

Лекции о представлении пространственных групп

Введение

Предлагаемый конспект лекций, читанных мною в отделе физики твердого тела ИХ, не содержит какого-либо оригинального материала. Представления пространственных групп, важные для квантовой теории кристаллов, были найдены в 30-ых годах Ю. Вигнером и его сотрудниками, основываясь на классических работах основоположников теории представлений групп - Фробениуса и Шура. Метод "малых групп", введенный Вигнером, изложен в книге Г. Штрайтвольфа "Теория групп в физике твердого тела".

Я следовал, в основном, изложению Штрайтвольфа, дополнив его рядом пояснений и примеров, а также приложением, мотивирующим метод индуцирования представлений. За исключение этого приложения, использующего несколько более трудную алгебраическую технику (хотя и развиваемую здесь же), лекции предполагают лишь знакомство с определением группы и могут рассматриваться как элементарное введение в теорию групп и их представлений, специализированное для физиков с указанным кругом интересов.

Теоремы общего характера не доказываются, но точно формулируются и разъясняются на примерах. Детальный разбор примеров вообще составляет необходимое условие, при котором чтение этих записок может принести пользу.

Представления пространственных
групп

1. Определения и простейшие свойства

Движением трехмерного пространства называется его преобразование, сохраняющее расстояния между точками. Простейшие движения:

$$\begin{array}{ll} \text{трансляции (сдвиги): } \bar{y} = \bar{x} + \bar{a} , & \bar{a} \text{ - вектор;} \\ \text{вращения : } \bar{y} = \alpha \bar{x} , & \alpha \text{ - ортогональная} \\ & \text{матрица.} \end{array}$$

Наиболее общее движение имеет вид

$$\bar{y} = \alpha \bar{x} + \bar{a}$$

и записывается в виде $(\alpha | \bar{a})$; в частности, сдвиги имеют вид $(\epsilon | \bar{a})$, где ϵ - единичная матрица, вращения - вид $(\alpha | 0)$.

При $\det \alpha = 1$ вращение называется собственным; при $\det \alpha = -1$ - несобственным.

Произведение движений:

$$\bar{y} = \alpha \bar{x} + \bar{a} , \quad \bar{z} = \beta \bar{y} + \bar{b} ,$$

откуда $\bar{z} = \beta \alpha \bar{x} + (\beta \bar{a} + \bar{b})$, т.е.

$$(\beta | \bar{b}) (\alpha | \bar{a}) = (\beta \alpha | \beta \bar{a} + \bar{b}) . \quad (1.1)$$

Отсюда обратное движение:

$$(\alpha | \bar{a})^{-1} = (\alpha^{-1} | -\alpha^{-1} \bar{a}) . \quad (1.2)$$

Группа движений не является матричной группой; она изоморфна разным матричным группам, но это бесполезно, т.к. изоморфизм теряет наглядный смысл элементов $(\alpha | \bar{a})$.

Пусть \mathcal{G} - подгруппа группы движений; \mathcal{G} может содер-

жать некоторые трансляции $(\varepsilon|\bar{a})$ и некоторые винтовые движения $(\alpha|\bar{a})$ (в частности, вращения $(\alpha|0)$). В физике важен случай, когда в винтовые движения группы \mathcal{G} входит лишь конечное число разных вращений:

$$\alpha_1 = \varepsilon, \alpha_2, \dots, \alpha_n \quad (1.3)$$

и три линейно независимых трансляции.

В этом случае \mathcal{G} называется пространственной группой.

Вращения α_j (кроме $\varepsilon = \alpha_1$), вообще говоря, не являются элементами \mathcal{G} ; элементы \mathcal{G} имеют вид $(\alpha_j|\bar{v})$, где \bar{v} пробегает бесконечное множество векторов. Поскольку для двух элементов группы $(\alpha_j|\bar{v}_1)$, $(\alpha_j|\bar{v}_2)$ элемент $(\alpha_j|\bar{v}_1)(\alpha_j|\bar{v}_2)^{-1}$ также входит в группу и равен $(\varepsilon|\bar{v}_1 - \bar{v}_2)$ (т.е. является входящей в группу трансляций $(\varepsilon|\bar{R})$), все такие элементы представимы в виде

$$(\alpha_j|\bar{v}_{\alpha_j} + \bar{R}). \quad (1.4)$$

\bar{v}_{α_j} (если они не равны нулю) называются неэлементарными трансляциями пространственной группы \mathcal{G} ; они выбираются неоднозначно, в зависимости от удобства. Входящие в группу трансляции $(\varepsilon|\bar{R})$ называются элементарными. Они образуют абелеву подгруппу:

$$T \subset \mathcal{G}. \quad (1.5)$$

Элементарные трансляции порождаются тремя сдвигами $\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$,

$$\bar{R} = n_1 \bar{t}_1 + n_2 \bar{t}_2 + n_3 \bar{t}_3, \quad (1.6)$$

где n_1, n_2, n_3 - целые числа, $-\infty < n_k < \infty$. Мы предположим, что векторы $\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$ независимы; их выбор неоднозначен. Принято выбирать их для каждой группы \mathcal{G} некоторым стандартным способом. Для любых образующих \bar{t}_k имеем об"ем параллелепипеда:

$$(\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3) = \pm 1. \quad (1.7)$$

Пример 1. Группа цинковой обманки ZnS .

В этом кристалле атомы цинка расположены в вершинах четырех параллельных систем кубов:

$$(n_1 \cdot 2a, n_2 \cdot 2a, n_3 \cdot 2a), (n_1 \cdot 2a, n_2 \cdot 2a + a, n_3 \cdot 2a + a), \\ (n_1 \cdot 2a + a, n_2 \cdot 2a, n_3 \cdot 2a + a), (n_1 \cdot 2a + a, n_2 \cdot 2a + a, n_3 \cdot 2a), \quad (1.8)$$

где n_1, n_2, n_3 - целые, а число a - "постоянная решетки".

Атомы серы расположены в вершинах правильных тетраэдров, окружающих каждый атом цинка; радиусы - векторы вершин такого тетраэдра относительно атома Zn суть

$$\vec{r} = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2} \right), \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2} \right), \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{2} \right), \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{2} \right) \quad (1.)$$

(представьте себе и нарисуйте расположение атомов).

При выбранной системе координат начало $O(0, 0, 0)$ - атом Zn .

Вращения (собственные и несобственные), переводящие в себя ближайший к началу тетраэдр S , образуют группу T_d из 24 элементов (группа тетраэдра). Эти вращения $(\alpha_j | 0)$ ($j=1, \dots, 24$) входят в пространственную группу \mathcal{G} цинковой обманки (с нулевыми \vec{v}_α !). Трансляции $(\epsilon | \vec{R})$, переводящие в себя кристалл, совпадают с трансляциями, переводящими атомы Zn в одноименные атомы; векторы сдвига \vec{R} имеют вид

$$\vec{R} = n_1 \vec{t}_1 + n_2 \vec{t}_2 + n_3 \vec{t}_3, \quad (1.)$$

где n_k - целые, а векторы

$$\vec{t}_1 = a(0, 1, 1), \vec{t}_2 = a(1, 0, 1), \vec{t}_3 = a(1, 1, 0). \quad (1.)$$

Группа \mathcal{G} состоит из описанных вращений, трансляций, а также их произведений.

Пример 2. Группа алмаза.

Кристалл алмаза состоит только из атомов углерода, занимающих все места атомов Zn и атомов S предыдущего

примера. Поскольку теперь больше допустимых движений (исчезла разница между двумя видами атомов), группа алмаза шире группы $Z_n S$. Ясно, что в \mathcal{G} входят все движения описанной выше группы; кроме того, имеется еще столько же новых движений, которые сейчас будут описаны. Рассмотрим все вращения (собственные и несобственные), меняющие местами октанты координатной системы; их 48. Половина из них - вращения α_j предыдущего примера, входящие также и в пространственную группу алмаза. Это те вращения, которые переводят в себя тетраэдр (1.9). Остальные 24 вращения не входят в группу алмаза, т.к. переводят атомы С, расположенные в точках (1.9), в "пустые" места. Но если α - такое вращение, то движение

$$(\alpha | \bar{c}) \quad (\alpha \in T_d) \quad (1.12)$$

переводит кристалл алмаза в себя (проверьте это!). Итак, в группу \mathcal{G} входят элементы:

$$(\alpha_1 | 0), \dots, (\alpha_{24} | 0), (\alpha_{25} | \bar{c}), \dots, (\alpha_{48} | \bar{c}) \quad (1.13)$$

(ср. (1.3)). Трансляции, сохраняющие алмаз - те же, что в примере 1. \mathcal{G} состоит ^{из} описанных вращений, трансляций и их произведений. Вращения α_j ($j=1, \dots, 48$) образуют группу октаэдра O_h .

Пространственная группа \mathcal{G} называется симморфной, если она порождается только чистыми вращениями и трансляциями; иначе, если все \bar{v}_j могут быть взяты равными нулю. Еще одна формулировка: группа \mathcal{G} симморфна, если для каждого ее элемента $(\alpha | \bar{a})$ группа содержит также вращение $(\alpha | 0)$ (и, тем самым, трансляцию $(0 | \bar{a})$). Группа $Z_n S$ - симморфна, группа алмаза - не симморфна. Симморфные группы и их представления* устроены особенно просто,

Отметим, что при сдвиге координатной системы неэлементарные трансляции \bar{v}_{α_j} должны быть изменены (но группа остается симморфной или не симморфной). Перенесем начало координат в примере 2 в точку $\frac{1}{2}\bar{c} = (\frac{\alpha\sqrt{3}}{4}, \frac{\alpha\sqrt{3}}{4}, \frac{\alpha\sqrt{3}}{4})$. Тогда, как легко проверить, для всех α_j ($j=1, \dots, 48$) неэлементарные трансляции $\bar{v}_{\alpha_j} \neq 0$, причем (проверьте это!)

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\alpha_j} &= \frac{1}{2}(\alpha_j \bar{c} - \bar{c}) \text{ при } \alpha_j \in T_d \text{ (т.е. } j=1, \dots, 24), \\ \bar{v}_{\alpha_j} &= \frac{1}{2}(\alpha_j \bar{c} + \bar{c}) \text{ при } \alpha_j \in \bar{T}_d \text{ (т.е. } j=25, \dots, 48). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Это - "стандартное" расположение системы координат. (заметьте, что при таком расположении начало - не атом кристалла алмаза!).

2. Подгруппа трансляций и кристаллическая решетка

Пусть $(\epsilon | \bar{R})$ - элементарная трансляция (т.е. входящая в пространственную группу \mathcal{G}), $a = (\alpha | \bar{a})$ - элемент \mathcal{G} . (Здесь a без черточки - движение, \bar{a} - соответствующая a трансляция). Тогда

$$a^{-1}(\epsilon | \bar{R})a = (\alpha | \bar{a})^{-1}(\epsilon | \bar{R})(\alpha | \bar{a}) = (\epsilon | \alpha^{-1} \bar{R}), \quad (2.1)$$

или, символически: для подгруппы трансляций T и любого элемента a группы \mathcal{G}

$$a^{-1}Ta = T. \quad (2.2)$$

По определению, это значит, что T - инвариантная подгруппа \mathcal{G} (или: нормальный делитель \mathcal{G}). Иначе: рассмотрим "внутренний автоморфизм" группы \mathcal{G} , заданный формулой

$$\varphi_a(g) = a^{-1}ga \quad (2.3)$$

(это нечто вроде "замены базиса" в матричной алгебре). Тогда при любом $\alpha \in \mathcal{G}$ подгруппа T переходит в себя.

Из (2.1) видно, что если трансляция $(\epsilon | \bar{R})$ входит в \mathcal{G} и α - вращение, входящее в некоторый элемент $(\alpha | \bar{a})$ группы \mathcal{G} , то и трансляция $(\epsilon | \alpha \bar{R})$ входит в \mathcal{G} . (в самом деле, слева в (2.1) - произведение элементов \mathcal{G} , значит, и справа - элемент \mathcal{G} ; вместо \bar{a} можно взять \bar{a}^{-1}).

Возьмем теперь все вращения $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ (ср. (1.3)), входящие в какие-либо элементы $(\alpha | \bar{a})$ группы \mathcal{G} (здесь \bar{a} может быть не равно нулю, и тогда само вращение α не входит в \mathcal{G}). Эти вращения образуют группу, называемую точечной группой \mathcal{G}_0 пространственной группы \mathcal{G} . В самом деле, $\alpha_1 = \epsilon$ и $(\epsilon | 0)$ входит в \mathcal{G} , так что \mathcal{G}_0 содержит тождественное вращение ϵ ; если $(\alpha' | \bar{a}')$ и $(\alpha'' | \bar{a}'')$ входят в \mathcal{G} , то их произведение $(\alpha' \alpha'' | \alpha' \bar{a}'' + \bar{a}')$ входит в \mathcal{G} , так что для двух вращений α', α'' из \mathcal{G}_0 произведение $\alpha' \alpha''$ тоже входит в \mathcal{G}_0 ; наконец, $(\alpha | \bar{a}) = (\alpha^{-1} | -\alpha^{-1} \bar{a})$, так что для α из \mathcal{G}_0 обратное вращение входит в \mathcal{G}_0 .

Примеры. Для группы \mathcal{G} цинковой обманки \mathcal{G}_0 состоит из всех α_j ($j = 1, \dots, 24$) и входит, как подгруппа, в \mathcal{G} (в этом случае надо отождествить вращение α_j с движением, записываемым в виде $(\alpha_j | 0)$). \mathcal{G}_0 есть группа тетраэдра. Для группы алмаза \mathcal{G} точечная группа есть группа октаэдра O_2 ; при исходном расположении начала координат лишь половина ее элементов входит в \mathcal{G} , другие же $(\alpha_{25}, \dots, \alpha_{48})$ входят в состав движений из \mathcal{G} $(\alpha_j | \bar{c})$, но сами не являются элементами \mathcal{G} . При стандартном выборе начала только единичный элемент \mathcal{G}_0 входит в \mathcal{G} . Мы видим, что по поводу элементов точечной группы нет смысла

говорить, принадлежат ли они пространственной группе, пока не фиксирована система координат. Поэтому лучше представлять себе \mathcal{G}_0 как отдельную от \mathcal{G} группу, определяемую пространственной группой \mathcal{G} . Точечная группа не переводит кристалл в себя! Точнее, переводит лишь в случае симморфной группы \mathcal{G} (подумайте, почему). Итак, вращения α из точечной группы \mathcal{G}_0 переводят элементарные трансляции снова в элементарные трансляции; точнее, если $(\epsilon|\bar{R})$ входит в \mathcal{G} , то и $(\epsilon|\alpha\bar{R})$ входит в \mathcal{G} .

Возьмем теперь начало координат в любом атоме кристалла. Тогда сдвиги $(\epsilon|\bar{R})$ сохраняют кристалл, т.е. приводят ^{его атомы} в другие одноименные ~~его атомы~~. Таким образом, можно получить не весь кристалл, а, как правило, лишь часть его; во всяком случае, при наличии атомов разных элементов. Эта часть - система точек в пространстве - называется кристаллической решеткой, или решеткой Браве данного кристалла. (Иногда так же называют и самую подгруппу трансляций T , поскольку при заданном начале трансляции $(\epsilon|\bar{R})$ взаимно однозначно соответствуют точкам решетки).

Пример. Для группы $Z_n S$ и алмаза элементарные трансляции задаются формулами (1.10), (1.11). Если откладывать эти векторы из начала координат (~~арм~~ ^{атом} Z_n), то получаются в точности точки (1.8) (проверьте это). Они составляют решетку $Z_n S$. Если выбрать за начала атом S , например, в точке \bar{r} , то получается другая решетка $Z_n S$, из атомов S (она отличается от (1.8) сдвигом всех точек на \bar{r}).

В случае алмаза решетка выглядит так же; все атомы здесь одноименны, но лишь часть их входит в решетку. Подчеркнем

полное равноправие атомов (решетку можно строить, начиная с
бого из них).

Решетка с базисом (1.11) называется кубической гранецентриро-
ванной (ср. координаты точек решетки (1.8)). Теперь можно
перефразировать предыдущий вывод для решетки (вместо транс-
ляций): все вращения точечной группы переводят решетку кри-
сталла в себя (но не весь кристалл в себя!).

Может оказаться, что решетка кристалла, рассматриваемая са-
ма по себе, т.е. отвлекаясь от других точек кристалла, инва-
риантна относительно большего числа вращений (а не только
входящих в точечную группу). Все вращения, переводящие кри-
сталлическую решетку в себя, образуют группу голоэдри кри-
сталла. Поскольку вращения из точечной группы обладают этим
свойством, точечная группа является подгруппой группы голоэд-
рии.

Примеры. В случаях ZnS и алмаза решетка одна и та же, а
значит, одна и та же группа голоэдри (зависящая только от
решетки, но не от остального строения кристалла). Группа го-
лоэдри в обоих случаях – группа октоэдра O_h (система кубов
должна совместиться сама с собой, т.е. октанты лишь меняют-
ся местами).

Точечной группой для ZnS служит группа тетраэдра
(собственная подгруппа O_h). Для алмаза точечная группа сов-
падает со всей группой голоэдри O_h ; такой кристалл называ-
ется голоэдрическим. Итак, кристалл ZnS – симморфный, но
не голоэдрический; кристалл алмаза – голоэдрический, но не
симморфный. (Повторите определения этих понятий). С помощью
решетки можно разбить пространство на ячейки, каждая из ко-

торых содержит существенный структурный элемент ("базис") кристалла, периодически повторяющийся в других ячейках. Проще всего это делается следующим образом. Возьмем точку решетки A и рассмотрим все точки пространства, отстоящие от A ближе, чем от всех других точек решетки. Такие точки образуют ячейку Вигнера-Зейтца рассматриваемого кристалла. Пусть α - элемент точечной группы того же кристалла. Поскольку вращение α переводит решетку в себя, точки, более близкие к A , перейдут в точки с тем же свойством. Итак, вращения точечной группы вокруг точки решетки переводят соответствующую этой точке ячейку Вигнера-Зейтца в себя. (В действительности то же верно относительно группы голоэдри). Более того, вращения точечной группы (и даже группы голоэдри) вокруг точки A переводят ячейку Вигнера-Зейтца любой другой точки решетки B в ячейку точки αB ; то же верно для трансляций из T , т.е. входящих в \mathcal{G} . В этих рассуждениях существенно, чтобы вращение или трансляция переводили решетку в себя; тогда они переводят в себя и все связанное с этой решеткой разбиение пространства на ячейки Вигнера-Зейтца.

С другой стороны, преобразование из пространственной группы $(\alpha|\bar{a})$, с $\alpha \in \mathcal{G}$, не переводит решетку в себя, тем самым, не переводит в себя разбиение на ячейки. Итак, ячейки Вигнера-Зейтца связаны только с решеткой кристалла; построение их требует знания только решетки, а их свойства инвариантности лишь постольку связаны с пространственной группой, поскольку те или иные атрибуты последней (вращения точечной группы, трансляции) сохраняют решетку.

Примерн. 1. Кубическая гранецентрированная решетка (рис. 1)

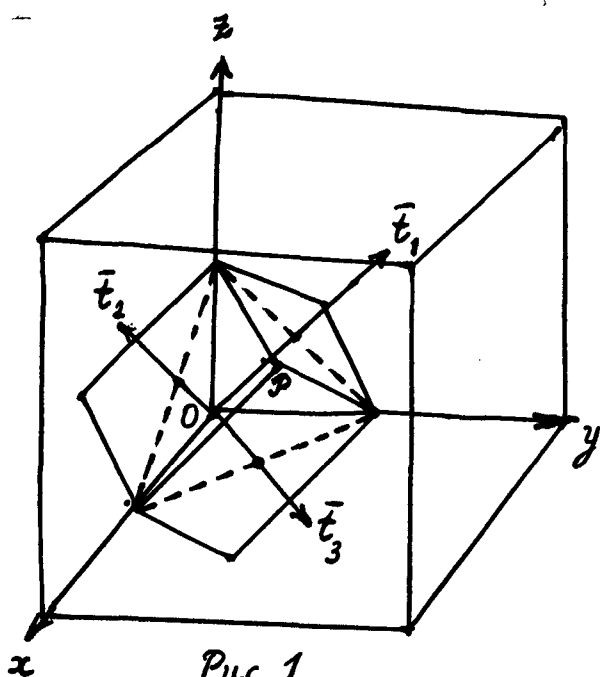


Рис. 1.

Базис решетки $-(1.11)$, ^{координаты} коэффициенты точек $-(1.0)$. Чтобы получить область пространства, более близкую к 0, чем к другим точкам решетки, соединим 0 прямолинейными отрезками с этими другими точками и через середины отрезков проведем перпендикулярные к ним плоскости. На рис. 1 такие плоскости проходят через пунктирные линии параллельно осям координат. Такие плоскости задают полупространства, содержащие 0; пересечение этих полупространств и есть ячейка Вигнера-Зейтца. Часть ячейки, заключенная в 1-ом октанте, есть тетраэдр; грани его смежные с P, продолжаютя в соседних октантах, образуя три ромба. Всего ячейка В.-З. ограничена 12-ю такими (равными) ромбами и называется ромбододекаэдром. (Отрезки, ведущие в более далекие точки решетки, не влияют на ячейку В.-З.: соответствующие плоскости проходят через вершины ромбододекаэдра).

2. Кубическая об"емноцентрированная решетка (рис. 2).

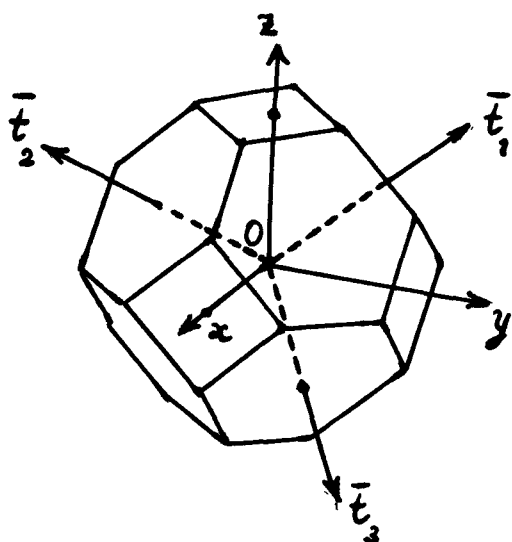


Рис. 2.

Базис решетки:

$$\begin{aligned} \bar{t}_1 &= \vartheta (\bar{1}, 1, 1), & \bar{t}_2 &= \vartheta (1, \bar{1}, 1), \\ \bar{t}_3 &= \vartheta (1, 1, \bar{1}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

где $\bar{1} = -1$, как это принято в кристаллографии для сокращения осей, а ϑ - постоянная решетки.

Координаты точек решетки:

$$\begin{aligned} (n_1 \cdot 2\vartheta, n_2 \cdot 2\vartheta, n_3 \cdot 2\vartheta), \\ (n_1 \cdot 2\vartheta + \vartheta, n_2 \cdot 2\vartheta + \vartheta, n_3 \cdot 2\vartheta + \vartheta), \end{aligned} \quad (2.5)$$

где n_k - целые, \mathbf{v} - постоянная решетки.

Таким образом, точки решетки - вершины двух параллельных систем кубов.

Соединяя точку O с точками $(\pm \mathbf{v}, \pm \mathbf{v}, \pm \mathbf{v})$, проводя затем перпендикулярные к этим отрезкам плоскости через полученные отрезки, получаем октаэдр с центром в O . Соединяя, далее, O с точками $(\pm 2\mathbf{v}, 0, 0)$, $(0, \pm 2\mathbf{v}, 0)$, $(0, 0, \pm 2\mathbf{v})$, получаем плоскости, отсекающие от октаэдра его углы. В итоге ячейка В.-З. ограничена восемью (как можно показать, правильными) шестиугольниками, лежащими на гранях октаэдра, и восемью квадратами, перпендикулярными координатным осям. Этот многогранник иногда называют усеченным додекаэдром.

Ячейки В.-З. заполняют все пространство, не налегая друг на друга. Однако, они прилегают друг к другу по границам. Для дальнейшего удобно присоединять к каждой ячейке такую часть ~~ее~~ ^{ее} границы, чтобы полученные таким образом пополненные ячейки (1) не пересекались, т.е. не имели общих точек, и (2) переходили друг в друга при сдвигах $(\mathbf{e} | \bar{\mathbf{R}})$ группы T . Будем предполагать, что такое присоединение раз навсегда фиксировано. (Подумайте, как это можно сделать в двух предыдущих примерах).

Пусть W_A - ячейка с центром в A , W'_A - та часть границы W_A которая присоединена к W_A . Ненулевая элементарная трансляция $(\mathbf{e} | \bar{\mathbf{R}})$ переводит A в некоторую точку решетки $B \neq A$, W'_A , W_B и W'_B в W'_B . Если $\bar{\mathbf{z}}$ - внутренняя точка W'_A (т.е. $\bar{\mathbf{z}} \in W'_A$, $\bar{\mathbf{z}} \in W'_A$), то $\bar{\mathbf{z}} + \bar{\mathbf{R}}$ - внутренняя точка W'_B и, тем самым, не лежит на границе W'_A . Назовем точки $\bar{\mathbf{z}}_1, \bar{\mathbf{z}}_2$ конгруэнтными относительно решетки, если $\bar{\mathbf{z}}_2 - \bar{\mathbf{z}}_1$ - элементарная трансляция.

Тогда предыдущее утверждение означает, что внутренняя точка ячейки не может быть конгруэнтна никакой точке внутри или на границе той же ячейки. Пусть теперь $\bar{z} \in W_A'$ (граничная точка ячейки). Тогда $\bar{z} + \bar{R} \in W_B'$ и, тем самым, $\bar{z} + \bar{R}$ принадлежит другой ячейке W_B . Но при этом может случиться что W_A и W_B примыкают по части границы и $\bar{z} + \bar{R}$ принадлежит границе W_A (хотя и не входит в W_A' и, следовательно не входит в W_A). Итак, граничная точка ячейки может быть конгруэнтна точке, лежащей на границе той же ячейки, хотя и причисляемой к соседней. Поясним все это на простейшем случае

Пример. Простая кубическая решетка. Базис имеет вид:

$$\bar{t}_1 = (1, 0, 0), \quad \bar{t}_2 = (0, 1, 0), \quad \bar{t}_3 = (0, 0, 1) \quad (2.6)$$

Точки решетки - вершины системы кубов. Ячейка В.-З. с центром в $(0, 0, 0)$ - куб $\left\{ -\frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \leq y < \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \leq z < \frac{a}{2} \right\}$, к которому присоединена часть границы, как видно из предыдущих неравенств. Другие ячейки В.-З. получаются из этой Δ свигами по осям на целые кратные a ; разные ячейки не имеют при этом общих точек. Две точки \bar{z}_1, \bar{z}_2 конгруэнтны относительно решетки, если $\bar{z}_2 - \bar{z}_1 = \bar{R}$ - целое кратное a .

