§ 7. ДВУЗНАЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

В гл. 7 мы познакомились с двузначными представлениями группы $\mathcal{R}_3$; о них говорилось в гл. 7, § 6, а также в гл. 8, § 4 в связи со спином. Поскольку точечные группы являются подгруппами группы $\mathcal{R}_3$, можно ожидать необходимость двузначных представлений также и для точечных групп. В гл. 7, § 6 мы указали особый прием — интерпретировать двузначные представления как однозначные представления двойных групп в случае группы $\mathcal{R}_3$.

Применим теперь тот же прием для точечных групп. Напомним, что двойная группа состоит из обычных вращений R, дополненных новыми элементами $\bar{\mathsf{E}}\mathsf{R}$, где $\bar{\mathsf{E}}$ — поворот на угол 2π вокруг любой оси. Единичный элемент E связывается теперь с поворотом на угол 4π, так что $\bar{\mathsf{E}}^2=\mathsf{E}$. Новый элемент $\bar{\mathsf{E}}$ коммутирует со всеми вращениями.

Таким образом, если задана точечная группа $\mathcal{G}$ с элементами G_a, то соответствующая точечная группа $\bar{\mathcal{G}}$ строится путем введения новых элементов $\bar{\mathsf{E}}\mathsf{G}_a$, которые в дальнейшем обозначаются через $\bar{\mathsf{G}}_a$. Если группа содержит вращение C_n, то

$$C_n^n=\bar{\mathsf{E}}, \quad C_n^{2n}=\mathsf{E}, \quad \bar{\mathsf{C}}_n=\bar{\mathsf{E}}\mathsf{C}_n.$$

В отличие от группы $\mathcal{R}_3$ методы, использованные в гл. 4 для вывода неприводимых представлений конечных групп, основывались на соотношении (4.1) и потому не приводили ни к каким двузначным представлениям. Используем теперь для их нахождения понятие двойной группы. Двойная группа будет иметь представления двух типов в зависимости от знака в соотношении $\chi(\bar{\mathsf{G}}_a)=\pm\chi(\mathsf{G}_a)$. (Это соотношение можно доказать следующим образом. Поскольку элемент E коммутирует со всеми элементами группы, по лемме Шура он должен быть кратен единичной матрице в любом неприводимом представлении. С учетом того, что $\bar{\mathsf{E}}^2=\mathsf{E}$, соответствующий множитель должен быть равен ±1.) Представления, соответствующие знаку плюс, являются, очевидно, однозначными представлениями группы $\mathcal{G}$, поскольку новый элемент $\bar{\mathsf{E}}$ имеет ту же матрицу, что и единичный элемент. Дву-

значные представления группы $\mathcal{G}$ будут совпадать с теми представлениями группы $\bar{\mathcal{G}}$, для которых в указанном соотношении стоит минус. Для определения числа таких представлений и таблицы их характеров, будем следовать общим методам гл. 4 применительно к группе $\bar{\mathcal{G}}$. Прежде всего необходимо найти число классов, совпадающее с числом неприводимых представлений. Зная таблицу характеров однозначных представлений, мы сможем затем непосредственно достроить и всю остальную таблицу, используя ортогональность и другие методы, согласно изложенному в гл. 4.

Структура классов собственных двойных групп легко выводится из соответствующей структуры исходных точечных групп. Поскольку элемент $\bar{\mathsf{E}}$ коммутирует со всеми элементами, он образует отдельный класс. Каждому классу поворотов на угол $2\pi/n$ ($n\neq 2$) соответствуют два класса поворотов в двойной группе, обозначаемые через C_n и $\bar{\mathsf{C}}_n$. В особом случае поворотов на угол π элементы C_2 и $\bar{\mathsf{E}}\mathsf{C}_2=\bar{\mathsf{C}}_2$ окажутся сопряженными (т. е. принадлежащими одному классу), если ось — двусторонняя, т. е. если имеется элемент группы, меняющий направление оси второго порядка на обратное). В самом деле, вращения $\mathsf{R}(\pm\theta)$ вокруг двусторонней оси являются сопряженными, так что, в частности, сопряженными являются и вращения $\mathsf{R}(\pm\pi)$. Однако в двойной группе эти вращения уже не являются идентичными, но $\mathsf{R}(-\pi)\equiv\mathsf{R}(3\pi)$, так что $\mathsf{R}(\pi)$ — элемент, сопряженный с $\mathsf{R}(3\pi)$. Иными словами, C_2 и $\bar{\mathsf{E}}\mathsf{C}_2$ принадлежат одному классу.

