Точкові групи

Андрій Жугаєвич (http://zhugayevych.me)

28 липня 2022 р.

1 Група обертань . . . 1
2 Представлення групи обертань . . . 2
3 Елементи симетрії точкових груп . . . 3
4 Точкові групи . . . 4
5 Представлення точкових груп . . . 7
6 Кубічна симетрія (група m-3m) . . . 10
7 Симетрія еліпсоїда (група mmm) . . . 11
8 Додаток . . . 12
8.1 Означення теорії груп . . . 12
8.2 Представлення груп . . . 12
8.3 Генерація групи ікосаедра за твірними елементами . . . 13

§1. Група обертань

Відомо, що будь-яке власне ортогональне перетворення тривимірного простору $\boldsymbol{r} \to R\boldsymbol{r}$ є обертанням навколо деякої осі (теорема Ейлера). Конкретніше, поворот на кут α навколо осі $\boldsymbol{n}$, напрямленої вздовж (θ, ϕ) у сферичних координатах, дається матрицею:

$$R(\alpha, \boldsymbol{n}) \equiv R(\alpha, [\theta, \phi]) = R_z(\phi) R_y(\theta) R_z(\alpha) R_y(-\theta) R_z(-\phi),$$

де

$$R_z(\alpha) = R(\alpha, [001]) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad R_y(\theta) = R(\theta, [010]) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

Також використовують представлення обертань через кути Ейлера, які в так званій "y-convention" дають таке:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\gamma) R_y(\beta) R_z(\alpha).$$

Ми розрізнятимемо ці два представлення за аргументами. Очевидно,

$$R^{-1}(\alpha, \boldsymbol{n}) = R(-\alpha, \boldsymbol{n}) \equiv R(-\alpha, [\pi - \theta, \pi + \phi]), \qquad R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = R(-\gamma, -\beta, -\alpha).$$

Оскільки інверсія комутує з обертаннями, то будь-яке ортогональне перетворення взагалі задається матрицею виду $\pm R(\alpha, \theta, \phi)$, де плюс відповідає власним перетворенням, а мінус — невласним. Ортогональні перетворення утворюють групу, яка позначається $SO(3)$ у випадку власних обертань і $O(3) = SO(3) \times I$ в загальному випадку.

Інфінітезимальні оператори групи — це оператори "кутового моменту"

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_z = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

які генерують поворот

$$R(\alpha, \boldsymbol{n}) = \exp\left[-\mathrm{i}\alpha \left(n_x L_x + n_y L_y + n_z L_z\right)\right],$$
$$R_x(\alpha_x) R_y(\alpha_y) R_z(\alpha_z) = \exp(-\mathrm{i}\alpha_x L_x) \exp(-\mathrm{i}\alpha_y L_y) \exp(-\mathrm{i}\alpha_z L_z)$$

і задовольняють комутаційні співвідношення $[L_i, L_j] = \mathrm{i}\, e_{ijk} L_k$.

§2. Представлення групи обертань

Скінченновимірні незвідні представлення власної групи обертань нумеруються орбітальним (квантовим) числом $l \in \mathbb{Z}_+$ і позначаються D^l. Розмірність кожного такого представлення $2l+1$. Майже завжди представлення групи обертань розглядаються у просторі функцій на сфері. Базисом представлення l служать сферичні функції Y_{lm}, $m = -l, \ldots, l$. Інфінітезимальні оператори представляються відомими у квантовій механіці операторами $L_i = -\mathrm{i} \sum_{jk} e_{ijk} x_j \partial_{x_k}$. Представлення елементів симетрії здійснюється унітарними матрицями обертань Вігнера:

$$\mathrm{T}[R(\alpha,\beta,\gamma)] = D^l(\alpha,\beta,\gamma), \quad D^l_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\alpha + \mathrm{i}m'\gamma} d^l_{mm'}(\beta),$$