Если $\bar{z} = (x, y, z)$ и $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} < y < \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2}$ (внутренняя точка ячейки), то $\bar{z} + \bar{R}$ при $\bar{R} \neq 0$ не принадлежит "замкнутому" кубу $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \leq y \leq \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2}$. Однако, для точки $\bar{z} = (-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, -\frac{a}{2})$, принадлежащей ячейке и лежащей на ее границе, конгруэнтная точка $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ лежит на границе ячейки, хотя и принадлежит соседней $\left\{ \frac{a}{2} \leq x < \frac{3}{2}a, \frac{a}{2} \leq y < \frac{3}{2}a, \frac{a}{2} \leq z < \frac{3}{2}a \right\}$

Несколько педантичное изложение на предшествующей странице предохранит нас в дальнейшем от путаницы. Повторим еще раз: * когда говорится, что точка принадлежит ячейке W_A , имеется в

виду, что она лежит либо внутри W_A , либо на той части границы W_A' , которая причислена к W_A . С других точек границы W_A мы не будем говорить, что они принадлежат W_A : они лежат на границе W_A но не принадлежат W_A .

Теперь ясно, что для каждой точки пространства существует оди только одна конгруэнтная ^{ей} точка, принадлежащая заданной ячейке В.-З.; в самом деле, любая точка \bar{z} принадлежит единственной ячейке W_B , поскольку все ячейки покрывают пространство и не имеют ^{общих} точек, и конгруэнтная \bar{z} точка в W_A получается сдвигом на $\bar{R} = \bar{B}A$.

3. Представления группы трансляций.

Построение представлений пространственных групп мы начнем с подгруппы трансляций. Напомним, что Γ состоит из всех чистых трансляций $(\epsilon | \bar{R})$, которые входят в пространственную группу \mathfrak{g} . В силу (1.6), группа Γ является прямой суммой (другой термин + прямым произведением - применяется для неабелевых групп) трех групп, каждая из которых изоморфна группе целых чисел; это значит, что элементам группы трансляций $(\epsilon | \bar{R})$ взаимно однозначно соответствуют тройки (n_1, n_2, n_3) целых чисел (1.6), причем сложению трансляций $\bar{R}_1 + \bar{R}_2$ соответствует "покомпонентное" сложение троек. Для группы целых чисел \mathbb{Z} (с операцией сложения) все представления можно получить следующим образом. Поскольку группа абелева, все неприводимые представления одномерны; каждое из них сопоставляет целым числам n некоторые комплексные числа z_n , причем $z_{n_1+n_2} = z_{n_1} \cdot z_{n_2}$, по определению представления.

Сверх того, мы будем строить унитарные представления, а

"унитарная матрица первого порядка" есть комплексное число вида e^{iy} , где y действительно. Для любого фиксированного действительного числа k формула

$$z_n^{(k)} = e^{-ikn} \quad (3.1)$$

задает представление группы целых чисел; в самом деле,

$$z_0^{(k)} = e^{-ik \cdot 0} = 1, \quad z_{n_1+n_2}^{(k)} = e^{-ik(n_1+n_2)} = e^{-ikn_1} \cdot e^{-ikn_2} = z_{n_1}^{(k)} \cdot z_{n_2}^{(k)}.$$

Можно показать, что группа целых чисел \mathbb{Z} не имеет никаких других неприводимых представлений, кроме заданных в виде (3.1). Каждое такое представление нумеруется действительным числом. При этом изменение k на кратное 2π приводит к тому же представлению, так что для полной нумерации представлений \mathbb{Z} группы \mathbb{Z} достаточно взять

$$0 \leq k < 2\pi. \quad (3.2)$$

Можно показать, что неприводимые представления группы T (также одномерные, поскольку T абелева) строятся путем "перемножения" представлений ее "прямых" слагаемых. Точнее, трансляции $(\varepsilon | \bar{R})$ ставится в соответствие комплексное число

$$\mathcal{D}^{(k_1, k_2, k_3)}(\varepsilon | \bar{R}) = z_{n_1}^{(k_1)} \cdot z_{n_2}^{(k_2)} \cdot z_{n_3}^{(k_3)} = e^{-i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)}, \quad (3.3)$$

где действительные числа k_i удовлетворяют неравенствам (3.2). Таким образом, получают все неприводимые унитарные представления группы T , нумеруются же они тройками чисел (k_1, k_2, k_3) (Знак $-$ в показателе (3.1) пишут по установившейся традиции; $+$ был бы не хуже).

Для более наглядного изображения таких троек построим "двойственный" базис $\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3$, связанный с базисом $\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$ заданной кристаллической решетки соотношениями

$$\bar{t}_i \cdot \bar{v}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (3.4)$$

Тогда тройку (k_1, k_2, k_3) можно изобразить вектором

$$\bar{k} = k_1 \bar{v}_1 + k_2 \bar{v}_2 + k_3 \bar{v}_3, \quad (3.5)$$

а представление (3.3) записывается в виде

$$\mathcal{D}^{(\bar{k})}(\varepsilon | \bar{R}) = e^{-i(\bar{k} \bar{R})}. \quad (3.6)$$

Для полной нумерации представлений вектор \bar{k} достаточно брать в параллелепипеде, заданном неравенством

$$0 \leq k_i < 2\pi, \quad (3.7)$$

т.е. построенном на векторах $\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3$ с присоединением части границы.

Тогда между векторами \bar{k} и представлениями $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$ группы трансляций устанавливается взаимно-однозначное соответствие.

Базис $\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3$ определяет некоторую решетку, состоящую из векторов

$$\bar{K} = m_1 \bar{v}_1 + m_2 \bar{v}_2 + m_3 \bar{v}_3, \quad (3.8)$$

где m_1, m_2, m_3 — целые числа. Это — обратная решетка для заданной решетки (1.6). Векторы (3.5) задают одно и то же представление группы T в том и только том случае, если они отличаются на вектор обратной решетки:

$$\bar{k}_2 - \bar{k}_1 = \bar{K}. \quad (3.9)$$

Теперь можно в качестве стандартного набора векторов \bar{k} , нумерующих представления группы T, взять векторы любой ячейки какого угодно разбиения пространства, инвариантного относительно трансляций (а не только разбиения на параллелепипед определяемого векторами $\bar{v}_1, \bar{v}_2, \bar{v}_3$).

В самом деле, надо только, чтобы для каждого вектора \bar{k} в ячейке был один и только один конгруэнтный ему вектор, и чтобы никакие два вектора ячейки не были конгруэнтны; здесь понятие конгруэнтности относится к обратной решетке (ср.

(3.9)). Этим требованиям удовлетворяют ячейки В.-З. обратной решетки, построенные с соблюдением сделанных в § 2 соглашений по поводу граничных точек (для чего и нужны были эти соглашения). Ячейка В.-З. обратной решетки называется зоной Бриллюэна заданной решетки (или еще: первой зоной Бриллюэна).

Пример. Пусть заданная кристаллическая решетка - кубическая гранецентрированная (1.10), с базисом (1.11).

$$\bar{t}_1 = a(0, 1, 1), \quad \bar{t}_2 = a(1, 0, 1), \quad \bar{t}_3 = a(1, 1, 0). \quad (3, 10)$$

Двойственный базис имеет вид (ср. (3,4)):

$$\bar{b}_1 = \frac{\pi}{a}(\bar{1}, 1, 1), \quad \bar{b}_2 = \frac{\pi}{a}(1, \bar{1}, 1), \quad \bar{b}_3 = \frac{\pi}{a}(1, 1, \bar{1}). \quad (3, 11)$$

Как показывает сравнение с (2.4), обратная решетка в этом случае - кубическая об"емноцентрированная, с постоянной решетки $b = \frac{\pi}{a}$; векторы базиса обратной решетки обозначаются через \bar{b}_j , в отличие от базиса исходной решетки \bar{t}_i . Ячейки В.-З. исходной гранецентрированной решетки - ромбододекаэдр в пространстве (x, y, z) (рис. 1); зона Бриллюэна той же исходной решетки - усеченный октаэдр в "двойственном" пространстве (k_1, k_2, k_3) (рис. 2).

Условимся при построении представлений группы трансляций T по формуле (3.6) всегда брать вектор \bar{k} в зоне Б. заданной решетки (определяемой как система векторов (1.6) группой T) Тогда векторы \bar{k} , по сказанному выше, взаимно однозначно нумеруют представления $\mathcal{D}(\bar{k})$.

Вектор \bar{k} называется при этом волновым вектором для соответствующего представления.

Все построения этого § используют только решетку кристалла, т.е. задающую ее подгруппу трансляций T пространственной

группы \mathcal{G} . С представлений этой подгруппы и начинается построение представлений \mathcal{G} . Однако, перед этим нам придется аппроксимировать пространственную группу конечными группами (из-за наличия трансляций пространственные группы имеют счетное число элементов).

12 4. Аппроксимация Борна-Кармана

Теория представлений значительно проще для конечных групп, чем для бесконечных. В связи с этим полезно заменить изучаемую пространственную группу \mathcal{G} "близкими" к ней конечными группами. Это можно сделать, например, следующим образом. Рассмотрим подгруппу группы трансляций T , состоящую из всех

$$(\varepsilon | \bar{R}_N) \text{ с } \bar{R}_N = p_1 \mathcal{N} \bar{t}_1 + p_2 \mathcal{N} \bar{t}_2 + p_3 \mathcal{N} \bar{t}_3, \quad (4.1)$$

где p_1, p_2, p_3 - произвольные целые числа, а \mathcal{N} - фиксированно большое целое число. Условимся отождествлять трансляции $(\varepsilon | \bar{R}_1)$, $(\varepsilon | \bar{R}_2)$, если

$$\bar{R}_2 - \bar{R}_1 = \bar{R}_N. \quad (4.2)$$

Тогда группа T превращается в факторгруппу T_N , состоящую из трансляций "по модулю \mathcal{N} ", а вся пространственная группа в конечную группу \mathcal{G} , в которой $(\alpha | \bar{R}_1)$ и $(\alpha | \bar{R}_2)$ отождествляются в один элемент при условии (4.2). Различные "трансляции по модулю" \mathcal{N} могут быть заданы их представителями $(\varepsilon | \bar{R})$, у которых

$$\bar{R} = n_1 \bar{t}_1 + n_2 \bar{t}_2 + n_3 \bar{t}_3, \quad 0 \leq n_i < \mathcal{N} \quad (i=1, 2, 3). \quad (4.3)$$

Факторизованная группа T_N имеет, таким образом, порядок \mathcal{N}^3 .

Представления группы $T_{\mathcal{N}}$ задаются той же формулой (3.3), но теперь числа k_1, k_2, k_3 не могут быть выбраны произвольно: надо учесть условия периодичности, согласно которым наборы целых чисел

$$(n_1, n_2, n_3), (n_1 + p_1 \mathcal{N}, n_2 + p_2 \mathcal{N}, n_3 + p_3 \mathcal{N})$$

изображают один и тот же элемент группы $T_{\mathcal{N}}$. Отсюда, для однозначности представления, получаются условия:

$$k_i \mathcal{N}, k_2 \mathcal{N}, k_3 \mathcal{N} - \text{целые кратные } 2\pi. \quad (4.4)$$

Следовательно, в качестве k_i надо брать кратные $\frac{2\pi}{\mathcal{N}}$; достаточно взять

$$k_i = 0, \frac{2\pi}{\mathcal{N}}, 2 \cdot \frac{2\pi}{\mathcal{N}}, \dots, (\mathcal{N}-1) \frac{2\pi}{\mathcal{N}} \quad (i=1, 2, 3). \quad (4.5)$$

поскольку дальнейшие кратные не дают, по формуле (3.3), ничего нового. Векторы \bar{k} с компонентами из набора (4.4) (ср. (3.5)) образуют при большом \mathcal{N} достаточно плотную сеть в параллелепипеде (3.7); таким образом, при переходе от T к конечной группе $T_{\mathcal{N}}$ непрерывно зависящее от \bar{k} семейство унитарных неприводимых представлений (3.6) сводится к конечному числу представлений с дискретными векторами \bar{k} .

Физический смысл "периодической аппроксимации" Борна-Кармана состоит в замене "бесконечного кристалла", инвариантного относительно пространственной группы \mathcal{G} , "периодическим кристаллом", в котором все точки, отстоящие друг от друга на векторы $\bar{R}_{\mathcal{N}}$, физически тождественны. Ясно, что при достаточно большом \mathcal{N} любая конечная область кристалла такой периодичностью не затрагивается. Впрочем, и "бесконечный кристалл" - тоже некоторая абстракция.

Аппроксимация Борна-Кармана вводится для того, чтобы обойти

математические трудности двойного рода.

Во-первых, способ перехода от представлений группы трансляций T к представлениям пространственной группы \mathcal{G} , описываемый ниже, опирается на некоторые теоремы, справедливые для конечных групп, но не для всяких групп вообще. Эти теоремы верны и для \mathcal{G} , но было бы сложно формулировать условия для бесконечных групп, при которых они все же верны. Поэтому теоремы удобнее формулировать для конечной группы \mathcal{G}_N .

Во-вторых, для бесконечных групп \mathcal{G} меняется самый смысл разложения их представлений на неприводимые. У этих последних оказывается континуальное семейство (ср. (3.5)), и вместо суммы представлений разложение требует "интеграла по параметрам" представлений. Переход к \mathcal{G}_N избавляет от такой сложной техники, при другой "абстрактной схеме" кристалла, с физической стороны не менее удовлетворительной.

Что касается самого набора неприводимых представлений то он для \mathcal{G}_N и для \mathcal{G} строится одинаково (это и будет нашей задачей). Берется "волновой вектор" — любой вектор \vec{k} в зоне Б. пространственной группы, если ищут представления \mathcal{G} , или же один из дискретной сети векторов (4.5), если ищут представления \mathcal{G}_N (к этому и сводится вся разница, если интересоваться лишь неприводимыми представлениями; поэтому аппроксимация Б.-К. для дальнейшего не так уж важна). Для каждого \vec{k} строится представление $\mathcal{D}^{(\vec{k})}$ (см. (3.6)). Затем надо найти некоторую подгруппу \mathcal{G} , связанную с \vec{k} ("малая группа" Вигнера), что не представляет затруднений, и некоторые специальные неприводимые представления этой малой группы, в чем и состоит главная трудность. Но малая группа все же "меньше" всей группы \mathcal{G} , и

эту задачу удается разрешить для всех пространственных групп и всех \bar{K} . Наконец, по представлениям малой группы строятся все неприводимые представления группы \mathcal{G} методом "индуцированных представлений" Фробениуса и Шура. Этот этап уже нетруден

5. Малая группа и ее допустимые представления

Начнем с общей конструкции, которая нам пригодится в разных случаях. Пусть \mathcal{G} - любая группа, H - инвариантная подгруппа \mathcal{G} (т.е.

$$a^{-1}Ha = H \quad \text{для всех } a \in \mathcal{G} \quad (5.1)$$

Пусть дано неприводимое представление \mathcal{D} группы H ; матрицы этого представления будем обозначать $\mathcal{D}(h)$, где $h \in H$.

(Заметим, что для $a \notin H$ $\mathcal{D}(a)$ не имеет смысла, т.к. представление задано только на H !).

Фиксируем любой элемент $a \in \mathcal{G}$. Тогда, в силу (5.1),

$$h' = a^{-1}ha \in H \quad \text{для всех } h \in H. \quad (5.2)$$

Поэтому имеет смысл

$$\mathcal{D}(h') = \mathcal{D}(a^{-1}ha). \quad (5.3)$$

(Здесь нельзя писать $\mathcal{D}(a^{-1}ha) = \mathcal{D}(a)^{-1}\mathcal{D}(h)\mathcal{D}(a)$, поскольку $\mathcal{D}(a)$ при $a \notin H$ не имеет смысла!)

Положим теперь, для фиксированного a и всех $h \in H$,

$$\mathcal{D}_a(h) = \mathcal{D}(a^{-1}ha). \quad (5.4)$$

Покажем, что матрицы $\mathcal{D}_a(h)$ образуют представление инвариантной подгруппы H :

$$\mathcal{D}_a(\varepsilon) = \mathcal{D}(a^{-1}\varepsilon a) = \mathcal{D}(\varepsilon) = 1$$

(ε - единица группы H , 1 - единичная матрица);

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_a(h_1, h_2) &= \mathcal{D}(a^{-1}h_1, h_2 a) = \mathcal{D}(a^{-1}h_1, a \cdot a^{-1}h_2 a) = \\ & \text{(здесь } a^{-1}h_1 a, a^{-1}h_2 a \text{ принадлежат } \mathcal{H} \text{ вместе с } h_1, h_2) \\ &= \mathcal{D}(a^{-1}h_1, a) \mathcal{D}(a^{-1}h_2, a) \\ & \text{(по определению представления группы)} \\ &= \mathcal{D}_a(h_1) \mathcal{D}_a(h_2). \end{aligned}$$

Когда a пробегает группу \mathcal{G} , получаем систему представлений подгруппы \mathcal{H} , называемую орбитой представления \mathcal{D} (каждый элемент a переводит \mathcal{D} в некоторое представление из орбиты - в \mathcal{D}_a). Легко видеть, что из любого представления орбиты можно тем же способом получить всю орбиту (докажите это в виде упражнения). Все представления, ^{лежащие} на одной орбите, сопряжены друг другу. Если $a \in \mathcal{H}$, то можно выполнить разложение

$$\mathcal{D}_a(h) = \mathcal{D}(a^{-1}ha) = \mathcal{D}(a)^{-1} \mathcal{D}(h) \mathcal{D}(a) = W^{-1} \mathcal{D}(h) W, \quad (5.5)$$

где матрица W не зависит от h . Это значит, что представления \mathcal{D} и \mathcal{D}_a эквивалентны: $\mathcal{D}_a \sim \mathcal{D}$, т.е. переходят одно в другое при замене базиса в векторном пространстве представления.

Может случиться, что $\mathcal{D}_a \sim \mathcal{D}$ и при некоторых $a \notin \mathcal{H}$. Назовем такие элементы a группы \mathcal{G} , для которых $\mathcal{D}_a \sim \mathcal{D}$, "хорошими". Тогда единица ε - "хороший" элемент, и если a, b - "хорошие", то и ab - "хороший" элемент:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\varepsilon &= \mathcal{D}, \\ \mathcal{D}_{ab}(h) &= \mathcal{D}((ab)^{-1}h(ab)) = \mathcal{D}(b^{-1}a^{-1}hab) = \mathcal{D}_b(a^{-1}ha) = V^{-1} \mathcal{D}(a^{-1}ha) V = V^{-1} \mathcal{D}_a(h) \\ & \text{(поскольку } \mathcal{D}_b \sim \mathcal{D} \text{ ; } V \text{ - невырожденная матрица)} \\ &= V^{-1} W^{-1} \mathcal{D}(h) W V \end{aligned}$$

(поскольку $\mathcal{D}_a \sim \mathcal{D}$, W - невырожденная матрица)

$$= (WV)^{-1} \mathcal{D}(h) (WV),$$

а это значит, что $\mathcal{D}_{ab} \sim \mathcal{D}$.

Следовательно, "хорошие" элементы \mathcal{G} образуют подгруппу груп-

ны \mathfrak{g} ; она обозначается через \mathcal{L} и называется малой группой Вигнера, соответствующей группе \mathfrak{g} , инвариантной подгруппе \mathcal{H} и ее представлению \mathcal{D} . Так как все элементы \mathcal{H} - "хорошие" (ср.(5.5), то \mathcal{H} - подгруппа \mathcal{L} ; итак,

$$\mathcal{H} \subset \mathcal{L} \subset \mathfrak{g}. \quad (5.6)$$

Рассмотрим наиболее важный для дальнейшего случай, когда \mathfrak{g} -пространственная группа, а \mathcal{H} - подгруппа трансляций Γ . Тогда все неприводимые унитарные представления Γ имеют вид (3.6) (и тем самым одномерны). Возьмем в качестве исходного представления \mathcal{D} представление $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$ и построим для $\mathfrak{g}, \mathcal{H}, \mathcal{D}^{(\bar{k})}$ орбиту и малую группу. Предварительно заметим, что для одномерных представлений эквивалентность означает совпадение ("одномерные матрицы" = числа коммутируют). Пусть $a = (\alpha | \bar{a})$ - элемент пространственной группы \mathfrak{g} . Тогда для трансляции $(\epsilon | \Gamma)$ имеем (см.(2.1)):

$$a^{-1}(\epsilon | \bar{R})a = (\alpha | \bar{a})^{-1}(\epsilon | \bar{R})(\alpha | \bar{a}) = (\epsilon | \alpha^{-1} \bar{R}). \quad (5.7)$$

Отсюда, вследствие инвариантности скалярного произведения $(\bar{k} | \alpha^{-1} \bar{R}) = \alpha \bar{k} | \bar{R}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_a^{(\bar{k})}(\epsilon | \bar{R}) &= \mathcal{D}^{(\bar{k})}(a^{-1}(\epsilon | \bar{R})a) = \mathcal{D}^{(\bar{k})}(\epsilon | \alpha^{-1} \bar{R}) = \\ &= e^{-i\bar{k} \cdot \alpha^{-1} \bar{R}} = e^{-i\alpha \bar{k} \cdot \bar{R}} = \mathcal{D}^{(\alpha \bar{k})}(\epsilon | \bar{R}). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Таким образом, для представления $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$ все сопряженные ему представления имеют тот же вид, но с векторами $\alpha \bar{k}$ вместо \bar{k} где α принадлежит точечной группе \mathfrak{g}_0 группы \mathfrak{g} . Когда α пробегает всю точечную группу, получаем векторы

$$\alpha_1 \bar{k} = \epsilon \bar{k} = \bar{k}, \alpha_2 \bar{k}, \dots, \alpha_j \bar{k}, \dots, \alpha_n \bar{k}. \quad (5.9)$$

Если \bar{k} - внутренний вектор зоны B . (построенной вокруг начала координат O , помещенного в точке кристаллической реше

то все векторы (5.9) тоже лежат внутри зоны B .

Если же \bar{k} принадлежит зоне B , но лежит на ее границе (т.е.

$\bar{k} \in W_0'$, ср. § 2), то некоторые из векторов (5.9) могут не принадлежать W_0 . Тогда мы заменим их конгруэнтными векторами \bar{k}_j , лежащими в зоне B :

$$\alpha_j \bar{k} = \bar{k}_j + \bar{K}_j, \quad \text{где } \bar{K}_j \text{ - вектор обратной решетки. (5.10)}$$

Векторы

$$\bar{k}_1 = \bar{k}, \bar{k}_2, \dots, \bar{k}_j, \dots, \bar{k}_n \quad (5.11)$$

(не обязательно все различные) образуют звезду волнового вектора \bar{k} относительно пространственной группы \mathcal{G} . Итак, все представления орбиты, содержащей $D^{(\bar{k})}$, взаимно однозначно определяются различными векторами звезды вектора \bar{k} ; они имеют вид

$$D^{(\bar{k}_1)} = D^{(\bar{k})}, \dots, D^{(\bar{k}_j)}, \dots, D^{(\bar{k}_n)}, \quad (5.12)$$

где представления (как и векторы \bar{k}_j) не обязательно различны. Если все векторы (5.11) различны, они образуют звезду общего типа.

Примеры. 1. Звезда общего типа в группе алмаза.

В этом случае зона B - усеченный октаэдр (рис. 2), вершины которого (отсеченные при построении зоны B) лежат на координатных осях. Равенства

$$\alpha_j \bar{k} = \bar{k} + \bar{K}_j, \quad (5.13)$$

задают конечное число плоскостей; если \bar{k} им не принадлежит, то звезда \bar{k} - общего типа. Когда \bar{k} - внутренний вектор зоны B , (5.13) сводится к

$$\alpha_j \bar{k} = \bar{k}. \quad (5.14)$$

Поскольку точечная группа алмаза \mathcal{G}_0 есть группа октаэдра O_h

(§ 2), преобразование α_j лишь может менять местами координатные оси, с изменением направлений некоторых из них. Поэтому плоскости (5.14) суть координатные плоскости и плоскости вид

$$x = \pm y, \quad y = \pm z, \quad z = \pm x. \quad (5.15)$$

Если \bar{k} — внутренний вектор усеченного октаэдра, не лежащий на одной из этих плоскостей, то звезда \bar{k} — общего типа.

2. Звезда специального типа в решетке алмаза.

Построим зону B для алмаза, как на рис. 2, т.е. вокруг начала координат E -пространства, и обозначим ее через W_0 (ср. § 4). По определению зоны B , к W_0 следует присоединить часть ее границы, не содержащую точек, конгруэнтных относительно обратной решетки. В силу (3.11), векторы \bar{K} обратной решетки суть линейные комбинации с целочисленными коэффициентами векторов

$$\left(\pm \frac{2\pi}{a}, 0, 0 \right), \left(0, \pm \frac{2\pi}{a}, 0 \right), \left(0, 0, \pm \frac{2\pi}{a} \right), \left(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a} \right)$$

со всевозможными комбинациями знаков. Отсюда видно, что в усеченном октаэдре (рис. 2) конгруэнтны противоположащие шестиугольники и квадраты. Поэтому в качестве граничной части

W_0' зоны B можно взять, например, шестиугольник в первом октанте и смежные с ним грани, за исключением ребер, принадлежащих плоскостям $k_i = -\frac{\pi}{a}$ ($i=1, 2, 3$) (эти ребра конгруэнтны ребрам в плоскостях $k_i = \frac{\pi}{a}$). В дальнейшем будем придерживаться этого соглашения.

Рассмотрим вектор

$$\bar{k} = \left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right),$$

принадлежащий W_0' и, тем самым, зоне B . Вращения α_j из точечной группы алмаза меняют местами октанты и, следовательно, переводят \bar{k} в векторы, занимающие такое же положение в других октантах:

$$\alpha_j \bar{k} = \left(\pm \frac{\pi}{2a}, \pm \frac{\pi}{2a}, \pm \frac{\pi}{2a} \right).$$

Конгруэнтные им векторы \bar{k}_j , лежащие в зоне B , суть

$$\left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right), \left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right), \left(\frac{\pi}{2a}, -\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right), \left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, -\frac{\pi}{2a} \right);$$

они и образуют звезду вектора \bar{k} .

