то же для группы $\boldsymbol{B}$, то произведения $\psi_k^{(\beta)}\psi_i^{(\alpha)}$ будут базисом $f_\alpha f_\beta$-мерного представления группы $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$, причем представления неприводимого. Характеры этого представления получаются перемножением соответствующих характеров исходных представлений (ср. вывод формулы (94,21)); элементу $C = AB$ группы $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ соответствует характер

$$\chi(C) = \chi^{(\alpha)}(A)\,\chi^{(\beta)}(B). \tag{94,24}$$

Перемножив, таким образом, друг с другом все неприводимые представления групп $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$, мы получим все неприводимые представления группы $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$.

§ 95. Неприводимые представления точечных групп

Перейдем теперь к конкретному определению неприводимых представлений точечных групп. Огромное большинство молекул обладает лишь осями симметрии второго, третьего, четвертого и шестого порядков. Поэтому мы не будем рассматривать группы икосаэдра $\boldsymbol{Y}$, $\boldsymbol{Y}_h$; группы $\boldsymbol{C}_n$, $\boldsymbol{C}_{nh}$, $\boldsymbol{C}_{nv}$, $\boldsymbol{D}_n$, $\boldsymbol{D}_{nh}$ будем рассматривать лишь со значениями $n = 1, 2, 3, 4, 6$, а группы $\boldsymbol{S}_{2n}$, $\boldsymbol{D}_{nd}$ — с $n = 1, 2, 3$.

Характеры представлений этих групп даны в табл. 7. Изоморфные группы имеют одинаковые представления и приводятся вместе в одной таблице. Числа перед символами элементов группы в первых строках указывают числа элементов в соответствующих классах (см. § 93). В первых столбцах указаны принятые условные обозначения представлений. Одномерные представления обозначаются буквами A, B, двумерные — буквой E, а трехмерные — F (обозначение E для двумерного неприводимого представления не смешивать с обозначением E для единичного элемента группы!) [1]). Функции базисов представлений A симметричны, а функции B — антисимметричны по отношению к поворотам вокруг главной оси n-го порядка. Функции различной симметрии по отношению к отражению σ_h отличаются количеством штрихов (один или два), а индексы g и u указывают на симметрию по отношению к инверсии. Вместе с обозначениями представлений указано буквами x, y, z, по какому представлению преобразуются сами координаты; ось z везде выбрана вдоль главной оси симметрии. Буквы ε и ω обозначают:

$$\varepsilon = e^{2\pi i/3}, \qquad \omega = e^{2\pi i/6} = -\omega^4,$$
$$\varepsilon + \varepsilon^2 = -1, \qquad \omega^2 - \omega = -1.$$

[1]) Причина, по которой два комплексно сопряженных одномерных представления обозначаются как одно двумерное, выяснится в § 96.

Таблица 7

Характеры неприводимых представлений точечных групп

C_i	C_2	C_s	E E E	I C_2 σ
A_g	$A;\ z$	$A';\ x;\ y$	1	1
$A_u;\ x;\ y;\ z$	$B;\ x;\ y$	$A'';\ z$	1	-1

C_3	E	C_3	C_3^2
$A;\ z$	1	1	1
$E;\ x\pm iy$	1	ε	ε^2
	1	ε^2	ε

C_{2h}	C_{2v}	D_2	E E E	C_2 C_2 C_2^z	σ_h σ_v C_2^y	I σ_v' C_2^x
A_g	$A_1;\ z$	A	1	1	1	1
B_g	$B_2;\ y$	$B_3;\ x$	1	-1	-1	1
$A_u;\ z$	A_2	$B_1;\ z$	1	1	-1	-1
$B_u;\ x;\ y$	$B_1;\ x$	$B_2;\ y$	1	-1	1	-1

C_{3v}	D_3	E E	$2C_3$ $2C_3$	$3\sigma_v$ $3U_2$
$A_1;\ z$	A_1	1	1	1
A_2	$A_2;\ z$	1	1	-1
$E;\ x,\ y$	$E;\ x,\ y$	2	-1	0