В качестве примера рассмотрим собственную группу $\bar{D}_4$. Группа D_4 состоит из классов E, C_4^2, $2\mathsf{C}_4$, $2\mathsf{C}_2$, $2\mathsf{C}_2'$. Как показано выше, новые элементы $\bar{\mathsf{E}}\mathsf{C}_2$ лежат в том же классе, что и C_2, так что группа $\bar{D}_4$ состоит из классов E, $\bar{\mathsf{E}}$, $2\mathsf{C}_4^2$, $2\mathsf{C}_4$, $2\bar{\mathsf{C}}_4$, $4\mathsf{C}_2$, $4\mathsf{C}_2'$. Добавление двух новых классов означает также добавление еще двух неприводимых представлений, характеры которых удовлетворяют соотношению $\chi(\bar{\mathsf{G}}_a)=-\chi(\mathsf{G}_a)$. Отсюда следует, что для двусторонней оси второго порядка характер должен быть равен нулю. Можно построить и полную таблицу характеров (табл. 9.4), заметив, что мы уже

Таблица 9.4

$\bar{D}_4$	E	$\bar{\mathsf{E}}$	$2\mathsf{C}_4^2$	$2\mathsf{C}_4$	$2\bar{\mathsf{C}}_4$	$4\mathsf{C}_2$	$4\mathsf{C}_2'$
A_1	1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	1	—1	—1
B_1	1	1	1	—1	—1	1	—1
B_2	1	1	1	—1	—1	—1	1
E	2	2	—2	0	0	0	0
$\bar{E}_1$	2	—2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
$\bar{E}_2$	2	—2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

располагаем пятью неприводимыми представлениями одинарной группы D_4, которые образуют также представления двойной группы с $\chi(\bar{\mathsf{G}}_a)=\chi(\mathsf{G}_a)$ и имеют размерности 1, 1, 1, 1 и 2. Если размерность двух новых неприводимых представлений равна s_6 и s_7, то, согласно формуле (4.33),

$$16=1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+s_6^2+s_7^2,$$

так что $8=s_6^2+s_7^2$ и единственное возможное решение дает $s_6=s_7=2$. Отсюда мы сразу получаем характеры E и $\bar{\mathsf{E}}$, и остающиеся значения для $2\mathsf{C}_4$ и $2\bar{\mathsf{C}}_4$ легко находятся из соотношений ортогональности (4.25) и (4.36).

Структуру классов и неприводимые представления двойных несобственных точечных групп можно получить *из соответствующей структуры для собственных*, пользуясь теми же методами, что и в § 4, п. Б и в § 6. Группы, содержащие инверсию, вновь могут быть представлены в виде прямого произведения с группой S_2, а группы, не содержащие инверсии, изоморфны с некоторыми двойными собственными группами. Заметим, что если инверсия имеется, то она коммутирует со всеми элементами группы и, как и ранее, удовлетворяет соотношению $\mathsf{I}^2=\mathsf{E}$, но отражение σ дает теперь

$$\sigma^2=(\mathsf{I}\mathsf{C}_2)^2=\mathsf{E}\mathsf{C}_2^2=\bar{\mathsf{E}},$$

откуда $\sigma^4=\mathsf{E}$.

Полная сводка таблиц характеров для всех кристаллографических двойных точечных групп приведена в приложении 1 (т. 2).

§ 8. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ И МАГНИТНЫЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ

В гл. 5, § 10 был введен оператор обращения времени Υ, который является оператором симметрии для гамильтонианов многих физических систем. В случае кристаллической системы с симметрией относительно обращения времени полная точечная группа симметрии будет представлять собой прямое произведение обычной точечной группы на тождественное преобразование и обращение времени (последнее коммутирует со всеми операциями точечной группы). Заметим, однако, что данное утверждение может быть верным только для немагнитных кристаллов, поскольку оператор Υ меняет на обратное направление токов и спинов, а следовательно, и направление намагниченности в магнитоупорядоченных кристаллах. Тогда магнитные кристаллы должны были бы обладать симметрией только обычной точечной группы. Но это не всегда так, поскольку некоторые магнитные кристаллы могут быть инвариантными относительно произведения операции Υ на некоторое вращение, хотя они не инвариантны относительно операции Υ. Например, в ферромагнитном кристалле с намагниченностью вдоль оси z операция Υ может быть операцией симметрии (здесь R — поворот на угол π вокруг оси x), поскольку R меняет направление намагниченности на противоположное, а Υ восстанавливает исходное положение. Группы симметрии этого типа, содержащие операцию обращения времени лишь в комбинации с вращением или отражением, называются магнитными точечными группами; таких групп существует всего 58 (см. книгу Брэдли и Крекнелла). Эти группы называются также цветными или шубниковскими, так как А. В. Шубников впервые изучал их, рассматривая симметрию правильных твердых многогранников с «цветными» (черными и белыми) гранями. Он