Малая группа $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ состоит из таких элементов $(\alpha | \bar{a})$ пространственной группы алмаза \mathcal{G} , для которых $\alpha \bar{k}$ конгруэнтен \bar{k} (ср. (5.13)). Из всех 48 векторов $\alpha_j \bar{k}$ конгруэнтны \bar{k} только два:

$$\left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right), \left(-\frac{\pi}{2a}, -\frac{\pi}{2a}, -\frac{\pi}{2a} \right).$$

Следовательно, в малую группу $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ входят те ~~и~~ и только те $(\alpha | \bar{a})$, у которых $\alpha \bar{k} = \bar{k}$ или $\alpha \bar{k} = -\bar{k}$. Легко видеть, что существует 6 вращений α_j , сохраняющих \bar{k} :

тождественное вращение ε ;

вращения $\delta_{xyz}^{\pm 1}$ на углы $\pm \frac{\pi}{3}$ вокруг оси $x=y=z$;

зеркальные отражения $\rho_{x\bar{y}}, \rho_{y\bar{z}}, \rho_{z\bar{x}}$ относительно соответственных плоскостей $x=y, y=z, z=x$.

(обозначения связаны с нормалью ^н, задающими эти плоскости, напр., $x=-y, z=0$). Далее, существует 6 вращений α_j , переводящих \bar{k} в $-\bar{k}$:

инверсия i ;

$$\sigma_{xyz}^{\pm 1} = i \delta_{xyz}^{\pm 1};$$

$$\delta_{2x\bar{y}} = i \rho_{x\bar{y}}, \delta_{2y\bar{z}} = i \rho_{y\bar{z}}, \delta_{2z\bar{x}} = i \rho_{z\bar{x}}$$

(обозначение σ_{xyz} связано с тем, что это вращение шестого

порядка, т.е. $\sigma_{xyz}^6 = \varepsilon$). Заметим, что $\delta_{2x\bar{y}}, \delta_{2y\bar{z}}, \delta_{2z\bar{x}}$ - вращения на угол π вокруг соответствующих осей (каких?). Элементы $(\alpha | \bar{a})$ пространственной группы, содержащие указанные вращения, записываются в зависимости от выбора начала координат в x -пространстве. Условимся пользоваться "стандартным" выбором, при котором (ср.(1.14)) инверсия i входит в пространственную группу (без трансляции!). Тогда для шести вращений α , сохраняющих \bar{k} , имеем $\frac{1}{2}(\alpha\bar{c} - \bar{c}) = 0$, и так как они входят в группу \mathcal{T}_d , их неэлементарные трансляции $\bar{v}_\alpha = 0$; для шести остальных α имеем $1/2(\alpha\bar{c} + \bar{c}) = 0$ и так как они не входят в \mathcal{T}_d , то опять все $\bar{v}_\alpha = 0$. Таким образом, малая группа $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ состоит из чистых вращений, описанных выше.

В качестве другого примера рассмотрим вектор \bar{k} с компонентами

$$(0 < k_1 < c, k_2 = \frac{\pi}{a}, k_3 = 0),$$

где $c =$ половине диагонали квадратной грани (рис.2). Легко проверить, что в точечной группе алмаза имеется два вращения

ε, δ_{2x} , переводящих \bar{k} в себя (δ_{2x} - вращение вокруг оси x на угол π), и два вращения ρ_y, ρ_z , переводящих \bar{k} в конгруэнтный вектор $(k_1, k_2 - \frac{2\pi}{a}, k_3)$ (ρ_y - отражение относительно плоскости xz , ρ_z - относительно xy).

Первые два вращения принадлежат \mathcal{T}_d ; для ε имеем $\varepsilon\bar{c} - \bar{c} = 0$, $\bar{v}_\varepsilon = 0$, для δ_{2x} имеем $\delta_{2x}\bar{c} - \bar{c} = -\bar{c}_1$, $\bar{v}_{\delta_{2x}} = -\frac{1}{2}\bar{c}_1$, где \bar{c}_1 - базисный вектор (3.10). для остальных двух вращений, не входящих в \mathcal{T}_d , имеем

$$\bar{v}_{\rho_y} = \frac{1}{2}(\bar{c} + \rho_y \bar{c}) = \frac{1}{2}\bar{c}_2, \bar{v}_{\rho_z} = \frac{1}{2}(\bar{c} + \rho_z \bar{c}) = \frac{1}{2}\bar{c}_3.$$

Итак, $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ состоит из элементов

$$(\epsilon|0), (\delta_{2x} | \frac{1}{2}\bar{t}_1), (\rho_y | \frac{1}{2}\bar{t}_2), (\rho_z | \frac{1}{2}\bar{t}_3) \quad (\bar{v}_z = -\frac{1}{2}\bar{t}_1 + \bar{t}_2, \text{ также допуска- тима!})$$

Звезда вектора \bar{k} состоит из трех векторов, принадлежащих входящим в зону Б. граничным квадратам; найдите их.

Предыдущие примеры достаточно раз'ясняют понятие малой группы и оправдывают ее название: $\mathfrak{g}_{\bar{k}}$ содержит меньше элементов и устроена проще, чем вся пространственная группа \mathfrak{g} . В случае алмаза имеется одно исключение - вектор $\bar{k} = 0$, для которого малая группа $\mathfrak{g}_{0k} = \mathfrak{g}$, поскольку этот вектор переводится в себя всеми вращениями. Вообще, имеем

$$T \subset \mathfrak{g}_{\bar{k}} \subset \mathfrak{g}, \quad (5.16)$$

где не исключается совпадение $\mathfrak{g}_{\bar{k}} = \mathfrak{g}$.

Вернемся теперь к общей ситуации, когда группа \mathfrak{g} содержит инвариантную подгруппу \mathcal{H} , для которой строится малая группа \mathcal{L} :

$$\mathcal{H} \subset \mathcal{L} \subset \mathfrak{g}. \quad (5.17)$$

Предположим, что задано неприводимое представление \mathcal{D} группы \mathcal{H} . Нас будут интересовать некоторые специальные неприводимые представления $\mathcal{D}^{(e)}$ малой группы \mathcal{L} , связанные с представлением \mathcal{D} следующим образом: ограничение представления $\mathcal{D}^{(e)}$ на подгруппу \mathcal{H} распадается на неприводимые представления, эквивалентные \mathcal{D} . Такие представления малой группы мы назовем допустимыми. Смысл этого определения состоит в следующем. Если l -любой элемент группы \mathcal{L} , то матрица $\mathcal{D}^{(e)}(l)$ имеет, вообще говоря, общий вид; но если, в частности, h -элемент подгруппы \mathcal{H} , то $\mathcal{D}^{(e)}(h)$ имеет ящичный вид:

$$\mathcal{D}^{(e)}(h) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1(h) & & & & \\ & \mathcal{D}_2(h) & & & \\ & & \dots & & \\ 0 & & & & \mathcal{D}_s(h) \end{pmatrix}, \quad (5.18)$$

важных случаях представления таких точечных групп. Далее будет описана процедура "индуцированных" представлений, позволяющая по известным допустимым представлениям малых групп построить все неприводимые представления пространственной группы \mathcal{G} . Наконец, мы вернемся к малым группам и покажем, как искать их допустимые представления в более сложных случаях. Все это будет иллюстрироваться на группе алмаза.

6. Представления малой группы в простейших случаях

Пусть дан "волновой вектор" \bar{k} в зоне Б., и $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ - его малая группа. Точечной группой вектора \bar{k} ^{называется группа} $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ всех вращений α , входящих в элементы (α/\bar{a}) малой группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}$. Например, в случае алмаза для рассмотренных векторов \bar{k} имеем:

$\bar{k} = 0$. $\mathcal{G}_{\bar{k}} = O_h$ (группа октаэдра).
 $\bar{k} = (\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$. $\mathcal{G}_{\bar{k}} = \mathcal{G}_{\bar{k}} = D_{3d}$ (группа, переводящая в себя тело из двух трехгранных правильных призм, поставленных друг на друга с поворотом на угол $\frac{\pi}{3}$).

$\bar{k} = (k, \frac{\pi}{a}, 0)$, $0 < k < c$. $\mathcal{G}_{\bar{k}} = C_{2v}$ (группа, переводящая в себя равнобедренный, не равносторонний треугольник).

Читателю рекомендуется проверить, что описанные в § 5 вращения действительно составляют группы только что указанного строения.

Точечная группа $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ устроена проще малой группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}$. Прежде всего, это конечная группа (подгруппа точечной группы кристалла \mathcal{G}_0). В ряде случаев для разыскания неприводимых пред-

ставлений $\mathfrak{g}_{O\bar{K}}$ достаточно простых соображений, излагаемых в § 7. Сейчас мы укажем, как можно - в некоторой простейшей ситуации, к сожалению, не всегда встречающейся - по неприводимым представлениям $\mathfrak{g}_{O\bar{K}}$ строить неприводимые представления малой группы $\mathfrak{g}_{\bar{K}}$, и притом сразу допустимые (никакие другие нам не нужны).

Прием состоит в следующем. Пусть $\mathcal{D}_{O\bar{K}}$ - неприводимое представление группы $\mathfrak{g}_{O\bar{K}}$ - уже известно. Тогда для каждого элемента $(\beta|\bar{v})$ малой группы $\mathfrak{g}_{\bar{K}}$ положим

$$\mathcal{D}_{\bar{K}}(\beta|\bar{v}) = e^{-i\bar{k}\bar{v}} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta). \quad (6.1)$$

Иначе говоря, мы поступаем здесь так, как если бы можно было отдельно представить $(\varepsilon|\bar{v})$ и $(\beta|0)$, первый элемент с помощью $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$, второй - с помощью $\mathcal{D}_{O\bar{K}}$, а затем перемножить полученные число и матрицу.

Посмотрим, когда формула (6.1) задает представление $\mathfrak{g}_{\bar{K}}$.

Имеем

$$\mathcal{D}_{\bar{K}}(\beta|\bar{v}) \mathcal{D}_{\bar{K}}(\beta'|\bar{v}') = e^{-i\bar{k}(\bar{v}+\bar{v}')} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta) \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta') = e^{-i\bar{k}(\bar{v}+\bar{v}')} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta\beta'), \quad (6.2)$$

поскольку $\mathcal{D}_{O\bar{K}}$ - представление. С другой стороны,

$$\mathcal{D}_{\bar{K}}((\beta|\bar{v})(\beta'|\bar{v}')) = \mathcal{D}_{\bar{K}}(\beta\beta'|\beta\bar{v}'+\bar{v}) = e^{-i\bar{k}(\beta\bar{v}'+\bar{v})} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta\beta') = e^{-i\beta^{-1}\bar{k}\cdot\bar{v}'} e^{-i\bar{k}\bar{v}}$$

(здесь использована инвариантность скалярного произведения при вращении β^{-1})

$$= e^{i(\bar{k}-\beta^{-1}\bar{k})\bar{v}'} e^{-i\bar{k}(\bar{v}+\bar{v}')} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\beta\beta'). \quad (6.3)$$

Чтобы $\mathcal{D}_{\bar{K}}$ было представлением малой группы $\mathfrak{g}_{\bar{K}}$, необходимо и достаточно, чтобы правые части (6.2) и (6.3) совпадали, чтобы для всех $(\beta|\bar{v})$, $(\beta'|\bar{v}')$ из $\mathfrak{g}_{\bar{K}}$ было

$$e^{i(\bar{k}-\beta^{-1}\bar{k})\bar{v}'} = 1. \quad (6.4)$$

~~(6.4)~~

Рассмотрим два случая, когда это условие выполнено.

1. \bar{k} — внутренний вектор зоны Б.

В этом случае $\beta^{-1}\bar{k}$ — тоже внутренний вектор зоны Б., поскольку β^{-1} принадлежит точечной группе \mathcal{G}_0 и переводит зону Б. в себя, внутренние точки — во внутренние (§ 5). Но тогда \bar{k} и $\beta^{-1}\bar{k}$ не конгруэнтны, поскольку внутри зоны Б. нет конгруэнтных пар точек. Вспомним, теперь, что $(\beta^{-1}|\beta^{-1}\bar{v}) = (\beta|\bar{v})^{-1}$ принадлежит малой группе вместе с $(\beta|\bar{v})$; по определению малой группы,

$$\beta^{-1}\bar{k} = \bar{k} + \bar{\mathcal{K}}, \quad (6.5)$$

где $\bar{\mathcal{K}}$ — вектор обратной решетки (см. (5.13)). Так как $\beta^{-1}\bar{k}$ и \bar{k} не конгруэнтны, они могут только совпадать: $\beta^{-1}\bar{k} - \bar{k} = 0$, откуда следует (6.4).

II. \bar{k} — граничный вектор зоны Б., но группа $\mathcal{G}_{\bar{R}}$ симморфна.

Это значит (ср. §1), что вместе с $(\beta'|\bar{v}')$ группа $\mathcal{G}_{\bar{R}}$ содержит $(\beta'|0)$ и $(\epsilon|\bar{v}')$. Таким образом, \bar{v}' — элементарная трансляция \bar{R} . Если мы докажем, что $\bar{k} - \beta^{-1}\bar{k}$ — вектор обратной решетки, то из (3.4) получим (6.4). Но это как раз и означает (6.5) (где на этот раз не обязательно $\bar{\mathcal{K}} = 0$).

Из случаев, рассмотренных в § 5, вектор $\bar{k} = (\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$ удовлетворяет условию (6.4), так как его малая группа симморфна (состоит из чистых вращений).

Напротив, для вектора $\bar{k} = (k, \frac{\pi}{a}, 0)$, группа $\mathcal{G}_{\bar{R}}$ не симморфна, и описанная техника построения представлений малой группы неприменима.

Для внутреннего вектора $\bar{k} = 0$ построение (6.1) применимо.

(Заметим, что в этом случае $\mathcal{G}_{\bar{k}} = \mathcal{G}$, т.е. малая группа не симморфна).

Покажем, что если $\mathcal{D}_{0\bar{k}}$ — неприводимое представление, то и $\mathcal{D}_{\bar{k}}$ неприводимо. В самом деле, неприводимость представления, по лемме Шура, равносильно тому, что со всеми матрицами представления коммутируют только скалярные матрицы (кратные единичной). Но в силу (3.1) любая матрица одновременно коммутирует с $\mathcal{D}_{0\bar{k}}(\beta)$ и $\mathcal{D}_{\bar{k}}(\beta|\bar{\theta})$; тем самым, представления $\mathcal{D}_{0\bar{k}}, \mathcal{D}_{\bar{k}}$ одновременно приводимы или нет (предполагая, что $\mathcal{D}_{\bar{k}}$ — действительно представление, например, при условии I или II).

Покажем, что если $\mathcal{D}_{\bar{k}}$ построено по формуле (3.1) из любого представления $\mathcal{D}_{0\bar{k}}$ группы $\mathcal{G}_{0\bar{k}}$, то $\mathcal{D}_{\bar{k}}$ допустимо. В самом деле, пусть в (3.1) $(\beta|\bar{\theta}) = (\epsilon|\bar{R})$ (=трансляция). Тогда $\beta = \epsilon$, $\mathcal{D}_{0\bar{k}}(\beta) = I$ (по определению представления), и $\mathcal{D}_{\bar{k}}(\epsilon|\bar{R}) = e^{-i\epsilon\bar{R}}$ (ср.(3.6)).

Условия I или II достаточно для справедливости (3.4), но не необходимы. Могут быть и другие случаи, когда прием (3.1) дает представления малой группы. Чтобы ^{облегчить} ~~обеспечить~~ применение критерия (3.4), перепишем его следующим образом. Имеем

$$(\beta'|\bar{\theta}') = (\beta'|\bar{v}_{\beta'}) (\epsilon|\bar{R}),$$

где $\bar{v}_{\beta'}$ — неэлементарная трансляция, принадлежащая вращению

β', \bar{R} — элементарная трансляция (§ 1). Отсюда

$$e^{i(\bar{k}-\beta'^{-1}\bar{k})\bar{\theta}'} = e^{i(\bar{k}-\beta'^{-1}\bar{k})\bar{v}_{\beta'}} e^{i(\bar{k}-\beta'^{-1}\bar{k})\bar{R}}.$$

Но второй множитель = 1, вследствие (3.5). Поэтому вместо

(3.4) достаточно проверить, что для всех β, β' из $\mathcal{G}_{0\bar{k}}$

$$e^{i(\bar{k}-\beta'^{-1}\bar{k})\bar{v}_{\beta'}} = 1. \quad (3.6)$$

7. Неприводимые представления некоторых точечных групп

Существует обширная теория представлений конечных групп, содержащая различные общие методы, примененные ^{или} ко всем вообще конечным группам. Нас, однако, интересуют те не очень сложные группы, которые встречаются в качестве точечных групп волновых векторов. В этих случаях удастся найти все неприводимые представления с помощью общих теорем теории представлений и простых интуитивных соображений. Напомним нужные нам теоремы.

Элементы α, α' группы \mathcal{G}_0 называются сопряженными, если существует такой элемент β той же группы, что $\alpha' = \beta^{-1} \alpha \beta$. Будем записывать сопряженность в виде $\alpha \sim \alpha'$. Тогда легко доказать следующие свойства:

- (1) $\alpha \sim \alpha$ (отношение сопряженности рефлексивно);
- (2) Если $\alpha \sim \alpha'$, то $\alpha' \sim \alpha$ (отн. сопр. симметрично: если $\alpha' = \beta^{-1} \alpha \beta$, то $\alpha = (\beta^{-1})^{-1} \alpha' (\beta^{-1})$);
- (3) Если $\alpha \sim \alpha'$ и $\alpha' \sim \alpha''$, то $\alpha \sim \alpha''$ (отн. сопр. транзитивно: если $\alpha' = \beta^{-1} \alpha \beta$, $\alpha'' = \gamma^{-1} \alpha' \gamma$, то $\alpha'' = (\beta \gamma)^{-1} \alpha (\beta \gamma)$).

Группа \mathcal{G}_0 распадается на классы сопряженности - множества (и подгруппы!) без общих элементов, в каждом из которых все элементы сопряжены друг другу, в то время как элементы разных классов друг другу не сопряжены.

Примеры. 1. Группа всех вращений $O(3)$. Пусть α - вращение с осью ℓ на угол φ , α' - вращение с осью ℓ' на угол φ' (тождественное вращение ε пока оставляем в стороне). Тогда

сопряженность $\alpha \sim \alpha'$ означает существование такого вращения β , что $\alpha' = \beta^{-1} \alpha \beta$. Возьмем вектор \bar{k} , направленный вдоль e ; тогда для вектора $\bar{k}' = \beta^{-1} \bar{k}$ имеем $\alpha' \bar{k}' = \beta^{-1} \alpha (\bar{k}) = \beta^{-1} (\bar{k}) = \bar{k}'$, так что \bar{k}' направлен вдоль e' . Отсюда вытекает, что любые два вращения α, α' на один и тот же угол сопряжены: в качестве β достаточно взять произвольное из вращений, переводящих k' в k . Таким образом, для каждого угла $\varphi, 0 < \varphi < 2\pi$, имеется один класс сопряженности. Тожественное вращение составляет само по себе класс, т.к. $\beta^{-1} \varepsilon \beta = \varepsilon$. Мы видим, что сопряженность, в случае группы вращений или ее подгруппы, означает "геометрическую однотипность" вращений.

Рассмотрим классы сопряженности несобственных вращений ($c \det = -1$).

2. Группа тетраэдра T_d . Расположим тетраэдр относительно координатных осей, как это изображено на рис. 3:

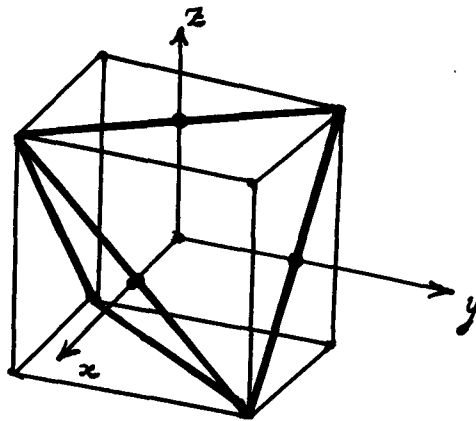


Рис. 3

Классы сопряженности группы T_d имеют следующий состав:

- 1) ε
 - 2) $\delta_{2x}, \delta_{2y}, \delta_{2z}$ — (7.1)
- вращение на угол π вокруг осей x, y, z , соответственно;

$$3) \quad \sigma_{4x}, \sigma_{4x}^{-1}, \sigma_{4y}, \sigma_{4y}^{-1}, \sigma_{4z}, \sigma_{4z}^{-1}, \quad (7.2)$$

где $\sigma_{4x}^{\pm 1}$ — вращение на угол $\pm \frac{\pi}{2}$ вокруг оси x (соединяющей середины противоположащих ребер), умноженное на инверсию, и аналогично для других осей;

$$4) \quad \rho_{xy}, \rho_{x\bar{y}}, \rho_{yz}, \rho_{y\bar{z}}, \rho_{zx}, \rho_{z\bar{x}}, \quad (7.3)$$

где ρ_{xy} — отражение в плоскости $x = -y$, $\rho_{x\bar{y}}$ — отражение в плоскости $x = y$ и т.д.

$$5) \quad \delta_{3xyz}^{\pm 1}, \delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1}, \delta_{3\bar{x}y\bar{z}}^{\pm 1}, \delta_{3\bar{x}\bar{y}z}^{\pm 1}, \quad (7.4)$$

где $\delta_{3xyz}^{\pm 1}$ — вращение на угол $\pm \frac{\pi}{3}$ вокруг оси $x=y=z$

$\delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1}$ — вращение на угол $\pm \frac{\pi}{3}$ вокруг оси $x=y=-z$ и т.д.

Покажите, что элементы каждого класса сопряжены друг другу, а элементы разных классов — нет (воспользуйтесь примером 1).

3. Абелевы группы. Если \mathcal{G}_0 — абелева, то всегда $\beta^{-1}\alpha\beta = \alpha$, так что каждый класс сопряженности состоит из единственного элемента, а число их равно порядку группы.

Число неприводимых представлений конечной группы (считая эквивалентные представления за одно) дается следующей теоремой:

Теорема А. Число неэквивалентных неприводимых представлений конечной группы равно числу ее классов сопряженности.

(Напомним, что в случае конечной группы все неприводимые представления конечномерны, и каждое из них эквивалентно унитарному представлению).

Критерий, позволяющий проверить неприводимость представления, опирается на понятие характера представления. Пусть

\mathcal{D} - представление конечной группы \mathcal{G}_0 . Тогда для каждого элемента группы α можно вычислить след $\text{Sp } \mathcal{D}(\alpha)$ матрицы $\mathcal{D}(\alpha)$, зависящей от α ; тем самым на группе задана функция с комплексными значениями

$$\chi(\alpha) = \text{Sp } \mathcal{D}(\alpha), \quad (7.5)$$

называемая характером представления \mathcal{D} .

Пример. В случае группы T_d все элементы - вращения пространства α , изображаемые матрицами третьего порядка; например, для $\alpha = \delta_{2x}$ имеем матрицу

$$\mathcal{D}(\delta_{2x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

для $\alpha = \rho_{xy}$ - матрицу

$$\mathcal{D}(\rho_{xy}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

и т.д. \mathcal{D} - представление группы T_d (почему?)

Соответствующий характер $\chi(\alpha)$ равен сумме диагональных элементов:

$$\chi(\delta_{2x}) = -1, \quad \chi(\rho_{xy}) = 1, \quad \text{и т.д.}$$

Если $\alpha' = \beta^{-1}\alpha\beta$, то $\mathcal{D}(\alpha') = \mathcal{D}(\beta)^{-1}\mathcal{D}(\alpha)\mathcal{D}(\beta)$, откуда

$$\chi(\alpha') = \text{Sp } \mathcal{D}(\alpha') = \text{Sp } \mathcal{D}(\alpha) = \chi(\alpha)$$

(эквивалентные матрицы имеют равные следы). Поэтому характер принимает одинаковое значение на элементах (данного) класса сопряженности.

С помощью характера представления можно формулировать следующий признак его неприводимости:

Теорема В. Представление \mathcal{D} конечной группы \mathcal{G} неприводимо
в том и только том случае, если

$$\sum_{a \in \mathcal{G}} |\chi(a)|^2 = \sum_{i=1}^r z_i |\chi_i|^2 = g, \quad (7.6)$$

где r - число классов сопряженности группы \mathcal{G} , z_i - число элементов в i -ом классе, χ_i - значение характера представления \mathcal{D} на i -ом классе (не зависящее от элемента в классе) и g - число элементов (порядок) \mathcal{G} . Если \mathcal{D} приводимо, то левая часть (7.6) больше g .

(для применения теоремы достаточно найти $\sum |\chi(a)|^2$ по все элементам группы, т.е. можно и не знать разложения группы на классы сопряженности).

Полный набор неприводимых представлений $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_r$ группы \mathcal{G} (число их равно r , по теореме А) описывается с помощью их характеров $\chi^{(1)}, \dots, \chi^{(r)}$ следующим образом. Пусть вообще

$f(a), g(a)$ - функции на \mathcal{G} с комплексными значениями. Построим скалярное произведение (не смешивать с произведением векторов (\bar{a}, \bar{b})):

$$(f, g) = \sum_{a \in \mathcal{G}} f(a)^* g(a), \quad (7.7)$$

где $*$ означает переход к комплексно сопряженному числу. Тогда ясно, что такое ортогональная система функций на группе. Если число функций в такой системе равно числу элементов g , то система полна, т.е. всякая функция на группе разлагается в линейную комбинацию функций ортогональной системы; в самом деле, для определения коэффициентов такого разложения получаем систему из g уравнений с g неизвестными с ненулевым

детерминантом. (Проверьте это).

Теорема С. Характеры всех неприводимых представлений группы
 G образуют ортогональную систему функций на групп

$$(\chi^{(P)}, \chi^{(Q)}) = \sum_{a \in G} \chi^{(P)}(a) \cdot \chi^{(Q)}(a) = \sum_{i=1}^r \tau_i \chi_i^{(P)} \cdot \chi_i^{(Q)} = g \delta^{PQ}. \quad (7.8)$$

Система эта, как правило, неполна; однако, она полна в подпространстве всех центральных функций - таких, которые на каждом классе сопряженности C_i принимают одно и то же значение c_i (зависящее от класса); это значит, что такую функцию можно (единственным образом) разложить по характерам $\chi^{(1)}, \dots, \chi^{(r)}$ (ср. это с разложимостью по косинусам функций из подпространства четных функций).

Теоремы B, C позволяют без труда построить характеры всех неприводимых представлений, как мы увидим дальше на примерах. Можно, например, начать с простейших центральных функций, равных 1 на классе C_i и 0 на $C_j \neq C_i$, и подвергнуть их линейному преобразованию. Впрочем, характеры простейших групп ~~групп~~ табулированы.