де $d^l_{mm'}$ – приведені матричні елементи функції Вігнера. Зокрема,

$$D^l_{0m}(\alpha,\beta,\gamma) = (-1)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}(\beta,\gamma),$$

$$d^0 = 1, \qquad d^1(\beta) = \begin{array}{|c|ccc|}\hline m\backslash m' & 1 & 0 & -1 \\ \hline 1 & c^2 & \sqrt{2}cs & s^2 \\ 0 & -\sqrt{2}cs & c^2-s^2 & \sqrt{2}cs \\ -1 & s^2 & -\sqrt{2}cs & c^2 \\ \hline \end{array}$$

$$d^2(\beta) = \begin{array}{|c|ccccc|}\hline m\backslash m' & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \hline 2 & c^4 & 2c^3 s & \sqrt{6}c^2 s^2 & 2cs^3 & s^4 \\ 1 & -2c^3 s & -c^2(4s^2-1) & \sqrt{6}cs(c^2-s^2) & s^2(4c^2-1) & 2cs^3 \\ 0 & \sqrt{6}c^2 s^2 & -\sqrt{6}cs(c^2-s^2) & 1-6c^2 s^2 & \sqrt{6}cs(c^2-s^2) & \sqrt{6}c^2 s^2 \\ -1 & -2cs^3 & s^2(4c^2-1) & -\sqrt{6}cs(c^2-s^2) & -c^2(4s^2-1) & 2c^3 s \\ -2 & s^4 & -2cs^3 & \sqrt{6}c^2 s^2 & -2c^3 s & c^4 \\ \hline \end{array},$$

де $c = \cos\frac{\beta}{2}$, $s = \sin\frac{\beta}{2}$. Сферичні функції перетворюються таким чином:

$$Y_{lm}(R\boldsymbol{r}) = \sum_{m'=-l}^{l} D^l_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) Y_{lm'}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\alpha} \sum_{m'=-l}^{l} d^l_{mm'}(\beta) \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\gamma} Y_{lm'}(\boldsymbol{r})\right].$$

Представлення повної групи $O(3)$ одержуються як для прямого добутку. Група інверсії має лише два одновимірних представлення: парне g і непарне u. В результаті одержимо подвоєння представлень групи $SO(3)$ на D^l_g і D^l_u, або коротко D^l_p, де $p = \pm 1$ – парність представлення.

Слід зауважити, що у просторі функцій на сфері представлення групи інверсії реалізуються парними і непарними функціями. Проте наявність симетрії $SO(3)$ вичерпує можливий запас функцій, оскільки система власних функцій цієї групи повна, а симетрія цих функцій відносно інверсії фіксована: функції Y_{lm} мають парність $(-1)^l$. Тому формально розширюють простір функцій, вводячи поняття скалярних і псевдоскалярних функцій: перші при інверсії перетворюються звичайним чином, як функції перетворених координат ($\theta \to \pi - \theta$, $\phi \to \pi + \phi$), псевдоскаляри ж додатково домножуються на -1. Таким чином, наприклад, базис представлення D^0_g складається зі звичайної Y_{00}, а для представлення D^0_u – умовно псевдоскалярної Y_{00}. Для D^1_g треба брати псевдоскалярні Y_{1m} (аксіальний вектор функцій), а для D^1_u – звичайні.

Представлення D^0_g, D^0_u, $V = D^1_u$ і $A = D^1_g$ називаються відповідно скалярним, псевдоскалярним, векторним і аксіальним.

Класи спряжених елементів групи $SO(3)$ складаються, очевидно, з усіх обертань на однаковий кут повороту α. У групі $O(3)$ вони подвоюються додаванням до кожного обертання інверсії (інверсійний поворот позначається $\bar{\alpha}$). Характери такі:

$$\chi^l_p[\alpha] = \frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\alpha\right]}{\sin\left[\frac{1}{2}\alpha\right]}, \quad \chi^l_p[\bar{\alpha}] = p\chi^l_p[\alpha].$$

Прямий добуток представлень розкладається на незвідні за наступними формулами:

$$D_{p_1}^{l_1} \times D_{p_2}^{l_2} = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} D_{p_1 p_2}^{l}, \qquad \left[D_p^l \times D_p^l\right] = \sum_{k=0}^{l} D_g^{2k}, \quad \left\{D_p^l \times D_p^l\right\} = \sum_{k=1}^{l} D_g^{2k-1},$$

$$Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (-1)^{m_1+m_2} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m_1-m_2 \end{pmatrix} Y_{l, m_1+m_2},$$

де в коефіцієнтах Клебша–Гордона використані 3j-символи Вігнера.

Представлення двовимірної групи власних обертань $SO(2)$ всі одновимірні, оскільки група абелева. Вони нумеруються азимутальним числом $m \in \mathbb{Z}$, операторами представлень є числа $\mathrm{T}[R(\alpha)] = \mathrm{e}^{-im\alpha}$.

