $u_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$ – произвольная периодическая функция: $u_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}+\mathrm{a}) = u_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$. Действительно, если $\hat{D}(\mathrm{a}) f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}) = f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}-\mathrm{a}) = e^{-i\mathrm{ka}} f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$, то $\hat{D}(\mathrm{a}) e^{-i\mathrm{kr}} f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}) =$ $= e^{-i\mathrm{k}(\mathrm{r}-\mathrm{a})} f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r}-\mathrm{a}) = e^{-i\mathrm{kr}} f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$, т.е., функция $e^{-i\mathrm{kr}} f_{\mathrm{k}}(\mathrm{r})$ – периодическая; она преобразуется по тождественному представлению группы решеточных трансляций. Функцию (6.7) называют также ***блоховской функцией***; она является функцией симметрии для группы трансляций. В пределе, когда базисные вектора $\mathrm{a}_i \to 0$, $u(\mathrm{r}) = \mathrm{const}$, и блоховская функция становится гармонической функцией – собственной функцией оператора импульса (инфинитезимального оператора сдвига). Представление произвольной функции в виде комбинации блоховских функций является аналогом разложения в ряд Фурье.

Если гамильтониан системы обладает трансляционной симметрией, то можно стационарные состояния описывать индексом НП группы трансляций k (даже если трансляции составляют лишь часть полной группы симметрии) и представить соответствующие функции в виде блоховских функций. Как обычно, при использовании функций симметрии гамильтониан оказывается диагональным по индексу k (согласно лемме Шура), в матрице его выделяются блоки H_{k}, соответствующие каждому значению k, и дальнейшее решение уравнения Шредингера сводится к диагонализации этих блоков: $H_{\mathrm{k}} u_{n\mathrm{k}} = E_n(\mathrm{k}) u_{n\mathrm{k}}$. В одноэлектронных задачах индекс n соответствует «зонам» спектра $E_n(\mathrm{k})$, в теории нормальных колебаний решетки – «ветвям» (или модам) колебаний. В отдельных точках зоны Бриллюэна возможно вырождение «зон», связанное с более высокой, нежели чисто трансляционная, симметрией решеток.

6.6 l j _ ^ k l Z \ e _ gbyjhkljZgkl_gguoijmii

Любое неодномерное представление $g \to D(g)$ пространственной группы для подгруппы трансляций является приводимым. ***Звезда представления*** пространственной группы $D(g)$ – совокупность неэквивалентных между собой волновых векторов k («***лучей***» звезды), входящих в разложение

$$D(t_{\mathrm{a}}) = D_{\mathrm{k}_1}(\mathrm{a}) + D_{\mathrm{k}_2}(\mathrm{a}) + \ldots + D_{\mathrm{k}_s}(\mathrm{a}). \qquad (6.8)$$

Каждый луч k в этом разложении может встретиться несколько раз; пространство представления разбивается на собственные подпространства L_{k} операторов $D(t_{\mathrm{a}})$, относящиеся к собственным значениям $e^{-i\mathrm{ka}}$. Звезда представления инвариантна относительно пространственной группы:

$$D(t_{\mathrm{a}})D(g)e_{\mathrm{k}} = D(g)D(t_{g^{-1}\mathrm{a}})e_{\mathrm{k}} = e^{-i\mathrm{k}\cdot g^{-1}\mathrm{a}}D(g)e_{\mathrm{k}} = e^{-ig\mathrm{k}\cdot\mathrm{a}}D(g)e_{\mathrm{k}}, \qquad (6.9)$$

т.е., вместе с лучом k звезда содержит и луч $g\mathrm{k}$, где g – любой элемент группы (удобно считать, что любые трансляции не меняют волновые вектора, как и вектора решетки, $t\mathrm{k} = \mathrm{k}$). ***Звезда неприводимая***, если все лучи ее получаются из одного преобразованиями пространственной группы (фактически, поворотами из кристаллического класса); поэтому ее можно обозначить одним лучом, $\{\mathrm{k}\}$. ***Приводимые звезды*** расщепляются на несколько неприводимых; соответственно, пространство представления разбивается в сумму подпространств, относящихся к этим неприводимым звездам. Каждое из этих подпространств, как вытекает из (6.9), инвариантно относительно всех операторов представления. Таким образом, звезда НП – неприводима. Звезда приводимого представления также может быть неприводимой (например, если оно составлено из одинаковых НП).

Группа волнового вектора k: $G_\mathrm{k} \subset G$, $g_\mathrm{k}\,\mathrm{k} = \mathrm{k} + \mathrm{b}$. G_k содержит все трансляции Т, фактор-группа $G_\mathrm{k}/\mathrm{T} \propto F_\mathrm{k} \subset F$.

Рассмотрим представление $D(g)$ с неприводимой звездой $\{\mathrm{k}\}$. Подпространство L_k, в соответствии с (6.9), инвариантно относительно всех операторов $D(g_\mathrm{k})$, $g_\mathrm{k} \in G_\mathrm{k}$, т.е., на этом подпространстве индуцируется представление группы волнового вектора k, называемое ***малым представлением***, $D(g_\mathrm{k}) \to D^\mathrm{k}(g_\mathrm{k})$. Представление $D(g)$ может быть восстановлено по малому представлению следующим образом:

Пусть $e_1^{(1)}, e_2^{(1)}, \ldots, e_\mu^{(1)}$ – базис L_k (малого представления D^k), $\{g_j\}$ – некоторое множество элементов, порождающих звезду $\{\mathrm{k}\}$: $g_j\mathrm{k} = \mathrm{k}_j$, $j = 2,\ldots l$, l – число лучей звезды. Отметим, что пространственная группа может быть представлена в виде следующей суммы смежных классов:

$$G = G_\mathrm{k} + g_2G_\mathrm{k} + \ldots + g_lG_\mathrm{k}.$$

Исходя из базиса $\{e_\nu^{(1)}\} \subset L_\mathrm{k}$ построим систему базисных векторов всего пространства $L = L_\mathrm{k} + L_{\mathrm{k}_2} + \ldots + L_{\mathrm{k}_l}$:

$$e_1^{(j)} = D(g_j)e_1^{(1)}, \ldots, e_\mu^{(j)} = D(g_j)e_\mu^{(1)}.$$

Если $g\mathrm{k}_j = \mathrm{k}_{j'}$, то $g_{j'}^{-1}gg_j \in G_\mathrm{k}$ и $g = g_{j'}g_\mathrm{k}g_j^{-1}$. Тогда матрица $D(g)$ в выбранном нами базисе имеет вид:

$$D(g)e_\nu^{(j)} = \sum_{\nu'} D_{\nu'\nu}^\mathrm{k}(g_\mathrm{k})e_{\nu'}^{(j')}, \quad [D(g)]_{\nu'\nu}^{j'j} = D_{\nu'\nu}^\mathrm{k}(g_\mathrm{k})\delta(\mathrm{k}_{j'}, \hat{g}\mathrm{k}_j + \mathrm{b}). \qquad (6.10)$$

Построенное таким образом представление $D(g)$ унитарно, если унитарно малое представление D^k; $D(g)$ неприводимо, если неприводимо D^k. Размерность представления D равна размерности D^k, умноженной на число лучей звезды. Таким образом, *построение НП пространственных групп сводится к построению неприводимых малых представлений*.

Представления группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$ связаны с *представлениями* ее фактор-группы $F_{\mathbf{k}}$. Произвольный элемент $G_{\mathbf{k}}$ имеет вид $g_{\mathbf{k}} = t_{\alpha} r$, $r \in F_{\mathbf{k}}$, $\alpha = \alpha_r + \mathbf{a}$. Матрица $e^{i\mathbf{k}\cdot\alpha} D^{\mathbf{k}}(g_{\mathbf{k}}) = D(r)$ не зависит от вектора решетки Z и определяется лишь поворотным элементом r. Отображение $r \to D(r)$ обладает следующим свойством:

$$D(r_1 r_2) = e^{i\mathbf{k}\cdot\alpha_{12}} D^{\mathbf{k}}(g_1 g_2) = e^{i\mathbf{k}(\alpha_{12}-\alpha_1-\alpha_2)} D(r_1) D(r_2) = e^{i(r_1^{-1}\mathbf{k}-\mathbf{k})\cdot\alpha_2} D(r_1) D(r_2) \qquad (6.11)$$

(так как $\alpha_{12} = \alpha_1 + r_1\alpha_2$) и в общем случае относится к так называемым ***проективным представлениям***. Множество множителей $\omega(r_1, r_2) = \exp[i(\mathbf{k} - r_1^{-1}\mathbf{k})\cdot\alpha_2]$, отличающих рассматриваемое матричное отображение группы $F_{\mathbf{k}}$ от обычного представления, называют ***фактор-системой проективных представлений***. В теории пространственных групп она определяется звездой представлений $\{\mathbf{k}\}$ и набором неэлементарных трансляций поворотных элементов группы. Из построения видно, что малое представление группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$ и индуцированное им проективное представление группы $F_{\mathbf{k}}$ совместно являются или приводимыми, или неприводимыми. Таким образом, *поиск неприводимых представлений пространственных групп сводится к поиску неприводимых проективных представлений* 32 *точечных групп* $F_{\mathbf{k}}$.

Отметим, что множители фактор-системы в (6.11) сводятся к единице и, соответственно, проективное представление сводится к обычному представлению, если (а) все неэлементарные трансляции $\alpha(r_{\mathbf{k}})$ равны нулю; (б) имеет место точное равенство $r\mathbf{k} = \mathbf{k}$ для всех $r \in F_{\mathbf{k}}$. Последнее, в частности, справедливо для всех звезд, лучи которых являются внутренними точками зоны Бриллюэна.

Подытожим последовательность нахождения НП со звездой $\{\mathbf{k}\}$ пространственной группы G:

1) Устанавливается точечная группа симметрии $F_{\mathbf{k}} \subset F$ произвольного луча $\mathbf{k}$ звезды.

