Міністерство науки і освіти України

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

В.В. ЗАГОРОДНІЙ

СИМЕТРІЯ У ФІЗИЦІ

Затверджено Вченою радою НТУУ «КПІ»
як підручник для студентів, які навчаються
за спеціальністю 6.040204 «Прикладна фізика»

КИЇВ
НТУУ «КПІ»
2015

ББК 22.37я73
УДК 53.01+539+ 512.547.21

Гриф надано Вченою радою НТУУ «КПІ»
(протокол № 6 від 30 червня 2015 року)

Автор:
Загородній В.В., к.т.н., доцент

Рецензенти:

Антонов Віктор Миколайович, зав. відділом обчислювальної фізики Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, член-кореспондент НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор.

Вільчинський Станіслав Йосипович, зав. кафедри квантової теорії поля фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка, доктор фіз.-мат. наук, професор.

Шевченко Андрій Борисович, провідний науковий співробітник Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, доктор фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник.

Загородній В.В.
Симетрія у фізиці.

Відповідно до навчальної програми курсу викладаються базові принципи та поняття, необхідні для засвоєння математичного апарату симетрії – теорії груп. Послідовно розглядаються абстракті групи, групові співвідношення, групова алгебра. Теорія представлень дається в загальному вигляді у скінченновимірних лінійних просторах із скалярнім добутком. Розглядаються: основні леми і теореми стосовно звідних і незвідних унітарних представлень, теорія характерів, прямий добуток груп і представлень груп, представлення у просторі функцій. Для точкових та просторових груп описуються принципи їх будови. Розглядаються застосування теоретико-групових методів у квантовій механіці, описі зонної структури твердого тіла та ін.

Для студентів фізико-технічних спеціальностей і напрямків підготовки «прикладна фізика» та інших фізичних спеціальностей.

УДК53.01+539+ 512.547.21
ББК 22.37я73

З М І С Т

Передмова 7

Вступ 9

Розділ I Абстрактна теорія груп 12

1.1 Перетворення симетрії і фізика 12

1.2 Перетворення симетрії і елементи симетрії скінченних систем. Визначення групи 15

1.3 Таблиця Келі 21

1.4 Наслідки з визначення групи 22

1.5 Порядок елементів в групі 23

1.6 Лема про зсув 24

1.7 Підгрупа 24

1.8 Суміжні класи. Теорема Лагранжа 26

1.9 Спряжені елементи і класи 28

1.10 Інваріантна (нормальна) підгрупа 31

1.11 Фактор-група 32

1.12 Ізоморфізм і гомоморфізм 33

Питання для самоконтролю 35

Розділ II Теорія представлення скінченних груп 37

2.1 Оператори і матриці 37

2.1.1 Лінійні векторні простори 37

2.1.2 Лінійні оператори 43

2.1.3 Матричний запис лінійних операторів 45

2.1.4 Дії з операторами. Зворотний оператор 47

2.1.5 Лінійний спряжений і самоспряжений оператор. Унітарний оператор 48

2.1.6 Лінійні невироджені перетворення простору 50

2.1.7 Група лінійних перетворень 51

2.2 Представлення скінченних груп 53

2.2.1 Скінченновимірні представлення груп. Матричні представлення 53

2.2.2 Звідні і незвідні представлення 57

2.2.3 Унітарні представлення в просторі із скалярним добутком 62

2.2.4 Теорема про унітарність 65

2.2.5 Розкладання звідного представлення на суму незвідних 66

2.2.6 Еквівалентні представлення 67

2.2.7 Теорема Машке 70

2.2.8 Леми Шура 71

2.2.9 Ортогональність матричних елементів незвідних представлень 74

2.2.10 Характери представлень 78

2.2.11 Регулярне представлення 82

2.2.12 Перша теорема Бернсайда 84

2.2.13 Число незвідних представлень (друга теорема Бернсайда) 85

2.2.14 Друге співвідношення ортогональності характерів груп 87

2.2.15 Складання таблиці характерів незвідних представлень 88

2.2.16 Незвідні представлення абельових і циклічних груп 90

2.2.17 Прямий (тензорний) добуток матриць 92

2.2.18 Прямий добуток представлень групи 93

2.2.19 Прямий добуток груп 95

2.2.20 Незвідні представлення прямого добутку груп 96

2.3 Представлення у просторі функцій 97

2.3.1 Індуковане перетворення функцій 97

2.3.2 Представлення у функціональному просторі 100

2.3.3 Ортогональність базисних функцій 104

2.3.4 Критерій для функції представлення 107

2.3.5 Оператор проектування 109

Питання для самоконтролю 111

Розділ III Точкові групи 113

3.1 Група ортогональних перетворень 113

3.2 Елементи і операції симетрії точкових груп 116

3.3 Матриці ортогональних перетворень 118

3.4 Про виведення точкових тривимірних груп 120

3.5 Принципи розбиття точкових груп на класи 124

3.6 Групи точкових перетворень
3.6.1 Групи власних перетворень (власні групи) 126

3.6.2 Групи, що містять невласні перетворення (невласні групи) 133

3.7 Граничні точкові групи 140

3.8 Категорії симетрії і точкові групи 142

Питання для самоконтролю 145

Розділ IV Симетрія в квантовій механіці 147

4.1 Огляд основних понять 147

4.2 Група симетрії рівняння Шредінгера 148

4.3 Класифікація стаціонарних станів квантових систем 153

4.4 Порушення симетрії при збуренні 157

4.5 Симетрізовані молекулярні орбіталі 164

Питання для самоконтролю 170

Розділ V Кристалографічні просторові групи 172

5.1 Трансляційна симетрія. Гратки Браве. Сингонії 172

5.2 Кристалографічні класи 176

5.3 Група трансляцій 179

5.4 Дійсна афінна група. Просторові групи 181

5.5 Неелементарні трансляції 184

5.6 Незвідні представлення групи трансляцій 186

5.7 Зона Брилюена та її властивості 189

5.8 Зірка вектора **k** 192

5.9 Група вектора **k** 195

5.10 Незвідні представлення просторової групи 197

5.11 Незвідні представлення групи вектора **k**.
Типи векторів **k** в зоні Брилюена 199

Питання для самоконтролю 201

Розділ VI Застосування до зонної теорії твердих тіл 202

6.1 Двовимірний випадок 202

6.2 Тривимірний випадок 205

6.3 Електрон у періодичному полі решітки 210

6.4 Співвідношення сумісності у простій кубічній гратці 217

6.5 Співвідношення сумісності
у гранецентрованій кубічній ґратці 223

6.6 Хвильові функції особливих точок 229

Питання для самоконтролю 233

Література 234

Додаток**.** Розрахункові завдання 238

Частина I Абстрактні групи 238

Частина II Теорія представлення. Точкові групи 243

Приклади індивідуальних завдань 250

Передмова

Симетрія та її математичний апарат – теорія груп – широко застосовується у фізиці, зокрема, у таких розділах, як квантова фізика, теорія атома, фізика твердого тіла, квантова хімія та інших розділах. Сфера контактів фізики і теорії груп постійно розширюється. На сучасному етапі ідеї теорії груп використовують у таких важливих галузях фізики, як квантова теорія поля, фізика високих енергій, теорія гравітації, теорія нелінійних систем та явищ, фізика конденсованого стану, фізика плазми. Отже, володіння теоретико-груповими методами досліджень є важливою складовою частиною підготовки сучасних фахівців з фізики, як експериментаторів, так і теоретиків. У світовій літературі є багато монографій та підручників на тему симетрії, теорії груп та їх застосувань. Вони відрізняються як підбором матеріалу, так і ступенем адаптованості математичного апарату до розглядання конкретних задач. Не всі з них пропонують послідовне викладення основ теорії з використанням певного математичного апарату. Тому у пропонованому курсі є намір, де це можливо і доцільно, викладати більш універсальною математичною мовою, не поступаючись при цьому фізичним сенсом при розгляді конкретної задачі. У курсі послідовно розглядаються абстрактні дискретні групи та алгебра груп, як основа подальшого узагальненого підходу до сприяння теорії представлень. Теорія представлень викладається у скінчено вимірному лінійному ортонормованому просторі, в якому діють унітарні (ортогональні) оператори та їх матричні зображення, як представлення елементів груп. Розглядаються принципи побудови скінченних точкових груп та їх опис. Наведені приклади конкретних систем, для опису симетрії яких застосовані ті чи інші точкові групи. Дається застосування теоретико-групового підходу до опису квантово-механічних систем, зокрема, порушення симетрії при збуренні, застосування для симетризації МО ЛКАО та ін. Розглядаються просторові групи та їх застосування для опису зонної теорії твердих тіл, зокрема, з використанням співвідношення сумісності. У додатках до курсу надаються задачі та вправи, наведені приклади індивідуальних завдань студентам для виконання розрахункових робіт. Пропонований матеріал дає достатню основу для подальшого, за потребою, самостійного засвоєння інших розділів теорії груп, що не потрапили до підручника. Отже, мета курсу – надати основні відомості з теорії груп, теорії представлень скінченних груп, їх застосування у квантовій механіці, аналізі структури молекул, описі кристалічного стану. Для опанування понятійним апаратом, термінологією та принципами теорії симетрії студент повинен: ознайомитися із базовими принципами і теоремами теорії груп симетрії; мати представлення про основні групи симетрії (точкові, просторові), які застосовуються при вивченні наносистем; навчитися грамотно використовувати отримані знання при рішенні низки завдань, які виникають при дослідженнях таких систем. Це дасть смогу здійснювати обчислення деяких властивостей молекул і кристалів за допомогою великої кількості стандартних пакетів програм, а також інтернет-ресурсів з базами даних стосовно кристалографічних груп. Тобто, вивчення курсу є необхідним етапом загальної фізичної і математичної освіти, яке закладає базу для подальшої спеціалізації. Завданнями дисципліни є також надання необхідного матеріалу для подальшого вивчення дисциплін теоретичної і експериментальної сучасної фізики, яка застосовується в сучасному матеріалознавстві.

Курс викладається протягом 8 семестру студентам 4-ого курсу фізико-технічного інституту, які навчаються на денному відділенні за напрямком підготовки «прикладна фізика», і може бути корисним для інших напрямків підготовки з фізики.

Вступ

Ідеї симетрії – одні з найглибших та плідних у природознавстві.

Ще за античних часів зародилися вчення про сумісності та пропорції. Ці ідеї явно та неявно були присутні в усіх природничо-філософських теоріях античності та середньовіччя. До середини 19 століття ідею симетрії розглядали як філософську категорію чи принцип світогляду, а не як самостійну науку у сучасному понятті. Лише з появою робіт Еваріста Галуа (1811 – 1832 р.р.) про роль перестановок в теорії алгебраїчних рівнянь, вірніше, публікацію Жордана, присвячену теорії Галуа, через 40 років після його смерті, можна вважати приблизною датою виникнення цієї нової теорії і початком її самостійного існування.

Далі, Клейн Ф. вперше встановив зв'язок між симетріями великих багатогранників і групами перестановок. Він також запропонував ідею про те, що групи перетворень можна взяти за основу усіх різновидів геометрії, виявивши особливості кожного з них. Таким чином, було здійснено об'єднання між теорією груп, чисто алгебраїчною наукою, та симетріями геометричних об'єктів. В подальшому стверджувалось поняття того, що симетрія – це в першу чергу сукупність операцій, які зберігають точні алгебраїчні і геометричні співвідношення, і ця сукупність має структуру групи. Таким чином, ідея симетрії отримала математичне оформлення і відповідну термінологію.

Проникнення теоретико-групового мислення у фізику почалося на рубежі 19 і 20 століть. Цьому сприяли два видатні досягнення в двох різних областях природознавства – класифікації кристалів і кристалографічних симетрій Федорова і Шенфліса (1894 р.), та спеціальна теорія відносності Ейнштейна-Пуанкаре (1895 р.).

Становлення квантової теорії і квантової механіки йшло паралельно з розвитком теорії груп і теорії представлень. У роботах Гайзенберга і Дирака квантовомеханічні змінні були представлені як елементи асоціативної алгебри, які задовольняють деяким комутаційним співвідношенням, а стани системи – як вектори простору представлень цієї алгебри. Нова форма рівнянь квантової теорії вимагала і нового математичного апарату. На сьогодні теоретико-групові методи домінують в арсеналі математичних методів сучасної фізики, демонструють свою ефективність і універсальність в усіх галузях фізики.

Симетрія і її математичний апарат – теорії груп – виступають як принципово важливий евристичний принцип при побудові моделей нових явищ. Один з прикладів – відкриття унітарної асиметрії в сильних взаємодіях і виявлення на цій основі кваркової структури матерії. Це було зроблено в 60 роках минулого століття після того, як була відкрита нова характеристика елементарних часток – дивність. Група симетрії, що відповідає сильним взаємодіям, була визначена групою Su(3). Вона забезпечувала виконання збереження дивності і ізотонічного спіну. Застосування апарату теорії груп дозволило довести існування частки Ω^- (омега-мінус-гіперон), яку відкрили через декілька років.

Контакти фізики та теорії груп різноманітні.

Вже у 60 роках минулого століття для опису елементів симетрії кристалів були використані елементи представлення скінченних груп, матричних груп, а також теорія прямих добутків цих представлень. На сучасному етапі взаємозв'язок з теоретичною фізикою означає використання апарату некласичних алгебр Лі, теорії когомології, нескінченновимірних афінних алгебр, квантових груп і алгебр.

У фізиці важливу роль відіграє поняття симетрії. Сукупність операцій симетрії складає групу. На основі вивчення цієї групи можна робити важливі висновки про властивості фізичних об'єктів. Наприклад, теорема Нетер встановлює той факт, що кожній симетрії відповідає певний закон збереження. Так, закон збереження енергії є результатом однорідності часу, закон збереження імпульсу випливає із однорідності простору, а закон збереження моменту імпульсу із ізотропності простору. Інші фізичні симетрії не настільки очевидні. У квантовій теорії поля існує поняття калібрувальних перетворень, які відповідають фундаментальним симетріям світу елементарних частинок. Сукупність фундаментальних частинок за сучасними уявленнями гомоморфна групам матриць із родини SU(n).

В кристалографії та хімії важливе значення мають операції симетрії, які описуються точковими й просторовими групами. Вивчення цих груп важливе для класифікації та визначення властивостей мінералів та молекул. Групи симетрії визначають, наприклад, структуру оптичних спектрів, спектрів раманівського розсіяння тощо.

Розділ I

Абстрактна теорія груп

1.1 Перетворення симетрії і фізика

Перетворюванням множини x є взаємно-однозначне відображення $f: x \to x$ цієї множини на себе, тобто таке відображення, для якого існує зворотне відображення f^{-1}: $x \to x$, при цьому $f^{-1}f = ff^{-1} = e$. Тут fg означає добуток відображень, тобто послідовне виконання операцій над x:

$$(fg)(x) = f\big(g(x)\big);\ x \in X \tag{1.1}$$

а e – тотожне перетворення $xe = ex = x$; $\forall x \in X$.

Набір тих чи інших перетворень, що зберігають деякий об'єкт незмінним, може бути інтерпретований як сукупність його симетрій. Наприклад, як виміряти симетричність не рівностороннього, рівнобедреного, або рівностороннього трикутника? Його можна виміряти тим, що число переміщень площини, що переводять трикутник в себе, різне для кожного з типів трикутників. Воно складається:

а) з одного тотожного перетворення (для різностороннього трикутника);

б) з тотожного перетворення і відображення відносно осі симетрії (для рівнобедреного трикутника);

в) з шести перетворень: тотожного, поворотів на 120^0, 240^0 навколо центра О і відображень відносно трьох площин симетрії (для рівностороннього трикутника).

Набір симетрій плоского візерунка складається з усіх переміщень площини, які переводять його в себе: із паралельного переносу вздовж напрямку *ox*; паралельного переносу вздовж напрямку *oy* разом із дзеркальним відбиттям відносно осі *oy* й усіх їх комбінацій.

Під симетрією молекули розуміється рухи простору, що суміщають кожний атом молекули із атомом того ж типу і які зберігають всі валентні зв'язки між атомами.

Велику міру симетрії має кристал, набір симетрій і перетворення симетрій кристала є його важливою характеристикою.

Симетрії можуть мати вирази алгебри або арифметики. Симетрією многочлена $F(x_1, x_2, \cdots x_n)$ називається перестановка невідомих $x_1 \cdots x_n$, що зберігає величину F.

Симетрію у фізиці розуміють як інваріантність (незмінність) фізичної системи відносно тих чи інших перетворень, які здійснюються над нею. Самі перетворення – це елементи симетрії чи просто симетрії.

Симетрія фізичних законів є їх найважливішою характеристикою. Під цим мається на увазі перетворення координат, при якому рівняння цього закону є інваріантними (незмінними) відносно такого перетворення. Зокрема, закони механіки повинні зберігатися при переході від однієї інерціальнії системи координат до іншої. Відповідні перетворення мають у механіці Галілея-Ньютона вид (при русі по прямій): $x' = x - vt; t' = t$, а в механіці СТВ це

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - {v^2}/{c^2}}}; \; t' = \frac{t - {v}/{c^2}\, t}{\sqrt{1 - {v^2}/{c^2}}}$$

Просторово-часові симетрії виражають таким чином найбільш загальні закони природи, пов'язані з властивостями простору і часу, при цьому залишається незмінним функціонал дії.

Перетворення симетрії можна розділити на дискретні і неперервні.

Неперервні перетворення.

До неперервних можна віднести такі перетворення:

1) трансляції в просторі – переміщення фізичної системи як цілого на деякий вектор, при цьому незмінність фізичних законів при довільних трансляціях системи в просторі є вираження принципу однорідності простору, тобто еквівалентність усіх його точок. Наслідком цього є закони збереження імпульсу замкненої системи (зміна початку відліку координат).

2) зміна початку відліку часу (безперервна трансляція часу). Симетрія, що відноситься до такого перетворення, означає однорідність часу, а наслідком є закон збереження енергії.

3) обертальна інваріантність є вираження ізотропії простору, наслідком чого є закон збереження моменту імпульсу.

Дискретні перетворення.

Дискретними просторовими перетвореннями є перетворення симетрії в кристалах. Елементами цих перетворень є скінченні трансляції і ортогональні перетворення 3-вимірного евклідового простору, при яких кристалічна структура суміщається сама з собою.

Більшість фізичних систем мають певну просторову або часову симетрію. Часто дослідження однієї тільки симетрії дає можливість зробити важливі висновки, не вимагаючи при цьому точного знання законів фізики. Тоді і корисно проводити дослідження, що спираються лише на властивості симетрії системи. Такі дослідження доцільно проводити методами теорії груп. У квантовій механіці її застосування найцікавіші. Квантова механіка великою мірою спрощується за наявності симетрії, наданням хвильової функції часткам.

Хвильова функція відображує симетрію фізичної системи при різних перетвореннях координат. Наприклад, якщо частка знаходиться у полі з потенціалом $U(x)$, потенціал може бути інваріантним відносно перетворення $x \to (-x)$, тобто $U(x) = U(-x)$. Для 3-вимірного випадку потенціал може мати сферичну симетрію, тобто мати вигляд $U(\mathbf{r})$ і не залежати від кута. Такий потенціал інваріантний відносно будь-якого перетворення повороту на будь-який кут навколо довільної осі, що проходить через початок координат. Число таких перетворень нескінченне. Приклад: пов'язані стани багаточасткових квантових систем описують власними функціями відповідного гамільтоніана:

$$HU = \lambda U$$

з відповідними граничними умовами. Вид гамільтоніана H залежить від характеру взаємодії часток системи між собою і з зовнішніми полями. Нехай оператор H інваріантний відносно деяких лінійних перетворень у 3-вимірному просторі. Це є перетворення симетрії, якщо всі властивості системи, що описуються рішенням рівняння, однакові як для початкової, так і для перетвореної системи. Власні функції оператора H також будуть інваріантні відносно цих же перетворень, якщо, зокрема, це перетворення парності (непарності). В загальному випадку відповідь на це питання дає представлення груп симетрії.

Таким чином, знання симетрії дозволяють дати природну класифікацію власних значень енергії власних функцій і отримати представлення про характер спектра гамільтоніана, що досліджується.

1.2 Перетворення симетрії і елементи симетрії скінченних систем. Визначення групи

Розглянемо симетрію тіла скінченного розміру. Вона визначається сукупністю тих переміщень, які суміщають тіло з самим собою. Такі переміщення називаються перетвореннями симетрії або операціями симетрії. Існують три основні типи перетворення.

1). Поворот тіла на певний кут навколо деякої осі.

Якщо тіло суміщається саме з собою при повороті навколо деякої осі на кут $\frac{2\pi}{n}$, то така вісь називається віссю симетрії n-го порядку. Якщо $n=1$, то виконується тотожне перетворення. Операцію повороту навколо даної осі на кут $\frac{2\pi}{n}$ символічно позначають C_n. Поворот на кут $p\left(\frac{2\pi}{n}\right)$ позначають $C_n^p = C_{n/p}$, при цьому $C_n^n = E$ – тотожне перетворення.

2). Дзеркальне відображення в деякій площині.

Якщо суміщення тіла з самим собою відбувається при дзеркальному відображення в деякій площині, ця площина називається площиною симетрії і вона позначається σ. Подвійне дзеркальне відображення позначається σ^2. Очевидно, що $\sigma^2 = E$ (E – тотожність). В цьому випадку елемент симетрії – площина дзеркального відображення, операція симетрії – відображення в площині.

Комбінація (одночасне застосування) двох перетворень – повороту і відображення – призводить до дзеркально-поворотних осей. Тіло має дзеркально-поворотну вісь n-го порядку, якщо воно суміщається з самим собою при повороті навколо цієї осі на кут $\frac{2\pi}{n}$ і подальшому відображенні в площині σ_h, перпендикулярній осі. В цьому випадку у σ з'являється індекс h.

Дзеркально-поворотне перетворення позначають символом S_n. Очевидно, що $S_n = C_n\sigma_h = \sigma_h C_n$. Для парного n з'являється новий вид симетрії. Для $n=2$ перетворення S_2 – перетворення інверсії I, точка $P_1 \to P'$, тіло має центр інверсії, $I = S_2 = C_2\sigma_2$. Сукупність всіх перетворень симетрії певного об'єкта складає деяку сукупність, множину перетворень, замкнену відносно набору операцій перетворення.

3). Паралельне перенесення (трансляція) тіла на деяку відстань.

До операцій симетрії відносяться також перестанови та зсуви, переходи між інерційними системами відліку, зміни масштабування і перенормування, інверсія часу, заміна частинок античастинками та інше. Для того, щоб ці перетворення були зрозумілими, необхідно знати, як влаштовано безліч перетворень симетрії будь-якого об'єкту, тобто в найзагальнішому випадку абстрактна математична множина, елементи якої взаємопов'язані так само, як операції симетрії, що послідовно виконуються. Іншими словами, потрібно знати основні співвідношення алгебри теорії груп і уявляти, як і навіщо вони застосовуються в реальних системах. Симетрія фізичної системи заснована на ідентичності її складових частин. В багатьох випадках дослідження моделі симетрії значно спрощують опис фізичних систем. На цьому засновано більшість сучасних додатків теорії груп. Симетрія широко використовується для опису деяких фізичних дисциплін – атомної фізики, фізики твердого тіла,. Тому знання теорії груп допомагає сприйняти фундаментальні фізичні теорії.

Таким чином, під симетрією системи розуміється інваріантність її властивостей відносно будь-яких перетворень (інваріантність рівнянь руху, інваріантність форми чи відстані її елементів), чи відносно деякої сукупності перетворень. При цьому, якщо властивість інваріантна відносно перетворень A і B, то воно інваріантне і відносно перетворень C, яке є результатом послідовного застосування перетворень A і B: $C = AB$, тобто перетворення симетрії повинні бути замкнутими відносно операцій перетворення. Така сукупність називається групою перетворень симетрії фізичної системи.

Визначення групи.

Групою $G(g_1, g_2, \cdots g_n)$ називають скінченну або нескінченну сукупність (множину) об'єктів довільної природи або операцій (елементів групи), якщо в G визначена бінарна операція (множення), для якої виконуються наступні умови:

а) операція визначена для кожної пари елементів з G: якщо елементи $g_1, g_2 \in G$, і якщо будь-якій парі елементів g_1 і g_2 ставиться у відповідність елемент g_3, то $g_3 \in G$, при цьому $g_1 g_2 = g_3$ (у певному порядку);

б) для будь-яких трьох елементів $g_1, g_2, g_3 \in G$ виконується співвідношення: $g_1(g_2 g_3) = (g_1 g_2) g_3$ – властивість асоціативності;

в) в G існує елемент e, що називається одиницею групи, такий, що $eg = ge = g$ для $\forall g \in G$;

г) для $\forall g \in G$ існує зворотний елемент $g^{-1} \in G$, такий, що $gg^{-1} = g^{-1}g = e$.

Ці чотири властивості визначають групу. Вона є сукупністю, множиною, замкненою відносно заданого в ній закону множення. Ті групи, в яких множення має переставну властивість, тобто $g_1 g_2 = g_2 g_1$, називаються абельовими.

Якщо число елементів групи скінченне, група називається скінченною, а число елементів в групі – порядком групи. Порядок елементів позначається ord G або $|G| =$n. Якщо число елементів групи нескінченне, то така група є нескінченною.

Приклади математичних груп.

1). Сукупність усіх цілих чисел z разом з нулем утворюють нескінченну групу, якщо як групове множення узяти складання. Одиничним елементом цієї групи є нуль, зворотним елементом для числа A буде – A.

Група абельова.

2). Сукупність усіх раціональних чисел R, за винятком нуля, утворюють групу з операцією множення, що співпадає із звичайним множенням. Одиничним елементом буде одиниця. Це також нескінченна абельова група. Зворотним елементом для A є A^{-1}.

3). Сукупність векторів n-мірного лінійного простору L_n утворюють групу. Груповим множенням є складання векторів, одиничним елементом буде нульовий вектор, зворотним елементом для вектору **a** буде вектор (-**a**).

4). Група U_n коренів n-ого ступеня з одиниці, де n – натуральне число, число $e^{\frac{2\pi ik}{n}}$, $k = 0, 1, 2, \dots n-1$. Ця множина комплексних чисел є рішенням алгебраїчного рівняння $Z^n = 1$, причому $Z_k = \exp\left(\frac{2\pi ik}{n}\right) = (Z_i)^k$. При цьому

$$\exp\left(\frac{2\pi ik}{n}\right) \cdot \exp\left(\frac{2\pi im}{n}\right) = \exp\left(\frac{2\pi i(k+m)}{n}\right) = \exp\left(\frac{2\pi ir}{n}\right) \in U_n, \quad \text{де} \quad r = k + m.$$

Одиницею цієї групи є число 1, зворотним елементом є число $(Z_n)^{-1} = \exp\left(\frac{2\pi i(n-k)}{n}\right)$, тобто це група відносно множення комплексних чисел. Група абельова, порядок групи n.

5). Лінійний простір $R^n = R \times R \times R \times \cdots \times R$ (n співмножників). Елементами групи є послідовності дійсних чисел $(x_1 \cdots x_n) = \mathbf{x}$. Такий лінійний простір має структуру абельової групи відносно операції складання векторів $\mathbf{X} + \mathbf{Y} = (x_1 + y_1, x_2 + y_2 \cdots x_n + y_n)$. Окрім цієї операції є ще операція множення на дійсне число.

6). Нехай в просторі Евкліда E^n заданий скалярний добуток $(\mathbf{xy}) = \sum_i x_i y_i$. Лінійні перетворення E^n, які зберігають скалярний добуток, утворюють групу *O(n)* – групу ортогональних перетворень. Перетворення O(n), які зберігають орієнтацію простору E^n, називаються перетвореннями обертання. Вони утворюють підгрупу *SO(n)* (від слова spin – обертання). Обертання площини – простори E^2 задають матрицями $\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$

Група $SO(2)$ – абельова.

<u>Приклади груп з фізики</u>.

1). Група трансляцій в 3-вимірному просторі, її елементами є перетворення перенесення початку координат на довільний вектор $\mathbf{a}$: $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$.

2). Групи симетрії молекул (точкові групи) складаються з ортогональних перетворень 3-мірного простору.

3). Групи симетрії кристалів, просторові групи симетрії, складаються з скінченного числа ортогональних перетворень, з дискретних зрушень, трансляцій і їх добутків. Таку симетрію має нескінченній кристал або модель кристала з так званими циклічними граничними умовами.

4). Група $SO^+(3)$ обертань тривимірного простору на будь-які кути біля осей, що проходять через початок координат. Відомо, що добуток обертання g_1 біля осі l_1 на кут φ_1 і обертання g_2 біля осі l_2 на кут φ_2 є обертання g_3 на деякий кут φ_3 біля осі l_3. Кожне обертання можна задати трьома параметрами: кутами θ, ψ, яки задають положення осі обертання, і величиною кута φ повороту навколо цієї осі. Кути θ, ψ відлічуються проти годинникової стрілки $0 \le \varphi \le \pi,\ 0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \psi \le 2\pi$. Таким чином, група $SO^{+3}(3)$ є нескінченна трьох параметрична група. Оскільки параметри θ, ψ, φ, яки визначають елементи групи, міняються безперервно, то група називається безперервною.

Усі групові закономірності скінченної групи зводяться до закону «множення» елементів. Відзначимо, що групова операція, яка традиційно називається «множенням», насправді може не бути множенням в звичайному сенсі. Так, наприклад, n-мірний векторний простір R^n є групою по складанню. Одиничний елемент – нуль-вектор, зворотний елемент для **r** є (– **r**).

1.3 Таблиця Келі

Властивості абстрактних груп повністю визначаються її таблицею множення, що називається квадратом Келі. Для скінченної групи таблиця Келі має вигляд (табл. 1.1):

Таблиця 1.1 Приклад складання квадрата Келі

G_{ai}/G_{bj}	G_{b1}	G_{b2}	…	G_{bn}
G_{a1}	$G_{a1}G_{b1}$	$G_{a1}G_{b2}$	…	$G_{a1}G_{bn}$
G_{a2}	$G_{a2}G_{b1}$	$G_{a2}G_{b2}$	…	$G_{a2}G_{bn}$
…	…	…	…	…
G_{an}	$G_{an}G_{b1}$	$G_{an}G_{b2}$	…	$G_{an}G_{bn}$

Оскільки $G_{ai}G_{bj} = G_{lk}$, то таблиця задана, якщо вказано, якому з елементів G_{lk} рівний кожен з n^2 елементів $G_{ai}G_{bj}$ на перетині i-ого рядку і j-ого стовпця. На цьому перетині стоїть елемент $G_{ai}G_{bj}$. Таблиця є квадратною матрицею.

Розглянемо приклади.

1). Для вивчення симетрії фізичних систем важливо знати їх поведінку пі час обертань. Різноманітні набори обертань утворюють групи. Закон множення тут такий: якщо поворот R_1 переводить систему з положення A в положення B, а поворот R_2 – з положення B в положення C, то добуток R_1R_2 переводить систему з A в C, водночас $R_1R_2 \neq R_2R_1$. В цьому разі одиничний елемент E – це поворот на нульовий кут, тотожна операція.

2). Група C_3. Нехай R_1, R_2 – повороти навколо осі z на кути $2\pi/3$, $4\pi/3$.

Сукупність операцій E, R_1, R_2 утворюють групу з таблицею множення Келі (табл.1.2)

Таблиця 1.2 Таблиця Келі групи C_3

C_3	E	R_1	R_2
E	E	R_1	R_2
R_1	R_1	R_2	E
R_2	R_2	E	R_1

3). Група D_3. Сукупність операцій E, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, де R_1, R_2 – повороти на кут $2\pi/3, 4\pi/3$ навколо осі z відповідно, R_3, R_4, R_5 – повороти на кут π навколо кожної з осей, що проходить вздовж бісектрисі кута рівностороннього трикутника в площині (xy) і перпендикулярних осі z. Це група симетрії рівностороннього трикутника, група його обертань, що переводять його в положення, невідмітне від початкового. Таблиця множення цієї групи має наступний вигляд (табл. 1.3):

Таблиця 1.3 Таблиця Келі групи D_3

D_3	E	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
E	E	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
R_1	R_1	R_2	E	R_4	R_5	R_3
R_2	R_2	E	R_1	R_5	R_3	R_4
R_3	R_3	R_5	R_4	E	R_2	R_1
R_4	R_4	R_3	R_5	R_1	E	R_2
R_5	R_5	R_4	R_3	R_2	R_1	E

1.4 Наслідки з визначення групи

1). У групі міститься тільки один одиничний елемент.

Нехай в групі G є два одиничні елементи: e і e'. В силу третьої властивості групи маємо: $e \cdot e' = e = e' \cdot e = e'$, тобто $e = e'$.

2). Якщо g_1 – зворотний елемент по відношенню до g, те елемент g буде зворотним по відношенню до g_1, тобто якщо $g \cdot g_1 = e$, то і $g_1 \cdot g = e$.

Насправді, нехай $g \cdot g_1 = e$. Помножимо ліворуч цей вираз на g_1, отримуємо: $g_1 \cdot g \cdot g_1 = g_1 e = g_1$, тобто $g_1 \cdot g \cdot g_1 = g_1$ Для елементу g_1, як і для кожної сукупності G, в цій сукупності є зворотний елемент g_1^{-1}. Помножимо отриману рівність $g_1 \cdot g \cdot g_1 = g_1$ на g_1^{-1} справа, отримуємо: $g_1 \cdot g \cdot g_1 \cdot g_1^{-1} = g_1 \cdot g_1^{-1}$, тобто $g_1 \cdot g \cdot e = e; g_1 \cdot g = e$, а це і є за визначенням те, що g і g_1 – взаємно зворотні елементи.

3). Для кожного елементу існує тільки один зворотний елемент.

Нехай для елементу $g_1 \in G$ є два зворотні елементи, g_2 і g_3, тобто, $g_1 g_2 = e$, $g_1 g_3 = e$. Тоді $g_1 g_2 = g_1 g_3$ Помножимо цю рівність ліворуч на g_1^{-1}, отримуємо: $g_1^{-1} g_1 g_2 = g_1^{-1} g_1 g_3$. Звідси витікає, що $g_2 = g_3$.

4). Якщо $g_1 = g_2 g_3$, то $g_1^{-1} = g_3^{-1} g_2^{-1}$.

Доказ очевидний при послідовному множенні ліворуч спочатку на g_2^{-1}, потім на g_3^{-1} і отриманий результат, нарешті, справа на g_1^{-1}.

1.5 Порядок елементів в групі

Розглянемо групу G із скінченним числом елементів. Візьмемо довільний елемент групи $g_i \in G$ і утворимо ступені цього елементу $g_i, g_i^2, g_i^3 \dots$. Оскільки число елементів в групі скінченне, члени в послідовності ступенів повинні обов'язково повторюватися. Наприклад: $g_i^{k_1} = g_i^{k_2} = g_l, k_1 > k_2$. Тоді $g_i^{k_1} = g_i^{k_1} g_i^{k_2 - k_1} = g_l g_i^{k_2 - k_1} = g_l$, оскільки

$g_l g_i^{k_2-k_1} = g_l g_l (g_i^{k_1})^{-1} = g_l g_l g_l^{-1} = g_l$. Отже, $g_i^{k_2-k_1} = e$, тобто $k_2 = k_1$. Найменший показник ступеню *k*, для якого має місце $g_i^n = e$, називається порядком елементу g_i. Сукупність елементів $g_i, g_i^2, g_i^3 ... g_i^n = e$ називається періодом або циклом елементу.

1.6 Лема про зсув

Нехай $g_1, g_2 ... g_N$ – усі елементи групи G порядку N. Тоді для $\forall g \in G$ усі елементи $gg_1, gg_2, ... gg_N$ різні і кожен з елементів послідовності з'являється один і тільки один раз.

Доказ.

Оскільки $\mathrm{ord}\, G = N$, то досить довести, що $gg_i \neq gg_j$ при $i \neq j$. Це очевидно, оскільки при $gg_i = gg_j$, помноживши це співвідношення на g^{-1} ліворуч, отримуємо $g^{-1}gg_i = g^{-1}gg_j \to g_i = g_j$, що неможливе. Аналогічний результат має місце для правого зсуву $g_1 g, g_2 g ... g_N g$.

1.7 Підгрупа

Частина елементів групи G, які самі по собі утворюють групу з тим же законом множення, називаються підгрупою групи G. Частина групи G, що залишилася, не може утворити групу, оскільки вона не містить, наприклад, одиничний елемент. Прості підгрупи групи G: одиничний елемент і сама група. Підгрупи – будівельні блоки, з яких зібрані групи, вивчення їх структури багато в чому характеризує групу.

Приклад 1.

Нехай ми маємо множину, що складається з чотирьох матриць:

$$A=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};\ B=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix};\ C=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix};\ E=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

Як операцію множення, розглянемо операцію множення матриць. Для доказу того, що ця множина є групою, побудуємо квадрат Келі (таблицю множення) цієї множини (табл. 1.4):

Таблиця 1.3 Таблиця множення групи матриць

Гр.	*A*	*B*	*C*	*E*
A	*B*	*C*	*E*	*A*
B	*C*	*E*	*A*	*B*
C	*E*	*A*	*B*	*C*
E	*A*	*B*	*C*	*E*

Видно, що множина з чотирьох матриць дійсно замкнута відносно операції множення матриць. Отже, матриці *A, B, C, E* дійсно утворюють групу 4-го порядку. Ця група має нетривіальну підгрупу, що складається з елементів *B, E*. Таблиця Келі цієї підгрупи має вигляд (табл. 1.5):

Таблица 1.5 Таблиця множення підгрупи матриць

Гр.	*B*	*E*
B	*E*	*B*
E	*B*	*E*

Матриці *B* і *E* співпадають зі зворотними. Будь-яка пара матриць, одна з яких є *E* – одинична матриця (одиничний елемент групи) – утворюють підгрупу групи G.

Приклад 2.

Ми встановили, що сукупність елементів $g_i, g_i^2, g_i^3 ... g_i^n = e$ називається періодом або циклом елементу g_i . Очевидно, що період елементу утворює підгрупу групи G. Видно, що всі елементи цієї підгрупи комутують один з одним. Отже, підгрупа абельова.

1.8 Суміжні класи. Теорема Лагранжа

Нехай H – підгрупа групи G, $H \subset G$, з елементами $h_1, h_2 ... h_m$, де m – порядок групи H. Складемо якусь послідовність сукупностей елементів групи *G*. Спочатку візьмемо елементи самої підгрупи H, потім виберемо з групи G який-небудь елемент g_1, що не міститься в H, і складемо сукупності елементів $g_1 h_1, g_1 h_2, ... g_1 h_m$, яку позначимо через $g_1 H$. Виберемо з G елемент g_2, який не міститься ні в H, ні $g_1 H$, і складемо сукупність $g_2 H$. Можна продовжити побудову таких сукупностей, поки не вичерпаємо всю групу G. В результаті отримуємо послідовності $H, g_1 H, g_2 H, ... g_m H$. Сукупність елементів $g_i H$ називається лівим суміжним класом по підгрупі H, де кожен g_i – фіксований елемент з G.

Аналогічним чином можна провести розкладання групи G на праві суміжні класи $H, Hg_1, Hg_2, ... Hg_k$. Таким чином, групу G можна розбити на підмножини, об'єднуючи в кожному з них ті елементи групи G, які відрізняються один від іншого на правий або лівий множник якої-небудь підгрупи $H \subset G$. Такі підмножини називаються суміжними класами. Будь-який фіксований елемент суміжного класу називається його представником. Очевидно, сама підгрупа H є суміжним класом (одночасно правим і лівим), так як $eH = He$ (рис. 1.1). З визначення суміжних класів випливає, що всі вони мають однакову чисельність, і це число дорівнює порядку групи H: $\operatorname{ord}(g_m H) = \operatorname{ord}(Hg_m) = m$

Суміжний клас не є групою, так як він не може містити ні жодного одиничного (тотожного) елемента E, ні будь-якого іншого елемента групи G (див. рис. 1.1). Процедура розбиття скінченної групи на праві (ліві) суміжні класи триває, поки не буде вичерпано всі елементи групи G. В результаті отримуємо шукане розбиття, яке можна записати, як:

$$G = H \cup g_1 H \cup g_2 H \cup \ldots \cup g_k H$$

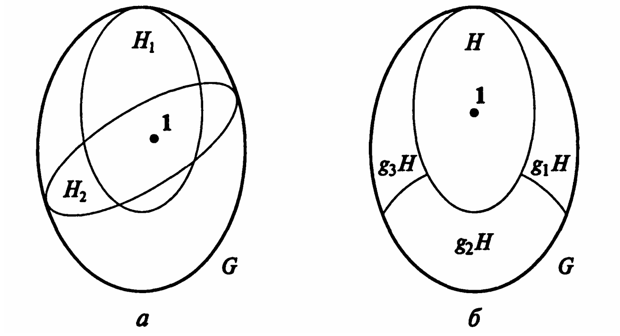


Рис. 1.1 Підмножини в групі G: а – підгрупи в групі G; б – розбиття G на чотири ліві суміжні класи по підгрупі H

<u>Теорема</u>. Ліві (праві) суміжні класи або співпадають, або не перетинаються.

<u>Доказ.</u> Нехай $g \in Hg_1$ і $g \in Hg_2$, тобто класи Hg_1 і Hg_2 мають загальний елемент. Тоді існують такі елементи $h_1, h_2 \in H$, що $g = h_1 g_1 = h_2 g_2$. Помноживши цю рівність зліва на h_1^{-1}, отримуємо: $h_1^{-1} h_1 g_1 = h_1^{-1} h_2 g_2$, або $g_1 = h_1^{-1} h_2 g_2 = h_3 g_2$, де $h_3 = h_1^{-1} h_2 \in H$. Тоді $Hg_1 = Hh_3 g_2$, і g_1 разом зі всім класом Hg_1 належить до $Hg_2 : Hg_1 \subset Hg_2$. З іншого боку, множачи це ж рівність $g = h_1 g_1 = h_2 g_2$ зліва на h_2^{-1}, отримуємо: $h_2^{-1} h_1 g_1 = h_2^{-1} h_2 g_2$ або $g_2 = h_2^{-1} h_1 g_1 = h_3' g_1$, де $h_3' = h_2^{-1} h_1 \in H$, що означає, що $Hg_2 \subset Hg_1$. Тому $Hg_2 = Hg_1$. Отже, класи, що мають загальний елемент, співпадають. Це твердження аналогічним чином доводиться для правих суміжних класів.

З іншого боку, нехай $h_1 g_1 = h_2 g_2$. Помножимо зліва на h_2^{-1}, отримуємо: $g_1 h_1 h_2^{-1} = g_2 h_2 h_2^{-1} = g_2$, тобто $g_2 = g_1 h_1 h_2^{-1} = g_1 h_3$, де $h_3 \in H$. Звідси випливає, що $g_2 \in g_1 H$, що суперечить побудові суміжних класів, при якому вибирається елемент $g_2 \in G, g_2 \notin H, g_2 \notin g_1 H$. Звідси випливає, що кожен елемент групи G входить лише в одну з сукупностей.

Якщо група G – скінченна, то кількість суміжних класів по H називається індексом підгрупи H в G і позначається $[G : H]$

Теорема Лагранжа. Порядок і індекс підгрупи H є дільником порядку групи G і $\operatorname{ord} G = [G:H] \operatorname{ord} H$, тобто порядок групи G є індекс підгрупи H в G, помножений на порядок підгрупи H.

Доказ. Так як суміжні класи не перетинаються, то всю групу можна подати як об'єднання суміжних класів:

$$G = H \bigcup g_1 H \bigcup g_2 H \bigcup ... \bigcup g_k H \tag{1.2}$$

Тому $\operatorname{ord} G = k \cdot \operatorname{org} H$, де $\operatorname{ord} G = k \cdot \operatorname{org} H$ – кількість суміжних класів. Таким чином, кількість елементів і кількість суміжних класів підгрупи H є дільник числа елементів групи G, а число елементів G є добуток кількості суміжні класи по підгрупі H на порядок підгрупи H. Теорему Лагранжа можна використовувати, щоб знайти можливі структури групи заданого порядку. Наприклад, група, порядок якої є просте число, не може мати власних підгруп.

1.9 Спряжені елементи і класи

В усіх групах число елементів має буті дуже великим. Дослідження будови груп можна спростити, якщо усередині групи виділити класи елементів з схожими властивостями.

Елемент g_a групи називається спряженим елементу g_b, якщо в групі знайдеться такий елемент $g_n \in G$, що $g_a = g_n g_b g_n^{-1}$. Якщо елементи g_b і g_c є спряженим елементу g_a, то звідси слідує, що елементи g_b, g_c також є спряжені один одному. Насправді, нехай $g_a = g_n g_b g_n^{-1}$; $g_a = g_m g_c g_m^{-1}$ для $\forall g_n, g_m \in G$. Помножимо перше співвідношення ліворуч на g_n^{-1}, отримуємо $g_n^{-1} g_a = g_n^{-1} g_n g_b g_n^{-1}$. Потім помножимо справа на g_n: $g_n^{-1} g_a g_n = g_b g_n^{-1} g_n$. Звідси $g_b = g_n^{-1} g_a g_n = g_n^{-1}(g_m g_c g_m^{-1}) g_n = (g_n^{-1} g_m) g_c (g_n^{-1} g_m)^{-1}$, тобто елементи виявилися взаємно спряженими. Для елементів групи, що спряжені один одному, це призводить до поняття класу, в якому усі елементи спряжені один з одним. При цьому не один з елементів не може належати більше, ніж одному класу. Якщо елемент належить двом класам, він має бути спряженим з усіма елементами в обох класах, і тоді елементи одного класу будуть спряжені елементам іншого, тобто два класи об'єднуються в один. Тому всяку групу можна розбити на класи спряжених елементів, що не перетинаються. Число елементів в класі називають порядком класу. Всяка кінцева група може бути розбита на декілька класів спряжених елементів. Один з цих класів завжди співпадає з одиничним елементом, оскільки він не спряжений ні з яким іншим.

Приклад. Розглянемо шість матриць:

$$E=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix};B=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$C=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix};D=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix};F=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

Ця сукупність матриць утворює групу, де груповим множенням виступає множення матриць. Таблиця Келі цієї групи має вигляд (табл. 1.6). Кожна з 36 матриць, що виходять після множення, співпадають з однією з них, тобто ці матриці утворюють замкнуту групу по множенню. Розіб'ємо цю групу на класи спряжених елементів. Наприклад, утворюємо клас С. Легко видно, що

$$C=ECE^{-1};\ B=ACA^{-1};\ A=BCB^{-1};\ C=CCC^{-1};\ A=DCD^{-1};\ B=FCF^{-1}$$

Отже, клас С, таким чином, складається з елементів А, В, С. Він також є класом A або B. Усі три елементи A, B, C мають порядок два. Таким чином, один з класів групи є $\{A, B, C\}$. Утворюємо клас D:

Таблиця 1.6 Таблиця множення елементів групи матриць

Гр.	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

$$D = EDE^{-1}; F = ADA^{-1}F = BDB^{-1}; F = CDC^{-1}; D = DDD^{-1}; D = FDF^{-1}$$

Отже, клас D (або F) складається з двох елементів D, F. Тобто, другий клас цієї групи матриць є $\{D, F\}$.

Відносно класів спряжених елементів можна висловити наступні твердження.

1). Елементи класу взаємно спряжені.

Насправді, для $\forall g_a, g_b \in C$, тобто таких, що належать класу C, з умови $g_b = g_n g_a g_n^{-1}$ виходить, що $g_n^{-1} g_b g_n = g_a$

2). Класи не мають спільних елементів, тобто не перетинаються, і група G може бути записана, як об'єднання своїх класів: $G = C_0 \bigcup C_1 \bigcup C_2 ...$, де $C_0 = e$.

Припустимо зворотне, тобто, припустимо, що класи C_1, C_2 мають спільний елемент $g_b \in C_1 \bigcap C_2$. Тоді для $g_1 \in C_1$ і $g_2 \in C_2$ отримуємо: $g_b = g_c g_1 g_c^{-1}$ і $g_b = g_n g_2 g_n^{-1}$, де $g_c, g_n \in G$. Звідси витікає, що $g_1 = g_c^{-1} g_b g_c$ і $g_2 = g_c^{-1} g_b g_c$, тобто g_1, g_2 належать одному класу, що суперечить початковому припущенню.

3). У класі усі елементи мають однаковий порядок.

Дійсно, якщо $g_a, g_b \in C$ тобто класу C, і порядок g_a рівний k, тобто $g_a^k = e$, то $g_b^k = (g_c g_a g_c^{-1})^k = g_c^k g_a^k g_c^{-k} = g_c^k g e g_c^{-k} = e$.

<u>Приклад.</u>

Розглянемо групу D_3, групу перетворень симетрії правильного трикутника. Елементами групи є: $e, C_3, C_3^2, C_2', C_2'', C_2'''$ – обертання навколо осей 3-ого порядку, перпендикулярної площини трикутника і 3-ох осей другого порядку, що лежать в площині трикутника. Порядок групи рівний шести. Порядок елементів групи дорівнює порядку операціям, що відповідають їм, в даному випадку, обертань. Елемент e має перший порядок, елементи C_2', C_2'', C_2''' – другий порядок, C_3, C_3^2 – третій порядок. Отже, кожна сукупність одного і того ж порядку утворює клас, всього три класи.

1.10 Інваріантна (нормальна) підгрупа

Нехай H – підгрупа G, $H \subset G$ і $g_i \in G$. Утворюємо сукупність (множину) елементів виду $g_i H g_i^{-1}$. Такі сукупності називаються подібними або спряженими підгрупі H в G, при цьому g_i – фіксовано. При цьому усі $h_i \in H$ пробігають групу H. Ця сукупність є підгрупою групи G і сама є групою, оскільки усі групові співвідношення виконуються і вона містить одиницю. Якщо $g_i \in H$, то ця сукупність, очевидно, співпадає з H, $g_i H g_i^{-1} \subseteq H$. Якщо ж $g_i \notin H, g_i \in G$, (g_i – фіксовано), то матимемо різні сукупності, відмінні від H. У тих випадках, коли при усіх $g_i \in G$, $g_i H g_i^{-1} \subseteq H$, тобто коли підгрупа, яка спряжена з H, співпадає з самою підгрупою H, H називається інваріантною підгрупою або нормальним дільником, або самоспряженою підгрупою. Позначають як $H \triangleleft G$.

Розглянемо деякі властивості інваріантної підгрупи.

1). Нехай Н – інваріантна підгрупа. Оскільки для $\forall h \in H$ усі елементи $ghg^{-1} \in H$ $(g \in G)$ (за визначенням інваріантної підгрупи), то Н містить увесь клас елементів, спряжених з h. Отже, інваріантна підгрупа складається з цілих класів спряжених елементів ($\forall h_i$, спряжений із $h_j \in H$ за визначенням спряження).

2). Для інваріантних підгруп лівий і правий суміжні класи співпадають, оскільки $H = gHg^{-1}$, тобто $Hg = gH$ для $\forall g \in G$. Звідси можна дати друге визначення інваріантній підгрупі: підгрупа Н інваріантна в групі G, якщо ліві і праві суміжні класи по будь-якому елементу співпадають.

<u>Приклад.</u>

Група D_3, в ній є один нормальний дільник $\left\{e, C_3, C_3^2\right\}$ – підгрупа, складається з класу спряжених елементів. Є ще три підгрупи $\left\{e, C'_2\right\}, \left\{e, C''_2\right\}, \left\{e, C'''_2\right\}$, вони не складаються з цілих класів спряжених елементів і жодна з них не є нормальним дільником. Підгрупа $H \subset G$ нормальна тільки у тому випадку, коли вона є об'єднанням класів спряжених елементів, тобто коли Н разом з кожним своїм елементом містить усі спряжені елементи. (є абельовой).

1.11 Фактор-група

Нехай Н – інваріантна підгрупа G, $H \subset G$. Розкладемо G на суміжні класи по підгрупі Н: $H, g_1H, g_2H \ldots g_kH$. Розглянемо два суміжні класи g_iH, g_jH . Визначимо добуток елементів цих суміжних класів, як множина

$g_i h' \cdot g_j h''$, де $h'', h'' \in H$ і пробігають всю групу Н. У загальному випадку ми отримуємо множину, куди входять представники різних суміжних класів, які не перетинаються. Але якщо Н – інваріантна підгрупа, то: $(g\ H)\cdot(g_j H) = (g_i H)\cdot(Hg_j) = g_i H \cdot Hg_j = g_i H g_j = g_i g_j H$. Очевидно, що добуток спряжених сукупностей Н на Н не міняє цієї сукупності. Тому $g_i H \cdot g_j H = g_i g_j H$. Крім того, $(gH)\cdot(g^{-1}H) = H$. Отже, визначена операція множення на сукупність лівих суміжних класів по інваріантній підгрупі. Ця операція задовольняє аксіомам 1-4 групового визначення. Роль одиничного елемента грає клас $eH = H$, зворотним для $g_i H$ є клас $g_i^{-1}H$. Отже, щодо інваріантної підгрупи ліві суміжні класи можна розглядати, як елементи деякої групи. Вона називається фактор-група і позначається G/H. Елементами фактор-групи є суміжні класи. Якщо $\operatorname{ord} G < \infty$, то $\operatorname{ord} G/H$ дорівнює індексу Н.

Приклад.

Суміжними класами по нормальній підгрупі $H\left\{e, C_3, C_3^2\right\}$ групи D_3 є множини Н і $C_2'H$: $C_2'H = \left\{C_2', C_2'', C_2'''\right\}$, оскільки $H \cdot H = H$, і для розгляду фактор-групи G/H маємо наступну таблицю множення (табл. 1.7):

Таблиця 1.7 Таблиця множення для суміжних класів

Гр.	H	$C_2'H$
H	H	$C_2'H$
$C_2'H$	$C_2'H$	H

1.12 Ізоморфізм і гомоморфізм

1°. Якщо між елементами двох груп існує взаємно-однозначна відповідність, яка не порушується при груповому множенні, то такі групи називаються ізоморфними. Нехай G і $\tilde{G}$ – ізоморфні групи. Тоді, якщо елементам g_i і g_k групи відповідають елементи $\tilde{g}_i$ і $\tilde{g}_k$ групи $\tilde{G}$, $g_i \leftrightarrow \tilde{g}_i, g_k \leftrightarrow \tilde{g}_k$, то $g_i g_k = g_l \leftrightarrow \tilde{g}_l = \tilde{g}_i \tilde{g}_k$. Іншими словами, групи G, $\tilde{G}$ називають ізоморфними, якщо існує взаємно-однозначне відображення групи G на групу $\tilde{G}$, що зберігає групову операцію, тобто таке, що $\forall g_1, g_2 \in G$ маємо: $\varphi(g_1)\varphi(g_2) = \varphi(g_1 g_2)$. Відображення φ називається ізоморфізмом груп G і $\tilde{G}$.

Зауважимо, що якщо e – одиниця групи G, а $\tilde{e}$ – одиниця групи $\tilde{G}$, то $\varphi(e) = \tilde{e}$. Крім того:

а) $\varphi^{-1}(g_1 g_2) = \varphi^{-1}(g_1)\varphi^{-1}(g_2)$

б) $\forall \tilde{g} \in \tilde{G}$ з рівності $\tilde{e} = \varphi(e) = \varphi(g g^{-1}) = \varphi(g)\varphi(g^{-1})$ випливає, що зворотним до елементу $\varphi(g)$ є елемент $\varphi(g^{-1})$.

Ізоморфне відображення групи на себе називається автоморфізмом – Aut G.

Очевидно, ізоморфні скінченні групи мають однакове число елементів, ізоморфні групи повністю збігаються за структурою і з точки зору теорії груп, не відрізняються одна від одної. Проте, насправді такі групи можуть відрізнятися фізичним або геометричним змістом їх елементів, відрізнятися природою своїх елементів, але володіти однаковими груповими властивостями. Встановлення ізоморфізму груп дозволяє звести дослідження даної групи до вивчення іншої групи, ізоморфній з нею.

2°. Іншим важливим поняттям в теорії груп є гомоморфізм. Якщо кожному елементу групи G відповідає тільки один певний елемент групи $\tilde{G}$, а кожному елементу групи $\tilde{G}$ відповідає кілька елементів групи G, причому це відповідність зберігається при груповому множенні, то кажуть, що група $\tilde{G}$ гомоморфна групі *G*. Іншими словами, відображення групи *G* на групу $\tilde{G}$ називається гомоморфізмом, якщо воно просто зберігає групову операцію: $\psi(g_1)\psi(g_2)=\psi(g_1g_2)$ для $\forall g_1,g_2\in G$, де $\psi(g_1),\psi(g_2)\in\tilde{G}$ і перемножують за законом групи $\tilde{G}$. Позначення $G\xrightarrow{Hom}\tilde{G}$:– гомоморфізм *G* на $\tilde{G}$ (читається справа наліво: $\tilde{G}$ гомоморфна *G*).

Розглянемо деякі властивості гомоморфних груп.

а) Якщо група $G\xrightarrow{Hom}\tilde{G}$ ($\tilde{G}$ гомоморфна *G*), то одиничному елементу *G* відповідає одиничний елемент $\tilde{G}$.

Нехай e– одиничний елемент G, $e\in G$. Тоді $\forall g\in G \quad eg=ge=g$. Нехай $\tilde{e},\tilde{g}\in\tilde{G}$, а $e,g\to\tilde{e},\tilde{g}$. В силу гомоморфизма звідси випливає, що $eg\to\tilde{e}\tilde{g};\ ge\to\tilde{g}\tilde{e}$. Так як $eg=ge=g$, отже, $\tilde{e}\tilde{g}=\tilde{g}\tilde{e}=\tilde{g}$. Звідси, $\tilde{e}$ – одиничний елемент $\tilde{G}$.

б) Якщо група $G\xrightarrow{Hom}\tilde{G}$ ($\tilde{G}$ гомоморфна *G*), то взаємно оберненим елементам групи G відповідають взаємно обернені елементи групи $\tilde{G}$.

Нехай $g_i,\ g_k\in G,\ g_ig_k=e;\ g_i\to\tilde{g}_i,\ g_k\to\tilde{g}_k;\ e\to\tilde{e}$ – чинності гомоморфізму груп $\tilde{G}$ і G. Отже, $g_ig_k\to\tilde{g}_i\tilde{g}_k=\tilde{e}$.

Питання для самоконтролю

1. В якому сенсі розуміється і інтерпретується сукупність симетрій фізичного об'єкту? Як встановити та виміряти симетричність? Як розуміється симетричність у фізиці?

2. Чім відрізняються дискретні і неперервні перетворення?

3. Перетворення симетрії та операції симетрії – чи є між ними різниця? Що таке елементи симетрії?

4. Які чотири властивості визначають групу? Як відрізняються одна

від одної скінченна група, нескінченна група, абельова група?

5. Що розуміється під терміном «груповий добуток елементів групи»?

6. Наведіть приклади скінченних та нескінченних груп у математиці, фізиці, хімії.

7. Для чого застосовують таблицю Келі або квадрат Келі ? Що можна розповісти про групу, якщо подивитися на таблицю Келі?

8. Доведіть слідства 1– 4 з визначення груп.

9. Як визначається порядок елемента у групі, його цикл та його ступінь?

10. Підгрупа є частиною групи? Завжди у групи є підгрупа?

11. Чи є групою правий/лівий суміжний клас якоїсь групи? Якщо це не група, то чому? Сформулюйте і доведіть теорему про праві/ліві суміжні класи. У чому сенс цієї теореми?

12. Який наслідок використання теореми Лагранжа? Де вона може бути застосована?

13. Як визначаються спряжені елементи груп? Класи спряжених елементів перетинаються? Чому одиничний елемент завжди є окремий клас? Доведіть твердження 1-3 про спряжені елементи.

14. Які основні властивості інваріантної підгрупи? Чому у цій підгрупі праві і ліві суміжні класи співпадають?

15. Як співвідносяться між собою група та її фактор-група?

16. Можна вважати ізоморфні групи такими, що співпадають за своєю структурою, але мають різне походження своїх елементів?

17. Сформулюйте властивості ізоморфізму і гомоморфізму. Чи є гомоморфні групи ідентичними? Що у цих груп є ідентичним?

18. За якім правилом визначається групове множення у гомоморфних і ізоморфних груп?

19. Які ви знаєте типи відображення групи G на групу $\tilde{G}$?

Розділ II
Теорія представлення скінченних груп

2.1 Оператори і матриці

У застосуванні теорії груп до дослідження симетрії інтерес представляє часто не структура самій по собі групи, а перетворення і зміни, які індукують в тих або інших фізичних системах і об'єктах елементи груп. Об'єктами, що піддаються діям елементів груп в загальному випадку являються або координати складових частин деяких фізичних систем, або функції координат. Ці об'єкти, зокрема, координати, можна розглядати, як вектори в деякому просторі.

З іншого боку, симетрії, з якими мають справу у фізиці, хімії, реалізуються через лінійні перетворення величин, які характеризують фізичну систему. Елементи абстрактних груп і самі групи реалізуються при своїй дії на фізичну систему через свої лінійні представлення операторами і матрицями, що задані і діють в цьому самому просторі. Тому представлення груп, з якими ми матимемо справу, реалізовані в скінченновимірних лінійних просторах. У загальному випадку ці простори вважатимемо комплексними (унітарними).

2.1.1 Лінійні векторні простори

Визначення. Множина R елементів x, y, z будь-якої природи називають лінійним або афінним простором, якщо виконуються наступні три вимоги:

I Є правило, за допомогою якого будь-яким двом елементам $x, y \in R$ ставиться у відповідність третій елемент z цього простору, що називається сумою x і y: $z = x + y;\ z \in R$;

II Є правило, за допомогою якого $\forall x \in R$ і для $\forall \lambda$ речовинного, ставиться у відповідність елемент u цієї множини, що називається добутком елементу x на λ: $u = x\lambda = \lambda x; u \in R$;

III Вказані два правила підкоряються наступним восьми аксіомам:

1. $x + y = y + x$;

2. $(x + y) + z = x + (y + z)$;

3. існує нульовий елемент, такий, що $x + 0 = x, x \in R$;

4. $\forall x \; \exists x'$, протилежний елементу x такий, що $x + x' = 0$;

5. $1 \cdot x = x \;\; \forall x \in R$;

6. $\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x$;

7. $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$;

8. $\lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y \;\; \forall x, y \in R$

При введенні поняття лінійного простору абстрагуються не лише від природи об'єкту, а і від конкретного виду правил утворення суми елементів і добутку елементів на число [4, 21, 51].

Приклади. Множина вільних векторів 3-вимірного простору (простір B_3). Множина векторів на площині і на прямій теж є лінійними просторами B_2 і B_1 відповідно.

Простір матриць $m \times n$.

Простір безперервних функцій.

Простір функцій, що є рішенням диференціального рівняння.