§3. Елементи симетрії точкових груп

Виділяють такі елементи симетрії точкових груп (у фігурних дужках вказані міжнародні позначення (Hermann–Mauguin), позначення Шенфліса (Schoenflies) і альтернативні позначення):

- $\{1,\ e\}$ – тотожне перетворення.
- $\{\bar{1}$, -1, $i\}$ – центр симетрії – інверсія.
- $\sigma(\theta, \phi) = -R(\pi, \theta, \phi)$ – площина симетрії – дзеркальне відбиття в площині з нормаллю (θ, ϕ), $\sigma(\theta) \equiv \sigma(\theta, 0)$;
  $\{\cdot$/m, $\sigma_h\}$ – горизонтальна площина симетрії $\sigma(0, 0)$ (перпендикулярна до основної осі);
  $\{\cdot$m, $\sigma_v\}$ – вертикальна площина симетрії $\sigma(\pi/2, \phi)$ (проходить через основну вісь), за умовчанням $\sigma_v = \sigma(\pi/2, 0)$ – відбиття в площині yz.
- $c(\alpha) = R(\alpha, [001]) = R_y(0, 0, \alpha)$ – вертикальна поворотна вісь – поворот на кут α навколо осі z;
  $\{n,\ c_n = c(2\pi/n)\}$ – поворотна вісь n-го порядку.
- $u_2(\theta, \phi) = R(\pi, \theta, \phi) = R_y(\pi - \phi, 2\theta, \phi)$ – похила вісь 2-го порядку;
  $\{\cdot/2,\ u_{2h}\}$ – вісь 2-го порядку, перпендикулярна до основної осі, за умовчанням $u_{2h} = R(\pi, [100])$ – поворот навколо осі x.
- $\{\bar{n}$, -n, $c_{ni} = -c_n\}$ – інверсійно-поворотна вісь – поворот + інверсія.
- $\{\tilde{n},\ s_n = c_n \sigma_h\}$ – дзеркально-поворотна вісь – поворот + відбиття в перпендикулярній площині; зауважимо, що $s(\alpha) = c_i(\alpha - \pi)$, або ж $s_n = c_2 c_{ni}$.

Основу для побудови точкових груп становлять наступні твердження. Як зазначалося вище, будь-який поворот можна одержати комбінацією лише двох елементів $c(\alpha)$ і $u_2(\theta)$, а саме:

$$R(\alpha, [\theta, \phi]) = c(\phi) u_2(\theta/2) c(\alpha) u_2(\theta/2) c(-\phi).$$

Будь-який елемент групи $O(3)$ можна одержати комбінацією лише трьох елементів $c(\alpha)$, $u_2(\theta)$ та інверсії -1, зокрема

$$\sigma(\theta, \phi) = -c(\phi) u_2(\theta/2) c_2 u_2(\theta/2) c(-\phi).$$

Матриці базових елементів симетрії мають такий вигляд:

$$c(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \ u_2(\theta) = \begin{pmatrix} -\cos 2\theta & 0 & \sin 2\theta \\ 0 & -1 & 0 \\ \sin 2\theta & 0 & \cos 2\theta \end{pmatrix}.$$

Існує багато співвідношень між елементами симетрії, зокрема: $c_{1i} = s_2 = -1$, $c_{2i} = s_1 = \sigma_h$, $\sigma_v = -u_{2h}$. Графічно точкові групи зображуються за допомогою стереографічної проекції.

§4. Точкові групи

Точкові групи симетрій тривимірного простору це скінченні (скінченність еквівалентна дискретності) підгрупи групи $O(3)$. Вони діляться на 5 класів, що відповідають п'яти скінченним підгрупам групи $SO(3)$: C_n, D_n, T, O, Y. Твірними елементами точкових груп будуть c_n, $u_2(\theta)$ та i, або їх комбінації. Побудова точкових груп відбувається у два етапи. Спочатку додаванням до тривіальних циклічних груп C_n похилих осей другого порядку одержуємо всі власні точкові групи. Далі, додаючи інверсію, отримуємо всі інші.