Для определения размерностей (степеней) неприводимых представлений d_1, \dots, d_r полезна

$$(7.9)$$

Теорема D. $\sum_{j=1}^r d_j^2 = g.$

Пример 1. Представления группы тетраэдра T_d и группы собственных вращений октаэдра O .

Эти группы изоморфны. В самом деле, элементы $T_d \in (7.1), (7.4)$ входят также в O (собственные вращения, сохраняющие октаэдр) и мы их поставим в соответствие самим себе. Несобственному

вращению $\sigma_{4x}^{\pm 1}$ (7.2) поставим ^М в соответствие вращение

$\delta_{4x}^{\pm 1}$ вокруг оси x на угол $\pm \frac{\pi}{2}$, и т.д. для (7.2).

Отражению ρ_{xy} (7.3) поставим ^М в соответствие вращение δ_{2xy} вокруг оси $x=-y, z=0$ на угол π , ρ_{xy} - вращение вокруг оси $x=y, z=0$ на угол π , и т.д. для (7.3).

(Проверьте, что это соответствие действительно сохраняет умножение вращений). (Нетрудно понять, как можно додуматься до такого соответствия: в \mathcal{T}_d имеется 6 элементов σ_4 четвертого порядка и 6 элементов ρ второго порядка, а в O - шесть элементов δ_4 четвертого порядка и 6 элементов δ_2 второго порядка; изоморфизм же должен сохранять порядок элемента).

Ясно, что группы \mathcal{T}_d и O , состоящие ^{щие} из вращений пространства, представляются ортогональными матрицами третьего порядка обозначим эти представления через $\Gamma'_{25}, \Gamma'_{15}$. Матрицы представлений нетрудно выписать (проделайте это). При этом обнаруживается, что элементам $\sigma_4, \rho \in \mathcal{T}_d$, в силу изоморфизма, в представлении Γ'_{15} соответствуют матрицы, отличающиеся обратным знаком от их матриц в представлении Γ'_{25} . Характеры этих представлений (для \mathcal{T}_d) задаются таблицей

	ϵ	$3\delta_2$	$6\sigma_4$	6ρ	$8\delta_3$	
Γ'_{15}	3	-1	1	-1	0	(7.10)
Γ'_{25}	3	-1	-1	1	0	

Далее, очевидны еще одномерные представления \mathcal{T}_d . Единичное (тривиальное) представление Γ_1 ^{сопоставляет} ~~соответствует~~ всем элементам группы число 1. Далее, если изображать элементы \mathcal{T}_d матрицами, как в Γ'_{25} , то определители этих матриц при перемножении элементов также умножаются, что дает представление Γ_2 .

Характеры задаются таблицей

	ε	$3\delta_2$	$6\sigma_4$	6ρ	$8\delta_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1

(7.11)

Неприводимость представлений $\Gamma'_{25}, \Gamma'_{15}, \Gamma_1, \Gamma_2$ проверяется с помощью теоремы В. Например, для Γ'_{25} имеем

$$\sum_{i=1}^2 z_i |\chi_i|^2 = 1 \cdot 9 + 3 \cdot 1 + 6 \cdot 1 + 6 \cdot 1 + 8 \cdot 0 = 24 = \text{порядку } \mathcal{T}_d.$$

По теореме А, не хватает еще одного представления, так как группа \mathcal{T}_d распадается на пять классов сопряженности ε , (7.1) - (7.4). Характер χ недостающего представления должен быть ортогонален характерам (7.10), (7.11) (теорема С). сверх того, в силу теоремы D размерность его равна 2:

$$3^2 + 3^2 + 1^2 + 1^2 = 20 = 24 - 2^2$$

Поэтому $\chi(\varepsilon) = 2$, и из ортогональности находим $\chi(\delta_2) = 2$, $\chi(\sigma_4) = \chi(\rho) = 0$, $\chi(\delta_3) = -1$. Полная таблица характеров (сразу для обеих изоморфных групп \mathcal{T}_d, O) имеет, таким образом, вид (двумерное представление обозначено через Γ_{12}):

O	ε	$3\delta_2$	$6\delta_4$	$6\delta_2$	$8\delta_3$
\mathcal{T}_d	ε	$3\delta_2$	$6\sigma_4$	6ρ	$8\delta_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	-1
Γ'_{15}	3	-1	1	-1	0
Γ'_{25}	3	-1	-1	1	0

(7.1)

Остается найти матрицы представления Γ_{12} . Ясно, что

$$\Gamma_{12}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Элементы $\varepsilon, \delta_{3xy}, \delta_{3yz}^{-1}, \rho_{xy}, \rho_{y\bar{z}}, \rho_{z\bar{x}}$ образуют подгруппу \mathcal{T}_d , изоморфную группе C_{3v} всех вращений плоскости \mathcal{C}_{3v} , сохраняющих правильный треугольник (проверьте это). Попробуем поэтому положить

$$\Gamma_{12}(\rho_{xy}) = \Gamma_{12}(\rho_{x\bar{y}}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_{12}(\rho_{yz}) = \Gamma_{12}(\rho_{y\bar{z}}) = \left(\begin{array}{l} \text{отражение в} \\ \text{прямой } x = 2y \end{array} \right) = (\text{вычислите})$$

(7.13)

$$\Gamma_{12}(\rho_{zx}) = \Gamma_{12}(\rho_{z\bar{x}}) = \left(\begin{array}{l} \text{отражение в} \\ \text{прямой } x = -2y \end{array} \right) = (\text{вычислите})$$

$$\Gamma_{12}(\delta_{3xyz}) = \left(\begin{array}{l} \text{вращение} \\ \text{на угол } \frac{\pi}{3} \end{array} \right) = (\text{выч.})$$

$$\Gamma_{12}(\delta_{3xyz}^{-1}) = \left(\begin{array}{l} \text{вращение} \\ \text{на угол } -\frac{\pi}{3} \end{array} \right) = (\text{выч.})$$

Для элементов δ_2 матрицы $\Gamma_{12}(\delta_2)$ должны быть унитарны со следом 2 (7.12). Положим

$$\Gamma_{12}(\delta_{2x}) = \Gamma_{12}(\delta_{2y}) = \Gamma_{12}(\delta_{2z}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

Наконец, σ_4 представляются как произведения предыдущих элементов (каким образом?) Найдите отсюда матрицы $\Gamma_{12}(\sigma)$.

Пример 2. Представления группы O_h .

Полная группа октаэдра O_h содержит в качестве подгруппы группу O (пример 1), состоящую из собственных вращений, переводящих октаэдр в себя:

$$O \subset O_h. \quad (7.13)$$

Несобственным вращением из O_h является, например, инверсия i :

$$i \bar{x} = -x. \quad (7.17)$$

Из каждого собственного вращения α можно получить несобственное $i\alpha$; при этом $i\alpha = i\beta$ в том и только том случае, когда $\alpha = \beta$, так как $i^2 = 1$ и из $i\alpha = i\beta$ следует $i^2\alpha = i^2\beta, \alpha = \beta$. Всякое несобственное вращение α' из O_h

представимо в виде $i\alpha$, $\alpha \in O$; в самом деле, достаточно взять $\alpha = i\alpha'$, Итак, элементы α' группы O_h однозначно представимы в одном из видов:

$$\alpha' = \varepsilon\alpha, \quad \alpha' = i\alpha \quad (7.18)$$

Но элементы (ε/i) сами образуют подгруппу O_h - циклическую группу C_2 второго порядка, с таблицей умножения

$$\begin{array}{c|cc} & \varepsilon & i \\ \hline \varepsilon & \varepsilon & i \\ i & i & \varepsilon \end{array} \quad (7.19)$$

Отношения между группами O_h , O и C_2 , выра^{аение}~~ение~~ формулами (7.18), записывается в виде

$$O_h = O \times C_2. \quad (7.20)$$

(произведение групп). Существует правило, позволяющее по заданным неприводимым представлениям перемножаемых групп найти неприводимые представления их произведения; мы ограничимся, однако, случаем умножения на C_2 . Ясно, что в любом представлении O_h имеем

$$D(i)^2 = D(i^2) = D(\varepsilon) = 1 \quad (7.21)$$

(1- единичная матрица). Отсюда видно, что

$$\text{либо } D(i) = 1, \text{ либо } D(i) = -1, \quad (7.22)$$

либо, наконец, $D(i)$ - еще какая-нибудь унитарная матрица, квадрат которой равен 1. Рассмотрим случаи (7.22). Тогда, в силу (7.18), $D(\alpha') = D(\varepsilon)D(\alpha)$ и $D(\alpha') = D(i)D(\alpha) = \pm D(\alpha)$. В случае

$$D(\alpha') = D(\alpha) \quad (7.23)$$

для характера представления D имеем

$$\chi(\alpha') = \chi(\alpha); \quad (7.24)$$

в случае

$$D(i\alpha) = -D(\alpha) \quad (7.25)$$

~~(7.25)~~

имеем

$$\chi(\varepsilon\alpha) = \chi(\alpha), \quad \chi(i\alpha) = -\chi(\alpha). \quad (7.26)$$

Пусть теперь задано представление \mathcal{D} группы O . Воспользуемся формулами (7.23), (7.25), чтобы расширить его до представления $\tilde{\mathcal{D}}$ группы O_k (имеющего ту же размерность; проверьте, что действительно получается представление).

Неприводимость расширенного представления почти очевидна: если бы можно было его разложить на представления меньших размерностей, то оказалось бы приводимым и представление подгруппы O , из которого мы исходили.

Из каждого класса сопряженности C группы O можно получить два класса сопряженности группы O_k :

$$\varepsilon \cdot C = C, \quad iC \quad (7.27)$$

(докажите, что iC - класс сопряженности). По теореме А, число различных (неэквивалентных) неприводимых представлений O_k вдвое больше, чем у O . Но мы и получили выше для каждого представления \mathcal{D} группы O два представления O_k , неприводимых вместе с \mathcal{D} и неэквивалентных, так как их характеры не совпадают ((7.24), (7.26)). (Заметим, что другой выбор

$\tilde{\mathcal{D}}(i) = \sqrt{1}$, кроме (7.22), не привел бы, тем самым, к новым представлениям). Итак, при построении матриц представления

$\tilde{\mathcal{D}}$ группы O_k надо всегда полагать $\tilde{\mathcal{D}}(\alpha) = \mathcal{D}(\alpha)$ для собственных вращений α , а для несобственных $i\alpha$ либо всегда $\tilde{\mathcal{D}}(i\alpha) = \mathcal{D}(\alpha)$, либо всегда $\tilde{\mathcal{D}}(i\alpha) = -\mathcal{D}(\alpha)$; дело сводится, тем самым, к разнесению неприводимых представлений группы O . Приводим таблицу характеров группы O_k , построенную по (7.24), (7.26); в ней указаны обозначения "новых" пред-

ставлений, а также "новых" элементов

(Проверьте ортогональность этих характеров!)

O_k	ϵ	$3\delta_2$	$6\delta_4$	$6\delta_2$	$8\delta_3$	i	3ρ	$6\sigma_4$	6ρ	$8\sigma_6$
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	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

(7)

Пример 3. Представления группы D_4

D_4 - группа всех собственных вращений, переводящих в себя правильную четырехугольную призму (не куб!)

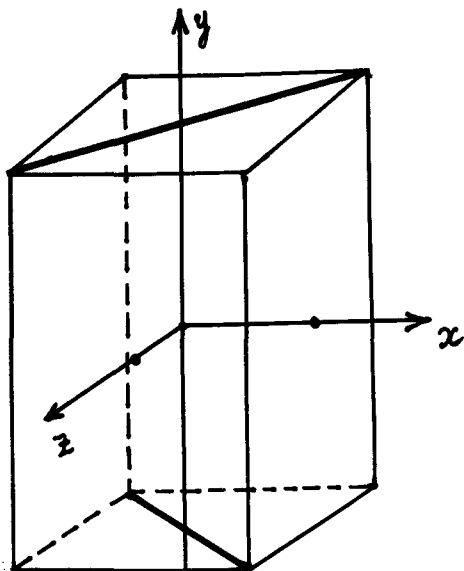


Рис. 4.

Элементы \mathcal{D}_4 , распределенные по классам сопряженности, суть (рис. 4):

$$\begin{aligned} & \varepsilon; \\ & \delta_{4y}^{\pm 1} \text{- вращения вокруг оси } y \text{ на} \\ & \quad \text{угол } \pm \frac{\pi}{4}; \\ & \delta_{2y} \text{- вращение вокруг оси } y \text{ на} \\ & \quad \text{угол } \pi; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \delta_{2z}, \delta_{2x} \text{- вращения вокруг осей } x=z, y=0 \\ & \quad \text{и } x=-z, y=0 \quad \text{на угол } \pi \quad (7.29) \end{aligned}$$

(Проверьте, что это действительно классы сопряженности).

Имеется две других точечных группы, изоморфных \mathcal{D}_4 (т.е. имеющих то же алгебраическое строение, но состоящих из другого набора вращений). Начнем с \mathcal{D}_{2d} . Это - группа всех (собственных и несобственных) вращений, переводящих в себя фигуру из двух жирных отрезков рис. 4. Ясно, что в эту группу входят

$$\begin{aligned} & \varepsilon; \\ & \sigma_{4y}^{\pm 1} = i \delta_{4y}^{\pm 1}; \\ & \delta_{2y}; \\ & \delta_{2z}, \delta_{2x}; \\ & \rho_{zx} = i \delta_{zx}, \rho_{z\bar{x}} = i \delta_{z\bar{x}}. \end{aligned} \quad (7.30)$$

(Установите изоморфизм между \mathcal{D}_4 и \mathcal{D}_{2d}).

Группа C_{4v} состоит из всех (с. и нес.) вращений, сохраняющих правильную четырехугольную пирамиду (не правильный тетраэдр; четыре равных ребра). Если основание пирамиды совпадает с основанием призмы на рис. 4, то C_{4v} состоит из

элементов

$$\begin{aligned}
 & \epsilon; \\
 & \delta_{4y}^{\pm 1}; \\
 & \delta_{2y}; \\
 & \rho_x, \rho_z \quad - \text{отражения в плоскостях } x=0, z=0; \\
 & \rho_{zx}, \rho_{z\bar{x}}.
 \end{aligned} \tag{7.31}$$

(Проверьте, что это - классы сопряженности и установите изоморфизм между C_{4v} и D_4 , а также прямо между C_{4v} и D_{2d}). Из трех изоморфных групп удобнее всего для отыскания представлений C_{4v} ; в самом деле, эту группу можно истолковать как группу вращений плоскости xz (с. и нес.), сохраняющих квадрат-основание пирамиды. Число неприводимых представлений по теореме А, равно 5. По теореме $D, \sum d_j^2 = 8$, так что должно быть одно двумерное представление и четыре одномерных $2^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 = 8$.

Двумерное представление, обозначаемое через Δ_5 , сразу же строится как система матриц, изображающих вращения плоскости xz , сохраняющие квадрат $x = \pm 1, z = \pm 1$ (см. характер Δ_5 в таблице 7.32). Одномерные представления легко найти из условия ортогональности (теорема С). Неприводимость проверяется по теореме В. (Проверьте все это).

В таблице 7.32 одновременно показаны характеры представлений C_{4v} .

Примечание: эти представления строятся с помощью изоморфизма между C_{4v} и D_{2d} , но называются, как указано в (7.32); так что при изоморфизме Δ_1' и Δ_2' переходят друг в друга. В отличие от примера 1, в (7.32) элементы, расположенные друг над другом, не соответствуют друг другу при изо-

морфизме.

C_{4v}	ε	$2\delta_{4y}$	δ_{2y}	ρ_x, ρ_z	$\rho_{2x}, \rho_{2\bar{x}}$
D_{2d}	ε	δ_{2z}, δ_{2x}	δ_{2y}	$\rho_{2x}, \rho_{2\bar{x}}$	$2\sigma_{4y}$
Δ_1	1	1	1	1	1
Δ'_1	1	1	1	-1	-1
Δ_2	1	-1	1	1	-1
Δ'_2	1	-1	1	-1	1
Δ_5	2	0	-2	0	0

(7.3.)

Например, матрицы представления Δ_5 нетрудно выписать:

$$\Delta_5(\delta_{2y}) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \Delta_5(\rho_x) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Отметим, что группы D_4, C_{4v}, D_{2d} — точечные группы, не содержащие инверсии i .

Пример 4. Представления группы D_3

D_3 -группа с вращений, сохраняющих треугольную правильную призму. Эта группа изоморфна описанной в примере 1 подгруппе $C_{3v} \subset T_d$, т.е. группе всех (с.и н.) вращений, переводящих в себя грань тетраэдра (проверьте это, построив изоморфизм).

Отсюда мы и получили в примере 1 неприводимые представления C_{3v} . Характеры этих представлений получаются из характеров представлений $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_{12}$ группы T_d (табл. в примере 1);

обозначения (Λ_j) вводятся в (7.33):

C_{3v}	ϵ	$2\delta_3$	3ρ
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	1	-1
Λ_3	2	-1	0

(7.33)

Как обычно, из теорем А-С следует, что мы имеем полную систему неприводимых представлений.

В предыдущих примерах рассмотрены различные точечные группы $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$, встречающиеся у пространственной группы алмаза. Для полного их перечня остается добавить следующие - уже тривиальные - примеры.

Пример 5. Представления группы C_2 .

В частном случае, когда неединичный элемент есть инверсия i циклическая группа второго порядка обозначается C_i . Проверьте, что все характеры (и представления) задаются таблицей

C_i	ϵ	i
\mathcal{D}_+	1	1
\mathcal{D}_-	1	-1

(7.34)

Пример 6. Представления группы $\mathcal{D}_2 \approx C_2 \times C_2$.

Группа \mathcal{D}_2 состоит из собственных вращений, сохраняющих прямой угольник (не квадрат!). Она изоморфна двум подгруппам \mathcal{G}_0

(полной точечной группы алмаза), элементы которых перечислены в таблице (7.35), а также представляется в виде произведения $C_2 \times C_2$. (Проверьте это, построив изоморфизм). Характеры представлений строятся тем же способом, ~~что~~^{что} в примере 2 но с группой C_2 вместо O . Все представления здесь одномерны (почему?). В таблице (7.35) единственным непонятным фактом является нумерация представлений S_k ; она принята для удобства изложения некоторых физических вопросов.

$C_{2v}(\Sigma)$		ϵ	ρ_{xy}	δ_{2xy}	ρ_z
$C_{2v}(S)$		ϵ	$\rho_{z\bar{x}}$	δ_{2zx}	ρ_y
S_3	Σ_1	1	1	1	1
S_4	Σ_2	1	-1	1	-1
S_1	Σ_3	1	1	-1	-1
S_2	Σ_4	1	-1	-1	+1

(7.3)

8. Элементарные многогранники и симметричные комплексы

Зона Б. есть многогранник, переходящий в себя при вращениях точечной группы кристалла \mathcal{G}_0 (если не считать граничных точек). Всегда можно выделить в зоне Б. (хотя и неоднозначно) меньший многогранник \mathcal{EM} , обладающий следующими свойствами:

(1) Для каждой точки \bar{k} зоны Б. найдется вращение α из точечной группы \mathcal{G}_0 , переводящее \bar{k} в точку \mathcal{EM} .

(2). Если \bar{k}_1, \bar{k}_2 - точки \mathcal{EM} , то не существует вращения из \mathcal{G}_0 , переводящего \bar{k}_1 в $\bar{k}_2 + \mathcal{R}$ (\mathcal{R} - вектор обратной решетки).

Если в \mathcal{G}_0 имеется n элементов, то, вообще говоря, в зоне Б. для каждой точки \bar{k} имеется n точек, "конгруэнтных" \bar{k} относительно группы \mathcal{G}_0 ($\bar{k}_1 = \bar{k}, \bar{k}_2, \dots, \bar{k}_n$); при частном расположении \bar{k} их может быть меньше (ср. определение звезды \bar{k} в § 5). Итак, \mathcal{EM} содержит ровно один вектор из каждой звезды. Следует ожидать, что \mathcal{EM} составляет $\frac{1}{n}$ объема всей зоны Б.

Пример. Группа алмаза.

Удобно начать с "неусеченного" октаэдра, вершины которого расположим на осях координат (ср. рис. 2). Для алмаза $n = 48$. Удобнее следить, во что вращения α_j ($j = 1, \dots, 48$) переводят поверхность октаэдра. Ясно, что каждую грань можно перевести в фиксированную грань, например, лежащую в первом октанте. Далее, октаэдр можно еще вращать вокруг оси $x = y = z$ на углы $\pm \frac{\pi}{3}$ и отражать относительно высот грани (т.е. плоскостей $x = y, y = z, x = z$). При этом каждую точку грани можно перевести в точку ее $1/6$ части (см. рис. 5)

Соединим точки этой части после отсечения вершин алмаза (рис. 5), состав-
зоны Б.

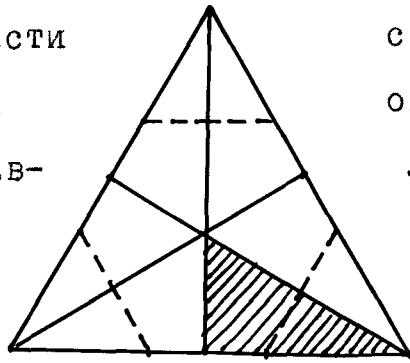


Рис. 5

с центром зоны Б.;
октаэдра получаем э.
ляющий 1/48 объема

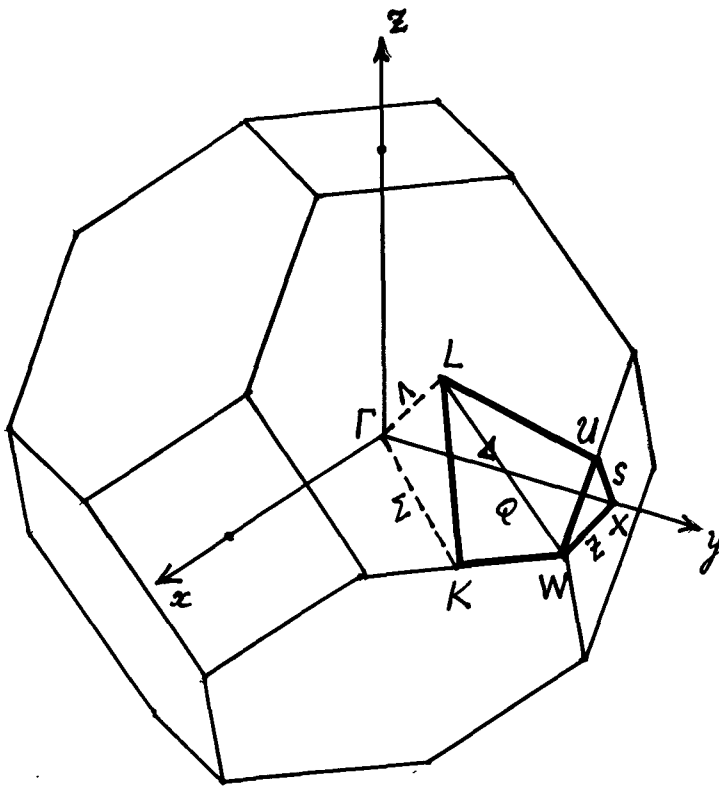


Рис. 6

Э.м. имеет вершины, обозначаемые $\Gamma, \mathcal{L}, \mathcal{K}, W, X, U$;
некоторые ребра также имеют отдельные обозначения: $\Gamma\mathcal{K} = \Sigma$,
 $\Gamma X = \Delta$, $\Gamma\mathcal{L} = \Lambda$, $WX = Z$, $UX = S$. Отрезок $\mathcal{L}W$ (не являющийся ребром много-
гранника) обозначается через Q . Ясно, что каждую точку \bar{e} зоны
Б. можно перевести в точку э.м. вращением из группы октаэдра
 O_k . По нашему соглашению (§5, пример 2), весь э.м., лежащий
в 1-ом октанте, входит в зону Б. (вместе с границей!). Оста-

ется проверить, нет ли в э.м. точек, принадлежащих одной звезде. Предположим, что \bar{k}_0 - такая точка; тогда для некоторого вращения α из O_k имели бы другую точку э.м. $\bar{k}'_0 = \alpha \bar{k}_0$. Однако, такое равенство возможно лишь для граничной точки зоны Б. (§ 5). Следовательно, движение

$$\bar{k}' = \alpha \bar{k} + \bar{\mathcal{K}} \quad (8.1)$$

переводит границу $\mathcal{LKW}\mathcal{U}$ э.м. во множество, пересекающее эту же границу. Но тогда можно показать, что (8.1) имеет вид

$$\bar{k}' = i \sigma_{6xyz} \bar{k} + \frac{\pi}{a} (1, 1, 1). \quad (8.2)$$

(Попробуйте доказать это). Отсюда видно, что точки отрезков $\mathcal{L}\mathcal{K}$, $\mathcal{L}\mathcal{U}$, одинаково отстоящие от \mathcal{L} , принадлежат одной звезде. Если удалить из э.м. точки отрезка $\mathcal{L}\mathcal{U}$ (кроме \mathcal{L}), то в оставшейся части зоны Б. уже не будет ни одной пары точек, принадлежащих одной звезде; ее мы и будем дальше называть э.м., в соответствии с определением в начале §.

Вспомним теперь, что для построения всех неприводимых представлений пространственной группы \mathcal{G} мы начинаем с представлений малых групп $\mathcal{G}_{\bar{k}}$, где \bar{k} лежит в зоне Б. Оказывается, что процедура "индуцирования представлений" (§ 5), отправляющаяся с векторов \bar{k}_1, \bar{k}_2 зоны Б., ведет к эквивалентным представлениям \mathcal{G} , если \bar{k}_1 и \bar{k}_2 принадлежат одной звезде. Так как мы хотим избежать "повторения" представлений, то достаточно брать "волновые векторы" \bar{k} из э.м. В этом и состоит польза э.м. Для каждой точки \bar{k} из э.м. мы определяем малую группу $\mathcal{G}_{\bar{k}}$, а затем, для построения ее представлений, берем ее точечную группу $\mathcal{G}_{O\bar{k}}$ - подгруппу полной точечной группы кристалла.

\mathcal{G}_0 (§ 6). Поскольку число различных подгрупп конечной группы \mathcal{G}_0 также конечно, то для многих точек может получиться одна и та же группа $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$; это множество называется симметричным комплексом, принадлежащим группе $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$. Следующие примеры относятся к кристаллу алмаза.

Пример 1. $\bar{k} = 0$ (точка Γ рис. 6). В этом случае звезда состоит из единственного вектора 0, $\mathcal{G}_{\bar{K}} = \mathcal{G}$, $\mathcal{G}_{O\bar{K}} = \mathcal{G}_0 = 0$ (ср. § 5, пример 2). Γ -симметричная точка, принадлежащая группе $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$.