1^o Лінійний простір R називається нормованим, якщо в R визначено правило, за допомогою якого кожним двом елементам $x, y \in R$ ставиться у відповідність число $\rho(x, y)$, – відстань між x і y, яке має таку властивість:

$\rho(x, y) = \rho(y, x)$ – симетрія;

$\rho(x, y) = 0 \rightarrow x = y$;

$\rho(x, y) \le \rho(x) + \rho(y) \;\; \forall x, y \in R$;

$$\rho(\lambda x) = |\lambda| \rho(x) \quad \forall x \in R, \forall \lambda .$$

Величина ρ називається нормою $\rho = \|x - y\|$. Лінійний простір, в якому задана норма, називають нормованим простором. Норму будь-якого числа позначають $\|x\| = \rho(x, 0)$. Норма може задаватися яким завгодно способом [51].

2° Введемо поняття комплексного евклідова простору L, як комплексного лінійного простору із заданим в нім скалярним добутком двох його елементів $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Скалярний добуток визначають як числову комплекснозначну функцію двох векторів, яка задовольняє таким умовам:

$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \overline{(\mathbf{y}, \mathbf{x})}$;

$(\lambda \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda (\mathbf{x}, \mathbf{y})$;

$(\mathbf{x_1} + \mathbf{x_2}), \mathbf{y} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}_2, \mathbf{y})$;

$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0;\ (\mathbf{x}, \mathbf{x}) > 0$ при $\mathbf{x} \neq 0$

Довжина (норма вектору) в такому просторі $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$. Можна переконатися, що усі властивості норми, введеної таким чином, як вище, задовольняються.

Нормований простір називається повним, якщо будь-яка фундаментальна послідовність (або послідовність Коші) в ньому сходиться, тобто, якщо для $\forall \varepsilon > 0 \ \exists\ N(\varepsilon)$ таке, що $\rho(x_n, x_m) < \varepsilon$ при $\forall n, m > N(\varepsilon)$.

Повний нормований простір називається Банаховим простором або B-простором [4, 51].

3° Система ненульових векторів $\{\mathbf{x_i}\} \in R$ називається ортогональною, якщо $(\mathbf{x_i} \mathbf{x_j}) = 0$ при $i \neq j$. Якщо вектори $\{\mathbf{x_i}\}$ ортогональні, то вони лінійно незалежні, що означає: не існує дійсних чисел $\alpha, \beta, \gamma \ldots$ таких, що лінійна комбінація елементів $\mathbf{x_i}$ з цими числами є нульовим елементом, тобто лінійна комбінація дорівнює нулю.

Якщо ортогональна система векторів повна, тобто найменший замкнутий підпростір, що містить її, є в її R, то така система векторів називається ортогональним базисом [21].

Якщо норма кожного елементу в ортогональному базисі дорівнює одиниці, то система $\{\mathbf{x_i}\}$ є ортогональним нормованим базисом і тоді

$$(\mathbf{x_i}\mathbf{x_j}) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$

Якщо в просторі R можна знайти n лінійно незалежних елементів, а будь-які $n+1$ елементів цього простору лінійно залежна, то простір має розмірність n. Якщо в R можна вказати систему з довільного скінченного числа лінійно незалежних елементів, то простір нескінченновимірний. Доводиться, що у будь-якому n-вимірному просторі Евкліда існує ортонормований базис [4]. Надалі вважатимемо, що $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \ldots)$ – довільні вектори простору L.

4^{o} Нехай ми маємо довільний ортонормований базис n-вимірного евклідового простору $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \ldots \mathbf{e_n}$, а **x**, **y** – два довільних елемента цього простору. Позначимо координати елементів **x**, **y** щодо цього базису через $(x_1, x_{2,} \ldots x_n)$ і $(y_1, y_2 \ldots y_n)$ відповідно, тобто $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e_1} + x_2\mathbf{e_2} + \cdots + x_n\mathbf{e_n}$; $\mathbf{y} = y_1\mathbf{e_1} + y_2\mathbf{e_2} + \cdots + y_n\mathbf{e_n}$. Знайдемо, що вираз для скалярного добутку $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ цих елементів через їх координати відносно базису має вигляд

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\sum_i^n x_i \mathbf{e_i}, \sum_j^n y_j \mathbf{e_j} \right) = \sum_i \sum_j x_i y_j (\mathbf{e_i}\mathbf{e_j}) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n \qquad (2.1)$$

в силу аксіом скалярного добутку та умови ортогональності базисних векторів. Таким чином, в ортонормованому базисі скалярний добуток двох будь-яких елементів дорівнює сумі добутків відповідних координат цих елементів.

Нехай ми маємо розкладання $\mathbf{x} = \sum_{i}^{k} x_i \mathbf{e_i}$. Помноживши праву і ліву частини на $\mathbf{e_k}$ скалярне і використовуючи аксіоми скалярного добутку, отримуємо:

$$(\mathbf{xe_k}) = \left(\sum_{i}^{n} x_i \mathbf{e_i e_k} \right) = \sum_{i}^{n} x_k (\mathbf{e_i e_k}) = x_k \; ; \; x_k = \mathbf{xe_k} \; ; \qquad (2.2)$$

Таким чином, координати довільного елемента щодо ортогонального базису дорівнюють скалярним добуткам цього елемента на відповідні базисні вектори.

5^{o} Не пуста підмножина R' лінійного простору R називається підпростором, якщо воно саме утворює лінійний простір по відношенню до визначених в R операціях складання і множення на число. Іншими словами, $R' \subset R$ є підпростір, якщо з того, що для $\forall x, y \in R'$ витікає, що $\alpha x + \beta y \in R'$ при $\forall \alpha, \beta$.

Прості приклади.

1). Нульовий підпростір, тобто підмножина лінійного простору R, складається з одного нульового елементу; увесь простір R.

2). Множина усіх вільних векторів в 3-вимірному просторі утворює лінійний простір B_3, аналогічна множина векторів на площині і на прямій є просторами B_2 і B_1 відповідно, оскільки для них визначені правила складання, множення на число, що задовольняють аксіомам лінійного простору. Підмножина B_2 усіх вільних векторів, паралельних деякій площині в лінійному просторі B_3 є підпростір B_3.

Можна стверджувати, що розмірність будь-якого підпростору n-вимірного лінійного простору R не перевищує розмірність n простору R. Точніше, якщо підпростір R' не співпадає з усім n-вимірним лінійним простором R, то розмірність підпростору строго менше n [4, 21].

Нехай R_1 і R_2 – два довільних підпростори одного і того ж простору R. Сукупність усіх елементів простору R, що належать одночасно R_1 і R_2, $R_1 \bigcap R_2$, утворює підпростір простору R, що називається перетином R_1 і R_2, оскільки елементи цієї сукупності задовольняють вимогам, сформульованим для підпросторів.

Сукупність усіх елементів простору *R* виду $x + y$, де $x \in R_1, y \in R_2$, утворюють підпростір простору *R*, що називається сумою підпросторів $R_1 + R_2$ [21].

<u>Приклад.</u> Якщо R - лінійний простір усіх вільних векторів в 3-вимірному просторі B_3 , R$_1$ – підпростір усіх вільних векторів, паралельних площині xOy, R_2, – підпростір усіх вільних векторів, паралельних площині xOz, тоді $R_1 + R_2 = R$. Насправді, $\forall \mathbf{x} \in R$ $\mathbf{x} = \alpha\mathbf{i} + \beta\mathbf{j} + \gamma\mathbf{k}$, при цьому $\alpha\mathbf{i} + \beta\mathbf{j} \in R_1, \gamma\mathbf{k} \in R_2$, а $R_1 \bigcap R_2$ є множина усіх вільних векторів, паралельних осі Ox.

Нехай R_1 і R_2 – два підпростори лінійного n- вимірного простору R. Говоритимемо, що простір R є прямою сумою підпросторів R_1 і R_2, якщо кожен елемент *X* простору R може бути єдиним способом представлений у вигляді суми $X = x_1 + x_2$, де $x_1 \in R_1, x_2 \in R_2$, а $R = R_1 \oplus R_2$. Ця рівність означає розкладання простору R в пряму суму підпросторів R_1 і R_2.

<u>Приклад.</u> Простір R усіх вільних векторів можна розкласти в пряму суму підпростору R_1 усіх векторів, паралельних xOy і R_2 усіх векторів, паралельних осі oz. Відмінність прямої і звичайної сум підпросторів в тому, що $\mathbf{X} = \mathbf{x_1} + \mathbf{x_2}$, де $\mathbf{X} \in R, \mathbf{x_1} \in R_1, \mathbf{x_2} \in R_2$ виконується в обох випадках, але для прямої суми цей спосіб єдиний, для звичайної суми не єдиний. Так, нехай $\mathbf{X} = \alpha\mathbf{i} + \beta\mathbf{j} + \gamma\mathbf{k}$.. З однієї сторони можна записати

$\mathbf{X} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2$, де $\mathbf{x}_1 = \alpha\mathbf{i} + \beta\mathbf{j} \in R_1$, $x_2\mathbf{k} \in R_2$. З іншої сторони, $\mathbf{X} = \mathbf{x}_1' + \mathbf{x}_2'$, де $\mathbf{x}_1' = \beta\mathbf{j} \in R_1$, $\mathbf{x}_2' = \alpha\mathbf{i} + \gamma\mathbf{k} \in R_2$.

Доводяться теореми, що сума підпросторів R_i є прямою тоді, коли $R_i \bigcap (R_1 + R_2 + \cdots + R_m) = 0$ для $\forall i = 1 \cdots m$, і сума $R = R_1 + R_2 + \cdots + R_m$ є прямою тоді і тільки тоді, коли $\dim R = \sum_{i=1}^{m} \dim R_i$ [4, 21].

6° Оскільки в лінійних просторах Евкліда введені лише операції складання елементів, множення на число і скалярного добутку, то два простори Евкліда R і R' називаються ізоморфними, якщо між елементами цих просторів можна встановити взаємно-однозначну відповідність так, що якщо елементам $x, y \in R$ відповідають елементи $x', y' \in R'$, при цьому $x \leftrightarrow x'$, $y \leftrightarrow y'$, то елементам $(x+y) \leftrightarrow (x'+y'), \alpha x \leftrightarrow \alpha x', (x,y) \leftrightarrow (x',y')$. Інакше кажучи, ізоморфізм просторів Евкліда – це взаємно-однозначна відповідність, що зберігає як лінійні операції, визначені в цих просторах, так і скалярний добуток. [21].

Доводиться, що усі простори Евкліда однієї і тієї ж розмірності n ізоморфні один одному [4]. Простори Евкліда нескінченного числа вимірів не обов'язково ізоморфні один одному.

2.1.2 Лінійні оператори

У цьому розділі розглядаються комплексні евклідові скінченовимірні простори.

1° Нехай ми маємо два лінійні простори V і W розмірності m і n відповідно. Називатимемо оператором A, що діє з V в W, відображення виду A: $V \to W$, що ставить у відповідність кожному елементу x простору

V деякий елемент у простору W. Позначення: $y = A(x)$ або $y = Ax$, де $x \in V, y \in W$

Визначення. Оператор A, що діє з V в W називається лінійним, якщо для будь-яких елементів $x_1, x_2 \in V$ і будь-якого комплексного числа λ виконуються співвідношення:

1) $A(x_1 + x_2) = Ax_1 + Ax_2$

2) $A(\lambda x) = \lambda Ax$

Зауваження.

а) якщо простір W співпадає з простором V, то лінійний оператор A, що діє в цьому випадку з V в V, називається лінійним перетворенням V.

б) надалі обмежимося розглядом тільки лінійних операторів, оскільки усі оператори, що представляють інтерес з точки зору симетрії – лінійні.

2^o Розглянемо множину L (V, W) лінійних операторів, що діють з V в W. У цій множині визначимо операції суми операторів і множення оператора на скаляр.

Нехай A і B – два лінійні оператори, що діють з V в W. Сумою цих операторів назвемо лінійний оператор $A + B$, який визначається рівністю $(A + B)x = Ax + Bx$.

Добутком лінійного оператора A на скаляр λ назвемо лінійний оператор λA, визначуваний рівністю $(\lambda A)x = \lambda(Ax)$

Назвемо нульовим оператор, що позначається символом 0 ($A = 0$) і що відображає усі елементи простору V в нульовий елемент простору W. Іншими словами, оратор 0 діє за правилом $0x = 0$.

Для кожного оператора A визначимо протилежний оператор (–A) співвідношенням $-A = (-1)A$.

Очевидно, що множина L (V, W) усіх лінійних операторів, що діють з V в W з вказаними вище операціями, утворює лінійний простір, оскільки для нього визначені сума двох елементів, множення на будь-яке число, нульовий елемент і протилежний елемент.

2.1.3 Матричний запис лінійних операторів

Нехай в лінійному просторі L зафіксований базис $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2} \cdots \mathbf{e_n}$, нехай $\mathbf{x}$ – довільний елемент простору L, і нехай $\mathbf{x} = \sum_{k=1}^{n} x_k \mathbf{e_k}$ – розкладання елементу $\mathbf{x}$ за заданим базисом, де x_k – координати $\mathbf{x}$ відносно базису $\mathbf{e_k}$, – будь-які дійсні числа. Нехай A – лінійний оператор з L (V, V). Тоді маємо:

$$A\mathbf{x} = \sum_{k=1}^{n} x_k A\mathbf{e_k} \tag{2.3}$$

Вектор $\mathbf{e_k}$ – базисний вектор. Позначимо дію оператора A на базисний вектор як $\mathbf{e'_k}$. Дія оператора в лінійному просторі з базисом задана, якщо задана дія оператора A на базисні вектори $A\mathbf{e_k} = \mathbf{e'_k}$. Оператор A діє в просторі L і відображає усі величини в той же простір. Оскільки вектори $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2} \cdots \mathbf{e_n}$ утворюють базис, вектор $\mathbf{e'_k}$ можна розкласти за цім базисом:

$$\mathbf{e'_k} = A\mathbf{e_k} = \sum_{j=1}^{n} a_{jk} \mathbf{e_j} \tag{2.4}$$

Таким чином, перетворення усього базису повністю задається набором коефіцієнтів a_{jk}. Тоді для довільного вектора отримуємо:

$$A\mathbf{x} = \sum_{k=1}^{n} x_k A\mathbf{e_k} = \sum_{k=1}^{n} x_k \sum_{j=1}^{n} a_{jk} \mathbf{e_j} = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k \right) \mathbf{e_j} \tag{2.5}$$

Якщо $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$ і елемент $\mathbf{y}$ має координати $y_1, y_2, \cdots y_n$, тобто $\mathbf{y} = \sum_{y=1}^{n} y_j \mathbf{e_j}$, то порівнюючи співвідношення $\sum_{j=1}^{n} y_j \mathbf{e_j} = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k \right) \mathbf{e_j}$ отримуємо:

$$y_j = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k \,, \; j = 1 \cdots n \qquad (2.6)$$

Квадратна матриця A з елементами a_{jk}, $A = (a_{jk})$ називається матрицею оператора в заданому базисі $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2} \cdots \mathbf{e_n}$. Формула (2.4) $\mathbf{e'_k} = \sum_{j=1}^{n} a_{jk} \mathbf{e_j}$ зв'язує нові перетворені базисні вектори з початковим базисом, а формула (2.6) $y_j = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k$, $j = 1 \cdots n$ – компоненти будь-якого перетвореного вектору з його первинними компонентами, причому і ті, і інші компоненти відносяться до початкового базису.

Таким чином, кожному операторові A з L (V, V) при заданому базисі лінійного простору V відповідає (зіставляється) матриця A цього оператора. Виникає зворотне питання: чи кожній цій матриці A при заданому базисі в V можна поставити у відповідність лінійний оператор A, матрицею якого буде ця матриця? Доводиться [4, 21], що якщо в лінійному просторі V заданий базис $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2} \cdots \mathbf{e_n}$ і $A = (a_{jk})$ – квадратна матриця з n рядків і n стовпців, то існує єдиний лінійний оператор A, матрицею якого в заданому базисі є матриця A.

Ранг лінійного оператора A дорівнює рангу матриці A цього оператора: $\mathrm{rang} A = \mathrm{rang} \|A\|$.

<u>Зауваження.</u> Якщо розміри просторів не співпадають, тобто, якщо ми маємо перетворення типу $A: V \to W$, де розмірність V є n, розмірність W є m, то образ простору $V \to W$ є лінійним підпростором, розмір якого є ранг матриці, тобто не перевершує n.

Якщо базис $\mathbf{e_i}$ – ортонормований, то можлива ще одна інтерпретація матричних елементів a_{jk}. Обчислимо скалярний добуток $(\mathbf{e_j e}'_i)$, отримаємо: $(\mathbf{e_j e}'_i) = \mathbf{e_j} A \mathbf{e_i} = \sum_k a_{ki}\delta_{jk} = a_{ji}$. Таким чином, матричний елемент a_{ji} – це скалярний добуток $(\mathbf{e_j} A \mathbf{e_i})$, де оператор А вкладений між двома базисними векторами.

2.1.4 Дії з операторами. Зворотний оператор

Добутком TS двох операторів T і S у векторному просторі L назвемо результат дії спочатку оператора S, а потім оператора T. Якщо векторний простір з базисом і якщо $S\mathbf{e_i} = \sum_j S_{ji}\mathbf{e_j}$; $T\mathbf{e_j} = \sum_k T_{kj}\mathbf{e_k}$, то

$$TS\mathbf{e_i} = \sum_j S_{ji} T\mathbf{e_j} = \sum_j \sum_k S_{ji} T_{kj}\mathbf{e_k} = \sum_k \left\{ \sum_j T_{kj} S_{ji} \right\} \mathbf{e_k} \tag{2.7}$$

Таким чином, матричні елементи добутку TS мають вигляд $(TS)_{ki} = \sum_j T_{kj} S_{ji}$. Звідси ясно, що матриця добутку операторів TS є звичайний добуток матриць T і S у вказаному порядку. При цьому оператори, як і матриці, в загальному випадку не комутують. Різниця $TS - ST$ двох різних добутків операторів T і S називають їх комутатором, який сам є оператором. Прийнято вважати, що оператор діє на вектор, що знаходиться праворуч від нього.

Якщо $T\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ у векторному просторі, то можна визначити зворотний оператор T^{-1} співвідношенням $\mathbf{r} = T^{-1}\mathbf{r}'$. Очевидно, що $T^{-1}T = TT^{-1} = E$ – тотожний оператор. У будь-якому довільному базисі він дається одиничною діагональною матрицею. Матриця T^{-1} – матриця, зворотна T. При цьому передбачається, що зворотна матриця існує, а перетворення мають бути взаємно однозначні, і детермінант $T \neq 0$.

<u>Доведемо,</u> що $(TS)^{-1} = S^{-1}T^{-1}$. Насправді, оскільки $(TS)^{-1}TS = T$, то, помноживши справа останнє співвідношення на S^{-1}, отримаємо $(TS)^{-1}TSS^{-1} = S^{-1}$; тобто $(TS)^{-1}T = S^{-1}$; помноживши останнє справа на T^{-1}, маємо; $(TS)^{-1}TT^{-1} = S^{-1}T^{-1}$. Твердження доведене.

2.1.5 Лінійний спряжений і самоспряжений оператор. Унітарний оператор

Нехай V – скінченовимірний простір Евкліда. Розглянемо лінійні оператори з L (V, V).

1°. Оператор A^+ з L (V, V) називається спряженим операторові A, якщо для $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ виконується співвідношення: $(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^+\mathbf{y})$, де $(A\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $(\mathbf{x}, A^+\mathbf{y})$ – скалярний добуток.

Очевидно, що оператор A^+, спряжений до лінійного оператора, сам є лінійним оператором . Насправді, за визначенням

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\overline{\mathbf{y}, \mathbf{x}})$$

$$(\lambda\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda(\overline{\mathbf{y}, \mathbf{x}})$$

$$(\mathbf{x}, \lambda\mathbf{y}) = (\overline{\lambda\mathbf{y}, \mathbf{x}}) = \overline{\lambda(\mathbf{y}, \mathbf{x})} = \overline{\lambda}(\overline{\mathbf{y}, \mathbf{x}}) = \overline{\lambda}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

Тому

$$\begin{aligned}(A\mathbf{x}, \alpha\mathbf{y_1} + \beta\mathbf{y_2}) &= (\overline{\alpha\mathbf{y_1} + \beta\mathbf{y_2}, A\mathbf{x}}) = \overline{\alpha}(\overline{\mathbf{y_1}, A\mathbf{x}}) + \overline{\beta}(\overline{\mathbf{y_2}, A\mathbf{x}}) = \overline{\alpha}(A\mathbf{x}, \mathbf{y_1}) + \overline{\beta}(A\mathbf{x}, \mathbf{y_2}) = \\ &= \overline{\alpha}(\mathbf{x}, A^+\mathbf{y_1}) + \overline{\beta}(\mathbf{x}, A^+\mathbf{y_2}) = \left(\mathbf{x}, A^+(\alpha\mathbf{y_1} + \beta\mathbf{y_2})\right)\end{aligned}$$

Відмітимо наступні властивості спряжених операторів:

$$E^+ = E;\ (A+B)^+ = A^+ + B^+;\ (\lambda A)^+ = \overline{\lambda}A^+;\ (A^+)^+ = A;\ (AB)^+ = B^+A^+$$

Існує теорема [4, 21] про те, що у векторному просторі із скалярним добутком, що має ортонормований базис, матриця оператора A^+ виходить з матриці оператора A шляхом трансформації і комплексного спряження. Тобто, узявши замість $\mathbf{x},\mathbf{y}$ вектори ортів $\mathbf{e_1},\mathbf{e_2}$, отримуємо:

$$
\begin{gathered}
(A\mathbf{x},\mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^{+}\mathbf{y}) = \mathbf{e_i}A^{+}\mathbf{e_j} = \mathbf{e_i}\sum_k a_{kj}^{+}\mathbf{e_k} = \sum_k a_{kj}^{+}\mathbf{e_i}\mathbf{e_k} = \sum_k a_{kj}^{+}\delta_{ik} = a_{ji}^{+} \\
(A\mathbf{x},\mathbf{y}) = A\mathbf{e_i},\mathbf{e_j} = \sum_k a_{ki}\mathbf{e_k}\mathbf{e_j} = \sum_k a_{ki}\delta_{kj} = a_{ij}
\end{gathered}
\qquad (2.8)
$$

Звідси маємо $a_{ij} = a_{ji}^{+}$, тобто матриця оператора A^{+} в ортогональному базисі є трансформованою і комплексно спряженою.

Лінійний оператор A з L (V, V) називається самоспряженим, якщо справедлива рівність $A^{+} = A$. Самоспряжений оператор називають ермітовим.

2$^{\text{o}}$. Визначення. Лінійний оператор U з L (V, V) називають унітарним, якщо $\forall \mathbf{x},\mathbf{y} \in V$ справедливе співвідношення $(U\mathbf{x},U\mathbf{y}) = (\mathbf{x},\mathbf{y})$, тобто унітарний оператор не змінює скалярний добуток.

Доводиться, що для того, щоб оператор був унітарним, таким, що діє в Евклідовому просторі V, необхідно і достатньо, щоб виконувалася умова $U^{+} = U^{-1}$[4,21]. Умову унітарності записують ще у виді $UU^{+} = U^{+}U = E$. Ця остання умова важлива тим, що при цьому скалярний добуток зберігається, оскільки якщо узяти $\mathbf{r}' = U\mathbf{r}$; $\mathbf{s}' = U\mathbf{s}$, то $(\mathbf{r}',\mathbf{s}') = (U\mathbf{r},U\mathbf{s}) = (\mathbf{r},U^{+}U\mathbf{s}) = (\mathbf{r},\mathbf{s})$. Це означає, що, якщо вектори $\mathbf{e_i}$ утворюють ортонормований базис, а вектор $\mathbf{e}_i' = U\mathbf{e_i}$, то вектори $\mathbf{e}'_{\mathbf{j}}$ утворюють новий ортонормований базис. Таким чином, унітарний оператор є оператор переходу від одного ортонормованого базису до іншого.

Для ермітових або самоспряжених операторів $(H\mathbf{r},\mathbf{s}) = (\mathbf{r},H\mathbf{s})$ при будь-кому $\mathbf{r}, \mathbf{s}$: $(H\mathbf{r},\mathbf{s} = (\mathbf{r},H^{+}\mathbf{s}) = (\mathbf{r},H\mathbf{s})$, оскільки $H^{+} = H$, що виходить з визначення самоспряженого оператора.

Поняття унітарних і ермітових (самоспряжених) операторів має сенс тільки тоді, коли повністю визначені векторний простір і скалярний добуток.

3° Приклад.

У комплексному просторі Евкліда (ермітовому) важливу роль грають унітарні оператори. Аналогом унітарних перетворень в дійсному просторі Евкліда є ортогональні оператори.

Лінійний оператор P, що діє в дійсному просторі Евкліда V, називається ортогональним, якщо для будь-яких $\mathbf{x},\mathbf{y}$ з V виконується рівність: $(P\mathbf{x},P\mathbf{y})=(\mathbf{x},\mathbf{y})$, тобто ортогональний, як і унітарний оператор, зберігає скалярний добуток. Звідси витікає, що якщо $\mathbf{e_1}\cdots\mathbf{e_n}$ – ортонормований базис дійсного евклідова простору, то $P\mathbf{e_1}\cdots P\mathbf{e_n}$ – також ортонормований базис. Для ортогональних операторів, як і для унітарних $P^{+}=P^{-1}$, тобто $P^{+}P=E=PP^{+}$. Оскільки $P^{+}=P^{-1}$, то елементи ортогональних матриць пов'язані між собою співвідношенням: $\sum_{j} p_{ji}^{+} p_{jk}=\delta_{ik}$; $\sum_{j} p_{ij} p_{kj}^{+}=\delta_{ik}$. Тому якщо матриця P – дійсна, то матриця P^{+} буде транспонованою. Унітарна дійсна матриця називається ортогональною.

2.1.6 Лінійні невироджені перетворення простору

Групи перетворення простору можна задати як множина операторів, що відповідають певним умовам. Якщо лінійний простір $W\to V$, тобто лінійний простір W відображається на лінійний простір V за допомогою оператора A таким чином, що образ суми елементів дорівнює сумі образів, образ добутку на число дорівнює добутку цього числа на образ, то такий оператор називають лінійним. Лінійний оператор називають невиродженим, якщо детермінант матриці цього оператора не дорівнює нулю:

$$\text{A: } W \to V \text{ , } A(x+y) = Ax + Ay\text{ ; } A(\lambda x) = \lambda Ax \forall \lambda \neq 0$$

$$Ax, Ay \in V, \det A \neq 0$$

Розглядатимемо лінійні невироджені перетворення виду $V \to V$. Важливою властивістю невиродженого лінійного перетворення $V \to V$ є те, що кожен такий оператор відображає простір V на себе взаємно-однозначно. Іншими словами, якщо A – невироджений оператор, то $\forall \mathbf{x} \in V$ відповідає тільки один елемент $\mathbf{y} \in V$ по співвідношенню $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$, і якщо $\mathbf{y}$ – будь-який фіксований елемент простору V, то існує тільки один елемент $\mathbf{x}$, такий, що $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$.

Насправді, якщо $(A) = (a_{jk})$ – матриця A в цьому базисі, а елементи $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ мають в цьому базисі координати $x_1, x_2 \cdots x_n; y_1, y_2 \cdots y_n$, то в матричному виді співвідношення $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$ запишеться у вигляді:

$$y_j = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k \text{ , } \quad j = 1 \cdots n \tag{2.9}$$

Координати x_k можна розглядати як невідомі при заданих y_j, A – невироджений, $\det A \neq 0$; система рівнянь має єдине рішення для x_k. Це означає, що для $\forall \mathbf{y} \in V$ існує тільки один елемент $\mathbf{x}$ такий, що $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$. Таким чином, при заданому невиродженому A можна говорити про невироджене лінійне перетворення простору V, або просто про лінійне перетворення.

2.1.7 Група лінійних перетворень

Нехай V – n-вимірний лінійний простір, дійсний або комплексний з елементами $x, y, z, \cdots$, $GL(n)$ – множина усіх невироджених лінійних перетворень цього простору (перетворення $V \to V$, здійснювані лінійними операторами за умови, що $\det A \neq 0$). Визначимо в $GL(n)$ закон композиції, який назвемо множенням лінійних перетворень так, як це визначено для лінійних операторів. Добутком AB лінійних перетворень $A, B \in GL(n)$ назвемо лінійний оператор, що діє за правилом: $(AB)x = A(Bx)$, при цьому в загальному випадку $AB \neq BA$. Це перетворення невироджене, так як $\det(AB) = \det A \cdot \det B \neq 0$, оскільки $\det A \neq 0, \det B \neq 0$.

Існує наступна теорема: множина $GL(n)$ невироджених лінійних перетворень лінійного n- вимірного простору V з введеною вище операцією множення є група лінійних перетворень лінійного простору V.

Теорема доводиться перевіркою умов (б-г) визначення групи:

б) $A(BC) = (AB)C$ – виконується:

в) I - тотожне перетворення $\det I = 1 \neq 0$; $AI = IA = A$; таким чином I – одиниця групи і вона існує;

г) $\exists A^{-1}$, оскільки $\det A \neq 0$; а так як $y = Ax$, то $y_i = \sum a_{jk} x_k$. Отже, можна визначити єдиним чином координати x_k, використовуючи зворотне перетворення A^{-1}, це зворотне перетворення лінійне. Крім того, $A^{-1}A = I$, $\det A^{-1} \neq 0$. Таким чином, $GL(n)$ – група, тобто множина невироджених лінійних перетворень n-вимірного простору утворює групу.

У групи $GL(n)$ існують декілька типів підгруп. Наприклад: 1) скінченні підгрупи, що містять скінченне число елементів (підгрупа відображень відносно початку координат); 2) дискретні підгрупи – ті, що містять зчисленне число елементів (підгрупа поворотів площини біля початку координат на кути $k\varphi$, k – ціле число); 3) безперервні підгрупи – підгрупи, що містять більш, ніж зчисленне число елементів (підгрупа усіх поворотів 3-вимірного простору навколо фіксованої осі).

2.2 Представлення скінченних груп

2.2.1 Скінченновимірні представлення груп
Матричні представлення

Нами розглянуті абстрактні групи, введена аксіоматика групових співвідношень, алгебра груп. Розглянемо співвідношення між елементами групи і перетвореннями векторного простору. Питання тут можна поставити таким чином: як властивості і групові співвідношення абстрактно заданої групи можуть бути охарактеризовані за допомогою груп лінійних перетворень векторного простору.

Один із способів вирішення цього питання полягає в гомоморфному (зокрема, ізоморфному) відображенні абстрактної групи на підгрупу або на усю групу лінійних перетворень простору. Звідси витікає поняття представлення цієї групи за допомогою підгрупи групи лінійних перетворень лінійного простору.

1^o. Нехай L є довільний n-вимірний лінійний простір. Нехай є деяка скінченна група G з елементами $g_1, g_2, \cdots g_m$. Розглянемо в L яку-небудь групу лінійних операторів T, що діють із $L \to L$ із звичайною операцією множення між операторами: $T'T''x = T'(T''x)$ для $\forall x \in L, \forall T', T'' \in T$.

<u>Визначення.</u> Нехай заданий гомоморфізм групи G на групу T, $G \xrightarrow{\text{hom}} T$, тобто група T лінійних операторів в деякому просторі L гомоморфна групі G. Тоді говорять, що група T утворює представлення групи G в L.

Іншими словами, якщо у векторному просторі L можна знайти групу T лінійних операторів $T(g_a)$, які відповідають елементам g_a групи G в тому сенсі, що є лінійне перетворення T, за допомогою якого кожному елементу $g_1, g_2, \cdots g_m$ цієї групи ставиться у відповідність лінійне перетворення $T(g_a)$ з групи лінійних оператор таке, що $\forall g_a, g_b \in G$, $T(g_{a)})T(g_b) = T(g_a g_b)$, $T(E) = 1$, то таку групу T називають представленням групи G в просторі L. З вказаного визначення очевидно, що в силу гомоморфізму, оскільки $T(g_a^{-1})T(g_a) = T(g_a^{-1} g_a) = T(E) = 1$, то, отже, кожен оператор $T(g_a)$ взаємно-однозначного відображає $L \to L$ і $T(g_a^{-1}) = T^{-1}(g_a)$.

Таким чином, представлення групи G в просторі L є відображення T елементів g_a операторами $T(g_a)$ у векторному просторі L. Якщо розмірність простору L рівна n, то представлення називають n-мірним, простір L називають простором представлень, а базис в цьому просторі називають базисом представлення.

Представлення $T(g_a)$ називають точним, якщо існує взаємно-однозначна відповідність (ізоморфізм) між операторами $T(g_a)$ і груповими елементами.

Гомоморфізм групи лінійних операторів T в деякому просторі L і групи G означає, що кожному елементу групи G, $\forall g_a \in G$, відповідає тільки один (за визначенням гомоморфізму) елемент групи T, $T(g_a)$, $g_a \to T(g_a)$; $g_k \to T(g_k)$; $g_n \to T(g_n)$, а кожному елементу групи T відповідає декілька елементів групи G:

$$\begin{array}{lll} T(g_1) \to g_1 & T(g_2) \to g_2 & T(g_k) \to g_k \\ T(g_1) \to g_2\,; & T(g_2) \to g_3\ ; \ \ldots\ldots & T(g_k) \to g_{k+1} \\ T(g_1) \to g_3 & T(g_2) \to g_5 & T(g_k) \leftarrow g_{k+n} \end{array} \qquad (2.10)$$

Ця відповідність зберігається при груповому множенні, тобто ця відповідність не взаємно-однозначна, причому групове множення виконується за правилами групи T.

Отже, якщо група Т лінійних операторів $T(g_a)$ в деякому лінійному просторі L гомоморфна групі G, то група Т утворює представлення групи G: між елементами Т – $T(g_a)$ – і елементами групи G – g_i – можна встановити не взаємно однозначну відповідність, а між g_i і $T(g_a)$ встановлюється взаємно однозначна відповідність.

Таким чином, лінійне представлення групи G в скінченновимірному просторі Евкліда L є гомоморфізм цієї групи на деяку підмножину лінійних перетворень цього простору, представлених множиною обмежених лінійних операторів простору L. Множина таких операторів утворює в L групу.

2°. Виберемо в просторі L довільний ортонормований базис розмірності n, тобто вважатимемо, що L – n-вимірний векторний ортонормований простір з базисом. Будь-який елемент $\mathbf{x} \in L$ може бути розкладений за ортами цього базису: $\mathbf{x} = \sum_{k=1}^{n} x_k \mathbf{e_k}$. Для кожного лінійного оператора $T(g_a)$, такого, що діє з $L \to L$, його дія на довільний елемент – вектор $\mathbf{x}$ можна представити таким чином:

$$T(g_a)\mathbf{x} = \sum_k x_k T(g_a)\mathbf{e_k} = \sum_k x_k \sum_j T_{jk}(g_a)\mathbf{e_j} = \sum_j (\sum_k T_{jk} x_k)\mathbf{e_j} = \sum_j x'_j \mathbf{e_j} \qquad (2.11)$$

де

$$x'_j = \sum_k T_{jk} x_k \; ; \; T(g_a)\mathbf{e_k} = \sum_j T_{jk}(g_a)\mathbf{e_j} \, .$$

Звідси витікає, що кожному елементу g_a групи G ставиться у відповідність матриця $\left\| T_{jk}(g_a) \right\|$. Як було вказано вище, кожному лінійному операторові в заданому базисі лінійного простору L відповідає матриця цього оператора, також як і квадратній матриці, заданій в лінійному просторі з базисом, відповідає єдиний лінійний оператор, матрицею якого в цьому базисі є матриця цього оператора. Тобто, група операторів T ізоморфна групі матриць $\|T_{jk}(g_a)\|$. Тому, якщо задано представлення $g_a \to T(g_a),\ g_a \in G$, то відповідність $g_a \to \|T_{jk}(g_a)\|$ буде гомоморфізмом групи G на групу матриць, тобто група матриць $\|T_{jk}(g_a)\|$ гомоморфна групі G.

Визначення. Нехай заданий гомоморфізм групи G на яку-небудь групу матриць $\|T_{jk}(g_a)\|,\ g_a \in G,\ \|T_{jk}(g_a)\| \in \|T_{jk}\|$, тобто група матриць $\|T_{jk}\|$ гомоморфна групі G. Тоді говорять, що група матриць $\|T_{jk}\|$ утворює матричне представлення групи G. Розмірність матриць називають розмірністю представлення.

Оскільки кожну матрицю в n-вимірному просторі L з базисом можна розглядати як матрицю деякого оператора в цьому базисі, і групи T і $\|T_{jk}\|$ ізоморфні, то визначення представлення за допомогою матриць і за допомогою оператора еквівалентні, і можна користуватися будь-яким з них.

3°. Як і повинно бути, матриці $T(g_a)$ повинні задовольняти співвідношенню звичайного матричного множення: $T(g_a)T(g_b) = T(g_a g_b)$. Доведемо це.

Дійсно, як випливає із застосування до орта $\mathbf{e_k}$ послідовно при дії двох операторів $T(g_a)$ і $T(g_b)$, маємо: $T(g_a)\mathbf{e_k} = \sum_j T_{jk}(g_a)\mathbf{e_j}$

$$T(g_a)T(g_b)\mathbf{e_k} = T(g_f)\sum_j T_{jk}(g_b)\mathbf{e_j} = \sum_j T_{jk}(g_b)T(g_a)\mathbf{e_j} =$$

$$= \sum_j T_{jk}(g_b)\sum_r T_{rj}(g_a)\mathbf{e_r} = \sum_r \left(\sum_j T_{rj}(g_a)T_{jk}(g_b) \right)\mathbf{e_r} = \sum T_{rk}\mathbf{e_r} \tag{2.12}$$

Видно, що матриця добутку операторів є звичайний добуток матриць.

З іншого боку:

$$T(g_a)T(g_b)\mathbf{e_k} = T(g_a g_b)\mathbf{e_k} = \sum_r T_{rk}(g_a g_b)\mathbf{e_r}$$

Звідси витікає, що

$$\sum_r \left(\sum_j T_{rj}(g_a) T_{jk}(g_b) \right) = \sum_r T_{rk}(g_a g_b) \tag{2.13}$$

що означає, що $T(g_a)T(g_b) = T(g_a g_b)$, і матричний елемент

$$T_{rk}(g_a g_b) = \sum_j T_{rj}(g_a) T_{jk}(g_b) \tag{2.14}$$

При практичних розрахунках для обчислення матричного елементу використовують ортонормованність базису.

2.2.2 Звідні і незвідні представлення

Нехай в просторі L визначений деякий оператор T, що здійснює представлення $T(g_a)$ групи G в цьому просторі. Підпростір $L' \subset L$ називається інваріантним підпростором відносно представлення $G \to T(g_a)$, якщо для $\forall x' \in L'$ і для $g_a \in G$ виконується $T(g_a)x' \in L'$. Іншими словами, підпростір називається інваріантним по відношенню до перетворень, що індукуються групою G, якщо дії оператора T на елементи цього підпростору не виводять нас з цього підпростору: $\forall x' \in L'$ отримуємо $T(g_a)x' \in L'$ ($L' \subset L$). Очевидно, нульовий простір і увесь простір дають приклади тривіальних інваріантних підпросторів. Сума і перетин інваріантних підпросторів – інваріантний підпростір.

Покажемо, що якщо відомий інваріантний підпростір L', то можна спростити матрицю представлення, помістивши в L' декілька базисних векторів [52]. Нехай $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \cdots \mathbf{e_k} \in L'$. Тоді їх образи теж належать L' і можуть бути розкладені по цих же базисних векторах.. Нехай $\mathbf{e_1}\cdots\mathbf{e_n}$ – базис усього простору L, а вектори $\mathbf{e_1}\cdots\mathbf{e_k}$, $k \le n$ виберемо як базисні в L'. Тоді:

$$\begin{gathered}
\mathbf{e}_1' = A\mathbf{e_1} = A_{11}\mathbf{e_1} + A_{21}\mathbf{e_2} + \cdots + A_{k1}\mathbf{e_k} + (A_{k+1,1} = 0)\mathbf{e_{k+1}} + \cdots + (A_{n1} = 0)\mathbf{e_n} \\
\mathbf{e}_2' = A\varepsilon_2 = A_{12}\mathbf{e_1} + A_{22}\mathbf{e_2} + A_{32}\mathbf{e_3} + \cdots + \\
+ A_{k2}\mathbf{e_k} + (A_{k+1,2} = 0)\mathbf{e_{k+1}} + \cdots + (A_{n2} = 0)\mathbf{e_n} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\mathbf{e}_\mathbf{k}' = A\mathbf{e_k} = A_{1k}\mathbf{e_1} + A_{2k}\mathbf{e_2} + \cdots + A_{kk}\mathbf{e_k} + \\
+(A_{k+1,k} = 0)\mathbf{e_{k+1}} + (A_{k+2,k} = 0)\mathbf{e_{k+2}} + \cdots + (A_{nk} = 0)\mathbf{e_n} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\mathbf{e}_\mathbf{n}' = A\mathbf{e_n} = A_{1n}\mathbf{e_1} + A_{2n}\mathbf{e_2} + \cdots + A_{kn}\mathbf{e_k} + A_{k+1,n}\mathbf{e_{k+1}} + \cdots + A_{nn}\mathbf{e_n}
\end{gathered} \tag{2.15}$$

Тобто, для $\forall \mathbf{e_i}$, де i=1...k , $\mathbf{e}_i' = A\mathbf{e_i} \in L'$, а для $\forall \mathbf{e_i}, i = k+1\cdots n$ $A\mathbf{e_i} = 0$. Якщо простір L скінченновимірний і в нім вибраний базис $\{\mathbf{e_n}\}$, а в L' – базис $\{\mathbf{e_k}\}$, тобто з n перших ортів $\{\mathbf{e_k}\}$, $k \le n$, то інваріантність L' відносно представлення $T(G)$ групи G означає, що кожен оператор $T(g_a)$, $\forall g_a \in G$ записується в початковому базисі $\{\mathbf{e_n}\}$ матрицею виду:

$$T(g_a) = \left(\begin{array}{c|c} A(g_a) & C(g_a) \\ \hline 0 & B(g_a) \end{array} \right) \tag{2.16}$$

у якій k рядків нулів, а в матриці $B(g_a)$ – $(n-k)$ рядків, оскільки перші k базисних векторів з L потрапляють в L', а вектори від $\mathbf{e_{n+1}}$ до $\mathbf{e_n}$ не потрапляють в L', але залишаються в L.

Розглянемо, чому матриця оператора $T(g_a)$ має саме такий вигляд, тобто вигляд такої трикутної матриці. Таблиця коефіцієнтів оператора A, або матриця оператора, має вигляд:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{k1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{k2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{1k} & A_{2k} & \cdots & A_{kk} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{1,k+1} & A_{2,k+1} & \cdots & A_{k,k+1} & A_{k+1,k+1} & A_{k+2,k+1} & \cdots & A_{n,k+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{kn} & A_{k+1,n} & A_{k+2,n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

За визначенням матриці, в матриці $\|a_{ik}\|$ число a_{ik} знаходиться в і-ому рядку і k-ому стовпці, тобто індекс і – це номер рядка, індекс k – номер стовпця. Тому насправді, матриця представлення, або, в даному випадку, матриця перетворення одного базису в іншій, є транспонованою матрицею отриманої вище матриці (2.17), відповідно до даного вище визначення матриці:

$$A = \left(\begin{array}{cccc|ccc} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1k} & A_{1,k+1} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2k} & A_{2,k+1} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{k1} & A_{k2} & \cdots & A_{kk} & A_{k,k+1} & \cdots & A_{kn} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{k+1,k+1} & \cdots & A_{k+1,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{n,k+1} & \cdots & A_{nn} \end{array}\right) \quad (2.18)$$

Ми прийшли до поняття звідності представлення, де матриця представлення має більш простіший вигляд, «зводиться» чи «наводиться» при деякому перетворенні.

Дамо загальне визначення звідності представлення.

Визначення. Нехай в просторі L розмірності n задано представлення T групи G. Якщо в просторі L існує хоч би один нетривіальний підпростір L_1 розмірності $k < n$, інваріантний відносно усіх перетворень T, тобто якщо для $\forall x \in L_1 \;\; Tx \in L_1$, то представлення називається звідним. Таким чином, матриця звідного представлення в початковому базисі набуває вигляду:

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1k} & T_{1,k+1} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2k} & T_{2,K=1} & \cdots & T_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ T_{k1} & T_{k2} & \cdots & T_{kk} & T_{k,k+1} & \cdots & T_{kn} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & T_{k+1,k+1} & \cdots & T_{k+1,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & T_{n,k+1} & \cdots & T_{nn} \end{array}\right) \qquad (2.19)$$

тобто має блочно-трикутну структуру.

Якщо ж в просторі L не можна виділити інваріантний підпростір, представлення називається незвідним.

Питання про звідність пов'язане з питанням про опис цього представлення за допомогою простіших представлень, які мають меншу розмірність, тобто йдеться про вибір базису шляхом його перетворення операторами з групи представлення скінченної групи, в якому (у новому базисі) матриця його спрощується, і має менший ранг, або розпадається на більш прості матриці.

Здавалося б, виходячи з усе більш складного функціонального простору, можна отримати матричні представлення усе більш зростаючого розміру, тобто вивчення можливих представлень навіть в простих випадках – справа складна. Проте, тут на допомогу приходять властивості групових представлень: усі представлення скінченних груп можна побудувати з скінченного числа незвідних представлень.

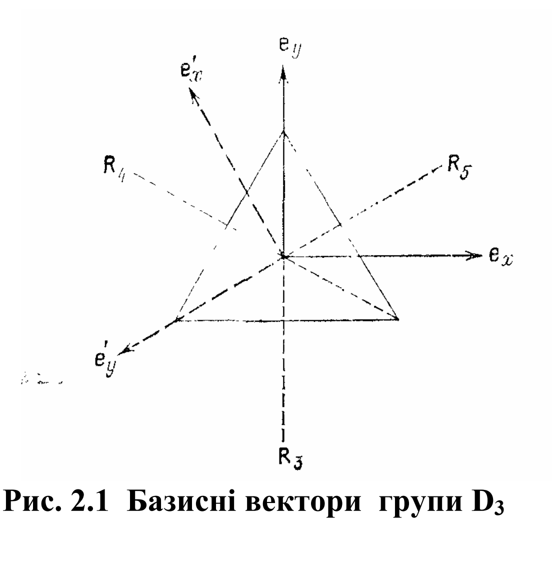


Рис. 2.1 Базисні вектори групи D_3

<u>Приклад.</u> Розглянемо приклад представлення, встановимо його фізич-

ний сенс на прикладі групи D_3. Для неї побудуємо матричне представлення. Точне представлення вийде, якщо записати перетворення, що відповідають кожній операції перетворення, в звичайному 3-вимірному просторі. Виберемо базисні вектори $\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}$ згідно з рисунком 2.1, $\mathbf{e_z}$ перпендикулярно площини (xy). Нехай R_1 – оператор повороту на 120^o навколо осі z. Тоді відображення цього елементу групи приймає вид:

$$T(R_1)\mathbf{e_x} = \mathbf{e'_x} = -\mathbf{e_x}\cos 60^0 + \mathbf{e_y}\cos 30^0 = -\frac{1}{2}\mathbf{e_x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e_y}$$

$$T(R_1)\mathbf{e_y} = \mathbf{e'_y} = -\mathbf{e_x}\cos 30^0 - \mathbf{e_y}\cos 60^0 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e_x} - \frac{1}{2}\mathbf{e_y} \qquad (2.20)$$

$$T(R_1)\mathbf{e_z} = \mathbf{e'_z} = \mathbf{e_z}$$

або

$$\mathbf{e'_y} = T(R_1)\mathbf{e_y} = T_{12}\mathbf{e_x} + T_{22}\mathbf{e_y} + T_{32}\mathbf{e_z} = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e_x} - \frac{1}{2}\mathbf{e_y} + 0\cdot\mathbf{e_z}$$

$$\mathbf{e'_x} = T(R_1)\mathbf{e_x} = T_{11}\mathbf{e_x} + T_{21}\mathbf{e_y} + T_{31}\mathbf{e_z} = -\frac{1}{2}\mathbf{e_x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e_y} + 0\cdot\mathbf{e_z} \qquad (2.21)$$

$$\mathbf{e'_z} = T(R_1)\mathbf{e_z} = T_{13}\mathbf{e_x} + T_{23}\mathbf{e_y} + T_{33}\mathbf{e_z} = 0\cdot\mathbf{e_x} + 0\cdot\mathbf{e_y} + 1\cdot\mathbf{e_z}$$

Матриця перетворення (представлення) має таким чином вид:

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (2.22)$$

Матричні елементи також можна знайти із співвідношення:

$$T_{ji}(g_a) = (\mathbf{e_j}, T(g_a)\mathbf{e_i}$$

Яка розмірність представлень оператора R_1? Вона рівна трьом. З виду матриці витікає, що побудована з перших двох рядків і стовпців матриця

2х2 утворює двовимірне представлення, а елемент, розташований на перетині третього рядка і третього стовпця утворює представлення розмірності одиниця. Це можливо, оскільки дорівнюють нулю елементи, розташовані на перетині перших двох стовпців з третім рядком, і перших двох рядків з третім стовпцем. Якщо говорити про векторний простір, це означає, що два вектори $\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}$ породжують інваріантний підпростір, а один вектор, $\mathbf{e_z}$, породжує другий інваріантний векторний підпростір, ортогональний першому. Тоді говорять, що тривимірне представлення зводиться до суми двовимірного і одновимірного представлень. Очевидно, що представлення не може бути приведене далі, а двовимірне також незвідне: неможливо вибрати нові базисні вектори $\mathbf{e_1} = \alpha\mathbf{e_x} + \beta\mathbf{e_y}; \mathbf{e_2} = \beta\mathbf{e_x} + \alpha\mathbf{e_y}$, такі, щоб матричні елементи T_{21} і T_{22} в цьому новому базисі оберталися в нуль для усіх перетворень R_α з групи D_3. Представлення, які не можна привести, спростити, називаються незвідними.

2.2.3 Унітарні представлення в просторі із скалярним добутком

У додатках часто використовують унітарні представлення, які виникають в теорії поля, квантовій механіці, фізиці твердого тіла. Тут можливі деякі спрощення. Ясно, що унітарні представлення здійснюються унітарними операторами.

Нехай L_1 – інваріантний підпростір простору L відносно перетворень $T(g_a)$, що відображаються групою G з елементами g_a. Нехай L_2 – ортогональне доповнення L_1, тобто такий підпростір, кожен елемент $\mathbf{x_2}$ якого ортогональний кожному елементу $\mathbf{x_1}$ підпростору L_1, тобто, якщо $\forall \mathbf{x_1} \in L_1, \forall \mathbf{x_2} \in L_2$, то $(\mathbf{x_1} \cdot \mathbf{x_2}) = 0$, а $L = L_1 \oplus L_2$, тобто розкладається в пряму суму підпросторів. (див. § 2, гл. 4, Ільїн, Позняк [4]). Істотно, що L_2 є ортогональним доповненням. В цьому випадку, якщо оператори $T(g_a)$ унітарні, то ортогональне доповнення L_2 підпростору L_1 також є інваріантним відносно перетворень $T(g_a)$.

<u>Доведемо</u> це. Нехай $\mathbf{x} \in L_1, \mathbf{y} \in L_2$, $L = L_1 \oplus L_2$. В силу ортогональності $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$. В силу інваріантності L_1, оскільки $T(g_a)\mathbf{x} \in L_1$, маємо: $\left(T(g_a)\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = 0$. Якщо $T^+(g_a)$ – спряжений оператор, тому

$$\left(T(g_a)\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \left(\mathbf{x}, T^+(g_a)\mathbf{y}\right) = \left(\mathbf{x}, T^{-1}(g_a)\mathbf{y}\right) = \left(\mathbf{x}, T(g_a^{-1})\mathbf{y}\right) = 0 \qquad (2.23)$$

оскільки для унітарного представлення, індукованого унітарним оператором, $T^+ = T^{-1}$; $TT^+ = E$, унітарний оператор – спряжений оператор, для якого $(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^+\mathbf{y})$. Звідси, витікає, що вектори $T^+(g_a)\mathbf{y}$ і $T^{-1}(g_a)\mathbf{y}$ – ортогональні векторам $\mathbf{x}$, і ці вектори $\mathbf{x} \in L_2$. А у свою чергу витікає, що L_2 – інваріантний підпростір відносно перетворень $T(g_a)$, оскільки, якщо g_a пробігає усю групу, то g_a^{-1} також пробігає усю групу. Тому $\forall T(g_a^{-1})\mathbf{y} \in L_2$, і, отже $T(g_a)\mathbf{y} \in L_2$, і це виконується для усіх матриць даного представлення, і інваріантність L_2 для оператора $T(g_a)$ доведена. Простір представлень L розкладається в пряму суму $L = L_1 \oplus L_2$. Якщо тепер в n- вимірному просторі перші k ортів вибрати як орти підпростори L_1, останні $(n-k)$ орти – як орти підпростору L_2, його ортогонального доповнення, то матриця представлення матиме наступний квазідіагональний вигляд:

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1k} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2k} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ T_{k1} & T_{k2} & \cdots & T_{kk} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & T_{k+1,k+1} & T_{k+1,k+2} & \cdots & T_{k+1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & T_{k+2,k+1} & T_{k+2,k+2} & \cdots & T_{k+2,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & T_{n,k+1} & T_{n,k+2} & \cdots & T_{nn} \end{array}\right) \qquad (2.24)$$

Насправді, нехай $T : G \to T(g_a)$ – скінченновимірне лінійне представлення групи G в L; L$_1$, L$_2$ – інваріантні підпростори, які є ортогональними доповненням один одного (додатковими) $L = L_1 \oplus L_2$. Виберемо базис підпростору L$_1$ у виді $\{\mathbf{e_k}\}$, а базис підпростору L$_2$ у виді $\{\mathbf{e_{k+1}},...\mathbf{e_n}\}$. Їх об'єднання $\{\mathbf{e_1}\ldots\mathbf{e_n}\}$ і буде базисом простору L. У такому базисі оператори $T(g_a),\ \forall g_a \in G$ запишуться матрицями виду:

$$\left(\begin{array}{c|c} T_1(g_a) & 0 \\ \hline 0 & T_2(g_a) \end{array}\right) \qquad (2.25)$$

де $T_1(g_a)$ – матриця оператора $T(g_a)$ у базисі $\{\mathbf{e_k}\}$, а $T_2(g_a)$ – матриця оператора $T(g_a)$ у базисі $\{\mathbf{e_{k+1}},...\mathbf{e_n}\}$. Лінійне представлення $T : G \to T(g_a)$ називається цілком звідним якщо для $\forall L_1 \subset L$ інваріантного підпростору існує його ортогональне доповнення (додатковий підпростір), при цьому $L = L_1 \oplus L_2,\ L_2 \subset L$. Звідси витікає, що <u>всяке незвідне представлення цілком звідне</u>. <u>Доведемо це</u>.

1°. Насправді, для будь-якого незвідного представлення є тільки два інваріантні підпростори: увесь простір представлення і нульовий підпростір. Ці два підпростори є ортогональними доповненнями один одного. Отже, для кожного інваріантного підпростору є його ортогональне доповнення, яке теж є інваріантним підпростором, що і вимагалося довести.

2°. Те ж саме справедливе і відносно унітарного (ортогонального) представлення: всяке унітарне (ортогональне) представлення цілком звідне. Доведемо це. Нехай $T: G \to T(g_a)$ – унітарне представлення групи G, $L_1 \subset L$ – довільний інваріантний підпростір. Нехай L_2 – ортогональне доповнення L_1, тобто $L = L_1 \oplus L_2$. Для $\forall g_a \in G$ оператор $T(g_a)$ – інваріантний оператор і $T(g_a)x_1 \in L$ для $\forall x_1 \in L_1$. Вище ми довели, що L_2 в цьому випадку теж є інваріантним доповненням, тобто $\forall x_2 \in L_2 \;\; T(g_a)x_2 \in L_2$. Отже, L_2 – інваріантний підпростір, а отже, L – цілком звідне.

2.2.4 Теорема про унітарність

Має місце наступна теорема: будь-яке представлення (дійсне або комплексне) скінченної групи є унітарним (ортогональним).

Доказ. Нехай $T(g_a)$ – лінійне представлення групи G в просторі L, тобто, T: $G \to T(g_a)$. Нехай для будь-якого $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in L$ $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ є скалярний добуток в L. Побудуємо скалярний добуток виду $(\mathbf{x}, \mathbf{y})' = \sum_{g_a \in G} \left(T(g_a)\mathbf{x}, T(g_a)\mathbf{y} \right)$. Легко перевірити, що отриманий скалярний добуток зберігається при дії оператора $T(g_b),\ g_b \in G$:

$$\left(T(g_b)\mathbf{x}, T(g_b)\mathbf{y} \right)' = \sum_{g_a \in G} \left(T(g_a g_b)\mathbf{x}, T(g_a g_b)\mathbf{y} \right) = \sum_{g_c \in G} \left(T(g_c)\mathbf{x}, T(g_c)\mathbf{y} \right) \qquad (2.26)$$

де $g_c = g_a g_b \in G$ в силу групового співвідношення. Таким чином, кожен оператор $T_1(g_a)$, $\forall g_a \in G$ є унітарним відносно нового скалярного добутку $(\mathbf{x}, \mathbf{y})'$ і тому представлення $T(g_a)$ є унітарне і відносно скалярного добутку $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Звідси витікає, що будь-яке представлення скінченної групи, як дійсне, так і уявне, цілком звідне. З приведеного розгляду виходить, що унітарне представлення групи завжди або незвідне, або цілком звідне.

2.2.5 Розкладання звідного представлення на суму незвідних

У свою чергу, якщо в L_1 і L_2 існують інші інваріантні підпростори, то процес розкладання можна продовжити, поки ми не отримаємо пряму суму інваріантних підпросторів, в кожному з яких реалізуються незвідне представлення $T(g_a)$ групи G. Таке представлення теж називається цілком звідним.

Введемо поняття суми представлень. Нехай $L_1 \cdots L_k$ – лінійні простори, $L = L_1 \oplus L_2 \oplus \cdots \oplus L_k$ – їх пряма сума, так що кожен вектор $\mathbf{x} \in L$ єдиним чином представлений у вигляді суми $\mathbf{x} = \mathbf{x_1} + \mathbf{x_2} + \cdots + \mathbf{x_k}$, де $\forall \mathbf{x_k} \in L_k$. Нехай в кожному L_k задано представлення $T^{(k)}(g_a)$ однієї і тієї ж групи G. Визначимо лінійний оператор $T(g_a)$ в L, вважаючи

$$T(g_a)(\mathbf{x_1} + \mathbf{x_2} + \cdots + \mathbf{x_k}) = T^{(1)}(g_a)\mathbf{x_1} + T^{(2)}(g_a)\mathbf{x_2} + \cdots + T^{(k)}(g_a)\mathbf{x_k} \qquad (2.27)$$

Очевидно $T(E) = 1$, $T(g_a g_b) = T(g_a)T(g_b)$, так що співвідношення $G \to T(g_a)$ є представлення групи G в просторі L. Представлення $T(g_a)$ в просторі, визначене за вищезгаданим правилом (2.27), називається прямою сумою представлень $T^{(1)}$, $T^{(2)}$, $\cdots T^{(k)}$:

$$T(g_a) = \sum\nolimits^{\oplus} T^{(k)}(g_a) \qquad (2.28)$$

або

$$T(g_a) = T^{(1)}(g_a) \oplus T^{(2)}(g_a) \oplus \cdots \oplus T^{(k)}(g_a) \qquad (2.29)$$

Очевидно, кожне L_k є підпростір в L, інваріантне відносно $T^{(k)}(G)$.У свою чергу, $L_1 \oplus L_2$ інваріантні відносно представлення $T^{(1)} \oplus T^{(2)}$ і так далі. У матричному запису суму $T(g_a)$ (2.29) скінченновимірних представлень $T^{(k)}(G)$:

$$G \to T(g_a),\ k = 1 \cdots m$$

можна представити таким чином. Нехай $\{\mathbf{e}\}$ – базис простору $L_1 \oplus L_2 \oplus \cdots \oplus L_k$, який є об'єднанням базисів $\{\mathbf{e_k}\}$ просторів L_k. Тоді

$$T(g_a) = \begin{pmatrix} T^{(1)}(g_a) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & T^{(2)}(g_a) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & T^{(3)}(g_a) & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & T^{(k)}(g_a) \end{pmatrix} \qquad (2.30)$$

тобто матриця цього представлення при такому виборі ортів має квазідіагональний вигляд, де уздовж діагоналі розташовані матриці $T^{(k)}(g_a)$ у базисах $\mathbf{e}_1^{(k)} \cdots \mathbf{e}_{n_k}^{(k)}$.

Можна сформулювати наступне. Цілком звідне скінченновимірне лінійне представлення ізоморфно сумі незвідних представлень. Обернено: сума незвідних представлень є цілком звідним представленням. Це твердження відноситься також до унітарних представлень. Сума (2.28) $T(g_a) = \sum^{\oplus} T^{(k)}(g_a)$ – сума операторів в різних просторах L_k.

2.2.6 Еквівалентні представлення

Умова унітарності перетворень практично не обмежує спільності, оскільки майже усі цікаві з точки зору фізики перетворення унітарні. Зведення представлення дозволяє в принципі звести будь-яке представлення до складових його незвідних представлень. Тому надалі обмежимося дослідженням властивостей незвідних представлень, знаючи, що з них можна вивести властивості будь-якого звідного представлення, навіть якщо число можливих незвідних представлень залишається нескінченним. Якщо простір незвідний, то по-іншому вибравши базисні вектори в тому ж просторі, ми отримаємо інший набір матриць $T(g_a)$. Вибір базису в просторі представлень важливий ще і тому, що в якому-небудь базисі матриці, що відповідають елементам групи, можуть мати досить простий вигляд, і можна зробити важливі висновки про досліджуване представлення.

Введемо поняття еквівалентного представлення. Нехай $T(g_a)$ є представлення групи G в просторі L. Якщо існує не вироджене лінійне взаємно-однозначне відображення A простору L на L' тієї ж розмірності, тобто якщо для $\forall g_a \in G$ справедливо співвідношення $T'(g_a) = AT(g_a)A^{-1}$, то оператор $T'(g_a)$, що діє в просторі L', також утворює представлення групи G в L'. У L' таким чином, визначений новий оператор $T'(g_a)$.

Насправді, покажемо, що $T'(g_a)$ задовольняє правилам групового множення. Оскільки $T(g_a)T(g_b) = T(g_a g_b)$, то

$$T'(g_a)T'(g_b) = AT(g_a)A^{-1}AT(g_b)A^{-1} =$$
$$= AT(g_a)T(g_b)A^{-1} = AT(g_a g_b)A^{-1} = T'(g_a g_b)$$

Такі два представлення називаються еквівалентними. Необхідно, щоб для усіх групових елементів застосовувалася одна і та ж операція відображення. Якщо L і L' скінченні, то матриці операторів $T'(g_a)$ і $T(g_a)$ однакові, тобто, одного рангу (розміру).