Почнемо з власних груп. Забігаючи наперед зауважимо, що кожна власна точкова група взаємно однозначно асоціюється з правильним многогранником або дуальним до нього, для яких вона є групою симетрій. При цьому через вершини фігури проходять осі c_n, через середини ребер – осі u_2, а через центри граней – осі $(c_n u_2)^{-1}$. Орієнтація така, що осі c_n, u_2 і $(c_n u_2)^{-1}$ утворюють праву трійку векторів найменшого об'єму (тобто всі вони прикріплені до одної грані). Для визначеності між многогранником або дуальним до нього вибиратимемо простіші грані.

Перейдемо до самої побудови. Зауважимо, що комбінації самих лише c_n і $u_2(\theta)$ не дають нових твірних елементів — це все одно будуть поворотні осі. Тому власні групи можуть мати лише два базиси твірних елементів: $\{c_n\}$ і $\{c_n, u_2(\theta)\}$. Перша серія — це групи C_n. Для другої θ може приймати лише обмежений набір значень (з умови скінченності породженої групи), що підсумовано в наступній таблиці:

	n	θ	n'	многогранник	дуальний
C_n	n			піраміда	піраміда
D_n	n	$\pi/2$	2	призма (діедр)	біпіраміда
T	3	$\cos 2\theta = -1/3$	3	тетраедр	тетраедр
O	4	$\pi/4$	3	октаедр	куб
Y	5	$\cos 2\theta = 1/\sqrt{5}$	3	ікосаедр	додекаедр

де n' – порядок осі $(c_n u_2)^{-1}$, а для виключних груп $\cos 2\theta = [1/\cos(2\pi/n) - 1]^{-1}$.

Зауважимо, що симетрію октаедра часто називають кубічною симетрією, а групу тетраедра за умовчанням розглядають в цих же кубічних осях. В цьому випадку головні елементи симетрії позначаємо так: c_4 – головна вісь куба [001], u_{2K} – твірна вісь куба і тетраедра другого порядку [101], $u_{3K}{=}(c_4 u_{2K})^{-1}$ – головна вісь тетраедра або ж діагональна вісь куба [111] ($u_{3K} = R_y(\pi/2, \pi/2, 0)$). За твірні елементи вибирають: для групи T $\{u_{3K}, u_{2K}\}$, для групи T_h $\{-u_{3K}, u_{2K}\}$, для групи T_d $\{-c_4, u_{2K}\}$.

Інверсію можна включити наступними способами. Для класу $\{c_n\}$ є лише два нових базиси твірних елементів: $\{-c_n\}$ і $\{c_{2k}, -1\}$, в останньому ми врахували, що $G\{c_{2k+1}, -1\} = G\{-c_{2k+1}\}$[1]. Відповідні групи:

$$G\{-c_n\} = C_{ni},\ G\{c_{2k}, -1\} = C_{2k,h}.$$

Для класу $\{c_n, u_2(\theta)\}$ можливі, очевидно, такі нові базиси: $\{-c_n, u_2(\theta)\}$, $\{c_n, -u_2(\theta)\}$ і $\{c_n, u_2(\theta), -1\}$. В результаті для діедричного класу одержимо такі групи:

$$G\{-c_n, u_{2h}\} = D_{ni},\ G\{c_n, -u_{2h}\} = C_{nv},\ G\{c_{2k}, u_{2h}, -1\} = D_{2k,h},$$

при цьому $G\{c_{2k+1}, u_{2h}, -1\} = G\{-c_{2k+1}, u_{2h}\}$. Для виключних класів одержимо:

$$\begin{aligned} G\{-c_3, u_{2T}\} &= G\{c_3, u_{2T}, -1\} = T_h,\ G\{c_3, -u_{2T}\} = T_d, \\ G\{-c_4, u_{2K}\} &= G\{c_4, -u_{2K}\} = G\{c_4, u_{2K}, -1\} = O_h, \\ G\{-c_5, u_{2Y}\} &= G\{c_5, u_{2Y}, -1\} = Y_h \sim G\{c_5, -u_{2Y}\}. \end{aligned}$$

Цим вичерпуються всі можливі точкові групи, див. рис. 1 і табл. 1.

З точки зору абстрактної теорії груп деякі точкові групи ізоморфні, що видно з аналізу твірних елементів (табл. 1). З точністю до ізоморфізму є лише точкові групи C_n, D_n, T, O, Y, а також їх прямі добутки з C_2 при парних n. Остання умова випливає з таких ізоморфізмів: $C_2 \times C_{2k+1} \sim C_{4k+2}$, $C_2 \times D_{2k+1} \sim D_{4k+2}$. Всі інші точкові групи зводяться до них, як вказано в табл. 1.