2) Определяется фактор-система $\omega(r_1, r_2)$ проективного представления группы $F_{\mathbf{k}}$,

$$\omega(r_1, r_2) = \exp[i(\mathbf{k} - r_1^{-1}\mathbf{k})\cdot\alpha_{r_2}] \qquad (6.12)$$

3) Строятся (или берутся из таблиц) матрицы неприводимых проективных представлений группы $F_{\mathbf{k}}$ с данной фактор-системой, $D^{(\beta)}(r)$.

4) Строится малое представление группы $G_{\mathbf{k}}$ по формуле

$$D^{\mathbf{k},\beta}\left(g_{\mathbf{k}} = (\mathbf{a} + \alpha_r \,|\, r)\right) = \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \alpha_r)] D^{(\beta)}(r). \qquad (6.13)$$

5) По этому малому представлению восстанавливается полное представление группы G по формуле (6.10).

6.7 Некоторые неприводимые представления группы O_h^7

Рассмотрим в качестве примеров НП группы O_h^7. Для центра зоны Бриллюэна (точка Г) $\mathbf{k} = 0$ (однолучевая звезда $\{0\}$), точечная группа луча – O_h, фактор-система, как для любой внутренней точки зоны Бриллюэна, тривиальна: $\omega(r_1, r_2) = 1$. Матрицы НП полной группы октаэдра $D^{(\alpha)}$ оказываются и матрицами НП группы O_h со звездой $\{0\}$:

$$D^{(\{0\},\,\alpha)}\left(g = (\mathbf{a} + \alpha_r \,|\, r)\right) = D^{(\alpha)}(r).$$

Всего имеется десять однозначных и шесть двузначных НП такого вида (по числу НП группы O_h).

Точка Δ на оси четвертого порядка, $\mathbf{k} = k_0(100)$, порождает шестилучевую звезду, точечная группа луча – C_{4v}; пять однозначных (из них четыре одномерных и одно двумерное) и два двузначных (двумерных) представления этой группы выступают в качестве «проективных» представлений группы $F_{\mathbf{k}}$, а после умножения их матриц на число $e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}+\alpha_r)}$ получаем малые НП группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$. Напомним, что $\alpha_r = 0$ для элементов e, C_4^2 и отражений в плоскостях, проходящих через ось x и составляющих угол $45°$ с осями y, z – эти элементы входят в T_d. Для остальных четырех элементов группы C_{4v} $\alpha_r = (a/4)(111)$. Наконец, по формулам (6.9) восстанавливаем НП группы O_h^7. При этом одномерные малые НП порождают шестимерные НП пространственной группы, а двумерные малые НП – 12-мерные.

Рассмотрим еще точку X на границе зоны Бриллюэна; для нее $\mathbf{k} = (2\pi/a)(100)$, она порождает трехлучевую звезду, точечная группа луча D_{4h}, $\alpha_r = 0$ для элементов подгруппы D_{2d}, и элементы фактор-системы $\omega(r_1, r_2) = \exp(-2i\mathbf{k}\,\alpha_r) = -1$, если r_1 относится к смежному классу IC_{4v} (для него $r_1\mathbf{k} = -\mathbf{k}$) и $r_2 \in I\,D_{2d}$ ($\alpha_{r_2} \neq 0$); для остальных пар r_1, r_2 $\omega(r_1, r_2) = 1$.

Будем искать унитарные матрицы $D(r)$ для образующих элементов группы D_{4h} – S_4, U_2, I, удовлетворяющие условиям: (1) $D(S_4)D(U_2)D(S_4)D(U_2) = E$, (2) $D^4(S_4) = E$, (3) $D^2(U_2) = E$, (4) $D^2(I) = -E$, (5) $D(S_4)D(I) = -D(I)D(S_4)$, (6) $D(U_2)D(I) = -D(I)D(U_2)$. Как видно, некоторые матрицы антикоммутируют, поэтому они не могут быть одномерными, и мы сначала рассмотрим двумерные матрицы. Используем базис, в котором $D(S_4)$ диагональна: $D(S_4) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$, тогда из (5) $D(I)=\begin{pmatrix}0 & \alpha\\ \beta & 0\end{pmatrix}$ и $a=-b$; из (2): $a=1, i$, ($-1, -i$ можно исключить перенумерацией базисных векторов), из (4) $\beta=-\alpha^{-1}$, и выбором относительной фазы базисных векторов можно преобразовать $D(I)$ к виду $\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$. Условие (6) приводит к $D(U_2)=\begin{pmatrix}c & d\\ d & -c\end{pmatrix}$, из (3): $c^2+d^2=1$; из (1): при $a=1$ $d=0$, $c=\pm1$; при $a=+i$ $c=0, d=\pm1$. Таким образом, получаются четыре различных проективных представления, исчерпывающих все неприводимые проективные представления с данной фактор-системой (ср. п. 6.9). Они порождают четыре однозначных шестимерных НП группы O_h^7 со звездой {X}. Для спинорных представлений в правых частях условий (1) – (3) E заменяется на $-E$, двумерных матриц, удовлетворяющих этим условиям, нет; существует одно четырехмерное неприводимое проективное представление нужного типа.

6.8 : i i j h d k b f Z p b j y m i i u l j Z g k e y p b c g _ q g] h m a i i h

Часто бывает удобно заменить бесконечную группу трансляций T конечной группой высокого порядка N^3 (N – очень большое целое число), используя «периодические граничные условия»: $t(N\mathbf{a}_i)=e$. Такая группа имеет конечное число (N^3) НП:

$$D_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})=e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}},\quad \mathbf{k}=k_1\mathbf{b}_1+k_2\mathbf{b}_2+k_3\mathbf{b}_3,\quad k_i=n_i/N,\quad n_i=0,1,\ldots,N-1. \tag{6.14}$$

Точки $\mathbf{k}$, отвечающие НП, равномерно распределены по зоне Бриллюэна с плотностью $N^3/|\mathbf{b}_1(\mathbf{b}_2\times\mathbf{b}_3)|=V/(2\pi)^3$, $V=N^3\Omega_0$.

В качестве приложения выведем ***критерий вещественности НП пространственных групп***, исходя из общей формулы, приведенной в задаче 2.11:

$$\frac{1}{g}\sum_g\chi(g^2)=\frac{1}{g}\sum_{gj\nu}D^{jj}_{\nu\nu}(g^2)=\frac{1}{g}\sum_{gj\nu}D^{\mathbf{k}}_{\nu\nu}(g_j^{-1}g^2g_j)\delta(\mathbf{k}_j,g^2\mathbf{k}_j+\mathbf{b})=$$
$$=\frac{l}{g}\sum_{g\nu}D^{\mathbf{k}}_{\nu\nu}(g^2)\delta(\mathbf{k},g^2\mathbf{k}+\mathbf{b})=\frac{l}{g}\sum_{\nu,\mathbf{a},h^2\in G_{\mathbf{k}}}D^{\mathbf{k}}_{\nu\nu}(t_{\mathbf{a}+h\mathbf{a}}h^2)=$$
$$=\frac{l}{g}\sum_{\nu,\mathbf{a},h^2\in G_{\mathbf{k}}}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}+h\mathbf{a})}D^{\mathbf{k}}_{\nu\nu}(h^2)=\frac{l}{g}\sum_{h^2\in G_{\mathbf{k}}}\chi^{\mathbf{k}}(h^2)N^3\delta(\mathbf{k}+\mathbf{b},-h^{-1}\mathbf{k})= \tag{6.15}$$
$$=\frac{l}{n}\sum_{h\mathbf{k}\equiv-\mathbf{k}}\chi^{\mathbf{k}}(h^2)=\begin{cases}0, & D \text{ не эквивалентно } D^*\\ 1, & D \text{ потенциально-вещественно}\\ -1, & D \text{ псевдовещественно}\end{cases}$$

Здесь l – число лучей звезы $\{\mathbf{k}\}$, n – число элементов точечной группы направлений (кристаллического класса), h – поворотные элементы группы со своими неэлементарными трансляциями.

6.9 We_f_gll_uhjbihh_dlb\güjo_^klZ\e__

Отображение $r \to D(r)$ называется ***проективным представлением***, если

$$D(r_1)D(r_2) = \omega(r_1, r_2)D(r_1 r_2), \quad |\omega(r_1, r_2)| = 1.$$

Совокупность множителей $\omega(r_1, r_2)$ называют ***фактор-системой*** проективного представления. В силу ассоциативности группового умножения выполняются соотношения:

$$\omega(r_1, r_2 r_3)\,\omega(r_2, r_3) = \omega(r_1, r_2)\,\omega(r_1 r_2, r_3).$$

р-эквивалентные представления и ***фактор-системы***:

$$D'(r) = D(r)/u(r), \quad \omega'(r_1, r_2) = \omega(r_1, r_2)\,u(r_1 r_2)/u(r_1)u(r_2),$$

где $u(r)$ – произвольные числа с $|u(r)| = 1$. Множество фактор-систем группы разбивается на классы p-эквивалентных систем; множество классов фактор-систем $\{K\}$ называют ***мультипликатором группы***. На мультипликаторе определяется операция умножения по правилу: $K_p K_q = K_q K_p = K_s$, если $\omega_p(r_1, r_2)\,\omega_q(r_1, r_2) = \omega_s(r_1, r_2) \in K_s$ (очевидно, K_s не зависит от конкретного выбора $\omega_p(r_1, r_2) \in K_p$ и $\omega_q(r_1, r_2) \in K_q$). В результате мультипликатор $\{K\}$ оказывается абелевой группой, роль единичного элемента в ней играет класс K_0 фактор-систем, p-эквивалентных системе $\omega(r_1, r_2) = 1$ (соответствующей обычным представлениям группы). Мультипликатор конечных групп содержит конечное число элементов.

Эквивалентные, приводимые и неприводимые проективные представления определяются по аналогии с соответствующими обычными представлениями. Эквивалентные (в обычном смысле) проективные представления обладают одинаковой фактор-системой. Одномерные проективные представления могут относиться только к классу K_0.