Перетворення базису матричного представлення дає еквівалентне матричне представлення. Нехай в просторі L вибраний базис $\mathbf{e}'_\mathbf{i}$, пов'язаний з базисом $\mathbf{e}_\mathbf{i}$ лінійним перетворенням виду:

$$\mathbf{e}'_i A \mathbf{e}_\mathbf{i} = \sum_k A_{ki}\mathbf{e}_\mathbf{k}\,;\;\; \mathbf{e}_\mathbf{i} = \sum_k A^{-1}_{ki}\mathbf{e}'_\mathbf{k}:\;\; \det(A_{ik}) \neq 0\,.$$

Подіємо на орти $\mathbf{e}_\mathbf{i}$ оператором $T(g_a)$:

$$\begin{aligned} T(g_a)\mathbf{e}'_i &= \sum_k A_{ki}T(g_a)\mathbf{e}_\mathbf{k} = \sum_k A_{ki}\sum_j T_{jk}(g_a)\mathbf{e}_\mathbf{j} = \\ &= \sum_k A_{ki}\sum_j T_{jk}(g_a)\sum_s A^{-1}_{sj}\mathbf{e}'_\mathbf{s} = \sum_s \left(A^{-1}T(g_a)A\right)_{si}\mathbf{e}'_\mathbf{s} \end{aligned} \tag{2.31}$$

Таким чином, при переході до нового базису в тому ж просторі матриці представлення випробовують перетворення подібності. Представлення матрицями $A^{-1}T(g_a)A$, де А – невироджена матриця, одна і та ж для усіх $g_a \in G$, називається еквівалентним по відношенню до представлення матрицями $T(g_a)$. Тут $T(g_a)$ заданий в новому базисі, а для еквівалентних представлень визначений новий оператор. Таким чином, представлення $T(g_a)$ і $T'(g_a)$ групи еквівалентні $\left(T(g_a) \approx T'(g_a)\right)$, якщо вони мають однакову розмірність і існує така неособлива матриця А, що $T'(g_a) = A^{-1}T(g_a)A$ для $\forall g_a \in G$. Еквівалентні матриці можна розглядати, як одні і те ж операторні представлення, матриці якого записані в різних базисах одного і того ж простору. Найважливіші властивості будь-яких двох еквівалентних представлень співпадають.

Два представлення $T(g_a)$ і $T'(g_a)$ називають нееквівалентними, якщо не існує такого оператора А, який задовольняє співвідношенню $T'(g_a) = AT(g_a)A^{-1}$ для $g_a \in G$.

Еквівалентні незвідні представлення можна розглядати як одно представлення з точки зору розкладання звідного представлення на його незвідні частини. Це означає, що якщо цілком звідне представлення $T(g_a)$ є пряма сума незвідних представлень, серед яких є m_1 представлень, еквівалентних $T^{(1)}(g_a)$, m_2 – еквівалентних $T^{(2)}(g_a)$, m_p – еквівалентних $T^{(p)}(g_a)$ і немає ніяких інших незвідних представлень, то можна написати, що

$$T(g_a) = \sum_{\alpha}{}^{\oplus} m_\alpha T^{(\alpha)}(g_a) \tag{2.32}$$

де α пробігає нееквівалентні незвідні представлення, а ціле число m_α показує, скільки разів це незвідне представлення $T^{(\alpha)}$ з'являється в розкладання.

2.2.7 Теорема Машке

Вище було введено поняття еквівалентних представлень. Також було показано, що будь-яке представлення (дійсне або уявне) скінченної групи є унітарним (ортогональним).

Доведемо наступне: будь-яке представлення скінченної групи еквівалентне унітарному.

Нехай ми маємо представлення Т: $G \to T(g_a)$ в просторі L. Для цього представлення $T(g_a)$ ми повинні знайти такий оператор S, щоб еквівалентне представлення $T'(g_a) = ST(g_a)S^{-1}$ було унітарним.

Покажемо, що цій умові задовольняє оператор $S = \left(\sum\limits_b T^+(g_b)T(g_b) \right)^{\frac{1}{2}}$,

де $T^+(g_b)$ – оператор, спряжений $T(g_b)$. Ясно, що $S^+ = S$ – оператор ермитів (самоспряжений). Таким чином, нам потрібно показати, що $T'^+(g_a) = T'^{-1}(g_a)$. При цьому,

$$\begin{gathered} T^+(g_a)S^2T(g_a) = \sum_b T^+(g_a)T^+(g_b)T(g_b)T(g_a) = \\ = \sum_b \left(T(g_b)T(g_a)\right)^+ \left(T(g_b)T(g_a)\right) = \sum_b T^+(g_bg_a)T(g_bg_a) = \\ = \sum_c T^+(g_c)T(g_c) = S^2 \end{gathered} \tag{2.33}$$

де $g_c = g_bg_a$, згідно з груповим множенням. При цьому, якщо g_a є фіксованим, g_b пробігає усю групу, і якщо кожен елемент зустрічається один раз, то і g_c пробігає усі групові елементи, причому кожен з них зустрічається теж один раз.

Обидві частини виразу $T^+(g_a)S^2T(g_a) = S^2$ помножимо: справа – на $T^{-1}(g_a)S^{-1}$, а ліворуч – на S^{-1} . Маємо:

$$S^{-1}T^+(g_a)S^2T(g_a)T^{-1}(g_a)S^{-1} = S^{-1}T^+(g_a)SSS^{-1} = S^{-1}T^+(g_a)S$$

З іншої сторони:

$$S^{-1}S^2T^{-1}(g_a)S^{-1} = S^{-1}SST^{-1}(g_a)S^{-1} = ST^{-1}(g_a)S^{-1}$$

чи

$$S^{-1}T^{+}(g_a)S = ST^{-1}(g_a)S^{-1}.$$

Звідси:

$$\left(ST(g_a)S^{-1}\right)^{+} = \left(ST(g_a)S^{-1}\right)^{-1}$$

де враховано, що $S^{+} = S; (S^{-1})^{+} = S^{-1}$. Останнє означає, що

$$T'^{-1}(g_a) = ST(g_a)S^{-1}$$

що і вимагалося довести.

2.2.8 Леми Шура

Отримаємо критерії звідності і незвідності і оцінимо число нееквівалентних незвідних представлень. На підставі вище сказаного можна зробити висновок, що завдання дослідження представлень групи зводиться до вивчення нееквівалентних незвідних представлень, тих, що володіють, як ми побачимо нижче, важливою властивістю ортогональності. Ці властивості – ядро математичної теорії представлень і лежать в основі більшості фізичних проявів симетрії. Властивості ортогональності виходять з двох лем Шура. Лема – це деякий проміжний висновок, який необхідно зробити при виведенні теореми.

Лема 1. Нехай $T(G_a)$ – незвідне представлення групи G в просторі L, і нехай A – фіксований оператор в L. Тоді якщо для усіх елементів G_a групи G виконується рівність $T(G_a)A = AT(G_a)$, то $A = \lambda \cdot 1$, де 1 – тотожний або одиничний оператор.

Іншими словами: деякий фіксований оператор, що комутує з операторами $T(G_a)$ незвідного представлення для будь-яких G_a з групи G, є одиничним оператором з точністю до постійного множника, тобто тільки одиничний оператор комутує з операторам $T(G_a)$ незвідного представлення для $\forall G_a \in G$.

Доказ. Нехай $\mathbf{r}$ – власний вектор оператора А, $\mathbf{r} \in L$, з власним значенням λ, тобто $A\mathbf{r} = \lambda\mathbf{r}$. Утворюємо вектор $\mathbf{r_a} = T(G_a)\mathbf{r}$. Оператори А і $T(G_a)$ комутують один з одним., отже, вектор $\mathbf{r_a}$ теж є власним вектором оператора А:

$$A\mathbf{r_a} = AT(G_a)\mathbf{r} = T(G_a)A\mathbf{r} = T(G_a)\lambda\mathbf{r} = \lambda T(G_f)\mathbf{r} = \lambda\mathbf{r_a} \qquad (2.34)$$

Нехай G_a пробігає усю групу. В цьому випадку набір векторів $\mathbf{r_a}$ утворює інваріантний підпростір $L_1 \subset L$ оператора $T(G_a)$, оскільки $T(G_b)\mathbf{r_a} = T(G_b)T(G_a)\mathbf{r} = T(G_aG_b)\mathbf{r} = T(G_c) = \mathbf{r_c}$, де $G_c = G_bG_a$ з таблиці групового множення операторів $T(G_a)$. В той же час, набір $\mathbf{r_a}$, для будь-кого $\mathbf{r_a}$, є власними векторами оператора А, що комутує з оператором $T(G_a)$. Наявність інваріантного підпростору L_1 свідчить про те, що представлення $T(G_a)$ – звідне. Але оскільки за визначенням простір L не є незвідним, воно не може містити інваріантних підпросторів, або L_1 співпадає з усім простором. Таким чином, простір векторів $\mathbf{r_a}$ зобов'язаний співпадати з усім простором L. Отже, для будь-якого довільного вектору $\mathbf{R} = \sum_a C_a\mathbf{r_a}$ маємо:

$$A\mathbf{R} = A\sum_a C_a\mathbf{r_a} = \sum_a C_a A\mathbf{r_a} = \sum_a C_a\lambda\mathbf{r_a} = \lambda\mathbf{R} \qquad (2.35)$$

Але оскільки $\mathbf{R}$ – довільний вектор простору L, то $A = 1\cdot\lambda$. У матричній формі А просто дорівнює величині λ, помноженій на одиничну матрицю:

$$(A)=\lambda\begin{pmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{pmatrix} \qquad (2.36)$$

Слідство. Якщо єдиною матрицею, що комутує з усіма матрицями деякого представлення групи являється матриця, кратна одиниці, то таке представлення незвідне.

Лема 2. Нехай $T^{(1)}(G_a)$ і $T^{(2)}(G_a)$ – два незвідні представлення групи G в просторах L_1 і L_2 відповідно і які мають розмірності n_1 і n_2, нехай A – оператор, що переводить вектори з L_1 в L_2. Нехай представлення $T^{(1)}(G_a)$ і $T^{(2)}(G_a)$ нееквівалентні і для усіх елементів G_a групи G виконується рівність $T^{(2)}(G_a)A = AT^{(1)}(G_a)$. Тоді $A=0$, тобто. A – нульовий оператор.

Доказ. 1. Розглянемо спочатку випадок, коли $n_1 \le n_2$. Тоді A переводить елементи простору L_1 в підпростір L_A деякої розмірності $n_A \le n_1 \le n_2$ в просторі L_2: $\forall \mathbf{r}\in L_1, A\mathbf{r}\in L_A \subset L_2$. Таким чином, підпростір L_2 складається з векторів A**r**, де **r** – довільний вектор $\mathbf{r}\in L_1$. Звідси тут же витікає, що підпростір L_A інваріантний відносно перетворень групи G, оскільки за умовою $T^{(2)}(G_a)A = AT^{(1)}(G_a)$, і тому для $\forall A\mathbf{r}\in L_a \subset L_2$ маємо:

$$T^{(2)}(G_a)A\mathbf{r} = A\left(T^{(1)}(G_a)\mathbf{r}\right) = A\mathbf{r_a} \ \ (L_A \subset L_2)$$

де $\mathbf{r_a} = T^{(1)}(G_A)\mathbf{r}$ і отриманий вектор $A\mathbf{r_a}\in L_A$, оскільки $\mathbf{r_a} = T^{(1)}(G_a)\mathbf{r}\in L_1$, а оператор A переводить вектори з L_1 в L_2. Проте, представлення $T^{(2)}(G_a)$ за визначенням незвідне, а тому L_2 не може мати інваріантного підпростору. Таким чином, ми приходимо до протиріччя, якщо тільки L_A не є ні 0-мірним ($n_A = 0$), ні повним простором L_2 ($n_A = n_2$). Іншими словами, ми довели, що або: 1) $A\mathbf{r}=0$ для $\forall \mathbf{r}\in L_1$ – а це означає, що $A=0$, або 2)

$n_A = n_1 = n_2$. Остання рівність витікає з нерівності $n_A \le n_1$ і умови $n_1 \le n_2$. Друга альтернатива ($n_A = n_1 = n_2$) виключається внаслідок того, що $T^{(1)}(G_a)$ і $T^{(2)}(G_a)$ – нееквівалентні представлення. Еквівалентність представлень означала б, що L_1 і L_2 мають однакову розмірність, звідси слідувало б існування оператора A^{-1}, і тому з допущення $T^{(2)}(G_a)A = AT^{(1)}(G_a)$ виходило б, що $T^{(2)} = AT^{(1)}A^{-1}$, тобто $T^{(1)}(G_a)$ і $T^{(2)}(G_a)$ – еквівалентні оператори. Залишається зробити висновок, що $A = 0$.

2. Випадок $n_1 > n_2$ доводиться аналогічно. В цьому випадку з необхідністю $n_A < n_1$, оскільки $n_A < n_1$, а тому повинні існувати вектори $\mathbf{r} \in L_1$, які переводяться перетворенням А в нуль, тобто $A\mathbf{r} = 0$. Підпростір цих векторів в L_1 позначимо $L_B \subset L_1$, його розмірність буде рівна $n_B = n_1 - n_A$. Тоді L_B зобов'язане бути інваріантним підпростором відносно перетворень групи G, оскільки, якщо $\mathbf{r_a} = T^{(1)}(G_A)\mathbf{r}$, де $\mathbf{r} \in L_B \subset L_1$, то $A\mathbf{r_a} = AT^{(1)}(G_a)\mathbf{r} = T^{(2)}(G_a)A\mathbf{r} = 0$, з чого видно, що $\mathbf{r_a}$ теж належить простору $L_B, \mathbf{r_a} \in L_B \subset L_1$. Це суперечить умові незвідності представлення $T^{(2)}(G_a)$, якщо тільки не виконується рівність $\mathbf{r} \in L_1$, іншими словами, $A\mathbf{r} = 0$ для усіх векторів $\mathbf{r} \in L_1$. Звідси знову приходимо до висновку, що $A = 0$. Отже, два різні представлення, однаковій або різній розмірності, можуть бути пов'язані тільки нульовими матрицями, або різні незвідні представлення не можуть бути пов'язані один з одним.

2.2.9 Ортогональність матричних елементів незвідних представлень

Використовуючи леми Шура, можна отримати співвідношення між елементами матриць незвідних представлень. Розглянемо два незвідних представлення $T^{(\alpha)}(G_a)$ і $T^{(\beta)}(G_a)$ групи G, причому $T^{(\alpha)}(G_a)$ визначено в просторі L_α, а $T^{(\beta)}(G_a)$ – в просторі L_β. Нехай X – деякий оператор, що перетворює вектори простору L_β у вектори простору L_α. Ми можемо тепер показати, що оператор виду $A=\sum_b T^{(\alpha)}(G_b)XT^{(\beta)}(G_b^{-1})$ якраз має властивість оператора А в лемах Шура, тобто покажемо, що $T^{(\alpha)}(G_a)A=AT^{(\beta)}(G_a)$. Насправді, маємо:

$$\begin{aligned}
&T^{(\alpha)}(G_a)A=\sum_b T^{(\alpha)}(G_a)T^{(\alpha)}(G_b)XT^{(\beta)}(G_b^{-1})=\\
&=\sum_b T^{(\alpha)}(G_aG_b)XT^{(\beta)}(G_b^{-1})T^{(\beta)}(G_a^{-1})T^{(\beta)}(G_a)=\\
&=\sum_b T^{(\alpha)}(G_aG_b)XT^{(\beta)}(G_aG_b)^{-1}T^{(\beta)}(G_a)=\\
&=\sum_b T^{(\alpha)}(G_c)XT^{(\beta)}(G_c^{-1})T^{(\beta)}(G_a)=AT^{(\beta)}(G_a)
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Ми використали той факт, що $G_aG_b=G_c$ в силу наявності групового множення, а G_b пробігає усю групу і при цьому пробігає усі групові елементи. Таким чином $T^{(\alpha)}(G_a)A=AT^{(\beta)}(G_a)$.

Розглянемо два випадки.

1. Нехай $T^{(\alpha)}(G_a)$, $T^{(\beta)}(G_a)$ – одно і те ж представлення, звідки по першій лемі Шура $A=\lambda\cdot 1$

2. Нехай $T^{(\alpha)}(G_a)$, $T^{(\beta)}(G_a)$ – нееквівалентні і незвідні представлення, і по другій лемі Шура А=0.

Ці два випадки можна об'єднати в одну рівність:

$$A=\lambda\delta_{\alpha\beta}1,\ \delta_{\alpha\beta}=\begin{cases}1,\alpha=\beta\\ 0,\alpha\neq\beta\end{cases} \tag{2.38}$$

Тобто вважаючи, що в ній $\delta_{\alpha\beta}=0$, коли $T^{(\alpha)}(G_a)$, $T^{(\beta)}(G_a)$ – незвідні нееквівалентні представлення, і $\delta_{\alpha\beta}=1$, коли $T^{(\alpha)}(G_a)$, $T^{(\beta)}(G_a)$ – одно і те ж представлення.

Зміст леми Шур при виборі оператора А у операторній формі

$$A = \sum_b T^{(\alpha)}(G_b) X T^{(\beta)}(G_b^{-1}) = 1 \cdot \lambda \cdot \delta_{\alpha\beta}$$

можна звести до однієї рівності в матричній формі виду:

$$A_{ij} = \sum_{a=1}^{g} \sum_{m=1}^{S_\beta} \sum_{k=1}^{S_\alpha} T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) X_{km} T_{mj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} = \lambda(X) \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \qquad (2.39)$$

де X в лівій частині – абсолютно довільна прямокутна матриця, але множник λ залежить від вибору X. Тут S_α, S_β – розмірність представлень α і β відповідно.

Скористаємося свободою вибору матриці X і покладемо її елементи рівними $X_{km} = \delta_{kp} \delta_{mq}$. Таким чином, ми вибираємо матрицю X такій, в якій – нулі, окрім одного, розташованого на перетині *p*-ого рядка і q - ого стовпця, який дорівнює одиниці. При такому виборі в матричному елементі оператора А зникають два знаки підсумовування, тобто по суті, проведемо підсумовування по k, m з лівого боку рівності:

$$\sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \qquad (2.40)$$

Величина λ має сенс тільки тоді, якщо $\alpha = \beta$ і $i = j$, в цьому випадку, приймаючи $\alpha = \beta$ і підсумувавши по i обидві частини, отримуємо ліворуч:

$$\sum_{i=1}^{S_\alpha} \sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\alpha)}(G_a^{-1}) = \sum_{a=1}^{g} \sum_{\alpha=1}^{S_\alpha} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\alpha)}(G_a^{-1}) = \sum_{a=1}^{g} T_{qp}^{(\alpha)}(E) = g \delta_{pq}$$

При цьому справа отримуємо:

$$\lambda \cdot \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} = \lambda \cdot \sum_{i=1}^{S_\alpha} 1 = \lambda \cdot S_\alpha$$

і, отже $g \cdot \delta_{pq} = \lambda \cdot S_\alpha$. Звідси $\lambda = {g\delta_{pq}}/{S_\alpha}$, бо образом тотожної операції є одинична матриця. Підставляючи у початкове співвідношення (2.40) отримане вираження для λ, отримуємо:

$$\sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = {g\delta_{\alpha\beta}\delta_{pq}\delta_{ij}}/{S_\alpha} \tag{2.41}$$

Якщо матричне представлення $T^{(\beta)}(G_a)$ унітарне, то можливе подальше спрощення. Оскільки $T^{(\beta)}(G_a^{-1})T^{(\beta)}(G_a) = T^{(\beta)}(E) = 1$, і оскільки $T^{(\beta)}(G_a^{-1}) = T^{(\beta)^{-1}}(G_a)$ в силу гомоморфізму, а матричні елементи для унітарної матриці $T_{qj}^{(\beta)^{-1}}(G_a) = T_{jq}^{(\beta)*}(G_a)$, то, якщо матриця (T) унітарна, тому $T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = T_{jq}^{(\beta)*}(G_a)$ і при підстановці в співвідношення (2.41) останнє отримуємо вигляд:

$$\sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)*}(G_a) = {g\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{pq}}/{S_\alpha} \tag{2.42}$$

Отримане співвідношення є надзвичайно потужне співвідношення ортогональності, оскільки індекси матричних елементів в лівій частині вибрані абсолютно довільно, а підсумовування виконується тільки по елементах групи. Це співвідношення показує, що отримана сума стає нулем, якщо 1) α і β – нееквівалентні незвідні представлення. Навіть якщо $\alpha = \beta$, сума дорівнює нулю, поки 2) в ліву частину входять різні матричні елементи, тобто якщо $i \neq j$, або $p \neq q$. Єдина ситуація, при якій сума відрізняється від нуля при довільних індексах і, р можна представити так:

$$\sum_{a=1}^{g} \left| T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) \right|^2 = {g}/{S_\alpha} \tag{2.43}$$

отримане при $i = j, p = q, \alpha = \beta$. Підсумовування по g – по усіх елементах групи – називають усередненням по групі.

Термін ортогональність означає, що в деякому просторі деякий скалярний добуток стає нулем. Використання цього терміну виправдане, якщо розглядати набір матричних елементів $T_{ip}^{(\alpha)}(G_a)$ для фіксованих α, i, p як позначені індексом a компоненти вектору g-мірного простору. Скалярний добуток двох векторів в цьому просторі визначається зазвичай як сума компонентів. Тоді отримане вираження констатує ортогональність таких векторів з різними наборами індексів α, i, p. Важливо, що співвідношення ортогональності виконується тільки для незвідних представлень.

2.2.10 Характери представлень

Для кожного даного представлення можна побудувати нескінченне число еквівалентних матричних представлень шляхом зміни базису, тобто перетворення подібності. Знайдемо деякі цілком певні властивості представлень, які не залежать від таких перетворень. В принципі можна побудувати багато інваріантів, оскільки перетворення подібності не змінюють власних значень матриці. У більшості випадків достатньо однієї-єдиної характеристики. Найбільш відповідною для цієї мети характеристикою виявляється сума усіх власних значень, що називається «слідом» матриці і рівна сумі її діагональних елементів у будь-якому базисі.

Нехай $T: G \to T(G_a)$ – деяке лінійне представлення групи G. Функція $\chi: G \to \mathrm{tr}\big(T(G_a)\big)$ називається характером представлення – сума діагональних компонентів матриці представлення $T_{ij}(G_a)$. Такий слід матричного представлення $T(G_a)$ будемо позначати як $\chi(G_a)$. Набір чисел $\chi(G_a)$, де $\chi(G_a)$ пробігає усі елементи групи, називається характером представлення Т. Маємо, таким чином, що для одного представлення

$$\chi(G_a) = \sum_{i=1}^{S} T_{ii}(G_a) \tag{2.44}$$

Встановимо деякі властивості характерів представлень.

1. Відразу видно, що характер представлення інваріантний по відношенню до перетворення подібності, оскільки з рівності (для еквівалентних представлень) $T'(G_a) = AT(G_a)A^{-1}$ виходить:

$$\begin{aligned} \chi'(G_a) &= \sum_i T'(G_a) = \sum_i \sum_j \sum_k A_{ij} T_{jk}(G_a) A_{ki}^{-1} = \\ &= \sum_j \sum_k T_{jk}(G_a)(AA^{-1})_{kj} = \sum_j T_{jj}(G_a) = \chi(G_a) \end{aligned} \tag{2.45}$$

2. Так само можна показати, що усі елементи одного і того ж класу C_p повинні мати однаковий характер, який ми позначимо через χ_p Дійсно, припустимо, що елементи G_a, G_b належать одному і тому ж класу, тобто, пов'язані співвідношенням $G_a = G_m G_b G_m^{-1}$. Тоді для будь-якого представлення T маємо:

$$\begin{aligned} \chi(G_a) &= \sum_i T_{ii}(G_a) = \sum_i T_{ii}(G_m G_b G_m^{-1}) = \\ &= \sum_i \sum_j \sum_k T_{ij}(G_m) T_{jk}(G_b) T_{ki}(G_m^{-1}) = \sum_j \sum_k T_{jk}(G_b) T_{kj}(G_m^{-1} G_m) = \\ &= \sum_j T_{jj}(G_b) = \chi(G_b) \end{aligned} \tag{2.46}$$

3. <u>Теорема.</u> Характери незвідних представлень мають властивість ортогональності.

У разі незвідних представлень для виведення співвідношення між характерами скористаємося співвідношенням ортогональності матричних елементів незвідних представлень (2.42):

$$\sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{pq} / S_\alpha$$

Покладемо в цьому співвідношенні $p = i, q = j$ і підсумуємо ліву і праву частині по i і j, при цьому отримуємо:

$$\sum_g \sum_i T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) \sum_j T_{jj}^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta}$$

оскільки $\sum_i \sum_j \delta_{ii}\delta_{jj} / S_\alpha = 1$. Тому, після підсумовування по діагональних елементах матриць маємо:

$$\sum_g \chi^{(\alpha)}(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_b) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{2.47}$$

Для елементів одного і того ж класу, як показано вище, $\chi(G_a)$ має одно і те ж значення. Тому, якщо число елементів в класі C_p, то це співвідношення можна переписати у виді:

$$\sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g\delta_{\alpha\beta} \tag{2.48}$$

де підсумовування проводять по числу класів p групи G, оскільки $\chi^{(\alpha)} = \sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)}$. У окремому випадку, при $\alpha = \beta$, маємо для незвідних представлень співвідношення:

$$\sum_g \left|\chi^{(\alpha)}(G_a)\right|^2 = \sum_p C_p \left|\chi_p^{(\alpha)}(G_a)\right|^2 = g \tag{2.49}$$

Співвідношення (2.47)

$$\sum_g \chi^{(\alpha)}(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_b) = g\delta_{\alpha\beta}$$

називатимемо співвідношенням ортогональності для характерів. Характери в співвідношенні (2.48) $\sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g\delta_{\alpha\beta}$ можна розглядати як вектори з компонентами $\left(C_p\right)^{\frac{1}{2}} \chi_p$ у векторному просторі розмірності *p*, де C_p – число класів в групі G. У цьому просторі характери незвідних представлень утворюють набір ортогональних векторів. Звідси витікає, що число незвідних нееквівалентних представлень не може перевищувати числа класів групи.

4. Характер звідного представлення T дорівнює сумі характерів незві-

дних представлень, на які воно може бути розкладене.

Це витікає з того, що матриця звідного представлення має квазідіагональний вигляд, а усі еквівалентні представлення мають однакові характери. Оскільки

$$T = T^{(1)}(G_a) \oplus T^{(2)}(G_a) \oplus \cdots = \sum\nolimits_{\alpha}^{\oplus} m_\alpha T^{(\alpha)}$$

то підсумувавши діагональні елементи матриці, відразу видно, що характер χ звідного представлення пов'язаний з характером незвідного представлення таким же співвідношенням:

$$\chi(G_a) = \sum_{\alpha} m_\alpha \chi^{(\alpha)} \tag{2.50}$$

де m_α вказує, скільки разів це незвідне представлення входить в розкладання звідного. Для елементів одного класу C_p отримуємо:

$$\chi_p = \sum_{\alpha} m_\alpha \chi_p^{(\alpha)} \tag{2.51}$$

де m_α – число нееквівалентних незвідних представлень $T^{(\alpha)}$.

Якщо в звідному представленні $T(G_a)$ відомі характери незвідних представлень $\chi^{(\alpha)}$, то використовуючи співвідношення ортогональності, можна отримати:

$$\sum_{g} \chi(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_a) = \sum_{g}\sum_{\alpha} m_\alpha \chi^{(\alpha)}\chi^{(\beta)*} =$$

$$= \sum_{\alpha} m_\alpha \sum_{g} \chi^{(\alpha)}\chi^{(\beta)*} = \sum_{\alpha} m_\alpha g \delta_{\alpha\beta} = m_\beta g$$

Звідси

$$m_\beta = \frac{1}{g}\sum_{g} \chi(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_a) \tag{2.52}$$

Якщо $\chi(G_a) = \sum\limits_{p} C_p \chi(G_a)$, тобто $g = \sum\limits_{p} C_p$, де C_p – число елементів в класі p, то

$$m_\beta = \frac{1}{g}\sum_p C_p \chi_p(G_a)\chi_p^{(\beta)*}(G_a) \qquad (2.53)$$

Тут $\chi_p(G_a)$ – характер звідного представлення.

Зокрема, звідси витікає, що розкладання звідного представлення на незвідні частини може бути виконане єдиним чином. Символічно це записується, як:

$$T = \sum\nolimits^{\oplus} m_\alpha T^{(\alpha)}$$

де значок $\oplus$ нагадує, що вираження в правій частині не є сумою матриць в звичайному сенсі.

5. Якщо представлення Т незвідне, то $\sum\limits_p C_p \left|\chi_p^{(\alpha)}\right|^2 = g$, з іншого боку, якщо остання умова виконується, то представлення Т незвідне. Таким чином, це є необхідна і достатня умова незвідності.

Насправді. нехай Т – незвідне представлення, тоді

$$\sum_p C_p \left|\chi_p\right|^2 = \sum_\alpha\sum_\beta\sum_p C_p m_\alpha m_\beta \chi_p^{(\alpha)}\chi_p^{(\beta)*} = \sum_\alpha\sum_\beta m_\alpha m_\beta \sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)}\chi_p^{(\beta)*} =$$

$$= \sum_\alpha\sum_\beta m_\alpha m_\beta g\delta_{\alpha\beta} = g\sum_\alpha m_\alpha^2$$

З іншого боку $\sum\limits_p C_p \left|\chi_p^{(\alpha)}\right|^2 = g$. Звідси витікає, що $\sum\limits_\alpha m_\alpha^2 = 1$. Оскільки всі m_α – цілі числа по своєму сенсу, то всі $m_\alpha = 0$, окрім одного з них, яке позначимо $m_\gamma = 1$. Звідси видно, що $T = T^{(\gamma)}$, а останнє означає, що представлення Т є незвідне представлення.

2.2.11 Регулярне представлення

Важливим завданням теорії груп є визначення усіх незвідних представлень цієї конкретної групи. Розглянемо для цього спеціальний вид представлення – регулярне представлення. Нехай є група G. Візьмемо її довільний елемент g_s і зробимо операцію зсуву по групі, тобто кожного з елементів групи помножимо ліворуч на g_s. Тоді ми отримаємо послідовності виду :

$$g_s g_1,\ g_s g_2, \cdots\ g_s g_m$$

Згідно з лемою про зсув, в цій послідовності кожен елемент групи зустрічається один і тільки один раз. Якщо $g_s = E$, то фактично ніякого зсуву не станеться

Зсув, що відповідає будь-якому елементу g_s формально можна записати за допомогою оператора $T(g_s)$ і його матриці $\left\| T_{ij}(g_s) \right\|$ порядку m:

$$\forall s : T(g_s) g_i \square\ g_s g_i = \sum_k T_{ki}(g_s) g_k$$

Тут індекси нумеруються по тому елементу, який виходить в результаті дії оператора $T(g_s)$. Подивимося, що є матриця цього оператора. При $g_s = E$ очевидно, що в кожному стовпці матриці T є тільки один елемент, відмінний від нуля і рівний одиниці. Якщо $g_s g_i = g_k$ (а фактично $g_k = g_i$, при $g_s = E$) – елемент групи, то матричний елемент $T_{ki}(g_s) = 1$, а матричний елемент $T_{li}(g_s) = 0$ при $k \neq l$ ($T(g_s) g_i \square\ g_s g_i = \sum\limits_k T_{ki}(g_s) g_k$, $T_{ki}(g_s) = 1\ \ \forall g_k$).

Матриці, побудовані таким чином, дають представлення порядку g групи G, оскільки усі стовпці матриці $\left\| T_{ij}(g_s) \right\|$ складатимуться з нулів і однієї одиниці, крім того, ця одиниця розташовуватиметься на діагоналі тільки тоді, коли g_s є одиничний елемент, $g_s = E$. Таке представлення називається регулярним. Отже, характери регулярного представлення дорівнюватимуть нулю для усіх елементів групи, окрім одиничного, для якого характер дорівнює розмірності представлення (а розмірність представлення співпадає з числом елементів в групі, ord G):

$$\chi^{(R)}(E)=g,\ \ \chi^{(R)}(g_s)=g \text{, якщо } g_s=E$$
$$\chi^{(R)}(g_s)=0 \text{, якщо } g_s\neq E \qquad (2.54)$$

Розкладемо регулярне представлення $T^{(R)}$ на незвідні частини, тобто з'ясуємо, скільки разів в нім міститься кожне незвідне представлення $T^{(\alpha)}$. Оскільки $T^{(R)}=\sum_{\alpha}m_{\alpha}T^{(\alpha)}$, то, користуючись (2.52), $m_{\alpha}=\frac{1}{g}\sum_{g}\chi^{(R)}\chi^{(\alpha)*}(g_s)$, або $\frac{1}{g}g\sum_{\alpha}\chi^{(\alpha)*}(E)=S_{\alpha}$, оскільки $\chi^{(R)}=g$, і одиничному елементу у будь-якому представлені відповідає діагональна одинична матриця і її $\mathrm{Sp}=S_{\alpha}$, де S_{α} – розмірність звідного представлення $T^{(\alpha)}(g_s)$. Звідси витікає, що кожне незвідне представлення міститься в регулярному представленні стільки разів, який порядок (розмірність) незвідного представлення. Таким чином, регулярне представлення повинно містити усі незвідні представлення.

2.2.12 Перша теорема Бернсайда

За допомогою регулярного представлення доведемо першу теорему Бернсайда: сума квадратів розмірності усіх незвідних нееквівалентних представлень дорівнює порядку групи, тобто $\sum_{\alpha}S_{\alpha}^{2}=g$.

Оскільки $\chi^{(R)}=g$, з іншого боку $\chi^{(R)}=\sum_{\alpha}m_{\alpha}\chi^{(\alpha)}$ то $m_{\alpha}=S_{\alpha}$, отже, для незвідних нееквівалентних представлень, щоміститися в регулярному $\chi^{(\alpha)}(E)=S_{\alpha}$, звідси і отримуємо, що $\sum_{\alpha}S_{\alpha}^{2}=g$, тобто розмірність у представлення $T^{(R)}$ рівна сумарної розмірності його складових. Цей результат справедливий і в загальному випадку: сума квадратів розмірності усіх можливих незвідних нееквівалентних представлень дорівнює порядку групи.

2.2.13 Число незвідних представлень (друга теорема Бернсайда)

Отже, для матричних елементів незвідних представлень виконується умова ортогональності (2.42):

$$\sum_{a=1}^{g} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)*}(G_a) = \frac{g}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{pq}$$

Ця умова показує, що матричні елементи незвідних представлень можна розглядати в просторі елементів групи, і вони в цьому просторі утворюють систему ортогональних векторів. Ортогональність виконується за рядками, стовпцями і представленнями α, β. При $\alpha = \beta, j = i, q = p$ маємо:

$$\sum_{a=1}^{g} \left| T_{ip}(G_a) \right|^2 = \frac{g}{S_\alpha}$$

тобто довжина вектору в просторі елементів групи рівна $\sqrt{\frac{g}{S_\alpha}}$. Якщо помножити матричні елементи на $\sqrt{\frac{S_\alpha}{g}}$, то умову ортогональності можна записати у виді:

$$\sum_{a=1}^{g} \sqrt{\frac{S_\alpha}{g}} T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)*}(G_a) \sqrt{\frac{S_\alpha}{g}} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{pq}$$

З ортогональності матричних елементів незвідних представлень витікає співвідношення ортогональності характерів елементів груп:

$$\sum_{a=1}^{g} \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_{a=1}^{g}\sqrt{\frac{1}{g}}\chi^{(\alpha)}(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_a)\sqrt{\frac{1}{g}}=\delta_{\alpha\beta}$$

Характери незвідних представлень групи задовольняють умові ортогональності за різними незвідними представленнями, що можна трактувати аналогічно з матричними елементами незвідних представлень, розглядаючи їх в просторі елементів групи. Довжина вектору в цьому просторі рівна $\sqrt{g}$, оскільки при $\alpha=\beta$ маємо:

$$\sum_{a=1}^{g}\left|\chi^{(\alpha)}(G_a)\right|^2=g$$

Згадаємо, що характери елементів одного класу співпадають. Нехай число класів в групі є p, число елементів в класі C_p. У такому разі суму за елементами групи можна звести до суми за класами:

$$\sum_{p}C_p\chi_p^{(\alpha)}(G_a)\chi_p^{(\beta)*}(G_a)=g\delta_{\alpha\beta}$$

Це можна переписати у виді:

$$\sum_{a=1}^{g}\sqrt{\frac{C_p}{g}}\chi_p^{(\alpha)}(G_a)\chi_p^{(\beta)*}(G_a)\sqrt{\frac{C_p}{g}}=\delta_{\alpha\beta}$$

тобто, як розкладання вектору з компонентами $\sqrt{\frac{C_p}{g}}\chi_p^{(\alpha)}$ за ортами, тобто величини $\sqrt{\frac{C_p}{g}}\chi_p^{(\beta)*}$ можна розглядати як ортонормовані вектори в просторі класів. Число класів в групі p, отже, розмірність простору класів є p. Але в просторі p вимірів не може бути більший, ніж p лінійно незалежних (ортогональних) векторів. А це означає, що число незвідних представлень групи дорівнює числу класів групи. Таким чином, число класів визначає число незвідних нееквівалентних представлень, а в той же час і їх розмірність $\sum_{\alpha} S_{\alpha}^{2} = g$. Це і є <u>друга теорема Бернсайда</u>.

2.2.14 Друге співвідношення ортогональності характерів груп

Для кожного незвідного представлення кожної скінченної групи можна скласти таблицю характерів. Рівність числа класів числу нееквівалентних незвідних представлень означає, що в таблиці характерів стовпці відповідають класам, а рядки – незвідним представленням. Така таблиця має бути квадратною (табл. 2.1).

В силу співвідношення ортогональності

$$\sum_{a=1}^{g} \chi^{(\alpha)}(G_a)\chi^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta}$$
$$\sum_{p} C_p \chi_p^{(\alpha)}(G_a)\chi_p^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{2.55}$$

таким чином, будь-які два рядки в цій таблиці ортогональні, а звідси можна зробити висновок, що і для стовпців таблиці існує співвідношення ортогональності.. Для цього побудуємо матрицю В розміром $n \times n$ з елементами $B_{\alpha p} = \left(\frac{C_p}{g}\right)^{1/2} \chi_p^{(\alpha)}$, тоді $B_{\beta p}^{*} = \left(\frac{C_p}{g}\right)^{1/2} \chi_p^{(\beta)*}$, де n – число нееквівалентних незвідних представлень. Із співвідношення ортогональності рядків (2.55) виходить, що при будь-кому α, β для елементів цієї матриці маємо:

$$\sum_{p} B_{\alpha p} B_{\beta p}^{*} = \delta_{\alpha\beta}$$

що в операторній формі $BB^{+} = 1$.

Таблиця 2.1 До виведення співвідношення

Гр.	C_1	C_2	C_3	C_4
$T^{(1)}$	$\chi_1^{(1)}$	$\chi_2^{(1)}$	$\chi_3^{(1)}$	$\chi_4^{(1)}$
$T^{(2)}$	$\chi_1^{(2)}$	$\chi_2^{(2)}$	$\chi_3^{(2)}$	$\chi_4^{(2)}$
$T^{(3)}$	$\chi_1^{(3)}$	$\chi_2^{(3)}$	$\chi_3^{(3)}$	$\chi_4^{(3)}$
$T^{(4)}$	$\chi_1^{(4)}$	$\chi_2^{(4)}$	$\chi_3^{(4)}$	$\chi_4^{(4)}$

Оскільки B – квадратна матриця, з цього співвідношення виходить, що $\det B = 1$, і існує зворотна матриця B^{-1}, і $B^{-1} = B^{+}$. Тому також $B^{+}B = 1$, що для матричних елементів означає, що

$$\sum_{\alpha} B^{*}_{\alpha p} B_{\alpha q} = \delta_{pq}$$

Повертаючись до характерів груп, отримуємо:

$$\sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)*} \chi_q^{(\alpha)} = \frac{g}{C_p} \delta_{pq} \tag{2.56}$$

Це і є співвідношення ортогональності для стовпців таблиці характерів.

2.2.15 Складання таблиці характерів незвідних представлень

Елементи таблиці характерів (наприклад, групи D_3) можна знайти, підсумовуючи діагональні елементи побудованих раніше матриць представлень. Це не найпростіший спосіб побудови таблиці характерів.

Розглянемо, як з апріорних міркувань можна побудувати таблицю характерів для скінченних груп. Це робиться на основі властивостей характерів незвідних представлень.

1. Число незвідних представлень дорівнює числу класів.

2. Розмірність S_α незвідних представлень повинні задовольняти рівності $\sum_{\alpha} S_\alpha^2 = g$, яке у багатьох випадках дає для S_α єдине рішення. Оскільки характер E одиничного елементу є розмірність представлення, числа в першому стовпці таблиці характерів – це просто цілі числа S_α: $\chi^{(\alpha)} = S_\alpha$.

3. Для кожної групи існує одновимірне тотожне представлення, для якого $T(G_a) = 1$, і отже $\chi(G_a) = 1$. Цим співвідношенням визначається один з рядків таблиці, звичайно це перший рядок.

4. Кожен рядок таблиці – це перетворення координат фізичної систе-

ми, тобто незвідні представлення, в ній – її характери. Рядки таблиці взаємно ортогональні з вагами C_p і нормовані до числа елементів групи g, тобто

$$\sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)}(G_a)\chi_p^{(\beta)*}(G_a) = g\delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_p C_p \left|\chi_p^{(\alpha)}\right|^2 = g$$

Зокрема, якщо β – тотожне представлення, то для усіх представлень, не співпадаючих з тотожним $\sum_p C_p \chi_p^{(\alpha)} = 0$. Число рядків визначає кількість незвідних представлень.

5. Стовпці таблиці взаємно ортогональні і нормовані до g/C_p :

$$\sum_\alpha \chi_p^{(\alpha)*}\chi_q^{(\alpha)} = \frac{g}{C_p}\delta_{pq}$$

Зокрема, якщо вибраний клас – це одиничний елемент E, то для усіх інших стовпців маємо:

$$\sum_\alpha S_\alpha \chi_p^{(\alpha)} = 0$$

Таким чином можна побудувати таблицю характерів простих груп. Про групу слід знати її порядок g, число класів і число елементів в кожному класі. Для складніших груп потрібна додаткова інформація. Для додаткових співвідношень між характерами потрібно знання групової таблиці множення. Для більшості фізичних застосувань необхідно просто поглянути на таблицю характерів. У таблиці характерів незвідних представлень для представлень використовують наступні позначення: A або B з індексами – для одномірних, E – для двовимірних, F або T – для тривимірних, представлення більшої розмірності в тривимірному просторі Евкліда не зустрічаються. Таблиця характерів містить позначення групи в лівому верхньому ряду, склад групи за класами – у верхньому правому рядку, позначення представлень – в лівому стовпці, самі характери знаходяться на перетині рядка – представлення і стовпця – класу. Іншими словами: рядки таблиці містять характери усіх класів в одному представлені, а стовпці – характери одного і того ж класу в усіх незвідних представленнях.

2.2.16 Незвідні представлення абельових і циклічних груп

Для абельової групи кожен елемент спряжений тільки самому собі, тому число класів спряжених елементів дорівнює порядку групи g, а кожен клас складається з одного елементу g_k. Насправді, $g_i = g_m g_k g_m^{-1} = g_k g_m g_m^{-1} = g_k$, тобто при складанні співвідношення спряження елемент g_i виявляється рівним g_k, чого не може бути, так як $g_k \neq g_i$.

Розглянемо циклічні групи. Вище ми розглянули сукупність елементів $g_i, g_i^2, g_i^3 ... g_i^n = e$, яку визначили, як період або цикл елементу g_i. У загальному випадку, циклічною називають групу, породжену одним елементом g :

$$C_n = \left\{ E, g, g^2, g^3 \cdots g^{n-1} \right\} \tag{2.57}$$

У ній $g^i \neq g^j$ при $i \neq j$ і $g^n = E$.

Якщо n – просте число, C_n не має власних підгруп, якщо n – не просте число, кожному дільникові n відповідає підгрупа в C_n. Елемент g називається породжуючим елементом. Очевидно, множина усіх елементів групи створює систему породжуючих елементів. Мінімальну систему таких співвідношень називають визначальними співвідношеннями. Групи з заданими породжуючими елементами і визначальними співвідношеннями позначають символом:

$$G = \langle \cdots / \cdots \rangle$$

де елемент зліва від лінії – породжуючи елементи, справа – визначальне співвідношення. Наприклад, циклічна група C_n записується у виді:

$$C_n = \langle g / g^n = E \rangle \qquad (2.58)$$

Це означає, що g – елемент, що породжує, він один, і одно визначальне співвідношення.

Умова $\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2 = g$ для абельових, і тим самим для циклічних груп означає, що усі незвідні представлення одновимірні, а їх число дорівнює порядку групи, оскільки кожен елемент абельової групи утворює свій власний одновимірний клас. Оскільки матриці незвідних представлень одновимірні, то характери представлень співпадають з самими представленнями. Оператори представлень $T(g)$ діють в одновимірному просторі V=1. Умова унітарності представлень вимагає, щоб ці числа по модулю дорівнювали одиниці. Таким вимогам задовольняють оператори виду:

$$T^{(m)}(g) = e^{\frac{2\pi i}{n} m} \qquad (2.59)$$

де $m = 0,1,2.\cdots n-1$, m нумерує незвідні представлення. При $m = 0$ – тотожне представлення. Оскільки усі представлення одновимірні, оператори $T(g)$ являються одночасно і характерами:

$$\chi^{(m)}(g^k) = T^{(m)}(g^k) = e^{\frac{2\pi i m}{n} k} \qquad (2.60)$$

$m = 0,1,2.\cdots n-1$, k – ступень елементу, n – ступень елементу, при якій $g^n = E$. При $m = 1$ отримуємо перше (одновимірне) представлення, при $m = 2$ – друге представлення и так далі. Таблиця характерів абельових і циклічних груп має розмірність, таким чином, $g \times g$, де g – порядок групи.

2.2.17 Прямий (тензорний) добуток матриць

Розглянемо дві квадратні матриці: матрицю A розміром $n \times n$, і матрицю B розміром $m \times m$ з елементами

$$a_{ik},\ i,k = 1,2,\ldots n$$

$$b_{\alpha\beta},\ \alpha,\beta = 1,2,\ldots m$$

Прямим добутком матриці A на матрицю B називають суперматрицю $A \times B$ розмірності $mn \times mn$ (іноді прямий добуток позначують $A \otimes B$) з матричними елементами $(A \times B)_{i\alpha,k\beta} = a_{ik} b_{\alpha\beta}$. Наприклад, прямий добуток двох матриць другого порядку:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}$$

Звідси витікає, що $(A \times B)_{i\alpha,k\beta} = a_{ik} b_{\alpha\beta} = c_{i\alpha,k\beta}$. Кожен елемент матриці прямого добутку позначається подвійним індексом $c_{i\alpha,k\beta}$, причому перший індекс і відноситься до рядка матриці A, другий індекс α – до рядка матриці B, а індекс kβ – відповідно до стовпів матриць A і B. Елементами матриці $A \times B$ є всілякі добутки елементів матриць A і B. З визначення прямого добутку виходить, що прямий добуток діагональних матриць є діагональна матриця, а прямий добуток одиничних матриць – одинична матриця.

Приведемо без доказу деякі властивості прямого добутку матриць [1].

1. Якщо $A^{(1)}, A^{(2)}$ – матриці порядку n, а $B^{(1)}, B^{(2)}$ – матриці порядку m, то $\left(A^{(1)} \times B^{(1)}\right)\left(A^{(2)} \times B^{(2)}\right) = A^{(1)}A^{(2)} \times B^{(1)}B^{(2)}$

2. Якщо матриці A і B – унітарні, то матриця $A\times B$ – теж унітарна.

3. Нехай матриці A і B мають зворотні матриці, тобто $\det(A)\neq 0, \det(B)\neq 0$, матриці не вироджені. Тоді прямий добуток матриць $A\times B$ має зворотну матрицю і якщо $A\times B = C$, то $C^{-1} = A^{-1}\times B^{-1}$.

2.2.18 Прямий добуток представлень групи

Нехай дано два представлення – $T^{(\alpha)}$ і $T^{(\beta)}$ (не обов'язково незвідні) групи G. Розглядатимемо матриці цих представлень як матриці перетворень відповідно в L_1 і L_2 - мірних просторах R_{L_1}, R_{L_2}. Для ортів $\mathbf{u_i}$ простору R_{L_1} маємо $T^{(\alpha)}\mathbf{u_i} = \sum\limits_m T^{(\alpha)}_{mi}(G)\mathbf{u_m}$, а для ортів $\mathbf{v_k}$ простору R_{L_2} отримуємо $T^{(\beta)}\mathbf{v_k} = \sum\limits_n T^{(\beta)}_{nk}\mathbf{v_n}$.

Виберемо в просторі R_{L_1} вектор $\mathbf{X}(x_1, x_2 \cdots x_{L_1})$, а в просторі R_{L_2} вектор $\mathbf{Y}(y_1, y_2 \cdots y_{L_2})$. Утворюємо L_1L_2 добутків виду $x_i y_k$ складових векторів $\mathbf{X}$ і $\mathbf{Y}$, і розглядатимемо ці числа як компоненти вектору в просторі $R_{L_1}\times R_{L_2}$. Цей вектор називатимемо прямим добутком векторів $\mathbf{X}$ і $\mathbf{Y}$. Простір називатимемо прямим добутком просторів R_{L_1} та R_{L_2} і позначатимемо $\left(R_{L_1}\times R_{L_2}\right)$. Ясно, що базис простору $\left(R_{L_1}\times R_{L_2}\right)$ може бути утворений з прямих добутків базисних ортів $\mathbf{u_i}$ і $\mathbf{v_k}$ просторів R_{L_1} і R_{L_2}:

$$\mathbf{w} = \mathbf{u}\times\mathbf{v};\ \mathbf{w_{ik}} = \mathbf{u_i}\times\mathbf{v_k} \tag{2.61}$$

Визначимо тепер лінійні оператори $T^{(\alpha\times\beta)}(G)$, що діють в просторі $\left(R_{L_1}\times R_{L_2}\right)$ співвідношенням:

$$T^{(\alpha\times\beta)}(G)\mathbf{w_{ik}} = T^{(\alpha)}(G)\mathbf{u_i}\times T^{(\beta)}(G)\mathbf{v_k} = \tag{2.62}$$

$$= \sum_m \sum_n T_{mi}^{(\alpha)}(G)\mathbf{u_m} \times T_{nk}^{(\beta)}(G)\mathbf{v_n} = \sum_m \sum_n T_{mi}^{(\alpha)}(G) T_{nk}^{(\beta)} \mathbf{w_{mn}}$$

Видно, що операторам $T^{(\alpha\times\beta)}(G)$ відповідають матриці, що є прямим добутком матриць $T^{(\alpha)}(G)$ і $T^{(\beta)}(G)$:

$$T^{(\alpha\times\beta)}(G) = T^{(\alpha)}(G) \times T^{(\beta)}(G) \qquad (2.63)$$

Перевірити, що матриці $T^{(\alpha)}(G) \times T^{(\beta)}(G)$ утворюють представлення групи G можна, використовуючи властивість 1) прямого добутку матриць. Насправді, нехай $G_i G_k = G_l$, так що

$$\left.\begin{array}{l} T^{(\alpha)}(G_i) T^{(\alpha)}(G_k) = T^{(\alpha)}(G_i G_k) \\ T^{(\beta)}(G_i) T^{(\beta)}(G_k) = T^{(\beta)}(G_i G_k) \end{array}\right\}$$

Використовуючи властивість 1 прямого добутку матриць, отримуємо:

$$\begin{gathered} \left(T^{(\alpha)}(G_i) \times T^{(\beta)}(G_i)\right) \cdot \left(T^{(\alpha)}(G_k) \times T^{(\beta)}(G_k)\right) = \\ = \left(T^{(\alpha)}(G_i) T^{(\alpha)}(G_k)\right) \times \left(T^{(\beta)}(G_i) T^{(\beta)}(G_k)\right) = \\ = T^{(\alpha)}(G_l) \times T^{(\beta)}(G_l) \end{gathered}$$

Представлення матрицями $T^{(\alpha)}(G) \times T^{(\beta)}(G)$ називається композицією або прямим добутком представлень $T^{(\alpha)}(G)$ і $T^{(\beta)}(G)$. Якщо представлення $T^{(\alpha)}(G)$ і $T^{(\beta)}(G)$ – унітарні, то за властивістю 2) їх прямий добуток також унітарний.

Якщо представлення $T^{(\alpha)}(G)$ і $T^{(\beta)}(G)$ незвідні, то їх прямий добуток в загальному випадку звідний. Розкладання композиції представлень на незвідні частини називається розкладанням Клепша-Гордана:

$$T^{(\alpha)}(G) \times T^{(\beta)}(G) = \sum_l^{\oplus} \gamma_{\alpha\beta l} T^{(l)}(G) \qquad (2.64)$$

де $T^{(l)}(G)$ – незвідні представлення групи G. Відомо, що за допомогою співвідношень ортогональності для характерів незвідних представлень і за відомими характерами звідного представлення можна визначити, скільки разів в нім міститься кожне незвідне представлення. Аналогічно маємо:

$$\gamma_{\alpha\beta l} = \frac{1}{g}\sum_{g}\chi^{(l)*}(G)\chi^{(\alpha,\beta)}(G)$$

де через $\chi^{(\alpha,\beta)}(G)$ позначені характери представлення $T^{(\alpha)}(G)\times T^{(\beta)}(G)$. Знайдемо вираження для характеру $\chi^{(\alpha,\beta)}(G)$. Оскільки елементи матриці $T^{(\alpha)}(G)\times T^{(\beta)}(G)$ мають вигляд

$$\left(T^{(\alpha)}(G)\times T^{(\beta)}(G)\right)_{lm,kn} = T^{(\alpha)}_{lk}(G)T^{(\beta)}_{mn}(G)$$

то, очевидно, характер цього представлення рівний:

$$\chi^{(\alpha,\beta)}(G) = \mathrm{Sp}\left(T^{(\alpha)}(G)\times T^{(\beta)}(G)\right) = \sum_{l}\sum_{m}\left(T^{(\alpha)}(G)\times T^{(\beta)}(G)\right)_{lm,lm} =$$

$$= \sum_{l}\sum_{m}T^{(\alpha)}_{ll}(G)T^{(\beta)}_{mm}(G) = \chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G)$$

Таким чином, характер композиції двох представлень дорівнює добутку характерів співмножників. Підставляючи це у вище отримане вираження отримуємо для числа незвідних представлень прямого добутку:

$$\gamma_{\alpha\beta l} = \frac{1}{g}\sum_{g}\chi^{(l)*}(G)\chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G) \tag{2.65}$$

2.2.19 Прямий добуток груп

Розглянемо поняття прямого добутку груп і дослідимо незвідні представлення прямого добутку.

Нехай дані дві групи: $G^{(1)}$ з елементами $G^{(1)}_{\alpha}$, і $G^{(2)}$ з елементами $G^{(2)}_{\beta}$. Визначимо нову групу $G^{(1)}\times G^{(2)}$, елементами якої являються пари $\left(G^{(1)}_{\alpha}G^{(2)}_{\beta}\right)$, причому порядок розташування елементів в парі несуттєвий. Така група називається прямим добутком груп $G^{(1)}$ і $G^{(2)}$. Закон множення для неї визначається таким чином:

$$\left(G_{\alpha}^{(1)}G_{\beta}^{(2)}\right)\cdot\left(G_{\alpha'}^{(1)}G_{\beta'}^{(2)}\right)=\left(G_{\alpha''}^{(1)}G_{\beta''}^{(2)}\right) \qquad (2.66)$$

де $G_{\alpha''}^{(1)}=G_{\alpha}^{(1)}G_{\alpha'}^{(1)}$; $G_{\beta''}^{(2)}=G_{\beta}^{(2)}G_{\beta'}^{(2)}$. Легко показати, що одиничний елемент прямого добутку груп – це пара одиничних елементів співмножників. Зворотним елементом по відношенню до пари ($G_{\alpha}^{(1)}$, $G_{\beta}^{(2)}$) буде елемент $\left(G_{\alpha}^{(1)-1}G_{\beta}^{(2)-1}\right)$. Якщо групи $G^{(1)}$ і $G^{(2)}$ є комутуючими підгрупами однієї і тієї ж групи, то пара елементів ($G_{\alpha}^{(1)}$, $G_{\beta}^{(2)}$) розуміється як результат групового множення елементів. Можна показати, що з не комутуючих підгруп таким чином не можна скласти прямого добутку. Також можна показати, що число класів групи $G^{(1)}\times G^{(2)}$ дорівнює добутку числа класів співмножників [1].

2.2.20 Незвідні представлення прямого добутку груп

Розглянемо дві групи: G і H. Нехай задано два незвідні матричні представлення: $T^{(\alpha)}(G_a)$ групи G і $U^{(\beta)}(H_b)$ групи H. Покажемо, що прямий добуток матриць $\Gamma^{(\alpha\times\beta)}=T^{(\alpha)}(G_a)\times U^{(\beta)}(H_b)$ також утворюють незвідні представлення групи $G\times H$. Згідно з визначенням, прямий добуток $G\times H$ складається зі всіляких пар добутків $\left(G_aH_b\right)$. Дійсно, незвідність представлення виходить з його характеру, який згідно зі встановленим вище співвідношенням, дорівнює добутку характерів представлень $T^{(\alpha)}(G_a)$ і $U^{(\beta)}(H_b)$:

$$\chi^{(\alpha\times\beta)}(G_aH_b)=\chi^{(\alpha)}(G_a)\chi^{(\beta)}(H_b) \qquad (2.67)$$

Якщо підсумувати по усім груповим елементам обох груп і використати критерій необхідної і достатньої умови незвідності у виді

$\sum_g \left|\chi^{(\alpha)}\right|^2 = g;\ \ \sum_h \left|\chi^{(\beta)}\right|^2 = h$, то отримаємо:

$$\sum_{a,b} \left|\chi^{(\alpha\times\beta)}(G_a H_b)\right|^2 = \sum_a \left|\chi^{(\alpha)}(G_a)\right|^2 \sum_b \left|\chi^{(\beta)}(H_b)\right|^2 = gh$$

Але оскільки gh є порядок прямого добутку груп G і H, тобто групи $G\times H$, звідси витікає, що представлення незвідне.

Представленнями прямих добутків $\Gamma^{(\alpha\times\beta)}$ вичерпуються усі незвідні представлення групи $G\times H$, якщо α і β пробігають усі незвідні представлення G і H. Це просто довести, якщо підсумувати квадрати розмірності, користуючись співвідношенням:

$$g = \sum_\alpha S_\alpha^2;\ h = \sum_\beta S_\beta^2$$

$$\sum_{\alpha,\beta} (S_\alpha^2 S_\beta^2) = \sum_\alpha S_\alpha^2 \sum_\beta S_\beta^2 = gh$$

тобто знову застосовуючи до добутку груп $G\times H$ останнє співвідношення, переконуємося, що $\Gamma^{(\alpha\times\beta)}$ вичерпує усі нееквівалентні незвідні представлення груп $G\times H$.

2.3 Представлення у просторі функцій

2.3.1 Індуковане перетворення функцій

У реальних фізичних завданнях ми зустрічаємо не абстрактні групи, а з групи перетворень конфігураційного простору деякої фізичної системи. Багато груп симетрії є групами перетворення 3-вимірного простору, елементи таких груп утворюють представлення в 3-вимірному просторі.

Нехай нам задана деяка група G перетворень або її представлення $T(G)$. Нехай перетворення $g\in G$ переводить вектор $\mathbf{r}\to\mathbf{r}'$: $\mathbf{r}' = g\mathbf{r}$, де $\mathbf{r}'$

– координати системи. Нехай задана довільна функція $\psi(\mathbf{r})$. Перетворенню g можна поставити у відповідність оператор $T(g)$. Дія оператора $T(g)$ на функцію полягає в тому, що ця функція перетвориться у функцію $T(g)\psi = \psi'$, таку, що

$$\psi'(\mathbf{r}') \equiv T(g)\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) \tag{2.68}$$

якщо $\mathbf{r}' = g\mathbf{r}$. Інакше кажучи, перетворена функція $\psi' = T(g)\psi$ набуває в точці $\mathbf{r}'$, у точці, що є образом $\mathbf{r}$, таких же значень, яке початкова функція приймає в точці $\mathbf{r}$. Інакше: точка P з координатами $\mathbf{r}$ при перетворенні g переходить в точку P' з координатами $\mathbf{r}'$, переносячи разом з собою те чисельне значення, яке функція ψ мала в точці P. Наприклад, якщо g є перетворення виду $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$, то $\psi'(\mathbf{r})$ виходить з $\psi(\mathbf{r})$, якщо зрушити графік функції $\psi(\mathbf{r})$ на $\mathbf{a}$ одиниць управо Таким чином

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$$

Тоді можна записати, що

$$T(g)\psi(g\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$$

або

$$T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r}) \tag{2.69}$$

Для трансформованих функцій $T(g)\psi(\mathbf{r})$ можна використати позначення $\psi'(\mathbf{r})$. Важливо чітко розуміти, що ми маємо справу з двома векторними просторами: простором координат вектору $\mathbf{r}$, в якому визначено перетворення $g \in G$, і з простором функцій $\psi(\mathbf{r})$, в якому визначено індуковане перетворення $T(g)$. Через компоненти вектору $\mathbf{r}$ в деякому базисі $\{\mathbf{e}_i\}$ перетворення $T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$ можна представити таким чином:

$$T(g)\psi(r_1, r_2 \cdots r_s) = \psi(r_1', r_2' \cdots r_s')$$

де r_i' – і- та компонента вектору $\mathbf{r}' = g^{-1}\mathbf{r}$. Якщо відома матриця перетворення g у базисі $\{\mathbf{e}_i\}$, то для унітарного оператора $T(g)$ маємо:

$$r'_j = \sum_i (g^{-1})_{ji} r_i = \sum_i g^*_{ij} r_i$$

Числа r'_j можна розглядати, як компоненти вектору $\mathbf{r}$ в трансформованому базисі $\mathbf{e}'_i = g\mathbf{e}_i$.

Ще раз пояснимо, навіщо використати зворотний оператор, який в цьому фізичний сенс. До прикладу, $\psi(\mathbf{r})$ описує температуру тіла в точці $\mathbf{r}$ 3-вимірного простору, а g є поворот тіла відносно початку координат. Тоді за визначенням $T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$ нова функція $\psi'(\mathbf{r})$ описуватиме температуру в точці $\mathbf{r}$ після повороту. На рис. 2.3 [2] точка Q є $g^{-1}\mathbf{r}$. Таким чином, в результаті повороту g точка Q переходить в точку P, бо $g(g^{-1})\mathbf{r} = \mathbf{r}$. Значить, температура в P після повороту, що задається функцією $\psi'(\mathbf{r})$, це є температура, яка була до повороту в точці Q, тобто $\psi(g^{-1}\mathbf{r})$. Отже, ми отримали $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$, так що перетворення $\psi(\mathbf{r})$ в $\psi'(\mathbf{r})$ задає оператор $T(g)$ в просторі функцій.

