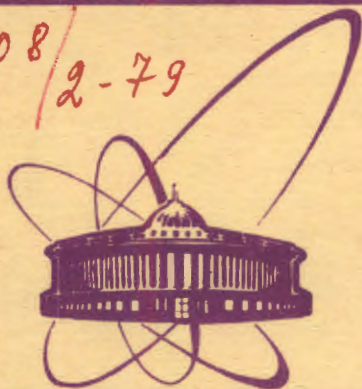


УЧОБ/2-79



объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

---

M-91

5/11-79

P5 - 12459

Р.М.Мурадян

О ДИСКРЕТНЫХ ПОДГРУППАХ  
ТРЕХМЕРНОЙ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

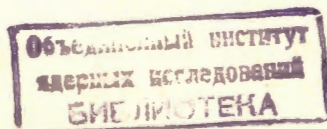
1979

P5 - 12459

Р.М.Мурадян

О ДИСКРЕТНЫХ ПОДГРУППАХ  
ТРЕХМЕРНОЙ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

Направлено в ТМФ



Мурадян Р.М.

P5 - 12459

О дискретных подгруппах трехмерной группы вращений

Предложен прямой и единый метод построения неприводимых представлений для всех дискретных подгрупп трехмерной группы вращений. В качестве примеров приложения метода рассмотрены группы треугольника, тетраэдра и октаэдра.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Muradian R.M.

P5 - 12459

On the Discrete Subgroups of the Three Dimensional Rotation Group

A direct and unique method for constructing irreducible representations for all discrete subgroups of the three dimensional rotation group is suggested. The application of this method is exemplified by the groups of triangle, tetrahedron and octahedron.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Дискретные подгруппы группы вращений уже много лет находят применение в физике твердого тела, а также в ядерной физике и в физике элементарных частиц. С помощью теории дискретных групп были получены нетривиальные результаты в различных областях физики, таких как теория кристаллического поля Бете<sup>/1/</sup>, в старой<sup>/2/</sup> и новой<sup>/3/</sup> кристаллической  $\alpha$ -частичной модели атомного ядра и при классификации элементарных частиц<sup>/4-6/</sup>. Следует ожидать, что и в будущем применение дискретных групп может привести к новым и важным результатам. Поэтому, хотя теория дискретных подгрупп группы вращений хорошо разработана и изложена, например, в книгах<sup>/1,7-11/</sup>, представляется целесообразным предложить новый метод построения представлений этих групп. Этот метод использует лишь минимум понятий из абстрактной теории групп и опирается на более привычные для физиков сведения о представлениях группы вращений<sup>/12/</sup>. Наряду с математической элегантностью, этот метод обладает простотой и наглядностью, что позволяет дать ясную геометрическую интерпретацию всем операциям группы симметрии. Как будет видно ниже, новый метод, по существу, основан на возможности извлечения корня  $n$ -ой степени из единичной матрицы, в "определенном направлении".

## 2. ТРЕХМЕРНЫЕ ВРАЩЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ

В настоящем параграфе приведены некоторые формулы, описывающие трехмерные вращения и отражения, достаточные для построения представлений всех дискретных подгрупп группы вращений.

**Чистые вращения.** Согласно известной теореме Эйлера /см., например, <sup>12/</sup> /, произвольное вращение с фиксированным началом координат может быть описано с помощью одного поворота на угол  $\omega$  вокруг определенной фиксированной оси  $\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ , проходящей через начало отсчета. Рассмотрим произвольный вектор  $\vec{r}$ . При повороте системы координат на угол  $\omega$  вокруг единичного вектора  $\vec{n}$  вектор  $\vec{r}$ , по теореме Эйлера, преобразуется в  $\vec{r}'$  согласно:

$$\vec{r}' = \vec{r} \cos \omega + (1 - \cos \omega) \vec{n} (\vec{n} \vec{r}) + [\vec{n} \times \vec{r}] \sin \omega. \quad /1/$$