Если группа определяется ν соотношениями $a^{n_i} b^{m_i} c^{l_i} \ldots = e$, то для проективных представлений возникает ν чисел:

$$D(e) = D(a^{n_i} b^{m_i} c^{l_i} \ldots) = \alpha_i D^{n_i}(a) D^{m_i}(b) D^{l_i}(c) \ldots = E. \tag{6.16}$$

При переходе к p-эквивалентным представлениям $\alpha_i' = \alpha_i u^{n_i}(a) u^{m_i}(b) \ldots$, и подходящим выбором $u(r)$ можно часть (или все) чисел α_i' обратить в единицу. Из соотношений (6.16) получаются уравнения для определения α_i' (для точечных групп $\alpha_i'^2 = 1$). С каждой совокупностью полученных решений этих уравнений $\{\alpha_i'(p)\}$ можно связать элемент мультипликатора K_p. Структура мультипликатора устанавливается соотношениями $\alpha_i'(p)\alpha_i'(q) = \alpha_i'(s)$.

Группа представлений G' группы G определяется соотношениями

$$\alpha_i a^{n_i} b^{m_i} c^{l_i} \ldots = e, \qquad \alpha_i^2 = e, \qquad \alpha_i \alpha_j = \alpha_j \alpha_i, \qquad a\alpha_i = \alpha_i a.$$

Все элементы G' имеют вид $g' = hr$, $r \in G$. Каждое НП группы G', $g' \to D(g')$ определяет неприводимое проективное представление группы G, $r \to D(r)$:

$$r_1 r_2 = h r_3, \qquad D(r_1 r_2) = D(r_1) D(r_2) = D(h) D(r_3) = \omega_{12} D(r_3),$$

так как по лемме Шура $D(h) = \omega_{12} E$. $h \to \omega_{12}$ – представление мультипликатора $\{K\}$. Для матричных элементов проективных НП имеет место соотношение ортогональности

$$\sum_r D_{ik}^{(\mu)*}(r) D_{jl}^{(\mu')}(r) = \frac{g}{n_\mu} \delta_{\mu\mu'} \delta_{ij} \delta_{kl}.$$

Для НП, относящихся к одной фактор-системе, справедливо соотношение Бернсайда $\sum_\alpha n_\alpha^2 = g$.

6.10 F Z] g b l g ub_p \ _ l g u]_j m i i u

Немагнитные кристаллы помимо пространственной симметрии обладают симметрией относительно обращения времени, и полная группа симметрии их $G_\theta = G \times \theta$, где G – пространственная группа, а θ – двухэлементная группа, включающая обращение времени θ. «Представления» этой группы при учете обращения времени ($\theta \neq 1$), как отмечалось в разделе 5, являются ***копредставлениями*** ввиду антиунитарности оператора $\hat{\theta}$.

Обращение времени меняет направление токов (и намагниченностей), поэтому θ не входит в группу симметрии магнитных кристаллов. При возникновении спонтанной намагниченности могут теряться и некоторые элементы пространственной симметрии кристаллов. Так, если кристалл тетрагональной симметрии D_{4h} намагничивается вдоль оси четвертого порядка, то из группы симметрии выпадают ряд отражений, повороты U_2 на π около осей второго порядка, перпендикулярных главной оси и т.п. Однако произведения этих элементов на θ являются элементами симметрии ферромагнитного кристалла, т.е., группой симметрии оказывается некоторая подгруппа G_θ, содержащая подгруппу пространственных преобразований $G' \subset G$ и произведения остальных элементов из

G на θ. Подобные подгруппы группы G_θ, описывающие симметрию магнитных кристаллов, называют ***магнитными группами*** (или ***группами антисимметрии***, ***черно-белыми группами***). Магнитную группу можно представить в виде суммы $G'_\theta = G' + \{r\theta\}$, где $r \notin G'$, и, имея в виду, что $g'r\theta \in \{r\theta\}$, а $r_1\theta r_2\theta \in G'$, убеждаемся, что оба множества, G' и $\{r\theta\}$, содержат одинаковое число элементов; G' является подгруппой индекса два как в G'_θ, так и в G. В принципе это замечание позволяет построить все магнитные группы.

Для построения ***точечных магнитных групп*** заметим, что 32 кристаллических класса имеют 58 различных подгрупп индекса два. Дополняя смежные классы этих подгрупп операцией θ и добавляя результат к подгруппам, получаем 58 специфических точечных магнитных групп.

Магнитные группы допускают дальнейшие обобщения. Можно, например, рассмотреть свойства решетки, принимающие не два, а более значений (цветов), что приводит к понятию ***цветных групп***. Рассматриваются также несколько различных свойств, каждое из которых принимает два значения.

A Z ^ Z q j b Z a ^ _ 6e m

1. Показать, что каждый элемент типа $t_a R(n,\varphi)$ с $\varphi \neq 0$ является винтовым поворотом. Найти соответствующую винтовую ось.
2. Показать, что элемент типа $t_a S(n,\varphi)$, $\varphi \neq 0$ представляет собой некоторый зеркальный поворот.
3. Как связаны между собой точечные преобразования r_O и $r_{O'}$, оставляющие неподвижными точки O и O', соответственно? Что представляет собой элемент $t_a I_O$?
4. Несколькими способами выбрать элементарную ячейку двумерной решетки.
5. Доказать, что объем элементарной ячейки не зависит от выбора базисных векторов.
6. Показать, что совокупность точечных операций симметрии решетки Бравэ, неподвижная точка которых находится в междоузлии, является подгруппой точечной группы симметрии решетки.
7. Проверить утверждение о наличии плоскости симметрии σ_v для группы K, содержащей ось C_n с $n = 3, 4, 6$.
8. Какова схема подчинения двумерных сингоний? Описать деформации, вызывающие соответствующее понижение симметрии.

9. Проследить за изменением типов решеток при деформациях, вызывающих следующее понижение симметрии: $O_h \to D_{4h} \to D_{2h}$.
10. Найти всевозможные структуры пространственных групп моноклинной сингонии.
11. Построить обратные решетки для плоских кристаллов.
12. Построить зоны Бриллюэна для плоских кристаллов.
13. Показать, что группы волновых векторов, входящих в одну звезду, сопряжены друг другу.
14. Показать, что разложение приводимых представлений пространственных групп сводится к разложению малых представлений.
15. Если $\{e_i\}$ – базис малого представления D^{k}, то $\{D(g_j)e_i\}$ – базис малого представления D^{k_j}, где $\mathrm{k}_j = g_j\mathrm{k}$. Доказать.
16. Пусть D и D' – НП пространственной группы со звездами $\{\mathrm{k}\}$ и $\{\mathrm{k}'\}$. Что представляют собой звезды представлений $D \times D'$, D^2, D^*?
17. Показать, что все одномерные представления проективно-эквивалентны тождественному.
18. Найти неприводимые проективные представления группы $C_{n\mathrm{h}}$, n = 2, 3, 4, 6.
19. Рассматривая группу трансляций кристалла как конечную группу (при периодических граничных условиях), написать соотношения ортогональности для характеров НП.
20. Найти все плоские двухцветные точечные группы.

E B L ? J : L M J :

H k g h \ g Z y

Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике: курс лекций для физиков-теоретиков. М.: URSS, Ленанд, 2014. 360 с.

Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. Изд. 3-е. М.: Либроком, 2010. 584 с.

Наймарк М. А. Теория представлений групп. Изд. 2-е. М.: Физматлит, 2010. 572 с.

Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. Т. 1, 2. М.: Мир, 1983.

Вигнер Е. Теория групп и ее приложения к квантомеханической теории атомных спектров. М.: ИИЛ, 1961. 444 с.

> h i h e g b l _ e v g Z y

Абрагам А., Блини Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных металлов. Т. 2. М.: Мир, 1973. 351 с.

Барут А., Рончка Р. Теория представлений групп и ее приложения. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.

Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.

Вейль Г. Теория групп и квантовая механика. М.: Наука, 1986. 496 с.

Вейль Г. Симметрия. М.: Наука, 1968. 192 с.

Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я. Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. М.: Физматгиз, Москва, 1958. 367 с.

Горенстейн Д. Конечные простые группы (введение в их классификацию). М.: Мир, 1985. 352 с.

Изюмов Ю. А., Сыромятников В. Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 245 с.

Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.

Каргаполов М. И., Мерзляков Ю. И. Основы теории групп. Изд. 5-е. СПб.: Лань, 2009. 288 с.

Курош А. Г. Теория групп. Изд. 4-е. СПб.: Лань, 2005. 648 с.

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. Изд. 5-е. М.: Физматлит, 2007. 264 с.

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Изд. 6-е. М.: Физматлит, 2008. 800 с.

Ляпин Е. С., Айзенштат А. Я., Лесохин М. М. Упражнения по теории групп. Изд. 2-е. СПб.: Лань, 2010. 272 с.

Най Дж. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. М.: Мир, 1967. 388 с.

Нокс Р., Голд А. Симметрия в твердом теле. М.: Наука, 1970. 424 с.