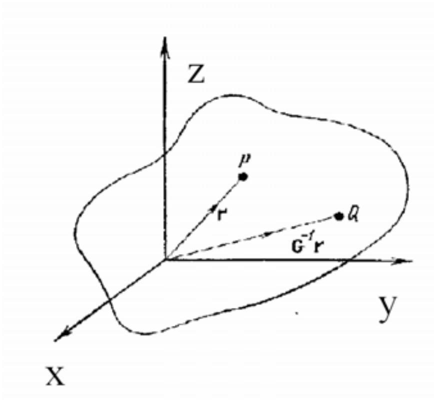


Рис. 2.3 Пояснення до перетворення функцій

Нехай ми маємо два перетворення. Задане співвідношення $T(g_1)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g_1^{-1}\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r})$ піддамо перетворенню $T(g_2)\psi'(\mathbf{r})$. Тоді отримуємо:

$$\begin{aligned} &T(g_2)T(g_1)T(g_2)\psi(g_1^{-1}\mathbf{r}) = T(g_2)\psi'(\mathbf{r}) = \\ &= \psi'(g_2^{-1}\mathbf{r}) = \psi(g_1^{-1}g_2^{-1}\mathbf{r}) = \psi((g_2 g_1)^{-1}\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.70}$$

Це означає, що добуток $g_2 g_1$ перетворень векторів $\mathbf{r}$ індукує в просторі функцій добуток $T(g_2)T(g_1)$ операторів, узятих в тій же послідовності. Таким чином, перетворення координат у виді $\mathbf{r}' = g\mathbf{r}$ означає, що функція координат $\psi(\mathbf{r})$ під дією оператора $T(g)$, того, що відповідає елементу g групи G, $g \in G$, перетвориться у функцію $T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}')$, де $\psi'(\mathbf{r}) = T(g)\psi'(\mathbf{r}')$ таким чином, що чисельне значення перетвореної функції співпадає з її чисельним значенням до перетворення:

$$\psi'(\mathbf{r}) = T(g)\psi(\mathbf{r}') = T(g)\psi(g\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$$

або $T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$.

Подібність чисельних значень не означає один і той же функціональний вид в різних системах координат. Якщо оператори $T(g)$ унітарні, то перетворення $T(g)\psi(\mathbf{r})$ також унітарні. При цьому наявність двох послідовних перетворень $g_1 g_2$ функції координат $\mathbf{r}$ індукує перетворення $\psi(\mathbf{r})$ операторами $T(g_1)T(g_2)$, що відповідають добутку елементів $g_1 g_2$ в тому ж порядку. Очевидно, що елементу g^{-1} відповідає оператор $T^{-1}(g)$. Можна довести і інші властивості операторів, що відповідають елементам групи G. За наявності ізоморфізму, або в загальному випадку, гомоморфізму елементів групи G і операторів, група операторів утворює операторні представлення групи G. Матричні представлення можуть бути отримані, якщо вибрати довільну систему лінійно незалежних функцій $\psi(\mathbf{r})$.

2.3.2 Представлення у функціональному просторі

Побудуємо представлення у функціональному просторі, розглянувши перетворення функцій при повороті системи координат виду $T(g)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$. Нехай ми маємо простір L функцій $\psi(\mathbf{r})$, інваріантних відносно групи перетворень G в тому сенсі, що якщо $\psi(\mathbf{r}) \in L$, то йому належить і $\psi(g_a^{-1}\mathbf{r})$ для $\forall g_a \in G$. Визначимо представлення T групи у функціональному просторі L як перетворення виду $T(g_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(g_a^{-1}\mathbf{r})$. Знову можна переконатися, що представлення задовольняє умові того, що добуток $g_a g_b$ перетворень векторів $\mathbf{r}$ індукує в просторі функцій добуток операторів $T(g_a)T(g_b)$ в тій же послідовності:

$$\begin{aligned} T(g_a)T(g_b)\psi(\mathbf{r}) &= T(g_a)\psi(g_b^{-1}\mathbf{r}) = \psi(g_b^{-1}g_a^{-1}\mathbf{r}) = \\ &= \psi\left((g_a g_b)^{-1}\mathbf{r}\right) = T(g_a g_b)\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad (2.71)$$

Ми отримали таким чином операторні представлення. Матричне представлення можна отримати, якщо вибрати за базисні орти простору L функції:

$$T(g_a)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(g_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \sum_j T_{ji}(g_a)\psi_j(\mathbf{r}) \qquad (2.72)$$

Тут $\psi_i(\mathbf{r})$ служать прикладом абстрактних базисних векторів $\mathbf{e}_j$. У цьому представленні елементу $g_a \in G$ групи перетворень відповідає матриця $T(g_a)$ з елементами $T_{ji}(g_a)$.

<u>Приклад.</u> У 6-вимірному просторі L задана функція $\psi(r)$ виду:

$$\psi(r) = C_1x^2 + C_2y^2 + C_3z^2 + C_4xz + C_5yz + C_6xy$$

Цей простір інваріантний відносно будь-якого обертання і зокрема, відносно операцій групи D_3, які визначені у розділі 1.3.

Насправді, виберемо як базисні 6 функцій:

$$\psi_1 = x^2,\ \psi_2 = y^2,\ \psi_3 = z^2,\ \psi_4 = yz,\ \psi_5 = zx,\ \psi_6 = xy$$

В цьому випадку, наприклад, для операції R_1 маємо:

$$T(R_1)\psi_1 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \sqrt{\frac{3}{4}}xy = \frac{1}{4}\psi_1 + \frac{3}{4}\psi_2 - \sqrt{\frac{3}{4}}\psi_6$$

$$T(R_1)\psi_4 = -\frac{1}{2}yz - \sqrt{\frac{3}{4}}xz = -\frac{1}{2}\psi_4 - \sqrt{\frac{3}{4}}\psi_5$$

Продовжуючи викладення, отримуємо матрицю:

$$
T(R_1)=\begin{pmatrix}
\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} \\
\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\
-\sqrt{\frac{3}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}
\end{pmatrix}
$$

Таким же шляхом можуть бути отримані інші 5 матриць для операцій групи D_3, і вони матимуть ту ж таблицю множення, що і елементи групи.

Розглянемо ще приклад. Нехай задана функція $\psi(\mathbf{r})$, де **r** – вектор в двох вимірах. Введемо полярні координати на площині (**r** φ), тобто $\psi(\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r},\varphi)$. Розглянемо поворот цього вектору під дією оператора $R(\alpha)$ – оператора повороту. Перетворення функції $\psi(\mathbf{r})$, індукованого поворотом $R(\alpha)$ має вигляд (за визначенням):

$$
T\big(R(\alpha)\big)\psi(\mathbf{r})=\psi\Big(R^{-1}(\alpha)\mathbf{r}\Big)=\psi(\mathbf{r},\varphi-\alpha)
$$

тобто

$$
T\big(R(\alpha)\big)\psi(\mathbf{r},\varphi)=\psi(\mathbf{r},\varphi-\alpha)
$$

Візьмемо дві функції:

$$
\psi_1(\mathbf{r},\varphi)=\cos\varphi; \qquad \psi_2(\mathbf{r},\varphi)=\sin\varphi
$$

При застосуванні до цих функцій оператора повороту $R(\alpha)$ отримаємо наступне:

$$
T\big(R(\alpha)\big)\psi_1(\mathbf{r},\varphi)=\cos(\varphi-\alpha)=\cos\varphi\cos\alpha+\sin\varphi\sin\alpha
$$
$$
T\big(R(\alpha)\big)\psi_2(\mathbf{r},\varphi)=\sin(\varphi-\alpha)=\sin\varphi\cos\alpha-\cos\varphi\sin\alpha
$$

Остаточно отримуємо:

$$T\psi_1(\mathbf{r},\varphi) = \cos\alpha \cdot \psi_1 + \sin\alpha \cdot \psi_2$$
$$T\psi_2(\mathbf{r},\varphi) = \sin\alpha \cdot \psi_1 - \cos\alpha \cdot \psi_2$$

Отже. ми отримали перетворення функцій ψ_1, ψ_2, індуковане перетворенням $R(\alpha)$. Можна побудувати і складніші функції. Якщо ми візьмемо $\psi(\mathbf{r},\varphi)$ виду:

$$\psi(\mathbf{r},\varphi) = \exp(im\varphi)$$

то

$$T\left(R(\alpha)\right)\psi(\mathbf{r},\varphi) = \exp\left[im(\varphi-\alpha)\right] = \exp(-im\varphi)\cdot\psi$$

Ця функція є насправді власною функцією оператора Т з власними значеннями $\exp(-im\varphi)$.

Таким чином визначений метод побудови представлень в просторі функцій. Вибирається довільна система лінійно незалежних функцій і до кожної з них застосовують усі операції симетрії, що відповідають елементам групи G. В результаті отримуємо набір функцій, які можна лінійно виразити через n з них: $\psi_1,\ \psi_2\ \cdots\ \psi_{n-1},\ \psi_n$. Якщо тепер застосувати до таких функцій який завгодно оператор $T(g_a)$, то функції, що виходять при цьому, можна представити у вигляді лінійної комбінації тих же самих функцій:

$$T(g_a)\psi_i = \sum_i T_{ji}(g_a)\psi_j \qquad (2.73)$$

і елементу групи $g_a \in G$ відповідає матриця $\left\|T_{ji}(g_a)\right\|$ у вибраному базисі.

Доведемо, що між елементами групи і її матрицями існує гомоморфізм, тобто доведемо, що

$$\left\|T(g_a g_b)\right\| = \left\|T(g_a)\right\|\cdot\left\|T(g_b)\right\| \quad \forall g_a,\ g_b \in G$$

Насправді, оскільки $T(g_a g_b) = T(g_a)T(g_b)$, що було показане вище, то:

$$T(g_a g_b)\psi_i = T(g_a)T(g_b)\psi_i = T(g_a)\sum_j T_{ji}(g_b)\psi_j = \sum_j T_{ji}(g_b)T(g_a)\psi_j =$$

$$= \sum_j T_{ji}(g_b)\sum_l T_{lj}(g_a)\psi_l = \sum_l \sum_j T_{lj}(g_a)T_{ji}(g_b)\psi_l = \sum_l \left(\sum_j T_{lj}(g_a)T(g_{ji}(g_b) \right)\psi_l$$

З іншого боку:

$$T(g_a g_b)\psi_i = \sum_l T_{li}(g_a g_b)\psi_l$$

Звідси витікає, що

$$T_{li}(g_a g_b) = \sum_j T_{lj}(g_a)T_{ji}(g_b) \tag{2.74}$$

що відповідає операторній рівності $T(g_a g_b) = T(g_a)T(g_b)$. Отже, існує гомоморфізм $G \xrightarrow{\text{hom}} T(G)$, і матриця $T(g_a)$ є представленням $T(G)$ групи G в просторі вибраних лінійно незалежних функцій. Сама ψ_i буде однією з базисних функцій або лінійно виражатиметься через базисні. Це справедливо і при розкладанні цілком звідного представлення на незвідні частини. Тому будь-яка функція ψ має бути зображена у вигляді розкладання $\psi = \sum_\alpha \sum_i \psi_i^{(\alpha)}$, які можуть служити базисними функціями в різних незвідних представленнях.

2.3.3 Ортогональність базисних функцій

Нехай представлення $T(g_a)$ – унітарне, $g_a \in G$ і діє в деякому просторі L, незвідне в нім і належить типу α. Виберемо в L довільний набір функцій $\psi_1, \psi_2 \cdots \psi_{S_\alpha}$, де $S_\alpha = \dim L$ і позначимо матриці операторів $T(g_a)$ в цьому базисі через $T^{(\alpha)}(g_a)$. Тоді очевидно

$$T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}\psi_j^{(\alpha)}, \quad i = 1 \cdots S_\alpha \tag{2.75}$$

Визначення. Говоритимемо, що функція $\psi_i^{(\alpha)}$ належить і-ому рядку представлення $T^{(\alpha)}(g_a)$, якщо можна вказати такі функції $\psi_1^{(\alpha)}, \psi_2^{(\alpha)} \cdots \psi_{ii-1}^{(\beta)}, \psi_{i+1}^{(\alpha)} \cdots \quad \psi_{S_\alpha}^{(\alpha)}$ – всього $n_\alpha - 1$, які разом із $\psi_i^{(\alpha)}$ задовольняють вказаному вище співвідношенню (2.75) для $\forall g_a \in G$. Набір функцій $\psi_1^{(\alpha)} \ \cdots \ \psi_{S_\alpha}^{(\alpha)}$ називається в цьому випадку канонічним базисом представлення типу α.

Таким чином, якщо унітарне представлення $T^{(\alpha)}(g_a)$ незвідне в L, то в якості функцій, що належать 1, 2 і так далі рядкам можна узяти 1, 2 і так далі функції довільного ортонормованого базису в L, який і буде канонічним для представлення $T^{(\alpha)}(g_a)$, якщо матриці розглянутих операторів $T^{(\alpha)}(g_a)$ записані в тому ж базисі.

Базисні функції $\psi_1^{(\alpha)} \cdots \psi_{S_\alpha}^{(\alpha)}$ представлення $T(g_a)$ визначають деякий S_α- вимірний підпростір простору L. Цей підпростір називається простором представлення $T(g_a)$. Функції цього простору називають функціями представлення $T(g_a)$. Це представлення $T(g_a)$ може мати декілька різних підпросторів. Навпаки, завданням простору, саме представлення з точністю до еквівалентності визначається однозначно. Всякий простір представлення є інваріантним підпростором простору L відносно операторів $T(g_a)$. Справедливо і зворотне: всякий інваріантний відносно $T(g_a)$ підпростір є простором деякого представлення групи G.

Встановимо ортогональність базисних функцій, що належать двом не еквівалентним незвідним представленням, скориставшись властивостями ортогональності незвідних представлень.

Нехай функція $\varphi_i^{(\alpha)}$ перетвориться по і-ому рядку незвідного представлення $T^{(\alpha)}(g_a)$, і нехай функція $\psi_j^{(\beta)}$ перетвориться по j-ому рядку незвідного представлення $T^{(\beta)}(g_a)$, тобто:

$$T(g_a)\varphi_i^{(\alpha)} = \sum_l T_{li}^{(\alpha)}(g_a)\varphi_l^{(\alpha)}$$

$$T(g)\psi_j^{(\beta)} = \sum_m T_{mj}^{(\beta)}(g)\psi_m^{(\beta)}.$$

При визначеному скалярному добутку, застосованому до усіх даних функцій, оператори $T(g_a)$ унітарні, тобто $\forall g_a \in G$

$$\left(\varphi_i^{(\alpha)}\psi_j^{(\beta)}\right) = \left(T(g_a)\varphi_i^{(\alpha)}T(g_a)\psi_j^{(\beta)}\right) = \sum_l \sum_m T_{li}^{(\alpha)}(g_a)T_{mj}^{(\beta)}(g_a)(\varphi_l^{(\alpha)}\psi_m^{(\beta)}) \qquad (2.76)$$

Якщо вважати, що базисні вектори кожного представлення узяті ортонормованими, то можна за цими умовами скористатися співвідношенням ортогональності матричних елементів незвідних представлень (2.42). Тоді, осереднюючи за групою, з (2.76) отримуємо наступне:

$$\begin{aligned}(\varphi_i^{(\alpha)}\psi_j^{(\beta)}) &= \frac{1}{g}\sum_g \sum_l \sum_m T_{li}^{(\alpha)*}(g_a)T_{mj}^{(\beta)}(g_a)(\varphi_l^{(\alpha)}\psi_m^{(\beta)}) = \\ &= \frac{1}{S_\alpha}\sum_l \sum_m \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{lm}(\varphi_l^{(\alpha)}\psi_m^{(\beta)}) = \frac{1}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\sum_l (\varphi_l^{(\alpha)}\psi_l^{(\beta)})\end{aligned} \qquad (2.77)$$

Це означає, що дві будь-які функції, що перетворюються за унітарними незвідними представленнями, взаємно ортогональні, якщо вони не належать одному і тому ж рядку (тобто, вони не перетворяться відповідно до одного і того ж рядка) одного і того ж (чи еквівалентного) незвідного представлення. Тобто, канонічні базиси різних незвідних представлень ортогональні один одному.

Значення цього результату полягає в ортогональності базисних функцій, що відносяться до різних рядків еквівалентних представлень або нееквівалентних представлень (про що говорить наявність множника $\delta_{\alpha\beta}$). Останній результат абсолютно не залежить від вибору базису в кожному представленні.

2.3.4 Критерій для функції представлення

Знайдемо необхідні і достатні умови того, що функція $\psi_i^{(\alpha)}$ належить *i*-тому рядку незвідного представлення $T(g_a)$ групи G, тобто, що існує такий простір представлення $T(g_a)$, якому належить ця функція, і що функція $\psi_i^{(\alpha)}$ відповідає в нім *i*-тому рядку представлення $T(g_a)$:

$$T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(g_a)\psi_j^{(\alpha)}$$

Функція $\psi_i^{(\alpha)}$ тільки тоді належить *i*-тому рядку незвідного представлення $T(g_a)$ групи G, якщо

$$\sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_k^{(\alpha)}$$

Дійсно, якщо $\psi_i^{(\alpha)}$ належить *i*-тому рядку представлення $T(g_a)$, то є S_α базисних функцій $\psi_j^{(\alpha)}$, однієї з яких являється сама $\psi_i^{(\alpha)}$ і для яких справедливо

$$T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(g_a)\psi_j^{(\alpha)}$$

Помножимо цей вираз на матричний елемент $T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)$ і підсумуємо по усіх елементах групи:

$$\sum_g T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \sum_g\sum_j T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T_{ji}^{(\alpha)}(g_a)\psi_j^{(\alpha)} = \sum_j\left(\sum_g T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T_{ji}^{(\alpha)}(g_a)\right)\psi_j^{(\alpha)} =$$

$$= \frac{g}{S_\alpha}\sum_j \delta_{lj}\delta_{mi}\delta_{\alpha\beta}\psi_j^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{mi}\psi_l^{(\alpha)}$$

При $\alpha = \beta, \quad m = l$ отримуємо:

$$\sum_g T_{ll}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_l^{(\alpha)}\delta_{li}$$

При $l = i$ отже маємо:

$$\sum_g T_{ii}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_l^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_i^{(\alpha)} \tag{2.78}$$

Це необхідна умова, якій повинні задовольняти функції $\psi_i^{(\alpha)}$. Доведемо, що ця умова також достатня, тобто якщо функція $\psi_k^{(\alpha)}$ задовольняє умові

$$\sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_k^{(\alpha)} \tag{2.79}$$

то можна знайти $S_\alpha - 1$ функцій-партнерів таких, що ці функції також задовольнятимуть умові (2.79), тобто умові приналежності до k-ого рядку незвідного представлення $T^{(\alpha)}(g_a)$.

Скористаємося отриманим вище результатом:.

$$\sum_g T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{mi}\psi_l^{(\alpha)};$$

$$\frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{mi}\psi_l^{(\alpha)}$$

При $\alpha = \beta, \quad m = k = i$ маємо:

$$\psi_l^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{kl}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)}$$

При $l = k$

$$\psi_k^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)} \to \sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_k^{(\alpha)}$$

Тобто, отримуємо (2.78). Співвідношення

$$\psi_k^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_l^{(\alpha)} \tag{2.80}$$

дозволяє визначити S_α функцій $\psi_l^{(\alpha)}$ через $\psi_k^{(\alpha)}$, якщо виконується співвідношення:

$$\sum_g T_{kk}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\psi_l^{(\alpha)}$$

Ці функції, визначені вище, тобто

$$\psi_l^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{kl}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a)\psi_k^{(\alpha)}$$

задовольняють умові $T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(g_a)\psi_j^{(\alpha)}$ і таким чином утворюють базис представлення α.

2.3.5 Оператор проектування

Розглянемо ще раз співвідношення $\psi = \sum_\alpha \sum_i^{S_\alpha} \psi_i^{(\alpha)}$, де $i = 1\cdots\ S_\alpha$, і поставимо питання: як знайти $\psi_i^{(\alpha)}$, якщо функція ψ нам задана? Тобто. як розкласти цю функцію в суму функцій, кожна з яких належить певному рядку незвідного представлення?

Повернемося до співвідношення

$$\sum_g T_{lm}^{(\beta)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{mi}\psi_l^{(\alpha)}$$

і покладемо $l = m$:

$$\sum_g T_{ll}^{(\beta)*}(g_a)T(g_a)\psi_i^{(\alpha)} = \frac{g}{S_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{li}\psi_l^{(\alpha)}$$

Введемо оператор

$$P_i^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g T_{ii}^{(\alpha)*}(g_a)T(g_a) \tag{2.81}$$

який назвемо оператором проектування або проекційним оператором, для якого

$$P_i^{(\alpha)}\psi_j^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\psi_i^{(\alpha)} \tag{2.82}$$

Застосовуючи цей оператор до вираження $\psi = \sum_\alpha \sum_i^{S_\alpha} \psi_i^{(\alpha)}$, отримуємо:

$$\psi_i^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g} \sum_g T_{ii}^{(\alpha)*}(g_a) T(g_a)\psi = P_i^{(\alpha)}\psi \qquad (2.83)$$

тобто, деяка функція ψ належить незвідному представленню *α,* якщо вона є сумою функцій, яки належать різним строкам цього представлення:

$$\psi^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{S_\alpha} \psi_i^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{S_\alpha} P_i^{(\alpha)}\psi \qquad (2.84)$$

Таким чином, введення оператора проектування дозволяє, знаючи функцію ψ_i, яка належить і-ому рядку представлення α, отримувати функції-партнери за допомогою оператора $P_i^{(\alpha)}$. Суть його полягає в наступному. У звичайному 3-вимірному просторі відоме поняття проекції вектору $\mathbf{r}(x,\ y,\ z)$ на площину $(x,\ y)$ – це є вектор $(x,\ y,\ 0)$, що лежить в площині $(x,\ y)$. Це є поняття проекції на деякий підпростір і це поняття можна розповсюдити і на випадок більш високої розмірності на функціональні простори.

Якщо в просторі L задати підпростір L_{α_i} набором базисних векторів $\mathbf{e}_\mathbf{i}^{(\alpha)}$, то $P_i^{(\alpha)}$ – проекційний оператор, в результаті дії якого на довільний вектор $\mathbf{r}$ в просторі L цей оператор обертає в нуль усі компоненти вектору, що лежать зовні простору L_{α_i}, і залишає незмінними компоненти простору L_{α_i}. Підсумувавши (2.81) за індексом *l*, маємо наступне:

$$P^{(\alpha)} = \sum_l P_{ll}^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g} \sum_g \sum_l T_{ll}^{(\alpha)*}(g_a) T(g_a) = \frac{S_\alpha}{g} \sum_g \chi^{(\alpha)*}(g_a) T(g_a) \qquad (2.85)$$

Отже, ми теж отримаємо проекційний оператор з $L \to L_{\alpha_i}$, оскільки звідси маємо наступне: $P^{(\alpha)}\psi^{(\beta)} = \psi^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}, \quad \psi = \sum_\alpha \psi^{(\alpha)}, \quad \psi^{(\alpha)} = P^{(\alpha)}\psi$, тобто, знову отримали (2.83, 2.84). Ним можна користуватись, якщо відомі характери незвідних представлень $T^{(\alpha)}(g_a)$ елементів групи $g_a \in G$.

Питання для самоконтролю

1. Який сенс у тому, щоб розглядати дії елементів груп (представлення груп) у лінійних векторних просторах? Чому простори повинні бути лінійними?

2. Що розуміється під комплексним евклідовим простором із заданим в ньому скалярним добутком двох його елементів (x, y)? Чи є такий простір нормованим?

3. Що таке ортонормований базис і яким чином його визначають? Простір і підпростір – чим вони відрізняються? Сформулюйте, як відрізняються один від одного: перетин підпросторів, сума підпросторів, пряма сума підпросторів.

4. Чи є всі Евклідові простори ізоморфними і чому? Сформулюйте, що таке оператор, лінійний оператор, та що таке перетворення простору? Чому множина лінійних операторів утворює лінійний простір?

5. Що таке матриця лінійного оператора і як вона утворюється?

6. Спряжений, самоспряжений, унітарний, ортогональний оператори – як вони відрізняються один від одного? Чи є лінійні перетворення простору завжди невироджені?

7. Чому лінійні невироджені перетворення лінійного простору утворюють групу?

8. Як відрізняються операторні і матричні представлення? Що таке простір представлення і розмірність представлення? Яке співвідношення існую між операторами та матрицями, які здійснюють представлення?

9. В чому є сенс введення інваріантного підпростору? Як його визначають? Які наслідки існування інваріантного підпростору? В чому сенс існування звідних та незвідних представлень?

10. Що таке ортогональне доповнення (ортогональне доповнення чо-

го?)? Чому матриця звідного представлення має квазідіагональних вигляд?

11. Що таке унітарні представлення?

12. Сформулюйте теорему про унітарність. Як розкладається звідне представлення на суму незвідних? Чи є два еквівалентні представлення тотожними?

13. Що стверджують леми Шура?

14. Чому матричні елементи незвідних представлень мають властивості ортогональності? Як розуміється ця ортогональність?

15. Що таке характери представлень? Чому характери представлень не залежать від перетворень?

16. Як співвідносяться характери звідних та незвідних представлень?

17. Сформулюйте властивості характерів незвідних представлень.

18. Що стверджують перша та друга теореми Бернсайда?

19. Як складається таблиця характерів? Чому в ній ортогональні строчки та стовбці?

20.Чому незвідні представлення абельових та циклічних груп є одновимірними?

21. Як складається матриця, яка є прямим добутком двох матриць? Які властивості мають матриці прямого добутку? В якому випадку матриця прямого добутку є унітарною?

22. Як будується прямий добуток представлень двох, або більше, груп?

23. Що таке прямий добуток груп і як він визначається? Які властивості має прямий добуток двох груп? З яких підгруп складається прямий добуток груп? Чому дорівнює характер прямого добутку груп?

24. Що таке представлення у функціональному просторі та його властивості.

25. Сформулюйте властивості індукованого перетворення функцій.

Розділ III

Точкові групи

Ми вже зустрічалися з деякими точковими групами, розглядаючи приклади перетворень. Далі ми виведемо формальні властивості точкових груп ортогональних перетворень в 3-вимірному вимірі. Ці групи мають важливе фізичне застосування, оскільки описують симетрію жорстких молекул і геометричних фігур (правильних многогранників). Деякі з них, а саме 32 кристалографічних точкових групи особливо важливі, оскільки описують симетрію кристалічних решіток і широко використовуються у фізиці твердого тіла. Аналогічним чином класифікація рівнів енергії багатоатомної молекули пов'язана з симетрією цієї молекули, також, як завдання про знаходження спектру коливань молекули. Симетрія зовнішніх макроскопічних форм кристалів пов'язана з симетрією мікроскопічної структури, що лежить в їх основі. Класифікація енергетичних рівнів електрона в кристалі пов'язана з симетрією поля в кристалі. Тому для усіх цих завдань істотно передусім дати систематичне перечислення можливих типів симетрій, які може мати молекула або кристал.

3.1 Група ортогональних перетворень

Визначимо ієрархію (місце розташування) точкових груп в лінійних групах невироджених перетворень лінійного простору.

Вище ми розглянули множину усіх невироджених перетворень лінійного n-вимірного простору $V \to V$ лінійними операторами і показали, що множина таких перетворень утворює групу $GL(n)$ – General Linear

Group. У групі $GL(n)$ виділяють як підгрупи, окремої групи, групу ортогональних перетворень $O(n)$ евклідова (дійсного) простору V.

Як відомо, лінійний оператор Р є ортогональним, якщо $\forall$ $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ $\in V$ скалярний добуток $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (P\mathbf{x}, P\mathbf{y})$, тобто ортогональний оператор не міняє скалярного добутку елементів в дійсному просторі Евкліда. Ортогональний оператор здійснює ортогональні перетворення. Для ортогонального оператора виконуються співвідношення (по аналогії з унітарним оператором) $P^{-1} = P^{+}$, де P^{+} – оператор, спряжений до Р. Матриця оператора P^{+} в ортогональному базисі є транспонованою і комплексно спряженою, а оскільки Р діє в дійсному просторі, то комплексне спряження співпадає з самим собою. Оскільки у ортогонального оператора є зворотний оператор P^{-1}, то кожне ортогональне перетворення є невиродженим. Насправді, оскільки $PP^{-1} = E$ то $\det P \cdot \det P^{-1} = \det E = 1$, тобто $\det P \neq 0$, і Р - невироджене перетворення.

<u>Теорема.</u> Множина усіх ортогональних перетворень евклідова простору V із звичайною операцією множення лінійних перетворень утворює групу $O(n)$ – ортогональну групу.

Досить довести, що добуток ортогональних перетворень є ортогональне перетворення, оскільки для будь-якого ортогонального оператора існує зворотний оператор і виконується співвідношення $P^{+} = P^{-1}$, а оскільки $PP^{-1} = E$, то $PP^{+} = E$.

Доведемо, що якщо P_1, P_2 – два ортогональні перетворення, то $(P_1P_2)\cdot(P_1P_2)^{+} = E$. Насправді $(AB)^{+} = B^{+}A^{+}$, в даному випадку $(P_1P_2)^{+} = P_2^{+}P_1^{+}$. Звідси:

$$(P_1P_2)\cdot(P_1P_2)^{+} = P_1(P_2P_2^{+})P_1^{+} = P_1EP_1^{+} = E$$

Визначник $\det P$ ортогонального перетворення задовольняє співвідношенню $(\det P)^2 = 1$, тобто $\det P = \pm 1$. Насправді, оскільки $P^+ = P^{-1}$, то $PP^+ = 1$, де P^+– транспонована матриця Р, а $\det P^+ = \det P$. Отже $(\det P)^2 = 1$, $\det P = \pm 1$. Перетворення з $\det P = 1$ – власні перетворення, або перетворення першого роду. Перетворення з $\det P = -1$ – перетворення невласні, або перетворення другого роду. Множина усіх власних ортогональних перетворень утворюють ортогональну групу $SO(n)$ з $\det P = 1$.

У повній аналогії з ортогональними групами можна розглядати унітарні групи перетворень в комплексному (ермітовому) просторі $U(n)$. У них також виділяють підгрупу $SU(n)$ унітарних унімодулярних перетворень, для яких детермінант перетворень дорівнює +1.

У разі тривимірних вимірів групи $O(n)$ і $U(n)$ переходять в групи відповідно $O(3)$ і $U(3)$. Перетворення з детермінантом $\det = 1$ складають групу $O_+(3)$, з $\det = -1$ – $O_-(3)$ або $({}_+SO(3),\ {}_-SO(3))$. Множини $SO(3)$ є підгрупа $O(3)$:

$$O(3) = SO(3) \bigcup (-eSO(3); \quad e = 1; \ \det(-eSO(3) = -1$$

$SO(3)$ є інваріантною підгрупою $O(3)$.

Перетворення в 3-вимірному просторі з $\det = 1$ називають також обертальними перетвореннями, або власними ортогональними перетвореннями.

Якщо описані вище групи лінійних перетворень розташувати в порядку вкладення їх один в одного, отримаємо наступну схему:

$$\begin{Bmatrix} {}_+SO(3) \\ {}_-SO(3) \end{Bmatrix} \subset \begin{Bmatrix} O(n) \\ SU(n) \end{Bmatrix} \subset U(n) \subset GL(n)$$

Унітарні ортогональні перетворення входять до групи руху евклідова простору V.

До точкових груп відносять скінченні підгрупи $O(3)$. Точкові групи залишають нерухомими одну з точок 3-вимірного простору. Цю точку, як правило, вибирають як початок координат. Ці групи мають важливе фізичне застосування, оскільки вони описують симетрію молекул і геометричних фігур (правильних многогранників). Кристалографічні точкові групи описують симетрію кристалічних решіток і широко використовуються у фізиці твердого тіла.

3.2 Елементи і операції симетрії точкових груп

Назву «точкові» групи дістали тому, що перетворення, що входять в них, залишають нерухомій принаймні одну точку простору (як правило, початок системи координат). Дійсно, усі ортогональні перетворення зводяться до комбінації двох типів перетворень – обертання і відображення відносно площини, що проходить через початок координат. Точка простору, що відповідає початку координат, залишається при цьому нерухомою.

Говорять, що тіло має симетрію деякої точкової групи, якщо під дією перетворень цієї групи воно поєднується саме з собою. Подібні осі і площини називають елементами симетрії. Кожен елемент симетрії породжує відповідне перетворення симетрії – операції симетрії.

Точкові перетворення – це ортогональні (унітарні) перетворення деякого об'єкту, які зберігають незмінними відстані між усіма парами точок тіла і поєднують об'єкт з самим собою. Сукупність таких перетворень утворює групу – групу симетрії об'єкту. Вони є комбінаціями трьох основних типів перетворень, що зберігають відстані:

1. повороти на деякий кут навколо якої-небудь осі;
2. дзеркального відображення в площині;

3. трансляції (паралельного перенесення)

Для фізичних систем скінченної протяжності можливі тільки перші два типи.

1^0. Якщо при повороті навколо деякої осі на кут 2π тіло поєднується з собою n разів, то току вісь називають віссю симетрії n-ого порядку C_n. Найменший кут повороту, при якому відбувається поєднання, рівний в цьому випадку $2\pi/n$. Операцію такого повороту позначають, як і вісь C_n. Послідовність k поворотів на кут $2\pi/n$, тобто поворот на кут $2\pi k/n$ позначають C_n^k. Очевидно, що операція, виконана n разів еквівалентна тотожному перетворенню:

$$C_n^n = E$$

2^0. Іншим елементом симетрії точкової групи є площина симетрії, а операцією симетрії – відображення тіла в цій площині. Площина симетрії позначається σ. При цьому площина, перпендикулярна осі C_n, позначають σ_h і називають горизонтальною площиною. Площину, що проходить через C_n, позначають σ_v (чи σ_d). Таке ж позначення прийняте і для операцій симетрії. Очевидно, що $\sigma^2 = E$ – тотожне перетворення.

3^0. Якщо поєднання тіла з самим собою відбувається тільки при послідовному застосуванні двох операцій симетрії: повороту на кут $2\pi/n$ і відображення в площині, перпендикулярній осі повороту, то така операція симетрії називається дзеркально-поворотною і позначається S_n (рис. 3.1). Вісь повороту в цьому випадку називають дзеркально-поворотною віссю n -го порядку і також позначають S_n Послідовність виконання операцій повороту і відображення несуттєва:

$$S_n = \sigma_h C_n = C_n \sigma_h \qquad (3.1)$$

З отриманих вище співвідношень (3.1) виходить, що

$$(S_n)^n = (C_n\sigma_h)^n = (C_n)^n(\sigma_h)^n \qquad (3.2)$$

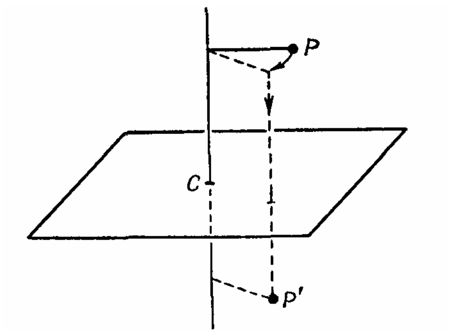


Рис. 3.1 Дія на точку P дзеркально-поворотної осі S_n

Звідки при парному n витікає, що $(S_n)^n = E$, а при непарному n $(S_n)^n = \sigma_h$. Отже, якщо тіло має симетрію S_n, те воно також має симетрію σ_h і C_n як незалежний елемент симетрії.

4^0. Дзеркально-поворотна вісь другого порядку еквівалентна наявності у тіла центру симетрії, розташованого в точці перетину осі S_2 з площиною σ_h. Операція S_2 є операцією інверсії відносно центру симетрії і позначається :

$$I = S_2 = C_2\sigma_h = \sigma_h C_2 \qquad (3.3)$$

Очевидно, що $C_2 = I\sigma_h = \sigma_h I$; $\sigma_h = IC_2 = C_2 I$. Усі три елементи симетрії I, σ_h і C_2 комутують. Якщо будь-хто два з цих елементів належать групі симетрії, то й третій елемент теж належить їй. Сукупність операцій симетрії цього тіла утворює його точкову групу симетрії.

Таким чином, сукупність перетворень симетрії задовольняє аксіомам теорії груп, оскільки можна визначити поняття добутку двох перетворень симетрії, як деяке реальне перетворення симетрії системи. Тотожне перетворення залишає систему незмінної. У будь-якого перетворення існує зворотне перетворення, при перемножуванні декількох перетворень виконується умова асоціативності.

3.3 Матриці ортогональних перетворень

Вище ми встановили, що ортогональні перетворення з $\det = 1$ називаються власними перетвореннями, з $\det = -1$ – невласними перетвореннями. Встановимо, які перетворення вважати власними, або перетворення першого роду, які – невласні, або перетворення другого роду.

Матриця повороту на будь-який кут навколо осі, перпендикулярної площини (x, y), має вигляд:

$$C(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (3.4)$$

Очевидно, що детермінант цієї матриці при будь-якому куту φ є:

$$\det C(\varphi) = \cos^2\varphi - (-\sin^2\varphi) = 1 \qquad (3.5)$$

Отже, до власних перетворень відносять тільки повороти відносно вибраних осей.

Перетворення I інверсії – це добуток осі C_2 на відображення в площині, перпендикулярній цій осі:

$$I = S_2 = C_2\sigma_h = \sigma_h C_2$$

Інверсія, таким чином, переводить точку М в дзеркально симетричну відносно нерухомої точки, в яку поміщають початок координат:

$$M \to M'; \ \mathbf{r}' = I\mathbf{r} = -\mathbf{r}$$

або

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = I \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \qquad (3.6)$$

Тому в матричній формі перетворення інверсії можна записати таким чином:

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (-1)E \qquad (3.7)$$

Очевидно, що $\det I = -1$. Інверсія є елементом другого порядку:

$$\mathbf{r}'' = I\mathbf{r}' = -\mathbf{r}' = -(-\mathbf{r}) = \mathbf{r} = I^2\mathbf{r}$$

$$I^2 = E$$

Площина дзеркального відображення σ перетворює точки простору за законами уявного відображення в плоскому дзеркалі в оптиці. Позначимо площину, перпендикулярну осі x_i, через σ_i. Для відображення в координатних площинах перетворення в матричній формі може бути записане в наступному виді:

$$\mathbf{r}' = \sigma_x \mathbf{r}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

Отже:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

Очевидно, що $\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1$. Отже, до невласних ортогональних перетворень відносять перетворення інверсії і відображення в площині.

3.4 Про виведення точкових тривимірних груп

Перетворення, що входять до групи точкової симетрії, повинні мати принаймні одну загальну точку перетину, в якій, як правило, поміщають початок системи координат.

Існують різні способи виведення точкових груп симетрії [45]. Майже усі ці способи ґрунтовані на переборі допустимих поєднань породжуючих елементів груп, теоретико-груповому або геометричному аналізі цих поєднань і доказу того, що цей перебір вичерпний. Використовуємо метод перебору на основі геометричних образів, як найбільш наочне і просторове уявлення про симетрію.

Операції симетрії точкових груп – це відображення в площини, прості C_n, дзеркальні S_n і інверсійні I. Але через одну точку можуть проходити декілька різних і по-різному орієнтованих елементів симетрії. Кожен з них під дією своєї операції переходить саму в себе і переводить усі інші елементи в еквівалентні. Завдання виведення і полягає в тому, щоб знайти замкнуті сукупності операцій і комбінації елементів симетрії, що відповідають їм .

Дійсно, вісь C_n розмножить будь-яку похилу до неї вісь в n осей, будь-яку не перпендикулярну їй площину – в n площин. Будь-яка площина подвоїть число площин, що перетинаються з нею, або осей, не перпендикулярних їй. Тому «криво» розташовані елементи симетрії породжуватимуть нові, а нові породжуватимуть наступні і так далі. Ясно, що скінченну точкову групу можна отримати, якщо комбіновані елементи будуть розташовані так, що їх взаємно розмножуючи дії відразу або через скінченне число операцій приведе до збігу виникаючих елементів із вже наявними.

Для розгляду взаємодії операцій елементів симетрії скористаємося теоремами про взаємодію і перетин елементів симетрії. Тому розглянемо декілька простих властивостей послідовних відображень в різних площинах або поворотів навколо різних осей.

Розглянемо добуток відображення в двох площинах що перетинаються по деякій прямій і доведемо, що пряма перетину двох площин під кутом φ є вісь повороту на кут 2φ. Точка О – слід лінії перетину площин v и v'

(рис. 3.2).

Відбиваючи точку Р спочатку в площині v, а потім в площині v' видно, що точка Р переходить в точку P', а потім в точку P'', причому $OP = OP' = OP''$. З побудови видно, що кут між OP, OP'' рівний 2φ. Таким чином, композиція відображень в двох площинах $\sigma_v \cdot \sigma'_{v'}$ що перетинаються під кутом φ, є поворотом на кут 2φ навколо осі перетину площин:

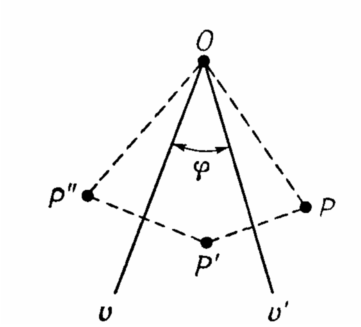


Рис. 3.2 Відображення точки Р в двох площинах, що перетинаються в точці О

$$\sigma_v \sigma'_{v'} = C(2\varphi) \tag{3.10}$$

де $C(2\varphi)$ – поворот на кут 2φ навколо лінії перетину площин в напрямі від v до v'. Точно також $\sigma'_{v'}\sigma_v$ є поворот на той же самий кут навколо тієї ж осі, але в протилежному напрямі. З цього видно, що перетворення σ_v і $\sigma'_{v'}$ не комутують, за винятком окремого випадку $\varphi = \frac{\pi}{2}$, а їх добуток рівний C_2, і тривіального випадку, коли $\varphi = \pi$. Помноживши рівність $\sigma_v \sigma'_{v'} = C(2\varphi)$ на σ_v ліворуч. отримуємо:

$$\sigma_v \sigma_v \sigma'_{v'} = \sigma_v C(2\varphi); \quad \sigma'_{v'} = \sigma_v \cdot C(2\varphi) \tag{3.11}$$

Таким чином, добуток повороту на даний кут навколо деякої осі і відображення в площині, що проходить через цю вісь є відображення в другій площині, що проходить через ту ж вісь і утворює з першою площиною кут, рівний половині кута повороту. Ми отримали три взаємно незалежних елементу симетрії. З наявності, таким чином, будь-яких двох елементів симетрії $\left[\sigma_v, \quad \sigma'_{v'} \quad C(2\varphi)\right]$ виходить наявність третього.

Нехай ми маємо вертикальний відрізок ОР, Оа і Ob лежать в горизонтальній площині, Оа перпендикулярно Ob (рис. 3.3). Розглянемо

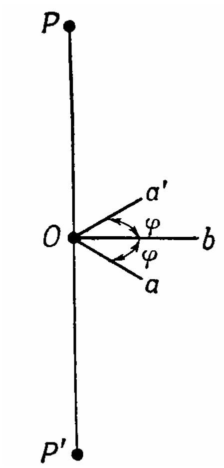


Рис. 3.3 Послідовне виконання поворотів навколо двох осей

результат послідовного виконання поворотів на кут π спочатку навколо Oa, а потім навкруги Ob. Поворот навкруги Oa залишає Oa і переміщає точку P в положення P' $(OP = OP')$, при цьому положення Ob залишається на місці, вісь Ob не жорстко закріплена з OP. Якщо потім ми вчинимо поворот на кут π навколо Ob, то точка P' повертається назад в точку P, так що добуток цих поворотів має бути якимсь поворотом навколо прямої POP'. Точка a, яка залишалася нерухомою при першому повороті, тепер перейде в положення a', рахуючи вісь Oa жорстко пов'язаною з OP. Таким чином, послідовне виконання поворотів на кут π навколо двох осей, що утворюють між собою кут φ, дає в результаті поворот на кут 2φ навколо осі, перпендикулярної до перших двох. Зокрема, якщо осі X, Y є поворотними осями другого порядку, то і вісь Z є віссю другого порядку.

Існує також наступна теорема Ейлера [8].

Теорема. Повороти навколо двох осей C_n і C'_n, що перетинаються, еквівалентні повороту навколо третьої осі, рівнодійної цим двом осям. Тобто, якщо є дві осі C_n і C'_n, то є і третя вісь C''_n.

Розглянемо взаємодію власних і невласних точкових перетворень. Вище з геометричних міркувань було встановлено, що:

1). Добуток двох невласних перетворень (двох відображень в площині) є перетворення власне (поворот на кут 2φ, де φ – кут між двома площинами, що перетинаються (див 3.10). Добуток парного числа невласних перетворень є власне перетворення, добуток непарного числа невласних перетворень є знову перетворення невласне:

$$S_n \cdot S'_{n'} = \sigma_h C_n \cdot \sigma_h C'_{n'} = \sigma_h \sigma_h C_n C'_{n'} = C'_{n+n'}$$
$$\sigma_v \cdot \sigma'_{v'} = C(2\varphi); \quad \sigma'_{v'} = \sigma_v \cdot C(2\varphi) \tag{3.12}$$
$$S_n \cdot C'_{n'} = \sigma_h C_n \cdot C'_{n'} = \sigma_h C'_{n+n'} = S'_{n+n'}$$

Добуток власних перетворень на невласні дають невласні перетворення.

2). добуток двох обертань, згідно теореми Ейлера, є також обертання, добуток будь-якого числа власних перетворень є перетворення власне. Отже, обертання самі по собі утворюють групу. Таким чином, додавання нових елементів симетрії до якого-небудь з тих, що розглядаються, спричиняє появу двох елементів симетрії. При цьому для отримання скінченної точкової групи приєднання нових елементів не може бути довільним: нові осі симетрії можуть перетинатися із старими не під довільним кутом, інакше це може привести до нескінченних груп.

3.5 Принципи розбиття точкових груп на класи

При розбитті групи на класи керуються наступними міркуваннями.

1. Два повороти на один кут навколо різних осей відносять до одного класу, якщо в числі операцій групи є перетворення, поєднуючи обидві осі.

2. Два повороти навколо однієї осі на однаковий кут в протилежних напрямах відносять до одного класу, якщо в числі операцій симетрії групи є операція повороту, що міняє напрям осі на зворотне, або є операція відображення в площині, що проходить через вісь.

3. Два відображення в різних площинах належать одному класу, якщо серед операцій групи є перетворення, що переводить одну площину в іншу.

4. Усі осі або площини, які можна поєднати за допомогою якої-небудь операції, що належить групі, називаються еквівалентними осями або площинами. Поворот на один і той же кут навколо еквівалентних осей

належить одному і тому ж класу. Те ж відноситься і до дзеркально-поворотних операцій навколо еквівалентних осей.

5. Якщо є поворот C_n^k, то зворотним є поворот $C_n^{-k} = C_n^{n-k}$, тобто поворот на кут $(n-k)2\pi/n$ в тому ж напрямі, або на кут $2\pi/n \cdot k$ в зворотному. Якщо в числі перетворень групи є поворот на π навколо осі, перпендикулярної осі (він міняє напрям даної осі на протилежне), то повороти C_n^k, C_n^{-k} належать одному класу.

6. Відображення σ_h в площині, перпендикулярній осі теж міняє її напрям на протилежне, але відображення міняє і напрям обертання. Тому σ_h не робить C_n^k і C_n^{-k} спряженими. Відображення в площині σ_v, що проходить через вісь, не міняє напрям осі, але міняє напрям обертання, тому $C_n^{-k} = \sigma_v C_n^k \sigma_v^{-1}$; за наявності площини $\sigma_v = \sigma_v^{-1}$ C_n^k і C_n^{-k} – одного класу.

Операції, які породжують яку-небудь групу, називаються генераторами цієї групи. Будь-який елемент скінченної групи є добутком її генераторів. Групи з одним генератором – циклічні. Вибір генератора неоднозначний.

З простих геометричних міркувань можна сформулювати наступні правила.

1. При додаванні операції інверсії (яка комутує з усіма іншими елементами групи) повне число елементів групи подвоюється. Інверсія комутує з будь-яким перетворенням точкової групи і завжди складає окремий клас.

2. При додаванні горизонтальної осі другого порядку до вертикальний осі n-ого порядку з'являється $n-1$ інших горизонтальних осей другого порядку.

3. При додаванні вертикальної площини симетрії σ_v до вертикальної осі n-ого порядку з'являються $n-1$ інших вертикальних осей симетрії.

3.6 Групи точкових перетворень

3.6.1 Групи власних перетворень (власні групи)

До власних точкових перетворень відносяться перетворення повороту навколо деякої осі. Тому розглянемо групи, які містять тільки чисті повороти.

1. Групи C_n. Генератором груп є $\{C_n\}$

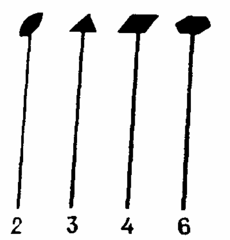


Рис. 3.4 Схематичне зображення осей симетрії групи поворотів при різних значеннях порядку осі: 2 – другого порядку, 3 – третього порядку, 6 – шостого порядка

Розглянемо випадок, коли є тільки одна поворотна вісь симетрії. За головну вісь виберемо вісь Z. Для осі порядку n групу симетрії позначатимемо C_n (рис.. 3.4). Ці групи є абельовими і циклічними. Група C_n породжена однією віссю симетрії n-ого порядку і забезпечує поєднання перетвореної системи з початковою при повороті на дискретні кути $2\pi/n \cdot k$. Група складається з елементів $C_n, C_n^2, \cdots C_n^n = e$. Число класів дорівнює порядку групи. Приклади молекул, що мають симетрію C_n при конкретному значенні n, показані нижче на рисунках 3.5 і 3.6.

2. Групи діедрів D_n. Генератори групи $\{C_n^z, C_2'\}$

Група утворюється додаванням до головної вертикальної осі C_n однієї поворотній горизонтальній осі другого порядку C_2', перпендикулярною C_n. Згідно з правилом 2) з'являється ще $n-1$ других поворотних осей другого порядку. Умова $C_n \perp C_2'$ обов'язкова, оскільки інакше дія осі C_2' дало б іншу вісь C_n: при $C_n \perp C_2'$ вісь C_2' перевертає C_n і

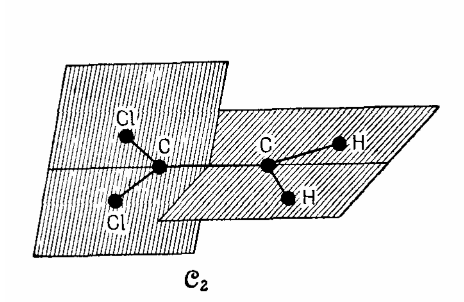


Рис.3.5 [8] Молекула $H_2C = CCl_2$, що має симетрію C_2

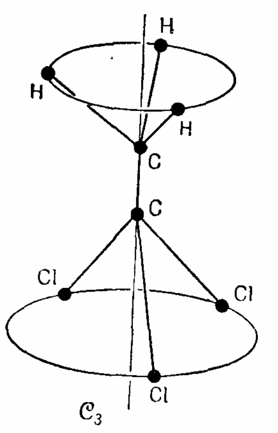


Рис. 3.6 [8] Молекула $H_3C - CCl_3$, що має симетрію C_3

поєднує з собою. Кути між осями другого порядку, що з'являються, рівні π/n (рис 3.7). Групи D_n містять 2n елементів. Група D_2 – абельова, при n > 2 не є абельовою. Приклад молекули з симетрією D_2 можна отримати, якщо на рис. 3.5 замінити атоми хлору на атоми водню (молекула C_2H_4). На рис. 3.8 показана молекула, що має симетрію D_3.

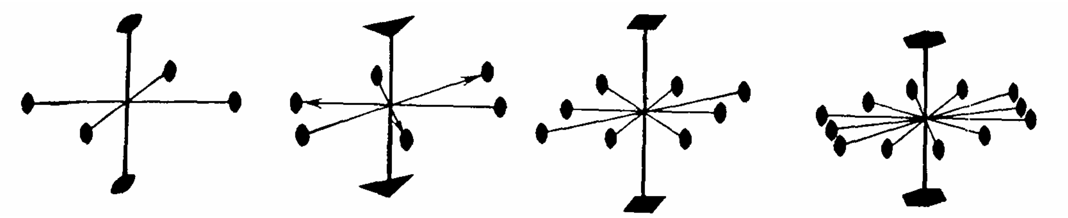


Рис. 3.7 Елементи симетрії груп D_n

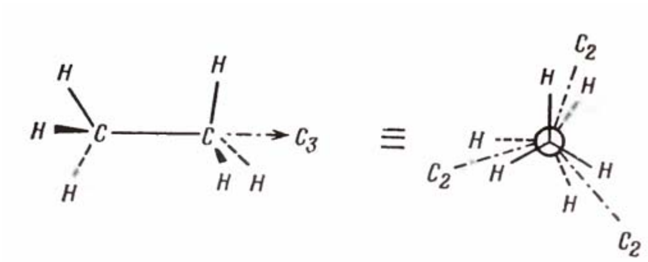


Рис. 3.8 [13] Молекули C_2H_6 мають симетрію D_3

3. Групи симетрії опуклих многогранників.

Групи, що містять тільки осі обертання, можна схемне, умовно, описати за допомогою одиничної сфери з центром на початку координат. На її поверхні вибирають довільну точку і відмічають усі положення, які вона займатиме в результаті операцій обертання. Для будь-яких поворотів є тільки дві точки на поверхні сфери, які залишаються нерухомими при дії поворотів: точки перетину сфери і осі обертання. Ці точки називаються полюсами обертання (x_1, x_2).

Розглянемо групи з декількома вертикальними осями обертання. Нехай ми маємо дві або більше висій порядку n. З'ясуємо, які з них можливі. Для цього розглянемо групу з декількома осями порядку n, що перетинаються в центрі сфери. Якщо на сфері відмітити точки P_i, в яких осі n-ого порядку перетинають її, то в силу дії осі n-ого порядку відносно будь-якої з осей точки P_i будуть вершинами правильного многогранника (поліедра). Якщо тепер з'єднати точки P_i сегментами кругів на поверхні сфери або ребрами, отримаємо деяку сітку (рис. 3.9 [2]). За допомогою такого процесу ми покриємо усю поверхню одиничної сфери однаковими правильними сферичними багатокутниками. Ми отримаємо правильний сферичний многогранник, вписаний в сферу, з певним числом граней, вершин і ребер. Кожна грань є правильним сферичним багатокутником з певним числом сторін. Ми маємо Г граней, В вершин, С сторін правильного багатокутника. Нехай число ребер, що сходяться в одній вершині, рівне n. Кожне ребро Р має по одній вершині на кожному з двох своїх кінців, тому число ребер $P = \frac{nB}{2}$. Кожне ребро належить двом граням, звідси:

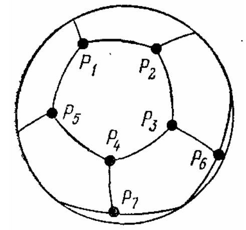


Рис. 3.9 [2] Правильний поліедр на поверхні одиничної сфери

$$P = \frac{ГС}{2}$$

Порівнюючи два останні вираження, отримуємо, що $nB = \Gamma C$; $n = \frac{\Gamma C}{B}$.

Площа багатокутника із С сторонами на одиничній сфері дорівнює сумі кутів многогранника мінус $(C-2)\pi$. Для нашого побудованого правильного багатокутника площа його рівна $C \cdot \frac{2\pi}{n} - (C-2)\pi$. Якщо ми помножимо цю величину на число граней Г, отримаємо повну поверхню сфери, рівну 4π (оскільки сфера одинична). Таким чином, отримуємо:

$$\Gamma\left[(C \cdot \frac{2\pi}{n}) - (C - 2\pi)\right] = 4\pi \tag{3.13}$$

або

$$\frac{\Gamma C}{n} - \frac{\Gamma C}{2} + \Gamma = 2; \quad \frac{nB}{n} - P + \Gamma = 2$$

де враховано, що $\frac{\Gamma C}{2} = P$. Остаточно отримуємо:

$$B - P + \Gamma = 2 \tag{3.14}$$

Це є <u>теорема Ейлера</u>, застосовна для будь-якої сітки на поверхні сфери. Перепишемо отримане у виді:

$$\frac{2C}{n} - (C-2) = \frac{4}{\Gamma} \tag{3.15}$$

що виходить з того, що $\frac{\Gamma C}{n} - \frac{\Gamma C}{2} + \Gamma = 2 \rightarrow \frac{C}{n} - \frac{C}{2} + 1 = \frac{2}{\Gamma}$ з подальшим множенням на два. При $n > 2$ величина $2C/n$ має бути більше $C-2$, оскільки $\frac{4}{\Gamma} > 0$, і тому допустимі значення С обмежені. При $n = 2$ $\Gamma = 2$, і ця процедура подвоїть групи діедра. При $n > 2$ отримаємо можливості, приведені в таблиці 3.1 [2,21].

Таблиця 3.1 Характеристики правильних многогранників [2,21]

n	**C**	**Г**	**B**	**P**	**много-гранник**	**порядок групи**
3	3	4	4	6	тетраедр	12
3	4	6	8	12	куб	24
4	3	8	6	12	октаедр	24
3	5	12	20	30	додекаедр	60
5	3	20	12	30	ікосаедр	60

Таким чином, на підставі геометричних міркувань доведена наступна теорема:

Повний список скінченних підгруп в групі обертань $_{+}SO(3)$ складається з п'яти груп і з точністю до спряження вичерпується групами:

1). C_n – циклічними групами порядку n, елементами яких є повороти на кут $2\pi/n \cdot m, \quad m=1,\ 2 \ \cdots \ n-1$;

2). діедричними групами D_n, які є симетрії правильних n-кутників і містить, окрім інваріантної підгрупи C_n, повороти на куті π навколо осей, які лежать в площині, перпендикулярній осі n-ого порядку і складають між собою кути, кратні $\frac{\pi}{n}$;

3). T – групою власних симетрій тетраедра;

4). $K \cong O$ – групою власних симетрій куба (октаедра);

5). Y – групою власних симетрій ікосаедра (додекаедра).

Пояснення. Ікосаедр – правильний 20-гранник з трикутними гранями, додекаедр – правильний 12-гранник з п'ятикутними гранями.

4. Група тетраедра T, група обертань тетраедра

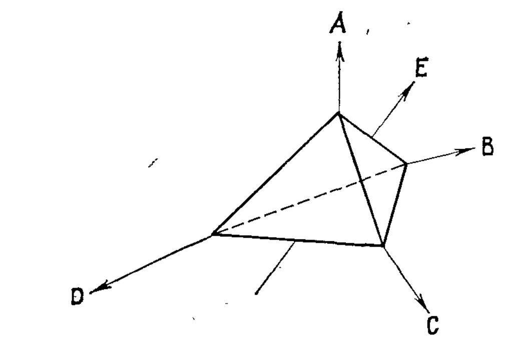


Рис. 3.10 Осі повороту тетраедра

Генераторами групи є $\left\{C_2^{(z)} \quad C_3^{(xyz)}\right\}$. Елементами групи T є обертання на кути $2\pi/3$, $4\pi/3 = -2\pi/3$ навколо чотирьох осей A, B, C, D, що сполучають вершини з центрами протилежних граней (осі 3-го порядку), і обертання на кут π (осі 2-го порядку) навколо кожної з трьох осей, що сполучають середини протилежних ребер (навколо осей E). Тетраедр має 4 грані, 4 вершини, 6 ребер, усі грані однакові, кожна з них є правильним трикутником (рис. 3.10). Таким чином, група T складається з 12 елементів:

$4C_3$ – 4 осі C_3 третього порядку з поворотами на кут $2\pi/3$;

$4C_3^2$ – 4 осі $C_3^2 = C_3^{-1}$ з поворотами на кут $4\pi/3$;

$C_3^3 = E$ – тотожне перетворення;

$3C_2 = 3C_2^{-1}$ – 3 осі другого порядку з поворотами на кут π.

Група розбивається на 4 класи спряжених елементів: $\left(4C_3, 4C_3^2, 3C_2, E\right)$. Для аналізу цієї групи зручно використати перестановки. Перетворення C_3 дає цикл з трьох елементів. Легко переконатися, що $T = D_2 \times C_3$.

5. Група O симетрії куба (октаедра),

або група обертань куба (октаедра)

Генераторами групи є елементи $\left\{C_4^{(z)} C_3^{(xyz)}\right\}$. Це група поворотних осей куба або октаедра (рис.3.11). Октаедр може бути вписаний в куб таким чином, що середини граней куба є вершинами октаедра (рис. 3.12). Їх групи симетрії схожі, ізоморфні. Повна група симетрії O включає усі власні операції, що перетворюють куб в себе. Очевидно, що група поворотних симетрій включає групу T як інваріантну підгрупу, а також додатково повороти навколо осей ox, oy, oz на кути $\pi/2,\ \pi,\ 3\pi/2$, повороти на кут π навколо 6 осей, що проходять через середини протилежних ребер. Група O має наступні елементи:

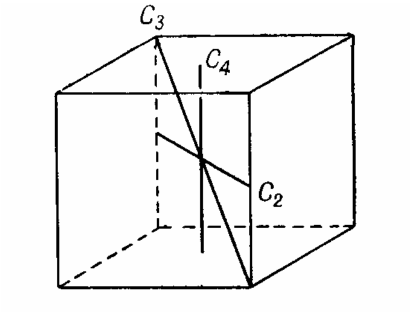


Рис. 3.11 Осі симетрії куба

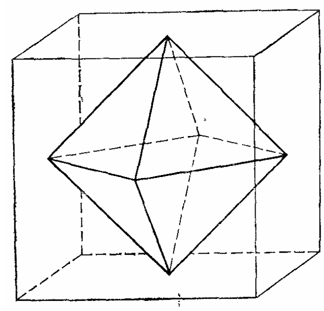


Рис. 3.12 Октаедр, вписаний в куб

осі $3C_4, 3C_4^2, 3C_4^3$, проходять через центри протилежних граней, таких осей три;

осі $4C_3, 4C_3^2$, проходять по просторових діагоналях куба, таких діагоналей чотири і осей теж чотири;

осі $6C_2$, проходять через середини протилежних ребер, таких осей шість;

E – тотожне перетворення.

Таким чином. група має 24 елементи і розбивається на 5 класів спряжених елементів: $\left(E, 3C_4, 3C_4^2,\ 3C_4^3, 4C_3, 6C_2\right)$. Правильний тетраедр вписується в куб і інваріантний відносно обертань з O порядку 2 і 3. При цьому $T \subset O,\ \left|O:T\right| = 2$. Серед стійких молекул приклади симетрії груп T, O не зустрічається.

6. Група Y ікосаедра (додекаедра)

Генераторами групи є елементи $\{C_5, C_3,\ C_2\}$. Група ікосаедра (рис. 3.13, 3.14) не представляє інтерес з точки зору фізики, оскільки у кристалів немає осей 5 порядку і не відомі молекули, що мають таку симетрію.