Если представить векторы  $\vec{r}$  и  $\vec{r}'$  в виде столбцов

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix},$$

то легко видеть, что матричные элементы 3x3 матрицы поворота в /1/ можно записать в виде:

$$\cos \omega \delta_{ik} + (1 - \cos \omega) n_i n_k - \sin \omega \epsilon_{ikl} n_l \quad (i, k, l = x, y, z). \quad /2/$$

Преобразование Эйлера /1/ может быть представлено также двумя различными способами с помощью квантовомеханических операторов спина 1 и 1/2. Действительно, с помощью декартовых компонент оператора спина 1

$$\vec{s} = \{s_x, s_y, s_z\} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\} \quad /3/$$

матрица поворота /2/ может быть записана в следующей экспоненциальной форме, если учесть, что  $(\vec{s} \vec{n})^3 = \vec{s} \vec{n}$ :

$$e^{-i\omega \vec{s} \vec{n}} = 1 - (1 - \cos \omega) (\vec{s} \vec{n})^2 - i \sin \omega \vec{s} \vec{n}. \quad /4/$$

Воспользовавшись следующими равенствами

$$\vec{s} \vec{n} = i \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (\vec{s} \vec{n})^2 = - \begin{pmatrix} n_x^2 - 1 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & n_y^2 - 1 & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & n_z^2 - 1 \end{pmatrix} \quad /5/$$

можно переписать соотношение /4/ в виде, совпадающем с формулой /2/:

$$e^{-i\omega \vec{s} \vec{n}} = \cos \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1 - \cos \omega) \begin{pmatrix} n_x^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & n_y^2 & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & n_z^2 \end{pmatrix} + \sin \omega \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}. \quad /6/$$

С другой стороны, преобразование /1/ может быть получено также с помощью матриц Паули — операторов спина 1/2:

$$\vec{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}. \quad /7/$$

Для этого необходимо векторам  $\vec{r}$  и  $\vec{r}'$  поставить в соответствие матрицы

$$\vec{\sigma} \vec{r} = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} \vec{r}' = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix}$$

и подействовать оператором поворота

$$e^{-i\frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \vec{n}} = \cos \frac{\omega}{2} - i \sin \frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \vec{n} = \cos \frac{\omega}{2} - i \sin \frac{\omega}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} \quad /8/$$

следующим образом:

$$\vec{\sigma} \vec{r}' = e^{-i \frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \vec{n}} (\vec{\sigma} \vec{r}) e^{i \frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \vec{n}} \quad /9/$$

Используя тождество Дирака  $(\vec{\sigma} \vec{a})(\vec{\sigma} \vec{b}) = \vec{a} \vec{b} + i \vec{\sigma} [\vec{a} \times \vec{b}]$ , можно показать, что преобразование /9/ также приводит к формуле Эйлера /1/:

$$\vec{\sigma} \vec{r}' = \vec{\sigma} (\vec{r} \cos \omega + (1 - \cos \omega) \vec{n} (\vec{n} \vec{r}) + \sin \omega [\vec{n} \times \vec{r}]). \quad /10/$$

Очевидно, что вращения на углы  $\omega$  и  $\omega + 2\pi$  физически эквивалентны, однако соответствуют различным матрицам  $\pm e^{-i \frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \vec{n}}$ .

так что оператор вращения /8/, в отличие от /6/, соответствует двухзначному /спинорному/ неприводимому представлению группы вращений.

Формулы /6/ и /8/ позволяют извлекать корень  $n$ -ой степени соответственно из трехмерной и двумерной единичной матрицы, что будет использовано ниже при построении неприводимых представлений дискретных подгрупп группы вращений.