[1] $G\{a, b, \ldots\}$ – група породжена нескінченною ітерацією застосування операцій множення і взяття оберненого елемента, починаючи з твірних елементів

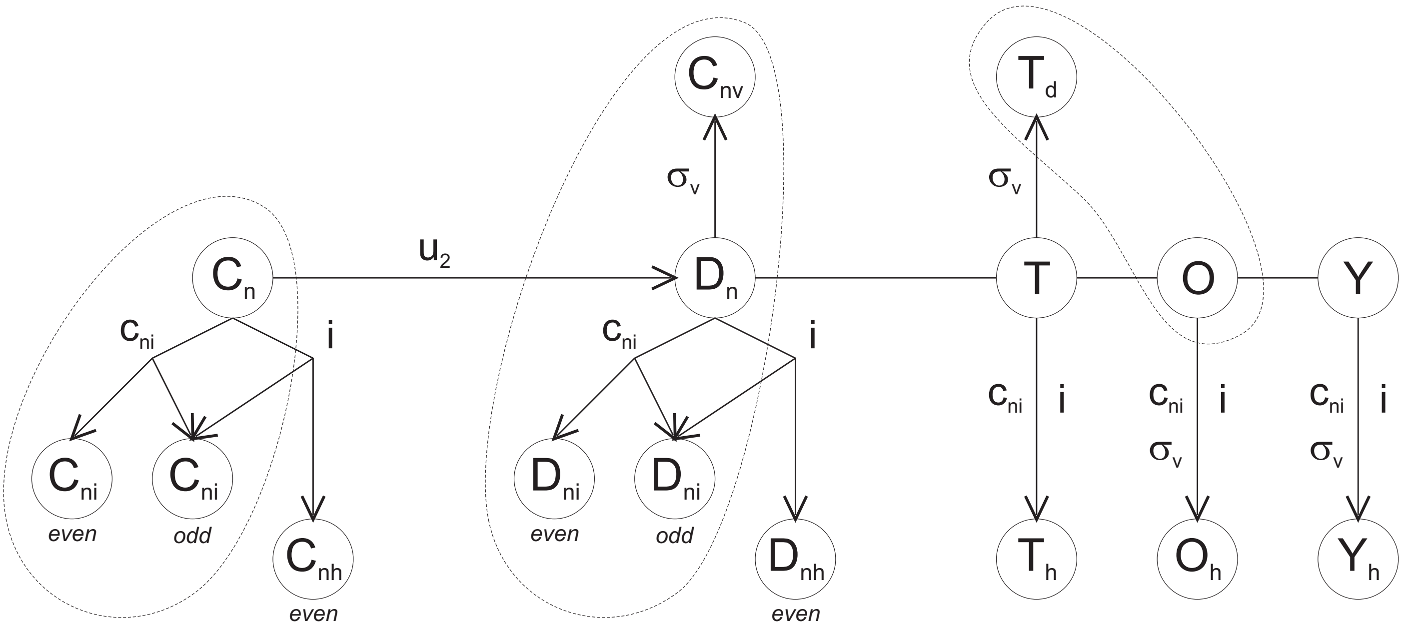

Рис. 1: Ієрархія точкових груп (ізоморфні групи об'єднані)