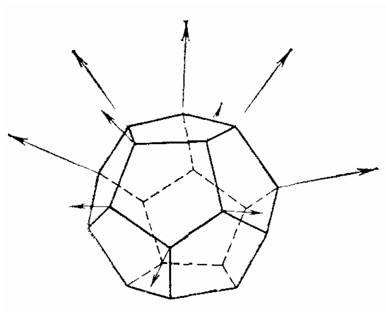


Рис. 3.13 Додекаедр

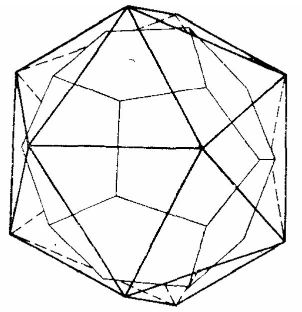


Рис. 3.14 [2] Додекаедр, вписаний в ікосаедр

3.6.2 Групи, що містять невласні перетворення (невласні групи)

Невласні групи утворюються шляхом додавання невласного елементу S_n до описаних вище власних груп. Нехай S – дзеркальний поворот, що входить до числа елементів групи. Добуток S на будь-який поворот є знову дзеркальний поворот. Добуток двох дзеркальних поворотів є поворот. Чисті повороти утворюють підгрупу.

Додавання невласних елементів перетворення має бути зроблене так, щоб не виникало жодного нового власного обертання щоб уникнути подвоєння групи. Згадаємо, що якщо S – дзеркальний поворот, то добуток S на поворот є знову дзеркальний поворот. Добуток $S_n S'_{n'} = S'^{n'}_n$ є поворот $C'^{n'}_n$, $S_n S_n = S_n^2 = C_n^2$. Для вибору S є декілька можливостей. Одна з них в тому, що якщо $S^2 = E$, те звідси маємо два рішення: $S = \sigma$; $S = I$. Якщо ж $S^2 \neq E$, то $S^2 = C_n$. Таким чином, маємо три можливості для дзеркального повороту: $\sigma, I,\ S$, причому $S_n^2 = C_n$.

1. Група C_{nh}. Генератори групи $\{C_n, \sigma_h\}$, причому $C_{nh} = C_n \times C_S$.

Це група, в якій до групи C_n додано відображення в площині, перпендикулярній осі C_n (рис. 3.15). Містить 2n елементів: n поворотів C_n

і n дзеркальних поворотів $C_n^k\sigma_h$. Група абельова, має 2n одновимірних класів. Елементами групи є: осі симетрії C_n, площини σ_h і їх добутки:

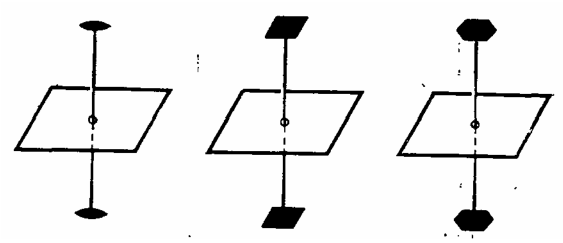


Рис. 3.15 Елементи груп C_{nh}

$$C_n, C_n^2, \cdots C_n^{n-1}, C_n^n =$$
$$= E,\ \sigma_h C_n,\ \sigma_h C_n^2, \cdots \sigma_h C_n^{n-1}, \sigma_h C_n^n = .$$
$$= \sigma_h E = \sigma_h$$

При парному n маємо $C_n^{n/2}\sigma_h = I$ – група містить інверсію. Група C_h $(n=1)$ – група другого порядку, складається з елементів σ_h, E, її позначають C_S. На рисунках 3.16 – 3.19 [13] показані молекули, що мають симетрію C_{nh} при різних n.

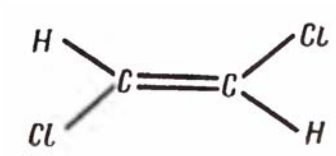


Рис. 3.16 C_{2h}

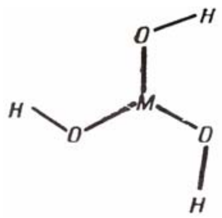


Рис. 3.17 C_{3h}

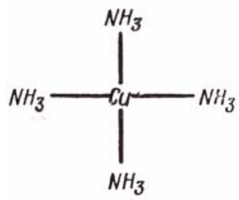


Рис. 3.18 C_{4h}

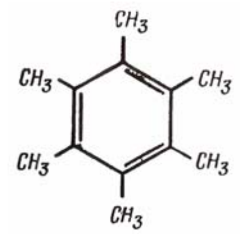


Рис. 3.19 C_{6h}

2. Група C_{nv}. Генератори групи $\{C_n^{(z)}, \sigma_v\}$.

Ці групи утворюються додаванням відображення у вертикальній площині σ_v до групи C_n, при цьому площина проходить через вісь, тобто містить цю вісь, що автоматично веде до появи n вертикальних площин дзеркального відображення (рис. 3.20). При цьому $C_{1h} \cong C_{1v}$. Кут між сусідніми площинами рівний π/n. Група C_{nv} містить 2n елементів, складається з n поворотів і n відображень в площинах σ_v, група не абельова. При парному n, $n = 2m$, група розбивається на $n+3$ класи, при непарному n, $n = 2m+1$, група розбивається на $n+2$ класи. Група C_{nv} ізоморфна групі D_n, $C_{nv} \cong D_n \cong C_n \bigcup \sigma_v C_n$. Приклади молекул з симетрією

C_{nv} показані на рисунку 3.21 [8].

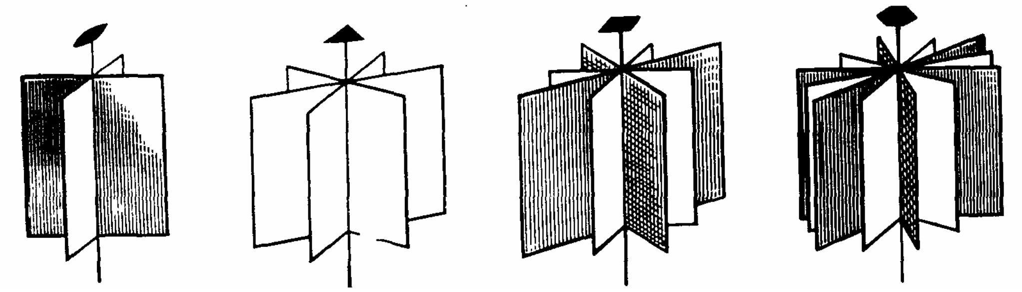
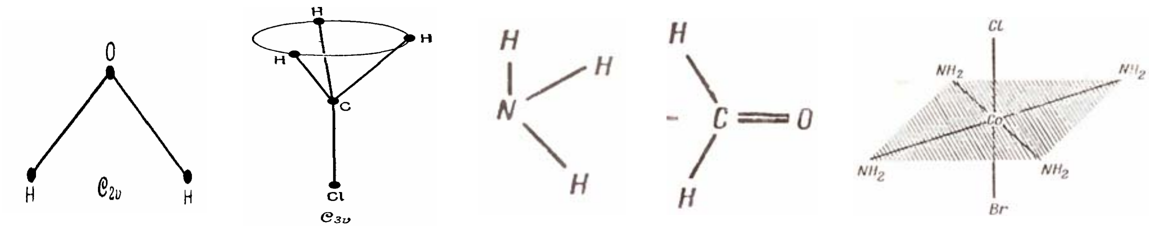


Рис. 3.20 Сукупність елементів симетрії груп C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v} відповідно



C_{3v} C_{3v} C_{3v} C_{2v} C_{4v}

Рис. 3.21 [8] **Молекули, що мають симетрію C_{nv}**

3. Група S_{2n}. Генератори групи $\{S_{2n}\}$.

Це група дзеркальних поворотів, при яких поєднання системи досягається при повороті на кут $2\pi/2n = \pi/n$ з подальшим відображенням в площині σ_h або при проведенні операцій $S_{2n} = C_{2n}\sigma_h = \sigma_h C_{2n}$. Якщо $r = r_z(\pi/n)$ – повороти біля осі z на кут π/n, σ_h – відображення в площині $\sigma_h \perp z$, то $S_{2n} \cong C_{2n} = (2\sigma_h / r\sigma_h)^{2n} = r^{2n} = e$. Група $S_{2n} \bigcap SO(3)$ – циклічна група, породжена парними ступенями r: $S_{2n} = C_n \bigcup r\sigma_h C_n$. Це група симетрії двох правильних n-кутників, що лежать в двох різних паралельних площинах і повернених один відносно одного на кут π/n. Група S_{2n}– циклічна, елементи групи $S_{2n}, S_{2n}^2, \cdots S_{2n}^{2n} = E$; порядок групи дорівнює 2n. Зокрема, $S_2 = \sigma_h C_2 = \sigma_h \sigma_v^{(1)} \sigma_v^{(2)} = I = C_i$ – група інверсії де $\sigma_v^{(1)} \perp \sigma_v^{(2)}$, а лінія їх перетину є вісь C_2. Оскільки $S_2 = C_I$ – група інверсії, то звідси витікає, що інверсія є в групах з непарним $n = 2m + 1$. Очевидно, що $S_{2(2m+1)} = C_{2m+1} \times C_I = C_{2m+1} \times S_2$. Приклади молекул, що мають симетрію S_{2n}, показані на рисунках 3.22–3.23 [8].

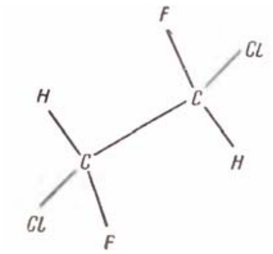


Рис. 3.22 Симетрія $S_2 = C_i$

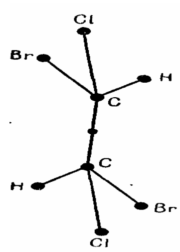


Рис. 3.23 Симетрія $S_2 = C_i$

4. Група D_{nh}. Генератори групи $\{C_n\, C_2'\, \sigma_h\}$

Ця група утворюється додаванням відображення в горизонтальній площині σ_h до груп D_n, в цьому випадку повинні також існувати вертикальні площини відображення, що містять усі n горизонтальних осей

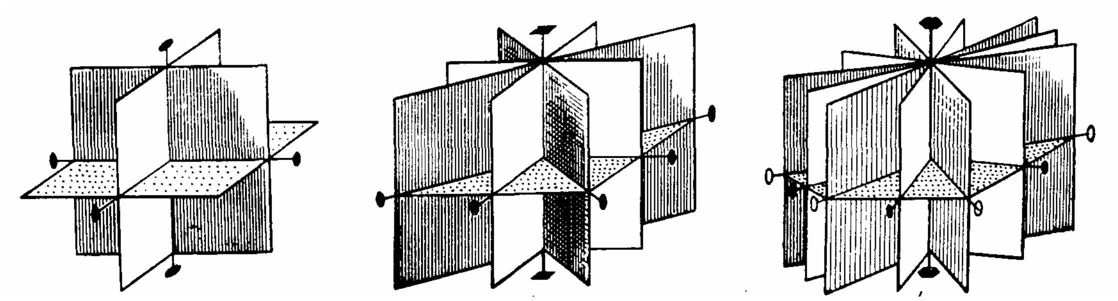


Рис 3.24 Елементи симетрії групи D_{nh}

другого порядку (рис. 3.24, 3.25). Порядок групи 4n: 2n елементів групи D_n і 2n добутків $\sigma_h C_n, \cdots \sigma_h C_n^n = \sigma_h$; $\sigma_h C_2'^{(1)}, \cdots \sigma_h C_2'^{(n)}$, де $C_2'^{(n)}$ – горизонтальні осі 2-го порядку, перпендикулярні C_n. З побудови групи видно, що $D_{nh} = D_n \times C_S$. З побудови групи також виходить, що в ній є одна вісь $C_2' \perp C_n$, а $n-1$ вісь з'являється розмноженням цієї C_2' віссю C_n. Всього в групі n осей 2-го порядку, перпендикулярних C_n. На рисунку 3.26 показані молекули з симетрією D_{nh}. Операція σ_h комутує з усіма елементами групи. Тому можна записати D_{nh} у вигляді прямого добутку $D_{nh} = D_n \times C_S$. При

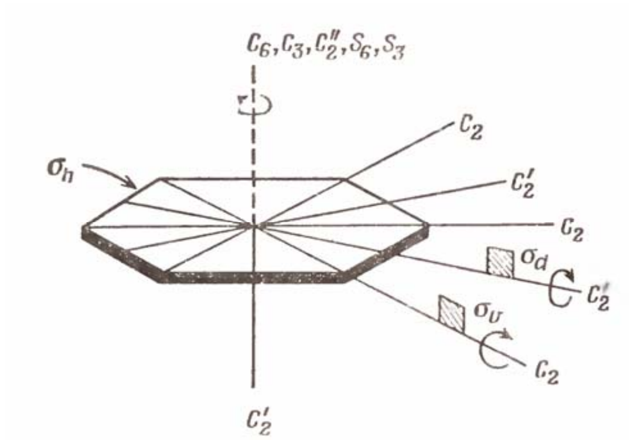


Рис. 3.25 [28] Операції симетрії групи D_{6h}

парному $n = 2p$ група містить інверсію, тому $D_{2p,h} = D_{2p} \times C_i$.

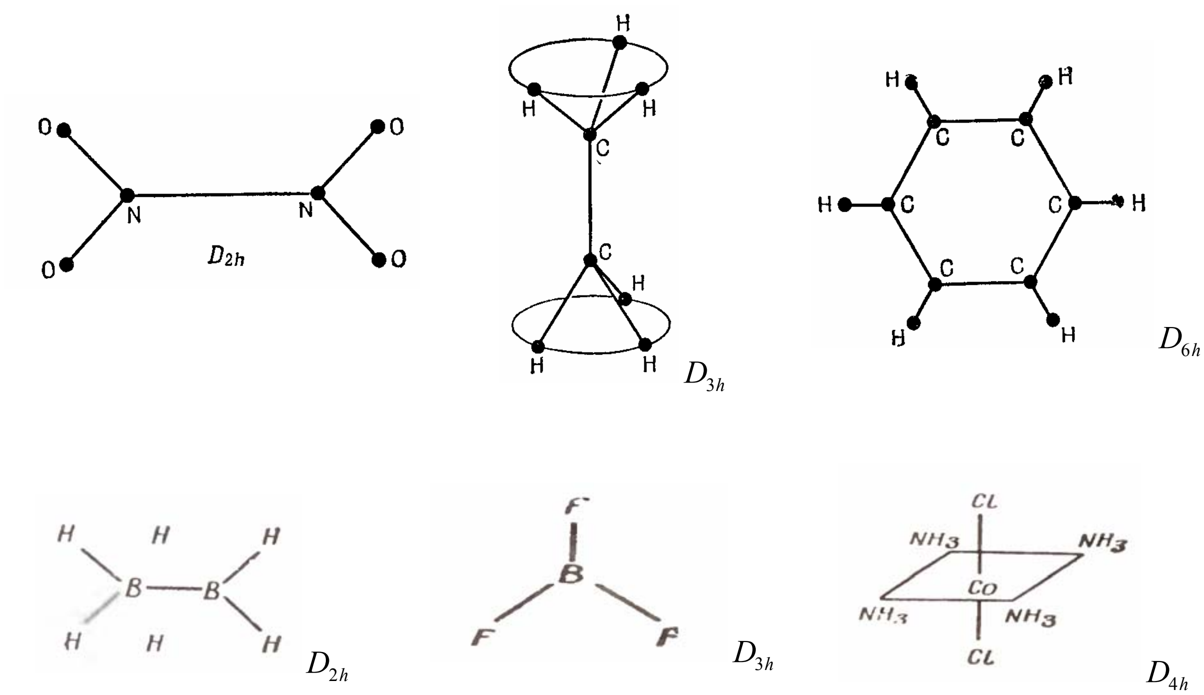


Рис. 3.26 [8] Молекули, що мають різну симетрію D_{nh}

5. Групи D_{nd}. Генератори груп $\{C_n \; C_2'' \; \sigma_d\}$.

Ці групи утворюються додаванням відображення у вертикальній площині σ_v, причому ця площина ділить навпіл кут між двома сусідніми горизонтальними осями другого порядку. Додаткові $(n-1)$ площина цього типу утворюється обертанням на кути $2\pi/n$. Ми маємо n поворотів навколо осі C_n, n осей $C_2' \perp C_n$ і n площин σ_d (рис. 3.27). Група D_{nd} має порядок

4n, її елементи складаються з $S_{2n}, S_{2n}^2 = C_n, \cdots S_{2n}^{2n} = E$ у кількості 2n: n площин σ_d і n осей C_2'. Усі осі C_2' еквівалентні, оскільки поєднуються площинами відображення, еквіваленти і усі σ_d. Площина σ_d переводить дві осі 2-го порядку, що перетинаються, одна в іншу, звідси і позначення площин через σ_d. При парному $n = 2p$ група $D_{2p,d}$ має $2p+3$ класи, при непарному $n = 2p+1$ група містить інверсію, має $2p+4$ класи, і може бути записана як $D_{2p+1,d} = D_{2p+1} \times C_i$, тобто має рівно в 2 рази більше класів групи D_{2p+1}. Нові класи утворюються з класів групи D_{2p+1} множенням на інверсію. Приклад молекули з групою D_{nd} показаний на рисунку 3.28 [8].

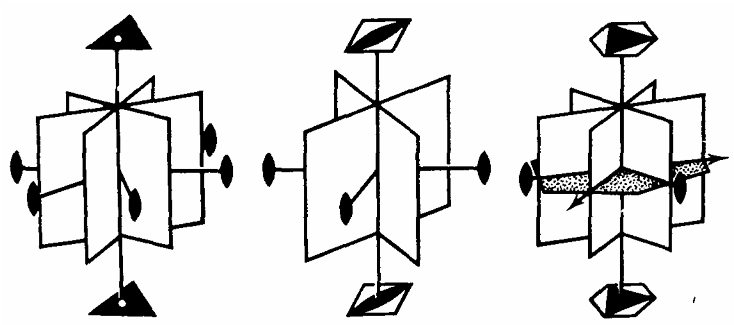


Рис. 3.27 Елементи симетрії групи D_{nd}

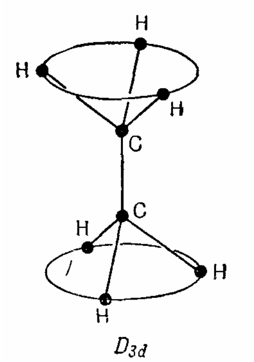


Рис. 3.28 Молекула C_2H_6

6. Групи T_d, T_h

Це повна група симетрії тетраедра. Група T_d утворюється додаванням до групи T площин відображення, що проходять через пари вершин тетраедра, і середину протилежного ребра (рис. 3.29). Існування шести таких площин відображення (оскільки шість ребер), перпендикулярних осям 2-го порядку, означає наявність шести дзеркальних поворотів S_4 навколо цих осей $S_4 = \sigma_h C_4$. Група T_h утворюється додаванням до групи T операції інверсії. Інверсія не є операцією симетрії групи T_d. У групі T_h 24 елементи: 12 елементів групи T і 12 нових елементів: $3S_4, 3S_4^3, 6\sigma_d$.

Очевидно, що

$$T_h = T \times C_i = T \times S_2 .$$

На рисунку 3.30 показана молекула CH_4, що має симетрію T_d.

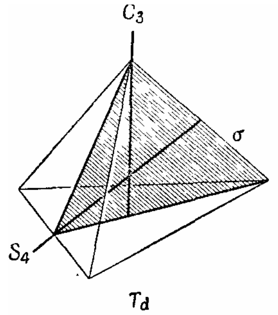


Рис. 3.29 Утворення групи T_d

7. Група O_h. Генератори групи $\{C_4^{(z)}\ C_3\ I\}$.

Група O_h – повна група симетрії октаедра і гранецентрованого куба. Група утворюється додаванням до групи O

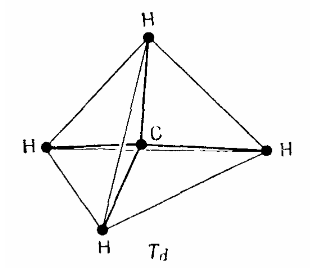


Рис. 3.30 Молекула CH_4

інверсії I (рис 3.31). Її можна представити у виді $O_h = T_d \times C_i$, або $O_h = O \times C_i = O \times S_2$. Група має 48 елементів Площини дзеркального відображення проходять через центр куба паралельно парам протилежних граней (3 площини σ_h) і через центр куба по діагоналях протилежних граней (6 площин σ_d). (рис. 3.31 [28]). Молекула з симетрією O_h показана на рисунку. 3.32 [8].

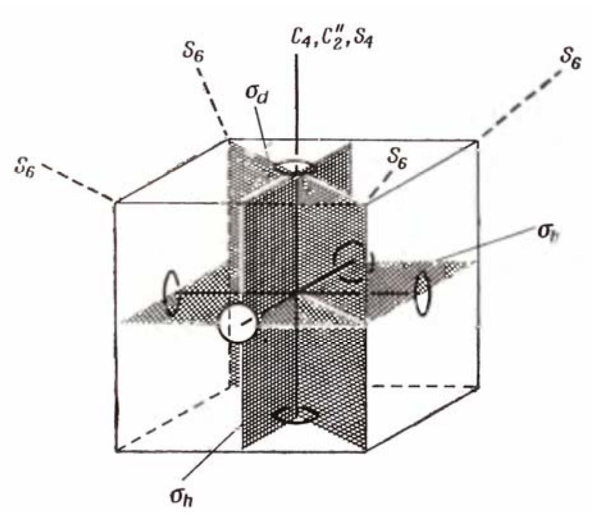


Рис. 3.31 Елементи групи O_h

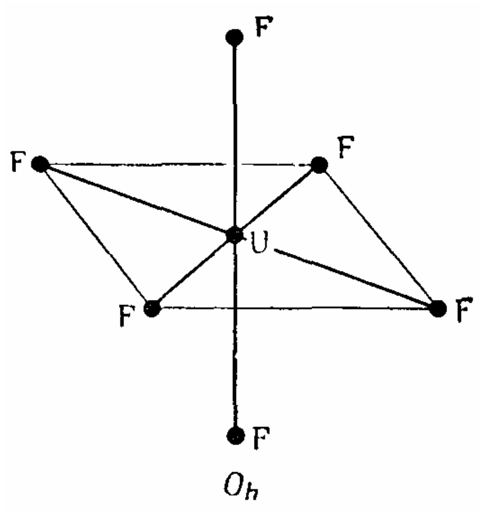


Рис. 3.32 Молекула з симетрією O_h

8. Група Y_h. Генератори групи $\{C_5\ C_3\ C_2\ I\}$

Це група повної симетрії ікосаедра, її можна представити у вигляді прямого добутку $Y_h = Y \times C_i = Y \times S_2$. Група ікосаедра не представляє інтерес з точки зору фізики.

3.7 Граничні точкові групи

Розглянемо точкові групи з осями симетрії нескінченного порядку. Вони описують осьову симетрію і називаються граничними групами або групами Кюрі [49,50]. До таких груп відносяться наступні сім груп: $C_\infty, C_{\infty v}, C_{\infty h}, D_\infty, D_{\infty h}, O_3, \infty/\infty$. Багато груп, що описують властивості кристалів, містять осі нескінченного порядку.

1. Група C_∞ – група симетрії кругового конуса, що рівномірно обертається. Група має тільки одну вісь нескінченного порядку. Група C_∞ є граничною для кристалографічних груп C_n при $n \to \infty$. Конус може обертатися як в право, так і вліво (рис. 3.33а)

2. Група $C_{\infty v}$ – група симетрії кругового конуса, що знаходиться в стані спокою. Група отримана додаванням до елементів групи C_∞ вертикальних площин симетрії. Деякі полярні вектори мають симетрію нерухомого конуса. Така симетрія, наприклад, вектора напруженості однорідного електричного поля, вектора прискорення вільного падіння [47]. У групі міститься вісь симетрії нескінченного порядку і нескінченне число подовжніх площин симетрії (рис. 3.33б)

3. Група $C_{\infty h}$ – група симетрії циліндра, що обертається. Група містить вісь симетрії нескінченного порядку, поперечну площину симетрії і центр симетрії (інверсію). Очевидно $C_{\infty h} = R_2 \times S_2$. Симетрію цієї групи має поле постійного магніту, вектор напруженості якого **H** є аксіальним вектором [47]. Це група симетрії аксіальних векторів (рис. 3.33 в).

4. Група $D_{\infty h}$ – група симетрії циліндра в стані спокою. До елементів симетрії цієї групи відносять вісь симетрії нескінченного порядку, одну поперечну і нескінченну безліч подовжніх площин симетрії, нескінченну множину поперечних осей 2-го порядку і інверсію. Очевидно $D_{\infty h} = C_{\infty h} \times S_2$. Така симетрія присутня в однорідній полі стискуючої або розтяжної механічної напруги (рис. 3.33д).

5. Група D_{∞} – група симетрії закрученого циліндра. Група містить вісь симетрії нескінченного порядку і нескінченне число поперечних осей 2-го порядку. Така група симетрії характерна для обертання площини поляризації в анізотропному середовищі (рис. 3.33г).

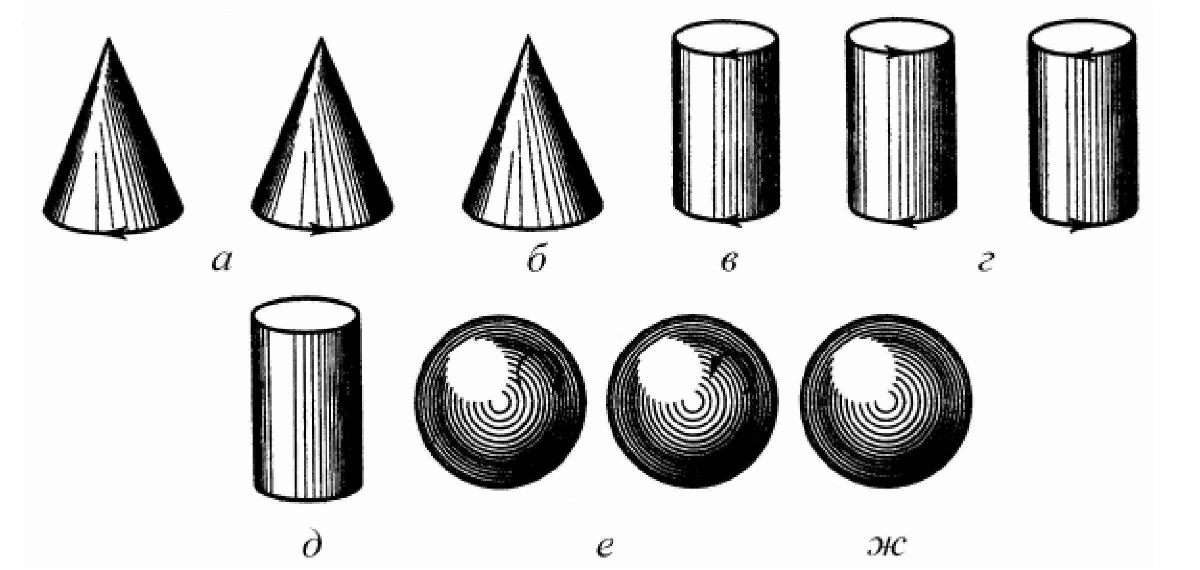


Рис. 3.33 [17, 24, 49, 50] Граничні групи симетрії по Кюрі: а – правий і лівий конус, що обертається; б – нерухомий конус; в – циліндр, що обертається; г – правий і лівий закручений циліндр; д – нерухомий циліндр; е – права і ліва закручена куля; ж – звичайна куля.

6. Група O_3 – повна група симетрії нерухомої кулі. Вона містить нескінченну множину площин симетрії і центр симетрії (інверсію). Ця симетрія описує всебічне гідростатичне стискування і однорідний нагрів [46]. Ця група містить усі точкові операції в тривимірному просторі, або усі рухи, відносно яких інваріантна сфера або однорідна куля, її називають повною ортогональною групою (рис. 3.33ж).

7. Група ∞/∞ – група симетрії своєрідної кулі, у якої усі діаметри закручені за правилом правого або лівого гвинта. Група містить нескінченну множину осей нескінченного порядку без площин симетрії і інверсії. Така симетрія площини поляризації в ізотропному середовищі. Оскільки група містить тільки поворотні осі, її іноді називають групою обертання (рис. 3.33 е).

3.8 Категорії симетрії і точкові групи

Точкові групи молекулярної симетрії можна умовно розбити на три категорії по порядку n осей, що входять в ці групи: нижчої, середньої і вищої.

Нижча категорія симетрії

Це сім точкових груп: $C_2,\ C_S,\ C_i,\ C_{2h},\ C_{2v},\ D_2,\ D_{2h}$. Групи $C_2,\ C_S,\ C_i$ складаються з елементів другого порядку: $C_2,\ \sigma,\ i$. Оскільки будь-яка з цих операцій служить для себе зворотним елементом, тобто $C_2^2 = \sigma^2 = i^2 = e$, то ці групи абельові і кожний клас спряжених елементів у будь-якій з них складається з однієї операції симетрії. Групи порядком вище двох є прямими добутками:

$$C_{2h} = C_2 \times C_i;\ D_2 = C_2 \times C_2';\ C_{2v} = C_2 \times C_S\ ,\ D_{2h} = D_2 \times C_S\ \ .$$

Групи $C_{2h},\ C_{2v},\ D_2$ порядку 4 ізоморфні одна одній і групі Клейна V (D_2).

Середня категорія симетрії

Об'єднує нескінченне число точкових груп з однією головною поворотною або дзеркально-поворотною віссю порядку вище другого. Їх можна розбити на 7 сімейств: $C_n,\ S_n,\ C_{nh},\ C_{nv},\ D_n,\ D_{nh},\ D_{nd}$, де n – порядок головної осі групи. Серед елементів найбільш високого порядку в реальних структурах відмітимо поворотні осі в квазікристалах, також дзеркально-поворотну вісь S_{12} в молекулі $(C_8H_8)_2Cl$

Вища категорія симетрії

Утворюється семи скінченими точковими групами: $T,\ T_h,\ T_d\ \ O,\ O_h,\ Y,\ Y_h$. У кожній з них є більше ніж одна вісь симетрії порядку 3 і вище, що перетинаються в нерухомій точці простору, інваріантної відносно усіх операцій групи. Серед стійких молекул групи обертань $T,\ O,\ Y$ не зустрічається, групи $T_h,\ Y_h$ зустрічаються відносно рідко, групи $T_d,\ O_h$ дуже поширені.

Приклад

Операції симетрії, які породжують яку-небудь групу, називаються генераторами цієї групи, Будь-який елемент скінченної групи є добутком її генераторів. Циклічні групи – групи з одним генератором. Вибір генераторів неоднозначний. Розглянемо на прикладі групи D_{3d} побудову елементів симетрії групи з трьох її генераторів $\{C_3,\ C_2',\ \sigma_d\}$. Першим генератором є елемент, що породжує циклічну підгрупу $(E,\ C_3,\ C_3^2)$. Другий генератор – це C_2' – вісь 2-го порядку, перпендикулярна осі C_3. Його правий суміжний клас (множина елементів виду gC_2' для елементів g підгрупи C_3) складається з 3 осей, кожна з яких повернена на кут 60° по відношенню до іншої. Це дає розширену групу $D_3 = (E,\ \ 2C_3,\ \ 3C_2')$. Останній генератор – σ_d. Його суміжний клас складається з добутку циклічної підгрупи C_3 і σ_d. Це призводить до трьох площин σ_d, розташованих під кутом 60° одна відносно іншої і появі операцій $\sigma_d C_2'$. Послідовне застосування операцій C_2' і σ_d повертає об'єкт на кут 60° проти годинникової стрілки і відбиває його в горизонтальній площині (операція $S_6,\ S_6^3 = S_2 = i$) і S_6^5. В результаті для групи D_{3d} отримуємо елементи

$\left(E,\ \ 2C_3,\ \ 3C_2',\ \ 3\sigma_d,\ \ I,\ \ 2S_6\right).$

Позначення точкових груп по Шенфлісу і міжнародні (по Герману-Могену) дані в таблицях 3.2 і 3.3 [9].

Таблиця 3.2 Позначення Шенфлісу і міжнародні для елементів точкових груп

Позначення		**Елементи симетрії, перетворення симетрії**
Шенфлісу	**Міжнародні (Германа-Могена)**	
E	1	Тотожне перетворення
C_n	n	Вісь симетрії n- то порядку, поворот на кут $2\pi/n$
$C_2',\ u_2$	2	Поворот на π навколо осі $C_2' \perp C_n$, головної осі C_n
σ_h	$1/m$	Дзеркальне відображення відносно площини $\perp C_n$
$\sigma_v,\ \sigma_d$	m	Дзеркальне відображення відносно площини, що містить C_n і що ділить навпіл кут між двома осями $C_2' \perp C_n$
S_p	$n/m = \bar{n}$	Дзеркально-поворотні осі порядку $p = 2n$, $\bar{n}$ при n непарному, $\bar{p}$ при n парному
$I = S_2$	$\bar{2}$	Інверсія відносно початку координат (центру симетрії)

Таблиця 3.3 Приклади позначення деяких груп і їх генераторів.

Позначення Шенфлісу групи і її генератора	**Приклад**	**Позначення міжнародні Германа-Могена**	**Приклад**	**Примітка**
$C_n \ \{C_n\}$	C_5	n	5	
$S_p \ \{S_h\}$	S_4 S_6	$\bar{n}$ або $\bar{p}$	$\bar{4}$ $\bar{3}$	$\bar{n}$ при n непарнім $\bar{p}$ при p парнім
$C_{nh} \ \{C_n \ \sigma_h\}$	C_{5h}	n/m	$5/m$	
$C_{nv} \ \{C_n \ \sigma_v\}$	C_{3v}	nm	$3m$	$C_2 \to mm, \ 2mm$
$D_n \ \{C_n, \ C_2'\}$	D_4	n_2	4_2	
$D_{nd} \ \{C_n \ C_2' \ \sigma_d\}$	D_{3d}	$\bar{p}2m$	$\bar{3}2m$	$\bar{p}$ – невласна. ось
$D_{nh} \ \{C_n \ C_2' \ \sigma_h\}$	D_{6h}	$n/m2/m2/m$	$6/m2/m2/m$	$D_{6h} = 6/mmm$

Питання для самоконтролю

1. Що таке група ортогональних перетворень і які властивості вона має? Чому ортогональні перетворення створюють групу? Які значення може мати матриця ортогональних перетворень і чому?

2. Які значення мають матриці власних і невласних перетворень?

3. Сформулюйте ієрархію лінійних груп перетворень лінійного простору. Яке місце у цієї ієрархії займають точкові групи?

4. Чи є точкові групи скінченними групами перетворень простору? В якому просторі (мається на увазі розмірність простору) діють ці групи? Чому групи перетворень називають точковими? До яких фізичних систем можуть бути застосовані точкові групи?

5. В якому сенсі розуміють симетричну дію точкових груп?

6. Чому ортогональні (унітарні) перетворення не змінюють метрику простору?

7. Які типи перетворень використовують у точкових групах? Як відрізняються елементи симетрії та операції симетрії? Поворот на деякий кут – це елемент симетрії чи операція симетрії?

8. Які співвідношення існують між основними операціями симетрії точкових груп? Що таке інверсія і дзеркально-поворотна вісь?

9. Сформулюйте коротко принципи виведення точкових груп. Як треба додавати елементи, які складають точкові групи, щоб група була кінцевою?

10. З яких елементів складаються групи точкових власних перетворень і групи невласних перетворень? Сформулюйте принципи розбиття точкових груп за класами спряжених елементів.

11. Що таке генератори груп? З яких елементів створюються групи власних точкових перетворень? За яким принципом будуються ці групи?

12. Що таке група діедрів? Симетрію яких опуклих фігур описують ці групи? Які елементи симетрії має група тетраедра? Які перетворення симетрії містить ця група? Чи відрізняються групи симетрії куба і октаедра? Якщо ні, то чому?

13. Який порядок має група Y? Які елементи симетрії додають до груп власних перетворень при будові груп другого роду? Що таке вертикальні і діагональні площині симетрії? У яких групах вони містяться? Яку симетричне перетворення вони здійснюють?

14. Чому група дзеркальних поворотів є абельова? Які групи точкових перетворень відносяться до абельових груп? Які з них є циклічними?

15. Чим відрізняються групи T_d, T_h?

16. Що таке граничні точкові групи? Де вони застосовуються у фізиці?

17. За яким принципом точкові групи розбивають на категорії?

Розділ IV

Симетрія в квантовій механіці

4.1 Огляд основних понять

Поведінка квантово-механічної системи з n ступенями свободи описується набором координат $(r_1, r_2 \cdots r_n) = \mathbf{r}$ і повністю визначається її хвильовою функцією або вектором стану $\psi(\mathbf{r}, t)$. Для будь-якої пари $(\mathbf{r}, t)$ хвильова функція набуває в загальному випадку деяких комплексних значень. Дійсна величина $|\psi(\mathbf{r},t)|^2 dv$ інтерпретується як вірогідність того, що у момент часу t координата системи має значення, що лежить усередині елементу об'єму dv поблизу точки **r**. Хвильова функція нормується так, щоб повна вірогідність знаходження системи в якому-небудь положенні дорівнювала одиниці:

$$\int_v |\psi(\mathbf{r},t)|^2 dv = 1,$$

де інтеграл береться по всіх значеннях координат. Самі хвильові функції знаходять з рішення рівняння Шредінгера:

$$H(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = E\psi(\mathbf{r}, t) \qquad (4.1)$$

У багатьох важливих обчисленнях використовують стаціонарний гамільтоніан і стаціонарне рівняння Шредінгера виду:

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (4.2)$$

Рішення стаціонарного рівняння Шредінгера дає стаціонарні стани. Власні значення E інтерпретуються як енергія системи в стаціонарному стані. Сукупність усіх безперервних функцій, що задовольняють накладеним на рівняння Шредінгера граничним умовам, утворюють функціональний простір – Гільбертовий простір. Гільбертовий простір належить до категорії нескінченновимірних повних просторів Евкліда. Скалярний добуток в цьому просторі визначається як

$$(\varphi,\psi) = \int_v \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})dv \tag{4.3}$$

причому

$$\int_v \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})dv = 1 \tag{4.4}$$

по всіх можливих значеннях координат **r**. Щоб енергія E в такому визначенні скалярного добутку була дійсною величиною, гамільтоніан має бути ермітовим оператором. Набір власних функцій $\psi_E(\mathbf{r})$ при цьому визначенні скалярного добутку є ортогональним і служить базисом, а функції $\psi_E(\mathbf{r})$ нормовані на одиницю.

4.2 Група симетрії рівняння Шредінгера

Розглянемо дію групи G перетворень координат виду $G_a\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Задамо перетворення функцій координат, «індукованого» перетворенням аргументів цієї функції, тобто розглянемо перетворення, що індукують перетворення в просторі функцій $\psi(\mathbf{r})$, які застосовані до **r**. Таке перетворення позначимо як $T(G_a)$, воно визначається співвідношенням:

$$T(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) \tag{4.5}$$

Як встановлено вище в розділі 2, тут ми також маємо справу з двома векторними просторами: простором функцій $\psi(\mathbf{r})$, в якому визначено індуковане перетворення, і простором координат векторів **r**, в якому визначено перетворення G_a. Для того, щоб перетворена функція $\psi'(\mathbf{r}) = T(G_a)\psi(\mathbf{r})$ співпадала сама з собою (була інваріантною відносно перетворень G_a), необхідно, щоб значення функції після перетворення $\psi'(\mathbf{r})$ співпало зі значенням до перетворення в тій же точці, тобто в точці $G_a^{-1}\mathbf{r}$ після перетворення системи відносно початку координат.

Нехай квантово-механічна система описується рівнянням Шредінгера виду :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}) \qquad (4.6)$$

Розглянемо ортогональні перетворення координат хвильової функції, що належать групі G. Нехай перетворення $G_a \in G$ з групи G не змінює виду рівняння Шредінгера, тобто рівняння Шредінгера інваріантне відносно перетворення $G_a \in G$. Якщо це виконується, то підстановка $\psi'(\mathbf{r})=T(G_a)\psi(\mathbf{r})=\psi(G_a^{-1}\mathbf{r})$ повинна зберегти попередній вид рівняння. Очевидно, що це виконуватиметься, якщо така підстановка не змінить вид гамільтоніану $H(\mathbf{r})$. Оскільки оператор Лапласа, що входить в гамільтоніан, інваріантний відносно будь-яких ортогональних перетворень, то в результаті підстановки отримуємо:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}'}+V(G_a^{-1}\mathbf{r})\right]\psi(G_a^{-1}\mathbf{r})=E\psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) \qquad (4.7)$$

Умова інваріантності гамільтоніану зводиться до того, що повинно виконуватися співвідношення:

$$V(G_a^{-1}\mathbf{r})=V(\mathbf{r})$$

У більшості випадків, якщо елементами $G_a \in G$ групи є ортогональні перетворення координат, $V(G_a^{-1}\mathbf{r})=V(\mathbf{r})$, тобто потенціальна енергія інваріантна відносно будь-якого перетворення $G_a \in G$:

$$T(G_a)V(\mathbf{r})=V(G_a^{-1}\mathbf{r})=V(\mathbf{r}),$$

якщо дія групи G перетворень координат задана у виді $G_a\mathbf{r}=\mathbf{r}'$. На мові операторів це означає, що оператори $T(G_a)$, $\hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r})$ комутують:

$$T(G_a)\hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = T(G_a)V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = V(G_a^{-1}\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})T(G_a)\psi(\mathbf{r})$$

або

$$\left[T(G_a)\hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r}) - \hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r})\mathrm{T}(G_a)\right] = 0$$

Враховуючи інваріантність оператора Лапласа ортогональним перетворенням $G_a \in G$, звідси випливає, що оператори $T(G_a)$ і оператор Гамільтона Н ($\mathbf{r}$) є перестановочними, тобто комутують:

$$T(G_a)\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r})T(G_a)$$

або $T(G_a)H(\mathbf{r}) = H(G_a^{-1}\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})$. Оператори перетворення, що комутують з гамільтоніаном системи, називають операторами симетрії гамільтоніана. Група операторів симетрії гамільтоніана утворює групу симетрії рівняння Шредінгера. Будь-яка підгрупа групи симетрії гамільтоніана сама є групою симетрії цього рівняння. Будь-яка перетворена хвильова функція

$$\psi'(\mathbf{r}) = T(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r})$$

також є власною функцією рівняння Шредінгера з тими ж власними значеннями. Отже, перетворення координат хвильової функції можна представити як дію оператора $T(G_a)$ на хвильову функцію.

Доведемо, що повний набір ортонормованих власних хвильових функцій, що відповідають власному значенню Е, утворюють базис представлення групи ортогональних перетворень. Перетворену власну хвильову функцію можна представити як лінійну комбінацію функцій цього рівня. Насправді

$$T(G_a)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \sum_j T_{ji}(G_a)\psi_j(\mathbf{r})$$

Перетворені функції також мають бути ортонормованими, оскільки заміна за допомогою ортогонального перетворення $\mathbf{r} = G_a^{-1}\mathbf{r}'$ зберігає умову ортонормування (4.3, 4.4):

$$\int \psi_i^*(G_a^{-1}\mathbf{r})\psi_j(G_a^{-1}\mathbf{r})dv = \int \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r})dv = \delta_{ij} \tag{4.8}$$

Звідси випливає, що матриця $\left\| T_{ji}(G_a) \right\|$ має бути унітарною. Таким чином, кожному перетворенню $G_a \in G$ з групи симетрії рівняння Шредінгера ставляться у відповідність унітарні матриці k-того порядку, і вони утворюють представлення групи:

$$T(G_aG_b) = T(G_a)T(G_b)$$

Доведемо це. Розглянемо власні функції операторів

$$H\psi_k(\mathbf{r}) = E\psi_k(\mathbf{r})$$

Нехай даному власному значенню E відповідає n лінійно незалежних власних хвильових функцій $\psi_k(\mathbf{r})$. Якщо оператор Гамільтона H інваріантний відносно перетворення симетрії G_a, то

$$\begin{aligned} T(G_a)\left(H\psi_k(\mathbf{r})\right) = T(G_a)HT^{-1}(G_a)T(G_a)\psi_k(\mathbf{r}) = \\ = H\left(T(G_a)\psi_k(\mathbf{r})\right) = ET(G_a)\psi_k(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{4.9}$$

і $T(G_a)\psi_k(\mathbf{r})$ теж є власна функція, що належить тому ж самому власному значенню E. Іншими словами, якщо відомо одне рішення рівняння Шредінгера $\psi_k(\mathbf{r})$, то відомо ще ($\operatorname{ord} G - 1$) інших рішень цього рівняння для кожного $\psi_k(\mathbf{r})$. Всі ці рішення належать одному і тому ж значенню енергії E. Але тоді $T(G_a)\psi_k(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді лінійної комбінації

$$T(G_a)\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{n} T_{jk}(G_a)\psi_j(\mathbf{r}) \tag{4.10}$$

Виконуючи це для усіх операторів з групи симетрії H, тобто групи симетрії рівняння Шредінгера, ми отримуємо n-мірне представлення $T_{jk}(G_a)$. Якщо G_b – інше перетворення, що належить тій же групі, що і G_a, тобто $G_b \in G$, то по аналогії з (4.10)

$$T(G_b)\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{n} T_{jk}(G_b)\psi_j(\mathbf{r})$$

і тому

$$T(G_b)T(G_a)\psi_k(\mathbf{r}) = T(G_b)\sum_j T_{jk}(G_a)\psi_j(\mathbf{r}) = \sum_j T_{jk}(G_a)T(G_b)\psi_j(\mathbf{r}) =$$
$$= \sum_j T_{jk}(G_a)\sum_l T_{lj}(G_b)\psi_l(\mathbf{r}) = \sum_l T_{lj}(G_b)T_{jk}(G_a)\psi_l(\mathbf{r}) = \sum_l T_{lk}(G_bG_a)\psi_l(\mathbf{r})$$

Звідси випливає, що перетворенню симетрії G_bG_a відповідає матриця $T(G_bG_a) = T(G_b)T(G_a)$. Власні функції кожного виродженого рівня утворюють базис деякого представлення групи симетрії. Отже, якщо можна охарактеризувати можливі представлення групи симетрії, то ми можемо класифікувати і власні функції.

Встановлені умови: 1) інваріантності гамільтоніану відносно перетворень $T(G_a)$ з групи G; 2) комутації операторів $H(\mathbf{r})T(G_a) = T(G_a)H(\mathbf{r})$ для $\forall\,\psi(\mathbf{r})$; 3) розкладання за $\psi(\mathbf{r})$ для будь-якої власної функції і будь-якої функції, що є розкладанням за власними функціями, означають, що власний простір оператора Гамільтона, який містить усі власні функції рівня Е, співпадає з інваріантним підпростором операторів будь-якої групи симетрії рівняння Шредінгера. Тому власний простір оператора Гамільтона буде простором якогось представлення групи симетрії, і кожному власному виродженому значенню енергії Е системи можна поставити у відповідність деяке представлення групи та встановити можливі типи симетрії хвильових функцій, не вирішуючи рівняння Шредінгера. Розмірність простору представлення рівне виродженню відповідного власного значення. Власні функції $\psi_j(\mathbf{r})$ гамільтоніана можуть утворити базис представлення $T(G_a)$ групи симетрії, при цьому унітарність представлення забезпечує ортонормованість власних функцій $\psi_j(\mathbf{r})$. Отже, якщо $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$, то

$$T(G_a)H\psi(\mathbf{r}) = HT(G_a)\psi(\mathbf{r}) = ET(G_a)\psi(\mathbf{r}) = T(G_a)E\psi(\mathbf{r}) \qquad (4.11)$$

і функція $T(G_a)\psi(\mathbf{r})$ також є рішенням рівняння Шредінгера з тим же власним значенням Е.

4.3 Класифікація стаціонарних станів квантових систем

При класифікації станів квантово-механічних систем може видатися два випадки.

1. Енергетичний рівень Е не вироджений, тоді

$$T(G_a)\psi(\mathbf{r}) = c\psi(\mathbf{r}) \qquad (4.12)$$

де з вимог нормування $|c|^2 = 1$.

2. Рівень Е є S- кратне вироджений, тобто є S незалежних хвильових функцій $\psi_j(\mathbf{r})$. Оскільки функція $T(G_a)\psi(\mathbf{r})$ також є рішення цього рівняння з таким же Е, вона може бути виражена у вигляді лінійної комбінації S незалежних функцій $\psi_j(\mathbf{r})$:

$$T(G_a)\psi_j(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{S} T_{kj}(G_a)\psi_k(\mathbf{r})$$

для $\forall G_a \in G$. Отже, система власних функцій породжує S-мірне представлення групи G для цього Е.

Таким чином з властивостей симетрії рівняння Шредінгера відносно перетворень з групи G виходить, що хвильові функції, що належать до одного рівня енергії перетворюються за незвідними представленнями групи симетрії цього рівняння. Оператори, що комутують з гамільтоніаном, утворюють групу симетрії рівняння Шредінгера $G(H)$. Проте в загальному випадку для сукупності енергетичних рівнів це представлення є звідним і може бути розбите на незвідні частини за числом рівнів енергії. Хвильові функції при цьому розбиваються на незвідні набори для кожного рівня енергії. Усі хвильові функції, що відносяться до одного набору, належать одному рівню енергії. Матриця гамільтоніану при такому виборі базису набуває вигляду:

$$G(H)=\begin{pmatrix} \|H_1\| & & & & \\ & \|H_2\| & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \|H_k\| \end{pmatrix} \tag{4.13}$$

де $\|H_S\|$, $S=1\cdots k$ – ненульові квадратні блоки, розміри яких відповідають розмірності S_α незвідного представлення $\Gamma^{(\alpha)}$. Незвідних представлень стільки, скільки рівнів енергій квантової системи $\Gamma(G)=\sum_{\alpha=1}^{k}{}^{\oplus}\,\Gamma^{(\alpha)}$. Для різних представлень $\int\psi_\alpha^* H\psi_\beta dv=0$, тобто базисні функції кожного незвідного представлення ортонормовані.

Слідство 1. Власні функції $\psi_j(\mathbf{r})$ і власні значення Е можна класифікувати за незвідними представленнями $\Gamma^{(\alpha)}(G)$ групи G гамільтоніана і позначати $\psi_j^{(\alpha)}$ і $E^{(\alpha)}$.

Слідство 2. Кожен енергетичний рівень має бути принаймні S_α вироджений, де S_α – розмірність представлення (розмірність блоку $\|H_S\|$), тобто розмірність кожного $\Gamma^{(\alpha)}$.

Таким чином, хвильові функції, що належать одному рівню енергії, перетворюються по представленням групи симетрії рівняння Шредінгера. У загальному випадку це представлення є звідним і може бути розбите не незвідні частини. Хвильові функції при цьому розбиваються на звідні набори. При цьому усі хвилеві функції, що відносяться до одного набору,

$\psi_j^{(\alpha)}$, тобто до одного незвідного представлення, належать одному рівню енергії. Можливий збіг значень енергій для різних наборів, не обумовлене симетрією рівняння Шредінгера, називається випадковим виродженням. Наприклад, у разі системи часток, поміщених в магнітне поле, два рівні енергії, що відповідають різним незвідним представленням, при деякому значенні магнітного поля можуть співпадати. Отже, при цьому значенні магнітного поля має місце випадкове виродження. Таким чином, це виродження, обумовлене не симетрією, а величиною поля $V(\mathbf{r})$. Змінюючи величину поля будь-яким способом, можна виродження зняти. Виродження, обумовлене симетрією фізичної системи, називається істотним або природним. Істотне виродження зміною величини поля зняте бути не може. Воно може бути зняте зміною симетрії поля $V(\mathbf{r})$. Випадкове виродження виникає також внаслідок наближеного рішення задачі.

Таблиця 4.1 Відповідності теорії груп і квантової механіки

Абстрактна група	**Група симетрії гамільтоніана**
Елемент групи	Перетворення симетрії гамільтоніана
Незвідні представлення (НП)	Рівні енергії
Вектори НП	Власні вектори, які належать одному и тому же рівню енергії
Розмірність НП	Кратність виродження рівня

Отже, якщо наявність природного виродження відповідає точному рішенню рівняння Шредінгера і обумовлена симетрією його групи перетворення, оператор якої комутує з гамільтоніаном, то, не вирішуючи рівняння Шредінгера, можна відразу визначити можливі кратності виродження енергетичних рівнів і закони перетворення хвильових функцій при операціях групи симетрії системи. Між поняттями теорії груп і квантової механіки встановлені відповідності, представлені в таблиці 4.1 [9] (див. табл. 4.1).

Розглянемо конкретні приклади, в яких можна вважати, що рух часток відбувається в полі з потенціалом $V(\mathbf{r})$.

1. Молекула води H_2O (рис. 3.21). Рівноважна конфігурація ядер молекули води має симетрію точкової групи C_{2v}. Рівні енергії молекулярних електронів при рівноважній конфігурації ядер класифікується за звідними представленнями групи C_{2v}. Група C_{2v} – це група, в якій до осі другого порядку C_2 додана вертикальна площина симетрії σ_v, в який розташована ця вісь. Група C_{2v} – абельова група, усі її незвідні представлення одновимірні. Звідси робимо висновок, що в системі не може бути вироджених рівнів, якщо немає випадкового виродження. Число класів групи – чотири, вона має чотири одновимірні незвідні представлення. Хвильові функції можуть бути розбиті на 4 симетричні типи, відповідно до таблиці характерів.

2. Молекули NH_3, CH_3Cl (рис. 3.21). Обидві молекули мають точкову симетрію C_{3v}. У них можливі два типи не вироджених станів і один тип двократно вироджений, оскільки група симетрії цих молекул має 2 одновимірних незвідних представлення і одно 2-мірне відповідно до таблиці характерів.

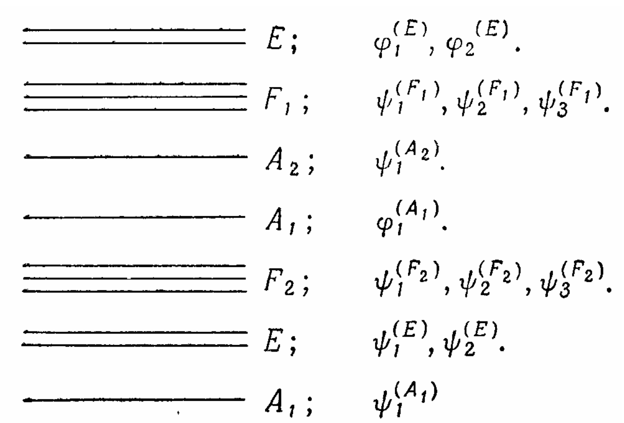


Рис. 4.1 Набір енергетичних рівнів і хвильових функцій квантовомеханічної системи, що має симетрію О

3. Для системи, що має групу симетрії О, відповідно до таблиці характерів маємо набір рівнів і хвильових функцій показаний на рис. 4.1 [8]. З того, що вони зображені у вигляді рівнів з різними енергіями, випливає, що функції $\psi_1^{(A_1)}$ і $\varphi_1^{(A_1)}$ лінійно незалежні. Якби ці функ-

ції були лінійно залеж ні, їм повинна була б відповідати одна і та ж енергія. Аналогічно для двох рівнів, позначених буквою Е, функції $\psi_1^{(E)}$ і $\psi_2^{(E)}$ є партнерами, що перетворюються за представленням Е і що відповідає одній і тій же енергії. Функції $\varphi_1^{(e)}$, $\varphi_2^{(E)}$ також є партнерами, але функції φ і ψ не пов'язані між собою ніякою лінійною залежністю.

4. Для системи, що володіє симетрією D_3. Потенціал $V(\mathbf{r})$ інваріантний відносно поворотів навколо осі Z, через яку проходить вісь C_3 і поворот навколо осей C_2 в площині (x, y). Група D_3 має два одновимірні представлення, і одно 2-вимірне. Отже, власні стани або не вироджені, або двічі вироджені.

4.4 Порушення симетрії при збуренні

Хвильові функції в стаціонарному стані задовольняють хвильовому рівнянню Шредінгера виду (4.2):

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{4.14}$$

де Е – енергія системи, власні значення гамільтоніана. Стаціонарне рівняння Шредінгера може бути вирішене точно тільки в деяких випадках. Одним з важливих методів наближеного рішення цього рівняння є метод теорії збурення. Його застосування можливе в тих випадках, коли оператор Гамільтона вдається представити у виді

$$H = H_0 + V \tag{4.15}$$

де H_0 – не збурений гамільтоніан, а V – оператор збурення. При цьому збурений гамільтоніан матиме групу симетрії, яка може бути деякою підгрупою групи G незбуреного гамільтоніана. Збурення V, як правило, порушує симетрію незбуреного оператора. Наприклад, заміщення атомів у молекулі знижує симетрію заміщеної молекули по відношенню до первинної не заміщеною таким чином, що кінцева симетрія є як би «частиною» початкової симетрії. В результаті цього в збуреній системі залишаються елементи симетрії, спільні з елементами симетрії збудження, якщо вони є, точніше, елементи симетрії підгрупи цієї точкової групи. Співвідношення між початковою і перетвореною системами можуть бути виведені із співвідношення між незвідними представленнями групи і її підгрупою.

Нехай гамільтоніан H_0 має групу симетрії G, а оператор збурення V – групу симетрії G'. Звичайна вимога «малості» збурення має на увазі більш високу симетрію H_0 в порівнянні з симетрією V. Розглянемо два випадки: група G' співпадає з групою G; група G' є підгрупою групи G.

Якщо симетрія V має симетрію, яка не нижче симетрії гамільтоніана H_0, то група G буде, як і раніше, групою симетрії повного гамільтоніана H. В цьому випадку, оскільки власні значення рівняння Шредінгера можна класифікувати за звідними представленнями його групи симетрії, класифікація і кратність виродження рівнів енергії нашого завдання залишаються такими ж, як і в не збуреному випадку. Можна чекати лише зміщення власних значень Е оператора H відносно власних значень оператора H_0:

$$E_k = E_{0k} \pm \Delta E_k \tag{4.16}$$

Таким чином, в цьому випадку збурення не може викликати зміну можливих типів рівнів, тобто не може викликати розщеплювання вироджених рівнів енергії. Насправді, розглянемо який-небудь рівень E_μ і його власні функції $\psi_i^{(\mu)}$. Оскільки збурення V інваріантне відносно усіх операцій групи G, то функція $\psi_i^{(\mu)} = V\psi_i^{(\mu)}$ належить *i*-тому рядку $\mu-$того незвідного представлення. При цьому недіагональні елементи $(\psi_l^{(\mu)},\ V\psi_j^{(\mu)})$ матриці збурення дорівнюють нулю, а усі діагональні елементи рівні між собою, через що і не відбувається розщеплювання рівнів. Це можна довести в загальному випадку [8], виходячи з того, що скалярний добуток двох функцій, що не належать одному і тому ж рядку одного і того ж незвідного представлення дорівнює нулю, використовуючи той факт, що унітарні оператори не міняють скалярний добуток, а також з властивості ортогональності базисних функцій (2.77). Слід також підкреслити, що рівень E_μ не може розщепнутися ні в якому наближенні. Якби він розщепнувся, це означало б, що початкове представлення було звідним.

Розглянемо тепер випадок, коли збурення V має більш низьку симетрією, ніж гамільтоніан H_0. В цьому випадку повний гамільтоніан H матиме групу симетрії, що є деякою підгрупою групи G'. Нехай є деяке представлення $T(G)$ групи G. В цьому випадку отримуємо деяке представлення її підгрупи, вибираючи серед матриць $T(G)$ ті, які відповідають елементам G'. Класифікація власних значень гамільтоніана тепер проводять за незвідними представленнями групи G'. Оскільки порядок незвідних представлень підгрупи (сума квадратів розмірності незвідних представлень групи дорівнює порядку групи) не перевищує порядку незвідних представлень групи G, в цьому випадку може мати місце розщеплювання рівнів незбуреної задачі. Навіть у тому випадку, коли представлення $T(G)$ групи G незвідне, представлення її підгрупи G', $T'(G')$, може виявитися звідним. Іншими словами, у разі збурення, для гамільтоніана H не можна знайти підсистему базисних векторів представлення $T(G)$, яка була б інваріантної відносно усіх перетворень групи G, але можна знайти підпростір, інваріа-

Таблиця 4.2 Характери групи C_4

C_4	E	C_4	C_4^2	C_4^3
A	1	1	1	1
B	1	–1	1	–1
Г(ω)	1	–i	–1	i
Г(ω*)	1	i	–1	–i
(E)	2	0	–2	0

нтний відносно усіх перетворень підгрупи G'. Звідси випливає, що попри те, що власні функції, що належать рівню енергії E_μ утворюють базис незвідного представлення групи G, це представлення для підгрупи G' може виявитися звідним. В цьому випадку збурення V розщеплює рівень E_μ. Для того, щоб знайти розщеплення рівня E_μ при включенні збурення, треба розкласти звідне представлення Г цього рівня групи G на пряму суму незвідних представлень її підгрупи G'.

Розглянемо конкретні приклади. Нехай групою симетрії не збуреного гамільтоніана H_0 є група C_4. Група абельова, циклічна, усі незвідні представлення цієї групи одновимірні. Характери цієї групи показані в таблиці 4.2. Пара комплексно спряжених представлень Г (ω) і Г (ω*) (E) відповідає одному і тому ж рівню енергії тому, що при відсутності зовнішніх полів у квантовій механіці гамільтоніан є інваріантним відносно обернення часу, і комплексно спряжена функція по відношенню до власної функції теж є власної функцією того ж рівня енергії [8]. Накладемо збурення, що має симетрією C_2. Вироджений Е-рівень в цьому випадку має розщепнутися на два рівні, що належать представленню В групи C_2. Насправді, розглянемо таблицю характерів групи C_2 (таблиця 4.3) Порівняємо характери незвідних представлень груп C_4 і C_2. Видно, що при пониженні симетрії представлення А групи C_4 зберігається, а вироджений рівень Е розщеплюється на два рівні, що належать представленню В групи C_2. Це можна показати, якщо знайти розкладання звідного у даному випадку представлення Е групи C_4 за незвідними представленнями її підгрупи, тобто групи C_2. Треба знайти, скільки разів незвідне представлення В групи C_2 міститься в звідному тепер

Таблиця 4.3
Характери групи C_2

C_2	E	C_2
A	1	1
B	1	–1

представленні Е групи C_4, використовуючи відоме співвідношення (2.53):

$$m_\gamma = \frac{1}{g}\sum_p C_p \chi_p^* \chi_p \qquad (4.17)$$

де g – число елементів групи C_2; p – число класів спряжених елементів групи C_2; C_p – число елементів в класі p; χ_p – характер звідного представлення Е групи C_4; χ_p^* – характер незвідного представлення групи C_2. Виконаємо розрахунки:

1. $m_A = \frac{1}{2}(1\cdot 1\cdot 2 + 1\cdot 1\cdot(-2)) = 0$. Це означає, що представлення А групи C_2 не міститься в звідному представленні Е групи C_4, $A \notin E$.

2. $m_B = \frac{1}{2}(1\cdot 1\cdot 2 + 1\cdot(-1)\cdot(-2)) = 2$. Це означає, що представлення В групи C_2 двічі міститься в звідному представленні Е групи C_4, $B \in E$.