**Зеркальные отражения.** Зеркальное отражение в произвольной плоскости, проходящей через начало координат и характеризующееся нормалью  $\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ , может быть представлено как результат двух операций: вращения на угол  $\pi$  вокруг оси  $\vec{n}$  и инверсии  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ . При этом, как видно из /1/, вектор  $\vec{r}$  переходит в  $\vec{r}''$  по закону:

$$\vec{r}'' = \vec{r} - 2\vec{n}(\vec{n} \vec{r}). \quad /11/$$

Отсюда видно, что матричные элементы соответствующей матрицы преобразования имеют вид:

$$\delta_{ik} - 2n_i n_k \quad /12/$$

В точности та же самая матрица преобразования может быть получена из /6/, если положить там  $\omega = \pi$  и применить операцию инверсии

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} e^{-i\pi \vec{\sigma} \vec{n}} = \begin{pmatrix} 1 - 2n_x^2 & -2n_x n_y & -2n_x n_z \\ -2n_y n_x & 1 - 2n_y^2 & -2n_y n_z \\ -2n_z n_x & -2n_z n_y & 1 - 2n_z^2 \end{pmatrix} \quad /13/$$

**Извлечение корня  $n$ -ой степени из единичной матрицы.** Как будет показано ниже, с помощью формул /6/, /8/ и /13/ прямым и довольно изящным методом могут быть построены матричные представления всех без исключения дискретных подгрупп группы трехмерных вращений. Основная математическая операция при этом, по существу, заключается в извлечении корня  $n$ -ой степени из единичной матрицы в определенном направлении  $\{n_x, n_y, n_z\}$ , соответствующем конкретному преобразованию симметрии.

В случае единичной 3x3 матрицы общая формула, вытекающая из /5/, имеет вид ( $n=1, 2, \dots; k=0, 1, 2, \dots, n-1$ ):

$$\begin{aligned} \sqrt[n]{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} &= \exp\left(-\frac{2k\pi i}{n} \vec{\sigma} \vec{n}\right) = \\ &= \cos \frac{2k\pi}{n} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1 - \cos \frac{2k\pi}{n}) \begin{pmatrix} n_x^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & n_y^2 & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & n_z^2 \end{pmatrix} + \\ &+ \sin \frac{2k\pi}{n} \begin{pmatrix} 0 & -n_z n_y & n_x n_z \\ n_z & 0 & -n_x n_z \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad /14/$$

Для двумерного случая из /8/ следует

$$\sqrt[n]{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} = \exp\left(-\frac{2k\pi i}{n} \vec{\sigma} \vec{n}\right) = \cos \frac{2k\pi}{n} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i \sin \frac{2k\pi}{n} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} \quad /15/$$

и

$$\sqrt[n]{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} = \exp\left[-\frac{(2k+1)\pi i}{n} \vec{\sigma}_n\right] =$$

$$= \cos \frac{(2k+1)\pi}{n} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i \sin \frac{(2k+1)\pi}{n} \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} \quad /16/$$

Формулы /14/, /15/ и /16/ являются естественным обобщением обычной формулы извлечения корня степени  $n$  из единицы:

$$\sqrt[n]{1} = e^{\frac{2k\pi i}{n}} = \cos \frac{2k\pi}{n} + i \sin \frac{2k\pi}{n} \quad /17/$$

Как известно, значения корней из единицы, определяемые равенством /17/, соответствуют неприводимым /одномерным/ представлениям абелевой циклической группы  $C_n$ .

### 3. ГРУППА РАВНОСТОРОННЕГО ТРЕУГОЛЬНИКА

#### $D_3$ И ДВОЙНАЯ ГРУППА $D_3'$

В качестве простой иллюстрации рассмотрим группу симметрии равностороннего треугольника. Из рис. 1 видно, что

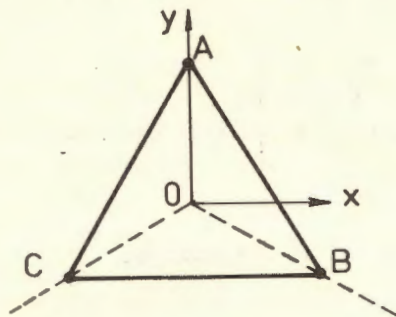


Рис. 1. Операции симметрии равностороннего треугольника. Ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости чертежа.

