ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРОВ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

Классы обозначают символом типичного элемента (гл. 9, § 1) с поставленным перед ним числом элементов в классе. Операторы вращения и отражения иногда снабжают нижним индексом, указывающим ось вращения или зеркальную плоскость. Ось z всегда направлена вдоль главной оси вращения.

Для неприводимых представлений применяется химическая система обозначений (Маликена). Одномерные представления обозначают буквами A или B: буквой A, если характер операции вращения на наименьший возможный угол (собственного или несобственного) относительно главной оси равен $+1$, и буквой B, если он равен -1. Двумерные представления обозначаются через E, трехмерные — через T и четырехмерные — через U. (Пары комплексно-сопряженных представлений обозначаются тоже символом E, поскольку соответствующие состояния обычно вырождены, см. гл. 5, § 10.) Если в число групповых элементов входит инверсия, верхним индексом плюс или минус указывают четность.

В табл. П.1 даны характеры одиннадцати собственных точечных групп, входящих в первую строку табл. 9.2 (гл. 9, § 6). Изоморфные группы, находящиеся в третьей и четвертой строках табл. 9.2, естественно, имеют такие же характеры; поэтому каждая из таблиц характеров соответствует нескольким наборам символов классов и неприводимых представлений, используемых в изоморфных группах. Таблицы характеров несобственных точечных групп, содержащих операцию инверсии, могут быть получены с использованием табл. 9.2; поэтому они здесь приводятся только в тех случаях, когда соответствующая группа изоморфна одной из собственных точечных групп.

Однако группы, являющиеся прямым произведением, указаны в таблице.

Таблицы характеров двузначных представлений точечных групп представлены в табл. П.2 для одиннадцати двузначных групп, соответствующих первой строке табл. 9.2. Характеры представлений остальных групп можно вывести из соотношений, указанных в табл. 9.2. Для групп $\overline{C}_n$ здесь приведены только характеры элементов с символом без черты; для элементов $\overline{G}_a$ характер равен $-\chi(G_a)$. В остальных таблицах приведены все существующие классы. Для классов применены два обозначения: первое из них — обычно используемое в литературе, а второе мы приводим, чтобы показать, какие именно элементы попадают в каждый из классов. Например, в группе $\overline{D}_4$, рассмотренной в гл. 9, § 7, имеются два класса: $2C_4$ и $2\overline{C}_4$. Но, хотя элемент C_4 находится в первом из них, элемент C_4^3 в этот класс уже не входит, как это было в простой группе, поскольку в данном случае поворот на 2π не является тождественной операцией. Элемент C_4 находится в одном классе с элементом $C_4^{-1} = \overline{E}C_4^3 = \overline{C}_4^3$. Следует также помнить, что двойная группа $\overline{\mathcal{G}}$, кроме того, содержит однозначные представления, характеры которых совпадают с характерами обычной группы $\mathcal{G}$, составленной из элементов G_a, причем $\chi(\overline{G}_a) = \chi(G_a)$.

Таблица П.1

C_1	E
A	1

C_2	S_1	S_2	E	C_2
			E	σ
			E	I
A	A_1	A^+	1	1
B	A_2	A^-	1	—1

Группы S_1 и S_2 часто обозначаются через C_s и C_i.
$C_{2h} \equiv C_2 \times S_2$.

Продолжение

C_3		E	C_3	C_3^2
A		1	1	1
E		1	ε	ε^2
		1	ε^2	ε

$\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$.
$S_6 = C_3 \times S_2$ (также изоморфна группе C_6).
$C_{3h} = C_3 \times S_1$ (также изоморфна группе C_6).

C_4	S_4	E	C_4	C_2	C_4^3
		E	S_4	C_2	S_4^3
A	A	1	1	1	1
B	B	1	-1	1	-1
E	E	1	i	-1	$-i$
		1	$-i$	-1	i

$C_{4h} = C_4 \times S_2$.

C_6	C_{3h}	S_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
			E	S_3	C_3	σ_h	C_3^2	S_3^5
			E	S_6	C_3	I	C_3^2	S_6^5
A	A_1	A	1	1	1	1	1	1
B	A_2	B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	E_1	E_1	1	ε	ε^2	1	ε	ε^2
			1	ε^2	ε	1	ε^2	ε
E_2	E_2	E_2	1	$-\varepsilon^2$	ε	-1	ε^2	$-\varepsilon$
			1	$-\varepsilon$	ε^2	-1	ε	$-\varepsilon^2$

$\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$.
$C_{6h} = C_6 \times S_2$.

Продолжение

D_2	C_{2v}	C_{2h}	E E E	C_{2z} C_2 C_2	C_{2y} σ_y σ_h	C_{2x} σ_x I
A	A_1	A^+	1	1	1	1
B_3	B_1	B^+	1	—1	—1	1
B_1	A_2	A^-	1	1	—1	—1
B_2	B_2	B^-	1	—1	1	—1

$D_{2h}=D_2\times S_2$.