Таблиця 4.4
Характери групи C_{3v}

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	–1
E	2	–1	0

Таблиця 4.5
Характери групи C_S

C_S	E	σ_h
A'	1	1
A''	1	–1

Нехай групою симетрії гамільтоніана H_0 є група C_{3v}. Рівні класифікуються за представленнями A_1, A_2, E групи C_{3v} згідно таблиці характерів (табл. 4.4). Рівні типу E двократно вироджені. Нехай група симетрії G' повного гамільтоніана H є група C_S (табл.4.5, ізоморфна C_2). Розглянемо таблиці характерів обох груп (табл. 4.4 і 4.5). Скористаємося (4.17) для знаходження незвідних представлень C_S, що містяться в C_{3v}. Для представлення A' групи C_S знайдемо:

$$m_{A'} = \frac{1}{2}(2\cdot 1\cdot 1 + 0\cdot 1\cdot(-1)) = 1.$$

Для представлення A'':

$$m_{A''} = \frac{1}{2}(2 \cdot 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \cdot 1) = 1 .$$

Тому рівень E групи C_{3v} розщеплюється на рівні типу A' і $A'' : E = A' \oplus A''$, виродження рівня знімається.

Розглянемо ще один приклад [34].

Таблиця 4.6 Характери групи T_d

T_d	E	$8C_3$	$8C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	–1	–1
E	2	–1	2	0	0
T_1	3	0	–1	1	–1
T_2	3	0	–1	–1	1

Таблиця 4.7 Характери спільних елементів груп T_d і C_{3v}

$T_d + C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	–1
E	2	–1	0
T_1	3	0	–1
T_2	3	0	1

Міра виродження станів в молекулі визначається її симетрією Якщо молекула. має кубічну симетрію (T_d, O_h), рівні енергії можуть бути 3-кратно вироджені. У молекулах, що мають просту або дзеркальну поворотну вісь третього або більш високого порядку, степінь виродження не може бути більше двох. Для інших груп симетрії вироджених рівнів немає. Тому при пониженні симетрії вироджені стани розщеплюватимуться. Визначимо характер розщеплювання станів при пониженні симетрії T_d до C_{3v}. Зміна симетрії молекули може бути викликана різними причинами. Наприклад, в результаті заміщення одного атома F на Cl в молекулі CH_4 або відриву протона від іона NH_4^+ походить пониження симетрії $T_d \rightarrow C_{3v}$. При цьому різко зменшується число операцій симетрії: з 24 елементів залишається всього 6. Характери групи T_d показані в таблиці 4.6, а характери

C_{3v} дані в таблиці 4.4. При пониженні симетрії, якщо подивитися на таблицю характерів групи C_{3v} (табл. 4.4), то можна помітити, що зберігаються наступні елементи: E, $2C_3$, $3\sigma_v$ (у C_{3v} площині симетрії $\sigma_d \to \sigma_v$). Випишемо з таблиці 4.6 характери цих елементів і порівняємо отримані значення характерів незвідних представлень елементів групи T_d при пониженні симетрії до C_{3v} з характерами незвідних представлень C_{3v} (табл. 4.7). Видно, що, при пониженні симетрії незвідні представлення A_1, A_2 і E зберігаються, а 3-кратоно вироджені представлення T_1 і T_2 розщеплюються. Насправді, знайдемо розкладання T_1 і T_2 групи T_d по незвідним представленням групи C_{3v}, тобто знайдемо, скільки разів незвідні представлення групи C_{3v} містяться в звідних представленнях T_1 і T_2 групи T_d. Для представлення T_1 маємо:

$$m_{A_1} = \frac{1}{6}(3\cdot 1\cdot 1 + 2\cdot 1\cdot 0 + 3\cdot 1\cdot(-1)) = 0\,,\quad A_1 \notin T_1$$

$$m_{A_2} = \frac{1}{6}(3\cdot 1\cdot 1 + 0\cdot 2\cdot 2 +$$
$$+ 3\cdot(-1)\cdot(-1)) = 1,\ \ A_2 \in T_1$$

$$m_E = \frac{1}{6}(3\cdot 1\cdot 2 + 0\cdot 2\cdot(-1) + 3\cdot 0\cdot 1) = 1,\quad E \in T_1$$

Отже, $T_1 = A_2 \oplus E$. Аналогічним чином можна отримати, що $T_2 = A_1 \oplus E$.

Таким чином, при переході від симетрії T_d до симетрії C_{3v} двічі вироджені стани E зберігаються, а триразове виродження знімається – відбувається розщеплювання цих станів на суму не виродженого і двічі виродженого рівнів.

Отже, при «включенні» збурення з гамільтоніаном H меншої симетрії, що є підгрупою не збуреного стану, незвідні представлення виродженого рівня стають звідними представленням групи збурення V. Його можна розкласти за звідними представленнями групи збурення V. При цьому можна сказати, на скільки рівнів і в якій кратності виродження розщепнеться рівень, вироджений під дією збурення. Але нічого не можна сказати про величину виродження і послідовності розташування цих рівнів.

4.5 Симетризовані молекулярні орбіталі

При вивченні будови молекул необхідно брати до уваги одночасний рух ядер і електронів атомів, що входять до складу молекул. Проте, маса ядер у багато разів більше маси електронів. Тому приблизно можна розглядати рух цих часток окремо. Це так зване наближення Борна-Оппенгеймера. У нашому розгляді вважатимемо ядра нерухомими, і розглядати рух електронів. Далі, інтерес представлятимуть ті молекули, для яких розташування закріплених ядер інваріантне відносно деякої точкової групи операції симетрії. При цьому обмежимося простою моделлю, в якій кожен електрон рухається незалежно від інших в постійному полі, що створюється ядрами й іншими електронами. Ця модель аналогічна наближенню центрального поля у разі атомів. Відмінність в тому, що поле вважається таким, що має не сферичну симетрію, а симетрію точкової групи. У такому підході на електрон, що рухається поблизу одного з ядер в молекулі, діє поле, схоже з полем ізольованого атома. Тому в цій області простору хвильова функція електрона має бути подібна до хвильовій функції вільного атома $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)$, де $\mathbf{R}_k$ – радіус-вектор ядра k-того атома. Отже, можна будувати повні хвильові функції у вигляді лінійних комбінацій найменш пов'язаних атомних орбіталей $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)$ з центрами на різних ядрах $\mathbf{R}_k$. Таку хвильову функцію називають молекулярною орбіталлю (МО) ЛКАО – лінійною комбінацією атомних орбіталей. Молекулярні орбітали зазвичай описують одноелектронні стани в молекулах і молекулярних комплексах. У цьому уявленні молекулярна орбіталь – лінійна комбінація атомних орбіталей, тобто одноелектронних станів атомів, що становлять молекулу, виду

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k,nlm} c_{nlm}^{(k)} \varphi_{nlm}^{(k)} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \qquad (4.18)$$

При проведенні простих обчислень зазвичай вважається, що в створенні цих орбіталей беруть участь атомні орбіталі валентних електронів, а електрони внутрішніх заповнених оболонок знаходяться у своїх не збурених атомних станах. Аналогії між атомними орбіталями (АО) і МО дозволило перенести в теорію МО основні положення атомних орбіталей багатоелектронного атома [33]:

а) стан кожного електрона в молекулі описується певною хвильовою функцією, яка в даному випадку називається МО;

б) кожній МО відповідає певна енергія, яка називається орбітальною енергією;

в) МО заповнюються електронами у відповідністю з правилами, аналогічними правилам заповнення АО (принцип найменшій енергії, принцип Паулі, правило Хунда).

Якщо відома МО, можна визначити вірогідність знаходження електрона в певному об'ємі простору. Електронна щільність дає картину просторового розподілу електрона в молекулі.

Яким чином можна побудувати МО? Розглянемо іон H_2^+. Припустимо, що між’ядерна відстань в H_2^+ є нескінченно великою. В цьому випадку ядра не взаємодіють один з одним, і хвильова функція електрона є хвильовою функцією атома водню, тобто атомними орбіталями 1s-типу з однаковою енергією. Якщо між'ядерна відстань відповідає довжині зв'язку в іоні, то хвильова функція може бути представлена у вигляді лінійної комбінації хвильових функцій атомних орбіталей з деякими коефіцієнтами (див. 4.18). Коефіцієнти в (4.18) визначають вклад кожної окремий АО в загальну молекулярну хвильову функцію.

Нехай молекула має ту чи іншу симетрію. В цьому випадку рівні енергії і стаціонарні МО класифікують за звідними представленнями групи симетрії G молекули. Тому МО можна помітити індексом, що відповідає незвідному представленню групи G. Для знаходження цих індексів необхідно розкласти звідне в загальному випадку представлення Г на незвідні частини, для чого треба знати характери цього звідного представлення. Множина функцій (4.18) пов'язані перетворенням симетрії, і ці функції можна розглядати в як базис, що перетворюється за звідними представленнями групи симетрії G. Розкладання представлення Г на незвідні частини, $\Gamma = \sum_{\alpha} m_\alpha \Gamma^{(\alpha)}$, вказує число m_α наборів МО, що реалізовують незвідні представлення $\Gamma^{(\alpha)}$. Ці набори можна отримати, використовуючи процедуру проектування, тобто проективні оператори виду:

$$P^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g} \sum_{g} \chi^{(\alpha)*}(g_a) T(g_a) \tag{4.19}$$

де S_α – розмірність незвідного представлення типу α; g – порядок групи; $\chi^{(\alpha)*}(g_a)$ – характер елементу $g_a \in G$ в незвідному представленні тиру α; $T(g_a)$ – оператор, що відповідає операції симетрії елементу $g_a \in G$ групи G. Оператор проектування дозволяє спроектувати будь-який базис представлення Г таким чином, що отриманий в результаті проектування новий базис належатиме незвідному представленню типу α цієї точкової групи.

При застосуванні оператора проектування до побудови симетризованих ЛКАО процедура його застосування включає наступні дії [13,33]:

1) визначення точкової групи симетрії молекули;

2) вибір базисних АО;

3) складання матриці перетворення і визначення з її допомогою характеру незвідного представлення;

4) розкладання звідного представлення Г на незвідні частини $\Gamma^{(\alpha)}$ з урахуванням визначення числа m_α нееквівалентних незвідних представлень;

5) побудова оператора проектування для тих незвідних $\Gamma^{(\alpha)}$, які входять в звідне представлення Г;

6) побудова за допомогою оператора проектування симетризованих ЛКАО.

Як приклад розглянемо молекулу H_3, що складається з трьох протонів і трьох електронів [23]. Завдання зводиться до знаходження хвильової функції електрона (МО) в полі трьох протонів, які знаходяться, по припущенню, у вершинах рівностороннього трикутника. На електрон, що рухається поблизу одного з протонів, діє поле, близьке до поля в атомі водню. Тому в цій області простору хвильова функція електрона має бути близька до атомній орбіти водню, центрованою на даному протоні. Повну хвильову функцію електрона в молекулі (МО) можна в нульовому наближенні записати у вигляді лінійної комбінації АО. Зображення молекули дане на рис. 4.2. Виберемо сферично симетричні функції 1s-станів атома водню як АО, що центруються в точках a, b, c, і позначимо їх $\varphi(a),\ \varphi(b),\ \varphi(c)$. Група симетрії молекули – D_3, число класів – три:

$$\left\{E,\ (C_3\ C_3^2), (C_2'\ C_2''\ C_2''')\right\}$$

Введемо векторний простір з ортами:

$$\begin{aligned}\varphi(a) &= \left(\varphi(a),0,0\right)\\ \varphi(b) &= \left(0,\varphi(b),0\right)\\ \varphi(c) &= \left(0,0,\varphi(c)\right)\end{aligned} \qquad (4.20)$$

Довільний вектор цього простору запишемо у вигляді лінійної комбінації $\alpha\varphi(a)+\beta\varphi(b)+\gamma\varphi(c)$. Молекулярними орбіталями будуть ті лінійні комбінації, які при операції симетрії перетворяться за незвідними представленнями групи симетрії D_3. Це випливає з того, що МО є хвильовими функціями, тобто рішеннями рівняння

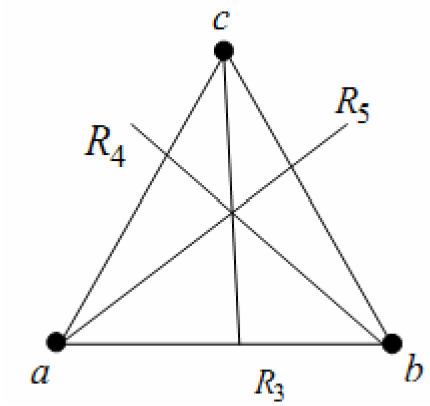


Рис. 4.2 Схемне зображення молекули H_3

Шредінгера, гамільтоніан якого інваріантний відносно перетворення симетрії молекули. Лінійні комбінації легко знаходяться за допомогою оператора проектування. Складемо матриці перетворення положення атомів молекули H_3 під дією елементів групи D_3. Як відомо, група D_3 – група шостого порядку, що складається з елементів:

Таблиця 4.8 Характери звідного представлення групи D_3

D_3	E	C_3, C_3^2	C_2', C_2'', C_2'''
Γ	3	0	1

Таблиця 4.9 Характери незвідних представлень групи D_3

D_3	E	C_3, C_3^2	C_2', C_2'', C_2'''
E	2	– 1	0
A_1	1	1	1
A_2	1	1	– 1

$\left\{E, C_3, C_3^2, C_2', C_2'', C_2'''\right\}$, де усі осі другого порядку перпендикулярні осям третього порядку. Вважатимемо, що поворотні осі обертають молекулу за годинниковою стрілкою. У вибраному функціональному просторі отримуємо:

$$C_3\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(b)\\ \varphi(c)\\ \varphi(a)\end{pmatrix};$$

$$C_3^2\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(c)\\ \varphi(a)\\ \varphi(b)\end{pmatrix};$$

$$C_2'\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(b)\\ \varphi(a)\\ \varphi(c)\end{pmatrix};\ C_2''\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(c)\\ \varphi(b)\\ \varphi(a)\end{pmatrix};\ C_2'''\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(c)\\ \varphi(b)\end{pmatrix};$$

$$E\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi(a)\\ \varphi(b)\\ \varphi(c)\end{pmatrix};$$

Характери звідного представлення Г мають вид, приведений в таблиці 4.8. Характери незвідних представлень цієї ж групи приведені в таблиці 4.9. Очевидно, і це можна перевірити, звідне представлення Г розпадається на два незвідних представлення групи D_3: $\Gamma = A_1 \oplus E$ – одновимірне і двовимірне. Застосуємо далі проективний оператор (4.19) для знаходження симетризованих ЛКАО. Для представлення A_1 маємо:

$$P^{(A_1)}\varphi(a)=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1\cdot T(C_3)\varphi(a)+1\cdot T(C_3^2)\varphi(a)+1\cdot E\varphi(a)+\\ +1\cdot T(C_2')\varphi(a)+1\cdot T(C_2'')\varphi(a)+1\cdot T(C_2''')\varphi(a)\end{bmatrix}=$$

$$=\frac{1}{6}\left[\varphi(b)+\varphi(c)+\varphi(a)+\varphi(b)+\varphi(c)+\varphi(a)\right]=\frac{1}{3}\left[\varphi(a)+\varphi(b)+\varphi(c)\right]=\psi_{A_1}$$

Дія $P^{(A_1)}$ на $\varphi(b)$ і $\varphi(c)$ не дає нічого нового, що перевіряється безпосередньо. Для представлення Е отримуємо:

$$\begin{aligned}P^{(E)}\varphi(a)&=\frac{2}{6}\left[2\cdot T(E)\varphi(a)-1\cdot T(C_3)\varphi(a)-1\cdot T(C_3^2)\varphi(a)\right]=\\ &=\frac{1}{3}\left[2\varphi(a)-\varphi(b)-\varphi(c)\right]=\psi_E(a)\end{aligned}\tag{4.21}$$

Аналогічним чином отримуємо:

$$P^{(E)}\varphi(b)=\frac{1}{3}\left[2\varphi(b)-\varphi(c)-\varphi(a)\right]=\psi_E(b)\tag{4.22}$$

$$P^{(E)}\varphi(c) = \frac{1}{3}\left[2\varphi(c) - \varphi(a) - \varphi(b)\right] = \psi_E(c) \qquad (4.23)$$

Очевидно $\psi_E(a) + \psi_E(b) + \psi_E(c) = 0$. Отже, отримані функції (4.21 – 4.23) лінійно залежні. Виберемо з них першу, $\psi_E(a)$, а замість $\psi_E(b)$ і $\psi_E(c)$ візьмемо їх різницю:

$$\psi_E(b) - \psi_E(c) = \varphi(b) - \varphi(c)$$

Таким чином, отримуємо наступні ненормовані хвильові функції МО:

$$\begin{aligned}
\psi_{A_1} &= \frac{1}{3}\left[\varphi(a) + \varphi(b) + \varphi(c)\right] \\
\psi_E^{(1)} &= \frac{1}{3}\left[2\varphi(a) - \varphi(b) - \varphi(c)\right] \\
\psi_E^{(2)} &= \left[\varphi(b) - \varphi(c)\right]
\end{aligned} \qquad (4.24)$$

Їх можна пронормувати умовою $\iiint \psi_1 \psi_2^* dv = \delta_{12}$. Нормування дає:

$$\begin{aligned}
\psi_{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\varphi(a) + \varphi(b) + \varphi(c)\right] \\
\psi_E^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left[2\varphi(a) - \varphi(b) - \varphi(c)\right] \\
\psi_E^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(b) - \varphi(c)\right]
\end{aligned} \qquad (4.25)$$

Питання для самоконтролю

1. Як визначають дію елементів групи перетворення координат на хвильову функцію?

2. Що таке індуковане перетворення функції?

3. Які умови інваріантності функції відносно групи перетворень?

4. Які умови інваріантності гамільтоніану квантовомеханічної системи відносно перетворень симетрії?

5. Чому перетворена хвильова функція теж є рішенням рівняння Шредінгера з тим же рівнем енергії?

6. Чому набір власних ортонормованих функцій створює базис представлення групи ортогональних перетворень?

7. Звідки випливає, що кожному власному виродженому рівню енергії відповідає деяке представлення групи симетрії (звідне чи незвідне?)? Які наслідки цього висловлення?

8. Яким чином класифікують стаціонарні стани квантових систем?

9. Що таке природне і випадкове виродження?

10. Скільки рівнів енергії системи, яка має симетрію D_{6h}, T_d, S_6?

11. Що таке розщеплення рівнів енергії? Коли воно відбувається?

12. Чому збурення зрушує симетрію?

13.Як визначається розщеплення енергетичних станів при накладанні збурення?

14. Як використовують оператор проектування для визначення симетризованих молекулярних орбіталей?

15. Як відрізняється порушення симетрії при збуренні і порушення симетрії при зміні атома у молекули?

16. Чому саме оператори проектування застосовують для побудови симетризованих молекулярних орбіталей?

17. Як будують молекулярні орбітами з атомних орбіталей?

18. Сформулюйте послідовність застосування оператора проектування до побудови симетризованих молекулярних орбіталей лінійних комбінацій атомних орбіталей (МО ЛКАО).

19. Чому для визначення величини збурення застосовують саме співвідношення (4.17)?

20. Скільки хвильових функцій має квантово-механічна система, симетрією якої є симетрія додекаедра?

Розділ V

Кристалографічні просторові групи

5.1 Трансляційна симетрія. Ґратки Браве. Сингонії

1^o. Кристал є 3-вимірною періодичною множиною його складових елементів: нейтральних атомів, іонів, молекулярних комплексів і так далі. Ці складові частини в стані рівноваги розміщуються в просторі або в площині регулярно, і складають кристалічну структуру. Перетворення симетрії залишають незмінними або інваріантними відносні положення цих елементів і дають кристал, еквівалентний відносно їх орієнтації.

Якщо атоми, молекули, іони, що становлять кристал, вважати матеріальними точками, то таку ідеалізовану структуру називають кристалічною решіткою Г. Основна властивість симетрії кристалічної решітки – трансляційна інваріантність. Трансляційна симетрія припускає, що за початок координат можна взяти будь-який вузол, що містить атом цього сорту, оскільки всі інші атоми еквівалентні. При будь-якому виборі початку координат отримуються тотожні фізичні результати.

Наявність трансляційної симетрії означає: якщо $\forall \mathbf{r} \in \Gamma$, то оператор зсуву $T(\mathbf{R})$ дає вектор $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{R} \in \Gamma$, де для довільних цілих чисел n_i

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a_1} + n_2\mathbf{a_2} + n_3\mathbf{a_3};\ n_i \in Z \tag{5.1}$$

Вектор **R** називають вектором ґратки, $\mathbf{a}_i$ – три незалежні не компланарні вектори, які називаються векторами основних трансляцій або основними періодами ґратки. Паралелепіпед, побудований на основних векторах $\mathbf{a}_i$ називається основним паралелепіпедом або елементарною коміркою кристала. Вибір базисних векторів певною мірою довільний. Базисні вектори вибирають так, щоб об'єм елементарної комірки $\Omega_0 = \mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]$ був мінімальним, і щоб вони утворювали правий базис. Увесь кристал розглядається як безмежний і побудований з нескінченного числа тотожних елементарних комірок. Вершини паралелепіпедів, які утворюють кожну елементарну комірку, що є кінцями векторів **R**, називаються вузлами Браве, а ґратки, створені вузлами Браве, називають ґратками Браве. У загальному випадку вузли ґраток Браве не є реальними вузлами кристалічної решітки, тобто місцем розташування атомів або іонів. У загальному випадку при побудові ґраток Браве за нульовий вузол можна вибрати довільну точку кристала, тому і інші вузли ґраток Браве можуть потрапити в довільні, але еквівалентні точки кристала. Якщо на елементарну комірку кристала доводиться один атом, то зручно поєднати вузли ґраток Браве з місцем розташування атомів, і тоді ґратки Браве співпадають з реальними ґратками кристала. Якщо на елементарну комірку доводиться декілька атомів, тобто ґратки є складними, їх розташування задається набором векторів, що називаються базисом кристалічної комірки. Таку складну комірку можна представити як складену з декількох (по числу атомів в елементарної комірки) ґраток Браве, які вставлені одна в одну, і нульові вузли яких співпадають з місцем розташування кожного атома в нульовій елементарній комірці. Трансляційна симетрія кристала характеризується однією з ґраток Браве. Елементарна комірка, що містить тільки один вузол ґраток, тобто комірка, усередині якої немає вузлів, а усі вузли знаходяться у вершинах комірки, називається примітивною коміркою.

2^o. Сукупність обертань, відображень, дзеркальних поворотів, які перетворять решітку Браве саму в себе і мають нерухому точку, утворюють деяку точкову групу K. Ця точкова група симетрії ґраток Браве, K, являється і групою симетрії векторної групи T, що характеризує симетрію трансляції кристала. Таким чином, точковою групою симетрії кристала називають скінченну підгрупу в групі O(3), елементи якої перетворюють кристалічну решітку в себе. Для кожних ґраток Браве існує точкова група К перетворень, які (перетворення) переводять вектор ґраток у вектор ґраток.

Перетворення трансляцій нескінченного кристала є лінійними, дійсними, неоднорідними, дискретними (спеціальними афінними) перетвореннями 3-вимірного евклідового простору. Найбільш загальний вигляд такого перетворення можна дати таким співвідношеннями:

$$\begin{cases} x_1' = \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 + a_1 \\ x_2' = \alpha_{21}x_1 + \alpha_{22}x_2 + \alpha_{23}x_3 + a_2 \\ x_3' = \alpha_{31}x_1 + \alpha_{32}x_2 + \alpha_{33}x_3 + a_3 \end{cases} \tag{5.2}$$

де x_i', x_i – координати точок кристала; α – ортогональні точкові перетворення; a_i – дійсні величини векторів основних трансляцій, що залежать від α_{ij}. У векторному вигляді таке перетворення запишеться таким чином:

$$\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{a} \tag{5.3}$$

Ця умова є умовою сумісності поворотів, відображень і трансляцій на цілі періоди. Це призводить до того, що не будь-яка точкова група може бути групою симетрії якої-небудь векторної групи. Серед усіх афінних перетворень вибирають такі, що:

а) залишають інваріантним квадрат відстані між будь-якими двома точками, тобто не змінюють метрику кристалічного простору;

б) сумісні з визначенням ґраток, тобто належать Г.

Щоб перетворення вказаного типу зберігали метрику, необхідно, щоб матриці точкових перетворень α були ортогональними при $a_i = 0$. Умова б) накладає обмеження на a_i – вони мають бути дійсними. Для чистих трансляцій відмінні від нуля тільки діагональні елементи матриці α, причому $\alpha_{jj} = 1$ и $x_j' = x_j + a_j$, тобто a_i мають бути цілими числами.

Таким чином, якщо α – усі точкові ортогональні перетворення 3-вимірного простору, які належні точковій групі К, то для кожних ґраток

Г Браве існують точкові групи К перетворень, які переводять вектор ґраток у вектор ґраток. Але не будь-яка точкова група може бути групою симетрії ґраток. Вимоги, щоб разом з вектором $\mathbf{R}$ вектор $\alpha\mathbf{R}$ також був вектором ґраток, обмежує круг допустимих точкових груп. Які ці обмеження?

1) група К повинна містити інверсію: разом з трансляцією на $\mathbf{a}$ в перетворенні трансляції $T(\mathbf{a})$ повинні входити трансляції і на вектор $(-\mathbf{a})$, оскільки у будь-якій векторній групі містяться вектори $\mathbf{a},\ -\mathbf{a}$;

2) група повинна містити осі певного порядку. Встановимо порядок осей, які повинна мати група К. За допомогою унітарного перетворення матриці α можна звести до виду:

$$\alpha = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \tag{5.4}$$

де $\varphi = \dfrac{2\pi}{n}k$ – кут повороту, знак " + " відповідає власним перетворенням, знак " – " – невласним. Слід (шпур) матриці у будь-якому базисі має бути цілим числом, оскільки $\mathbf{a}' = \alpha\mathbf{a}$ – теж вектор ґраток, $\mathbf{a}$ – ціле число. Звідси випливає обмеження для величини cos α:

$$\cos\alpha = \cos\frac{2\pi}{n}k = \pm 1,\ \pm\frac{1}{2},\ 0 \tag{5.5}$$

Отже, група К може містити тільки осі 1, 2, 3, 4, 6 порядків.

3) можна також показати, що, якщо в групі К міститься підгрупа C_n з $n > 2$, то є також і площина відображення σ_V, що проходить через вісь C_n, тобто в групі К міститься і підгрупа C_{nv}: вона містить відображення в n площинах, що проходять через вісь n-ого порядку і утворюють кут $\dfrac{\pi}{n}$ одна з одній. Це група симетрії правильної n-кутньої піраміди, висота якої є віссю симетрії n-ого порядку.

3°. Сформульовані вище обмеження призводять до того, що точковими групами кристала можуть бути лише сім точкових груп: $S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h$. Для кожної з семи точкових груп можна побудувати векторну групу Т і відповідні ґратки Браве, для яких ця точкова група є групою симетрії. При цьому одній і тій же групі К можуть відповідати різні векторні групи, тобто різні ґратки Браве. Сукупність векторних груп, що мають одну і ту ж симетрію К називається сингонією або голоедрією. Таким чином, існує тільки сім сингоній: триклинна S_2, моноклінна C_{2h}, ромбічна D_{2h}, ромбоедрична (тригональна) D_{3d}, тетрагональна D_{4h}, гексагональна D_{6h}, кубічна O_h. Для всіх кристалів існує сім груп симетрії К, тобто сім систем ґраток Браве. Найбільшу симетрію мають O_h і D_{6h}. Інші групи містяться в них як підгрупи [14]:

$$\begin{tikzcd}
& D_{3d} \arrow[dr] & & & \\
O_h \arrow[ur] \arrow[r] & D_{4h} \arrow[r] & D_{2h} \arrow[r] & C_{2h} \arrow[r] & S_2 \\
& D_{6h} \arrow[ur] & & &
\end{tikzcd} \qquad (5.6)$$

Кожна подальша група в цих схемах супідрядності міститься в попередній як підгрупа. Такі переходи можуть бути здійснені розтягуванням або стискуванням куба уздовж однієї з його осей 4-го порядку, а також деформацією зсуву або стискування в площині основи.

5.2 Кристалографічні класи

Завдання кристалографічної системи (сингоній або голоедрій) і типу ґраток не повністю характеризує групу симетрії кристала, оскільки вони визначають лише його ґратки Браве, тобто це група симетрії суміщення ґраток Браве. У складних ґратках з базисом суміщення ґраток не означає суміщення усіх еквівалентних точок. Симетрія кристалічної решітки може бути нижча симетрії її ґраток. Наприклад: ґратки Браве усіх кристалів містять інверсію, але інверсія не є елементом симетрії усіх кристалів.

У кристалі існують так звані еквівалентні напрямки, уздовж яких усі фізичні властивості кристалів однакові. Два будь-яких еквівалентних напрямки містять сукупність однаковим чином послідовно розташованих еквівалентних точок. Якщо g – елемент точкової групи симетрії К ґратки Браве, $g \in K$, то при перетвореннях g ґратки переходять самі в себе. При цьому для точок і напрямків в кристалі можуть бути реалізовані три можливості:

1) при перетвореннях g всі точки кристала, а не тільки вузли, переходять в еквівалентні, а значить переходять в еквівалентні і всі напрямки;

2) усі напрямки переходять в еквівалентні, але не всі точки переходять в еквівалентні;

3) не всі напрямки переходять в еквівалентні.

У разі 1) перетворення g належить групі G симетрії кристала, як сукупності точкових і трансляційних перетворень. У разі 2) для того, щоб g переводило всі точки кристала в еквівалентні, необхідно зробити трансляцію на деякий вектор, що не є вектором ґраток Браве. Тому, якщо $g \notin G$, то $T(\mathbf{n})g \in G$. У разі 3) g взагалі не входить до групи симетрії G кристала.

Випадок 1) припускає розгляд кристала без включень, тобто коли тотожні атоми розташовані тільки у вузлах ґраток. Проте можлива наявність атомів інших елементів усередині кожної комірки і (чи) на її гранях (випадок 2)). Не порушуючи симетрію трансляції кристала, такі включення знижують точкову симетрію. Інакше кажучи, якщо кристал мав точкову симетрію групи K, то після появи включень його точкова симетрія визначатиметься деякою підгрупою $F \subseteq K$.

Для кожної з точкових груп К елементи, які переводять усі напрямки в кристалі в еквівалентні (тобто випадки 1) і 2)), утворюють деяку точкову групу $F \subset K$, підгрупу К. Ця підгрупа F є групою симетрії напрямків в кристалі і називається кристалічним класом або симетрією базису.

Дамо ще одне пояснення виникнення кристалічних класів або симетрії базису. Як сказано вище, визначені нами групи точкової симетрії $S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h$ є так званими голоедричними групами, тобто групами з операціями I і II роду, що поєднують ґратки самі з собою. Очевидним елементом цих груп є інверсія, оскільки вектор $\mathbf{R}$ разом з вектором $(-\mathbf{R})$ також є вектором ґраток. За наявності C_2 у групи обов'язково є σ_h, отже, існує група C_{2h}. За наявності C_n $(n = 3, 4, 6)$ є елемент σ_v, що містить цю вісь, отже, $C_{nv} \subset K$. Цим умовам задовольняє 7 груп, що називаються кристалічними системами (сингоніями).

У кожну з 7 кристалічних систем точкових груп ґраток входить певне число типів ґраток, які можуть бути примітивними (Р), базо-центрованими (А, В, С), гранецентрованими (F), об'ємноцентрованими (I). Повна кількість ґраток Браве 14. Вимога інваріантності ґраток при поворотах і відображеннях накладає обмеження на вектори елементарних трансляцій **а**, **в**, **с**, і кути α, β, γ між ними. Складні ґратки мають базис. Якщо базис складається з одного атома, то усі точкові перетворення, незалежно від типу ґраток Браве, переводять ґратки в ґратки, і такі групи і називаються голоедричними групами. Якщо базис складний (оц, гц, бц) і складається з декількох атомів, то поєднання точкової симетрії і базису породжує наявність кристалічних класів – симетрій базису.

Існує 32 різних кристалографічних класів за числом різних підгруп у семи груп симетрії ґраток Браве. При цьому один і той же клас є підгрупою різних точкових груп ґраток Браве. Розподіл 32 кристалічних класів за кристалічними системи (сингоніями) приведено в таблиці 5.1 [2].

Таблиця 5.1 Розподіл 32 кристалічних класів за кристалічними системами (сингоніями)

Кристалічна система (сингонія)	Класи
Триклинна	$C_i,\ S_2$
Моноклінна	$C_S,\ C_2,\ C_{2h}$
Ромбічна	$C_{2v},\ D_2,\ D_{2h}$
Тетрагональна	$S_4,\ D_{2d},\ C_4,\ C_{4h},\ C_{4v},\ D_4,\ D_{4h}$
Ромбоедрична	$C_S,\ S_6,\ C_{3v},\ D_3,\ D_{3h}$
Гексагональна	$C_{3h},\ D_{3h},\ C_6,\ C_{6h},\ C_{6v},\ D_6,\ D_{6h}$
Кубічна.	$T,\ T_h,\ T_d,\ O,\ O_h$

Таким чином, кристалічний клас – це підгрупа $F \subset K$, елементи якої переводять кожний напрямок в кристалі в еквівалентний йому. При цьому, якщо $F \subset K$, то F не міститься в підпорядкованій сингонії. Кристалічний клас – це симетрія базису, відмінного від примітивного. Існує 14 типів ґраток (векторних груп) Браве, що відповідають 7 сингоніям. Сім сингоній (груп точкової симетрії) К ґраток мають 32 підгрупи (32 кристалічні класи). Ці 32 кристалографічні точкові групи об'єднуються з 14 ґратками Браве в комбінації, що називаються просторовими групами симетрії.

5.3 Група трансляцій

Задамо базис для опису кристала у вигляді трьох довільних некомпланарних векторів, довжини яких дорівнюють відстані між найближчими вузлами ґраток в цьому напрямку $\mathbf{a}_1,\ \ \mathbf{a}_2,\ \ \mathbf{a}_3$. Вектор $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ називається вектором трансляції, якщо $n_1,\ \ n_2,\ \ n_3 \in Z$ – цілі числа. Симетрія трансляції кристала означає, що при зміщенні на вектор трансляції деяка фізична величина α набуває початкового значення, тобто вектор трансляції **R** визначає положення еквівалентних фізично тотожних точок кристала $\mathbf{r}$ і $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{R}$. Фізичні властивості кристала в точках $\mathbf{r}$ і $\mathbf{r}'$ однакові.

Введемо оператор трансляції $T(\mathbf{R})$ умовою:

$$\mathbf{r}' = T(\mathbf{R})\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R} \tag{5.7}$$

Очевидно, що $T(\mathbf{R})$ утворює групу, якщо ввести операцію множення трансляцій умовою:

$$T(\mathbf{R}_2)T(\mathbf{R}_1)\mathbf{r} = T(\mathbf{R}_2)(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = \mathbf{r} + \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 \tag{5.8}$$

або

$$T(\mathbf{R}_2)T(\mathbf{R}_1) = T(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) \tag{5.9}$$

Одиничним елементом служить трансляція на нульовий вектор $E = T(0)$. Зворотним елементом служить трансляція на зворотний вектор

$$\{T(\mathbf{R})\}^{-1} = T(-\mathbf{R}) \tag{5.10}$$

Закон асоціативності виконується. Таким чином, трансляції дійсно утворюють групу. Очевидно, що група трансляцій – група циклічна, якщо:

$$\begin{aligned} T(\mathbf{R}) &= T(n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3) = T(n_1\mathbf{a}_1)\times T(n_2\mathbf{a}_2)\times T(n_3\mathbf{a}_3) = \\ &= \{T(\mathbf{a}_1)\}^{n_1}\times\{T(\mathbf{a}_2)\}^{n_2}\times\{T(\mathbf{a}_3)\}^{n_3} \end{aligned} \tag{5.11}$$

Для необмеженого кристала трансляцію можна здійснити на будь-який вектор, у тому числі на вектор **R**, для якого $|\mathbf{R}| \to \infty$, тобто це група нескінченного порядку. Зробимо її скінченною, оскільки реальні кристали обмежені, наприклад, мають вигляд паралелепіпеда з довжиною сторін L_1, L_2, L_3, причому $\mathbf{L}_1 = N_1\mathbf{a}_1$, $\mathbf{L}_2 = N_2\mathbf{a}_2$, $\mathbf{L}_3 = N_3\mathbf{a}_3$, де N_1, N_2, N_3 – цілі числа. Для цього накладемо на трансляцію циклічні умови:

$$T(\mathbf{L}_1)\times T(\mathbf{L}_2)\times T(\mathbf{L}_3) = T(0) = E \tag{5.12}$$

Тоді група трансляцій перетворюється на групу порядку $g = N_1N_2N_3$. Об'єм кристала $V = \left(\mathbf{L}_1\left[\mathbf{L}_2\mathbf{L}_3\right]\right) = N_1N_2N_3\left(\mathbf{a}_1\left[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3\right]\right) = gV_a$. Трансляції уздовж будь-якого напряму утворює підгрупу. Наприклад, $T(n_1\mathbf{a}_1)$ є підгрупа порядку N_1:

$$\{T(\mathbf{a}_1)\}^{N_1} = E \qquad (5.13)$$

оскільки точки, утворені вектором трансляції $N_1\mathbf{a_1}$ поєднують вектор і точку, утворену вектором 0.

Звідси випливає, що:

1) порядок групи $T(\mathbf{R})$ дорівнює добутку порядків співмножників $g = N_1 N_2 N_3$;

2) група трансляцій – група абельова;

3) трансляції у різних напрямках, в напрямках трьох основних векторів, комутують один з одним;

4) групу можна розглядати як прямий добуток трьох підгруп трансляцій уздовж основних напрямків.

5.4 Дійсна афінна група. Просторові групи

1^0. Розглянемо з початку групу перетворень, яку назвемо дійсною афінною групою перетворень. Ця група складається із різних трансляцій і ортогональних перетворень звичайного 3-вимірного простору. Елементи цієї групи здійснюють перетворення виду:

$$\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{t} \qquad (5.14)$$

де α – довільні ортогональні (точкові) перетворення; $\mathbf{t}$ – вектор довільної трансляції. Зазвичай такі перетворення записують у вигляді:

$$\mathbf{r}' = \{\alpha / \mathbf{t}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{t} \qquad (5.15)$$

Отже, будь-який елемент $\{\alpha / \mathbf{t}\}$ дійсної афінної групи складається з двох частин: точкового перетворення α і трансляції $\mathbf{t}$ на довільний вектор. Згідно Вігнеру-Зейтцу, це позначається як $\mathbf{r}' = \{\alpha / \mathbf{t}\}\mathbf{r}$.

Точкові перетворення α розглядатимемо як тривимірні ортогональні матриці, при цьому слід розрізняти чисті обертання і обертання з інверсією, тому для точкових перетворень детермінант матриці цих перетворень $|\alpha| = \det\alpha$ набуває значень $|\alpha| = \pm 1$. Власні перетворення мають $|\alpha| = 1$, обертання з інверсією або невласні перетворення мають $|\alpha| = -1$. У першому випадку елементи $\{\alpha / \mathbf{t}\}$ описують гвинтові рухи з подальшою трансляцією уздовж осі повороту, а в другому випадку – відображення в площині ковзання (площини ковзного відображення, відображення в площині симетрії з подальшою трансляцією уздовж площини відображення, а не перпендикулярно їй).

При трансляціях, що не перетворюються на нуль, перетворення $\{\alpha / \mathbf{t}\}$ нелінійні. Вони утворюють групу, якщо добуток двох елементів можна записати у вигляді:

$$\mathbf{r}' = \alpha(\beta\mathbf{r} + \mathbf{s}) + \mathbf{t} = \alpha\beta\mathbf{r} + \alpha\mathbf{s} + \mathbf{t} \tag{5.16}$$

звідси

$$\{\alpha / \mathbf{t}\}\{\beta / \mathbf{s}\} = \{\alpha\beta / \alpha\mathbf{s} + \mathbf{t}\} \tag{5.17}$$

Результат, очевидно, також належить просторовій групі перетворень. Одиничним елементом є елемент $\{\varepsilon / 0\}$, де ε – тотожне перетворення простору. Зворотним елементом до $\{\alpha / \mathbf{t}\}$ являється перетворення виду

$$\begin{aligned} \{\alpha / \mathbf{t}\}^{-1} &= \{\alpha^{-1} / -\alpha^{-1}\mathbf{t}\} \\ \{\alpha / \mathbf{t}\}^{-1}\mathbf{r} &= \alpha^{-1}\mathbf{r} - \alpha^{-1}\mathbf{t} \end{aligned} \tag{5.18}$$

Насправді:

$$\{\alpha / \mathbf{t}\}(\alpha^{-1}\mathbf{r} - \alpha\mathbf{t}) = \alpha\alpha^{-1}\mathbf{r} - \alpha\alpha^{-1}\mathbf{t} + \mathbf{t} = \mathbf{r} \tag{5.19}$$

Будь-які трансляції виду $\{\varepsilon / \mathbf{a}_\mathrm{i}\}$ утворюють підгрупу дійсної афінної групи (її нормальний дільник), оскільки для будь-якого елементу $\{\alpha/\mathbf{t}\}$ дійсної групи справедлива рівність:

$$\{\alpha/\mathbf{t}\}^{-1}\{\varepsilon/\mathbf{a}_{\mathrm{i}}\}\{\alpha/\mathbf{t}\} = \{\varepsilon/\alpha^{-1}\mathbf{a}_{\mathrm{i}}\} \tag{5.20}$$

тобто спряжений до трансляції $\mathbf{a}_{\mathrm{i}}$ елемент також є трансляцією і таким чином, усі трансляції спряжені одна з одною. Загальний елемент порожньої (примітивної) ґратки записується аналогічно:

$$\{\alpha/\mathbf{t}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{t} \tag{5.21}$$

2^0. Під просторовою групою G кристала розуміють будь-які перетворення простору, що переводять кристал самий в себе. Будь-яка просторова група є однією з підгруп дійсній афінної групи. Як випливає з (5.20), підгрупа трансляцій T просторової групи G замкнена відносно спряжень, тобто співпадає з усіма своїми спряженнями, є інваріантною підгрупою групи G або нормальним дільником, для якої праві і ліві суміжні класи співпадають. Отже, G можна розкласти в суміжні класи по T, оскільки $T \subset G, \forall g_i \in G : g_i T g_i^{-1} \subseteq T$.

Дамо більш строге <u>визначення</u> просторової групи. Просторовою групою G назвемо дискретну (що має обчислюваний порядок) підгрупу дійсної афінної групи лінійних перетворень, трансляції якої утворюють її нормальний дільник T і мають вигляд:

$$\{\varepsilon/\mathbf{R}\},\ \ \mathbf{R} = \sum_i n_i \mathbf{a}_{\mathrm{i}} \tag{5.22}$$

де n_i – довільні цілі числа. Нормальний дільник T групи G називається групою трансляції, а його елементи – допустимими трансляціями, тобто це цілочислові лінійні комбінації незалежних елементарних трансляцій з векторами $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$. Сукупність таких трансляцій утворює ґратки Браве, а сукупність точок, що породжуються векторами **R**, і які періодично повторюються, називають кристалічною решіткою. Точкові перетворення α елементів просторової групи $\{\alpha / \mathbf{t}\}$ самі утворюють групу – точкову групу K. З (5.20) випливає, що важливою властивістю просторової групи є те, що ґратки просторової групи повинні залишатися інваріантними по відношенню до всіх перетворень точкової групи, що відповідають цій просторовій групі. Дійсно, якщо **R** – довільний вузол, допустима трансляція, тоді

$$\{\alpha / \mathbf{t}\}^{-1}\{\varepsilon / \mathbf{R}\}\{\alpha / \mathbf{t}\}=\{\varepsilon / \alpha^{-1}\mathbf{R}\} \qquad (5.23)$$

і точка з вектором $\alpha^{-1}\mathbf{R}$ разом із $\alpha\mathbf{R}$ за визначенням теж є вузол ґраток, оскільки група трансляцій – нормальній дільник групи G. Ця властивість і обмежує множину точкових груп: не всі обертання і інверсії залишають ґратку інваріантною. Оператори обертання утворюють лише 32 точкові групи, можливі в просторових групах. Обертальна частина всякої просторової групи відповідає одній з цих 32 точкових груп, і в той же час дозволяє класифікувати ґратки відповідними точковими групами, по відношенню до яких ці ґратки інваріантні.

5.5 Неелементарні трансляції

Підгрупа T елементарних трансляцій просторової групи G є її нормальним дільником, оскільки праві і ліві суміжні класи співпадають. Отже, групу G можна розкласти по T. Очевидно також, що два представники одного суміжного класу мають однакові точкові перетворення α, а представники різних суміжних класів – різні. Звідси випливає наступне: фактор-група G/T ізоморфна точковій групі K. Іншими словами, розкладання G в суміжні класи можна записати у вигляді:

$$\sum_{\alpha\in K} T\{\alpha / \mathbf{V}_\alpha\} \qquad (5.24)$$

де $\{\alpha / \mathbf{V}_\alpha\}$ – представник суміжного класу, що відповідає перетворенню α. Вектор $\mathbf{V}_\alpha$, пов'язаний з перетворенням α, завжди можна вибрати так, щоб він мав мінімальну довжину серед усіх можливих векторів, пов'язаних з перетворенням α. Тоді довільний елемент просторової групи можна записати таким чином:

$$\{\alpha/\mathbf{t}\} = \{\varepsilon/\mathbf{R}\}\{\alpha/\mathbf{V}_\alpha(\alpha)\} = \{\alpha/\mathbf{V}_\alpha(\alpha) + \mathbf{R}\} \tag{5.25}$$

Тут α пробігає по всіх матрицях точкової групи, а вектори $\mathbf{V}_\alpha(\alpha)$ визначаються через α, і вектор **R** незалежно від α пробігає по всіх векторах ґратки ($\mathbf{R} = \sum_i n_i \mathbf{a}_i$). Отже, просторова група визначена повністю, якщо окрім точкової групи і ґраток відомі ще так звані вектори неелементарних трансляцій $\mathbf{V}_\alpha(\alpha)$. Неелементарні трансляції $\mathbf{V}_\alpha(\alpha)$ залежать від вибору початку координат, пов'язаного з осями обертання. Можна показати [3], що якщо вибрати новий початок координат, зміщений відносно старого на деякий вектор $\mathbf{r_0}$, то перетворення $\{\varepsilon/\mathbf{r}_0\}$ здійснює ізоморфне перетворення типу $\{\alpha/\mathbf{t}\} \leftrightarrow \{\varepsilon/\mathbf{r}_0\}^{-1}\{\alpha/\mathbf{t}\}\{\varepsilon/\mathbf{r}_0\}$. Новостворена просторова група, очевидно, має ті ж ґратки і ту ж точкову групу. Змінилася тільки неелементарна трансляція. Тепер вона має вигляд:

$$\mathbf{V}'_\alpha(\alpha) = \mathbf{V}_\alpha(\alpha) + \alpha\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_0 \tag{5.26}$$

Існують просторові групи, в яких при відповідному виборі початку координат можна досягти $\mathbf{V}_\alpha(\alpha) = 0$ для всіх $\alpha \in K$. Такі групи називаються симорфними. У цих групах представники $\{\alpha/0\}$ в розкладанні на суміжні класи самі утворюють групу, ізоморфну K. Кристали з симорфними просторовими групами називаються симорфними. У деяких просторових групах при будь-якому $\mathbf{r_0}$ вектори $\mathbf{V}_\alpha(\alpha) = 0$ не для всіх $\alpha \in K$. Вектори $\mathbf{V}_\alpha(\alpha) \neq 0$ в цих групах можуть бути представлені як дроби векторів елементарних трансляцій **R**. В цьому випадку просторовій групі належать вже не всі точкові перетворення $\{\alpha/0\}$, а деякі α входять разом з трансляціями: гвинтові осі ($|\alpha|=1$) і відображення в площині ковзання ($|\alpha|=-1$). З 230 просторових груп 73 симорфні. Таким чином, для повного завдання просторової групи необхідно вказати наступні три її складові [1]:

1. Ґратку припустимих трансляцій **R**, тобто групу трансляцій Т. Завданням ґратки визначається клас Браве і кристалічна система.

2. Точкову групу К, вона є підгрупою голоедрії і визначає кристалічний клас.

3. Неелементарні трансляції, які обов'язково мають бути визначені для всіх елементів точкової групи. Тільки для симорфних груп можна всі $\mathbf{V}_\alpha$ вибрати рівними нулю.

5.6 Незвідні представлення групи трансляцій

Щоб побудувати незвідні представлення просторових груп, вивчимо спочатку незвідні представлення їх підгруп – груп трансляцій Т. Група трансляцій – нескінченна група, на неї безпосередньо не можна перенести результати, отримані для скінченних груп. Тому групу трансляції заміняють скінченною групою, накладаючи на трансляції так звані періодичні граничні умови, або умови Борна-Кармана. Вони зводяться до припущення $\{\varepsilon/\mathbf{a}_\mathrm{i}\}^{N_i}=\{\varepsilon/0\}$ або $\{T(\mathbf{a}_\mathrm{i})\}^{N_i}=E$, де N_i – довільне достатньо велике ціле число. Це означає, що весь нескінченний кристал розбитий на еквівалентні скінченні області (паралелепіпеди) з ребрами $N\mathbf{a}_\mathrm{i}$. При цьому еквівалентні точки кожної з областей мають абсолютно однакові фізичні властивості, тобто в цих точках є однаковими не лише кристалічний потенціал і хвильові функції, але й усі інші величини, так що трансляції $\{\varepsilon/N\mathbf{a}_\mathrm{i}\}$ нічим не відрізняються від $\{\varepsilon/0\}$. Введену таким чином область називають основною областю. Всі фізичні висновки не повинні залежати від розмірів основної області.

Введення основної області перетворює групу трансляцій T на скінченну групу порядку $N = N_1 N_2 N_3$. Як було показано вище, ця група абельова і дорівнює прямому добутку трьох циклічних підгруп порядку N_1, N_2, N_3 і, відповідно: $T = T_1 \times T_2 \times T_3$, де кожна T_i – циклічна група з утворюючим елементом $\{\varepsilon / \mathbf{a}_i\}$ порядку N_i. Оскільки кожна з груп T_i – циклічна, усі її незвідні представлення одновимірні, причому елементу порядку N_j можна поставити у відповідність будь-який з коренів ступені N_j з одиниці. Усі представлення унітарні. Всі N_j незвідних представлень групи T_i матимуть вигляд:

$$T_i^{(P)}\{\varepsilon / n_i \mathbf{a}_i\} = T_i^{(P)}\left(\{\varepsilon / \mathbf{a}_i\}^{n_i}\right) = \exp\frac{2\pi i}{N_i} P n_i ;$$
$$P = 0, 1, \cdots N_i - 1;\ n_i = 0, 1, \cdots N_j \tag{5.27}$$

де P характеризує незвідні представлення; n_i – ступень елементу; N_i – порядок групи, ступень кореня з одиниці, при якій $\{\varepsilon / \mathbf{a_i}\}^N = \{\varepsilon / 0\} = 1$.

Незвідні представлення усієї групи трансляції T отримаємо як добуток незвідних представлень кожної з підгруп:

$$T^{(P)}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = T^{(P)}\{\varepsilon / n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3\} =$$
$$= T^{(P_1)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_1\}^{n_1} \times T^{(P_2)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_2\}^{n_2} \times T^{(P_3)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_3\}^{n_3}$$

або, те ж саме:

$$T^{(P)}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = T_1^{(P_1)} \times T_2^{(P_2)} \times T_3^{(P_3)} = T^{(P_1 \times P_2 \times P_3)}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = T^{(P)}\{\varepsilon / n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3\} =$$
$$= T^{(P_1)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_1\}^{n_1} \times T^{(P_2)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_2\}^{n_2} \times T^{(P_3)}\{\varepsilon / \mathbf{a}_3\}^{n_3} = \exp 2\pi i\left(\frac{n_1 P_1}{N_1} + \frac{n_2 P_2}{N_2} + \frac{n_3 P_3}{N_3}\right) \tag{5.28}$$

де

$$R = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3;$$
$$P_1 = 0,\ 1, \cdots N_1 - 1;\ P_2 = 0,\ 1, \cdots N_2 - 1;\ P_3 = 0,\ 1, \cdots N_3 - 1;$$
$$n_1 = 1,\ 2, \cdots N_1;\ n_2 = 1,\ 2, \cdots N_2;\ n_3 = 1,\ 2, \cdots N_3$$

Трійка чисел P_1, P_2, P_3 пробігає N_1, N_2, N_3 значень відповідно, що відповідають N_1, N_2, N_3 незвідним представленням групи Т. Для коротшого запису можна ввести в розгляд зручніші позначення. Введемо поняття оберненої ґратки, визначуваної базисом векторів $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$, який будується на векторах $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ таким чином:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]}{\Omega_0};\ \mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]}{\Omega_0};\ \mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]}{\Omega_0} \tag{5.29}$$

де $\Omega_0 = \left(\mathbf{a}_1\left[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3\right]\right)$ – об'єм комірки, побудованої на векторах $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ – векторах прямих ґраток. Базисні вектори прямих і обернених ґраток ортогональні: $(\mathbf{a}_i\mathbf{b}_k) = 2\pi\delta_{ik}, \quad i,\ k = 1,2,3$. Ортогональність векторів $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_k$ перевіряється безпосередньо. Таким чином, базиси прямої і оберненої ґраток взаємно ортогональні, що справедливо для будь-яких ґраток. Об'єм оберненої ґратки $\Omega_b = \left(\mathbf{b}_1\left[\mathbf{b}_2\mathbf{b}_3\right]\right)$ можна виразити через об'єм прямої ґратки $\Omega_b = \dfrac{1}{\Omega_0}$ або $\Omega_b\Omega_0 = 1$.

Розглянемо вектор $\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3$, де

$$k_i = \frac{P_i}{N_j};\ P_i = 0, 1, \cdots N_j - 1;\ N_j = N_1, N_2\ N_3 \tag{5.30}$$

Вектор **k** заданий в просторі векторів оберненої ґратки. З врахуванням цього незвідні представлення групи трансляцій можна записати як

$$T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{R}) = T^{(\mathbf{k})}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = \exp i(\mathbf{kR}) \tag{5.31}$$

Число незвідних представлень дорівнює порядку групи $N = N_1N_2N_3$. Вектор **k** має розмірність $\left[L^{-1}\right]$, його називають хвильовим вектором. У більшості випадків можна вважати, що $N_1 = N_2 = N_3 = N$. Якщо $\mathbf{e_k}$ – орт представлення $T^{(\mathbf{k})}$, а $T(\mathbf{R})$ – оператор трансляції, то

$$T(\mathbf{R})\mathbf{e_k} = T\{\varepsilon / \mathbf{R}\}\mathbf{e_k} = \exp i\mathbf{kR} \cdot \mathbf{e_k} \qquad (5.32)$$

Таким чином, матричний елемент незвідного представлення групи трансляцій, що належить хвильовому вектору **k** оберненої ґратки, записується у вигляді

$$T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{R}) = T^{(\mathbf{k})}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = \exp i(\mathbf{kR})$$

де **k** – хвильовий вектор і індекс незвідного представлення, **R** – вектор прямих ґраток, елемент групи трансляції. Для будь-якої базисної функції групи трансляції, що перетворюється за незвідними представленнями хвильового вектора **k** маємо:

$$T(\mathbf{R})\psi(\mathbf{n}) = \psi(\mathbf{n} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{kR}}\psi(\mathbf{n}) \qquad (5.33)$$

Тут $\psi(\mathbf{n})$ еквівалентна $\mathbf{e_k}$.

5.7 Зона Бриллюена та її властивості

Два вектори $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ простору оберненої ґратки, що розрізняються на вектор $\mathbf{b} = l_1\mathbf{b}_1 + l_2\mathbf{b}_2 + l_3\mathbf{b}_3$, тобто вектор, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{b}$ де **b** – вектор оберненої ґратки, l_i – цілі числа, є еквівалентними. Очевидно, що $\mathbf{k}$ і $\mathbf{k}'$ характеризують одно і те ж незвідне представлення. В цьому випадку потрібне виконання умови:

$$T^{(\mathbf{k}')}(\mathbf{R}) = T^{(\mathbf{k}')}\{\varepsilon / \mathbf{R}\} = \exp i\mathbf{k}'\mathbf{R} = \exp i\mathbf{kR} \cdot \exp i\mathbf{bR} = \exp i\mathbf{kR} \qquad (5.34)$$

Таким чином, $\exp i\mathbf{bR} = 1$ для будь-якого вектору оберненої ґратки **b**, оскільки $\exp i\mathbf{bR} = \exp(2\pi i \times$ суму добутків цілих чисел), а представлення $T^{(\mathbf{k})}, T^{(\mathbf{k}')}$ еквівалентні. Умова (5.34) є умовою розбиття оберненого простору на еквівалентні комірки, й усі значення вектора **k** містяться в елементарній комірці з векторами $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$:

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3 \qquad (5.35)$$

де $k_i = \dfrac{P_i}{N}$ і значення $\mathbf{k}$, визначальних N незвідних представлень, можна вибрати у будь-якій з елементарних комірок оберненої ґратки. Як область зміни вектора $\mathbf{k}$ зручно вибрати таку однозв'язну область в просторі оберненої ґратки, яка містить в собі початок координат і для якої виконані умови:

1) ця область не містить еквівалентних векторів;

2) для довільного вектора оберненого простору в цій області знайдеться еквівалентний вектор. Цю область називають приведеною або просто зоною Брилюена.

Для векторів оберненої ґратки $\mathbf{b} = l_1\mathbf{b}_1 + l_2\mathbf{b}_2 + l_3\mathbf{b}_3$, а l_i – цілі числа, представлення $T^{(\mathbf{k})}$ і $T^{(\mathbf{k+b})}$ еквівалентні

$$T^{(\mathbf{k})} = T^{(\mathbf{k+b})}(\mathbf{R}) = \exp i\left[(\mathbf{k}+\mathbf{b})\mathbf{R}\right] = \exp i\mathbf{kR} = T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{R}) \qquad (5.36)$$

Таким чином, різні представлення можна будувати, примушуючи числа $k_i = \dfrac{P_i}{N}$ (i = 1, 2, 3) пробігати інтервал одиничної довжини. Цією умовою визначається область простору, в якій повинен знаходитися вектор **k**. Якщо вибрати $0 \le k_i \le 1$, то областю зміни вектора **k** буде паралелепіпед на базисних векторах $\mathbf{b}_i$. Але зазвичай беруть область максимально симетричну відносно початку координат, допускаючи тим самим негативні значення величин k_i. N^3 значень вектора **k** рівномірно розподілені по всій зоні, при $N^3 \to \infty$ щільність значень вектора **k** збільшуватиметься, поки повністю не заповнить усю зону Брилюена. Зону Брилюена визначають як область, обмежену площинами, які ділять навпіл вектори, що сполучають точку початку координат в оберненому просторі з усіма найближчими вузлами оберненої ґратки векторами $\mathbf{b}_i$, і ортогональними цим векторам (аналогічно побудові комірок Вігнера-Зейтца).

Як <u>приклад</u> розглянемо обернені ґратки кубічної системи [3].

1. Для примітивних кубічних ґраток базисні вектори $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}$ і ортогональні. Базисні вектори оберненого простору пропорційні їм: $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 = \mathbf{b}$; $|\mathbf{b}| = \dfrac{2\pi}{a}$. Обернена ґратка також є примітивною з постійною $2\pi/a$. Зона Брилюена – куб з ребром $2\pi/a$.

2. Для г.ц.к.-прямих ґраток базисні вектори є $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}(0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})$, $\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}(\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2})$, $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0)$, а оберненою ґраткою є о.ц.к.-решітка з базисними векторами $\mathbf{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(\bar{1}, 1, 1)$; $\mathbf{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(1, \bar{1}, 1)$; $\mathbf{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(1, 1, \bar{1})$, де $|\mathbf{b}| = 1$. Зона Брилюена – усічений октаедр.

3. Для прямої о.ц.к.-решітки з базисними векторами $\mathbf{a}_1 = \tfrac{1}{2}\mathbf{a}(1, 1, -1)$; $\mathbf{a}_2 = \tfrac{1}{2}\mathbf{a}(-1, 1, 1)$; $\mathbf{a}_3 = \tfrac{1}{2}\mathbf{a}(1, -1, 1)$ оберненою є г.ц.к.-решітка з векторами $\mathbf{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(0, 1, 1)$; $\mathbf{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(1, 0, 1)$; $\mathbf{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\mathbf{b}(1, 1, 0)$, де $|\mathbf{b}| = 1$. Зона Брилюена – ромбододекаедр.

При такому виборі зони Брилюена точкова симетрія оберненої ґратки співпадає з симетрією прямих ґраток. Насправді, нехай ортогональне перетворення 3-вимірного простору $\alpha \in K_R$, тобто, належить точковій групі перетворень голоедрії прямих ґраток. Разом з рівністю $(\mathbf{Rb}) = 2\pi n$, де $\mathbf{R}$ – вектор прямих ґраток (оскільки $\exp i\mathbf{bR} = 1$) ми маємо $(\alpha\mathbf{Rb}) = 2\pi m$, оскільки вектор α**R** – теж вектор прямих ґраток. Більше того, вектор $\alpha^{-1}\mathbf{R}$ також належить цій голоедрії. З цього випливає, що $(\alpha^{-1}\mathbf{Rb}) = (\alpha\mathbf{Rb}) = (\mathbf{R}\alpha^{-1}\mathbf{b}) = (\alpha\mathbf{bR}) = 2\pi \times$ (ціле число), оскільки скалярний добуток двох векторів не змінюється при застосуванні до них ортогонального перетворення. Із врахуванням того, що $(\mathbf{bR}) = 2\pi \times$ціле число, то, коли α пробігає всю групу K_R, α^{-1} також пробігає усю групу. Звідси випливає, що $K_R \subset K_b$. Повторюючи міркування для $\alpha \in K_b$, отримаємо, що $K_b \subset K_R$. Отже, група K_R співпадає з K_b. Отже, симетрія оберненої ґратки співпадає з симетрією прямої ґратки.

5.8 Зірка вектора k

Як було сказано раніше, загальний елемент просторової групи записується у вигляді $\{\alpha / \mathbf{R}\}$, де α – довільне ортогональне перетворення, **R** – вектор ґраток. Дія цього елементу на довільний вектор **r** записується у вигляді:

$$\mathbf{r}' = \{\alpha / \mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R} = T(\mathbf{R})(\alpha\mathbf{r}) \tag{5.37}$$

де T(**R**) – трансляції на вектор **R**.