можно добиться самосовмещения равностороннего треугольника при помощи следующих шести операций чистых вращений.  $E$ : тождественное преобразование /нулевое вращение/;  $2_y$ : вращение на угол  $\pi$  вокруг оси  $OA$ ,  $\vec{n} = \{0, 1, 0\}$ ;  $2_{OB}$ : вращение на угол  $\pi$  вокруг оси  $OB$ ,  $\vec{n} = \{\sqrt{3}/2, -1/2, 0\}$ ;  $2_{OC}$ : вращение на угол  $\pi$  вокруг оси  $OC$ ,  $\vec{n} = \{-\sqrt{3}/2, -1/2, 0\}$ ;  $3_z^{(+)}$ : вращение на угол  $2\pi/3$  вокруг оси  $z$  в положительном направлении /против часовой стрелки/;  $3_z^{(-)}$ : вращение на угол  $4\pi/3$  /или  $-2\pi/3$  / вокруг оси  $z$  в положительном направлении.

Матрицы, соответствующие перечисленным операциям, могут быть легко получены из формулы /14/, с учетом указанных направлений извлечения корня и принимая  $n=2$  для трех осей 2-го порядка  $2_y, 2_{OB}, 2_{OC}$  и  $n=3$  - для двух осей третьего порядка  $3_z^{(\pm)}$ :

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$2_y = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 2_{OB} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 2_{OC} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$3_z^{(+)} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 3_z^{(-)} = \begin{pmatrix} -1/2 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

/18/

Видно, что это трехмерное представление является приводимым и распадается на сумму одномерного ( $A_2$ ) и двухмерного ( $E$ )



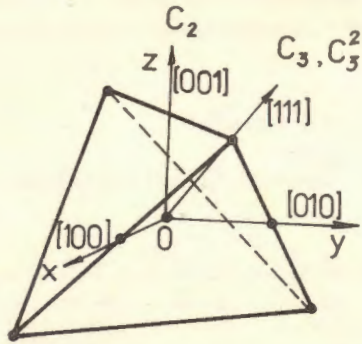


Рис.2. Операции симметрии правильного тетраэдра. Оси третьего порядка  $C_3$  и  $C_3^2$  соединяют вершины тетраэдра с серединами противоположных граней и проходят по диагоналям описанного куба.

$4C_3^2$ : вращения на угол  $\frac{4\pi}{3}$  /или  $-\frac{2\pi}{3}$  / вокруг тех же четырех осей третьего порядка. Извлекая с помощью /14/ соответствующий корень /квадратный или кубический/ в соответствующем направлении, указанном выше, получим явный вид матриц группы Т в трехмерном представлении Т:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$3C_2: 2_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, 2_y = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, 2_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$4C_3: 3_{[111]}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, 3_{[1\bar{1}\bar{1}]}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$4C_3: 3_{[111]}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, 3_{[1\bar{1}\bar{1}]}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

/19/

Группа Т'. Аналогично, с помощью /15/ и /16/ можно получить явный вид 24 матриц спинорного представления двойной тетраэдрической группы Т', приведенных в табл. 3.

Группа Т<sub>d</sub>. Наконец, рассмотрим группу Т<sub>d</sub>, состоящую из всех возможных операций симметрии правильного тетраэдра, включая отражения. Соответствующие 24 преобразования классифицируются по пяти классам:

Е: тождественное преобразование;

$8C_3$ : вращения на  $2\pi/3$  и  $4\pi/3$  /или  $-2\pi/3$  / вокруг четырех осей, с кристаллографическими направлениями  $[111]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ;

$3C_2$ : вращения на  $\pi$  вокруг трех осей  $x, y, z$ ;