D_3	C_{3v}	E E	$2C_3$ $2C_3$	$3C_2$ $3\sigma_v$
A_1	A_1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	—1
E	E	2	—1	0

$D_{3d}=D_3\times S_2$ (также изоморфна группе D_6).
$D_{3h}=D_3\times S_1$ (также изоморфна группе D_6).

D_4	C_{4v}	D_{2d}	E E E	C_4^2 C_2 C_2	$2C_4$ $2C_4$ $2S_4$	$2C_2$ $2\sigma_v$ $2C_2'$	$2C_2'$ $2\sigma_d$ $2\sigma_d$
A_1	A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	A_2	1	1	1	—1	—1
B_1	B_1	B_1	1	1	—1	1	—1
B_2	B_2	B_2	1	1	—1	—1	1
E	E	E	2	—2	0	0	0

$D_{4h}=D_4\times S_2$.

Продолжение

D_6	C_{6v}	D_{3h}	D_{3d}	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3C_2'$	$3C_2''$
				E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_v$	$3\sigma_v'$
				E	σ_h	$2C_3$	$2S_3$	$3C_2$	$3\sigma_v'$
				E	I	$2C_3$	$2S_6$	$3C_2$	$3\sigma_v$
A_1	A_1	A_1	A_1^+	1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	A_2	A_2^+	1	1	1	1	—1	—1
B_1	B_1	A_3	A_1^-	1	—1	1	—1	1	—1
B_2	B_2	A_4	A_2^-	1	—1	1	—1	—1	1
E_1	E_1	E_1	E^-	2	—2	—1	1	0	0
E_2	E_2	E_2	E^+	2	2	—1	—1	0	0

$D_{6h}=D_6\times S_2$.

T	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
A	1	1	1	1
E	1	1	ε	ε^2
	1	1	ε^2	ε
T	3	—1	0	0

$T_h=T\times S_2$.

O	T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
		E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	—1	—1
E	E	2	—1	2	0	0
T_1	T_1	3	0	—1	—1	1
T_2	T_2	3	0	—1	1	—1

$O_h=O\times S_2$.

Таблица П.2

$\overline{C}_1$	E
$\overline{A}$	1

$\overline{C}_2$	E	C_2
$\overline{A}_1$	1	$-i$
$\overline{A}_2$	1	i

$\overline{C}_3$	E	C_3	C_3^2
$\overline{E}$	1	γ	γ^2
	1	γ^{-1}	γ^{-2}
$\overline{B}$	1	-1	1

$\gamma = \exp(\pi i/3)$.

$\overline{C}_4$	E	C_4	C_2	C_4^3
$\overline{E}_1$	1	δ	i	δ^3
	1	δ^{-1}	$-i$	δ^{-3}
$\overline{E}_2$	1	δ^3	$-i$	δ
	1	δ^{-3}	i	δ^{-1}

$\delta = \exp(\pi i/4)$.

$\overline{C}_6$	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
$\overline{E}_1$	1	ω	ω^2	i	ω^4	ω^5
	1	ω^{-1}	ω^{-2}	$-i$	ω^{-4}	ω^{-5}
$\overline{E}_2$	1	i	-1	$-i$	1	i
	1	$-i$	-1	i	1	$-i$
$\overline{E}_2$	1	ω^5	$-\omega^4$	i	$-\omega^2$	ω
	1	ω^{-5}	$-\omega^{-4}$	$-i$	$-\omega^{-2}$	ω^{-1}

$\omega = \exp(\pi i/6)$.

Продолжение

$\overline{D}_2$	E	$\overline{E}$	$2C_{2z}$	$2C_{2y}$	$2C_{2x}$
	E	$\overline{E}$	C_{2z}, $\overline{C}_{2z}$	C_{2y}, $\overline{C}_{2y}$	C_{2x}, $\overline{C}_{2x}$
$\overline{E}$	2	−2	0	0	0

$\overline{D}_3$	E	$\overline{E}$	$2C_3$	$2\overline{C}_3$	$3C_2$	$3\overline{C}_2$
	E	$\overline{E}$	C_3, $\overline{C}_3^2$	$\overline{C}_3$, C_3^2	$3C_2$	$3\overline{C}_2$
$\overline{E}_1$	1	−1	−1	1	i	$-i$
	1	−1	−1	1	$-i$	i
$\overline{E}_2$	2	−2	1	−1	0	0

