§ 6. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

После разбиения точечных групп на классы, можно, следуя гл. 4, построить неприводимые представления этих групп. В частности, введенными в гл. 4 методами можно определить их характеры. Поскольку 32 кристаллографические точечные группы часто встречаются в задачах физики твердого тела, в приложении 1 даны таблицы характеров для 11 собственных точечных групп и групп, изоморфных им. Все остальные группы, как указано выше, можно получить в виде прямых произведений с группами S_1 или S_2. Указанные изоморфизмы и результаты взятия прямых произведений перечислены в табл. 9.2. Все 32 кристаллографические точечные группы приведены в первых трех строках табл. 9.2; оставшиеся две строки содержат другие полезные соотношения. При построении таблицы характеров нам понадобится лишь первая строка табл. 9.2. Первые пять групп в этой строке являются циклическими абелевыми с тривиальными одномерными представлениями (гл. 4, § 8). С неприводимыми представлениями группы D_3 мы уже

Таблица 9.2

Собственная точечная группа $\mathcal{G}$	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6	D_2	D_3	D_4	D_6	T	O
Прямое произведение групп $\mathcal{G}\times S_2$	S_2	C_{2h}	S_6	C_{4h}	C_{6h}	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}	T_h	O_h
Несобственная группа, не содержащая инверсию I и изоморфная группе $\mathcal{G}$		S_1		S_4	C_{3h}	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v} D_{2d}	C_{6v} D_{3h}		T_d
Другая несобственная группа, изоморфная группе $\mathcal{G}$		S_2			S_6	C_{2h}			D_{3d}		
Прямое произведение групп $\mathcal{G}\times S_1$	S_1	C_{2h}	C_{3h}	C_{4h}	C_{6h}	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}		

встречались в гл. 4, § 10. Группа D_2 изоморфна группе $C_{2h}=C_2\times S_2$, а группа D_6 — группе $D_{3h}=D_3\times S_1$ (она может быть записана также в виде $D_6=D_3\times C_2$; см. задачу 2.7). Поэтому единственные таблицы характеров, которые необходимо составлять заново,— это таблицы для групп D_4, T и O.

В пределе при $n\to\infty$ группа C_n стремится к непрерывной группе $\mathcal{R}_2$ (гл. 7, § 3). Аналогичные пределы существуют для групп C_{nv}, C_{nh}, D_n, D_{nh} при $n\to\infty$; они обозначаются через [1]) $C_{\infty v}$, $C_{\infty h}$, D_∞ и $D_{\infty h}$. Группа $C_{\infty v}$ получается из $\mathcal{R}_2$ добавлением любой вертикальной плоскости отражения, что приводит к появлению и всех остальных возможных плоскостей. Нетрудно убедиться в том, что вся бесконечная совокупность отражений в вертикальных плоскостях принадлежит одному и тому же классу. Как и при конечных n, повороты на углы a и $-a$ образуют класс из двух элементов. Соотношение $\sigma_v\mathsf{R}(a)=\mathsf{R}(-a)\sigma_v$, справедливое для любого отражения в вертикальной плоскости, означает, что произведение вращения и отражения в точности равно отражению в плоскости, повернутой на половинный угол:

$$\mathsf{R}(a)\,\sigma_v=\mathsf{R}\left(\frac{1}{2}a\right)\mathsf{R}\left(\frac{1}{2}a\right)\sigma_v=\mathsf{R}\left(\frac{1}{2}a\right)\sigma_v\mathsf{R}\left(-\frac{1}{2}a\right)=\sigma_v'.$$

Это означает также, что отражения и вращения не коммутируют друг с другом и, следовательно, группа $C_{\infty v}$ не является прямым произведением. Но эта группа изоморфна группе O_2 всех двумерных ортогональных матриц, поскольку в базисе, образованном единичными векторами $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ в горизонтальной плоскости, вращениям соответствуют все ортогональные матрицы с определителем $+1$, а отражениям — все ортогональные матрицы с определителем -1. (Заметим, что соотношение между O_2 и $\mathcal{R}_2$ отличается от соотношения между O_3 и $\mathcal{R}_3$, так как в последнем случае имеет место прямое произведение,

---

[1]) Такие группы с осями симметрии бесконечного порядка называются также предельными или группами Пьера Кюри. Полное число таких групп — семь: в дополнение к пяти перечисленным в в тексте существуют еще две шаровые — скалярная (с плоскостью симметрии) и псевдоскалярная (без плоскости симметрии). См. об этом книгу И. С. Желудева, указанную в литературе, стр. 11.— *Прим. ред.*

см. гл. 7, § 4.) Другие группы из упоминавшихся выше просто связаны с $C_{\infty v}$, поскольку $C_{\infty h}=\mathcal{R}_2\times S_2$, группа D_∞ изоморфна группе $C_{\infty v}$, а $D_{\infty h}=C_{\infty h}\times S_2$. Группа $C_{\infty v}$ является группой симметрии линейной молекулы без центра симметрии; если же молекула симметрична относительно средней точки, как в случае двухатомной молекулы с одинаковыми ядрами, то ее группой симметрии является группа $D_{\infty h}$.

Неприводимые представления группы $C_{\infty v}$ можно построить из неприводимых представлений подгруппы $\mathcal{R}_2$. Если $\mathbf{e}_m$ — базисный вектор, принадлежащий представлению $\mathsf{T}^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$ [например, функция $\exp(im\varphi)$], то отражение в вертикальной плоскости преобразует его в вектор $\mathbf{e}_{-m}$, принадлежащий представлению $\mathsf{T}^{(-m)}$. Таким образом, при $m\neq 0$ неприводимые представления группы $C_{\infty v}$ являются двумерными с характером

$$\chi^{(m)}(a)=\exp(ima)+\exp(-ima)=2\cos ma$$

для вращений и характером $\chi^{(m)}=0$ для отражений (в последнем случае отсутствуют диагональные матричные элементы). В особом случае, когда $m=0$, отражение преобразует $\mathbf{e}_0$ в другой вектор $\mathbf{e}_0'$, также соответствующий значению $m=0$. Если $\mathbf{e}_0'$ отличается от $\mathbf{e}_0$ скалярным множителем, то, поскольку $\sigma_v^2=1$, отражение должно иметь характер ± 1. К тому же выводу можно прийти, если $\mathbf{e}_0$ и $\mathbf{e}_0'$ вообще независимы, поскольку в этом случае можно образовать две комбинации $\mathbf{e}_0\pm\mathbf{e}_0'$, которые имеют при отражениях характер ± 1. Итак, при $m=0$ имеется два одномерных неприводимых представления. Эти результаты сведены в табл. 9.3.

Таблица 9.3

$C_{\infty v}$	E	2 R (a)	σ_v
A_+	1	1	1
A_-	1	1	—1
E_m ($m\geqslant 1$)	2	$2\cos ma$	0