$6S_4$ : вращения на  $\pi/2$  и  $3\pi/2$  /или  $-\pi/2$  / вокруг осей  $x, y, z$  и отражения в соответствующих нормальных плоскостях с направляющими косинусами  $\{1, 0, 0\}$ ,  $\{0, 1, 0\}$ ,  $\{0, 0, 1\}$ ;

$6\sigma_d$ : отражения в шести плоскостях, проходящих через центр и одну из шести граней. Соответствующие нормали к этим плоскостям имеют следующие кристаллографические обозначения и направляющие косинусы:

$$[110] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, [\bar{1}\bar{1}0] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, [101] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\},$$

$$[10\bar{1}] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\}, [011] \rightarrow \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\}, [01\bar{1}] \rightarrow \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\}.$$

12 матриц, соответствующих первым трем классам Е,  $8C_3$ ,  $3C_2$ , совпадают с матрицами группы Т, выписанными выше /см. формулы /19//. Остальные 12 матриц могут быть легко выписаны с помощью формул /13/ и /14/. Окончательный результат, соответствующий трехмерному неприводимому представлению Т<sub>2</sub>, приведен в табл. 4.



Таблица 3  
Представление  $E_{1/2}$  двойной тетраэдрической группы  $T'$ .

E	E'	$4C_3$	$4C_3^2$	$4C_3E'$	$3C_2, 3C_2E'$			
$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	угол $\rightarrow \frac{2\pi}{3}$ ось ↓ [111]	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma^* & \omega^* \\ \gamma^* & \gamma \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega^* & \omega^* \\ \gamma^* & \omega \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega & \gamma \\ \omega & \omega^* \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma & \gamma \\ \omega & \gamma^* \end{pmatrix}$	$\pi$ x $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$-\pi$ $\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
		[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma^* & \omega \\ \gamma & \gamma \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega^* & \omega \\ \gamma & \omega \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega & \gamma^* \\ \omega^* & \omega^* \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma & \gamma^* \\ \omega^* & \gamma^* \end{pmatrix}$	y $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
		[1 $\bar{1}\bar{1}$ ]	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma^* & \gamma^* \\ \omega^* & \gamma \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega^* & \gamma^* \\ \omega^* & \omega \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega & \omega \\ \gamma & \omega^* \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma & \omega \\ \gamma & \gamma^* \end{pmatrix}$	z $\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$
		[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma^* & \gamma \\ \omega & \gamma \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega^* & \gamma \\ \omega & \omega \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \omega & \omega^* \\ \gamma^* & \omega^* \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \gamma & \omega^* \\ \gamma^* & \gamma^* \end{pmatrix}$		
$\chi$	2 -2		1 -1	-1 1		0		

$$\gamma \equiv e^{\frac{\pi i}{4}} = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{i}{\sqrt{2}}, \quad \omega \equiv e^{\frac{3\pi i}{4}} = -\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{i}{\sqrt{2}}$$

Таблица 4  
Представление  $T_2(x, y, z)$  группы  $T_d$

E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$				
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	угол $\rightarrow \frac{2\pi}{3}$ ось ↓ [111]	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	x $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	[110]	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	y $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	[1 $\bar{1}\bar{0}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	[111]	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	z $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	[101]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$				[10 $\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
							[011]	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
							[01 $\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\chi$	3	0	-1	-1	1			

## 5. ОКТАЭДРИЧЕСКАЯ ГРУППА O

Октаэдр имеет 6 вершин, 8 треугольных граней и 12 ребер. Оси симметрии проходят через 1/ пару противоположных вершин /3 оси/: 2/ середины противоположащих граней /4 оси/ и 3/ середины противоположащих ребер /6 осей/, /см. рис. 3/.