C_4	S_4	E E	C_4 S_4	C_2 C_2	C_4^3 S_4^3
$A;\ z$	A	1	1	1	1
B	$B;\ z$	1	-1	1	-1
$E;\ x\pm iy$	$E;\ x\pm iy$	1	i	-1	$-i$
		1	$-i$	-1	i

C_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
$A;\ z$	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
$E_2;\ x\pm iy$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω

C_{4v}	D_4	D_{2d}	E E E	C_2 C_2 C_2	$2C_4$ $2C_4$ $2S_4$	$2\sigma_v$ $2U_2$ $2U_2$	$2\sigma_v'$ $2U_2'$ $2\sigma_d$
$A_1;\ z$	A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	$A_2;\ z$	A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	B_1	B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	B_2	$B_2;\ z$	1	1	-1	-1	1
$E;\ x,\ y$	$E;\ x,\ y$	$E;\ x,\ y$	2	-2	0	0	0

Таблица 7 (*продолжение*)

D_6	C_{6v}	D_{3h}	E E E	C_2 C_2 σ_h	$2C_3$ $2C_3$ $2C_3$	$2C_6$ $2C_6$ $2S_3$	$3U_2$ $3\sigma_v$ $3U_2$	$3U'_2$ $3\sigma'_v$ $3\sigma_v$
A_1	A_1; z	A'_1	1	1	1	1	1	1
A_2; z	A_2	A'_2	1	1	1	1	−1	−1
B_1	B_2	A''_1	1	−1	1	−1	1	−1
B_2	B_1	A''_2; z	1	−1	1	−1	−1	1
E_2	E_2	E'; x, y	2	2	−1	−1	0	0
E_1; x, y	E_1; x, y	E''	2	−2	−1	1	0	0

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
F; x, y, z	3	−1	0	0

O	T_d	E E	$8C_3$ $8C_3$	$3C_2$ $3C_2$	$6C_2$ $6\sigma_d$	$6C_4$ $6S_4$
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
F_2	F_2; x, y, z	3	0	−1	1	−1
F_1: x, y, z	F_1	3	0	−1	−1	1

Наиболее просто определение неприводимых представлений для циклических групп (группы C_n, S_n). Циклическая группа, как и всякая абелева группа, имеет лишь одномерные представления. Пусть G — производящий элемент группы (т. е. элемент, возведение которого в последовательные степени дает все элементы группы). Поскольку $G^g = E$ (g — порядок группы), то ясно, что при воздействии оператора $\hat{G}$ на функцию базиса ψ последняя может умножиться только на $\sqrt[g]{1}$, т. е. [1])

$$\hat{G}\psi = e^{2\pi i k/g}\psi, \quad k = 1, 2, \ldots, g.$$

Группа C_{2h} (и изоморфные с ней C_{2v} и D_2) абелева, так что все ее неприводимые представления тоже одномерны, причем характеры могут быть равны только ± 1 (так как квадрат каждого элемента есть E).

Далее, рассмотрим группу C_{3v}. По сравнению с группой C_3 здесь прибавляются отражения σ_v в вертикальных плоскостях (относящиеся все к одному классу). Функция, инвариантная по отношению к повороту вокруг оси (функция базиса представления A группы C_3), может быть симметричной или антисимметрич-

[1]) Для точечной группы C_n в качестве функций ψ можно, например, выбрать функции $\psi = e^{ik\varphi}$ ($k = 1, 2, \ldots, n$), где φ — угол поворота вокруг оси, отсчитываемый от некоторого определенного направления.

ной по отношению к отражениям σ_v. Функции же, умножающиеся при повороте C_3 на ε и ε^2 (функции базисов комплексно сопряженных представлений E), при отражении переходят друг в друга [1]). Из этих рассуждений следует, что группа C_{3v} (и изоморфная с ней D_3) имеет два одномерных и одно двумерное неприводимое представление с характерами, указанными в таблице. В том, что мы действительно нашли все неприводимые представления, можно убедиться, из того, что сумма $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$, т. е. равна порядку группы.