$\overline{D}_4$	E	$\overline{E}$	$2C_4^2$	$2C_4$	$2\overline{C}_4$	$4C_2$	$4C_2'$
	E	$\overline{E}$	$C_4^2, \overline{C}_4^2$	$C_4, \overline{C}_4^3$	$\overline{C}_4, C_4^3$	$2C_2, 2\overline{C}_2$	$2C_2', 2\overline{C}_2'$
$\overline{E}_1$	2	−2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
$\overline{E}_2$	2	−2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

$\overline{D}_6$	E	$\overline{E}$	$2C_2$	$2C_3$	$2\overline{C}_3$	$2C_6$	$2\overline{C}_6$	$6C_2'$	$6C_2''$
	E	$\overline{E}$	$C_2, \overline{C}_2$	$C_3, \overline{C}_3^2$	$\overline{C}_3, C_3^2$	$C_6, \overline{C}_6^5$	$\overline{C}_6, C_6^5$	$3C_2', 3\overline{C}_2'$	$3C_2'', 3\overline{C}_2''$
$\overline{E}_1$	2	−2	0	1	−1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
$\overline{E}_2$	2	−2	0	1	−1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
$\overline{E}_3$	2	−2	0	−2	2	0	0	0	0

Продолжение

$\overline{T}$	E	$\overline{E}$	$6C_2$	$4C_3$	$4\overline{C}_3$	$4C_3^2$	$4\overline{C}_3^2$
	E	$\overline{E}$	$3C_2, 3\overline{C}_2$	$4C_3$	$4\overline{C}_3$	$4C_3^2$	$4\overline{C}_3^2$
$\overline{E}$	2	—2	0	1	—1	—1	1
$\overline{U}$	2	—2	0	ε	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε^2
	2	—2	0	ε^2	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε

$\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$.

$\overline{O}$	E	$\overline{E}$	$8C_3$	$8\overline{C}_3$	$6C_4^2$	$3C_4$	$3\overline{C}_4$	$12C_2$
	E	$\overline{E}$	$4C_3, 4\overline{C}_3^2$	$4\overline{C}_3, 4C_3^2$	$3C_4^2, 3\overline{C}_4^2$	$3C_4, 3\overline{C}_4^3$	$3\overline{C}_4, 3C_4^3$	$6C_2, 6\overline{C}_2$
$\overline{E}_1$	2	—2	1	—1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\overline{E}_2$	2	—2	1	—1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
$\overline{U}$	4	—4	—1	1	0	0	0	0

Интернациональные обозначения

Как отмечалось в гл. 9, кроме обозначений Шёнфлиса, которыми мы пользовались в своей книге, существуют также интернациональные обозначения точечных групп. Ось вращения n-го порядка C_n обозначают символом n, а плоскость зеркального отражения — символом m. Наличие плоскости симметрии (σ_h), перпендикулярной оси вращения n-го порядка C_n, выражается символом $\frac{n}{m}$, а наличие плоскости симметрии, в которой лежит ось C_n, — символом nm. Несобственный элемент в общем виде есть произведение инверсии на вращение. Он называется вращением с инверсией и обозначается через $\overline{n} = IC_n$. Зеркальный поворот $S_n = C_n\sigma_h$ (гл. 9) можно выразить через $\overline{n}$, пользуясь соотношением $\sigma_h = C_2 I$. Например,

$$\overline{4} = IC_4 = \sigma_h C_2 C_4 = C_4^{-1}\sigma_h = S_4^{-1}.$$

Полный символ группы в интернациональной системе — это набор неэквивалентных независимых операций, но обычно используют более короткие обозначения. В табл. П.3 приведены как полный, так и короткий символы, если они различаются.

Таблица П.3

Обозначения по Шёнфлису	Полные интернациональные обозначения	Сокращенные интернациональные обозначения	Обозначения по Шёнфлису	Полные интернациональные обозначения	Сокращенные интернациональные обозначения
C_n	n		D_4	422	
S_1, или C_{1h}, или C_s	m		D_6	622	
S_2 или C_i	$\bar{1}$		D_{2h}	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	mmm
S_4	$\bar{4}$		D_{3h}	$\bar{6}m2$	
S_6	$\bar{3}$		D_{4h}	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$4/mmm$
C_{2h}	$\frac{2}{m}$	$2/m$	D_{6h}	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$6/mmm$
C_{3h}	$\bar{6}$		D_{2d}	$\bar{4}2m$	
C_{4h}	$\frac{4}{m}$	$4/m$	D_{3d}	$\bar{3}\frac{2}{m}$	$\bar{3}m$
C_{6h}	$\frac{6}{m}$	$6/m$	T	23	
C_{2v}	$2mm$		T_h	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$m3$
C_{3v}	$3m$		T_d	$\bar{4}3m$	
C_{4v}	$4mm$		O	432	
C_{6v}	$6mm$		O_h	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$m3m$
D_2 или V	222				
D_3	32				