Пример 2. Точки отрезка Δ (кроме Γ, X). Для таких \bar{k} мы уже нашли малую группу (§ 5, пример 2). Соответствующая точечная группа $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ есть группа вращений, сохраняющих пирамиду с вершиной в Γ и с квадратным основанием - гранью зоны Б. с центром в X . Это группа C_{4v} из элементов $\varepsilon; \rho_{2y}; \rho_{4y}^{\pm 1};$

$\rho_{2x}, \rho_{2\bar{x}}; \rho_z, \rho_x$ (точки с запятой разделяют классы сопряженности). В § 7 мы нашли неприводимые представления этой группы. Δ (без Γ, X) - симметричный отрезок, принадлежащий группе $\mathcal{G}_{O\bar{K}} = C_{4v}$.

Пример 3. Точки многоугольника $\Gamma\Delta\Sigma$ с присоединением отрезка \mathcal{KW} (кроме точки W). Для таких точек \bar{k} малая группа $\mathcal{G}_{\bar{K}}$ состоит из ε и из $(\rho_z | \bar{v}_{\rho_z})$, где ρ_z - отражение в плоскости $z = 0$, а неэлементарная трансляция $\bar{v}_{\rho_z} = 1/2(0, 0,$

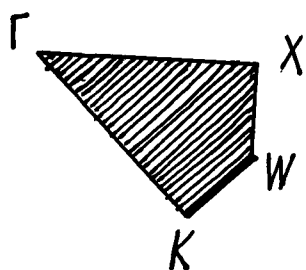


Рис. 7

(Проверьте, что написанное движение принадлежит группе алмаза). $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ состоит из элементов (ε, ρ_z) и является циклической группой второго порядка.

$\Gamma\Delta\Sigma + \mathcal{KW} - W$ - симметричный многоугольник, принадлежащий этой группе.

При отыскании групп $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ надо помнить, что вращение $\alpha \in \mathcal{G}_0$ вхо

дит в $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ тогда и только тогда, когда $\alpha\bar{k} = \bar{k} + \bar{\mathcal{K}}$, где $\bar{\mathcal{K}}$ - вектор обратной решетки. Недостаточно взять все α , и которых $\alpha\bar{k} = \bar{k}$! Для иллюстрации этого факта рассмотрим еще

Пример 4. Точка X. Группа $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ включает в этом случае все элементы примера 2, но не исчерпывается ими (все эти вращения переводят X в X , без добавления вектора обратной решетки).
Сверх того, имеются вращения $i, \sigma_{4y}^{\pm 1}, \rho_y, \delta_{2x}, \delta_{2x\bar{x}}, \delta_{2x}, \delta_{2x}$, переводящие $X = (0, \frac{\pi}{a}, 0)$ в $X' = (0, -\frac{\pi}{a}, 0)$.
Поскольку $\overrightarrow{X'X} = (0, \frac{2\pi}{a}, 0)$ есть вектор обратной решетки, все эти вращения также входят в $\mathcal{G}_{O\bar{X}}$ (покажите, что никакие другие не входят). $\mathcal{G}_{O\bar{X}}$ есть, таким образом, группа всех (с. и нес.) вращений, сохраняющих правильную четырехугольную призму; она обозначается через \mathcal{D}_{4h} .

Поскольку $\mathcal{D}_{4h} = \mathcal{D}_4 \times C_2$, где C_2 состоит из ϵ и i , разность неприводимых представлений \mathcal{D}_{4h} выполняется по способу § 7. (примеры 2, 3). Например, для $\alpha' = \rho_y = i\delta_{2y}$ имеем $\tilde{\Delta}_5(\rho_y) = \pm \Delta_5(\delta_{2y}) = \pm \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (см. § 7, пример 3) где выбор знака дает два представления группы \mathcal{D}_{4h} по одному представлению Δ_5 группы \mathcal{D}_4 . Для $\alpha = \rho_x$, принадлежащего \mathcal{D}_4 , имеем $\tilde{\Delta}_5(\rho_x) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ в обоих представлениях. В примерах 1, 2 вектор \bar{k} - внутренний для зоны Б., и можно перейти от представлений $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ к допустимым представлениям малой группы $\mathcal{G}_{\bar{K}}$ (§ 6). Например, для $\bar{k} = (0, \frac{\pi}{2a}, 0)$ имеем (ср. (6.1)):

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}(\rho_x | \bar{v}_{\rho_x}) = e^{-i\bar{k}\bar{v}_{\rho_x}} \mathcal{D}_{O\bar{K}}(\rho_x) = e^{-i\bar{k}\bar{v}_{\rho_x}} \Delta_5(\rho_x) =$$

$$= e^{-i\bar{k}(\frac{1}{2}, 0, 0)} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} D_{\bar{k}}(\delta_{2y} | \bar{v}_{\delta_{2y}}) &= e^{-i\bar{k}\bar{v}_{\delta_{2y}}} D_{0\bar{k}}(\delta_{2y}) = \\ &= e^{-i\bar{k}(0, \frac{1}{2}, 0)} \Delta_5(\delta_{2y}) = \pm e^{-i\frac{\pi}{4a}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где знак определяет выбор представления.

В примерах 3, (KW), вектор \bar{k} лежит на границе зоны Б. и (в примере 4) группа $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ не симморфна. Мы займемся этими случаями дальше (§ 10).

На стр. 90-91 книги Штрайтвольфа (см. также § 10 ниже) перечислены в виде таблиц всевозможные симметричные комплексы (точки, отрезки и многоугольники) для зоны Б. алмаза. Читателю рекомендуется проверить, что соответствующие группы $\mathcal{G}_{0\bar{k}}$ действительно принадлежат векторам \bar{k} из этих комплексов и найти для них малые группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ (т.е. указать для каждого $\alpha \in \mathcal{G}_{0\bar{k}}$ неэлементарную трансляцию \bar{v}_α). При этом полезно знать, что для алмаза, при "стандартном" положении начала решетки, все \bar{v}_α имеют вид $1/2 \bar{t}_j$; где $j = 1, 2$ или 3; лучше всего искать \bar{v}_α по методу, описываемому в § 9 (с помощью классов смежности).

9. Неприводимые представления пространственных групп

Переход от неприводимых представлений малых групп \mathcal{G}_L к неприводимым представлениям всей пространственной группы \mathcal{G} требует разложения группы \mathcal{G} на классы смежности относительно малой группы.

Напомним понятие классов смежности. Пусть \mathcal{G} - группа, \mathcal{L} - подгруппа \mathcal{G} . Тогда для любого элемента $a \in \mathcal{G}$ всевозможные элементы вида $a\ell$, где $\ell \in \mathcal{L}$, образуют левый класс смежности группы \mathcal{G} по подгруппе \mathcal{L} . Этот класс обозначается через $a\mathcal{L}$; сама подгруппа \mathcal{L} - тоже класс смежности, вида $\varepsilon\mathcal{L}$, где ε - единица группы \mathcal{G} . Можно показать, что классы смежности $a\mathcal{L}$, $b\mathcal{L}$ либо совпадают, либо не имеют общих элементов. Условие совпадения классов имеет вид

$$ab^{-1} \in \mathcal{L}. \quad (9.1)$$

Вся группа \mathcal{G} представляется в виде

$$\mathcal{G} = a_1\mathcal{L} + a_2\mathcal{L} + \dots,$$

где $+$ означает простое объединение подмножеств, а элементы a_j подобраны так, чтобы классы не пересекались. Если группа \mathcal{G} конечна (в наших задачах это достигается аппроксимацией Борна-Кармана), то имеем

$$\mathcal{G} = a_1\mathcal{L} + a_2\mathcal{L} + \dots + a_n\mathcal{L}, \quad (9.2)$$

где n - число различных классов смежности - называется индексом подгруппы \mathcal{L} в группе \mathcal{G} . Элементы a_1, a_2, \dots, a_n называются представителями своих классов; т.к. \mathcal{L} содержит ε , $a_j\mathcal{L}$ содержит $a_j\varepsilon$, т.е. a_j : каждый представитель входит в свой класс. Замена представителей, согласно (9.1), состоит в том, что вместо a_j берут $a_j' = a_j\ell$, где $\ell \in \mathcal{L}$; тогда класс $a_j\mathcal{L}$, $a_j'\mathcal{L}$ совпадают. Можно считать, что

$a_i = \varepsilon$, $a_i \mathcal{L} = \mathcal{L}$. Число элементов одинаково во всех классах.

Аналогично определяются правые классы $\mathcal{L}a$ и правое разложение

$$\mathcal{G} = \mathcal{L}a_1 + \mathcal{L}a_2 + \dots + \mathcal{L}a_n. \quad (9.3)$$

Как правило, левые классы не являются правыми, и наоборот; но число классов в разложениях (9.2), (9.3) одинаково, и в качестве представителей можно взять одну и ту же систему элементов.

Читателю рекомендуется доказать все предыдущие утверждения; обратите внимание на то, что условие принадлежности к одному классу (9.1) для левых и правых классов одинаково.

Пример 1. $\mathcal{G} = O_h$, $\mathcal{L} = O$. Условие (9.1) имеет здесь тот смысл, что a и b - либо оба собственные, либо оба несобственные вращения. Тем самым, все собственные вращения образуют один класс, ~~все несобственные - один класс,~~ который можно записать, например, в виде iO (i - инверсия). Левые классы совпадают с правыми.

Пример 2. $\mathcal{G} = O_h$, $\mathcal{L} = T_d$. И в этом случае имеется два класса: T_d и iT_d , оба одновременно левые и правые (проверьте это).

Пример 3. $\mathcal{G} = O_h$, $\mathcal{L} = C_{3v}$ (см. § 7, пример 1).

Разложим сначала на классы подгруппу $T_d \subset O_h$ (состоящую из вращений, сохраняющих тетраэдр углерода). Подгруппа C_{3v} перечислена в первой строке таблицы (9.4); в ней 6 элементов. Ее можно еще истолковать как подгруппу, сохраняющую ось $x=y=z$ и первый октант. Умножая C_{3v} слева на δ_{2xz} , получим, по порядку, элементы второй строки (9.4); это - левый класс $\mathcal{L}_1 = \delta_{2xz} C_{3v}$ (в группе T_d ; пока мы не выходим за ее пределы).

Аналогично получаем классы $\mathcal{L}_2 = \delta_{2y} C_{3v}$, $\mathcal{L}_3 = \delta_{2z} C_{3v}$.
 (Для умножения удобно пользоваться матрицами: Штрайтвольф, стр. 73).

Левые классы смежности	Элементы					
$\mathcal{L}_0 = C_{3v}$	ε	δ_{3xyz}	δ_{3xyz}^{-1}	ρ_{xy}	$\rho_{y\bar{z}}$	$\rho_{z\bar{x}}$
\mathcal{L}_1	δ_{2x}	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}$	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}^{-1}$	σ_{4z}	ρ_{yz}	σ_{4y}^{-1}
\mathcal{L}_2	δ_{2y}	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}$	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}^{-1}$	σ_{4z}^{-1}	σ_{4x}	ρ_{zx}
\mathcal{L}_3	δ_{2z}	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}$	$\delta_{3\bar{x}y\bar{z}}^{-1}$	ρ_{xy}	σ_{4x}^{-1}	σ_{4y}

(9.4)

Представителями здесь служат ε , δ_{2x} , δ_{2y} , δ_{2z} (или, напр $\rho_{z\bar{x}}$, σ_{4y}^{-1} , ρ_{zx} , σ_{4y}). Левые классы в данном случае совпадают с правыми (покажите это).

Переходя от T_d ко всей группе O , следует добавить классы $i\mathcal{L}_j$ ($j = 0, 1, 2, 3$), где i - инверсия; выпишите их элементы.

Примечание. Разложение на классы смежности удобно для разнесания неэлементарных трансляций. По таблице (9.4) легко проверить, что

$$\mathcal{L}_j \bar{\tau} - \bar{\tau} = -\bar{\tau}_j \quad (j = 0, 1, 2, 3) \quad (9.5)$$

где $\bar{\tau}_j$ при $j = 1, 2, 3$ - базисные векторы решетки, а $\bar{\tau}_0$ по соглашению полагается равным 0; запись $\mathcal{L}_j \bar{\tau}$ означает применение к вектору $\bar{\tau}$ любого вращения α из класса \mathcal{L}_j (результат зависит только от j).

(ЛВ . В формуле Штрайтвольфа (2.9), стр. 74, ошибка в знаке!).

Теперь из (1.14) получаются неэлементарные трансляции:

$$\bar{v}_\alpha = \frac{1}{2} \bar{t}_j \text{ при } \alpha \in \mathcal{L}_j \text{ или } \alpha \in i\mathcal{L}_j \text{ (} j=0,1,2,3 \text{)}. \quad (9.6)$$

Пример 4. Разложите группу C_{3v} на левые и правые классы смежности по подгруппе из двух элементов $(\varepsilon, \rho_{z\bar{x}})$; покажите, что в этом случае левые классы смежности не совпадают с правыми.

Вообще, разбиение группы на левые и правые классы можно иллюстрировать схемой, изображенной на рис. 8, где квадрат разбит на горизонтальные и вертикальные полосы.

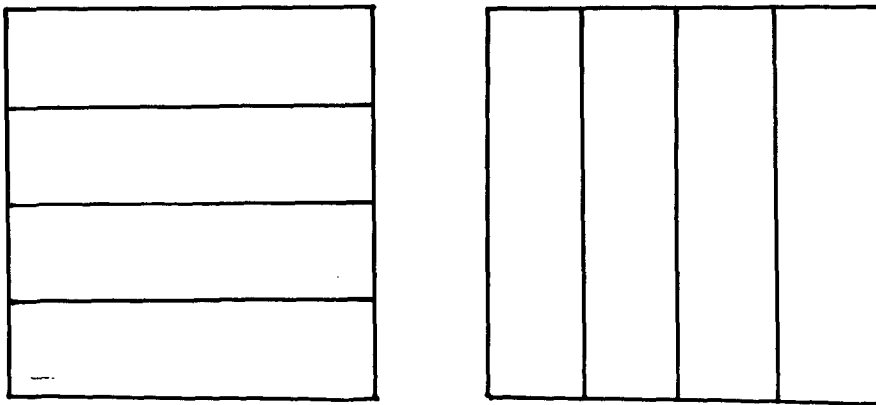


Рис. 8

Пусть конечная группа \mathcal{G} разложена по подгруппе \mathcal{L} левым и правым способом ((9.2), (9.3)). Задав произвольный элемент a группы \mathcal{G} , мы умножим его справа на какой-либо из представителей a_j ; полученный элемент aa_j , как и всякий элемент \mathcal{G} , лежит в некотором левом классе смежности $a_i\mathcal{L}$, где номер i зависит от a и j . Тогда

$$a_i^{-1}aa_j \in \mathcal{L}. \quad (9.7)$$

Построим теперь матрицу n -го порядка $M(a)$, состоящую из нулей и единиц, следующим способом: в j -ом столбце поставим 1 на i -ом месте, где i определяется из условия (9.7), а на остальных местах — нули.

Покажем, что в каждой строке этой матрицы также стоит одна единица, а остальные числа - нули. В самом деле, пусть задано i ; тогда $a_i^{-1}a$ лежит в некотором правом классе.

Вместо представителей a_1, \dots, a_n можно взять в качестве представителей (левых или правых классов обратные им элементы $a_1^{-1}, \dots, a_n^{-1}$ (причем, конечно, a^{-1} представляет, вообще говоря, другой класс, чем a); в самом деле, при $r \neq s$ элементы a_r^{-1}, a_s^{-1} не лежат в одном классе, поскольку

$$(a_r^{-1})(a_s^{-1})^{-1} = a_r^{-1}a_s = (a_s^{-1}a_r)^{-1}$$

может входить в \mathcal{L} лишь вместе с $a_s^{-1}a_r$, а это невозможно для представителей a_r, a_s разных классов (критерий (9.1)). Итак, правые классы можно записать в виде

$$\mathcal{G} = \mathcal{L}a_1^{-1} + \mathcal{L}a_2^{-1} + \dots + \mathcal{L}a_n^{-1} \quad (9.8)$$

Найдется поэтому такое j (и только одно), что $a_i^{-1}a$ входит в класс $\mathcal{L}a_j^{-1}$; тогда $a_i^{-1}aa_j \in \mathcal{L}$, и j однозначно определяется по i .

Частные случаи. 1) Если $a \in \mathcal{L}$, то, вообще говоря, $i \neq j$; но если \mathcal{L} вдобавок - инвариантная подгруппа, то $a_j^{-1}aa_j \in \mathcal{L}$ и следует взять $i = j$.

2) Если $a = \varepsilon$, то $a_j^{-1}\varepsilon a_j = \varepsilon$ есть элемент подгруппы \mathcal{L} , так что и в этом случае $M(a)$ - единичная матрица.

Заметим еще, что матрица $M(a)$ унитарна.

Индукцированные представления

Пусть задано представление $\mathcal{D}(l)$ подгруппы $\mathcal{L} \in \mathcal{G}$; обозначим его размерность через q . Тогда для каждого элемента $l \in \mathcal{L}$ задана матрица q -го порядка $\mathcal{D}(l)$ (для элементов a группы \mathcal{G} , не входящих в \mathcal{L} , матрицы $\mathcal{D}(a)$ не существуют!). Мы построим по заданному представлению \mathcal{D} подгруппы

\mathcal{L} вполне определенное представление $\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}$ группы \mathcal{G} , размерности $q.n.$ Для этого на каждое ненулевое (занятое единицей) место (i, j) матрицы $M(a)$ поставим "блок" $\mathcal{D}(a_i^{-1}aa_j)$, где a — любой заданный элемент \mathcal{G} , а i, j связаны условием (9.7). Остальные места матрицы $M(a)$ заполним блоками из нулей, того же размера $q \times q$. Полученную матрицу обозначим через $\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}(a)$. Можно показать, что матрицы $\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}(a)$ задают представление группы \mathcal{G} (размерности qn).

Комментарий. Доказать, что мы получили таким способом представление, т.е. что $\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}(ab) = \mathcal{D}^{(\mathcal{G})}(a)\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}(b)$, нетрудно, хотя и требует некоторых вычислений. Матрицы представления группы \mathcal{G} без труда строятся по матрицам $\mathcal{D}(\ell)$ заданного представления подгруппы \mathcal{L} (если считать, что строение самой группы \mathcal{G} достаточно изучено, так что мы умеем находить представители и т.п.). Остается, однако, неясным смысл этой процедуры; мы вернемся к этому вопросу в Приложении.

Мы индуцировали представления группы \mathcal{G} из представлений любой ее подгруппы \mathcal{L} ; при этом, вообще говоря, мало можно сказать о свойствах полученных представлений. Рассмотрим теперь более специальную ситуацию, в которой предыдущее построение и будет применяться.

Пусть в группе \mathcal{G} содержится инвариантная подгруппа \mathcal{H} , и пусть задано неприводимое представление $\mathcal{D}^\circ(h)$ подгруппы \mathcal{H} . Построим малую группу \mathcal{L} , соответствующую \mathcal{G} , \mathcal{H} и \mathcal{D}° (см. § 5). Построим, далее, любое допустимое по отношению к \mathcal{D}° неприводимое представление $\mathcal{D}(\ell)$ малой группы \mathcal{L} . Наконец, индуцируем из \mathcal{D} представление $\mathcal{D}^{(\mathcal{G})}$ всей группы \mathcal{G} , как это описано выше.

Тогда справедлива

Теорема I. $\mathcal{D}^{(\mathfrak{G})}(a)$ - неприводимое представление группы \mathfrak{G} .

Если при этом представление \mathcal{D} унитарно, то и $\mathcal{D}^{(\mathfrak{G})}$ оказывается унитарным представлением.

Как видно из следующей теоремы, этим способом можно получить все представление \mathfrak{G} .

Теорема II. Любое неприводимое представление группы \mathfrak{G} эквивалентно представлению, полученному указанным выше способом если выбрать надлежащее неприводимое представление \mathcal{D}° инвариантной подгруппы \mathfrak{H} , а затем надлежащее допустимое относительно \mathcal{D}° неприводимое представление \mathcal{D} малой группы \mathcal{L} , соответствующей \mathfrak{G} , \mathfrak{H} и \mathcal{D}° .

Мы могли бы пожелать, далее, чтобы набор всех неприводимых представлений группы \mathfrak{G} получился без повторений. Для этого полезно понятие орбиты представления \mathcal{D}° (§ 5).

Теорема III. Условимся брать из каждой орбиты неприводимых представлений инвариантной подгруппы \mathfrak{H} по одному представлению \mathcal{D}° ; тогда описанная выше процедура дает только неэквивалентные представления, если допустимые представления малой группы не эквивалентны друг другу.

Случай пространственной группы с подгруппой трансляций

В интересующих нас случаях \mathfrak{G} будет пространственной группой (или подгруппой такой группы, т.е. другой пространственной группой); в качестве инвариантной подгруппы \mathfrak{H} рассмотрим подгруппу трансляций $T \subset \mathfrak{G}$ (в § 10 то же построение будет применено к другим инвариантным подгруппам \mathfrak{H}) Роль $\mathcal{D}^{\circ}(\mathcal{L})$ играет любое неприводимое представление (3.6):

$$\mathcal{D}^{(\bar{k})}(\varepsilon | \bar{R}) = e^{-i\bar{k}\bar{R}}, \quad (9.9)$$

где в качестве \bar{k} достаточно брать векторы из зоны Б. (§ 1) Орбита такого представления состоит из всевозможных

$$\mathcal{D}_a^{(\bar{k})} = \mathcal{D}_{(\alpha|\bar{a})}^{(\bar{k})} = \mathcal{D}^{(\alpha^{-1}\bar{k})},$$

т.е. из представлений

$$\mathcal{D}^{(\bar{k}_1)}, \dots, \mathcal{D}^{(\bar{k}_s)}, \quad (9.10)$$

где $(\bar{k}_1, \dots, \bar{k}_s)$ - звезда вектора \bar{k} , полученная применением к нему всех вращений α_j из точечной группы \mathcal{G}_0 (и последующим переводом полученных векторов в зону Б. прибавлением векторов обратной решетки \bar{K} , если они выходят из зоны)

Согласно теореме III, достаточно брать из каждой орбиты по одному представлению. Условимся брать из орбиты (9.10) то представление $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$, для которого \bar{k} принадлежит Э.М. (§8

(Для этого и был введен Э.М.! Напомним, что Э.М. содержит один и только один вектор из каждой звезды зонн Б). Меняя \bar{k} в Э.М., мы получаем все нужные нам неприводимые представления (9.9) инвариантной подгруппы \mathcal{T} . Фиксируем такой вектор \bar{k} и найдем его малую группу $\mathcal{G}_{\bar{k}}$. Тогда следующий шаг состоит в построении всех (неэквивалентных друг другу) неприводимых представлений группы \mathcal{G} , допустимых относительно $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$ (Ср.(5.21)). Пусть $\mathcal{D}_{\bar{k}}$ - такое представление (играющее роль \mathcal{D} из теоремы II). Для данного \bar{k} может быть несколько таких представлений $\mathcal{D}_{\bar{k}}$, и все они должны быть использованы для индуцирования представлений группы \mathcal{G} , по описанной выше схеме. Обозначим представление \mathcal{G} , индуцированное из $\mathcal{D}_{\bar{k}}$, через $\mathcal{D}_{\bar{k}}^{(\mathcal{G})}$.

Разложение (9.2) принимает вид

$$\mathcal{G} = \sum_{i=1}^s a_i \mathcal{G}_{\bar{k}_i}. \quad (9.11)$$

Для пар (i, j) , удовлетворяющих условию

$$a_i^{-1} a a_j \in \mathcal{G}_{\bar{k}} \quad (9.12)$$

(ср. (9.7));

далее, составляется "блок"

$$D_{ij}(a) = D_{\bar{k}}(a_i^{-1} a a_j) \quad (9.13)$$

(правая часть имеет смысл ввиду (9.12)!).

Полученные блоки вставляются на соответствующие места (i, j) матрицы \mathcal{D} -го порядка, а остальные заменяются блоками нулей.

$$D_{\bar{k}}^{(7)}(a) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & D_{i_3^3}(a) & 0 \\ 0 & D_{i_2^2}(a) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{i_4^4}(a) \\ D_{i_1^1}(a) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (9.14)$$

Чтобы найти для каждого j соответствующее $i = i_j$, запишем (9.12) подробнее, пользуясь (5.8) и соотношением

$$a_i^{-1} a a_j = (\alpha_i | \bar{a}_i)^{-1} (\alpha | \bar{a}) (\alpha_j | \bar{a}_j) = (\alpha_i^{-1} \alpha_j | \alpha_i^{-1} \alpha \bar{a}_j - \alpha_i^{-1} \bar{a}_i + \alpha_i^{-1} \bar{a}) : \quad (9.15)$$

$$D_{ij}(a) \neq 0, \text{ если } \alpha_i^{-1} \alpha \alpha_j \bar{k} = \bar{k} + \bar{\mathcal{K}},$$

где $\bar{\mathcal{K}}$ - вектор обратной решетки, вращения α_j соответствуют выбранной системе представителей

$$a_j = (\alpha_j | \bar{a}_j), \quad j = 1, \dots, s, \quad (9.16)$$

$$a = (\alpha | \bar{a}) \quad (\text{ср. (5.13)}).$$

Рассмотрим простейший случай, когда \bar{k} принадлежит звезде общего типа (ср. § 5, пример 1).

Случай звезды общего типа

В этом случае $j = n$ (числу элементов точечной группы \mathcal{G}). Малая группа $\mathcal{G}_{\bar{k}} = \mathbf{T}$, поскольку условие (5.13) выполняется лишь при $\alpha_j = \alpha_1 = \varepsilon$. В качестве представителей a_j надо взять элементы вида $(\alpha_j | \bar{a}_j)$ со всеми j от 1 до n ; выберем, например, элементы с неэлементарными трансляциями

$$a_j = (\alpha_j | \bar{v}_{\alpha_j}) \quad (9.17)$$

и условимся для краткости писать \bar{v}_j вместо \bar{v}_{α_j} .