group		ord	a	b	c	$(ab)^{-1}$	generators	isomorphisms
C_n		n	c_n				$1 = a^n =$	
C_{ni}	$2k$	n	c_{ni}				$1 = a^n =$	$\sim C_{2k}$
	$2k{+}1$	$2n$	c_{ni}				$1 = a^{2n} =$	$\sim C_{4k+2}$
C_{nh}	$2k$	$2n$	c_n		i		$1 = a^n =$	$= c^2, ac = ca$
D_n		$2n$	c_n	u_{2h}		u'_{2h}	$1 = a^n = b^2 = (ab)^2$	
D_{ni}	$2k$	$2n$	c_{ni}	u_{2h}		σ'_v	$1 = a^n = b^2 = (ab)^2$	$\sim D_{2k}$
	$2k{+}1$	$4n$	c_{ni}	u_{2h}		σ'_v	$1 = a^{2n} = b^2 = (ab)^2$	$\sim D_{4k+2}$
D_{nh}	$2k$	$4n$	c_n	u_{2h}	i	u'_{2h}	$1 = a^n = b^2 = (ab)^2$	$= c^2, ac = ca, bc = cb$
C_{nv}		$2n$	c_n	σ_v		σ'_v	$1 = a^n = b^2 = (ab)^2$	$\sim D_n$
T		12	c_3	u_{2T}		c'_3	$1 = a^3 = b^2 = (ab)^3$	
T_h		24	c_{3i}	u_{2T}		c'_{3i}	$1 = a^6 = b^2 = (ab)^6$	
T_d		24	c_3	σ_{vT}		c'_{4i}	$1 = a^3 = b^2 = (ab)^4$	$\sim O$
O		24	c_4	u_{2K}		u_{3K}	$1 = a^4 = b^2 = (ab)^3$	
O_h		48	c_{4i}	u_{2K}		u_{3iK}	$1 = a^4 = b^2 = (ab)^6$	
Y		60	c_5	u_{2Y}		u_{3Y}	$1 = a^5 = b^2 = (ab)^3$	
Y_h		120	c_{5i}	u_{2Y}		u_{3iY}	$1 = a^{10} = b^2 = (ab)^6$	

Табл. 1: Точкові групи згруповані за класами. Для виключних груп співвідношення між твірними елементами не визначальні.

G	ord	a	b	c	$(ab)^{-1}$	polyhedron
C_n	n	c_n				proper pyramid
C_{nd}	$2n$	s_{2n}				pseudoantiprism
C_{nh}	$2n$	c_n		σ_h		pseudoprism
C_{nv}	$2n$	c_n	σ_v		σ'_v	pyramid
D_n	$2n$	c_n	u_{2h}		u'_{2h}	proper prism
D_{nd}	$4n$	s_{2n}	u_{2h}		σ'_v	antiprism
D_{nh}	$4n$	c_n	u_{2h}	σ_h	u'_{2h}	prism
T	12	c_3	u_{2T}		c'_3	proper tetrahedron
T_h	24	s_6	u_{2T}		s'_6	pseudocube
T_d	24	c_3	σ_{vT}		s'_4	tetrahedron
O	24	c_4	u_{2K}		u_{3K}	proper cube
O_h	48	s_4	u_{2K}		s'_6	cube
Y	60	c_5	u_{2Y}		u_{3Y}	proper icosahedron
Y_h	120	s_{10}	u_{2Y}		s'_6	icosahedron

Табл. 2: Альтернативний вибір точкових груп.

Scho	C_n	C_{ni}	C_{nh}	D_n	D_{nd}	D_{nh}	C_{nv}	E_n	E_{nh}	E_{nv}	
H-M odd	n	-n		n2	-nm	-(2n)m2	nm				
H-M even	n	-n	n/m	n22	-(2n)2m	n/mmm	$n$mm				
1	1	-1	m	(2)	(2/m)	(2/m)	(m)				
2	2	(m)	2/m	222	-42m	mmm	mm2				
3	3	-3	-6	32	-3m	-62m	3m	23	m-3	-43m	T
4	4	-4	4/m	422	-82m	4/mmm	4mm	432	m-3m		O
5	5	-5	-10	52	-5m	-102m	5m	25	m-5		Y
6	6	(-6)	6/m	622	-122m	6/mmm	6mm				
...	...	...	...	...	...	...	...				
∞	∞	∞/m	∞/m	∞2	∞/mm	∞/mm	∞mm	∞∞	∞∞m	∞∞m	

Табл. 3: Відповідність між Schoenflies і short Hermann–Mauguin позначеннями точкових груп (в дужках – дублікати).

Іноді вводять альтернативні позначення точкових груп, що базуються на заміні інверсії, як твірного елемента, на σ_h. При цьому інверсійні осі замінюють дзеркально-поворотними. Табл. 1 переходить в табл. 2. Нові групи зводяться до "старих" за такими співвідношеннями:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{2k+1,h} = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{4k+2,i}, \quad \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{2k+1,d} = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{2k+1,i}, \quad \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{2k,d} = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}_{4k,i}.$$

З точки зору теорії груп такий вибір менш вдалий, оскільки, наприклад, співвідношення між твірними елементами "псуються". Проте він зручний для геометричних міркувань, оскільки кожна така точкова група є групою симетрій декорованого правильного многогранника. Декоровані фігури одержуються зі звичайних заміною звичайних вершин на "додатні" та "від'ємні", які переходять одні в других при невласних перетвореннях. Зокрема, власні фігури складаються лише з вершин одного знаку, псевдопризма і псевдоантипризма мають на верхніх і нижніх гранях відповідно додатні і від'ємні вершини, псевдокуб складається із зчеплених в куб додатнього і від'ємного тетраедрів.