Ijbeh`_gb_ 1

Kn_jbq_k]dZbj_fhgbdbjy^dl 1\–6

$$P_{lm}(x,y,z) \equiv \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, r^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$l = 1$: $P_{10} = z, \quad P_{1\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{1}{2}}(x \pm iy);$

$l = 2$: $P_{20} = \tfrac{1}{2}(3z^2 - r^2), \quad P_{2\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{3}{2}}z(x \pm iy), \quad P_{2\pm2} = \sqrt{\tfrac{3}{8}}(x \pm iy)^2;$

$l = 3$: $P_{30} = \tfrac{1}{2}z(5z^2 - 3r^2), \quad P_{3\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x \pm iy),$

$P_{3\pm2} = \sqrt{\tfrac{15}{8}}z(x \pm iy)^2 = \sqrt{\tfrac{15}{8}}z[(x^2 - y^2) \pm 2ixy],$

$P_{3\pm3} = \mp\sqrt{\tfrac{5}{16}}(x \pm iy)^3 = \mp\sqrt{\tfrac{5}{16}}[(x^3 - 3xy^2) \pm i(3x^2y - y^3)];$

$l = 4$: $P_{40} = \tfrac{1}{8}(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4), \quad P_{4\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{5}{16}}z(7z^2 - 3r^2)(x \pm iy),$

$P_{4\pm2} = \sqrt{\tfrac{5}{32}}(7z^2 - r^2)(x \pm iy)^2, \quad P_{4\pm3} = \mp\sqrt{\tfrac{35}{16}}z(x \pm iy)^3,$

$P_{4\pm4} = \sqrt{\tfrac{35}{128}}(x \pm iy)^4 = \sqrt{\tfrac{35}{128}}[(x^4 - 6x^2y^2 + y^4) \pm 4ixy(x^2 - y^2)];$

$l = 5$: $P_{50} = \tfrac{1}{8}z(63z^4 - 70z^2r^2 + 15r^4),$

$P_{5\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{15}{128}}(21z^4 - 14z^2r^2 + r^4)(x \pm iy), \quad P_{5\pm2} = \sqrt{\tfrac{105}{32}}z(3z^2 - r^2)(x \pm iy)^2,$

$P_{5\pm3} = \mp\sqrt{\tfrac{35}{256}}(9z^2 - r^2)(x \pm iy)^3, \quad P_{5\pm4} = \sqrt{\tfrac{315}{128}}z(x \pm iy)^4,$

$P_{5\pm5} = \mp\sqrt{\tfrac{63}{256}}(x \pm iy)^5 = \mp\sqrt{\tfrac{63}{256}}[(x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4) \pm$

$\pm i(5x^4y - 10x^2y^3 + y^5)];$

$l = 6$: $P_{60} = \tfrac{1}{16}(231z^6 - 315z^4r^2 + 105z^2r^4 - 5r^6,$

$P_{6\pm1} = \mp\sqrt{\tfrac{21}{128}}z(33z^4 - 30z^2r^2 + 5r^4)(x \pm iy),$

$P_{6\pm2} = \sqrt{\tfrac{105}{1024}}(33z^4 - 18z^2r^2 + r^4)(x \pm iy)^2,$

$P_{6\pm3} = \mp\sqrt{\tfrac{105}{256}}z(11z^2 - 3r^2)(x \pm iy)^3$

$P_{6\pm4} = \sqrt{\tfrac{63}{512}}(11z^2 - r^2)(x \pm iy)^4, \quad P_{6\pm5} = \mp\sqrt{\tfrac{693}{256}}z(x \pm iy)^5,$

$P_{6\pm6} = \sqrt{\tfrac{231}{1024}}(x \pm iy)^6 = \sqrt{\tfrac{231}{1024}}[(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6) \pm$

$\pm 5ixy(x^4 - 4x^2y^2 + y^4)]$

Ijbeh`_gb_ 2

Kij Z\hqgu_ Zggu_ h]jmii_ hdlZw^jZ_ dkZ]hgZeygh c_

Группы O_h и D_{6h} вместе со своими подгруппами охватывают все 32 кристаллических класса. В таблице 1 приводится список элементов группы O_h, причем элементы в смежных классах по инвариантным подгруппам расставлены в порядке, соответствующем перечислению элементов в этих подгруппах (ср. Ковалев, 1986). По принятой нумерации первые четыре элемента составляют инвариантную подгруппу D_2, первые 12 элементов - подгруппу T; результату умножения i-го элемента на инверсию приписывается номер $i + 24$. Таким образом, подгруппу T_d образуют элементы 1–12 и 37–48. Для обозначения поворотов около осей n-го порядка вместо C_n использовано упрощенное обозначение n_j, где нижний индекс j различает однотипные оси; ось поворота указана в третьей колонке координатами простейшего вектора, направленного вдоль этой оси. В четвертой колонке указаны координаты вектора $C_n\mathbf{r}$. В пятой колонке приведены углы Эйлера поворота (используется определение углов Эйлера, приведенное в §3.2). В шестой колонке указаны первые строчки «матриц-поворотов» $D^{(1/2)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$: (α, β) (параметры Кэли-Клейна); вся матрица выглядит как $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}$. При этом мы изменили знаки матриц для элементов 2, 7, 10, 11, 12 и 19 (отмечены в таблице точками), что позволяет сохранить в одном классе сопряженных элементов матрицы, обозначенные как повороты на одинаковые углы, ({3}, {3^2}, {4}, {4^3}), и, кроме того, сохранить смысл степеней в этих обозначениях. Инверсия обозначена как I, отражения в плоскостях – m, зеркальные повороты S_6, S_4 как инверсионные повороты $\overline{3^2}$, $\overline{4^3} \equiv \overline{4}^3$, соответственно. Плоскость отражения инверсионного поворота перпендикулярна оси вращения, указанной в третьей колонке.

Двойная группа октаэдра получается добавлением к матрицам $D^{(1/2)}(\alpha, \beta)$ из шестой колонки списка матриц $-D^{(1/2)}(\alpha, \beta)$, которые нумеруются индексами 1* – 24*, фигурирующими в таблице умножения. Эта двойная группа является простейшим двузначным НП группы поворотов октаэдра.

Таблицы 2 и 6 фактически являются таблицами умножения соответствующих двойных групп. Если $ab = c^*$, то, очевидно, $ab^* = a^*b = c$, $a^*b^* = c^*$.

L Z [e b p Z 1. W e _ f _ g l u] j m i i u h d l Z w ^ j Z

№	C	ось	Cr	$(\varphi_1\ \theta\ \varphi_2)$	$(\alpha\ \beta)$	CI
1	e		$(x\ y\ z)$	$(0\ 0\ 0)$	$(1\ 0)$	I
2	4_1^2	[1 0 0]	$(x\ -y\ -z)$	$(\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ -i)$•	m_1
3	4_2^2	[0 1 0]	$(-x\ y\ -z)$	$(0\ \pi\ 0)$	$(0\ -1)$	m_2
4	4_3^2	[0 0 1]	$(-x\ -y\ z)$	$(\pi\ 0\ 0)$	$(-i\ 0)$	m_3
5	3_1^2	[1 1 1]	$(y\ z\ x)$	$(\tfrac12\pi\ \tfrac12\pi\ \pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-\sigma\ -\sigma)$	$\bar{3}_1^2$
6	3_2^2	[–1 –1 1]	$(y\ -z\ -x)$	$(\tfrac32\pi\ \tfrac12\pi\ 0)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-\sigma\ \sigma)$	$\bar{3}_2^2$
7	3_3^2	[1 –1 –1]	$(-y\ z\ -x)$	$(\tfrac12\pi\ \tfrac12\pi\ 0)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-\sigma^*\ \sigma^*)$•	$\bar{3}_3^2$
8	3_4^2	[–1 1 –1]	$(-y\ -z\ x)$	$(\tfrac32\pi\ \tfrac12\pi\ \pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-\sigma^*\ -\sigma^*)$	$\bar{3}_4^2$
9	3_1	[1 1 1]	$(z\ x\ y)$	$(0\ \tfrac12\pi\ \tfrac12\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(\sigma^*\ -\sigma)$	$\bar{3}_1$
10	3_4	[–1 1 –1]	$(z\ -x\ -y)$	$(0\ \tfrac12\pi\ \tfrac32\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(\sigma\ -\sigma^*)$•	$\bar{3}_4$
11	3_2	[–1 –1 1]	$(-z\ x\ -y)$	$(\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac32\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(\sigma^*\ \sigma)$•	$\bar{3}_2$
12	3_3	[1 –1 –1]	$(-z\ -x\ y)$	$(\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac12\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(\sigma\ \sigma^*)$•	$\bar{3}_3$
13	2_2	[1 –1 0]	$(-y\ -x\ -z)$	$(\tfrac12\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ -\sigma^*)$	m_5
14	4_3	[0 0 1]	$(-y\ x\ z)$	$(\tfrac12\pi\ 0\ 0)$	$(\sigma^*\ 0)$	$\bar{4}_3$
15	4_3^3	[0 0 1]	$(y\ -x\ z)$	$(\tfrac32\pi\ 0\ 0)$	$(-\sigma\ 0)$	$\bar{4}_3^3$
16	2_1	[1 1 0]	$(y\ x\ -z)$	$(0\ \pi\ \tfrac12\pi)$	$(0\ -\sigma)$	m_4
17	2_6	[0 1 –1]	$(-x\ -z\ -y)$	$(\tfrac32\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac32\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(i\ -1)$	m_9
18	2_5	[0 1 1]	$(-x\ z\ y)$	$(\tfrac12\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac12\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-i\ -1)$	m_8
19	4_1	[1 0 0]	$(x\ -z\ y)$	$(\tfrac32\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac12\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(1\ -i)$•	$\bar{4}_1$
20	4_1^3	[1 0 0]	$(x\ z\ -y)$	$(\tfrac12\pi\ \tfrac12\pi\ \tfrac32\pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-1\ -i)$	$\bar{4}_1^3$
21	2_4	[1 0 –1]	$(-z\ -y\ -x)$	$(\pi\ \tfrac12\pi\ 0)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-i\ i)$	m_7
22	4_2^3	[0 1 0]	$(-z\ y\ x)$	$(\pi\ \tfrac12\pi\ \pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-1\ -1)$	$\bar{4}_2^3$
23	2_3	[1 0 1]	$(z\ -y\ x)$	$(0\ \tfrac12\pi\ \pi)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(-i\ -i)$	m_6
24	4_2	[0 1 0]	$(z\ y\ -x)$	$(0\ \tfrac12\pi\ 0)$	$\sqrt{\tfrac12}\,(1\ -1)$	$\bar{4}_2$

Здесь $\sigma = e^{i\pi/4} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1+i),\ \ \sigma^{-1} = \sigma^*,\ \ \sigma^2 = i.$