Просторову групу G можна розглядати як отриману об'єднанням елементів T(**R**) групи трансляцій T з елементами α точкової симетрії – поворотів простих або інверсійних навколо одного з вузлів ґраток, що вважається початком. Добуток чистого повороту на трансляцію, очевидно, не комутують один з одним: $T(\mathbf{R})\alpha = \alpha T(\alpha^{-1}\mathbf{R})$, тобто

$$T(\mathbf{R})\alpha \neq \alpha T(\mathbf{R}) \tag{5.38}$$

оскільки

$$\alpha T(\mathbf{R})\mathbf{r} = \alpha(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \alpha\mathbf{r} + \alpha\mathbf{R}$$

Насправді: $\alpha T(\alpha^{-1}\mathbf{R})\mathbf{r} = \alpha(\mathbf{r} + \alpha^{-1}\mathbf{R}) = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$. З іншого боку, $T(\mathbf{R})\alpha\mathbf{r} = (\alpha\mathbf{r} + \mathbf{R})$, що і доводить (5.38). Таким чином, група G не є прямим добутком групи трансляції T на точкову групу K.

Нехай D – представлення просторової групи G. Оператор, що відповідає елементу групи $\{\alpha/\mathbf{R}\}$ позначимо $T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right)$. Оператори $T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right)$ повинні задовольняти тим же самим співвідношенням, що і елементи, тобто

$$\begin{aligned} T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right) &= T(\mathbf{R})T(\alpha); \\ T(\mathbf{R})T(\alpha) &= T(\alpha)T(\alpha^{-1}\mathbf{R}) \end{aligned} \tag{5.39}$$

Будуватимемо представлення просторової групи, виходячи з представлень групи трансляцій, тобто звузимо представлення групи G на підгрупи трансляцій T(**R**). Розглянемо яке-небудь представлення D(G) просторової групи розмірності S. Нехай базисом цього представлення є S функцій $\{\mathbf{e}_1 \cdots \mathbf{e}_S\}$. Виберемо базис представлення так, щоб кожна функція здійснювала незвідне представлення групи трансляцій T(**R**), і тому позначимо їх індексами **k**, де **k** – вектор зони Бриллюена. При дії оператора простої трансляції на базисний вектор $\mathbf{e}_\mathbf{k}$ отримуємо

$$T\left(\{\varepsilon/\mathbf{R}\}\right)\mathbf{e}_\mathbf{k} = T(\mathbf{R})\mathbf{e}_\mathbf{k} = T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{R})\mathbf{e}_\mathbf{k} \exp i\mathbf{k}\mathbf{R} \cdot \mathbf{e}_\mathbf{k}$$

У цьому базисі матриця оператора трансляцій діагональна і має вигляд:

$$T\left(\{\varepsilon/\mathbf{R}\}\right) = \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{R}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{R}} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{i\mathbf{k}_S\mathbf{R}} \end{pmatrix} \tag{5.40}$$

оскільки при трансляції в прямому просторі отримуємо нове значення хвильового вектора. Матриці незвідних представлень просторової групи, що відповідають чистим трансляціям $T\left(\{\varepsilon/\mathbf{R}\}\right)$ дають, таким чином, представлення групи трансляцій.

Встановимо зв'язок між незвідними представленнями групи трансляцій просторової групи і незвідними представленнями точкової групи цієї просторової групи. Для цього розглянемо дію більш узагальненого перетворення виду $\{\alpha/\mathbf{R}\}$, яке відповідає елементу просторової групи, на який-небудь орт $\mathbf{e_k}$, використовуючи зв'язок операторів (5.39), де орт $\mathbf{e_k}$ є ортом незвідного представлення групи трансляцій. Діючи цим оператором на орт $\mathbf{e_k}$, отримуємо новий орт $\mathbf{e}'_\mathbf{k}$:

$$\mathbf{e}'_\mathbf{k} = T\left(\{\varepsilon/\mathbf{R}\}\right)\mathbf{e_k} = T(\mathbf{R})T(\alpha)\mathbf{e_k} = T(\alpha)T(\alpha^{-1}\mathbf{R})\mathbf{e_k} = T(\alpha)e^{i\mathbf{k}\alpha^{-1}\mathbf{R}}\mathbf{e_k} =$$
$$= \exp(i\mathbf{k}\alpha^{-1}\mathbf{R})T(\alpha)\mathbf{e_k} = T(\alpha)\exp(i\alpha\mathbf{kR})\mathbf{e_k}$$

З'ясуємо тепер, як перетвориться вектор $\mathbf{e}'_\mathbf{k}$ при дії чистої трансляції на вектор решітки **m**, вважаючи його довільним вектором:

$$T\left(\{\varepsilon/\mathbf{m}\}\right)\mathbf{e}'_\mathbf{k} = T\left(\{\varepsilon/\mathbf{m}\}\right)T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right)\mathbf{e_k} = T\left(\{\alpha/\mathbf{m}+\mathbf{R}\}\right)\mathbf{e_k} =$$
$$= T(\alpha)T\left(\alpha^{-1}(\mathbf{m}+\mathbf{R})\right)\mathbf{e_k} = \exp^{[i\alpha(\mathbf{m}+\mathbf{R})]}T(\alpha)\mathbf{e_k} = e^{i\alpha\mathbf{km}}e^{i\alpha\mathbf{kR}}T(\alpha)\mathbf{e_k} = \tag{5.41}$$
$$= e^{i\alpha\mathbf{km}}\left[T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right)\mathbf{e_k}\right] = \exp(i\alpha\mathbf{km})\mathbf{e}'_\mathbf{k}$$

Таким чином, оператор $T\left(\{\alpha/\mathbf{R}\}\right)$, діючи на орт $\mathbf{e_k}$, переводить цей орт в орт $\mathbf{e}_{\alpha\mathbf{k}}$ і транслює на $e^{i\alpha\mathbf{kR}}$. Це говорить про те, що орт $\mathbf{e}'_\mathbf{k}$ перетворюється незвідне під дією групи трансляцій і належить до представлення $\alpha\mathbf{k}$. Звідси випливає, що власна функція $\{\alpha/\mathbf{R}\}\mathbf{e_k}$ з простору функцій $\{\mathbf{e_S}\}$ є власною функцією операторів трансляції T(**R**), що відповідає хвильовому вектору $\alpha\mathbf{k}$. Отже, загальне перетворення виду $\{\alpha/\mathbf{R}\}$ переводить орт $\mathbf{e_k}$ в орт $\mathbf{e}_{\alpha\mathbf{k}}$. Отже, якщо у базисі представлення D(G) просторової групи G входить орт $\mathbf{e_k}$, то в нього також входить і орт $\mathbf{e}_{\alpha\mathbf{k}}$, де α – перетворення з точкової групи $K \in G$. Сукупність усіх нееквівалентних векторів $\alpha\mathbf{k}$, де $\alpha \in K$, називається зіркою або орбітою вектора **k**. Кількість векторів в зірці називається її порядком. Якщо за допомогою усіх операцій $\alpha_i \in K$ отримують m різних векторів або m променів перетвореннями типу $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}; \mathbf{k}_2 = \alpha_1\mathbf{k}; ...\mathbf{k}_m = \alpha_{m-1}\mathbf{k}$, то говорять, що вектору **k** відповідає зірка m-того порядку. Зірка представлення інваріантна по відношенню до підгрупи трансляцій групи G, тобто разом з вектором **k** в зірці містяться і вектори $\alpha_i\mathbf{k}$. Усі вектори з набору $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} = T(\alpha_i)\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ належать різним незвідним представленням групи трансляцій.

Якщо сукупність векторів $\alpha_i\mathbf{k}$ вичерпує усю зірку представлення D, така зірка називається незвідною. Вона визначається повністю завданням вектора **k**, а інші отримуються застосуванням операції α з групи G. Тому незвідну зірку можна характеризувати одним вектором **k**. Звідна зірка, коли $\alpha_i\mathbf{k}$ не вичерпують усю зірку, може бути розщеплена на декілька незвідних. Точка **k** – точка загального типу, якщо при всіх $\alpha_i \in K$ утворюється g точок $\alpha_i\mathbf{k} = \mathbf{k}_i$, де g – порядок групи K.

5.9 Група вектора k

Візьмемо довільний вектор **k**, що належить зоні Брилюена, і розглянемо усі перетворення з просторової групи G, що залишають вектор **k** інваріантним (незмінним), або такі, що переводять його в йому еквівалентні. Ці перетворення складають підгрупу $H_{\mathbf{k}} \subset G$, і для $\forall h \in H_{\mathbf{k}}$ $h\mathbf{k} = \mathbf{k}$. Сюди входять:

1) усі перетворення підгрупи трансляцій, $T(\mathbf{R}) \subset H_{\mathbf{k}}$, при цьому фактор-група групи $H_{\mathbf{k}}$ по цій підгрупі T(**R**), $H_{\mathbf{k}}/T$, ізоморфна точковій групі $F_{\mathbf{k}}$ напрямків симетрії (базису). Ця група ($F_{\mathbf{k}}$) включає:

2) усі ортогональні перетворення $\alpha \in F_{\mathbf{k}}$, які або не міняють **k**, або переводять в еквівалентні $\alpha\mathbf{k} = \mathbf{k}$, тобто $F_{\mathbf{k}} \subset K$;

3) добуток цих перетворень на трансляції.

Оскільки всередині зони Брилюена немає жодної пари еквівалентних векторів, то для точок всередині зони Брилюена в групі $H_{\mathbf{k}}$ містяться тільки такі елементи, які не міняють вектор **k**. Якщо **k** лежить на межі зони, то в $H_{\mathbf{k}}$ входять також елементи, які переводять **k** в еквівалентний йому вектор $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{b}$. При **k** = 0 маємо $F_{\mathbf{k}} \square K$, $H_{\mathbf{k}} \square G$. Таку групу $H_{\mathbf{k}}$ назвемо групою вектора **k**. При цьому $H_{\mathbf{k}} \cong (F_{\mathbf{k}} \bigcup T(\mathbf{R})) \subset K \subset G$ (K – точкова група симетрії ґраток Браве, $F_{\mathbf{k}} \subset K$ – підгрупа ортогональних перетворень). Усі елементи групи $H_{\mathbf{k}} \subset K$, які не змінюють **k**, називаються малою групою.

Вивчимо властивості групи $H_{\mathbf{k}}$. Розкладемо просторову групу G за сукупностями лівих суміжних класів відносно $H_{\mathbf{k}}$, $G = \sum_i g_i H_{\mathbf{k}}$. Оскільки $H_{\mathbf{k}} \subset G$, то при розкладанні виберемо елементи $g_i \notin H_{\mathbf{k}}$, $g_i \in G$. Беремо спочатку саму підгрупу $H_{\mathbf{k}}$, потім елемент $g_2 \notin H_{\mathbf{k}}$, $g_2 \in G$, потім $g_3 \notin H_{\mathbf{k}}$, $g_3 \in G$, $\cdots$ $g_m \notin H_{\mathbf{k}}$, $g_m \in G$. Утворюємо сукупності $g_1 H_{\mathbf{k}}, g_2 H_{\mathbf{k}}, \cdots g_m H_{\mathbf{k}}$, де $g_1 = e$. Група $H_{\mathbf{k}}$– група інваріантних перетворень вектора **k**. Жоден з елементів сукупності $g_2 H_{\mathbf{k}}$ не міститься в $H_{\mathbf{k}}$. Отже, елемент g_2 не може залишати інваріантним вектор **k**, тобто усі перетворення виду $g_2 H_{\mathbf{k}}$, $g_2 \in G$ переводять вектор **k** в один і той же вектор $\mathbf{k}_2 = g_2 \mathbf{k}$ ($g_2 H_{\mathbf{k}} \mathbf{k} = g_2 \mathbf{k}$). Аналогічно, перетворення з інших представників розкладання переводять вектор **k** у вектори $\mathbf{k}_3 = g_3 \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_4 = g_4 \mathbf{k}, \cdots \mathbf{k}_m = g_m \mathbf{k}$. Усі ці вектори різні, оскільки суміжні класи не перетинаються і не містять загальних елементів. Оскільки суміжні класи вичерпують усю групу, створені вектори $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_m$ утворюють зірку вектора **k**. Група вектора **k**, належна цій зірці, може бути представлена у вигляді $H_{\mathbf{k}_i} = g_i H_{\mathbf{k}} g_i^{-1}$ [1], тобто усі групи зірки є спряженими. Отже, групи векторів зірки ізоморфні одна одній. Знаючи групу хвильового вектора $H_{\mathbf{k}}$ одного з променів, легко побудувати групу хвильового вектора будь-якого вектора $\mathbf{k}_i$ зірки $\{\mathbf{k}_i\}$. Група

$H_{\mathbf{k}_i}$ ізоморфна $H_{\mathbf{k}}$. Число променів зірки, тобто різних $\mathbf{k}_i$, дорівнює числу спряжених сукупностей в розкладанні $G = \sum_i g_i H_{\mathbf{k}}$, тобто індексу групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$. Між числом g елементів в K, порядком g' групи $H_{\mathbf{k}}$ і числом променів m існує співвідношення $g = g'm$. Точкова група $H_{\mathbf{k}}$ називається також локальною групою вектора **k** або когрупою.

5.10 Незвідні представлення просторової групи

Покажемо, що представлення групи хвильового вектору $H_{\mathbf{k}}$, $\Gamma^{(\alpha)}$, так зване мале представлення, однозначно визначає представлення D(G) просторової групи G з незвідною зіркою $\{\mathbf{k}\}$ [1].

Нехай ми маємо деяке представлення D(G) просторової групи, яке розкладене на незвідні представлення підгрупи трансляцій T(**R**). Нехай L – розмірність цього представлення, отже, матриця представлень групи трансляції в цьому просторі діагональна. У просторі L представлення D(G) виберемо ті орти, на яких реалізується одне і те ж представлення $T^{(\mathbf{k})}$ групи T(**R**). Група трансляцій діє на орти таким чином, що переводить орти $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ в орти $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$. Якщо до будь-якого вектора $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ застосувати перетворення з групи $H_{\mathbf{k}}$, групи хвильового вектора, ми знову отримаємо орт перетворень групи трансляцій. Нехай $L_{\mathbf{k}}$ є лінійний підпростір, утворений цими ортами. Отже, в просторі $L_{\mathbf{k}}$ реалізується деяке представлення $\Gamma(H_{\mathbf{k}})$ групи $H_{\mathbf{k}}$, необов'язково незвідне. Аналогічно, в L можна виділити підпростори $L_{\mathbf{k}_i}$, в кожному з яких реалізується одне і те ж представлення групи відповідного вектора $\mathbf{k}_i$: $\forall \mathbf{k}_{m_i} = h_i \mathbf{k}_i \ \forall h_i \in H_{\mathbf{k}_i}$. Кожне з $L_{\mathbf{k}_i}$ може бути отримано з $L_{\mathbf{k}}$ операцією h_i: $L_{\mathbf{k}_i} = h_i L_{\mathbf{k}}$. У кожному з $L_{\mathbf{k}_i}$ реалізуються таким чином еквівалентні представлення ізоморфних груп $H_{\mathbf{k}_i}$ зірки вектора **k**.

Покажемо, що якщо представлення D(G) є незвідним відносно підгрупи трансляцій в просторі L, то з цього випливає, що в кожному з підпросторів $L_{\mathbf{k}_i}$ реалізуються також незвідні представлення групи $H_{\mathbf{k}_i}$ відповідного вектора $\mathbf{k}_i$. Насправді, припустимо зворотне, тобто, що в $L_{\mathbf{k}}$ можна виділити підпростір, інваріантний відносно групи $H_{\mathbf{k}}$, тобто, припустимо, що незвідні представлення $H_{\mathbf{k}}$ реалізуються не в просторі $L_{\mathbf{k}}$, а в просторі $L'_{\mathbf{k}} \subset L_{\mathbf{k}}$. Діючи на орти простору $L'_{\mathbf{k}}$ операціями $T(g_i)$, $g_i \in G$, отримуємо орти підпросторів $L'_{k_i} : L'_{\mathbf{k}_i} = T(g_i) L'_{\mathbf{k}}$ для $\forall g_i \in G$. У такому разі з підпросторів $L'_{\mathbf{k}_i}$ можна скласти пряму суму підпростору $L'_{\mathbf{k}}$: $L'_{\mathbf{k}} = \sum^{\oplus}_{\mathbf{k}_i} L'_{\mathbf{k}_i} = L'_{\mathbf{k}_1} \oplus L'_{\mathbf{k}_2} \oplus \cdots \oplus L'_{\mathbf{k}_m}$, тобто сума підпросторів $L'_{\mathbf{k}_i}$ утворюють простір $L'_{\mathbf{k}}$, інваріантний відносно перетворень усієї просторової групи, і при перетвореннях $g_i \in G$ кожен з підпросторів $L'_{\mathbf{k}}$ переходить або в себе при $g_i = e$, або в який-небудь інший підпростір $L'_{\mathbf{k}_i}$. Усі простори $L_{\mathbf{k}_i} \subset L$ по побудові і $L = L_{\mathbf{k}} \oplus L_{\mathbf{k}_1} \oplus L_{\mathbf{k}_2} \oplus \cdots \oplus L_{\mathbf{k}_m}$. З іншого боку, усі $L'_{\mathbf{k}_i} \subset L_{\mathbf{k}_i}$ по припущенню, і усі $L'_{\mathbf{k}} = \sum^{\oplus}_{\mathbf{k}_i} L'_{\mathbf{k}_i} = L'_{\mathbf{k}_1} \oplus L'_{\mathbf{k}_2} \oplus \cdots \oplus L'_{\mathbf{k}_m}$. Значить, $L' \subset L$, а, отже, представлення D(G), реалізоване в L, є звідним. Але D(G) – незвідне представлення і простір L не може мати підпросторів. Отже, в кожному підпросторі $L_{\mathbf{k}_i}$ може реалізуватися тільки незвідне представлення $H_{\mathbf{k}}$. Таким чином, представлення D(G) є $D_{\mathbf{k}}$, реалізоване в $L_{\mathbf{k}_\mathrm{i}}$, і є незвідним. Кожне незвідне представлення $D_{\mathbf{k}}$ визначається зіркою вектора **k** і деяким незвідним представленням $\Gamma^{(\alpha)}$ групи $H_{\mathbf{k}}$ хвильового вектору. Позначимо їх $D^{(\alpha)}_{\mathbf{k}}$. Порядок $D^{(\alpha)}_{\mathbf{k}}$ дорівнює добутку порядків n_α незвідного представлення $\Gamma^{(\alpha)}$ групи $H_{\mathbf{k}}$ і m – числа векторів в зірці $n_{\mathbf{k}\alpha} = n_\alpha m$. Представлення повної просторової групи G визначається, таким чином, через незвідні представлення $\Gamma^{(\alpha)}$ групи хвильового вектору $H_{\mathbf{k}}$, $\Gamma^{(\alpha)}(H_{\mathbf{k}})$.

5.11 Незвідні представлення групи вектора k. Типи векторів k в зоні Брилюена

Встановимо, які незвідні представлення $\Gamma^{(\alpha)}(H_{\mathbf{k}})$ групи хвильового вектора $H_{\mathbf{k}}$ можуть реалізуватися в просторі $L_{\mathbf{k}}$, оскільки на усі можливі незвідні представлення групи $H_{\mathbf{k}}$ мають бути накладені деякі обмеження. Насправді, оскільки до групи хвильового вектора входять перетворення трансляцій на вектори ґраток, то, за визначенням, увесь підпростір $L_{\mathbf{k}}$ складається з власних векторів трансляцій $\mathbf{R}$ з власними значеннями $\exp(i\mathbf{kR})$. Тому матриця представлення, що відповідає трансляції, повинні мати вигляд для цього вектора $\mathbf{k}$:

$$\Gamma^{(\alpha)}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{kR}} E_{n\alpha} \tag{5.42}$$

тобто бути діагональною (див. 5.40), де $E_{n\alpha}$ – одинична матриця. Таким чином, допустимими незвідними представленнями $\Gamma^{(\alpha)}(H_{\mathbf{k}})$ групи $H_{\mathbf{k}}$ будуть ті, в яких трансляції на вектор $\mathbf{R}$ відповідають матриці незвідного представлення (5.42). Це так звані нормальні або допустимі представлення групи $H_{\mathbf{k}}$, тобто ті, що відповідають цій матриці. Якщо група G не має невласних трансляцій на вектори $\mathbf{m} \neq \mathbf{R}$, то $H_{\mathbf{k}}$ складається зі всіляких добутків елементів групи T($\mathbf{R}$) і точкової групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$, яка у свою чергу складається з тих елементів точкової групи $K \subset G$, яка залишає інваріантним вектор $\mathbf{k}$: $\forall g_i \in F_{\mathbf{k}}\ \ g_i\mathbf{k} = \mathbf{k}$; $F_{\mathbf{k}} \subset K \subset G$. Оскільки усі вектори з $L_{\mathbf{k}}$ є власними векторами операції трансляції з одним і тим же власним значенням, а кожне $\mathbf{k}_i$ входить тільки один раз, що говорить про незвідність представлення відносно $H_{\mathbf{k}}$, то з незвідності представлення відносно $H_{\mathbf{k}}$ виходить незвідність відносно точкової групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$. Таким чином, класифікація незвідних представлень $H_{\mathbf{k}}$ в цьому випадку проводиться по незвідним представленням точкової групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$.

Отже, незвідні представлення D(G) просторової групи G визначаються зіркою вектора **k**, $\{\mathbf{k}\}$ і нормальними або допустимими незвідними представленнями групи $H_{\mathbf{k}}$, які класифікуються за незвідними представленнями точкової групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$ хвильового вектора **k**. При цьому $H_{\mathbf{k}} \square F_{\mathbf{k}} \subset K \subset G$.

Проаналізуємо можливі типи зірок в зоні Бриллюена і їх положення в зоні [3]. Якщо **k** – деякий хвильовий вектор в зоні Бриллюена, що має певну групу $H_{\mathbf{k}}$, то при переході в деяку нескінченно близьку область – в точку зони з вектором $\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}$, де $\boldsymbol{\kappa}$ – нескінченно малий вектор, групи цих векторів будуть пов'язані співвідношенням: $H_{\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}} = H_{\mathbf{k}} \bigcap H_{\boldsymbol{\kappa}}$. Таким чином, групи, що лежать в околі $H_{\mathbf{k}}$, також є її підгрупами. Отже, в нескінченно малій околі точки загального типу знаходяться лише точки загального типу і точки загального типу можуть бути тільки внутрішніми точками зони Брилюена. З цього ж співвідношення випливає, що в нескінченно малій околі будь-якої точки завжди є точки загального типу. Для цього досить вибрати вектор $\boldsymbol{\kappa}$ таким, що лежить в загальному напрямку, що завжди можливо. Симетричними точками можуть бути лише точки, що належать межам областей, заповнених точками загального типу. Оскільки перетворення симетрії точкових груп – це обертання і обертання з інверсією, такі області повинні обмежуватися площинами. Симетричні точки утворюють деякі симетричні комплекси, тобто сукупність точок з векторами, що мають однакові групи $H_{\mathbf{k}}$. Зустрічаються симетричні площини, симетричні лінії і симетричні точки.

Питання для самоконтролю

1. Як будуються решітки Браве? Що таке кристал? Що таке точкова група симетрії решітки Браве? Чому існують умови сумісності, який принцип відображають ці умови?

2. Які осі симетрії і чому можливі у кристалах? Що таке голоедрія? Яке її походження? Які міркування лежать в основі появи симетрії напрямків (симетрії базису) у кристалах?

3. Чи є трансляції групою? Якщо так, то чому?

4. Що таке дійсна афінна група перетворень? Чому афінні перетворення простору утворюють групу?

5. Що розуміється під просторовою групою симетрії? Чому трансляції у просторовій групи створюють підгрупу? Чому ця підгрупа інваріантна дійсної афінної групи?

6. Чому незвідні представлення групи трансляції є одномірні? Які наслідки цього? Яким чином визначають обернену ґратку?

7. Як визначають хвильовий вектор? Чому симетрія прямої ті оберненої ґраток співпадають?

8. Як визначається та як будується зона Брилюена? Які основні властивості має ця зона? Чім відрізняється друга, третя і т.д. зони Брилюена від першої?

9. Що означає звідність і незвідність зірки вектора? Чому незвідні представлення просторовій групи визначаються незвідною зіркою хвильового вектору?

10. Як класифікуються незвідні представлення просторової групи? Які типи хвильових векторів існують в зоні Брилюена?

Розділ VI

Застосування до зонної теорії твердих тіл

6.1 Двовимірний випадок

Розглянемо приклад одноатомного кристала з квадратними ґратками на площині. В цьому випадку зона Бриллюена – квадрат із стороною $2\frac{\pi}{a}$, де **a** – постійна прямих ґраток. В цьому випадку точковою групою K буде група D_4, що складається з восьми елементів. Оскільки вектор **k** повністю визначає свою зірку, то для класифікації незвідних представлень просторової групи досить розглянути восьму частину квадрата.

1). Нехай точка k (кінець вектора **k**) є точкою загального типу, тобто точка, яка не лежить на елементі симетрії (рис. 6.1 [26]). Діючи на $\mathbf{k}$ усіма операціями обертання α_i групи K, отримуємо точки $k_i = \alpha_i k$ (кінці векторів $\mathbf{k}_i = \alpha_i \mathbf{k}$). Усі ці точки $k_i = \alpha_i k$ різні, оскільки точка **k** – точка загального типу. Таким чином отримуємо зірку вектора **k**.

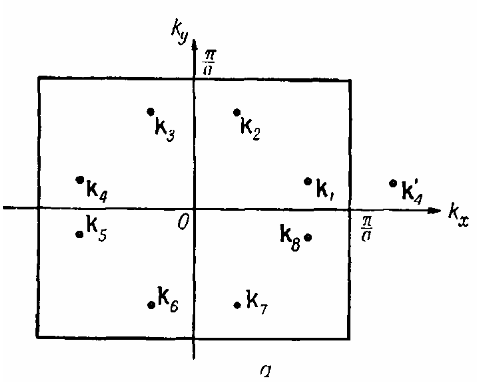


Рис. 6.1 [26] Зона Брилюена квадратних ґраток

2). Це не виконується для особливих точок зони Брилюена – симетричних точок, що знаходяться на елементах симетрії (рис. 6.2). В цьому випадку два або більше векторів стають ідентичними. Це може статися в трьох випадках: а) якщо вони лежать на осі обертання або площині симетрії; б) відрізняються один від одного вектором оберненої ґратки; в) виконується одночасно а) і б). У квадратних ґратках є шість особливих точок (див. рис. 6.2 [26]). З них Г, Δ, Σ – це випадок а), Z – випадок б) X, M – випадок в).

Знайдемо незвідні представлення різних точок як загального типу, так і симетричних. Вектор **k** повністю визначає свою зірку. Точковою групою К буде група D_4. Застосування перетворень з групи D_4 для точки k, що не лежить на елементах симетрії (вектор OA, точка загального типу), дає зірку з 8 векторів (рис. 6.3 [1]). Базисні функції такого перетворення утворюють незвідні представлення просторової групи G, оскільки далі це представлення не розкладається на звідні частини: кожен $\mathbf{k}_i$ входить в розкладання тільки один раз. В даному випадку при застосуванні до такого вектора перетворень, що входять до групи D_4,

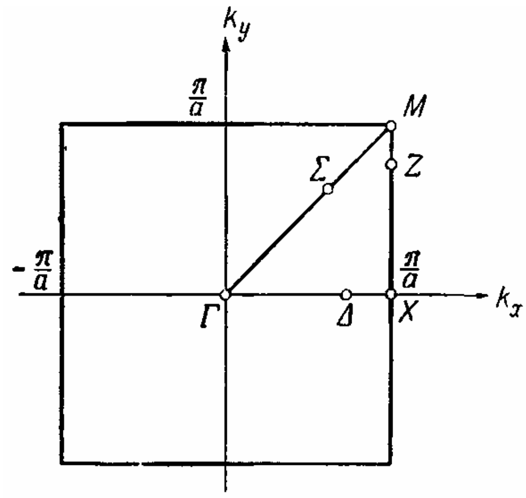


Рис. 6.2 [26]. Зона Брилюена квадратних ґраток з особливими точками

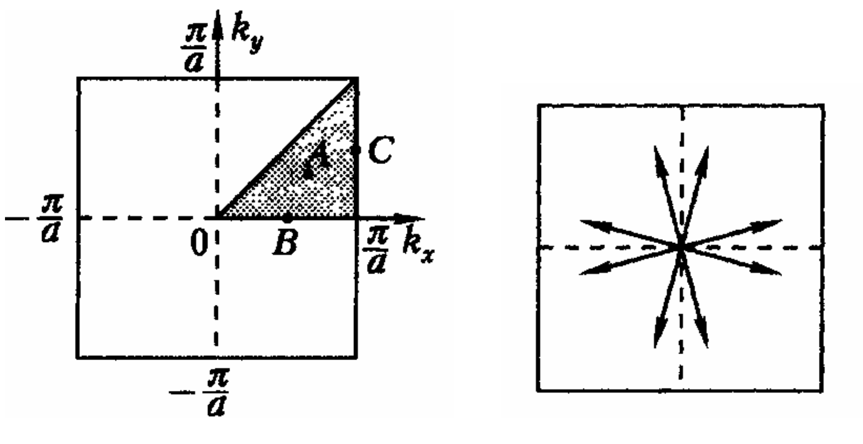


Рис. 6.3 [1] Положення точки загального типу (вектор OA) в зоні Брилюена і зірка вектора OA

отримуємо зірку з 8 векторів. Сукупність базисних векторів має симетрію групи квадрата D_4 □ C_{4v}. Група перетворень $F_{\mathbf{k}}$, що залишають цей вектор **k** інваріантним, містить тільки один елемент – E, і група $H_{\mathbf{k}}$ – група вектора **k** – в даному випадку співпадає з групою трансляцій T(**R**). Цьому вектору **k** відповідає одне незвідне представлення $D_{\mathbf{k}1}$ групи G восьмого порядку. У цьому представленні матриці трансляції будуть діагональними, елементами їх будуть $\exp i\mathbf{k}_i\mathbf{a}$, де i = 1, 2, ...8 (див. 5.40).

Розглянемо вектор **k**, кінець якого лежить на осі k_x, точку Δ. В цьому випадку група $F_{\mathbf{k}} \subset K$ містить, окрім тотожного елементу E, операцію відображення в площині *xz*. Вона ізоморфна групі C_2, що має два незвідних представлення першого порядку (симетричне і антисиметричне). Отже, зірка вектора $\Delta_{\mathbf{k}}$ складається з чотирьох векторів (рис. 6.4 [1]). Точці відповідатимуть два незвідних представлення четвертого порядку: $D_{\mathbf{k}}^{(1)}$, $D_{\mathbf{k}}^{(2)}$, оскільки порядок незвідного представлення є добуток порядку незвідного представлення $\Gamma^{(\alpha)}$ групи $H_{\mathbf{k}}$ і m – числа векторів зірки. Матриці, що відповідають трансляціям, співпадають, елементи інших матриць відрізняються знаком, $F_{\mathbf{k}} \square C_2$. Для точки Z на межі зірка також складатиметься з чотирьох векторів (рис. 6.4), інші чотири вектори будуть еквівалентні отриманим.

Розглянемо точку Г (0), **k** = 0, середину зони Бриллюена (рис. 6.2). Група $F_{\mathbf{k}} \subset K$ співпадає з усією групою D_4. Тому вектора **k** = 0 відповідає стільки різних незвідних представлень, скільки їх у групи D_4, тобто два 2-мірних і чотири одновимірних Порядок представлень $D_0^{(\alpha)}$ співпадає з порядком D_4. Трансляціям T(**R**) відповідають одиничні матриці; $D_0^{(\alpha)}(\mathbf{R})$ співпадають з відповідними матрицями незвідних представлень групи D_4.

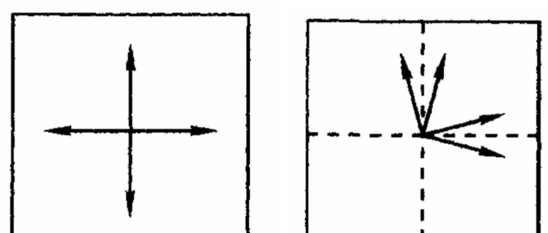


Рис.6.4 [1] Зірка вектора Δ і точки Z на межі зони

Групу хвильового вектора, що закінчується на поверхні, найпростіше отримати, якщо побудувати усі вектори, тотожні даному і такі, що мають ту ж довжину. Група фігури, що вийшла таким чином, і буде групою хвильового вектора. Для довільного вектора на поверхні ця група утримує площини симетрії. Наприклад, група симетрії точки M – та ж, що і точки, Г, оскільки точка M знаходиться у вершині квадрата (рис. 6.2). При перетвореннях з групи D_4 точка M або залишається на місці, або переходить в іншу вершину квадрата. Але оскільки вершини відстоять одна від одної на вектор оберненої ґратки, тобто по суті усі вершини еквівалентні, то точка M перетвориться сама в себе. Тому точкова група симетрії точки M співпадає з групою F точки Г, тобто з групою D_4.

6.2 Тривимірний випадок

Як 3-вимірний приклад виберемо прості кубічні ґратки, для яких зона Брилюена є кубом з ребром $2\dfrac{\pi}{a}$. Оскільки вектор **k** повністю визначає свою зірку, то для класифікації незвідних представлень просторової групи досить розглянути 1/8 отриманого куба. Тут ми маємо справу з точковою групою O_h. Тому в зірці довільного вектора **k** налічується 48 векторів $\mathbf{k_i}$. На рис. 6.5 [2] показані особливі точки, осі і площини і їх позначення, прийняті у фізиці твердого тіла. Точкова група O_h має три осі 4-ого порядку – осі Δ, що йдуть в напрямку [100], чотири осі 3-ого порядку – осі Λ в напрямку [111] і шість осей другого порядку – осі Σ в напрямку [110]. Якщо побудувати зірку вектора **k** кожній з цих осей, отримаємо відповідно до 6, 8 і 12 променів. До елементів симетрії відносяться також площини $\Delta\Sigma,\ \Lambda\Sigma,\ \Lambda\Delta$. Точки симетрії усередині зони – внутрішні точки. Внутрішні точки на осях Λ, Δ, Σ позначають тими ж буквами. На поверхні зони Бриллюена знаходяться зовнішні точки. Точки виходу осей Λ, Δ, Σ на поверхню позначають буквами X, R, M відповідно. Ребра куба позначають через T. Незвідні представлення групи вектора **k** позначають тими ж буквами, що і самі елементи симетрії. У даному випадку має сенс для деяких точок спочатку визначити групу симетрії особливих точок, а потім, скориставшись відомим співвідношенням між кількістю променів зірки, порядком групи особливої точки і порядком групи G, визначить зірку вектора **k** особливої точки і напрямку.

а) група вектора $\mathbf{k}_{\Delta}$, або просто Δ, має порядок 8, тому зірка точки

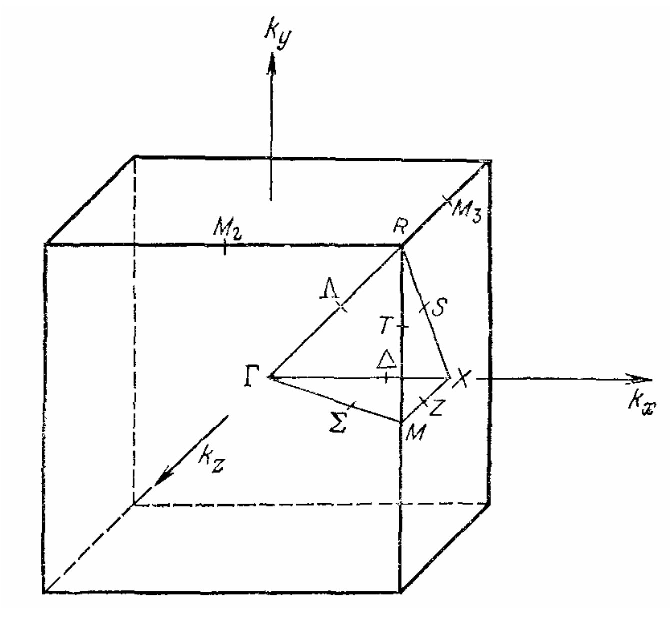


Рис. 6.5. [2] Зона Брилюена простих кубічних ґраток

складається з 6 променів. Це пов'язано з тим, що вісь Δ є віссю 4-го порядку, отже, вона містить осі C_4, C_4^2, C_4^3, $C_4^4 = E$. Координатні площини σ_{xy}, σ_{xz} входять в Δ, тобто містять її. Оскільки Δ – вісь 4-го порядку, то є ще 2 діагональні площини σ_d, σ_d', що також містять вісь Δ. Інших елементів симетрії куба, що переводять точки Δ самих в себе, немає. Таким чином група Δ ізоморфна групі $C_{4v} \sim D_4$. Вона має 8 елементів, розподілених по 5 класах. Незвідні представлення групи $F_{\mathbf{k}}$, в даному випадку групи Δ, і називають малим представленням. Тут група $F_{\mathbf{k}} \sim C_{4v} \sim D_4$ і забезпечує перетворення точки Δ на осі k_x саму в себе.

б) група точки Λ на осі Λ. Група Λ – це перетворення точки Λ в себе. Вісь Λ – вісь 3-его порядку, тому в групу Λ входять C_3, C_3^2, $C_3^3 = E$ і три діагональні площини σ_d, що проходять через Λ. Група Λ ізоморфна групі C_{3v} з шести елементів, тому зірка містить 8 променів.

в) група Σ. Точка Σ розташована на осі Σ 2-го порядку, до групи Σ входять осі C_2, $C_2^2 = E$ і дві площини σ_{xz}, σ_d, що містять цю точку (чи вісь). Тому точка Σ має 4 елементи: C_2, E, σ_z, σ_d і ізоморфна групі C_{2v}, зірка вектора $\mathbf{k}_{\Sigma}$ складається з 12 променів.

г) група T, точок T ребер куба. На кожному ребрі по дві таких точки, всього їх 24 на 12 ребрах. Точки T перетворяться в себе при тотожному перетворенні E і при відображенні в площині σ_d, яка проходить через середину грані (перпендикулярно їй). Вони містять 2 ідентичні точки T на протилежних ребрах. Діагональні площини, що проходять через ребро з точкою T, містять цю точку. Точка T – не внутрішня, і до її групи входить трансляція на вектор оберненої ґратки **b**, що забезпечує перетворення точок T в точки T. Отже, група T містить ті ж елементи, що і група Δ, вони ізоморфні.

д) точка S. Групи, що відповідають точкам Σ і S, – ізоморфні. Точка S лежить на осі 2-го порядку, в неї входять C_2, $C_2^2 = E$ і площини симетрії σ_{xz} і перпендикулярна їй площина дзеркального відображення σ_h (площина SX). Точка S має 4 елементи: C_2, E, σ_z, σ_d і ізоморфна групі C_{2v}, зірка вектора $\mathbf{k}_S$ складається з 12 променів.

е) точка Z лежить на осі 2-го порядку, на одній з граней зони Бриллюена, в неї входять C_2, $C_2^2 = E$, площини симетрії σ_{xz} і перпендикулярна їй площина дзеркального відображення σ_h (площина SX). Поворот на кут π навколо $\mathbf{k}_z$ переводить її в ідентичну точку на протилежній грані, віддалену на вектор оберненої ґратки. Група точки Z має 4 елементи, ізоморфна C_{2v} і співпадає з групами точок Σ та S.

ж) точка R, вершина зони Бриллюена, так само як і точка Г, має повну симетрію групи O_h по аналогії з 2-мірним випадком. Групи Г і R мають 48 елементів, зірки цих точок складаються з одного променя.

з) точка X. Гранична точка на осі 4-го порядку. Порівняно з точкою Δ має додаткову інверсію, де інверсована точка відстоїть на вектор оберненої ґратки і відображається на протилежну грань. Групою точки X є група D_{4h}, що має 16 елементів. Тому зірка вектора $\mathbf{k}_X$ складається з 3 променів.

и) точка M. Гранична точка в площині дзеркального відображення σ_h (площина SX) і на осі 2-го порядку Σ. Групою точки M є група D_{4h} з 16

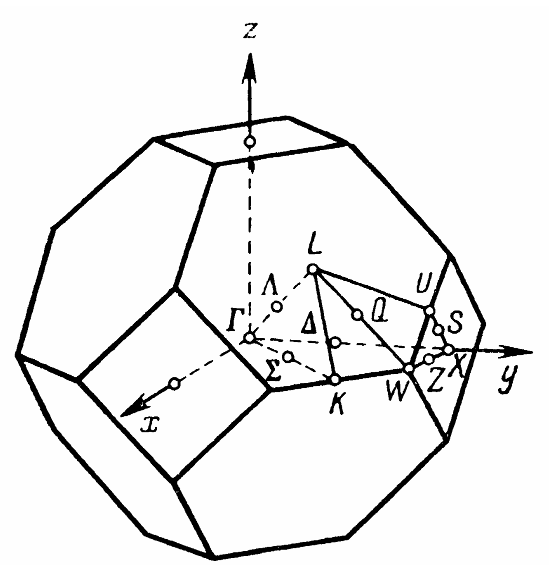


Рис. 6.6. [3] Зона Брилюена об'ємно-центрованої оберненої ґратки

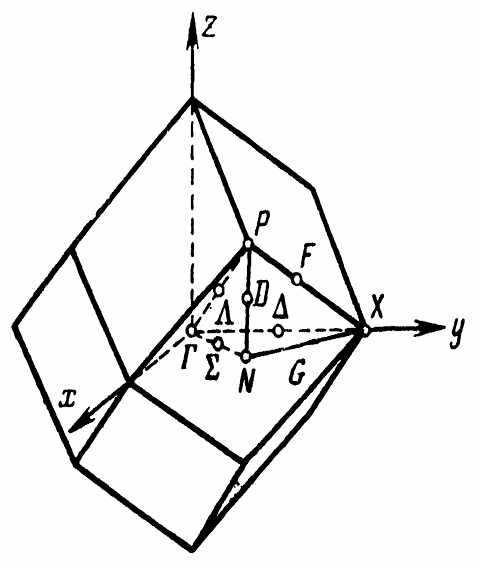


Рис. 6.7. [3] Зона Брилюена гранецентрованої оберненої ґратки

елементів. Зірка точки має 3 променя.

Зона Брилюена гранецентрованих прямих ґраток – об'ємноцентрованих обернених – і її симетричні точки показана на рис. 6.6 [3], а на рис. 6.7 [3] те ж показане для об'ємноцентрованої прямої (гранецентрованої оберненої). Максимальна симетрія точкової групи обох ґраток є група O_h. Групи симетрії особливих точок і напрямків в цих ґратках можна встановити по аналогії з тим, як це було виконано для простих кубічних ґраток (см, наприклад [7] Р. Нокс, А. Голд. «Симметрия в твёрдом теле», «Наука», 1970 р., с. 187-208). Групи симетрії особливих точок і напрямків (рис. 6.5 [2]) в оберненому просторі для простих кубічних ґраток приведені в таблиці 6.1.

Таблиця 6.1 Симетрія особливих точок і напрямків простих кубічних ґраток

Точка і її координати [6]	**Точкова група [6]**	**Кількість променів m**	**Порядок групи хвильового вектора g_k**
$\Gamma(0, 0, 0)$	O_h	1	48
$\Delta\ (0, 0, k_z)$	C_{4v}	6	8
$T\left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$	C_{4v}	6	8
$\Lambda(k_x, k_y, k_z)$	C_{3v}	8	6
$\Sigma(k_x, k_y, k_z)$	C_{2v}	12	4
$S\left(0, k_y, \frac{\pi}{2a}\right)$	C_{2v}	12	4
$Z\left(0, k_y, \frac{\pi}{2a}\right)$	C_{2v}	12	4
$R\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$	O_h	1	48
$X\left(0, 0, \frac{\pi}{a}\right)$	D_{4h}	3	16
$M\left(0, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$	D_{4h}	3	16

Нарешті, розглянемо послідовність знаходження незвідних представлень просторової групи G.

1. Встановлюється повна точкова група K симетрії оберненої ґратки,

яка відповідає симетрії голоедрії прямих ґраток.

2. Встановлюється точкова група $F_{\mathbf{k}} \subset K$ довільного променя $\mathbf{k}$ зірки, залежної від положення точки $\mathbf{k}$ в оберненому просторі:

$$\forall \alpha_i \in F_{\mathbf{k}} \;\; \alpha_i \mathbf{k} = \mathbf{k}_i$$

Елементи групи $F_{\mathbf{k}} \subset K$ залишають вектор $\mathbf{k}$ інваріантним.

3. Встановлюється точкова група хвильового вектора $\mathbf{k}$ $H_{\mathbf{k}} \sim F_{\mathbf{k}}$; $H_{\mathbf{k}} = F_{\mathbf{k}} \bigcup T(\mathbf{R})$; $H_{\mathbf{k}}\mathbf{k} = \mathbf{k}$.

4. Встановлюються нормальні (допустимі) представлення групи $H_{\mathbf{k}}$.

5. Будуються або беруться з таблиці незвідні представлення допустимих представлень групи $H_{\mathbf{k}}$ з цією трансляцією.

6. Будуються представлення групи $H_{\mathbf{k}}$: $\Gamma(H_{\mathbf{k}}) = \Gamma\{T(\mathbf{R})\} \bigcup \Gamma(F_{\mathbf{k}})$.

7. За цими даними відновлюється представлення групи G.

Таким чином, незвідні представлення групи G характеризуються: сукупністю векторів $\mathbf{k}$ зірки; незвідними представленнями групи симетрії хвильового вектора. Розмірність незвідного представлення групи G рівна добутку числа векторів $\mathbf{k}$ в зірці на розмірність представлення групи $H_{\mathbf{k}}$.

6.3 Електрон у періодичному полі решітки

Теорія груп дозволяє розглянути зонну теорію твердого тіла із загальних позицій. Виходитимемо з хвильових функцій, що є рішенням стаціонарного рівняння Шредінгера, яке в одноелектронному наближенні має вигляд

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (6.1)$$

Задача про електрони в твердому тілі в принципі є багатоелектронним завданням, оскільки повний гамільтоніан твердого тіла містить не лише одноелектронні потенціали, що описують взаємодію електронів з масивними атомними ядрами, але і парні потенціали, що описують взаємодію між електронами. У наближенні незалежних електронів (внаслідок так званого одноелектронного адіабатичного наближення) ця взаємодія враховується за допомогою ефективного одноелектронного потенціалу $V(\mathbf{r})$.

Найбільш характерною рисою потенціальної енергії $V(\mathbf{r})$ для електрона в кристалі являється його симетрія: потенціал електрона повинен мати ту ж симетрію, що і сам кристал. Зокрема, функція $V(\mathbf{r})$ має бути інваріантною під дією будь-якої трансляції, яка поєднує кристал сам з собою. Отже

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

де $\mathbf{R}$ – вектор ґраток, $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, n_i – цілі числа, $\mathbf{a_i}$ – вектори трансляції. Таким чином, вимагається знайти рішення рівняння Шредінгера з потенціалом, що має повну просторову симетрію ґраток, тобто припускаємо, що для ефективного потенціалу і гамільтоніана справедливе виконання умови:

$$\begin{aligned} V\left(\{\alpha/\mathbf{a}\}\mathbf{r}\right) &= V(\mathbf{r}) \\ H\left(\{\alpha/\mathbf{a}\}\mathbf{r}\right) &= H(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{6.2}$$

1°. Якщо в кристалі відсутня яка-небудь симетрія, окрім трансляції, то, як показав Блох, будь-яке рішення таким чином поставленої задачі повинне мати вигляд плоскої хвилі з хвильовим вектором **k**, модульованою функцією $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, залежної від **k** і такої, що має ту ж періодичність, що кристалічний потенціал, тобто функцією виду:

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp i\mathbf{kr} \cdot u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{6.3}$$

де $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – періодична з періодом ґраток функція, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$, а хвильовий вектор **k** – квазіімпульс електрона. Вид функцій $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ обумовлений тільки трансляційною симетрією кристала. Дійсно, оскільки $V(\mathbf{r}+\mathbf{R})=V(\mathbf{r})$, то звідси випливає, що по відношенню до операцій трансляцій оператор Гамільтона задовольняє умові (6.2), яка в даному випадку має вигляд:

$$T(\mathbf{R})H(\mathbf{r}) \equiv H(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = H(\mathbf{r})T(\mathbf{R})$$

Тому для будь-якого вирішення $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ рівняння (6.1) маємо також

$$H\left(T(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) = E\left(T(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) \tag{6.4}$$

З функцій $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ таким чином можна побудувати іншу власну функцію оператора Н, що відповідає тому ж власному значенню енергії Е. При нормуванні функцій $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ і накладенні періодичних граничних умов отримують, що для блохівских функцій (6.3) граничні умови виконуються, якщо $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ має періодичність ґраток, а **k** є вектор оберненої ґратки. Дві блохівські функції, що відрізняються на вектор оберненої ґратки $\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{b}$, фізично еквівалентні. Отже, будь-яка блохівська функція може бути охарактеризована хвильовим вектором з приведеної (центральної) зони Бриллюена, і хвильова функція класифікується цим **k**. Отже, і власні значення $E_{\mathbf{k}}$ рівняння Шредінгера будуть також функціями хвильового вектора: $E=E(\mathbf{k})$. Наприклад, в одновимірному випадку енергія $E(\mathbf{k})$ вільного електрона ($V(\mathbf{r})$ =0) дається виразенням:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

і вона виявляється багатозначною функцією **k** в приведеній зоні. Як показано на рис. 6.8 [2], частина параболи АВ при трансляції на вектор оберненої ґратки пересувається в положення А'В', і те ж саме має місце для інших частин параболи.

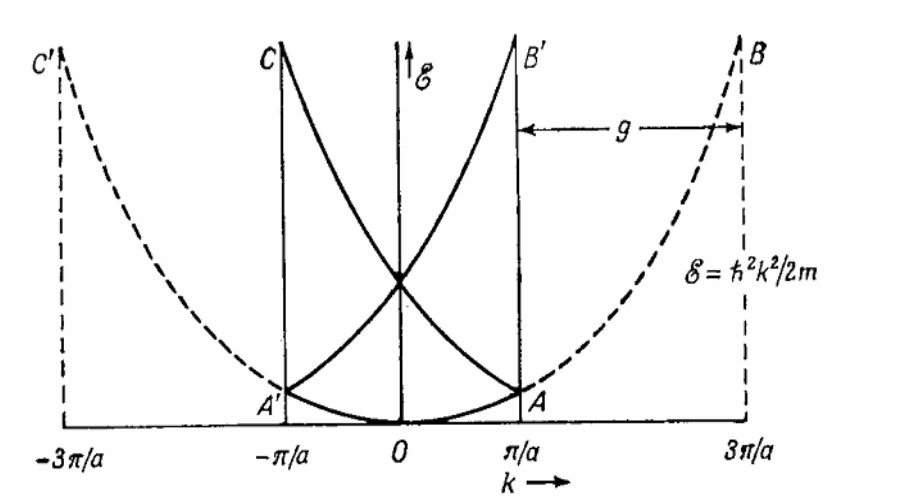


Рис. 6.8 [2] Енергія вільного електрона в приведеній зоні

Виходячи з періодичності функції $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, отримуємо:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) &= \exp i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{R})\cdot u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \\ &= \exp i\mathbf{kr}\cdot\exp i\mathbf{kR}\cdot u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp i\mathbf{kR}\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (6.5)$$

Звідси випливає, що якщо відомо, як змінюється власна функція в одній комірці кристала, то характер її зміни в усіх інших комірках, що визначається індексом **k**, зводиться до зміни фази. Якщо шукати усі рішення рівняння Шредінгера, які можна представити у блохівській формі із заданим **k** і періодом функції $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, то хвильове рівняння (6.1) при будь-якому допустимому фіксованому значенні $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ має безліч власних значень і власних функцій. Усі ці різні квантові стани, що відповідають одному якому-небудь значенню **k**, можна позначити індексом n. Цей індекс можна приписати різним квантовим станам в порядку зростання їх енергії:

$$E_1(\mathbf{k_0})\le E_2(\mathbf{k_0})\le\cdots\le E_j(\mathbf{k_0})\le\cdots\le E_n(\mathbf{k_0})$$

Це ж можна виконати і для інших довільних значень **k**:

$$E_1(\mathbf{k})\le E_2(\mathbf{k})\le\cdots\le E_n(\mathbf{k})$$

і усі функції $E_n(\mathbf{k})$ описують рівні енергії електрона в періодичному полі сімейством безперервних функцій. При зміні **k** в приведеній зоні Брилюена кожна з функцій визначає в 4-мірному просторі $(n,\mathbf{k})$ деяку гіперповерхню. Проекція її на координатні площини k_x, k_y, k_z дають енергетичні смуги. Кожен стан визначається завданням 2 величин: приведеного хвильового вектора $\mathbf{k}$ і номери смуги. Отже

$$\begin{gathered} \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \exp i\mathbf{kR} \cdot u_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) \\ E = E_n(\mathbf{k}) \end{gathered} \tag{6.6}$$

Ці функції визначають зонну структуру твердого тіла. При цьому вплив періодичного потенціалу $V(\mathbf{r})$ розглядається як збурення стану вільних електронів, що призводить до розщеплювання $E_n(\mathbf{k})$ на межі зони Бриллюена, тобто появі зони, в якій не лежать ніякі енергії (забороненої зони). Таким чином, ми приходимо до опису енергетичних рівнів електрона в періодичному потенціалі за допомогою сімейства безперервних функцій $E_n(\mathbf{k})$, кожна з яких має період оберненої ґратки.

2°. Розглянемо теоретико-груповий аспект цього питання. Рівняння Шредінгера мають бути інваріантними по відношенню до перетворень групи симетрії кристала, яка в даному випадку є просторовою групою. Гамільтоніан комутує з операторами елементів групи. З просторової групи завжди можна виділити її підгрупу трансляцій. Нехай відсутня яка-небудь симетрія, окрім трансляції. Власні стани електрона перетворюватимуться по звідним представленням групи трансляцій, відображатимуться вектором $\mathbf{k}$ і будуть мати властивість трансляції:

$$T(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kR})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{6.7}$$

Оператор Н, очевидно, комутує з оператором трансляції:

$$T(\mathbf{R})H(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})T(\mathbf{R}); \;\; H(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = H(\mathbf{r})$$

Тому функція $T(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ також є рішенням рівняння Шредінгера з тим же Е. Визначимо дію трансляції на хвилеву функцію у вигляді:

$$
\begin{aligned}
T(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \\
T(\mathbf{m})T(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}+\mathbf{m}+\mathbf{R}) = T(\mathbf{m}+\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{6.8}
$$

Видно, що групові співвідношення виконуються. Звідси отримуємо на основі (6.7) і (6.8), що

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{kR})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{6.9}$$

Це і є теорема Блоха для станів в кристалі. Оскільки представлення, відповідні **k**, одновимірні, власні стани, що відповідають хвильової функції $\psi_k(\mathbf{r})$, невироджені. Базисними функціями незвідних представлень нескінченної абельової групи трансляцій, таким чином, являються блохівські функції (6.3). Ці функції періодичні і перетворюються за звідними представленнями групи трансляцій. Для цього **k** є безліч (n) рішень рівняння Шредінгера – безліч власних значень $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ з власними енергіями $E_1, E_2, \cdots E_n$. Оскільки

$$\{\varepsilon/\mathbf{R}\}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kR})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{6.10}$$

то дія трансляції зводиться до множення цієї функції на фазовий множник $\exp(i\mathbf{kR})$. З цих функцій можна побудувати незвідні представлення просторової групи.

Розглядатимемо операції просторової групи заданими у вигляді

$$\{\alpha/\mathbf{R}\} = \{\varepsilon/\mathbf{R}\}\{\alpha/0\}$$

де α – точкові перетворення. Дія точкових перетворень зводиться до того, що функція з хвильовим вектором **k** перетвориться в хвильову функцію з вектором $\mathbf{k}' = \alpha\mathbf{k}$, тобто

$$\{\alpha/0\}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{6.11}$$

Насправді, з одного боку

$$
\begin{aligned}
&\{\alpha/0\}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \{\alpha/0\}\left(\exp i\mathbf{kr}\cdot u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) = \\
&= \exp i\mathbf{k}\alpha^{-1}\mathbf{r}\cdot u_{n\mathbf{k}}(\alpha^{-1}\mathbf{r}) = \exp i\alpha\mathbf{kr}\cdot u_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})
\end{aligned}
$$

З іншого боку,

$$\psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp i\alpha\mathbf{kr} \cdot u_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Порівнюючи праві частини цих двох співвідношень, (6.11) доведено (тут використано те, що $\mathbf{k}\alpha^{-1}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{kr}$). Як відомо, сукупність усіх нееквівалентних векторів виду $\alpha\mathbf{k}$, де α – перетворення точкової групи симетрії прямих ґраток, утворює зірку (орбіту) вектора **k**. Для вектора **k** загального типу звідси випливає, що разом з функцією $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ до того ж значення енергії належить і функція $\psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, тобто до цього ж значення належать і хвильові вектори зірки, що вказує на виродження енергії і визначає симетрію

$$E_n(\mathbf{k}) \equiv E_n(\alpha\mathbf{k}) \qquad (6.12)$$

Отже, ізоенергетичні поверхні в зоні Брилюена для кожної із смуг дозволених зон мають симетрію точкової групи ґраток. Оскільки йдеться про дослідження спектру багатовимірної задачі, то завжди має місце нескінченнократне виродження, оскільки енергії $E_n(\mathbf{k}) = \text{const}$ задовольняє нескінченне число станів, а саме, ціла поверхня в **k**- просторі. Але при незначній зміні потенціалу $V(\mathbf{r})$ отримуємо вже іншу поверхню $E_n'(\mathbf{k}) = \text{const}$. При цьому, якщо симетрія залишається колишньою (початковою), умова $E_n'(\mathbf{k}) = E_n'(\alpha\mathbf{k})$ все ще виконуватиметься. Тому слід розрізняти виродження, обумовлене багатовимірністю задачі (несуттєве виродження), і виродження, обумовлене симетрією системи. Тут ми маємо справу із виродженням, обумовленим симетрією системи. Якщо вектор **k** – вектор загального типу, тобто не лежить на симетричному напрямку, то вироджені стани належать різним значенням **k** і тому завданням $E_n(\mathbf{k})$ і **k** стан системи повністю визначається. Якщо ж вектор **k** лежить на симетричних напрямах, тобто є елементи симетрії, що залишають його інваріантним, то картина стає складнішою. Тут ми маємо справу із виродженням, обумовленим симетрією системи. Виродження, обумовлене симетрією системи.

може частково зніматися, тобто, функції $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ при $\mathbf{k}' = \alpha\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{b}$ можуть належати різним значенням енергії. Але оскільки виродження знімається не повністю, виявляється, що вироджені функції мають однакові звідні хвильові вектори. Для повної характеристики таких станів, окрім $E_n(\mathbf{k})$ і $\mathbf{k}$, треба задавати значення інших квантових чисел.

Таким чином, включення симетрії точкової групи призводить до того, що представлення $\Gamma^{(\mathbf{k})}$ просторової групи G відображаються (визначаються) вектором $\mathbf{k}$ і мають при будь-якому $\mathbf{k}$ розмірність точкової групи. Значення енергії $E_n(\mathbf{k})$ для деяких $\mathbf{k}$ повторюватимуться при усіх значеннях зірки і матимуть повну симетрію точкової групи. При цьому кожному стану $E_n(\mathbf{k})$ відповідає незвідне представлення. Розмірність можливих незвідних представлень для заданого $\mathbf{k}$ визначає можливе виродження для цього $\mathbf{k}$. Власні базисні функції $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ визначеного $E_n(\mathbf{k})$ мають симетрію відповідного незвідного представлення. При переході з точки $\mathbf{k}$ в сусідню точку $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}$ меншої симетрії представлення, яке було незвідним в k, може бути в $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}$ звідним. У симетричних зонах має місце торкання m зон. В цьому випадку говорять, що є m вироджених зон. Отже, вироджений рівень при переході з $\mathbf{k}$ в $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}$ розщеплюється.

Для графічного зображення $E_n(\mathbf{k})$ використовують два способи. Або відкладають енергію уздовж деякого напряму в зоні Брилюена, або проводять в зоні Брилюена ряд площин і викреслюють криві постійної енергії, тобто лінії перетину поверхні $E = \text{const}$ з цими площинами.

6.4 Співвідношення сумісності у простій кубічній ґратці

Розглянемо енергетичну зону з відомої симетрією хвильової функції у центрі зони Брилюена простій кубічній граткці. Розглянемо таблицю характерів групи O_h (таблиця 6.2 [7]). У цій таблиці позначення представлень дані так, як це прийнято у фізиці твердого тіла, індекси означають відпові -

Таблиця 6.2 Характери групи O_h [7]

O_h	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	I	$3IC_4^2$ $(3\sigma_h)$	$6IC_4$ $(6S_4)$	$6IC_2$ $(6\sigma_d)$	$8IC_3$ $(8S_6)$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
Γ'_{15}	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
Γ'_{25}	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
Γ'_1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ'_2	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	0	-1
Γ'_{12}	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
Γ_{15}	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	-1	0
Γ_{25}	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

дні незвідні представлення. Як було вказано вище, енергетичні рівні (зони) мають бути безперервні і не повинні перетинатися між собою усередині зони Брилюена. Те ж відноситься і до хвильових функцій. Візьмемо, як приклад, симетрію типу Γ_{15}. Виникає питання: чи можна з'єднати цей Г-стан із станом типу Δ, Λ, Σ з довільною симетрією так, щоб вони відносилися до тієї ж енергетичної зони? Відповідь – ні. За наявності випадкового виродженні мале представлення може змінитися на осі симетрії. Однак, не усі комбінації символів відповідають можливій енергетичній зоні. Тій же енергетичній зоні, що і цей Г-стан, можуть належати лише деякі певні типи станів з Δ, Λ, Σ-станів (див. рис. 6.5). Стани, які можуть співіснувати в одній і тій же енергетичній зоні називаються сумісними. Принцип, на основі якого визначається сумісність станів, теж простий: симетрія будь-якого типу на деякій осі повинна міститися в симетрії, яку має точка на кінці осі. Розглянемо таблиці характерів окремих напрямків і точок зони Брилюена. У таблиці 6.3 [7] приведені характери незвідних представлень групи напрямків Δ і точки Т. Як було показано вище, групою симетрії цього напряму є група C_{4v}. При русі точки **k** уздовж осі Δ до точки Г кожна хвильова функція зберігає цю симетрію, тобто володіє двома вузловими площинами, перпендикулярними до осей k_y і k_z. Тому стан Δ_2', наприклад, не можна приєднати до стану Γ_1, оскільки при русі точки уздовж осі Δ до центру мало б раптове зникнення двох вузлових площин, що порушило б умову безперервності хвильової функції і енергії усередині зони Брилюена. Є правило, що визначає ті типи симетрії хвильової функції і енергії на осі, які сумісні із заданим типом симетрії на кінці осі: сума характерів сумісних представлень для точок на осі повинні бути рівними характеру представлення для точки на кінці цієї осі. Ця рівність повинна виконуватися для кожного певного класу симетрії. Наприклад, з таблиці. 6.3 випливає, що сума характерів представлень Δ_2' і Δ_5 для усіх класів рівна (3, - 1, - 1, - 1, 1). Але з таблиці 6.2 характерів для Г слідує, що це якраз представлення Γ_{25}' відповідних класів. Отже, із Δ-стану з Γ_{25}' сумісні стани Δ_2' і Δ_5. Якщо представлення в кінцевій точці одновимірне, тобто відповідає невиродженому ста-

Таблиця 6.3 Характери незвідних представлень Δ, T (гр. C_{4v}) [7]

Δ, T	E	C_4^2	$2C_4$	$2JC_4^2$	$2JC_2$
Δ_1	1	1	1	1	1
Δ_2	1	1	−1	1	−1
Δ_2'	1	1	−1	−1	1
Δ_1'	1	1	1	−1	−1
Δ_5	2	−2	0	0	0

ну, то характер представлення на осі повинен співпадати з характером на кінці. Прикладом може бути сумісність Δ_2 і Γ_2.