Тогда $\alpha_j = \alpha^{-1} \alpha_i$ (9.15), поскольку для звезды общего типа (9.15) сводится $\alpha_i^{-1} \alpha \alpha_j = \varepsilon$; отсюда

$$a_i^{-1} a a_j = (\alpha_i | \bar{v}_i)^{-1} (\alpha | \bar{a}) (\alpha_j | \bar{v}_j) = (\varepsilon | \bar{a} + \alpha \bar{v}_j - \bar{v}_i). \quad (9.18)$$

Так как $\mathcal{G}_{\bar{k}} = \mathbf{T}$, имеем $\mathcal{D}_{\bar{k}} = \mathcal{D}^{(\bar{k})}$ (к этому сводится условие допустимости $\mathcal{D}_{\bar{k}}$!). Значит, $q = 1$, и "блоки" матриц $\mathcal{D}^{(q)}(a)$ одномерны. В силу (9.18), ненулевые элементы матрицы $\mathcal{D}^{(q)}(a)$ равны

$$\mathcal{D}_{ij}(a) = \exp[-ik \cdot \alpha_i^{-1} (\bar{a} + \alpha \bar{v}_j - \bar{v}_i)] = \exp[-ik_i (\bar{a} + \alpha \bar{v}_j - \bar{v}_i)]. \quad (9.19)$$

Размерность индуцированного представления равна порядку точечной группы \mathcal{G}_0 .

10. Представления малых групп в более сложных случаях

Как уже было отмечено (§ 6), в некоторых простых случаях представления малой группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ сразу же строятся по представлениям ее точечной группы $\mathcal{G}_{0\bar{k}}$ (и оказываются при этом допустимыми относительно $\mathcal{D}^{(\bar{k})}$). Это справедливо, например, для векторов \bar{k} , лежащих строго внутри зоны Б., и для

границных векторов \bar{k} , у которых малая группа симморфна (т.е. порождается чистыми вращениями и трансляциями). Однако, в ряде важных случаев упрощенная процедура § 6 неприменима. Для разнесения всех неприводимых представлений $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ в этих случаях снова применяют метод индуцированных представлений. Точно так же, как из представлений $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ индуцируются представления всей пространственной группы \mathfrak{G} , можно индуцировать представления $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ из представлений некоторой ее подгруппы $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$, выбрав эту подгруппу надлежащим образом. Таким образом, дело сводится к разнесению неприводимых представлений $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$. Можно показать, что любая пространственная группа содержит симморфную подгруппу $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$ индекса 2 или 3 (даже инвариантную подгруппу; индексом называется число классов смежности $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ по $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$). Мы рассмотрим случай индекса 2, встречающийся у пространственной группы алмаза. В этом случае будет указана несложная процедура, позволяющая свести задачу к разнесению представлений симморфной группы, что, в свою очередь, выполняется по правилу § 6. Можно показать, что $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T \supset T$ (это тоже специальное свойство пространственных групп).

Итак, пусть \mathfrak{G}' — пространственная группа (мы пишем \mathfrak{G}' вместо $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$; ведь $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ — тоже пространственная группа, при любом \bar{k}); $\mathfrak{G}_T \subset \mathfrak{G}'$ — инвариантная подгруппа индекса 2. Тогда имеем разложение

$$\mathfrak{G}' = \mathfrak{G}_T + \alpha_0 \mathfrak{G}_T, \quad (10.1)$$

где в качестве представителя класса смежности \mathfrak{G}_T выбирается, как обычно, ε , а в качестве представителя второго класса смежности — любой элемент $\alpha_0 \in \mathfrak{G}_T$. Заметим, что $\alpha_0^{-1} \in \mathfrak{G}_T$ (иначе и α_0 принадлежал бы \mathfrak{G}_T); напротив, $\alpha_0^2 \in \mathfrak{G}_T$

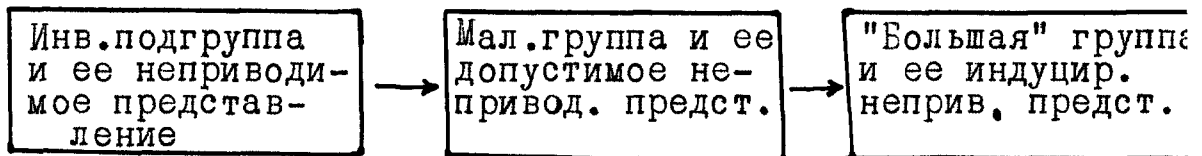
(доказательство: если бы $a_0^2 \in a_0 \mathcal{G}_T$, то было бы $a_0^2 = a_0 x$, где $x \in \mathcal{G}_T$, откуда $x = a_0^{-1} a_0^2 = a_0 \in \mathcal{G}_T$, что противоречит выбору a_0). Итак,

$$a_0 \bar{\in} \mathcal{G}_T, a_0^{-1} \bar{\in} \mathcal{G}_T, a_0^2 \in \mathcal{G}_T. \quad (10.2)$$

Мы будем считать, что задано неприводимое представление \mathcal{D} инвариантной подгруппы $\mathcal{G}_T \subset \mathcal{G}'$ (играющей роль H из общей теории § 9!), и построим малую группу \mathcal{L} для "большой группы" \mathcal{G} , ее инвариантной подгруппы \mathcal{G}_T и неприводимого представления \mathcal{D} подгруппы \mathcal{G}_T .

Примечание. Не следует смешивать группу \mathcal{G}' этого построения с полной пространственной группой \mathcal{G} . В интересующих нас задачах роль \mathcal{G}' будет играть $\mathcal{G}_{\bar{k}}$, роль $\mathcal{G}_T - \mathcal{G}_{\bar{k}}^T$. Для построения неприводимых представлений \mathcal{G} потребуется еще одно индуцирование - от $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ к \mathcal{G} .

Таким образом, будут последовательно выполнены два индуцирования по схеме



Первый этап:

$$\mathcal{G}_{\bar{k}}^T, \mathcal{D}_{\bar{k}}^T \rightarrow \mathcal{L}, \mathcal{D}^{\mathcal{L}} \rightarrow \mathcal{G}_{\bar{k}}, \mathcal{D}_{\bar{k}}. \quad (10.3)$$

Второй этап:

$$T, \mathcal{D}^{(\bar{k})} \rightarrow \mathcal{G}_{\bar{k}}, \mathcal{D}_{\bar{k}} \rightarrow \mathcal{G}, \mathcal{D}_{\bar{k}}^{(7)}. \quad (10.3)$$

"Исходным материалом" для первого этапа служит точечная подгруппа $\mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$, соответствующая симморфной подгруппе $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$,

и представление $\mathcal{D}_{0\bar{K}}^T$ этой точечной подгруппы, построенное по способам § 6. При этом допустимость представления малой группы (\mathcal{D}^Z) понимается по отношению к $\mathcal{D}_{\bar{K}}^T$. На втором этапе "исходным материалом" является представление $\mathcal{D}_{\bar{K}}$ группы $\mathcal{G}_{\bar{K}}$, полученное на первом ($\mathcal{D}^{(\bar{K})}(\epsilon|\bar{K}) = e^{-i\bar{K}\bar{K}}$ здесь очевидно); надо проверить при этом, что $\mathcal{D}_{\bar{K}}$ допустимо по отношению к $\mathcal{D}^{(\bar{K})}$.

Итак, ищем малую группу \mathcal{L} . Рассмотрим два случая.

(I) $\mathcal{D}_{a_0} \sim \mathcal{D}$. Тогда для любого элемента c группы \mathcal{G}' имеем либо выражение $c = \epsilon \cdot v'$, либо $c = a_0 \cdot v'$, где $v' \in \mathcal{G}_T$.

Отсюда для любого $v \in \mathcal{G}_T$

$$\mathcal{D}_c(v) = \mathcal{D}(c^{-1}vc) = \mathcal{D}(c)^{-1}\mathcal{D}(v)\mathcal{D}(c) \text{ при } c \in \mathcal{G}_T,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_c(v) &= \mathcal{D}(c^{-1}vc) = \mathcal{D}((a_0 v')^{-1}v(a_0 v')) = \mathcal{D}(v'^{-1}(a_0^{-1}va_0)v') = \\ &= \mathcal{D}(v')^{-1}\mathcal{D}_{a_0}(v)\mathcal{D}(v') \text{ при } c \in \mathcal{G}_T. \end{aligned}$$

В обоих случаях $\mathcal{D}_c(v) \sim \mathcal{D}(v)$. Таким образом, при условии (I) все представления, сопряженные \mathcal{D} , эквивалентны \mathcal{D} , и орбита \mathcal{D} сводится к одному \mathcal{D} (§ 5). Тем самым, малая группа на $\mathcal{L} = \mathcal{G}'$.

(II). $\mathcal{D}_{a_0} \not\sim \mathcal{D}$. Тогда по-прежнему или $\mathcal{D}_c \sim \mathcal{D}$, или $\mathcal{D}_c \sim \mathcal{D}_{a_0}$, но уже $\mathcal{D}_{a_0} \not\sim \mathcal{D}$; орбита \mathcal{D} состоит из двух представлений $\mathcal{D}, \mathcal{D}_{a_0}$. Малая группа $\mathcal{L} = \mathcal{G}_T$.

Опишем процесс индуцирования в случаях (I), (II); начнем с (II), обозначая индуцированное представление группы \mathcal{G}' через $\mathcal{D}'(\mathcal{I})$.

(II). В качестве представителей (9.2) выберем $a_1 = \epsilon, a_2 = a_0$. Тогда для $a \in \mathcal{G}'$, $a \in \mathcal{G}_T$ имеем

$$\epsilon^{-1}a\epsilon \in \mathcal{G}_T, a_0^{-1}aa_0 \in \mathcal{G}_T. \quad (10.4)$$

(второе - поскольку \mathfrak{G}_T -инвариантная подгруппа!). В матрице $\mathcal{D}'(\mathcal{F})(a)$, по правилу индуцирования § 9, должны быть отличны от нуля блоки (11), (22);

имеем

$$\mathcal{D}'(\mathcal{F})(a) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}(a) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}(a_0^{-1}aa_0) \end{pmatrix} (a \in \mathfrak{G}_T). \quad (10.5)$$

Для $a \in \mathfrak{G}_T$, $a \in \mathfrak{G}'$ имеем

$$\varepsilon^{-1}aa_0 \in \mathfrak{G}_T, a_0^{-1}a \in \mathfrak{G}_T \quad (10.6)$$

(в самом деле, $a = a_0 v$, где $v \in \mathfrak{G}_T$, откуда $a_0^{-1}a = a_0^{-1}a_0 v = v \in \mathfrak{G}_T$; в силу (10.2), $\varepsilon^{-1}aa_0 = a_0 v a_0 = a_0^2 (a_0^{-1} v a_0) = a_0^2 v' \in \mathfrak{G}_T$ где v' - другой элемент инвариантной подгруппы \mathfrak{G}_T).

Следовательно, в $\mathcal{D}'(\mathcal{F})(a)$ отличны от нуля блоки (12), (21).

$$\mathcal{D}'(\mathcal{F})(a) = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{D}(aa_0) \\ \mathcal{D}(a_0^{-1}a) & 0 \end{pmatrix} (a \in \mathfrak{G}_T). \quad (10.7)$$

Формулы (10.5), (10.7) полностью задают индуцированное представление группы \mathfrak{G}' ; по общей теореме (§ 9) оно неприводимо.

Итак, из каждого неприводимого представления группы \mathfrak{G}_T получается одно неприводимое представление группы \mathfrak{G} , вдвое большей размерности.

Покажем, что в частном случае $\mathfrak{G}' = \mathfrak{G}_{\bar{k}}$ полученное представление $\mathcal{D}'(\mathcal{F}) = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ оказывается допустимым относительно представления $\mathcal{D}_{\bar{k}}^{(\bar{k})}$ подгруппы T .

Вспомним, что $\mathcal{D} = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ строится в этом случае по формуле (6.1) из представления $\mathcal{D}_{o\bar{k}}^T$ точечной группы $\mathfrak{G}_{o\bar{k}}^T$ (группа $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$, в отличие от $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$, симморфна!). Отсюда для любой трансляции $(\varepsilon | \bar{R})$

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\varepsilon | \bar{R}) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_{o\bar{k}}^T(\varepsilon) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} \cdot I, \quad (10.8)$$

где I - единичная матрица. Далее, согласно (2.1), для

$$a_0 = (\alpha_0 | \bar{R}_0) \text{ имеем } a_0^{-1}(\varepsilon | \bar{R}) a_0 = (\varepsilon | \alpha_0^{-1} \bar{R}) , \text{ откуда}$$

$$\mathcal{D}_k^T(a_0^{-1}(\varepsilon | \bar{R}) a_0) = \mathcal{D}_k^T(\varepsilon | \alpha_0^{-1} \bar{R}) = e^{-i\bar{k} \cdot \alpha_0^{-1} \bar{R}} = e^{-i\alpha_0 \bar{k} \cdot \bar{R}}$$

(инвариантность скалярного произведения при вращениях)

$$= e^{-i\bar{k} \bar{R}} \quad (a_0 \text{ входит в малую группу } \mathcal{G}_{\bar{R}}, \text{ откуда}$$

$$\alpha_0 \bar{k} = \bar{k} + \bar{K}, \text{ ср. (5.10)).} \quad (10.9)$$

Итак, пусть $a = (\varepsilon | \bar{R})$ - трансляция; поскольку $T \subset \mathcal{G}_{\bar{R}}^T$

(см. начало § 10,) ^{НАДО} применить формулу (10.5). В силу (10.8)

(10.9), матрица $\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}(\varepsilon | \bar{R})$ также имеет вид $e^{-i\bar{k} \bar{R}} I$, и

найденное представление допустимо относительно $\mathcal{D}^{(\bar{R})}$.

I. В случае (I), согласно общей теории § 9, достаточно най-

ти допустимые неприводимые представления малой группы \mathcal{L} ;

т.к. теперь $\mathcal{L} = \mathcal{G}'$, то самого "индуцирования" нет (матри-

цы $\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}$ содержат единственный блок).

Итак, надо найти только такие неприводимые представления

$\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}$ группы \mathcal{G}' , что для $a \in \mathcal{G}'_T$ матрицы $\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}(a)$ сос-

тоят из диагональных ящиков вида $\mathcal{D}(a)$:

$$\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}(a) = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \mathcal{D}(a) & & & \\ \hline & \mathcal{D}(a) & & 0 \\ \hline & & \mathcal{D}(a) & \\ \hline & & & \mathcal{D}(a) \\ \hline & 0 & & \\ \hline \end{array} ; \quad (10.10)$$

тем самым будут найдены все неприводимые представления \mathcal{G}' .

Однако, пользуясь тем, что $\mathcal{D}_c \sim \mathcal{D}$ при всех $c \in \mathcal{G}'$, можно

показать, что в матрицах $\mathcal{D}^{(\mathcal{F})}(a)$ имеется всего один ящик!

Следовательно, размерность представления $\mathcal{D}'(\mathcal{G})$ совпадает с размерностью исходного представления \mathcal{D} инвариантной подгруппы \mathcal{G}_T . Поскольку должно получиться представление, для всех $a \in \mathcal{G}_T$ должно быть

$$\mathcal{D}'(\mathcal{G})(a_0 a) = \mathcal{D}'(\mathcal{G})(a_0) \mathcal{D}'(\mathcal{G})(a),$$

или, записывая для краткости $\mathcal{D}'(\mathcal{G})$ в виде $\tilde{\mathcal{D}}$,

$$\tilde{\mathcal{D}}(a_0 a) = \tilde{\mathcal{D}}(a_0) \tilde{\mathcal{D}}(a).$$

В силу (10.10) (с одним блоком!) для $a \in \mathcal{G}_T$ будет $\tilde{\mathcal{D}}(a) = \mathcal{D}(a)$ откуда

$$\tilde{\mathcal{D}}(a_0 a) = \tilde{\mathcal{D}}(a_0) \mathcal{D}(a) = \mathcal{U} \mathcal{D}(a), \quad (10.11)$$

где \mathcal{U} - некоторая унитарная матрица (напомним, что мы рассматриваем только унитарные представления которым эквивалентны любые для групп нашего типа \mathcal{G}). Итак, если искомое представление $\tilde{\mathcal{D}}$ существует, то оно должно иметь вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{D}}(a) = \mathcal{D}(a) \quad (a \in \mathcal{G}_T), \\ \tilde{\mathcal{D}}(a_0 a) = \mathcal{U} \mathcal{D}(a) \quad (a_0 a \in \mathcal{G}_T). \end{array} \right. \quad (10.12)$$

Вспомним теперь, что, по условию (I), $\mathcal{D}_{a_0} \sim \mathcal{D}$, т.е. для всех $a \in \mathcal{G}_T$ $\mathcal{D}_{a_0}(a) = \mathcal{D}(a_0^{-1} a a_0) = \tilde{\mathcal{D}}(a_0^{-1} a a_0)$ ($a_0^{-1} a a_0 \in \mathcal{G}_T$ т.к. \mathcal{G}_T - инвариантная подгруппа!) $= \tilde{\mathcal{D}}(a_0)^{-1} \tilde{\mathcal{D}}(a) \tilde{\mathcal{D}}(a_0) = \mathcal{U}^{-1} \mathcal{D}(a) \mathcal{U}$. Таким образом, \mathcal{U} есть матрица, осуществляющая эквивалентность $\mathcal{D}_{a_0} \sim \mathcal{D}$. Такая матрица определяется с точностью до фазового множителя (доказательство: если еще $\mathcal{D}(a) = V^{-1} \mathcal{D}(a) V$ для всех $a \in \mathcal{G}_T$, то $\mathcal{U}^{-1} \mathcal{D}(a) \mathcal{U} = V^{-1} \mathcal{D}(a) V$, $V \mathcal{U}^{-1} \mathcal{D}(a) \mathcal{U} V^{-1} = \mathcal{D}(a)$, $(\mathcal{U} V^{-1})^{-1} \mathcal{D}(a) (\mathcal{U} V^{-1}) = \mathcal{D}(a)$, так что $\mathcal{U} V^{-1}$ перестановочна со всеми $\mathcal{D}(a)$; ввиду неприводимости \mathcal{D} , можно применить лемму Шура, по которой $\mathcal{U} V^{-1}$ кратна единичной матрице; но \mathcal{U}, V унитарны, $\mathcal{U} V^{-1}$ также унитарна, откуда $\mathcal{U} V^{-1} = e^{-i\varphi} I$, φ действительно). Более того, т.к. $a_0^2 \in \mathcal{G}_T$ (см. (10.2)),

имеем

$$U^2 = \tilde{D}(a_0)^2 = \tilde{D}(a_0^2) = D(a_0^2). \quad (10.13)$$

Но тогда фазовый множитель определяется с точностью до знака. Можно показать, что если унитарная матрица U удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} U^{-1}D(a)U &= D(a_0^{-1}aa_0) \text{ для всех } a \in \mathcal{G}_T, \\ U^2 &= D(a_0^2), \end{aligned} \quad (10.14)$$

то формулы (10.12) действительно задают представление группы \mathcal{G}'

Таким образом, из каждого неприводимого представления группа \mathcal{G}_T в случае (I) получается два неприводимых представления группы \mathcal{G}' , той же размерности (неприводимость вытекает из того, что представление \tilde{D} неприводимо уже на подгруппе \mathcal{G}_T , где оно совпадает с D ; неэквивалентность двух представлений из того, что из $\tilde{D}_1(a_0) = V^{-1}\tilde{D}_2(a_0)V$ и $\tilde{D}_1(a_0) = U, \tilde{D}_2(a_0) = -U$ следовало бы $U = -V^{-1}UV$, и матрицы $U, -U$ имели бы одинаковые собственные значения).

Покажем, что в частном случае $\mathcal{G}' = \mathcal{G}_{\bar{K}}$ полученное представление $\tilde{D} = D_{\bar{K}}$ оказывается допустимым относительно представления $D^{(\bar{K})}$ подгруппы T . В самом деле, $T \subset \mathcal{G}_{\bar{K}}^T$, и достаточно проверить, что

$$D_{\bar{K}}^T(\epsilon | \bar{R}) = e^{-i\bar{K}\bar{R}} \cdot I$$

(следует применить к трансляции $(\epsilon | \bar{R})$ первую из формул 10.12)!). Но это мы уже имели в (10.8).

Примеры

Мы рассмотрим пространственную группу алмаза \mathcal{G} . Зона Б. для этой группы изображена на рис. 6, на обозначения которого мы и будем постоянно ссылаться. В следующих дальше

вычислениях удобно принять за начало координат обратной решетки алмаза один из атомов С ("нестандартный" выбор; стр. § 1). Тогда точечная группа алмаза $\mathcal{G}_0 = O_h$ имеет разложение

$$O_h = T_d + i T_d, \quad (10.15)$$

где T_d - группа тетраэдра, i - инверсия. Если $\alpha_j \in T_d$ то в выбранных координатах $\bar{v}_{\alpha_j} = 0$, так что $(\alpha_j | 0)$ входит в пространственную группу \mathcal{G} . Если же $\alpha_j \in i T_d$, то можно взять $\bar{v}_{\alpha_j} = \bar{c}$ (ср. § 1). Итак, система элементов (1.13) имеет в нашем случае вид

$$(\alpha_1 | 0), \dots, (\alpha_{24} | 0), (\alpha_{25} | \bar{c}), \dots, (\alpha_{48} | \bar{c}). \quad (10.16)$$

Важно выяснить, какие именно вращения из O_h входят в T_d и какие не входят. Напомним, что T_d состоит из вращений

ϵ ;

$\sigma_{4x}^{\pm 1}, \sigma_{4y}^{\pm 1}, \sigma_{4z}^{\pm 1}$, где $\sigma_{4x}^{\pm 1} = i \delta_{4x}^{\pm 1}$, а $\delta_{4x}^{\pm 1}$ - вращение на угол $\pm \frac{\pi}{2}$ вокруг оси x ;

$\rho_{xy}, \rho_{yz}, \rho_{zx}, \rho_{x\bar{y}}, \rho_{y\bar{z}}, \rho_{z\bar{x}}$, где ρ_{xy} - отражение в плоскости $x+y=0$, $\rho_{x\bar{y}}$ - отражение в плоскости $x-y=0$;

$\delta_{3xyz}^{\pm 1}, \delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1}, \delta_{3\bar{x}y\bar{z}}^{\pm 1}, \delta_{3\bar{x}\bar{y}z}^{\pm 1}$, где $\delta_{3xyz}^{\pm 1}$ - вращение на угол $\pm \frac{2\pi}{3}$ вокруг оси $x=y=z$,

$\delta_{3\bar{x}\bar{y}z}^{\pm 1}$ - вращение на угол $\pm \frac{2\pi}{3}$ вокруг оси $-x=-y=z$; (10.17)

$\delta_{2x}, \delta_{2y}, \delta_{2z}$, где δ_{2x} - вращение на угол π вокруг оси x .

Класс смежности iT_d (группы O_h по подгруппе T_d) состоит из вращений

$$\left. \begin{aligned}
 & i - \text{инверсии}; \\
 & \delta_{4x}^{\pm 1}, \delta_{4y}^{\pm 1}, \delta_{4z}^{\pm 1}, \text{ где } \delta_{4x}^{\pm 1} - \text{вращение вокруг оси } x \\
 & \quad \text{на угол } \pm \frac{\pi}{2}; \\
 & \delta_{2xy}, \delta_{2yz}, \delta_{2zx}, \delta_{2x\bar{y}}, \delta_{2y\bar{z}}, \delta_{2z\bar{x}}, \text{ где } \delta_{2xy} - \text{вращение} \\
 & \quad \text{на угол } \pm \frac{\pi}{2} \text{ вокруг прямой } x=y, z=0, z \\
 & \quad \text{на угол } \pm \frac{\pi}{2} \text{ вокруг} \\
 & \delta_{x\bar{y}} - \text{вращение вокруг прямой } \pm \frac{\pi}{2} \text{ вокруг} \\
 & \quad \text{прямой } x=-y, z=0; \\
 & \sigma_{6xyz}^{\pm 1}, \sigma_{6x\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1}, \sigma_{6\bar{x}y\bar{z}}^{\pm 1}, \sigma_{6\bar{x}\bar{y}z}^{\pm 1}, \text{ где } \sigma_{6xyz}^{\pm 1} = i\delta_{3xyz}^{\pm 1}, \\
 & \quad \sigma_{6\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1} = i\delta_{3\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{\pm 1}; \\
 & \rho_x, \rho_y, \rho_z, \text{ где } \rho_x - \text{отражение в плоскости } x=0.
 \end{aligned} \right\} \alpha_{25} - \alpha_{48} \quad (10.18)$$

При умножении на элементы переходят в элементы как раз в порядке, указанном в этом списке:

$$\begin{aligned}
 i \cdot \epsilon &= i; \\
 i\sigma_{4x}^{\pm 1} &= \delta_{4x}^{\pm 1}, \dots; \\
 i\rho_{xy} &= \delta_{2xy}, \dots; \\
 i\delta_{3xyz}^{\pm 1} &= \sigma_{6xyz}^{\pm 1}, \dots; \\
 i\delta_{2x} &= \rho_x, \dots.
 \end{aligned} \quad (10.19)$$

Для дальнейшего нам понадобится знать векторы $\alpha_j \cdot \bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}$ для $\alpha_j \in T_d$ и $\alpha_j \cdot \bar{\epsilon} + \bar{\epsilon}$ для $\alpha_j \in T_d$.

Согласно таблице (9.4), для этого надо разложить группу T_d на классы смежности по подгруппе C_{3v} . Таких классов четыре: $\mathcal{L}_0 = C_{3v}, \mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3$.

Для вращений из этих классов имеем символически (см.(9.5)):

$$\mathcal{L}_j \bar{c} - \bar{c} = -\bar{t}_j, \quad (10.20)$$

где \bar{c}_0 (по соглашению, вводимому для общности формулы) принимается равным 0, а $\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$ - векторы базиса "прямой" решетки алмаза:

$$\bar{t}_1 = a(0, 1, 1), \quad \bar{t}_2 = a(1, 0, 1), \quad \bar{t}_3 = a(1, 1, 0) \quad (10.21)$$

(NB : у Штрайвольфа ошибка в знаке, стр. 74, (2.9)!).

Если же α принадлежит классу смежности $i\mathcal{L}_j$ (группы O_h по подгруппе C_{3v} , i -инверсия, $j=0, 1, 2, 3$), то

$$i\mathcal{L}_j \bar{c} + \bar{c} = i(\mathcal{L}_j \bar{c} - \bar{c}) + i\bar{c} + \bar{c} = -i\bar{t}_j - \bar{c} + \bar{c} = -i\bar{t}_j = \bar{t}_j. \quad (10.22)$$

Симметричные комплексы алмаза.

В следующих ниже таблицах, которые мы для удобства читателя заимствуем у Штрайвольфа, перечислены все симметричные точки, отрезки и многогранники для кристалла алмаза, с их малыми группами.

Сейчас мы подробно поясним, как пользоваться таблицами.

Вся информация содержится в пяти столбцах.