LZ[ebpZ 2. LZ[ebpZ mfgh`_gby \hjhlh]jmiiu hdlZw^jZ

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	1*	4	3*	6	5*	8	7*	10*	9	12	11*
3	4*	1*	2	7	8*	5*	6	11*	12*	9	10
4	3	2*	1*	8	7	6*	5*	12*	11	10*	9
5	8	6	7	9*	12	10	11	1*	4	2	3
6	7*	5*	8	10	11*	9	12	2*	3*	1*	4
7	6	8*	5*	11	10	12*	9	3*	2	4*	1*
8	5*	7	6*	12	9	11	10*	4*	1*	3	2*
9	11*	12*	10*	1*	3*	4*	2*	5	7*	8*	6*
10	12	11*	9	2	4	3*	1*	6*	8	7*	5*
11	9	10	12*	3	1*	2	4*	7*	5*	6	8*
12	10*	9	11	4	2*	1*	3	8*	6*	5*	7
13	15*	14*	16	21*	23	22*	24*	17	19*	18	20*
14	16	13	15	22	24*	21*	23*	18	20*	17*	19
15	13	16*	14*	23*	21*	24	22*	19*	17*	20	18
16	14*	15	13*	24*	22*	23	21	20	18	19	17
17	18*	20	19	13*	14	16*	15	21*	22	24	23*
18	17	19*	20	14*	13*	15*	16*	22	21	23	24
19	20	18	17*	15	16*	14*	13	23	24	22*	21*
20	19*	17*	18*	16*	15*	13	14	24*	23	21*	22
21	24	23*	22	17	20	19	18*	13	16*	15	14
22	23*	24*	21*	18*	19	20*	17*	14*	15	16	13
23	22	21	24*	19*	18*	17	20*	15	14	13*	16
24	21*	22	23	20	17*	18*	19*	16	13	14	15*

1	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
2	14	13*	16*	15*	18	17*	20	19*	22*	21	24*	23
3	15	16	13*	14*	19*	20	17*	18*	23	24*	21*	22
4	16*	15	14*	13	20*	19*	18	17	24*	23*	22	21
5	17*	20	18*	19*	21	24*	22	23*	13*	16*	14*	15
6	18*	19*	17	20*	22*	23*	21	24	14*	15*	13	16*
7	19	18*	20*	17*	23	22*	24*	21	15*	14	16*	13*
8	20	17	19	18*	24*	21*	23*	22*	16	13*	15*	14*
9	21	23	24*	22	13	15	16	14*	17*	19*	20	18
10	22	24	23	21*	14*	16	15*	13*	18	20	19	17
11	23*	21	22	24	15*	13	14	16	19*	17	18	20*
12	24	22*	21	23	16	14	13*	15	20*	18	17*	19
13	1*	3	2	4*	9*	11*	10	12	5	7	6*	8
14	2*	4	1*	3	10	12*	9	11*	6	8	5	7*
15	3*	1*	4*	2*	11	9*	12*	10	7	5*	8	6
16	4	2	3*	1*	12*	10*	11*	9*	8*	6	7	5
17	5	6*	8*	7	1*	2	4*	3*	9	10*	12	11*
18	6	5	7	8	2*	1*	3	4*	10*	9*	11*	12*
19	7*	8*	6	5	3	4	2	1*	11	12*	10*	9
20	8*	7	5*	6	4	3*	1*	2*	12	11	9*	10*
21	9*	12*	11*	10	5*	8	7*	6*	1*	4*	3	2*
22	10*	11*	12	9*	6	7	8	5*	2	3*	4*	1*
23	11	10*	9*	12*	7*	6	5	8	3*	2*	1*	4
24	12*	9	10*	11*	8	5	6*	7	4	1*	2	3

LZ[eb p3. ZOZjZdl_ Gu I]jmiiuhdlZw^jZ

O	E	$8\,C_3$	$3\,C_4^2$	$6\,C_4$	$6\,U_2$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	–1	–1
Γ_3	2	–1	2	0	0
Γ_4	3	0	–1	1	–1
Γ_5	3	0	–1	–1	1

Двузначные НП (нечетные НП двойной группы октаэдра)

o	e	e^*	$3, 3^{2*}$	$3^2, 3^*$	$4^2, 4^{2*}$	$4, 4^{3*}$	$4^3, 4^*$	$2, 2^*$
Γ_6	2	–2	1	–1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	–2	1	–1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	4	–4	–1	1	0	0	0	0

FZljbpu GI]jmiiuhdlZw^jZ

Двумерное НП Γ_3 можно построить на функциях $3z^2 - r^2$, $\sqrt{3}(x^2 - y^2)$ (в кубических осях). Соответствующие матрицы:

$$(e, 4_1^2, 4_2^2, 4_3^2) \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad (3_1^2, 3_2^2, 3_3^2, 3_4^2) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix},$$

$$(3_1, 3_2, 3_3, 3_4) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \qquad (2_2, 4_3, 4_3^3, 2_1) \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(2_6, 2_5, 4_1, 4_1^3) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}, \qquad (2_4, 4_2^3, 2_3, 4_2) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что эти матрицы осуществляют точное представление группы D_3, изоморфной фактор-группе O/D_2.

Выпишем еще вещественные матрицы НП Γ_4 (см. следующую таблицу 4); их можно получить подстановкой углов Эйлера из таблицы 1 в формулу (3.3), т.е., это матрицы, построенные на функциях x, y, z. Матрицы НП Γ_5 получаются умножением последних двенадцати матриц НП Γ_4 на (–1).

LZ[ebpZ 4.2 FZljbpu GI =4]jmiiu hdlZw^jZ

4_1^2	4_2^2	4_3^2	3_1^2	3_2^2
$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix}$

3_3^2	3_4^2	3_1	3_4	3_2
$\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$

3_3	2_2	4_3	4_3^3	2_1
$\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$

2_6	2_5	4_1	4_1^3	2_4
$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$

4_2^3	2_3	4_2
$\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$

Комплексные матрицы НП Γ_4 (а вместе с ними и матрицы НП Γ_5) можно получить подстановкой соответствующих параметров Кэли-Клейна в следующую матрицу:

$$\hat{D}^{(1)}(\alpha,\beta)=\begin{pmatrix}\alpha^2 & \sqrt{2}\alpha\beta & \beta^2\\ -\sqrt{2}\alpha\beta^* & |\alpha|^2-|\beta|^2 & \sqrt{2}\alpha^*\beta\\ \beta^{*2} & -\sqrt{2}\alpha^*\beta^* & \alpha^{*2}\end{pmatrix}.$$

Матрицы двузначного представления Γ_6 – это «матрицы-повороты», приведенные в шестой колонке таблицы 1 своей первой строчкой; фактически это двойная группа октаэдра. Представление Γ_7 получается отсюда умножением элементов 13 – 24 на (–1). Наконец, матрицы НП Γ_8 можно получить подстановкой соответствующих параметров (α, β) в матрицу:

$$\hat{D}^{(3/2)}(\alpha,\beta)=\begin{pmatrix} \alpha^3 & \sqrt{3}\alpha^2\beta & \sqrt{3}\alpha\beta^2 & \beta^3 \\ -\sqrt{3}\alpha^2\beta^* & \alpha(1-3|\beta|^2) & -\beta(1-3|\alpha|^2) & \sqrt{3}\alpha^*\beta^2 \\ \sqrt{3}\alpha\beta^{*2} & \beta^*(1-3|\alpha|^2) & \alpha^*(1-3|\beta|^2) & \sqrt{3}\alpha^{*2}\beta \\ -\beta^{*3} & \sqrt{3}\alpha^*\beta^{*2} & -\sqrt{3}\alpha^{*2}\beta^* & \alpha^{*3} \end{pmatrix}.$$

l _ j _ o h^ l l _ l j Z] h g Z e v g u o d l j b] h g Z e v g u f

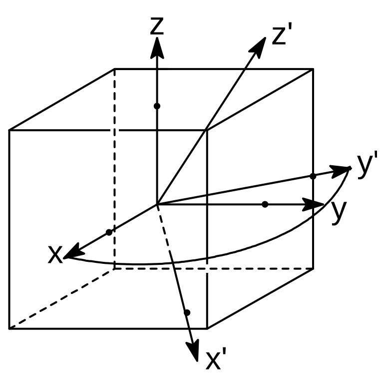
Переход от системы координат, в которой оси x, y, z ориентированы вдоль осей четвертого порядка куба к тригональной системе, в которой ось z направлена вдоль оси третьего порядка [111] (см. рис.), осуществляется поворотом с углами Эйлера $(\pi/4, \arctan\sqrt{2}, 0)$. Отметим, что $\arctan\sqrt{2} = \arccos(1/\sqrt{3}) = \arcsin\sqrt{2/3} \approx 54^\circ 44'$. Матрица перехода ($S$) следующая:

$$(\mathbf{e}_{x'}, \mathbf{e}_{y'}, \mathbf{e}_{z'}) = (\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix},$$

Соответствующая «матрица-поворот»:

$$\hat{s}=\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}+\frac{1}{2\sqrt{3}}}\,e^{-i\pi/8} & -\sqrt{\frac{1}{2}-\frac{1}{2\sqrt{3}}}\,e^{-i\pi/8} \\ \sqrt{\frac{1}{2}-\frac{1}{2\sqrt{3}}}\,e^{i\pi/8} & \sqrt{\frac{1}{2}+\frac{1}{2\sqrt{3}}}\,e^{i\pi/8} \end{pmatrix}.$$

Матрицы операторов в тригональных осях, D', связаны с матрицами в тетрагональных осях, D, соотношением $D' = S^{-1}DS$.