Октаэдр может быть самосовмещен при помощи 24 чистых поворотов, которые распределяются по 5 классам:

E: тождественное преобразование;

$8C_3$ : вращения на  $\frac{2\pi}{3}$  и  $\frac{4\pi}{3}$  /или  $-\frac{2\pi}{3}$ / вокруг четырех осей  $[111]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ;

$3C_2$ : вращения на  $\pi$  вокруг трех осей x, y, z;

$6C_4$ : вращения на  $\frac{\pi}{2}$  и  $\frac{3\pi}{2}$  /или  $-\frac{\pi}{2}$ / вокруг трех осей x, y, z;

$6C_2'$ : вращения на  $\pi$  вокруг шести осей:

$$[110] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, \quad [1\bar{1}0] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, \quad [101] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\},$$

$$[10\bar{1}] \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\}, \quad [011] \rightarrow \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\}, \quad [01\bar{1}] \rightarrow \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\}$$

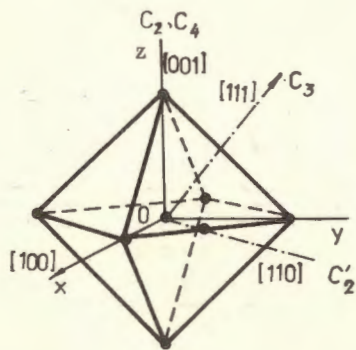


Рис.3. Правильный октаэдр. Одна из четырех осей  $C_3$ , показанная на рисунке, проходит через середины противоположащих граней и имеет направляющие косинусы  $\{1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}\}$ . Одна из шести осей  $C_2'$ , показанная на рисунке, проходит через середину противоположных ребер и имеет направляющие косинусы  $\{1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0\}$ .

С помощью общей формулы /14/ легко могут быть выписаны 24 матрицы, соответствующие перечисленным операциям симметрии. Эти матрицы соответствуют трехмерному неприводимому представлению  $T_1$  группы O и приведены в табл. 5. Матрицы трехмерного представления  $T_2$  группы O совпадают с матрицами представления  $T_2$  тетраэдрической группы  $T_d$ , приведенным в табл. 4, за исключением классификации по классам.

## 6. ГРУППА ИКОСАЭДРА Y

Икосаэдр имеет 12 вершин, 20 треугольных граней и 30 ребер. Оси симметрии проходят через: 1/ пару противоположных вершин /6 осей пятого порядка/, 2/ середины противоположащих граней /10 осей третьего порядка/ и 3/ середины противоположащих ребер /15 осей второго порядка/ / см. рис. 4/.

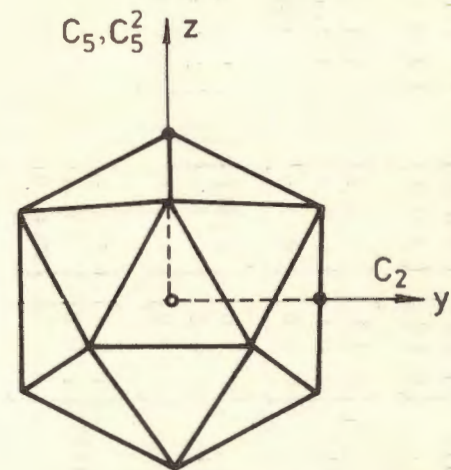


Рис.4. Правильный икосаэдр. Ось z направлена по одной из осей пятого порядка. Ось y, проходящая через середины двух противоположных ребер, является одной из осей второго порядка. Ось x направлена перпендикулярно к плоскости чертежа и является одной из осей третьего порядка.

Таблица 5  
Представление  $T_1: (x, y, z)$  группы октаэдра  $O$

E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2$			
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	угол $\rightarrow$ ось $\downarrow$ [111]	$\frac{2\pi}{3}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{4\pi}{3}$ $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\pi$ $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\frac{\pi}{2}$ $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{3\pi}{2}$ $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\pi$ [110] $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
	[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
	[111]	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	[ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	[111]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\chi$ 3	0	-1	1	-1			

Таблица 6

Представление  $T_1: (x, y, z)$  группы икосаэдра  $Y$ . Приведены по одной матрице из каждого класса.