Первый столбец. Здесь указаны стандартные обозначения симметричных комплексов, в соответствии с рис. 6, в пределах одного элементарного многогранника; остальные симметричные комплексы зоны Б. получаются из этих вращениями α_j (с возможным для граничных точек зоны прибавлением вектора обратной решетки \bar{K} , для возвращения в зону Б.). Для всех векторов данного симметричного комплекса группы $\mathcal{G}_{\bar{K}}$ состоят из одних и тех же элементов.

В первой таблице перечислены симметричные точки. Во-второй - симметричные отрезки; за исключением Σ , к которому присоединяется один из концов \bar{K} (обозначение симм.отрезка: Σ, \bar{K}),

все симм. отрезки берутся без обоих концов.

В третьей таблице перечислены симм. многогранники; под $\Gamma\Delta$ понимается открытый многогранник (без сторон и вершин), а под $\Gamma\Sigma\Lambda$, $\mathcal{K}\mathcal{L}$ - открытый многогранник $\Gamma\Sigma\Lambda$ с присоединением одной стороны $\mathcal{K}\mathcal{L}$, но без концов \mathcal{K} , \mathcal{L} (и т.п.).

Второй столбец в таблицах I, II содержит координаты векторов \bar{k} , входящих в симм. комплекс (выбор осей, как на рис. 6).

В табл. III второй столбец опущен.

Третий столбец содержит стандартные обозначения групп $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ - точечных групп, соответствующих малым группам $\mathcal{G}_{\bar{K}}$ данных симм. комплексов. Напомним, что $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ состоит из всех тех вращений α , для которых некоторое движение $(\alpha | \bar{a})$ входит в $\mathcal{G}_{\bar{K}}$. Каждая группа $\mathcal{G}_{O\bar{K}}$ обозначена здесь двойко - как пространственная группа и (в скобках) как абстрактная группа. Напомним обозначения. (Следует иметь в виду, что простейшие пространственные группы (O, D_4, D_6, \dots) служат моделями абстрактных групп; $O_k(O \times C_2)$ означает, что пространственная группа O_k , рассматриваемая как абстрактная группа, т.е. лишь с заданной таблицей умножения элементов, но без их конкретной интерпретации вращениями пространства, изоморфна произведению O на C_2).

O_k - полная группа октаэдра (все вращения, сохраняющие октаэдр)

O - собственная группа октаэдра (собственные вращения, сохраняющие октаэдр).

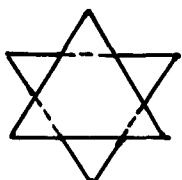
D_{4k} - группа всех вращений, сохраняющих правильную четырехугольную призму (не куб.)

D_4 - группа всех собственных вращений, сохраняющих правильную четырехугольную призму.

D_6, D_3 - то же для шестиугольной, треугольной правильной призмы

D_2 - группа всех собственных вращений, сохраняющих прямоугольник (не квадрат)

D_{3d} - группа всех вращений, сохраняющих фигуру, составленную из двух равных правильных треугольных призм с общей осью, примыкающих по основаниям и повернутых друг относительно друга на $\frac{\pi}{6}$.



Вид сверху

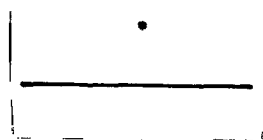


Вид сбоку

D_{2d} - группа всех вращений, переводящих в себя фигуру из двух ортогональных скрещивающихся прямых



Вид сверху



Вид сбоку

C_{4v}, C_{3v} - группа всех вращений, переводящих в себя правильную четырехугольную, треугольную пирамиду (в случае C_{3v} - не правильный тетраэдр)

C_{2v} - группа всех вращений, сохраняющих равнобедренный (не равносторонний) треугольник.

C_2 - группа, состоящая из ϵ и из вращения на угол π вокруг некоторой оси (циклическая второго порядка).

(10.24)

C_s - группа, состоящая из ϵ и из отражения в некоторой плоскости.

Четвертый столбец содержит элементы группы $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, входящие в T_d (полную группу тетраэдра, являющуюся подгруппой O_h).

В каждой строке помещен класс сопряженности $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$.

Пятый столбец содержит элементы группы $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, не входящие в T_d ; в каждой строке помещен класс сопряженности $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$.

Элементы $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, входящие в T_d , образуют подгруппу $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}^T$ группы $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$ (Это и будет подгруппа, служащая для индуцирования представлений, § 10).

В тех случаях, когда i входит в $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, каждая строка (класс сопряженности) четвертого столбца при умножении (слева или справа) на i переходит в стоящую рядом строку пятого столбца. Во всех случаях $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}^T$ — инвариантная подгруппа $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$ индекса 2 (проверьте это, опираясь на такие же свойства подгруппы $T_d \subset O_h$).

Построение групп $\mathfrak{G}_{\bar{K}}$, $\mathfrak{G}_{\bar{K}}^T$. Мы будем придерживаться в следующих дальше примерах системы координат, начало которой $\bar{z} = 0$ помещено в одном из узлов "прямой" решетки (ср. § 1). Тогда в силу (1.13), имеем

$$\bar{v}_\alpha = 0 \text{ для } \alpha \in T_d, \quad (10.25)$$

$$\bar{v}_\alpha = \bar{c} = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \text{ для } \alpha \in T_d.$$

Таким образом, каждая группа $\mathfrak{G}_{\bar{K}}$ состоит из элементов вида $(\alpha | \bar{a})$, где α принадлежит соответствующей точечной группе $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, указанной в таблице, а вектор

$$\bar{a} = \bar{R} \quad (\text{из "прямой" решетки}) \text{ при } \alpha \in \mathfrak{G}_{O\bar{K}}^T, \quad (10.26)$$

$$\bar{a} = \bar{c} + \bar{R} \quad \text{при } \alpha \in \mathfrak{G}_{O\bar{K}}$$

Важно отметить, что вследствие (10.26) все группы $\mathfrak{G}_{\bar{K}}^T$ сим-
морфны.

Таблица 1

Симметричные точки

Точка	\bar{k}	$\mathcal{G}_{O\bar{k}}$		Элементы группы $\mathcal{G}_{O\bar{k}}$
Γ	0	$O_h (O \times C_2)$	ϵ $6 \sigma_{4i}^{\pm 1}$ $6 \rho_i$ $8 \delta_{3i}^{\pm 1}$ $3 \delta_{2i}$	i $6 \delta_{4i}^{\pm 1} (i = x, y, z)$ $6 \delta_{2i} (i = xy, yz, zx, x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x})$ $8 \sigma_{6i}^{\pm 1} (i = xyz, x\bar{y}\bar{z}, \bar{x}y\bar{z}, \bar{x}\bar{y}z)$ $3 \rho_i (i = x, y, z)$
X	$\frac{\pi}{a}(0, 1, 0)$	$D_{4h} (D_4 \times C_2)$	ϵ $2 \sigma_{4y}^{\pm 1}$ δ_{2y} $\rho_{2x}, \rho_{2\bar{x}}$ δ_{2z}, δ_{2x}	i $2 \delta_{4y}^{\pm 1}$ ρ_y $\delta_{2zx}, \delta_{2z\bar{x}}$ ρ_z, ρ_x
Y	$\frac{\pi}{2a}(1, 1, 1)$	$D_{3d} (D_6)$	ϵ $2 \delta_{3xyz}^{\pm 1}$ $3 \rho_i$	i $2 \sigma_{6xyz}^{\pm 1}$ $3 \delta_{2i} (i = x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x})$
W	$\frac{\pi}{2a}(1, 2, 0)$	$D_{2d} (D_4)$	ϵ σ_{4x} δ_{2x} σ_{4x}^{-1}	$\delta_{2y\bar{z}}$ ρ_y δ_{2yz} ρ_z

Симметричные отрезки.

Отрезок	\bar{k}	$G_{\bar{k}}$	Элементы α группы $G_{\bar{k}}$	
			$\alpha \in T_d$	$\alpha \in \bar{T}_d$
Δ	$\frac{\pi}{a}(0, \lambda, 0)$ $(0 < \lambda < 1)$	$C_{4v}(D_4)$	ε δ_{2y} $\rho_{zx}, \rho_{z\bar{x}}$	$2\delta_{4y}^{\pm 1}$ ρ_z, ρ_x
Λ	$\frac{\pi}{2a}(\lambda, \lambda, \lambda)$ $(0 < \lambda < 1)$	$C_{3v}(D_3)$	ε $2\delta_{3xy}^{\pm 1}$ $3\rho_i (i = x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x})$	
Σ, \mathcal{K}	$\frac{3\pi}{4a}(\lambda, \lambda, 0)$ $(0 < \lambda \leq 1)$	$C_{2v}(D_2)$	ε $\rho_{x\bar{y}}$	δ_{2xy} ρ_z
Z	$\frac{\pi}{2a}(\lambda, 2, 0)$ $(0 < \lambda < 1)$	$C_{2v}(D_2)$	ε δ_{2x}	ρ_y ρ_z
S	$\frac{\pi}{a}(\frac{1}{4}\lambda, 1, \frac{1}{4}\lambda)$ $(0 < \lambda < 1)$	$C_{2v}(D_2)$	ε $\rho_{z\bar{x}}$	δ_{2zx} ρ_y
Q	$\frac{\pi}{2a}(1, 2-\lambda, \lambda)$ $(0 < \lambda < 1)$	$C_2(C_2)$	ε	$\delta_{2y\bar{z}}$

Таблица III

Симметричные многоугольники

Многоуголь- ник	$\mathfrak{G}_{O\bar{k}}$	Элементы группы $\mathfrak{G}_{O\bar{k}}$	
		$\alpha \in T_d$	$\alpha \in \bar{T}_d$
$\Gamma\Delta$	$C_s (C_2)$	ϵ $\rho_{z\bar{x}}$	
$\Gamma\Sigma\Lambda, \mathcal{K}\mathcal{L}$	$C_3 (C_2)$	ϵ $\rho_{x\bar{y}}$	
$\Gamma\Delta\Sigma, \mathcal{K}\mathcal{W}$	$C_3 (C_2)$	ϵ	ρ_z
$\mathcal{W}\mathcal{U}\mathcal{X}, \mathcal{W}\mathcal{U}$	$C_3 (C_2)$	ϵ	ρ_y

Малые группы с "простыми" представлениями.

Таковы, прежде всего, $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ для внутренних точек зоны Б., т.е. симм. комплексов $\Gamma, \Delta, \Lambda, \Sigma, \Gamma\Delta, \Gamma\Sigma\Lambda, \Gamma\Delta\Sigma$; согласно § 6, для этих \bar{k} имеем

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}(\beta | \bar{v}) = e^{-i\bar{k}\bar{v}} \mathcal{D}_{O\bar{k}}(\beta), \quad (10.26)$$

где $(\beta | \bar{v})$ - любой элемент $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$, и дело сводится к разнесканию представлений точечной группы $\mathfrak{G}_{O\bar{k}}$ (ср. § 6).

Вспомним теперь необходимое и достаточное условие (6.6) применимости формулы (10.26): для любых $\beta, \beta' \in \mathfrak{G}_{O\bar{k}}$ должен быть

$$e^{i(\bar{k} - \beta^{-1}\bar{k})\bar{v}_{\beta'}} = 1. \quad (10.27)$$

Поскольку β^{-1} принадлежит малой группе $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$, должно быть

$$\beta^{-1}\bar{k} = \bar{k} + \bar{\mathcal{K}}, \quad (10.28)$$

где \bar{k} - вектор обратной решетки (ср. (5.13)). Однако, для точек симметричных комплексов $\mathcal{K}, \mathcal{KL}$ (без \mathcal{L}) и \mathcal{KW} (без \mathcal{W}) имеем просто

$$\beta^{-1}\bar{k} = \bar{k}, \quad (10.29)$$

так что (10.27) выполнено, и представления $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ могут быть опять построены по правилу (10.26). (Проверьте это по таблицам).

Осталось рассмотреть симм. комплексы $\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{W}, \mathcal{Z}, \mathcal{S}, \mathcal{Q},$
 \mathcal{WUX} (вместе с \mathcal{WU} , но без \mathcal{W}, \mathcal{U}) (10.30)

(Напомним, что \mathcal{WU} входит в элементарный многогранник без конца \mathcal{U} , т.к. \mathcal{U} и \mathcal{K} принадлежат одной звезде; см. § 5)

Согласно сказанному выше, во всех этих случаях группа $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ содержит инвариантную подгруппу $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$ индекса 2. Прежде всего надо выяснить, какой из случаев I, II (см. начало этого §) имеется для каждого симм. комплекса.

Во всех $\mathcal{G}_{\bar{k}}$ возьмем в качестве α_0 элемент $(\alpha_0 | \bar{\tau})$, не принадлежащий $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$, т.е.

T_d . Ввиду симморфности $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$ построение (10.26) применимо, т.е. для всех $\beta \in \mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$ и \bar{R} из "прямой" решетки

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\beta | \bar{R}) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\beta), \quad (10.31)$$

где $\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T$ - неприводимое представление точечной группы $\mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$

Тем самым, мы получаем все нужные нам представления группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$. Посмотрим теперь, для каких \bar{k} будет справедлива эквивалентность

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(v) \sim \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1}v\alpha_0) \quad (v \in \mathcal{G}_{\bar{k}}^T). \quad (10.32)$$

Отложим пока рассмотрение точки \mathcal{W} . Для остальных комплексов (10.30) группа $\mathcal{G}_{0\bar{k}}$ либо абелева (изоморфная C_2 или D_2 ; проверьте, что D_2 - абелева группа), либо содержит

инверсию i (точки X, Z). Т.к. инверсия перестановочна со всеми вращениями, то, выбирая в качестве α_0 элемент $(i|\bar{c}$ в случаях X, Z , имеем всегда

$$\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1}\beta\alpha_0) = \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\beta) \quad (\beta \in \mathcal{G}_{0\bar{k}}^T),$$

откуда (см. (10.31)) для $\nu = (\beta|\bar{R}) \in \mathcal{G}_{\bar{k}}^T$

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1}\nu\alpha_0) = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1}\beta\alpha_0|\alpha_0^{-1}(\beta\bar{c}-\bar{c}+\bar{R})) = e^{-i\bar{k}\cdot\alpha_0^{-1}(\beta\bar{c}-\bar{c}+\bar{R})} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\beta)$$

В силу инвариантности скалярного произведения относительно вращений,

$$\bar{k}\cdot\alpha_0^{-1}(\beta\bar{c}-\bar{c}+\bar{R}) = \alpha_0\bar{k}\cdot(\beta\bar{c}-\bar{c}+\bar{R}).$$

Но $\alpha_0 \in \mathcal{G}_{\bar{R}}$, откуда (ср. (10.28)) $\alpha_0\bar{k} = \bar{k} + \bar{\mathcal{K}}$, так что $\alpha_0\bar{k}\cdot\bar{R} = \bar{k}\cdot\bar{R} + \bar{\mathcal{K}}\cdot\bar{R} = \bar{k}\cdot\bar{R} + \text{целое кратное } 2\pi$. Далее, $\beta \in \mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$, следовательно, $\beta \in T_d$, и из (10.20) видно, что $\beta\bar{c} - \bar{c}$ есть вектор "прямой" решетки \bar{R}_1 ; поэтому $\alpha_0\bar{k}\cdot(\beta\bar{c}-\bar{c}) = \bar{k}\cdot(\beta\bar{c}-\bar{c}) + \bar{\mathcal{K}}\cdot\bar{R}_1 = \bar{k}\cdot(\beta\bar{c}-\bar{c}) + \text{целое кратное } 2\pi$. Таким образом, для $\nu = (\beta|\bar{R}) \in \mathcal{G}_{\bar{k}}^T$, $\bar{k} \neq W$

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1}\nu\alpha_0) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} e^{-i\bar{k}(\beta\bar{c}-\bar{c})} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\beta) = e^{-i\bar{k}(\beta\bar{c}-\bar{c})} \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\nu). \quad (10.33)$$

Дальше будет полезно выделить группы $\mathcal{G}_{\bar{R}}^T$, для которых $\mathcal{D}_{\bar{k}\alpha_0}^T \sim \mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ (случай I начала §).

Симметричные комплексы $\mathcal{L}, \mathcal{S}, \mathcal{Q}, WUX$ (с WU , но без W, U).

Для этих комплексов, как видно из таблиц I, II, III, при всех

$\beta \in \mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$ будет $\beta\bar{c} - \bar{c} = 0$, и из (10.33) видно, что представление $\mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ самосопряжено (случай I). Следовательно, надо применить формулы (10.12), причем двузначный выбор U приводит к тому, что каждое неприводимое представление $\mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ группы $\mathcal{G}_{\bar{R}}^T$ порождает два неприводимых представления $\mathcal{D}_{\bar{k}}^{\pm}$ группы $\mathcal{G}_{\bar{R}}$, той же размерности. Элементы груп-

ны \mathfrak{G}_k^T имеют вид $(\alpha | \bar{R})$, где $\alpha \in \mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T$, а \bar{R} — элементарная трансляция (вектор "прямой" решетки). Элементы группы $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$, не принадлежащие \mathfrak{G}_k^T , имеют вид $(\alpha | \bar{c} + \bar{R})$, где \bar{c} — неэлементарная трансляция, одна и та же для всех $\alpha \in T_d$ (см. выше).

Для применения второй формулы (10.12) представим $a = (\alpha | \bar{c} + \bar{R})$ в виде $\alpha_0 \cdot (\alpha_0^{-1} a) = (\alpha_0 | \bar{c}) \cdot (\alpha_0^{-1} | -\alpha_0^{-1} \bar{c}) (\alpha | \bar{c} + \bar{R}) = (\alpha_0 | \bar{c}) (\alpha_0^{-1} \alpha | \alpha_0^{-1} \bar{R})$; для элемента $(\alpha_0^{-1} \alpha | \alpha_0^{-1} \bar{R})$ группы $\mathfrak{G}_{\bar{k}}^T$ имеем (см.

(10.31)):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha | \alpha_0^{-1} \bar{R}) &= e^{-i\bar{k} \cdot \alpha_0^{-1} \bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha) = e^{-i\alpha_0 \bar{k} \cdot \bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha) = \\ &= e^{-i(\bar{k} + \bar{K}) \cdot \bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha) = e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha), \end{aligned}$$

откуда (с двузначной матрицей \mathcal{U})

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\bar{k} \pm}^{(\mathcal{J})}(\alpha | \bar{R}) &= e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha) \quad (\alpha \in \mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T), \\ \mathcal{D}_{\bar{k} \pm}^{(\mathcal{J})}(\alpha | \bar{c} + \bar{R}) &= e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}} \mathcal{U} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \alpha) \quad (\alpha \in \mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T). \end{aligned} \quad (10.34)$$

Матрица \mathcal{U} должна быть найдена из условий (10.14); начнем со второго из них. Поскольку, в силу нашего выбора α_0 ,

$$\alpha_0^2 = (\alpha_0 | \bar{c})^2 = (\alpha_0^2 | \alpha_0 \bar{c} + \bar{c}) = (\varepsilon | \alpha_0 \bar{c} + \bar{c}),$$

должно быть

$$\mathcal{U}^2 = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\varepsilon | \alpha_0 \bar{c} + \bar{c}) = e^{-i\bar{k} \cdot (\alpha_0 \bar{c} + \bar{c})} I. \quad (10.35)$$

В силу (10.22),

$$\alpha_0 \bar{c} + \bar{c} = t_j,$$

где j — номер класса смежности $i\mathcal{L}_j$, содержащего α_0 .

Для комплекса \mathcal{L} было взято $\alpha_0 = i$, для $Q - \alpha_0 = \delta_{2y\bar{z}}$; так как $i, \delta_{2y\bar{z}} \in i\mathcal{L}_0$ ((10.18) и табл. 9.4), в обоих случаях

$\alpha_0 \bar{c} + \bar{c} = \bar{t}_0 = 0$. Для комплексов же S, WUX (с WU , без W) можно взять в качестве α_0 любой элемент, не входящий в T_d

взяв в обоих случаях $\alpha_o = \rho_y = i \delta_{2y}$ (см. (10.18)), имеем $\alpha_o \in i\mathcal{L}_2$ (табл. 9.4), $\alpha_o \bar{\tau} + \bar{\tau} = \bar{\tau}_2$. При этом,

в силу (10.35),

$$U = \begin{cases} \pm I & \text{для } \mathcal{L} \text{ и } Q, \\ \pm e^{-i\bar{k}\frac{\bar{\tau}_2}{2}} I & \text{для } S, W, \mu \text{ (с } W, \mu, \text{ без } W, \mu) \end{cases} \quad (10.36)$$

Поскольку матрицы (10.36) – скалярные, первое из условий (10.14) выполняется автоматически. Окончательно искомого представления группы $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$ задаются формулами (10.34), (10.36). Напомним, что матрицы $\mathcal{D}_{O\bar{K}}^T(a)$ представлений для групп $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}^T$ известны из § 7 (это группы $\mathcal{D}_{3d} \approx \mathcal{D}_6 \approx \mathcal{D}_3 \times C_2$, $\{\epsilon\}$, $\mathcal{D}_2 = C_2 \times C_2$, $\{\epsilon\}$, соответственно, для симм. комплексов $\mathcal{L}, Q, S, W, \mu$).

Примечание. Легко проверить, что для только что перечисленных комплексов $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$ разлагается в произведение

$$\mathfrak{g}_{O\bar{K}} = \mathfrak{g}_{O\bar{K}}^T \times C_2, \text{ где } C_2 = \{\epsilon, \alpha_o\}$$

(ср. § 7, пример 2). Вследствие этого, можно выразить неприводимые представления группы $\mathfrak{G}_{\bar{K}}$ не через представления $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}^T$ а через представления $\mathfrak{G}_{O\bar{K}}$, с ними тесно связанные, как указано в § 7. Таким образом получают формулы у Штрайтвольфа на стр. 96, (2.41).

Симметричный отрезок Z . В этом случае $\mathfrak{g}_{O\bar{K}}^T = \{\epsilon, \delta_{2x}\}$

(у Штрайтвольфа опечатка на стр. 97, 5-ая строка св.). На Z имеем $\bar{k} = \frac{\pi}{2a}(\lambda, 2, 0)$ (табл. II этого §); по табл. (9.4), $\delta_{2x} \in \mathcal{L}_1$, откуда в формуле (10.33) имеем

$$e^{-i\bar{k}(\beta\bar{\tau} - \bar{\tau})} = e^{i\bar{k}\bar{\tau}_1} = -1 \quad (10.37)$$

(ср. (10.21)).

Поскольку группа $\mathfrak{G}_{\bar{K}}^T$ для комплекса Z абелева ($\approx C_2$), все ее неприводимые представления одномерны; поэтому из (10.33), (10.37) вытекает неэквивалентность сопряженных представле-

ний $D_{\bar{k}}^T, D_{\bar{k}a_0}^T$ (эквивалентность одномерных представлений есть их совпадение). Каждая орбита представления $D_{\bar{k}}^T$ порождает одно неприводимое представление $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ (случай II начала этого §). В данном случае имеется одна орбита (табл. (7.34)) и тем самым одно двумерное неприводимое представление $D_{\bar{k}}^{\prime(\mathcal{F})}$ задаваемое формулами (10.5), (10.7). (Выпишите матрицы этого представления!).

Симметричная точка X. Для $\bar{k} = \bar{k}_x$ группа $\mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T = D_{2d}$ (табл. I).

Представления этой группы были изучены в § 7. Так как δ_{2x} входит в $\mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T$, из (10.37) снова следует, что одномерные представления этой группы не эквивалентны своим сопряженным, а для $\beta = \sigma_{4y} \in \mathcal{L}_3$ правая часть (10.37) снова равна -1. Из табл. (7.32) видно, что представлением, сопряженным Δ_1 , может быть только Δ_2 , а представлением, сопряженным Δ'_1 , только Δ'_2 (ЛВ: утверждение по этому поводу у Штрайтвольфа, стр. 97, ошибочно). Для индуцирования достаточно взять по одному представлению из каждой орбиты, например, Δ_1 и Δ'_1 , из которых опять строятся двумерные представления $\mathfrak{G}_{\bar{k}}$ по формулам (10.5), (10.7).

Интереснее обстоит дело с двумерным представлением Δ_5 (§ 7) поскольку это единственное двумерное представление группы D_2 , оно самосопряжено, и индуцирование производится, как в случае I начала этого §. Применим формулы (10.12). Для определения матрицы U воспользуемся на этот раз первым из условий (10.14). Эквивалентность, о которой идет речь в этом условии, по-прежнему описывается формулой (10.33) (теперь представления двумерны, и эквивалентность не означает тождества!). Рассмотрим элементы $\beta = \sigma_{4y}$, ρ_{2x} группы $\mathfrak{G}_{0\bar{k}}^T$.

Поскольку $\sigma_{4y} \in \mathcal{L}_3$, $\rho_{2x} \in \mathcal{L}_2$ (табл. (9.4)),

$$e^{-i\bar{k}(\beta\bar{t}-\bar{t})} = \begin{cases} e^{-i\bar{k}\bar{t}_3} = -1 & \text{для } \beta = \sigma_{4y}, \\ e^{-i\bar{k}\bar{t}_2} = 1 & \text{для } \beta = \rho_{2x}. \end{cases}$$

Сравнивая (10.33) с (10.14), имеем

$$\begin{aligned} U^{-1} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\sigma_{4y}) U &= -\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\sigma_{4y}), \\ U^{-1} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\rho_{2x}) U &= \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\rho_{2x}) \end{aligned} \quad (10.38)$$

(здесь можно заменить $\mathcal{D}_{\bar{k}}^T$ на $\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T$, так как σ_{4y}, ρ_{2x} имеют нулевые \bar{v}_\perp , как элементы подгруппы T_d).