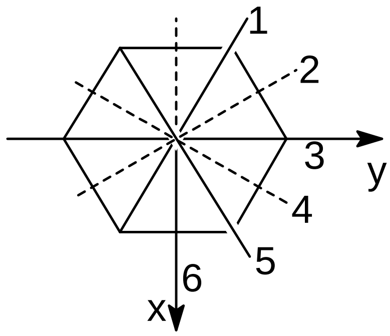


L Z [e b p Z 5. W e _ f _ g] l j u m i i u D_{6h}

№	C	ось	$(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$	(α, β)	CI
1	e	[0 0 1]	(0 0 0)	(1 0)	I
2	6	[0 0 1]	$(\frac{1}{3}\pi\ 0\ 0)$	$(\nu^*\ 0)$	$\bar{6}$
3	6^2	[0 0 1]	$(\frac{2}{3}\pi\ 0\ 0)$	$(\nu^{*2}\ 0)$	$\bar{3}$
4	6^3	[0 0 1]	$(\pi\ 0\ 0)$	$(-i\ 0)$	$\bar{2} \equiv m$
5	6^4	[0 0 1]	$(\frac{4}{3}\pi\ 0\ 0)$	$(-\nu^2\ 0)$	$\overline{3^2}$
6	6^5	[0 0 1]	$(\frac{5}{3}\pi\ 0\ 0)$	$(-\nu\ 0)$	$\bar{6}^5$
7	2_3	[0 1 0]	$(0\ \pi\ 0)$	(0 –1)	m_3
8	2_2	$[-1\ \sqrt{3}\ \ 0]$	$(\frac{1}{3}\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ -\nu^*)$	m_2
9	2_1	$[\sqrt{3}\ -1\ 0]$	$(\frac{2}{3}\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ -\nu^{*2})$	m_1
10	2_6	[1 0 0]	$(\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ i)$	m_6
11	2_5	$[\sqrt{3}\ \ 1\ 0]$	$(\frac{4}{3}\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ \nu^2)$	m_5
12	2_4	$[1\ \sqrt{3}\ \ 0]$	$(\frac{5}{3}\pi\ \pi\ 0)$	$(0\ \nu)$	m_4

Здесь $\nu = e^{i\pi/6} = \dfrac{1}{2}(\sqrt{3}+i)$, $\nu^2 = \dfrac{1}{2}(1+i\sqrt{3})$, $\nu^{-1} = \nu^*$, $\nu^3 = i$.

На рисунке указано расположение осей второго порядка:



LZ[ebpZ 6. LZ[ebpZ mfgh`_gby hjhlh]jmiiu D_6

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	3	4	5	6	1*	8	9	10	11	12	7*
3	4	5	6	1*	2*	9	10	11	12	7*	8*
4	5	6	1*	2*	3*	10	11	12	7*	8*	9*
5	6	1*	2*	3*	4*	11	12	7*	8*	9*	10*
6	1*	2*	3*	4*	5*	12	7*	8*	9*	10*	11*
7	12*	11*	10*	9*	8*	1*	6	5	4	3	2
8	7	12*	11*	10*	9*	2*	1*	6	5	4	3
9	8	7	12*	11*	10*	3*	2*	1*	6	5	4
10	9	8	7	12*	11*	4*	3*	2*	1*	6	5
11	10	9	8	7	12*	5*	4*	3*	2*	1*	6
12	11	10	9	8	7	6*	5*	4*	3*	2*	1*

LZ[ebpZ 7. OZjZdl_jGul]jmiiu D_6

D_6	E	$2C_6$	$2C_6^2$	C_6^3	$3U_2$	$3U_2'$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	–1	–1
Γ_3	1	–1	1	–1	1	–1
Γ_4	1	–1	1	–1	–1	1
Γ_5	2	1	–1	–2	0	0
Γ_6	2	–1	–1	2	0	0

Двузначные НП (*нечетные НП двойной гексагональной группы*)

d_6	e	e^*	$6, 6^{5*}$	$6^*, 6^5$	$3, 3^{2*}$	$3^*, 3^2$	$6^3, 6^{3*}$	$2, 2^*$	$2', 2'^*$
Γ_7	2	–2	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	1	–1	0	0	0
Γ_8	2	–2	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	1	–1	0	0	0
Γ_9	2	–2	0	0	–2	2	0	0	0

F Z l j b p u G I] j m i i u D_6

$$\Gamma_6:\quad (e,\,6^3)\to\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad (6,\,6^4)\to\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},\quad (6^2,\,6^5)\to\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},$$

$$(2_3,\,2_6)\to\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad (2_2,\,2_5)\to\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&1\end{pmatrix},\quad (2_1,\,2_4)\to\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}\\\sqrt{3}&1\end{pmatrix}.$$

Знаки матриц, отвечающих элементам $2_1 - 2_6$, можно изменить, ибо $\Gamma_6 \times \Gamma_2 = \Gamma_6$. Матрицы НП Γ_5 получаются отсюда изменением знака матриц элементов 6^3, 6, 6^5, 2_3, 2_1, 2_5.

Матрицы НП Γ_7 – это двойная группа для D_6; они указаны в пятой колонке списка группы. Матрицы НП Γ_8 можно получить из матриц НП Γ_7, если учесть, что $\Gamma_8 = \Gamma_7 \times \Gamma_3$ (или $\Gamma_7 \times \Gamma_4$).

Матрицы НП Γ_9:

$$(e,\,3^2)\to\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad 3\to\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad (6,\,6^5)\to\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix},\quad 6^3\to\begin{pmatrix}-i&0\\0&i\end{pmatrix},$$

$$(2_3,\,2_5)\to\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix},\quad (2_2,\,2_4)\to\begin{pmatrix}0&-i\\-i&0\end{pmatrix},\quad 2_1\to\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\quad 2_6\to\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}.$$

G _ d h l h j u h_] j m i i u j m i O_h b D_{6h}

O_h: $D_{4h}(z)$ – 1, 2, 3, 4, 13, 14, 15, 16 и номера $(i + 24)$;
$D_{2d}(z)$ – 1, 2, 3, 4, 37, 38, 39, 40;
D_{2h} – 1, 2, 3, 4, 25, 26, 27, 28;
$D_{3d}(111)$ – 1, 5, 9, 13, 17, 21 и $(i + 24)$;
$C_{3v}(z')$ – 1, 5, 9, 37, 41, 45.

D_{6h}: D_{3d} – 1, 3, 5, 7, 9, 11 и $(i + 12)$;
C_{3v} – 1, 3, 5, 19, 21, 23;
D_{2h} – 1, 4, 7, 10, 13, 16, 19, 22.

H I _ I ub m d Z a Z gjb_yr _ g b yaf Z ^ Z q

J Z a ^1_ e

1. а, б – да, с – нет.
5. $(ab)^2 = abab = e$. Умножить справа на a, потом на b.
6. e.
7. Рассмотреть две возможности: имеются элементы бесконечного порядка; таких элементов нет.
9. $xy = y^{-1}(yx)y$.
10. Разложить группу на смежные классы по нормализатору. Учесть, что элементы bab^{-1} одинаковы для всех b, принадлежащих одному классу.
13. Да, например, C_3.
15. Порядок группы $n = k_1 + k_2 + \ldots + k_r$, где k_i – число элементов i-го класса. Собирая слагаемые с $k_i = 1$, имеем $n = c + k_k + \ldots + k_r$, где c – порядок центра. Если c делится на p, то элемент порядка p содержится в центре; если нет, то на p не делится и какое-то из $k_i \neq 1$, но тогда на p делится порядок нормализатора элементов i-го класса, т.е., порядок подгруппы. Далее – по индукции.
16. Например, $C_3 \leftrightarrow C_3^2$ в группе C_3.
20. Противное означало бы: $G = Z + aZ + a^2Z + \ldots$, т.е., любой элемент G имел бы вид $a^n z$, и группа оказалась бы коммутативной.
21. Нет.
22. Порядок элемента (a, b), где a и b – образующие групп Z_1 и Z_2, оказывается равным пордку группы $Z_1 \times Z_2$.
23. 5 структур: 1) циклическая (типа C_8), 2) абелева, все элементы второго порядка (D_{2h}), 3) абелева, есть элемент четвертого порядка (C_{4h}), 4) неабелева, $G = \{a\} + b\{a\}$, $a^4 = e$, $b^2 = e$ (D_4), 5) неабелева, $G = \{a\} + b\{a\}$, $a^4 = e$, но $b^2 = a^2$ (кватернионы).
24. Достаточно заметить, что любой цикл $(12..p) = (1p)(1, p-1)\ldots(13)(12)$.
25. Все степени указанного цикла.
27. Каждый цикл длины l распадается на l–1 транспозицию, а общее число транспозиций $(l_1 - 1) + (l_2 - 1) + \ldots + (l_m - 1) = (l_1 + l_2 + \ldots + l_m) - m = n - m$.
28. Из указанных транспозиций можно получить любую другую, например, $(24) = (34)(23)(34)$; вообще, $(a, c+1) = (c, c+1)(a, c)(c, c+1)$.

29. $(12\ldots n)(m, m+1)(12\ldots n)^{-1} = (m+1, m+2)$, и задача сводится к предыдущей.

31. e; (123), (142), (134), (243); (132), (124), (143), (234); (12)(34), (13)(24), (14)(23).

32. Сопряжены подгруппы перестановок трех элементов (исключая 4, 3, 2 или 1).

33. Если $r_2 r_1 = r_1 r_2$, то $r_1 r_2 r_1^{-1} = r_2$, т.е., вращение r_1 не меняет оси r_2; отсюда либо ось r_1 совпадает с осью r_2, либо ось r_1 перпендикулярна оси r_2, и r_1 представляет собой поворот на π. Во втором случае $r_1 r_2 r_1^{-1} = r_2^{-1}$, но $r_2 = r_2^{-1}$ только если r_2 также является поворотом на π.

34. Класс составляют унитарные матрицы с одинаковыми собственными значениями $(\exp i\varphi_1, \ldots, \exp i\varphi_n)$.

37. C_{nv}.

38. Множество трансляций на $\mathrm{a} = m\mathrm{e}_1 + n\mathrm{e}_2$, m, n – целые, и их комбинации с поворотами C_4, C_4^2, C_4^3 относительно начала (одного из узлов). В качестве поворотных центров четвертого порядка служат узлы и центры квадратов (ячеек).

39. (C_n, U_2).

40. $C_4^z C_4^x = C_3^{(xyz)}$; $C_4^y C_4^z C_4^x = C_2^{(xy)}$.

41. $\sigma U_2 = S(\varphi)$, где $\varphi = 2\angle U_2 \wedge \sigma$; но минимальный угол между плоскостью и U_2 в D_{nd} равен $\pi/2n$, так что $\varphi_{\min} = \pi/n$.

J Z a ^2_ e

1. Нет.