E	$C_5$	$C_5^2$	$C_3$	$C_2$
E	$5_z \left(\frac{2\pi}{5}\right)$	$5_z \left(\frac{4\pi}{5}\right)$	$3_x \left(\frac{2\pi}{3}\right)$	$2_y$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi}{5} & -\sin \frac{2\pi}{5} & 0 \\ \sin \frac{2\pi}{5} & \cos \frac{2\pi}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos \frac{4\pi}{5} & -\sin \frac{4\pi}{5} & 0 \\ \sin \frac{4\pi}{5} & \cos \frac{4\pi}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{2\pi}{3} & -\sin \frac{2\pi}{3} \\ 0 & \sin \frac{2\pi}{3} & \cos \frac{2\pi}{3} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\chi$ 3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1

$$e^{\frac{2\pi i}{5}} = \frac{1}{4}(\sqrt{5}-1) + \frac{i}{4}\sqrt{10+2\sqrt{5}},$$

$$e^{\frac{4\pi i}{5}} = -\frac{1}{4}(\sqrt{5}+1) + \frac{i}{4}\sqrt{10-2\sqrt{5}}.$$

Икосаздр может быть самосовмещен при помощи 60 операций чистых поворотов, которые распределяются по 5 классам:

Е: тождественное преобразование:

$12C_5$ : вращения на  $\frac{2\pi}{5}$  и  $\frac{8\pi}{5}$  /или-  $\frac{2\pi}{5}$  / вокруг шести осей пятого порядка;

$12C_5^2$ : вращения на  $\frac{4\pi}{5}$  и  $\frac{6\pi}{5}$  /или-  $\frac{4\pi}{5}$  / вокруг шести осей пятого порядка;

$20C_3$ : вращения на  $\frac{2\pi}{3}$  и  $\frac{4\pi}{3}$  /или-  $\frac{2\pi}{3}$  / вокруг 10 осей третьего порядка;

$15C_2$ : вращение на  $\pi$  вокруг 15 осей второго порядка.

Неприводимые представления группы икосаздра более подробно будут рассмотрены в другом месте. Здесь же мы приведем явный вид матриц трехмерного представления, причем лишь по одной матрице из каждого класса. Выбрав направление осей координат согласно рис. 4 и воспользовавшись общей формулой /14/, получим матрицы, выписанные в табл. 6.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные выше примеры показывают, что с помощью прямого и единого метода могут быть построены матрицы неприводимых представлений всех дискретных подгрупп группы трехмерных вращений. В частности, этот общий метод можно применить к любой из 32 кристаллографических групп.

Выражаю благодарность академику Н.Н. Боголобову и профессору В.А. Матвееву за обсуждение.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Watanabe H. *Operator Methods in Ligand Field Theory*, Printice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1966.
2. Wheeler J.A. *Phys.Rev.*, 1937, 52, p. 1083.
3. Robson D. *Nucl.Phys.*, 1978, A308, p. 381.
4. Case K.M., Karplus R., Yang C.N. *Phys.Rev.*, 1956, 101, p. 874.
5. Fairbairn W.M., Fulton T., Klink W.H. *J.Math.Phys.*, 1964, 5, p. 1038.
6. Yamada K. *Phys.Rev.*, 1978, D18, p. 935.
7. Lomont J.S. *Applications of Finite Groups*, Academic Press, New York, 1959.

8. Хамермеш М. *Теория групп*. "Мир", М., 1966.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика*, ГИФМЛ, М., 1963.
10. Coxeter H.S.M., Moser W.O.J. *Generators and Relations for Discrete Groups*, Springer-Verlag, Berlin, 1965.
11. Atkins P.W., Child M.S., Phillips C.G.G. *Tables for Group Theory*, Oxford University Press, 1970.
12. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. *Квантовая теория углового момента*. "Наука", Л., 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел  
15 мая 1979 года.