Но матрицы представления $\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T = \Delta_5$ группы $\mathcal{G}_{0\bar{k}}^T = \mathcal{D}_{2d}$ уже были найдены в § 7:

$$\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\sigma_{4y}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\rho_{2x}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.39)$$

Итак, (10.38) принимает вид

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} U = -U \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} U = U \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.40)$$

Воспользуемся теперь вторым условием (10.14); теперь надо положить $\alpha_0 = i$, так как для точки χ мы выбрали $a_0 = (i|\bar{t})$:

$$U^2 = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(a_0^2) = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\epsilon | i\bar{t} + \bar{t}) = \mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\epsilon | 0) = I.$$

(ср. (10.35)). Следовательно, матрица U одновременно унитарна и эрмитова. Записывая ее в виде

$$U = \begin{pmatrix} a & \zeta \\ \zeta^* & b \end{pmatrix},$$

где a, b действительны, ζ и ζ^* комплексно сопряжены, получаем из первого равенства (10.40) $\zeta = \zeta^*$, $a = -b$, из второго вдобавок $a = b$; значит, $a = b = 0$ и ζ действительно. Ввиду унитарности U ,

$$U = \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.41)$$

Теперь формулы (10.12) задают два неприводимых двумерных представления группы $\mathcal{G}_{\bar{k}}$, соответствующих Δ_5 . Найдем, на-

пример, в первом из этих представлений матрицу $D_{\bar{k}}^{(\mathcal{G})}(\delta_{4y} | \bar{\tau})$

Поскольку

$$(\delta_{4y} | \bar{\tau}) = (i | \bar{\tau})(\sigma_{4y} | 0), \quad a_0 = (i | \bar{\tau}), \quad a = (\sigma_{4y} | 0),$$

из (10.12), (6.1), (10.39) находим

$$D_{\bar{k}}^{(\mathcal{G})}(\delta_{4y} | \bar{\tau}) = U D_{\bar{k}}^T(\sigma_{4y} | 0) = U D_{0\bar{k}}^T(\sigma_{4y}) = \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Симметричная точка W . Для этой точки $\mathcal{G}_{0\bar{k}}^T$ состоит из элементов $\{\varepsilon, \sigma_{4x}, \delta_{2x}, \sigma_{4x}^{-1}\}$ (табл. I этого §) и является циклической группой четвертого порядка C_4 (с образующей σ_{4x}). Эта группа - абелева, так что все ее неприводимые представления одномерны. Таблица представлений совпадает с таблицей характеров. Число представлений равно числу классов сопряженности, т.е., для абелевой группы, числу элементов. Итак, надо найти четыре взаимно ортогональных характера, что не представляет труда (табл. (10.42)). (Ввиду унитарности представлений, все значения χ по модулю равны 1 !)

Представления группы C_4

C_4	ε	σ_4	δ_2	σ_4^{-1}
\mathcal{D}_1	1	1	1	1
\mathcal{D}_2	1	-1	1	-1
\mathcal{D}_3	1	i	-1	$-i$
\mathcal{D}_4	1	$-i$	-1	i

(10,42)

Чтобы распределить эти представления по орбитам, выберем

$a_0 = (\rho_2 | \bar{\tau})$ (элемент $\mathcal{G}_{\bar{R}}$, не принадлежащий $\mathcal{G}_{\bar{R}}^T$). Подобно выводу (10.33) получаем для всех $v = (\beta | \bar{R})$ из $\mathcal{G}_{\bar{k}}^T$

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \beta \alpha_0) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} e^{-i\bar{k}(\beta\bar{t}-\bar{t})} \mathcal{D}_{0\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \beta \alpha_0) \quad (10.43)$$

(здесь $\alpha_0^{-1} \beta \alpha_0 \neq \beta$!)

Вследствие (10.20),

$$e^{-i\bar{k}(\beta\bar{t}-\bar{t})} = e^{i\bar{k}\bar{t}_j} \quad \text{для } \beta \in \mathcal{L}_j. \quad (10.44)$$

В следующей таблице вычисляются множители (10.44) для всех β ($\alpha_0 = \rho_2$); по таблице I, $\bar{k}_W = \frac{\pi}{2a}$. (1,2,0), а классы \mathcal{L}_j указаны в табл. (9.4).

β	ε	σ_{4x}	δ_{2x}	σ_{4x}^{-1}
$\alpha_0^{-1} \beta \alpha_0$	ε	σ_{4x}^{-1}	δ_{2x}	σ_{4x}
$j (\beta \in \mathcal{L}_j)$	0	2	1	3
$e^{i\bar{k}\bar{t}_j}$	1	i	-1	- i

(10.45)

(проверьте вычисления). Для тождественного представления

$$\mathcal{D}_{0\bar{k}}^T = \mathcal{D}_1 \quad \text{имеем из (10.43):}$$

$$\mathcal{D}_{\bar{k}}^T(\alpha_0^{-1} \beta \alpha_0) = e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_3(\beta) \cdot 1,$$

а это, в силу (10.31), и есть представление $\mathfrak{G}_{\bar{R}}^T$, соответствующее \mathcal{D}_3 . Таким образом, сопряжены представления $\mathcal{D}_{\bar{k}_1}^T$, $\mathcal{D}_{\bar{k}_3}^T$, соответствующие \mathcal{D}_1 , \mathcal{D}_3 .

Аналогично, имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\bar{k}_2}^T(\alpha_0^{-1}(\sigma_{4x} | \bar{R}) \alpha_0) &= e^{-i\bar{k}\bar{R}} \cdot i \cdot \mathcal{D}_2(\alpha_0^{-1} \sigma_{4x} \alpha_0) = i e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_2(\rho_2 \sigma_{4x} \rho_2) = \\ &= i e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_2(\sigma_{4x}^{-1}) = -i e^{-i\bar{k}\bar{R}} = e^{-i\bar{k}\bar{R}} \mathcal{D}_4(\sigma_{4x}) = \mathcal{D}_{\bar{k}_4}^T(\sigma_{4x}) \end{aligned}$$

и т.д. для остальных β ; таким образом, $\mathcal{D}_{\bar{k}_2}^T$, $\mathcal{D}_{\bar{k}_4}^T$ сопряжены. Каждой из двух орбит, по формулам (10.5), (10.7), отвечает двумерное неприводимое представление группы $\mathfrak{G}_{\bar{R}}$.

(Вычислите матрицы этих представлений).

Приложение

Алгебраический смысл индуцированных представлений

Ниже приводится алгебраическая конструкция, лежащая в основе "правила индуцирования представлений" (§ 9). Конечно, можно применять правило и без понимания этой конструкции; однако, его искусственный характер требует мотивировки. В этом приложении используется несколько более глубокая алгебра, чем в тексте.

Модули. Пусть W - векторное пространство, Λ - кольцо операторов на W ; это значит, что если операторы λ_1, λ_2 входят в Λ , то $\lambda_1 \pm \lambda_2$ и $\lambda_1 \lambda_2$ также входят в Λ . Тогда совокупность пространства W и кольца операторов Λ называется Λ -модулем. Мы предположим, что Λ содержит единичный оператор.

Примеры. 1. Пусть W - любое векторное пространство, с умножением векторов на комплексные числа, \mathbb{C} - кольцо всех комплексных чисел. Каждое комплексное число λ можно рассматривать как оператор на W - оператор умножения на λ . Тем самым, каждое (комплексное) векторное пространство является \mathbb{C} - модулем.

2. Гильбертово пространство с множеством всех унитарных (соотв. эрмитовых) операторов не является модулем, так как унитарные (эрмитовы) операторы не образуют кольца: сумма унитарных операторов - не унитарный оператор, а произведение эрмитовых - не всегда эрмитов. Если, однако, взять в качестве Λ множество всех полиномов от одного оператора (например, координаты или импульса), то гильбертово пространство оказывается Λ - модулем.

3. Векторное пространство W с кольцом Λ всех линейных операторов на нем образует Λ -модуль.

Более интересны случаи, когда кольцо операторов содержит лишь определенную часть операторов, действующих на W .

Пусть, для простоты, W -конечномерное пространство, на котором задано представление ρ группы \mathcal{L} . Это значит, что каждому элементу $\ell \in \mathcal{L}$ поставлен в соответствие оператор $\rho(\ell)$, действующий на W , причем $\rho(\varepsilon) = 1$ (единичный оператор) и

$$\rho(\ell_1 \ell_2) = \rho(\ell_1) \rho(\ell_2), \quad (\text{П.1})$$

т.е. умножению элементов группы соответствует последовательное применение операторов. Фиксировав представление ρ ,

удобно вместо $\rho(\ell)x$ (действие оператора $\rho(\ell)$ на вектор x) писать просто ℓx , считая тем самым сами элементы группы \mathcal{L} операторами на W . Тогда для любых комплексных чисел

z_1, \dots, z_k и любых элементов ℓ_1, \dots, ℓ_k определен оператор

$$(z_1 \ell_1 + \dots + z_k \ell_k)x = z_1 \ell_1 x + \dots + z_k \ell_k x, \quad (\text{П.2})$$

где умножение числа z_j на вектор $\ell_j x$ производится по правилу векторного пространства W .

Формальные линейные комбинации элементов \mathcal{L}

$$\lambda = z_1 \ell_1 + \dots + z_k \ell_k \quad (\text{П.3})$$

можно складывать (с "приведением подобных", т.е. с суммированием коэффициентов при одних и тех же ℓ) и умножать, пользуясь групповым умножением в \mathcal{L} :

$$\lambda \lambda' = \left(\sum_i z_i \ell_i \right) \left(\sum_j z'_j \ell'_j \right) = \sum_{i,j} (z_i z'_j) \ell_i \ell'_j. \quad (\text{П.4})$$

Тем самым мы построили кольцо операторов (П.3), действующих на пространстве W ; это кольцо называется групповым кольцом над \mathcal{L} и обозначается через $C(\mathcal{L})$. Итак, в силу (П.2) пространство W превращается в $C(\mathcal{L})$ - модуль; каждый оператор из $C(\mathcal{L})$ действует на W , причем сложению и умножению этих операторов соответствует, как обычно, сложение их образов и последовательное их применение:

$$\begin{aligned}(\lambda_1 + \lambda_2)x &= \lambda_1 x + \lambda_2 x, \\ (\lambda_1 \lambda_2)(x) &= \lambda_1(\lambda_2 x).\end{aligned}\tag{П.5}$$

Обратно, если W есть $C(\mathcal{L})$ - модуль, то, в частности, на W действуют в качестве операторов элементы $\ell \in \mathcal{L}$ ($\lambda = 1 \cdot \ell$), и второе соотношение (П.5) как раз и означает, что произведению $\ell_1 \ell_2$ отвечает последовательное применение - сначала ℓ_2 , затем ℓ_1 ; тем самым задано представление группы \mathcal{L} на пространстве W . Итак, понятие представления группы \mathcal{L} равносильно понятию $C(\mathcal{L})$ - модуля.

До сих пор мы записывали операторы λ , как это принято в теории операторов, слева от вектора x . Но в алгебре существует и другой способ записи - правый: $x\lambda$. При этом $x(\lambda, \lambda_2)$ понимается как $(x\lambda_1)\lambda_2$, т.е. применение справа оператора λ, λ_2 означает, что сначала надо применить λ_1 , а затем λ_2 (при левом действии λ, λ_2 порядок обратен!).

Модули с операторами, записываемыми слева, называются левыми модулями; модули, операторы которых записываются справа - правыми. Чисто формальное различие между этими понятиями исчезает в простейшем случае, когда кольцо Λ коммутативно, т.е. $\lambda, \lambda_2 = \lambda_2 \lambda_1$; это различие полезно в следующем важном определении.

Тензорное произведение Λ -модулей. Пусть W и S - векторные пространства. Для наглядности будем обозначать элементы векторного пространства W через w , элементы S - через s . Построим всевозможные формальные полиномы (любой длины)

$$v = s_1 \otimes w_1 + s_2 \otimes w_2 + \dots + s_k \otimes w_k, \quad (\text{П.6})$$

где знаки $+$ и \otimes (читается: "тензор") не означают каких-либо конкретных операций над векторами, а просто их соединение в общую запись вида (П.6). Условимся отождествлять полиномы (П.6), переходящие друг в друга при замене членов:

$$\begin{aligned} (s_1 + s_2) \otimes w &\text{ на } s_1 \otimes w + s_2 \otimes w && \text{и наоборот;} \\ s \otimes (w_1 + w_2) &\text{ на } s \otimes w_1 + s \otimes w_2 && \text{и наоборот;} \quad (\text{П.7}) \\ z s \otimes w &\text{ на } s \otimes z w && \text{и наоборот} \end{aligned}$$

(z - комплексное число).

Определим сложение полиномов v посредством их "последовательного выписывания":

$$\begin{aligned} v + v' &= (s_1 \otimes w_1 + \dots + s_k \otimes w_k) + (s'_1 \otimes w'_1 + \dots + s'_{k'} \otimes w'_{k'}) = \\ &= s_1 \otimes w_1 + \dots + s'_{k'} \otimes w'_{k'}, \end{aligned} \quad (\text{П.8})$$

а умножение на комплексное число (ср. третье равенство П.7) по правилу

$$\begin{aligned} z \cdot (s_1 \otimes w_1 + \dots + s_k \otimes w_k) &= z s_1 \otimes w_1 + \dots + z s_k \otimes w_k = \\ &= s_1 \otimes z w_1 + \dots + s_k \otimes z w_k. \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

Тогда полиномы v образуют, в свою очередь, векторное пространство. Базис этого пространства можно получить из базиса e_1, \dots, e_m пространства S и базиса f_1, \dots, f_n пространства W ; он состоит из векторов

$$v_{ij} = e_i \otimes f_j, \quad (\text{П.10})$$

по которым разлагается любой вектор v :

$$v = \sum_{\kappa} s_{\kappa} \otimes w_{\kappa} = \sum_{\kappa, i, j} (a_{\kappa}^i e_i) \otimes (b_{\kappa}^j f_j) = \sum_{i, j} c^{ij} v_{ij}, \quad (\text{П.11}),$$

где $a_{\kappa}^i, b_{\kappa}^j, c^{ij}$ - числа, причем в случае "монома" $v = 1 \otimes w$ имеем

$$c^{ij} = a^i b^j. \quad (\text{П.12})$$

Можно доказать, что векторы v_{ij} независимы.

Векторы v образуют, тем самым, пространство V размерности mn , называемое тензорным, или кронекеровым произведением пространств S, W и обозначаемое через

$$V = S \otimes W. \quad (\text{П.13})$$

Пусть теперь W - левый Λ -модуль, S - правый Λ -модуль.

Тогда имеют смысл векторы

$$s\lambda \otimes w, \quad s \otimes \lambda w. \quad (\text{П.14})$$

Условимся отождествлять эти векторы; тогда вместо тензорного произведения пространств (П.13) получаем тензорное произведение Λ -модулей, обозначаемое следующим образом:

$$V = S \otimes_{\Lambda} W \quad (\text{П.15})$$

(Обратите внимание на то, что в произведении пространств векторы (П.14) считаются различными; таким образом, при переходе от произведения (П.13) к произведению (П.15) производится "склеивание" элементов, вообще говоря, с уменьшением размерности пространства!).

Рассмотрим теперь частный случай, когда W - левый $C(\mathcal{L})$ -модуль, возникающий из заданного представления группы \mathcal{L} в пространстве W , а $S = C(\mathcal{L})$ - групповое кольцо. Так как элементы $C(\mathcal{L})$ можно складывать и умножать на комплексные числа (ср.(П.3)), $C(\mathcal{L})$ является одновременно и векторным

пространством. Базис этого пространства образуют элементы l_1, \dots, l_g группы \mathcal{L} (которую мы предположим конечной; ср. аппроксимацию Борна-Кáрманa). Далее, на S определено как левое, так и правое действие элементов группы \mathcal{L} :

$$\begin{aligned} l\lambda &= l(z_1 l_1 + \dots + z_k l_k) = z_1 ll_1 + \dots + z_k ll_k, \\ \lambda l &= (z_1 l_1 + \dots + z_k l_k)l = z_1 l_1 l + \dots + z_k l_k l \end{aligned} \quad (\text{П.16})$$

(результаты различны, т.к. группа \mathcal{L} , вообще говоря, не абелева!).

Тем самым, на S определено действие всех операторов λ' $C(\mathcal{L})$ (см. (П.3)), (как левое, так и правое):

$$\begin{aligned} \lambda'\lambda &= \left(\sum_i z'_i l'_i\right) \left(\sum_j z_j l_j\right), \\ \lambda\lambda' &= \left(\sum_j z_j l_j\right) \left(\sum_i z'_i l'_i\right). \end{aligned} \quad (\text{П.17})$$

Это действие сводится к умножению λ на λ' слева или справа.

Итак, $S = C(\mathcal{L})$ -одно временно векторное пространство, левый $C(\mathcal{L})$ -модуль и правый $C(\mathcal{L})$ -модуль.

Построим теперь тензорное произведение V_0 правого $C(\mathcal{L})$ -модуля $S = C(\mathcal{L})$ на левый $C(\mathcal{L})$ -модуль W :

$$V_0 = C(\mathcal{L}) \otimes_{C(\mathcal{L})} W. \quad (\text{П.18})$$

Индукированное представление. Ясно, что V_0 - векторное пространство, т.к. его элементы можно складывать и умножать на комплексные числа.

Ясно, что каждый вектор v_0 из V_0 есть линейная комбинация векторов вида $l \otimes_{C(\mathcal{L})} w$, где l - элемент группы \mathcal{L} , а w - вектор из W . По правилу отождествления (П.14) имеем

$$l \otimes_{C(\mathcal{L})} w = \varepsilon \cdot l \otimes_{C(\mathcal{L})} w = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} lw = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w_1,$$

где w_1 - другой вектор из W . Линейная комбинация имеет тот же вид (ср. П.7):

$$\sum_k z_k \ell_k \otimes_{C(\mathcal{L})} w = \sum_k z_k \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w_k = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} \sum_k z_k w_k = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w', \quad w' \in W$$

Можно доказать, что такое представление однозначно; тем самым, все элементы пространства V_0 имеют вид $\varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w'$, где $w' \in W$, и соответствие $\varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w' \leftrightarrow w'$ устанавливает изоморфизм между пространствами V_0 и W .

Итак, построение (П.18) дало только другую форму записи того же пространства; будем писать W вместо V_0 и заметим, что на V_0 действует заданное представление ρ группы \mathcal{L} :

$$\ell \cdot (\varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w') = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} \ell w'. \quad (\text{П.19})$$

Теперь пусть задана большая группа \mathfrak{G} , содержащая \mathcal{L} в качестве подгруппы. Построим для \mathfrak{G} групповое кольцо $C(\mathfrak{G})$, состоящее из всех формальных линейных комбинаций элементов \mathfrak{G} , с комплексными коэффициентами (ср. (П.3)):

$$\lambda = z_1 g_1 + \dots + z_k g_k. \quad (\text{П.20})$$

Построим, далее, пространство

$$V = C(\mathfrak{G}) \otimes_{C(\mathcal{L})} W. \quad (\text{П.21})$$

Следует обратить внимание на то обстоятельство, что для элементов V применяется прежнее правило отождествления (П.14), с λ из $C(\mathcal{L})$; иначе и нельзя было сделать, поскольку на W задано лишь представление ρ группы \mathcal{L} , т.е. операторы ℓw , но не операторы $g w$!. Позже мы построим в пространстве V базис и найдем его размерность; теперь же по заданному представлению ρ группы \mathcal{L} в пространстве W мы построим представление $\tilde{\rho}$ группы \mathfrak{G} в пространстве V . Это и будет индуцированное представление. Заметим прежде всего, что представление ρ уже использовано

при самом построении пространства V ; в самом деле, правило отождествления (П.14) предполагает, что уже задано действие операторов ℓ на пространстве W . (Если бы не было этого правила, мы получили бы неинтересную конструкцию, не ведущую в занимающих нас случаях к неприводимым представлениям; см. замечание ниже).

Теперь определим действие элемента g_0 группы \mathcal{G} на векторы пространства V по формуле

$$g_0 (g \otimes_{C(\mathcal{L})} w) = g_0 g \otimes_{C(\mathcal{L})} w. \quad (\text{П.22})$$

Это определение достаточно, поскольку все векторы V суть линейные комбинации векторов вида $g \otimes_{C(\mathcal{L})} w$ (ср. (П.6)). Произведение $g_0 g$ понимается, конечно, в смысле группового умножения в \mathcal{G} . Итак, каждому $g_0 \in \mathcal{G}$ поставлен в соответствие оператор на пространстве V ; ясно, что этим задается представление $\tilde{\rho}$ группы \mathcal{G} в пространстве V . Это и есть искомое индуцированное представление \mathcal{G} .

Так как $C(\mathcal{L}) \subset C(\mathcal{G})$, имеем

$$W = V_0 = C(\mathcal{L}) \otimes_{C(\mathcal{L})} W = C(\mathcal{G}) \otimes_{C(\mathcal{L})} W = V \quad (\text{П.23})$$

и W оказывается подпространством V . Для вектора из W , который можно представить в виде $\varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w$, определение (П.22) дает (ℓ из подгруппы \mathcal{L} !):

$$\ell (\varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w) = \ell \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} w = \varepsilon \ell \otimes_{C(\mathcal{L})} w = \varepsilon \otimes_{C(\mathcal{L})} \ell w. \quad (\text{П.24})$$

Таким образом, если рассматривать индуцированное представление $\tilde{\rho}$ на подгруппе $\mathcal{L} \subset \mathcal{G}$ и применять операторы на подпространстве $W \subset V$, то получается исходное представление ρ .

Замечание. Чтобы лучше понять определение индуцированного представления, посмотрим, что получится, если вместо тензор-

ного произведения (П.21) над кольцом операторов $C(\mathcal{L})$ взять простое кронекерово произведение пространств $C(\mathfrak{G}) \otimes W$. В этом случае можно, конечно, повторить (П.22), но ввиду отсутствия правила отождествления (П.14) полученное представление не будет обращаться в ρ на подгруппе \mathcal{L} и на векторах W . Действительно, $\ell(\epsilon \otimes w) = \ell \otimes w$ и $\epsilon \otimes \ell w$ не совпадают! Далее, чтобы сохранить связь с исходным представлением ρ , можно определить действие \mathcal{L} в правом сомножителе: $\ell(g \otimes w) = g \otimes \ell w$; но такой подход не позволяет расширить представление на всю группу \mathfrak{G} , что является нашей целью. Если, наконец, пожертвовать связью с ρ , то определение $g.(g \otimes w) = g.g \otimes w$ приводит к неинтересному приводимому представлению — W оказывается "вне игры".

Матрицы индуцированного представления. Начнем с построения базиса в пространстве V . Для этого разложим \mathfrak{G} на левые классы смежности по подгруппе \mathcal{L} и фиксируем их представители (ср. (9.2)):

$$g = a_1 \mathcal{L}_1 + \dots + a_n \mathcal{L}_n, \quad \mathcal{L}_i = \mathcal{L}, \quad a_i = \epsilon. \quad (\text{П.25})$$

Тогда любой вектор $v \in V$ записывается в виде

$$v = a_1 \otimes_{C(\mathcal{L})} w_1 + \dots + a_n \otimes_{C(\mathcal{L})} w_n \quad (\text{П.26})$$

(можно доказать, что такое представление однозначно). Если выбрать в W базис e_1^W, \dots, e_s^W , то векторы

$$e_{ij} = a_i \otimes_{C(\mathcal{L})} e_j^W \quad (1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq s) \quad (\text{П.27})$$

составляют базис V . Итак, размерность представления $\tilde{\rho}$ равна ns , т.е. произведению числа классов смежности \mathfrak{G} по \mathcal{L} на размерность исходного представления ρ .

Найдем матрицу $\tilde{D}(a)$, соответствующую в индуцированном представлении произвольному элементу a группы \mathfrak{G} . По определению, на месте (kl) матрицы $\tilde{D}(a)$ (k -ая строка, l -ый столбец) должен стоять k -ый коэффициент в разложении вектора $\mathcal{D}(a)e_l$ по базису e_1, e_2, \dots . Но в нашем случае индексы, нумерующие базис, двойные (т.е. пары (ij)). Матричные элементы $\tilde{D}(a)_{ij; i'j'}$ определяются поэтому из соотношения

$$ae_{i'j'} = \sum_{ij} \tilde{D}(a)_{ij; i'j'} e_{ij}. \quad (\text{П.28})$$

В силу (П.27), (П.22)

$$ae_{i'j'} = aa_{i'} \otimes_{C(x)} e_{j'}^w. \quad (\text{П.29})$$

Чтобы разложить правую часть (П.29) по базису e_{ij} , надо сначала представить ее в виде $\sum a_i \otimes_{C(x)} w_i$. Конечно, нельзя прямо "перебросить" a через $a_{i'}$ (некоммутативность \mathfrak{G} !). Однако, можно найти левый класс смежности, содержащий элемент $aa_{i'}$; пусть его номер будет i_0 . Тогда

$$aa_{i'} = a_{i_0} l_{i_0}, \quad l_{i_0} \in \mathcal{L}, \quad (\text{П.30})$$

откуда

$$ae_{i'j'} = a_{i_0} l_{i_0} \otimes_{C(x)} e_{j'}^w = a_{i_0} \otimes_{C(x)} l_{i_0} e_{j'}^w. \quad (\text{П.31})$$

Обозначим через $\mathcal{D}(l)$ матрицу исходного представления ρ , соответствующую оператору l . Тогда

$$l_{i_0} e_{j'}^w = \sum_j \mathcal{D}(l)_{jj'} e_j^w, \quad (\text{П.32})$$

и (П.31) принимает вид

$$\begin{aligned} ae_{i'j'} &= a_{i_0} \otimes_{C(x)} \sum_j \mathcal{D}(l)_{jj'} e_j^w = \left(\sum_j \mathcal{D}(l)_{jj'} \right) a_{i_0} \otimes_{C(x)} e_{j'}^w = \\ &= \sum_{ij} (\mathcal{D}(l)_{ij} \delta_{ii_0}) e_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{П.33})$$

Индекс i_0 определяется согласно (П.30): это единственный номер $\mu(i')$, при котором

$$a_{\mu(i')}^{-1} a a_{i'} \in \mathcal{L}. \quad (\text{П.34})$$

Теперь строение матрицы $\tilde{D}(a)$ вполне выяснено. Разделим поле этой матрицы на блоки размера $s \times s$ (всего $n \times n$ блоков); условимся ставить элемент $\tilde{D}(a)_{i,j;i',j'}$ на место (j, j') блока (i, i') ($i, i' = 1, \dots, n; j, j' = 1, \dots, s$).

Тогда при заданном i' (номер столбца блоков!)

$\tilde{D}(a)_{i,j;i',j'} \neq 0$ лишь при единственном значении номера строки блоков

$$i = \mu(i'), \quad (\text{П.35})$$

определяемом из (П.34); при этом нулевой блок

$$D_{i,j;i',j'} = D(e_i)_{jj'}, \quad (\text{П.36})$$

т.е. на место этого блока следует поставить матрицу

$$D(e_i) = D(a_i^{-1} a a_{i'}). \quad (\text{П.37})$$

Мы пришли, таким образом, к "правилу индуцирования представлений" § 9. Заметим в заключение, что представление $\tilde{\rho}$ (или \tilde{D} , в "матричном" виде), как правило, приводимо даже в том случае, если $\rho(D)$ неприводимо. Чтобы получить неприводимые представления группы \mathcal{G} , мы должны находиться в специальной ситуации: \mathcal{L} должна быть малой группой, соответствующей некоторой инвариантной подгруппе $H < \mathcal{G}$ и некоторому неприводимому представлению \mathcal{D}_0 группы H , а \mathcal{D} - допустимым относительно \mathcal{D}_0 неприводимым представлением малой группы \mathcal{L} .