Аналогичными рассуждениями находятся характеры представлений других групп такого типа (C_{4v}, C_{6v}).

Группа T получается из группы $D_2 \equiv V$ добавлением поворотов вокруг четырех наклонных осей третьего порядка. Функция, инвариантная по отношению к преобразованиям группы V (базис представления A), может умножаться при повороте C_3 на 1, ε или ε^2. Функции же базиса трех одномерных представлений B_1, B_2, B_3 группы V при поворотах вокруг осей третьего порядка переходят друг в друга (что видно, если взять, например, в качестве этих функций сами координаты x, y, z). Таким образом, получаем три одномерных и одно трехмерное неприводимое представление ($1^2 + 1^2 + 1^2 + 3^2 = 12$).

Наконец, рассмотрим изоморфные группы O и T_d. Группа T_d получается из группы T добавлением отражений σ_d в плоскостях, каждая из которых проходит через две оси третьего порядка. Функция базиса единичного представления A группы T может быть симметричной или антисимметричной по отношению к этим отражениям (относящимся все к одному классу), что дает два одномерных представления группы T_d. Функции, умножающиеся на ε или ε^2 при повороте вокруг оси третьего порядка (базис комплексно сопряженных представлений E группы T), при отражении в плоскости, проходящей через эту ось, переходят друг в друга, так что получается одно двумерное представление. Наконец, из трех функций базиса представления F группы T одна преобразуется при отражении сама через себя (причем может остаться неизменной или изменить знак), а две другие — переходят друг в друга. Таким образом, получаем всего два одномерных, одно двумерное и два трехмерных представления [2]).

Что касается остальных интересующих нас точечных групп, то их представления можно получить непосредственно из уже выписанных, если заметить, что эти группы являются прямыми

---

[1]) Эти функции можно взять, например, в виде $\psi_1 = e^{i\varphi}, \psi_2 = e^{-i\varphi}$. При отражении в вертикальной плоскости φ меняет знак.

[2]) Упомянем, что неприводимые представления большей размерности (4 и 5) имеются в группах икосаэдра.

произведениями рассмотренных уже групп на группу C_i (или C_s). Именно,

$$C_{3h} = C_3 \times C_s \quad D_{2h} = D_2 \times C_i \quad D_{3d} = D_3 \times C_i \quad O_h = O \times C_i$$
$$C_{4h} = C_4 \times C_i \quad D_{4h} = D_4 \times C_i \quad D_{6h} = D_6 \times C_i$$
$$C_{6h} = C_6 \times C_i \quad S_6 = C_3 \times C_i \quad T_h = T \times C_i$$

Каждое из этих прямых произведений имеет вдвое больше неприводимых представлений, чем исходная группа, причем половина из них симметрична (обозначаются индексом g), а другая половина антисимметрична (индекс u) по отношению к инверсии. Характеры этих представлений получаются из характеров представлений исходной группы умножением на ± 1 (в соответствии с правилом (94,24)). Так, для группы D_{3d} получим представления:

D_{3d}	E	$2C_3$	$3U_2$	I	$2S_6$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	−1	1	1	−1
E_g	2	−1	0	2	−1	0
A_{1u}	1	1	1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	−1	−1	−1	1
E_u	2	−1	0	−2	1	0

§ 96. Неприводимые представления и классификация термов

Квантовомеханические применения теории групп основаны на том, что уравнение Шредингера для физической системы (атома, молекулы) инвариантно по отношению к преобразованиям симметрии этой системы [1]. Из этого обстоятельства непосредственно следует, что после применения элементов группы к функции, удовлетворяющей уравнению Шредингера при некотором значении энергии (собственное значение), должны снова получаться решения того же уравнения с тем же значением энергии. Другими словами, при преобразовании симметрии волновые функции стационарных состояний системы, относящихся к одному и тому же уровню энергии, преобразуются друг через друга, т. е. осуществляют некоторое представление группы. Существенно, что это представление неприводимо. Действительно, функции,

[1] Методы теории групп были впервые введены в квантовую механику *Вигнером* (*E. P. Wigner*, 1926).