Таблиця 6.4 Характери незвідних представлень точок Σ, S (гр. C_{2v}) [7]

Σ, S	E	C_2	JC_4^2	JC_2
Σ_1	1	1	1	1
Σ_2	1	1	-1	-1
Σ_3	1	-1	-1	1
Σ_4	1	-1	1	-1

Таблиця 6.5 Характери незвідних представлень точки Λ (гр. C_{3v}) [7]

Λ, F	E	$2C_3$	$3JC_2$
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	1	-1
Λ_3	2	-1	0

В основі вказаного правила лежить таке міркування. Незвідне представлення, наприклад, 3-мірне, в точці Г виявляється звідним по відношенню до групи хвильового вектора, порядок якого менше трьох. За допомогою перетворення подібності кожну з квадратних матриць 3-ого порядку можна привести або до діагонального виду, або до сукупності діагонального елементу і матриці 2-го порядку. В цьому випадку діагональний елемент і шпур матриці 2-го порядку стають характерами на осі. Оскільки перетворення подібності не змінює шпур матриці, то звідси зрозуміле це правило. Іншими словами, мале представлення на осі Δ 4-го порядку повинне міститися в представленні центральної точки Г, якщо останнє розглядати як представлення групи Δ. Аналогічні умови повинні існувати для усіх пар елементів симетрії, які перетинаються.

Насправді, незвідні представлення групи (точки) Г співпадають з незвідними представленнями групи O_h. Тому в центрі зони Бриллюена є стани одновироджені, двократно вироджені і трикратно вироджені (див. таблицю. 6.2). Оскільки осі симетрії Δ, Λ, Σ мають нижчу симетрію, ніж точка Г, уздовж цих осей відбувається зняття виродження. Уздовж осі Δ можливо тільки двократне виродження у відповідності з таблицею характерів цієї групи (таблиця. 6.3). Аналогічний випадок має місце для точок і осі Λ (таблиця 6.5 [7]) При цьому для точок і напрямків Σ відбувається повне зняття виродження, оскільки група Σ має тільки одновимірні представлення (таблиця. 6.4 [7]). Вирішення питання про те, які рівні розщеплюються, а які залишаються виродженими, зводиться до розкладання незвідних представлень групи за незвідними представленнями підгрупи, в даному випадку, розкладання групи Г по підгрупах Δ, Λ, Σ. Розглянемо для прикладу це питання для підгрупи Δ. Співвідношення ортогональності характерів дозволяє розкласти представлення групи Г по представленням підгрупи Δ, використовуючи відоме співвідношення (2.53)

$$m_\alpha(\Gamma^{(\beta)}) = \frac{1}{g}\sum_g \chi^{(\alpha)*}(g_i)\chi^{(\beta)}(g_i)$$

де підсумовування ведуть по числу елементів підгрупи Δ, індекс α нумерує представлення підгрупи Δ (їх 5, див. таблицю. 6.3), β – представлення групи Г, їх 10 (таблиця 6.2). Таким способом можна визначити, на які представлення підгрупи Δ розпадеться конкретне представлення групи Г. Обчислення показують, що $\Gamma_{25} = \Delta_2 \oplus \Delta_5$, тобто рівень Γ_{25} розпадеться на простий рівень Δ_2 і двократно вироджений Δ_5. Аналогічним чином можна визначити, з яких представлень підгрупи Δ складаються інші представлення групи Г. Те ж саме можна перевірити і для інших напрямків: Λ, Σ. Таблиця 6.6 [7] показує, в які з представлень точок і напрямків Δ, Λ, Σ можуть переходити представлення точки Г. З таблиці видно, що 3-вимірно вироджений стан Γ_{25} розпадеться на три прості рівні уздовж осі Σ, на простий рівень Δ_2 або Λ_2 і двократно вироджений Δ_5 або Λ_3 відповідно для напрямків Δ, Λ. Співвідношення сумісності між станами на осях симетрії не залежать від вибору однієї певної осі. Так, співвідношення сумісності між Г і Δ-станами однакові незалежно від того, на якій осі лежить точка

Δ: k_x, k_y або k_z.

Таблиця 6.6 Співвідношення сумісності між точками Г и Δ, Λ, Σ [7]

Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{15}	Γ'_{25}
Δ_1	Δ_2	$\Delta_1\Delta_2$	$\Delta'_1\Delta_5$	$\Delta'_2\Delta_5$
Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_2\Lambda_3$	$\Lambda_1\Lambda_3$
Σ_1	Σ_4	$\Sigma_1\Sigma_4$	$\Sigma_2\Sigma_3\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3$
Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}
Δ'_1	Δ'_2	$\Delta'_1\Delta'_2$	$\Delta_1\Delta_5$	$\Delta_2\Delta_5$
Λ_2	Λ_1	Λ_3	$\Lambda_1\Lambda_3$	$\Lambda_2\Lambda_3$
Σ_2	Σ_3	$\Sigma_2\Sigma_3$	$\Sigma_1\Sigma_3\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_4$

Існують співвідношення сумісності і іншого роду: між станами на осях симетрії, що лежать на одній і тій же площині, наприклад, між станами на осях Δ, Λ, Σ. Ці співвідношення залежать від вибору системи координат і будуть різні при переміщенні точки на k_y або k_z. Умова сумісності таким чином, помітно зменшує число можливих типів енергетичних зон.

Розглянемо хід рівнів енергії уздовж осей поблизу межі зони Бриллюена в точках X, R, M. Як показано вище, групи цих точок є відповідно D_{4h}, O_h, D_{4h}, оскільки ці точки – граничні, і порядок цих груп вищий, ніж у точок усередині зони. Групу точки X можна представити у вигляді прямого добутку груп Δ і $C_S : X = \Delta \times C_S$. Отже, незвідні представлення групи X можна отримати, як прямий добуток незвідних представлень груп Δ і C_S. Ця група має вісім одновимірних і два двовимірні представлення. Тому характер розщеплювання рівнів енергії в точках X такий же, як і в точках Δ. Точка R ізоморфна точці Г. Характер розщеплювання рівнів такий же, як в точці Г. Нарешті, точка М має ту ж симетрію, що і точка Х: $M = \Delta \times C_S$. Тому в точках М можливе двократне виродження рівнів, при цьому в точках Σ виродження знімається.

6.5 Співвідношення сумісності у гранецентрованій кубічній ґратці

Якщо за породжуючи елементи ґратки вибрати вектори

$$\mathbf{a_1} = \mathbf{a}(0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}),\ \mathbf{a_2} = \mathbf{a}(\tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2}),\ \mathbf{a_3} = \mathbf{a}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0) \qquad (6.13)$$

то ми отримуємо гранецентровану кубічну ґратку, де векторами оберненої ґратки будуть вектори

$$\mathbf{b_1} = \mathbf{b}\left(-\tfrac{2\pi}{a}, \tfrac{2\pi}{a}, \tfrac{2\pi}{a}\right),\ \mathbf{b_2} = \mathbf{b}\left(\tfrac{2\pi}{a}, -\tfrac{2\pi}{a}, \tfrac{2\pi}{a}\right),\ \mathbf{b_3} = \mathbf{b}\left(\tfrac{2\pi}{a}, \tfrac{2\pi}{a}, -\tfrac{2\pi}{a}\right);\ |\mathbf{b}| = 1 \qquad (6.14)$$

Зона Брилюена гранецентрованої кубічної ґратки показана на рис. 6.6. Вона має форму зрізаного октаедра. На тому ж рисунку показані симетричні точки і напрямки в цій зоні. Внутрішні точки $\Gamma, \Delta, \Lambda, \Sigma$ мають ту ж саму групу симетрії, що й точки простої кубічної ґратки, тобто, $O_h, C_{4v}, C_{3v}, C_{2v}$ відповідно та, відповідно, таку ж саму кількість векторів зірок. Розглянемо симетрію інших точок.

а) точка Х, у центрі грані на координатної осі, що є віссю четвертого порядку. Група симетрії цієї точки є $D_{4h} \cong D_4 \times C_2$, зірка точки Х O_h / D_{4h} складається з трьох векторів з координатами: $\frac{2\pi}{a}(1,0,0), \frac{2\pi}{a}(0,1,0), \frac{2\pi}{a}(0,0,1)$

б) точка L – знаходиться у центри шестикутної грані на осі третього порядку в площині дзеркального відображення. Обертання навколо перпендикулярної до неї осі другого порядку, яка проходить через точку K, переводить точку L в діаметрально протилежну, яка пов'язана з L трансляцією на вектор оберненої ґратки. Тому група симетрії точки L є $D_{3v} \cong D_6$, а зірка містить три вектора.

в) точка W, точка на вершині зрізаного октаедра з координатами $\frac{\pi}{2a}(1,2,0)$. Група симетрії точки W є $D_{2d} \cong D_4$. Група містить два обертання навколо взаємно перпендикулярних осей другого порядку $C^{(z)}(\pi), C^{(xy)}(\pi)$ та інверсії навколо осі k_z. Орбіта складає шість векторів.

г) точка K, знаходиться на осі другого порядку та в площині дзеркального відображення, має симетрію C_{2v}. Зірка має 12 векторів.

д) симетрія точок Z і S співпадають з симетрією точки K, зірка цих точок має 12 векторів.

е) точка Q знаходиться на осі другого порядку, її група симетрії є C_2. Зірка складає 24 вектора.

Розглянемо, як приклад, кристал зі структурою алмазу, елементарні трансляції якого утворюють гранецентровану кубічну ґратку. Для находження співвідношень сумісності необхідно скористатись виразом (2.53), щоб визначити, які граничні представлення реалізуються при русі від центру зони Бриллюена вздовж симетричних напрямків. У таблиці 6.7 представлена симетрія особливих точок і напрямків зони Бриллюена для кубічних гранецентрованих ґраток. Користуючись цією таблицею, доволі легко в цьому випадку скласти співвідношення сумісності.

Ситуація усередині зони Бриллюена для кубічних гранецентрованих ґраток нічим не відрізняється від випадку простої кубічної ґратки. Усі співвідношення сумісності між малими представленнями в точці Г і уздовж осей другого, третього і четвертого порядків зберігаються. Тобто, зберігаються усі співвідношення сумісності, які наведені у таблиці 6.6 для простої кубічної ґратки між точкою Г та напрямками Δ, Λ, Σ. Те ж справедливе і відносно точок X, S, W на квадратній грані.

Таблиця 6.7 Симетрія особливих точок і напрямків гранецентрованих кубічних ґраток

Точка і її координати [3]	Точкова група [3, 6]	Кількість променів m зірки	Порядок групи хвильового вектора g_k
$\Gamma(0, 0, 0)$	O_h	1	48
$\Delta\, \frac{\pi}{a}(0, k_y, 0)$	C_{4v} □ D_4	6	8
$L\, \frac{\pi}{2a}(1,1,1)$	D_{3v} □ D_6	4	12
$\Lambda\, \frac{\pi}{2a}(k_x, k_y, k_z)$	C_{3v} □ D_3	8	6
$\Sigma, K\, \frac{3\pi}{4a}(k_x, k_y, 0)$	C_{2v} □ D_2	12	4
$S\, \frac{\pi}{a}\left(\frac{1}{4}k_x, 1, \frac{1}{4}k_z\right)$	C_{2v}	12	4
$Z\, \frac{\pi}{2a}(k_x, 2, 0)$	C_{2v}	12	4
$W\, \frac{\pi}{2a}(1, 2, 0)$	D_{2d} □ D_4	6	8
$X\, \frac{\pi}{a}(0, 1, 0)$	$D_{4h}\ (D_4 \times C_2)$	3	16
$Q\, \frac{\pi}{2a}(1, 2-k_y, k_z)$	C_2	2	24

Користуючись співвідношеннями сумісності, розглянемо хід енергетичних зон $E_n(\mathbf{k})$ уздовж деяких напрямків у зоні Бриллюена. Наприклад, розглянемо хід енергетичних зон кременю вздовж напрямків [111] та [100] у зоні Брилюена (рис. 6.9 [3[). Методи обчислювання електронного енергетичного спектру у більшості випадків дають змогу отримати такі розрахунки без великих обчислювальних витрат тільки для значень енергії у симетричних точках. Це дає можливість хоч би схематично пояснювати хід зон між обчисленими значення-

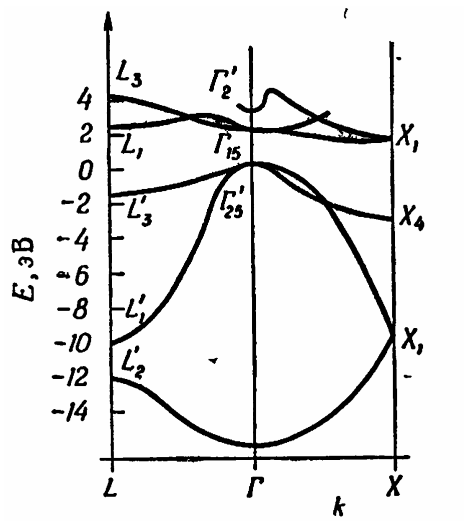


Рис. 6.9 Енергетичні зони кременю уздовж напрямків [111] та [100] [3]

ми. При $T = 0^{\circ}\mathrm{K}$ всі зони до Γ'_{25} заповнені, а всі ті, що розташовані вище, вільні. Зони Γ'_{25} називають валентними зонами, а більш високі – зонами провідності. Три валентні зони перекриваються. Енергетично найнижча точка валентної зони знаходиться у точці Γ_1 при $\mathbf{k} = 0$, вона не позначена на рисунку. Згідно з таблицею 6.2, незвідне представлення групи O_h, що реалізоване у цій точці, є одновимірним. Тобто, рівень енергії в точці Γ_1 однократно вироджений. При русі від цієї точки до точки X по напрямку Δ у разі безперервності $E_n(\mathbf{k})$, згідно із співвідношенням сумісності (табл. 6.6), $\Gamma_1(1)$ переходить у $\Delta_1(1)$, де в дужках зазначена кратність виродження енергії представлення Δ_1, і далі сполучується з рівнем $X_1(2)$. Аналогічне відбувається при русі від $\Gamma_1(1)$ до точки $L_2{}'(1)$ через точку $\Lambda_1(1)$. Рівень $\Gamma'_{25}(3)$ розщеплюється на 2 рівня: однократно вироджений і двократно вироджений. Однократно вироджений рівень $\Gamma'_{25}(1)$ сполучується з $L'_1(1)$ через $\Lambda_1(1)$, а двократно вироджений $\Gamma'_{25}(2)$ – з $L'_3(2)$ через $\Lambda_3(2)$. При русі від точки Γ в напрямку X рівень $\Gamma'_{25}(1)$ через $\Delta'_2(1)$ сполучується з рівнем $X_1(2)$, який розщеплюється, а рівень $\Gamma'_{25}(2)$ через $\Delta_5(2)$ сполучується з рівнем X_4 (2). Розглянемо далі рівні енергії, які відносяться до представлення $\Gamma_{15}(3)$. Цей рівень розщеплюється на два рівня: $\Gamma_{15}(1)$ та $\Gamma_{15}(2)$. При русі від Γ_{15} в напрямку L рівень $\Gamma_{15}(1)$ через $\Lambda_1(1)$ сполучується з точкою $L_1(1)$, а рівень $\Gamma_{15}(2)$ через $\Lambda_3(2)$ – з точкою $L_3(2)$. При русі в напрямку точки X рівень $\Gamma_{15}(1)$ через $\Delta_1(1)$ переходить до рівня $X_1(2)$, який розщеплюється. Рівень $\Gamma_{15}(2)$ сполучується з рівнем $\Delta_5(2)$ (на рис. 6.9 лінія обірвана). Рівень, який відповідає представленню $\Gamma'_2(1)$ сполучується через $\Delta'_2(1)$ з $X_1(2)$.

Всі співвідношення сумісності розглянутих точок приведені у таблицях 6.8 – 6.11 [7].

Таблиця 6.8 Співвідношення сумісності представлень між точками L та Λ

	L_1	L_2	L_3	L_1'	L_2'	L_3'
$L-\Lambda$	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_2	Λ_1	Λ_3

Таблиця 6.9 Характери незвідних представлень у точці L (група D_{3v} □ D_6)

L	E	$2C_3$	$3C_2$	J	$2JC_3$	$3JC_2$
L_1	1	1	1	1	1	1
L_2	1	1	−1	1	1	−1
L_3	2	−1	0	2	−1	0
L_1'	1	1	1	−1	−1	−1
L_2'	1	1	−1	−1	−1	1
L_3'	2	−1	0	−2	1	0

Таблиця 6.10 Характери незвідних представлень у точках X, M (група D_{4h})

M X	E E	$2C_4^2$ $2C_4^2\perp$	$C_4^2\perp$ $C_4^2\parallel$	$2C_4\perp$ $2C_4\parallel$	$2C_2$ $2C_2$	J J	$2JC_4^2$ $2JC_4^2\perp$	$JC_4^2\perp$ $JC_4^2\parallel$	$2JC_4\perp$ $2JC_4\parallel$	$2JC_2$ $2JC_2$
M_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
M_2	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1
M_3	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	1
M_4	1	−1	1	1	−1	1	−1	1	1	−1
M_1'	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
M_2'	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
M_3'	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
M_4'	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1
M_5	2	0	−2	0	0	2	0	−2	0	0
M_5'	2	0	−2	0	0	−2	0	2	0	0

Таблиця 6.11 Співвідношення сумісності представлень між точками Х та Δ

X_1	X_2	X_3	X_4	X_1'	X_2'	X_3'	X_4'	X_5	X_5'
Δ_1	Δ_2	Δ_2'	Δ_1'	Δ_1'	Δ_2'	Δ_2	Δ_1	Δ_5	Δ_5

Більш повне зображення зонної структури кременю показано на рис. 6.10 [40]. Наочно видно велику кількість окремих зон, які перекриваються. Вони розпадаються на дві групи: валентну зону і зону провідності. Ці дві зони розділені забороненою зоною. Ширина забороненої зони між самим високим рівнем валентної зони у точках Г і самим глибоким рівнем зони провідності на осі Δ складає більш одного електрон-вольта. На рисунку 6.11 [40] показано зону структуру нікелю уздовж важливих ліній симетрії зони Бриллюена. Одиницею виміру на осі енергії є ридберг.

Загальні міркування, що висловлені у цьому розділі, можна коротко сформулювати наступним чином:

1) кожному стану $E_n(\mathbf{k})$ відповідає незвідне представлення. Розмірності можливих незвідних представлень для даного **k** визначають можливе виродження для цього **k**;

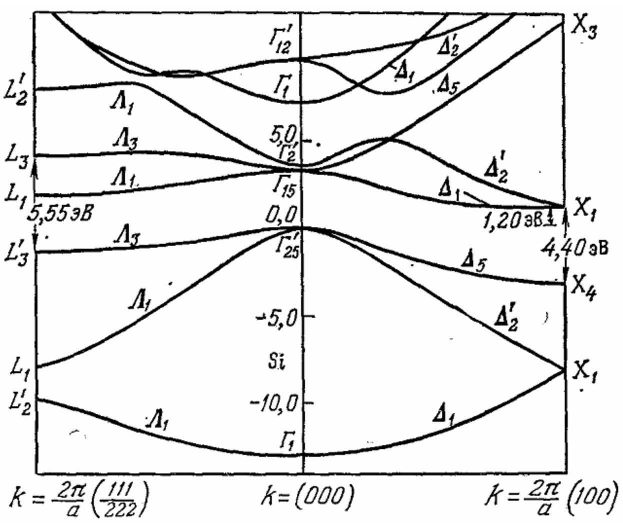


Рис. 6.10 Зона структура кременю

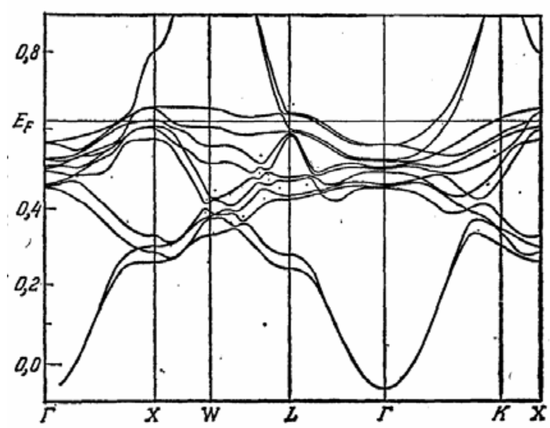


Рис. 6.11 Зона структура нікелю.

2) власні функції, які відносяться до певного $E_n(\mathbf{k})$ є базисними функ-

ціями відповідного незвідного представлення, тому знання незвідних представлень дає властивості перетворень, тобто, симетрію $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$;

3) якщо перейти з точки $\mathbf{k}$ до сусідній точки $\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}$ з меншої симетрією, то представлення, яке було незвідним в $\mathbf{k}$ може бути звідним в $\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}$ Вироджений рівень у цьому випадку, при переході із $\mathbf{k}$ до $\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}$, розщеплюється.

Результати експериментального і теоретичного дослідження зонної структури (структури енергетичних смуг) конкретних речовин, які виконані із застосуванням теоретико-групового підходу, розглянуті у [48].

6.6 Хвильові функції особливих точок

Повернемося до розгляду плоскої оберненої ґратки. Точковою групою К як прямої, так і оберненої ґраток в цьому випадку являється група $C_{4v} \sim D_4$ з вісьмома елементами і п'ятьма класами симетрії:

$$\left\{E, \quad C_4 \quad C_4^3, \quad C_2 = C_4^2, \quad \sigma_x\sigma_y, \quad \sigma_d\sigma_d'\right\}$$

де $\sigma_x = \sigma_v(y,z)$; $\sigma_y = \sigma_v(x,z)$ – площини відображення, що містять вісь симетрії $C_4^{(z)}$ і перпендикулярні осям х , у відповідно; σ_d, σ_d' – площини, що проходять через діагоналі квадрата і вісь C_4. Кожний хвильовий вектор $\mathbf{k}$ в зоні Бриллюена при дії на нього усіх елементів точкової групи К ~ C_{4v} перетвориться в деяку множину хвильових векторів, які разом з початковим утворюють зірку $\mathbf{k}$- представлення. Якщо кінець вектора $\mathbf{k}$ не знаходиться в особливих точках зони Бриллюена, то число векторів зірки дорівнює числу елементів групи точкової симетрії, в даному випадку їх вісім. Така зірка називається невиродженою. Якщо кінець вектора $\mathbf{k}$ попадає в особливу точку зони, тобто на симетричні елементи, то два або більше число векторів співпадають. В цьому випадку зірка називається виродженою (зокрема, центр зірки, точка Г, їй відповідає вироджена зірка з **k** = 0, кратність виродження рівна восьми). Між порядком групи К, g, порядком $g_{\mathbf{k}}$ групи $H_{\mathbf{k}}$ – групи хвильового вектора, і числом m різних променів зірки є співвідношення $g = g_{\mathbf{k}} m$. У виродженої зірки частина (m) векторів співпадає.

Якщо хвильовий вектор **k** електрона відноситься до невиродженої зірки, тобто всі вектори **k** – різні, то число m векторів в зірці рівне g, числу елементів симетрії, порядку групи К прямої ґратки. Енергії стану усіх векторів зірки однакові, оскільки g хвильових функцій належать одному E:

$$E_n(\mathbf{k}_1) = E_n(\mathbf{k}_1) = \cdots = E_n(\mathbf{k}_g)$$

де n – номер смуги дозволеної енергії і інші квантові числа. При цьому E_n відповідають хвильові функції $\psi_{n\mathbf{k}_1} \;\cdots\; \psi_{n\mathbf{k}_g}$, тобто для кожної E_n маємо g хвильових функцій, що перетворюються одна через одну під дією операцій симетрії групи К. Усі ці функції відносяться до одного незвідного представлення α групи К з енергією E_n. В цьому випадку розмірність представлення просторової групи G в g разів більше розмірності відповідного представлення групи симетрії $H_{\mathbf{k}}$ хвильового вектора **k**.

Якщо хвильовий вектор **k** електрона належить виродженій зірці з m векторами $\mathbf{k}_1 \;\cdots\; \mathbf{k}_m$ (тобто вектор **k** знаходиться на симетричному напрямку або симетричній точці), то всі елементи точкової групи К можна розбити на два типи: 1) елементи симетрії, які не змінюють **k**, тобто $\forall\mathbf{k}\; \alpha\mathbf{k} = \mathbf{k}$, $\forall\alpha \in H_k$, або такі, що переводять в еквівалентний; 2) елементи симетрії, що переводять **k** в нееквівалентний вектор (у зірку).

Елементи симетрії першого типу в повній групі К утворюють підгрупу – точкову групу $H_{\mathbf{k}}$ хвилевого вектора **k**, $H_{\mathbf{k}} \subset K$. Хвильові функції, що відносяться до однакових енергій, можна класифікувати за незвідними представленнями (Γ_1, Γ_2, Γ_3…) групи $H_{\mathbf{k}}$ відповідного вектора **k** симетричної точці (напряму). Кожному такому представленню відповідатиме своя енергія і m хвильових функцій з різними $\mathbf{k}_1 \ \cdots \ \mathbf{k}_m$, що утворюють зірку:

$$\begin{aligned} &\psi_{\Gamma_1\mathbf{k}_1}, \quad \psi_{\Gamma_2\mathbf{k}_2} \ \cdots \ \psi_{\Gamma_1\mathbf{k}_m} \to E_1(\mathbf{k}_1) \\ &\psi_{\Gamma_2\mathbf{k}_1}, \ \psi_{\Gamma_2\mathbf{k}_2} \ \cdots \ \psi_{\Gamma_2\mathbf{k}_m} \to E_2(\mathbf{k}_2) \end{aligned} \tag{6.15}$$

де порядок кожного незвідного представлення групи $H_{\mathbf{k}}$ – це число векторів зірки $\{\mathbf{k}_1 \ \cdots \ \mathbf{k}_m\}$; Γ_1, Γ_2 і так далі – незвідні представлення групи $H_{\mathbf{k}}$ в особливих точках (Δ, Σ, Z, X, Γ, M) зони Бриллюена. Для кожного Г маємо m однакових хвильових функцій. Кожне незвідне представлення – це рівень енергії.

Розглянемо приклад. Нехай хвильовий вектор **k** знаходиться на точці Δ. Зірка точки Δ складається з чотирьох векторів. Група цього вектора або група точки Δ містить два елементи симетрії E, σ_y (вона ізоморфна групі C_2) і має два незвідних представлення Δ_1, Δ_2 4-го порядку (по числу векторів зірки, чотири вектори в зірці). Для представлень Δ_1 і Δ_2 однієї енергії електрона відповідають по 4 хвильових функції:

$$\begin{aligned} &\psi_{\Delta_1\mathbf{k}_1}, \ \psi_{\Delta_1\mathbf{k}_2}, \ \psi_{\Delta_1\mathbf{k}_3}, \ \psi_{\Delta_1\mathbf{k}_4} \to E_1(\mathbf{k}) \\ &\psi_{\Delta_2\mathbf{k}_1}, \ \psi_{\Delta_2\mathbf{k}_2}, \ \psi_{\Delta_2\mathbf{k}_3}, \ \psi_{\Delta_2\mathbf{k}_4} \to E_2(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{6.16}$$

де вектори $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4$ – вектори зірки $\{\mathbf{k}\}$. Аналогічно маємо для точок Σ і Z, оскільки групи симетрії цих точок ізоморфні.

Точці X відповідає вироджена зірка з двох хвильових векторів. Група цих хвильових векторів (група X) містить чотири елементи симетрії і чотири одновимірні незвідні представлення (група симетрії цієї точки ізоморфна групі D_2). Кожне незвідне представлення – це рівень енергії. Тому кожному рівню енергії відповідатимуть по дві хвильові функції, що відносяться до одного з чотирьох незвідних представлень групи точок X:

$$\begin{aligned}
&\psi_{X_1\mathbf{k}_1}, \psi_{X_1\mathbf{k}_2} \to E_1(\mathbf{k}) \\
&\psi_{X_2\mathbf{k}_1}, \psi_{X_2\mathbf{k}_2} \to E_2(\mathbf{k}) \\
&\psi_{X_3\mathbf{k}_1}, \psi_{X_3\mathbf{k}_2} \to E_3(\mathbf{k}) \\
&\psi_{X_4\mathbf{k}_1}, \psi_{X_4\mathbf{k}_2} \to E_4(\mathbf{k})
\end{aligned} \qquad (6.17)$$

де вектори $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ – вектори зірки $\{\mathbf{k}\}$.

Точці Γ центру зони Бриллюена відповідає вироджена зірка з одним хвилевим вектором $|\mathbf{k}| = 0$. В цьому випадку точкова група хвилевого вектора $H_{\mathbf{k}} = K = C_{4v}$, тобто, співпадає з повною точковою групою квадратних ґраток. Класифікація стану електрона проводиться за п'ятьма незвідними представленнями групи C_{4v}. Група C_{4v} має чотири одновимірні представлення Γ_1, Γ_2, Γ_3, Γ_4 і одно двовимірне Γ_5. Отже в цій точці маємо п'ять рівнів енергії: E_1, E_2, E_3, E_4 – невироджені або одноразово вироджені, і E_5 – двократно вироджений. Число хвильових функцій теж п'ять. Для рівня E_5 маємо набір з двох хвильових функцій, що перетворюються одна через одну:

$$\begin{aligned}
&\psi_{\Gamma_1\mathbf{k}} \to E(\mathbf{k}) \sim \Gamma_1 \\
&\psi_{\Gamma_2\mathbf{k}} \to E(\mathbf{k}) \sim \Gamma_2 \\
&\psi_{\Gamma_3\mathbf{k}} \to E(\mathbf{k}) \sim \Gamma_3 \\
&\psi_{\Gamma_4\mathbf{k}} \to E(\mathbf{k}) \sim \Gamma_4 \\
&\psi_{\Gamma_5\mathbf{k}}(\psi^{(1)}_{\Gamma_5\mathbf{k}}, \psi^{(2)}_{\Gamma_5\mathbf{k}}) \to E(\mathbf{k}) \sim \Gamma_5
\end{aligned} \qquad (6.18)$$

Таким чином, в зірці $\{\mathbf{k}\}$ вектора власні значення енергії однакові, а власні функції отримують застосуванням перетворень симетрії групи G до власних функцій вектора **k**. Між поняттями теорії груп і квантової механіки встановлені відповідності, представлені в таблиці 4.1. Енергія, що розглядається як функція **k** в зоні Бриллюена, має симетрію точкової групи $H_{\mathbf{k}}$

хвильового вектора.

Питання для самоконтролю

1. Які точки зони Брилюена вважаються особливими і чому?

2. Як ви уявляєте собі послідовність знаходження незвідних представлень просторової групи G?

3. Чому власні значення $E_{\mathbf{k}}$ рівняння Шредінгера класифікуються саме хвильовим вектором ?

4. Як утворюються енергетичні смуги? Яку симетрію вони мають? Що означає у даному випадку випадкове і природне (суттєве) виродження?

5. Як ви розумієте співвідношення сумісності? Яким чином ці співвідношення були отримані?

6. Користуючись співвідношеннями сумісності, розгляньте схематично хід енергетичних зон $E_n(\mathbf{k})$ у середині зони Бриллюена уздовж напрямку $\Gamma \to \Sigma \to M$.

7. Знайдіть набір хвильових функцій симетричних точок кубічних ґраток у тривимірному випадку.

8. Прокоментуйте рис. 6.8. Чому саме так виглядає залежність енергії вільного електрона в приведеній зоні Брилюена?

9. Яку характерну рису має потенційна енергія $V(\mathbf{r})$ електрона в кристалі? Які умови повинні буди виконані для ефективного потенціалу і гамільтоніана, щоб знайти рішення рівняння Шредінгера з таким потенціалом?

10. Що показав Блох у разі відсутності будь-якої симетрія, окрім трансляції?. Чому будь-яка блохівська функція може бути охарактеризована хвильовим вектором з приведеної зони Брилюена, і хвильова функція класифікується цим $\mathbf{k}$? До яких наслідків для $E_n(\mathbf{k})$ приводять операції симетрії просторової групи?

Література

1. М.И. Петрошень, В.Д. Трифонов. Применение теории групп в квантовой механике. М., Наука. 1967 г.

2. Дж. Эллиот, П. Добер. Симметрия в физике. Т. 1, 2 М., Мир. 1983 г.

3. Г. Штрайтвольф. Теория групп в физике твёрдого тела. М., Мир. 1971 г.

4. В. А. Ильин, Э.Г. Позняк. Линейная алгебра. М., Физматгиз, 2004. г.

5. П.С. Киреев. Введение в теорию групп и ее применение в физике твердого тела. М., Высшая школа . 1973 г.

6. П.І. Голод. Симетрія та методи теорії груп у фізиці. Київ, Київо-Могилянська Академія, 2005 р.

7. Р. Нокс, А. Голд. Симметрия в твердом теле. М., Наука, 1970 г.

8. М. Хамермеш. Теория групп и её применение к физическим проблемам. М., УРСС, 2002 г.

9. Н.А Поклонский. Точечные группы симметрии. Минск, БГУ, 2003 г.

10. И.Г. Каплан. Симметрия многоэлектронных систем. М., Наука. 1969 г.

11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Наука. 1989 г.

12. Г. Джонс. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. М., Мир.1968 г.

13. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону, Феникс, 1997 г.

14. Л.К. Аминов. Теория симметрии. Конспект лекций и задачи. М., РХД, 2002 г.

15. В.А. Артамонов, Ю.И. Словохотов. Группы и их приложения в физике, химии и кристаллографии. М., Физматлит, 2005.

16. С.П. Аллилуев. Симметрия в физике. М., МФТИ, 2006 г

17. Г.В. Легкова. Симетрія у фізиці. Вступ до теорії симетрії. Київ. Видавництво «НАУ-друк», 2009 р.
18. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., «Наука», 1972 г.
19. И.Б. Берсукер. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л., «Химия», 1976 г.
20. А.И. Кострикин. Введение в алгебру. Ч. II. Линейная алгебра. М., Физматлит, 2004 г.
21. А.И. Кострикин. Введение в алгебру. Ч. III. Основные структуры. М., Физматлит, 2001 г.
22. П.И. Голод, А.У. Климык. Математические основы симметрии. РХД, 2001 г.
23. В.В. Иванов, Л.А. Слета. Квантовая химия. «Фолио», Харьков, 2007 г.
24. С.В. Шулепов. Основы теории групп и их применение к проблемам физики. Челябинск, 1987 г.
25. Дж. Бирман. Пространственная симметрия и оптические свойства твёрдых тел. Т.1. М., «Мир», 1978 г.
26. В. Хейне. Теория групп в квантовой механике. М., Из-во иностранной литературы, 1963 г.
27.Э.Б. Винберг. Линейные представления групп. «Наука», 1985 г.
28. Р. Хохштрассер. Молекулярные аспекты симметрии. «Мир», 1968 г.
29. Е.Н. Иванов. Теория групп и её применение в физике. М., МГИЭТ, 2006 г.
30. О. Маделунг. Теория твёрдого тела. М. «Мир», 1975.
31. Е. Вигнер. Теория групп и её приложения к квантовомеханической теории атомных спектров. М. 1965 г.
32. А.В. Соколов, В.П. Широковский. Метод теории групп в квантовой физике твёрдого тела (пространственная симметрия). УФН, Т. LXXI, вып.3

1960, с. 485 – 513.
33. Р.А. Эварестов. Квантовомеханические методы в теории твёрдого тела. ЛГУ, 1982 г.
34. А.А. Войтюк. Теория симметрии молекул. Новосибирск, 1983 г.
35. А.А. Кирсанов. Элементы теории групп. Псков, 2000 г.
36. Г.М. Жислин. Лекции по теории представлений конечных групп. (общая теория). Часть I. Нижний Новгород, 1995 г.
37. Г.М. Жислин. Лекции по теории представлений конечных групп. Часть II. Нижний Новгород, 1995 г.
38. Г.М. Жислин. Лекции по теории представлений конечных групп. Часть III. Точечные группы и их представления. Нижний Новгород, 2009 г.
39. В. Босс. Лекции по математике. Т.8. Теория групп. М., КомКнига, 2007г.
40. И.М. Цидильковский. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика. М., «Наука», 1972 г.
41. Р. Драго. Физические методы в химии. Т. 1. М., «Мир», 1981 г.
42. Б.Л. Ван-дер-Варден. Метод теории групп в квантовой механике. «Регулярная и хаотическая динамика», 1999 г.
43. Е.С. Ляпин, А.Я. Айзенштат, М.М. Лесохин. Упражнения по теории групп. «Наука», 1967.
44. Е.А. Каролинский, Б.В. Новиков. Сборник задач по теории групп. Луганск, 2002 г.
45. Современная кристаллография. Под ред Б.К. Вайнштейна. Т. 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. «Наука», 1976 г.
46. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. Ч.1 М., «Наука», 1976г.
47. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т.8.

Электродинамика сплошных сред. М., «Наука», 1982 г.
48. Дж. Каллуэй. Теория энергетической зонной структуры. М., «Мир», 1969 г.
49. А.С. Сонин. Курс макроскопической кристаллофизики. М., Физматлит, 2006 г.
50. Физическое материаловедение. Т.1 Физика твёрдого тела. Под общей редакцией Б.А. Калина. М., МИФИ, 2007 г.
51. А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. Элементы теории функций и функционального анализа. М., «Наука», 1976 г.
52. Н.В. Ефимов, Э.Р. Розендорн. Линейная алгебра и многомерная геометрия. М., «Наука», 1974 г.
53. Д.М. Васильев. Физическая кристаллография. М., Металлургия, 1989 г.
54. Г.М. Жислин. Лекции по теории представлений конечных групп. Часть VI. Пространственные группы и их представления. Нижний Новгород, 2009 г.

Додаток

Розрахункове завдання

Частина I

Абстрактні групи

1. Довести, що множина {1, i, -i, -1} утворює групу із звичайним множенням. Скласти таблицю Келі.
2. Група симетрії на площині – це множина усіх рухів, що залишають фігуру на місці. Перевірити, що це дійсно група відносно композиції, і знайти групи симетрії для різних видів трикутників і паралелограмів.
3. Для групи перетворень симетрії правильного трикутника D_3 скласти таблицю множення.
4. У групі G квадрат будь-якого її елементу дорівнює одиниці. Довести, що група абельова.
5. У групі G існує, і притому тільки один елемент $a \in G$ такий, що $a^2 = e, a \neq e$. Довести, що $\forall x \in G \ \ ax = xa$.
6. Перевірити, що якщо, $K \subset H$, $H \subset G$, то $K \subset G$.
7. Показати, що перетин будь-якої множини підгруп є підгрупою.
8. Нехай $H \subset G, \ g \in G$. Перевірити, що $gHg^{-1} \subset G$.
9. Вичислити порядки елементів групи D_3.
10. Нехай $|G| = n$. Довести, що $a^n = e$ для $\forall a \in G$.
11. Довести, що група парного порядку містить елемент порядку 2.
12. Нехай група G має непарний порядок. Довести, що $\forall a \in G \ \exists b \in G$ такий, що $a = b^2$.
13. Перевірити, що $|x| = |yxy^{-1}|$, $|ab| = |ba|$, $|abc| = |bac| = |cab|$.
14. Довести, що якщо $|G| \leq 5$, то G абельова.

15. За якої умови на групу G відображення $f: G \to G$, задане співвідношенням а) $g \to g^2$, б) $g \to g^{-1}$ є гомоморфізмом?

16. Довести, що образ і прообраз підгрупи при гомоморфізмі є підгрупами.

17. Перевірте, що відображення $f_g: G \to G,\ f_g(x) = gxg^{-1}$, де $g \in G$, є автоморфізмом групи G.

18. Нехай $[G:H] = 2$. Довести, що G/H.

19. Нехай M, N – нормальні дільники групи G, G/M, G/N. Довести, що $M \cap N$ також є нормальними дільниками G.

20. Нехай $G/N, H \subset G.$ Довести, що $NH = HN$ – нормальний дільник G.

21. Нехай $H \subset G$ Довести, що $\bigcap xHx^{-1}$ є нормальний дільник G.

22. Перевірити, що $G/G = E,\ G/E = G$ (еквівалентні).

23. Нехай C_1, C_2, C_3 – класи спряжених елементів групи G, $C_1 \cap C_2C_3 \neq 0$. Довести, що $C_1 \subseteq C_2C_3$.

24. Нехай $a, b \in G$, причому $a^3 = b^7 = 1,\ ab = b^3a$. Довести, що b = 1.

25. Чи утворює групу множина матриць

$$1)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix},\ \prod a_{jj} \neq 0,\ \ 2)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0,$$

$$3)\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

якщо за груповий добуток взяти звичайний добуток матриць?

26. Довести, що $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$.

27. Нехай a - елемент скінченної групи порядку n. Вичислити a^n.

28. Довести, що елементи xy і yx спряжені.

29. Довести, що якщо існує гомоморфізм $G \to G^*$ і $G^* \to G^{**}$, то існує гомоморфізм $G \to G^{**}$.

30. Показати, що перетворення $C(\varphi)\cdot I$ є дзеркальним поворотом.

31. Нехай фігура Ф складається з усіх точок площини, що мають цілі координати в деякій прямокутній системі координат. Знайти підгрупу самопоєднань Ф і описати її підгрупи 4-го порядку.

32. Побудувати групу, прийнявши за генератори матриці

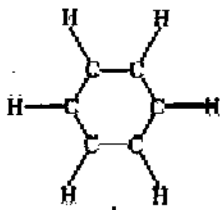
$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

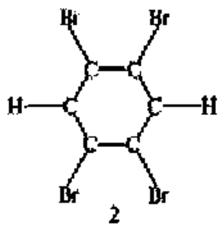
В якості групового множення узяти операцію множення матриць. Знайти її підгрупи, скласти квадрат Келі. Те ж для матриць

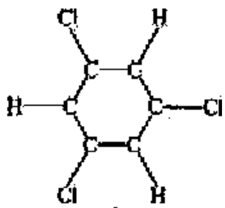
$$C = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ D =. \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

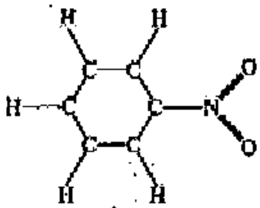
33. Знайти умови, при яких множина поворотів є скінченною групою.

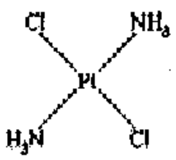
34. Визначити усі елементи симетрії плоских молекул на рисунку:

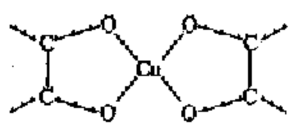

1


2


3


4





35. Для четверної групи Клейна D_2: скласти таблицю множення (таблицю Келі); визначити порядок елементів в групі; знайти праві (ліві) суміжні класи; знайти спряжені класи; знайти інваріантну підгрупу і фактор-групу.

36. Завдання 2.1 з книги М. Петрошень, Е. Трифонов «Применение теории групп в квантовой механике, стор. 25 по виданню 1967 р.

37. Довести, що підмножина $H \subset G$ є підгрупою в тому і тільки у тому ви-

падку, якщо з $a, b \in H$ витікає, що $ab^{-1} \in H$.

38. Довести, що підмножина $H \subset G$ є підгрупою в тому і тільки у тому випадку, якщо з $a, b \in H$ витікає, що $ab \in H,\ a^{-1} \in H$.

39. Довести, що всяка підгрупа індексу 2 – нормальна підгрупа.

40. Знайти ізоморфізм (відображення) групи позитивних дійсних чисел з груповою операцією звичайного множення і одиничним елементом – звичайною одиницею, на групу позитивних і негативних дійсних чисел з нулем в якості одиниці і складанням в якості групою операції.

41. Для групи D_3 знайти праві і ліві суміжні класи.

42. Групу D_3 розбити на класи спряжених елементів.

43. Для групи D_3 знайти нормальну підгрупу і фактор-групу. Скласти таблицю множення фактор-групи.

44. Довести, що для будь-якої підгрупи H групи G завжди існує праве і ліве розкладання G по H.

45. Довести, що підгрупа H групи G є нормальним дільником тоді і тільки тоді, коли для будь-якого $x \in G$ виконується $xH = Hx$.

46. У множині K, що складається з восьми елементів: 1, – 1, i, j, k, – i, – j, – k (тут знак мінус в даний момент не грає ніякій іншій ролі, крім того, що служить розрізняльним значком при завданні деяких елементів), задана дія за допомогою таблиці множення:

	1	-1	$-i$	i	$-j$	j	$-k$	k
1	1	-1	$-i$	i	$-j$	j	$-k$	k
-1	-1	1	i	$-i$	j	$-j$	k	$-k$
i	i	$-i$	1	-1	$-k$	k	j	$-j$
$-i$	$-i$	i	-1	1	k	$-k$	$-j$	j
j	j	$-j$	k	$-k$	1	-1	$-i$	i
$-j$	$-j$	j	$-k$	k	-1	1	i	$-i$
k	k	$-k$	$-j$	j	i	$-i$	1	-1
$-k$	$-k$	k	j	$-j$	$-i$	i	-1	1

Довести, що K є групою. Знайти усі її підгрупи і довести, що кожна з них є нормальним дільником K.

<u>Примітка</u>. Вказана група називається групою кватерніонів.

47. У всякій групі G підмножина, що складається з одного одиничного елементу е, і сама G є для G підгрупами і навіть нормальними дільниками. Довести.

48. Знайти праве і ліве розкладання групи кватерніонів К (див. завдання 46) по підгрупі, що складається з двох елементів: 1 і – 1. Порівняти їх і пояснити результат порівняння.

49. З'ясувати, які з наступних матриць зв'язані між собою в групі усіх дійсних неособливих квадратних матриць другого порядку:

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_3 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}.$$

50. Нехай N – нормальний дільник G. Довести, що для будь-яких елементів $x, y \in G$ виконується рівність $(xN) \cdot (yN) = xyN$.

51. Нехай група G гомоморфно відображається на групу G'. Довести, що G' ізоморфна деякої фактор-групі групи G.

Розрахункове завдання

Частина II

Теорія представлення. Точкові групи

1. Довести, що оператор A^+, спряжений лінійному операторові A, є лінійним оператором.

2. Довести, що $(AB)^+ = B^+A^+$.

3. Довести, що для унітарного оператора U його спряжений оператор U^+ співпадає із зворотним: $U^+ = U^{-1}$.

4. Довести, що якщо оператор $T(G_a)$ – представлення групи G в просторі L, тобто якщо $T(G_a)T(G_b) = T(G_aG_b)$, то еквівалентне матричне представлення також задовольняє цьому співвідношенню, якщо використати правила звичайного матричного множення.

5. Показати, що якщо відомий інваріантний підпростір, то матриця представлення в такому скінченномірному просторі наводиться до блочно-трикутного виду:

$$T_{(e)}(g) = \left\| \begin{array}{c|c} \underbrace{\begin{matrix} A(g) \\ \hline 0 \end{matrix}}_{k} & \begin{matrix} C(g) \\ \hline B(g) \end{matrix} \end{array} \right\| \Big\} k$$

6. Вивести друге співвідношення ортогональності характерів груп (ортогональність стовпців таблиці характерів).

7. Довести, що в прямому добутку груп $G_1 \times G_2$ число класів дорівнює добутку числа класів кожної з груп.

8. Вичислити порядки елементів груп S_3, D_4.

9. Чи циклічні групи S_n, D_n?

10. Довести, що якщо порядок групи – просте число, то група циклічна.

11. Довести, що група симетрій правильного n-кутника має порядок 2n

(мається на увазі група D_n)

12. Перевірити, що група D_3 ізоморфна C_{3v}.

13. Знайти підгрупу усіх самосуміщень кожної з наступних фігур в групі усіх рухів площини: 1) ромба; 2) квадрату; 3) рівнобедреного трикутника.

14. Нехай G – група обертань тривимірного векторного простору R_3 навколо осі Oz і $g \in G$ – поворот на кут φ_g. Довести, що відображення T:

$$T(g)=\begin{pmatrix} \cos\varphi_g & -\sin\varphi_g & 0 \\ \sin\varphi_g & \cos\varphi_g & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g\in G,$$

15. Нехай G– скінченна група і T – звідне представлення G матрицями порядку n. Довести, що T є цілком звідним представленням групи G.

16. Нехай T – незвідне представлення скінченної групи G матрицями порядку n, і нехай A – довільна квадратна матриця порядку n. Позначимо через X матрицю $\sum_{g\in G} T(g)AT(g^{-1})$. Довести, що знайдеться таке число λ, для якого X = λ E_n, де E_n - одинична матриця порядку n.

17. Довести, що всяке представлення абельової групи матрицями порядку $n > 2$ звідне.

18. Нехай представлення T групи G матрицями є прямою сумою представлень T_1, T_2 ..., T_m, і нехай χ – характер представлення T, χ_i – характери представлень T_i (i = 1...m). Довести, що $\chi(g) = \sum_{1}^{m} \chi(g)$ для кожного $g \in G$.

19. Довести, що характери усіх незвідних представлень скінченної абельової групи G є відображеннями, образами яких є тільки корені з 1.

20. Довести, що характери еквівалентних представлень групи G матрицями співпадають.

21. Знайти усі незвідні представлення циклічної групи G порядку n. Випи-

сати таблицю характерів цієї групи – дійсну і уявну.

22. Знайти найменшу множину елементів, що породжують групу D_n.

23. Показати, що усі елементи групи октаедра O породжуються поворотами навколо осей 4-го порядку.

24. Довести, що: a) характер одиничного елементу дорівнює розмірності представлення χ (E) = dim (T); b) для унітарного представлення характер зворотного елементу дорівнює характеру комплексно спряженого $\chi(G_a^{-1}) = \chi(G_a)^*$

25. Довести, що якщо $\chi_\Gamma = \chi_{\Gamma'}$, те представлення Г і Г' еквівалентні.

26. У 3-вимірному просторі Евкліда задана деяка декартова система координат. Як перетворяться функції x, x^2, sinx при повороті біля осі z на кут α?

27. Простежити за зміною типів ґраток при деформаціях, що викликають наступне пониження сингонії: $O_h \to D_{4h} \to D_{2h}$

28. Побудувати обернені гратки для плоских кристалів.

29 Розглядаючи групу трансляцій кристала як скінченну групу за періодичних граничних умов, написати співвідношення ортогональності для характерів НП групи трансляцій.

30 Визначити елементи симетрії об'ємних молекул на рисунку (переріз молекули на (2), (3) і (7) є квадратом, на (5), (6) і (8) – рівносторонній трикутник, на (1) усі кути O-C-O складають 120^0), рис. Д.1.

31 Для молекул 1, 3, 5, 7 на рисунку до завдання №30 визначити групу симетрії, розбити на класи, побудувати таблицю характерів НП.

32 Записати в матричній формі результати послідовної дії операцій: а) $2_x\bar{1}$; б) $6_z \cdot m_x$; в) $2_x 3_{111}$: г) $2_x m_z 3_{111}$; д) $3_z m_x$; е) $m_x 3_z$ і визначите отриману операцію.

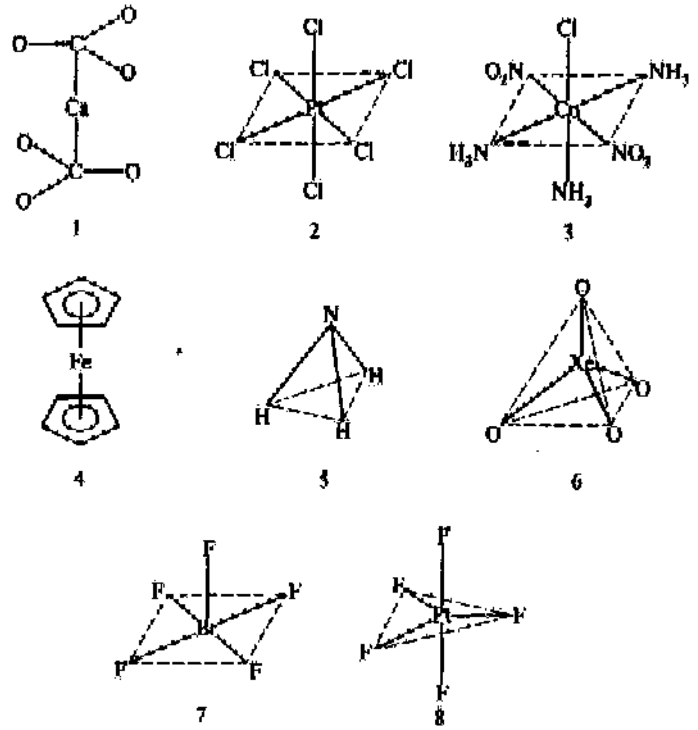


Рисунок Д 1. До завдання №30

33. Яким операціям симетрії відповідають наступні матриці:

$$
\text{а)}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad
\text{б)}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{pmatrix},\quad
\text{в)}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},
$$

$$
\text{г)}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},\quad
\text{д)}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\quad
\text{е)}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}.
$$

34. Зобразити графічно взаємне розташування осей початкової координатної системи і осей після перетворення точковими операціями, що мають в матричному записі вигляд:

$$
\text{а)}\begin{pmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\quad
\text{б)}\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\quad
\text{в)}\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},
$$

$$
\text{г)}\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad
\text{д)}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad
\text{е)}\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.
$$

35. Знайти матричне представлення операції симетрії, що дає той же результат, що і:

а) поворот навколо 3_z і поворот навколо 2_x;

б) поворот навколо 2_x і поворот навколо 3_x;

в) повороти навколо 4_x, навколо 2_y і навколо 2_x.

36. Записати міжнародною символікою точкові групи:

а) D_2, б) C_{2v}, в) C_{3v}, г) S_4, д) C_{4h}, е) D_{4h}, ж) C_{6h}, з) D_{6h}, и) T_h, к) O, л) T_d

37. Визначити усі можливі операції симетрії в кристалі з параметрами комірки $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^0, \gamma = 120^0$

38. Яким симетричним операціям відповідають наступні матриці?:

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

3) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ 4) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

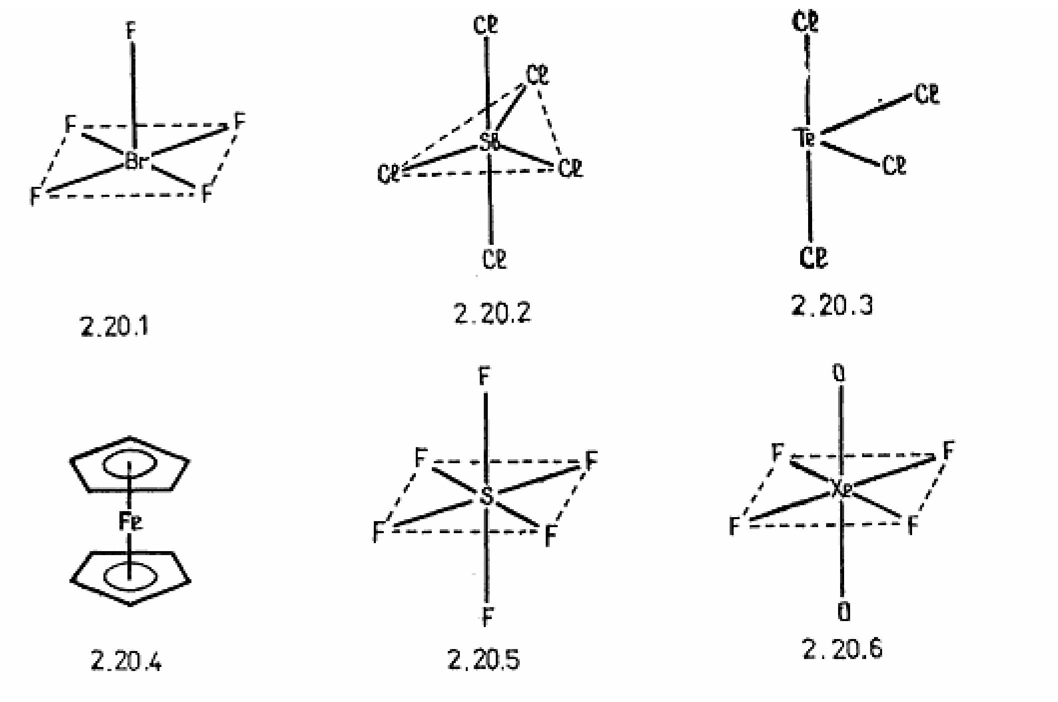
5) $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ 6) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

а) $\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, б) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, в) $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, г) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$,

д) $\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$, е) $\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$, ж) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$, з) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$,

39. Визначити точкову групу симетрії наступних молекул (на рис. нижчі): 1) BrF_5 (тетрагональна піраміда), 2) $SbCl_5$ (тригональна дипіраміда), 3) $TeCl_4$ (розташування двох зв'язків близьке до лінійного, два інші зв'язки

Te-C1 лежать в перпендикулярній площині), 4) фероцен (пентагональна анти призма), 5) SF_6 (октаедр), 6) XeO_2 F_4 (гіпотетична молекула, яка за формою має бути близька до октаедра).



2.20.1 2.20.2 2.20.3

2.20.4 2.20.5 2.20.6

Побудувати матриці НП, розбити на класи, побудувати таблицю характерів НП.

40. Побудувати групу, перемножуючи наступні елементи: поворот на кут π навколо осі z та відбиття в площині xy. Знайти класи спряжених елементів. Записати групу у вигляді прямого добутку.

41. Довести, що група D_6 є прямий добуток груп D_3 та C_2. Розбити групу на класи.

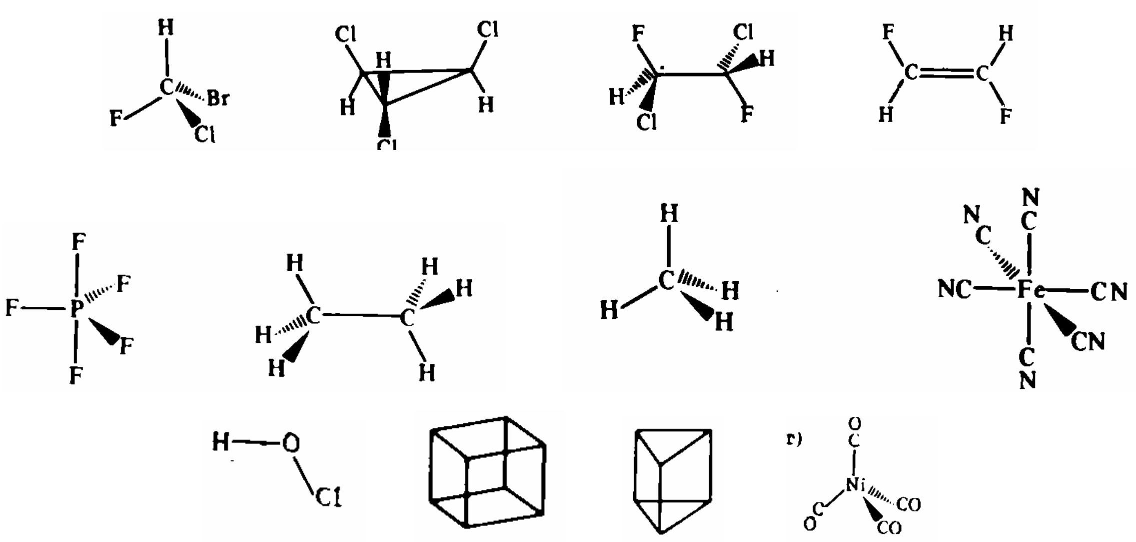
42. Якій групі ізоморфна група з елементом W = exp (i2π/6)?

43. Довести, що $\sigma_{v1}\sigma_{v2} = C(2\varphi)$, де φ – кут між площинами σ_{v1}, σ_{v2}.

44. Довести, що добуток поворотів на кут π навколо двох осей, що перетинаються під кутом φ є поворот на кут 2φ навколо осі перпендикулярної до двох вищезазначених.

45*.С використанням теорії груп виконати класифікацію нормальних коливань наступних молекул: NH_3 (група симетрії C_{3v}); $CHCl_3$ (C_{3v}).

46. Визначити точкові групи симетрії наступних молекул:



47. Знайти групи матриць, ізоморфні групам: C_{2h}, D_4, переконатися в ортогональності матричних елементів, побудувати таблицю характерів НП, переконатися в її ортогональності.

48. Показати, що $T \times i = O_h$.

49. Навести приклади молекул, які можуть мати симетрію C_{2v}, C_{3v}, D_{3h}.

50. Довести, що при $n = 2m+1$ $D_{nh} = D_n \times C_s$, а $D_{nh} = D_n \times C_i$ при $n = 2m$.

51. Показати, що трансляції утворюють інваріантну підгрупу просторової групи.

52. Дано звідне представлення групи C_{3v} з характерами:

C_{3v}	E	$2C_3$	3σ
χ	3	0	1

Розкласти його на незвідні частини.

Приклади індивідуальних завдань

1. Описати конкретні групи (вказати елементи групи), довести, що ці елементи складають групу, розбити на класи спряжених елементів, знайти підгрупи, праві і ліві суміжні класи, інваріантну підгрупу, фактор-групу, матричні представлення в координатах (x,y,z), довести ізоморфізм елементів групи і групи матриць, довести ортогональність матричних елементів незвідних представлень (НП), побудувати таблицю характерів НП, довести її ортогональність. Групи вказуються в завданні.

2. На фізичну систему, наприклад, молекулу, накладено збурення, група симетрії якого нижче, ніж симетрія системи, і яке знижує симетрію системи. Користуючись таблицею характерів НП точкових груп, знайти, як розщеплюються в результаті накладення збурення енергетичні двох- і трикратне вироджені рівні, що належать представленням E_1, E_2, T_1, T_2 групи симетрії системи, на які накладено збурення (такими системами можуть бути молекули з симетрією O, O_h, T, T_d, T_h). Описати обидві групи: системи, яка збурюється, та групу збурення. Симетрія груп вказується.

3. Квантово-механічна система має симетрію деякої точкової групи. Не вирішуючи рівняння Шредінгера, а користуючись таблицею характерів НП точкових груп, визначити число стаціонарних енергетичних рівнів і число хвильових функцій цієї системи. Відповідь обґрунтувати.

4. Побудувати симетризовані МО ЛКАО деяких молекул (в завданні вказується точкова симетрія молекул) з використанням оператора проектування виду $P^{(\alpha)} = \frac{S_\alpha}{g}\sum_g \chi^{(\alpha)*}(g_a)T(g)$ і зважаючи на перекриття тільки s – електронів.

5. Виходячи з ортогональності характерів НП точкових групи та теорем Бернсайда, знайти характери деяких груп (вказуються в завданні).