3. $a^n = e$, имеется n НП с $a \to \exp(2\pi i m/n)$, $m = 0, 1, 2, \ldots n-1$.

5. $D_1^+(g) = (A^+)^{-1} D_2^+(g) A^+$, с другой стороны, $D_1(g^{-1}) = A D_2(g^{-1}) A^{-1}$, откуда $AA^+ = \lambda E$.

7. Все кратности равны $(1/g)\sum_g \chi^{(1)}(g)\chi^{(2)}(g)\chi^{(3)}(g)$.

8. В противном случае возникло бы противоречие с теоремой задачи 7.

9. При выполнении условия задачи характеры любых представлений оказываются вещественными.

11. Расписать характер и воспользоваться соотношением ортогональности матричных элементов.

13. 0 для $\Gamma_\alpha \neq \Gamma_1$.

14. Γ и Γ′ одинаково разлагаются по НП.

15. $[\chi^3_\Gamma(g)] = \frac{1}{6}[\chi^3_\Gamma(g) + 3\chi_\Gamma(g^2)\chi_\Gamma(g) + 2\chi_\Gamma(g^3)]$, в $\{\chi^3_\Gamma(g)\}$ – знак (–) перед вторым слагаемым.

16. $[\Gamma^2] = [\Gamma_1^2] + \Gamma_1 \times \Gamma_2 + [\Gamma_2^2]$, $[\Gamma^3] = [\Gamma_1^3] + [\Gamma_1^2] \times \Gamma_2 + \Gamma_1 \times [\Gamma_2^2] + [\Gamma_2^3]$ и т.д.

17. Достаточно заметить, что любую матрицу, содержащую один единичный элемент при остальных элементах, равных нулю, можно выразить через матрицы НП: $\frac{n_\alpha}{g}\sum_g D_{ij}^{(\alpha)*}(g)\hat{D}^{(\alpha)}(g) = \hat{P}_{ij}$.

18. Использовать лемму Шура. а) $\hat{A} = \lambda_1 E_\alpha \oplus \lambda_2 E_\beta$ б) $\begin{pmatrix} \lambda_1 E_\alpha & \lambda_2 E_\alpha \\ \lambda_3 E_\alpha & \lambda_4 E_\alpha \end{pmatrix}$, где E_α – единичная матрица размерности n_α.

19. $a, x \in [\Gamma_\alpha]$, $a \to A$, $Ax = ax$; в базисе из матриц P_{11}, P_{12}, P_{21}, P_{22} $(A) = \begin{pmatrix} a_{11}E & a_{12}E \\ a_{21}E & a_{22}E \end{pmatrix}$.

20. $[\Gamma_{\text{рег}}]$ совпадает с регулярным представлением групповой алгебры.

21. Пусть $B'e = b$; из $B'Ae = AB'e$ следует $B'a = ab$.

22. $\begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{11} & b_{21} \\ 0 & 0 & b_{12} & b_{22} \end{pmatrix}$ в том же базисе, что и в задаче 19.

23. $g \leftrightarrow g^{-1}$.

25. Только для коммутативных групп ($Z = [G]$).

26. Убедиться, что равенство сводится к соотношению (2.5).

27. (2 2 0), исходя из Γ_1 для C_3; (2 –1 0) из Γ_2 и Γ_3.

28. Единичное НП самосопряжено и само является орбитой первого порядка; два комплексных НП $(1, \varepsilon, \varepsilon^2)$ и $(1, \varepsilon^2, \varepsilon)$ составляют орбиту второго порядка, с кратностью единица составляющую разложение НП Γ_3 группы C_{3v}.

J Z a ^3_ e

2. $D_{\infty h} = D_\infty \times C_i$; НП – $D^{(m)}{}_{g,u}$, $\Sigma^{\pm}{}_{g,u}$.

4. Из сравнения матриц $g(\varphi_1'\theta'\varphi_2') = g(\varphi_1^0\theta^0\varphi_2^0)g(\varphi_1\theta\varphi_2)$ следует $\partial\varphi_2'/\partial\varphi_2 = 1$, и якобиан $\left|\partial(\varphi_1'\theta'\varphi_2')/\partial(\varphi_1\theta\varphi_2)\right| = \left|\partial(\varphi_1'\theta')/\partial(\varphi_1\theta)\right|$. Поэтому для упрощения запи-

си можно положить $\varphi_1^0 = \varphi_2^0 = \varphi_2 = 0$, а в конечном выражении якобиана, если понадобится, заменить φ_1 на $\varphi_1 + \varphi_2^0$, φ_1' на $\varphi_1' - \varphi_1^0$.

5. $f = \sum_{lm} f_l^m(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

6. Сечение $a_1 = c$ – сфера радиуса $\sqrt{1-c^2}$, соответствует сопряженным, с одинаковым следом, матрицам (и вращениям на углы α, $\cos(\alpha/2) = \sqrt{1-c^2}$).

9. Если $\eta^k = D_{kl}\xi^l$, то $\eta_i = \varepsilon_{ik}\eta^k = \varepsilon_{ik}D_{kl}\varepsilon^{lm}\xi_m = \overset{*}{D}_{im}\xi_m$ (знаки суммирования опущены).

11. $\left(jm\tfrac{1}{2}\pm\tfrac{1}{2}\middle| j+\tfrac{1}{2}, m\pm\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\dfrac{j\pm m+1}{2j+1}}$, $\quad \left(jm\tfrac{1}{2}\pm\tfrac{1}{2}\middle| j-\tfrac{1}{2}, m\pm\tfrac{1}{2}\right) = \mp\sqrt{\dfrac{j\mp m}{2j+1}}$.

12. Матрица $D'^{(l)}$ вещественна на функциях ($P_{ll}, \ldots, P_{lm}, \ldots, Y_{l0}, \ldots, Q_{lm}, \ldots, Q_{ll}$), где матрица перехода S определяется соотношениями

$$(P_{lm}, Q_{lm}) = (Y_{lm}, Y_{l-m})\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ (-1)^m & i(-1)^m \end{pmatrix}; \quad \hat{D}'^{(l)} = S_l^{-1}\hat{D}^{(l)}S_l, \quad S_l\tilde{S}_l = (-1)^l\hat{C}^{(l)}.$$

13. $\xi_1 = Ab_2$, $\xi_2 = Ab_1$, $\xi_3 = Aa_2$, где $A = 2\arccos\left(a_1\big/\sqrt{1-a_1^2}\right)$ (ср. (3.20)).

15. а) При нечетных перестановках строк и столбцов K_J умножается на $(-1)^J$, при транспонировании не меняется. б) Рассмотреть спиноры (u_1, u_2), (v_1, v_2), (w_1, w_2) и положить $u_3 = v_3 = w_3 = 1$. в) В новых обозначениях $3j$-символ обладает всеми свойствами симметрии символа K_J. Часть из них приводит к соотношениям (3.38); транспонирование K_J дает:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tfrac{1}{2}(j_1+j_2+m_3) & \tfrac{1}{2}(j_1+j_2-m_3) & j_3 \\ \tfrac{1}{2}(j_2-j_1+m_1-m_2) & \tfrac{1}{2}(j_2-j_1-m_1+m_2) & j_1-j_2 \end{pmatrix}$$

16. $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 0 & c & b \end{Bmatrix} = \dfrac{(-1)^{a+b+c}}{\sqrt{(2b+1)(2c+1)}}$ и т.д. (см., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Изд. 6-е. М.: Физматлит, 2008).

18. $\dfrac{(-1)^{b+c+d+f}}{\sqrt{(2c+1)(2f+1)}}\begin{Bmatrix} a & b & c \\ e & d & f \end{Bmatrix}$.

20. $C(\varphi) \to e^{im\varphi}$, m – полуцелое; двойная группа $D_\infty(\propto C_{\infty v})$ состоит из матриц $c(\varphi)$, $c_2^{(y)}$, q и их произведений, «нечетные» НП – двумерные $D^{(m)}$ с полуцелым m.

21. D_2 имеет одно двузначное двумерное НП с $\chi(e) = -\chi(q) = 2$, остальные $\chi(c) = 0$. D_{2d} и D_4 изоморфны, имеют по два двумерных двузначных НП с $\chi(e) = -\chi(q) = 2$,

$\chi(c_4) = -\chi(c_4^3) = \chi(c_4^3 q) = -\chi(c_4 q) = \pm\sqrt{2}$, остальные характеры – нули.

J Z a ^4_ e

1. Тензор $\gamma_{i,kl}$ преобразуется по представлению ортогональной группы $D^{(1-)} \times [D^{(1-)2}] = D^{(3-)} + D^{(2-)} + 2D^{(1-)}$. $D^{(3-)}$ содержит один инвариант группы T_d. В кубических осях инвариантный тензор пропорционален следующему: $e_x e_y e_z + e_x e_z e_y + e_y e_x e_z + e_y e_z e_x + e_z e_x e_y + e_z e_y e_x$.
2. C_{3v}: возможны 3 типа слоев – 1 атом на оси C_3, 3 атома на плоскостях симметрии, 6 атомов, занимающих общее положение. D_{3d}: 5 типов – 1 атом в центре симметрии, 2 атома на оси C_3, равноудаленных от центра, 6 атомов на плоскостях симметрии, 6 атомов на осях второго порядка, 12 атомов в общих положениях.
3. Пусть G_1 – энергия взаимодействия центрального атома X с атомом Y, G_2 – энергия взаимодействия соседних атомов Y, $G_3(Y_1, Y_4) = 0$, R – равновесное расстояние X – Y. Тогда $k_2 = -G_1''(R)$, $k_3 = -G_1'/R$, $k_1 = -2k_2 - 4k_3$, $k_6 = k_7 = 0$, $k_8 = -G_2''/2 - G_2'/2R\sqrt{2}$, $k_4 = -k_2 - 4k_8$, $k_9 = k_{11} =$ $= -G_2''/2 + G_2'/2R\sqrt{2}$, $k_{10} = -G_2'/R\sqrt{2}$, $k_5 = -k_3 - 2k_8 - 2k_{10}$, так что, например, $\omega^2(\Gamma_{1g}) = G_1''(R) + 4G_2'(R\sqrt{2})/R\sqrt{2}$. При этом $G_1' + 2\sqrt{2}G_2' = 0$ из условия минимума энергии в равновесной конфигурации.
4. Колебательное представление молекулы XY_4 (см. рис.) расщепляется на неприводимые так: $\Gamma_{кол} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4$, где Γ_4 – векторное представление группы T_d. Обозначим $R_1 = X_1 + Y_1 + Z_1$, $R_2 = -X_2 - Y_2 + Z_2$, $R_3 = X_3 - Y_3 - Z_3$, $R_4 = -X_4 + Y_4 - Z_4$ (смещения атомов Y от центра). Тогда ненормированные симметрические координаты молекулы следующие:

Γ_1: $Q_1 = R_1 + R_2 + R_3 + R_4$,

Γ_3: $Q_2 = 3(Z_1 + Z_2 - Z_3 - Z_4) - R_1 - R_2 - R_3 - R_4$,

$Q_3 = X_1 + X_3 - X_2 - X_4 - Y_1 - Y_4 + Y_2 + Y_4$,

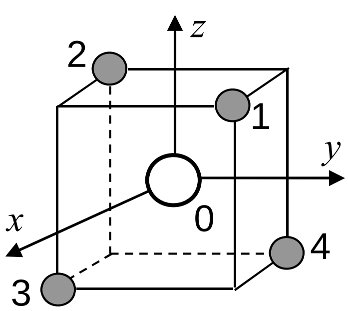
Γ_4: $Q_4 = X_1 + X_2 + X_3 + X_4 - (4m/M)X_0$,

Q_5, Q_6 получаются заменой X на Y и Z,

Γ_4': $Q_7 = Y_1 + Z_1 + Y_2 - Z_2 - Y_3 - Z_3 - Y_4 + Z_4$,

$Q_8 = X_1 + Z_1 + X_2 - Z_2 - X_3 + Z_3 - X_4 - Z_4$,

$Q_9 = X_1 + Y_1 - X_2 - Y_2 - X_3 + Y_3 + X_4 - Y_4$.



5. $\left[\hat{D}(g_1 g_2) f\right](x) = f(g_2^{-1} g_1^{-1} x) = \left[\hat{D}(g_2) f\right](g_1^{-1} x) = \left[\hat{D}(g_1)\hat{D}(g_2) f\right](x).$

6. $x\cos\alpha + y\sin\alpha$, $x^2\cos^2\alpha + y^2\sin^2\alpha + xy\sin 2\alpha$, $\sin x(\cos\alpha + y\sin\alpha)$

$$F(\mathrm{r}) = \frac{\partial}{\partial x} f(\mathrm{r}),\quad (\hat{D}F)(\mathrm{r}) = \cos\alpha \frac{\partial}{\partial x} f(g^{-1}\mathrm{r}) + \sin\alpha \frac{\partial}{\partial y} f(g^{-1}\mathrm{r}).$$

7. $x^2 = \frac{1}{3}(x^2 + y^2 + z^2)[\Gamma_1] + \frac{1}{3}(2x^2 - y^2 - z^2)[\Gamma_3].$

8. Нет; например, $f(\mathrm{r}) = x^2 + y^4$ порождает пятимерное представление O, распадающееся в $\Gamma_1 + 2\Gamma_3$.

9. См. приложение 2.

10. $O_3 \times P_n$.

13. 0.

15. $\Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_4$, $\Gamma_2 \leftrightarrow \Gamma_5$, $\Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_4,\Gamma_5$, $\Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_4,\Gamma_5$; для электрических переходов – между состояниями разной четности, для магнитных – одинаковой.

16. а) $\Gamma_4 = \Gamma_{t3} + \Gamma_{t2}$; $\Gamma_5 = \Gamma_{t3} + \Gamma_{t1}$ (четности уровней не меняются). б) $\Gamma_3 = \Gamma_{r1} + \Gamma_{r2}$, $\Gamma_4,\Gamma_5 = \Gamma_{r2} + \Gamma_{r3} + \Gamma_{r4}$ (искажение вдоль кубических осей x, y, z).

17. $\Gamma_{Ys} = \Gamma_1 + \Gamma_4$, $\Gamma_{Yp} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4 + \Gamma_5$. Некоторые из МО:

$\psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_3 - s_2 - s_4, \psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_4 - s_2 - s_3, \psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_2 - s_3 - s_4.$

МО типов Γ_1, Γ_3, Γ_4 из атомных p-орбиталей составляются подобно симметрическим координатам задачи 4, типа Γ_5 – подобно вращательным координатам молекулы.

18. $D^{(2)} = \Gamma_3 + \Gamma_5$, $D^{(3)} = \Gamma_2 + \Gamma_4 + \Gamma_5$, $D^{(4)} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$, $D^{(5/2)} = \Gamma_7 + \Gamma_8$, $D^{(7/2)} = \Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_8$.

19. Таблицы функций приведены, например, в книге А. Абрагама и Б. Блини. *Электронный парамагнитный резонанс переходных металлов*. Т. 2. Мир, Москва, 1973.

20. $j(j+1)$.

21. Инварианты тетрагональных групп составляются из функций Y_{k0}, $Y_{4\pm4}$, $Y_{5\pm4}$, $Y_{6\pm4}$. Четный кристаллический потенциал для групп D_{2d}, C_{4v}, D_4, D_{4h}:

$$B_{20}Y_{20} + B_{40}Y_{40} + B_{44}(Y_{44} + Y_{4-4}) + B_{60}Y_{60} + B_{64}(Y_{64} + Y_{6-4}).$$

Нечетный потенциал для группы C_{4v}:

$$B_{10}Y_{10} + B_{30}Y_{30} + B_{50}Y_{50} + B_{54}(Y_{54} - Y_{5-4}),$$

для группы D_4: $B'_{54}(Y_{54} + Y_{5-4})$.

22. $O_4^0 = 35J_z^4 - 30J(J+1)J_z^2 + 25J_z^2 - 6J(J+1) + 3J^2(J+1)^2$,

$O_4^2 = \frac{1}{2}[(7J_z^2 - J(J+1) - 5)(J_+^2 + J_-^2)]_+$, $O_4^3 = \frac{1}{2}[J_z(J_+^3 + J_-^3)]_+$, $O_4^4 = \frac{1}{2}(J_+^4 + J_-^4)$.

Знак + при скобках означает антикоммутатор.

J Z a ^5 e

1. $\theta = UK$, где $U\psi(p) = \psi(-p)$.
3. $D(\theta^2) = \pm 1 = D(\theta)D^*(\theta) = D(\theta)\tilde{D}(\theta)^{-1}$.
5. НКП группы θC_∞ содержит $\chi^{(m)} + \chi^{(-m)}$ ($m \neq 0$; третий тип НКП). НКП группы θD_∞ относятся к первому типу.
6. Два последних – Т-четные.
7. Нет; нет; да (см. Абрагам и Блини, 1973).

J Z a ^6 e

1. Представить t_a в виде $t_{a_\parallel} t_{a_\perp}$ и учесть (6.2).
2. $t_a S(\mathrm{n}, \varphi) = S'(\mathrm{n}', \varphi)$, n' определяется как в (6.2), $\sigma' = t_{a_\parallel/2}\sigma$.
3. $t_a I_O = I_{O'}$, где O' получается сдвигом O на $a/2$.
5. $\Omega_0' = |a_1'(a_2' \times a_3')| = \left|\sum_{ijk} \lambda_{1i}\lambda_{2j}\lambda_{3k}\, a_i(a_j \times a_k)\right| = \Omega_0 |\mathrm{Det}\lambda_{ij}| \geq \Omega_0$

   ($\lambda_{i'i}$ – целые числа)
6. Согласно результатам 1–3, любое точечное преобразование с центром на междоузлии O' можно записать в виде $r_{O'} = t_\alpha r_O$, где O – узел и, очевидно, α – вектор решетки. Тогда r_O – преобразование симметрии и является элементом сингонии.
7. Рис. d) и e) на стр. 89 дают картину узлов в плоскости, перпендикулярной оси C_n с $n = 3, 4, 6$. Через проекцию базисного вектора a_3 на эту плоскость опять должна проходить ось C_n, поэтому эта проекция попадает либо на узел в плоскости, либо в центр правильного треугольника (d) или квадрата (e). Во всех случаях отражение в плоскости, проходящей через a_1 (a_2) и ось C_n, является преобразованием симметрии решетки.
8. $C_{6v} \to C_{2v} \to C_2$, $C_{4v} \to C_{2v} \to C_2$.
10. Существует три группы класса C_2: $P2$, $P2_1$, $B2$; четыре – C_s: Pm, Pb, Bm, Bb; и шесть – C_{2h}: $P2/m$, $P2_1/m$, $B2/m$, $P2/b$, $P2_1/b$, $B2/b$.

11. $b_1 = 2\pi a_2\times(a_1\times a_2)/|a_1\times a_2|^2$, $b_2 = 2\pi a_1\times(a_2\times a_1)/|a_1\times a_2|^2$, типы прямой и обратной решетки совпадают.
12. Для решеток сингонии C_2 имеются два вида зон Бриллюэна (параллелограм и шестиугольник).
16. Множества $k_i + k'_{i'}$; $k_i + k_j$; $\{-k\}$.
18. Группа C_{3h} имеет только один класс фактор-систем, группы C_{2h}, C_{4h}, C_{6h} – два. Существует одно двумерное НП второго класса группы C_{2h}, два – C_{4h} и три – C_{6h}.
19. $\sum_{a} e^{i(k-k')a} = N^3\delta_{k,k'+b}$, $\quad \sum_{k} e^{ik(a-a')} = N^3\delta_{aa'}$.
20. Всего имеется 21 двухцветная группа.

: f b g h Линар Кашифович
D m l m a h \ Александр Сергеевич
l j h r b g Юрий Николаевич

ТЕОРИЯ ГРУПП И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ И ЗАДАЧИ

2015