Також використовуються групи $S_n = G\{s_n\}$, які зводяться за такою схемою: $S_{2k+1} = C_{4k+2,i}$, $S_{4k} = C_{4k,i}$, $S_{4k+2} = C_{2k+1,i}$, проте доцільність їх використання сумнівна.

Міжнародні позначення точкових груп наведені в табл. 3.

Є багато групових співвідношень між точковими групами. Прямі добутки:

$$C_{nh} = \Sigma_h \times C_n, \quad C_{2k,h} = I \times C_{2k}, \quad C_{2k+1,i} = I \times C_{2k+1},$$
$$D_{nh} = \Sigma_h \times D_n, \quad D_{2k,h} = I \times D_{2k}, \quad D_{2k+1,i} = I \times D_{2k+1},$$
$$E_h = I \times E, \quad O_h = I \times T_d.$$

Напівпрямі добутки:

$$D_n = U_{2h} \ltimes C_n, \quad C_{nv} = \Sigma_v \ltimes C_n, \quad D_{nd} = \Sigma_v\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2n}\right) \ltimes D_n,$$
$$T = U_{3K} \ltimes D_2, \quad T_d = U_{3vK} \ltimes D_2, \quad O = U_{2K} \ltimes T,$$

де U_2, U_3 і U_{3v} – "повернуті" групи C_2, C_3 і C_{3v}, відповідно. Про C_{nd} можна сказати лише, що C_n – її інваріантна підгрупа. Серію співвідношень можна отримати, враховуючи довільність положення групи I в прямих і напівпрямих добутках. Максимальні підгрупи Y_h: T_h, D_{5d}, D_{2h}.

Є також 7 груп граничної симетрії (див. також табл. 3):

C_∞	∞	власний конус
$C_{\infty i} = C_{\infty h}$	∞/m	псевдоциліндр
D_∞	∞2	власний циліндр
$D_{\infty i} = D_{\infty h}$	∞/mm	циліндр
$C_{\infty v}$	∞mm	конус
E_∞	$\infty\infty$	власна сфера
$E_{\infty h} = E_{\infty v}$	$\infty\infty$m	сфера

У двовимірному просторі є всього два типи точкових груп: C_n і D_n, які належать до одного класу C_n.

§5. Представлення точкових груп

Загальноприйняті позначення для представлень такі: буквами A і B позначаються одновимірні представлення, відповідно симетричні чи антисиметричні відносно повороту c_n навколо головної осі; один чи два штрихи означають симетрію або антисиметрію відносно відбиття σ_h; багатовимірні представлення, починаючи з двох вимірів, позначають буквами E, F (або T), G, H; індекси g і u позначають парне і непарне представлення відносно інверсії, індекси 1 і 2 позначають симетричне і антисиметричне представлення повороту u_2 або відбиття σ_v (або ж просто нумерують представлення).

Оскільки представлення ізоморфних груп однакові, достатньо розглянути лише неізоморфні групи. Крім того, незвідні представлення прямого добутку $\{e, i\} \times G$ отримуються подвоєнням представлень групи G на симетричні і антисиметричні, використовуючи формулу $T(ig) = \pm T(g)$. Якщо через R позначити стовпчик незвідних представлень групи G, а через M – таблицю їх характерів, то характери представлень прямого добутку можна подати як

	G	$i \cdot G$
R_g	M	M
R_u	M	$-M$

Тому для прямих добутків з групою інверсії далі ми будемо вказувати лише правильний порядок нових класів, що з'являються.

Почнемо з класу C_n. Незвідні представлення циклічних груп всі одновимірні і задаються як $\mathrm{T}[c_n^l] = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi ml/n}$. Всього їх n. У фізиці комплексно спряжені одновимірні представлення вважають дійсними двовимірними. Тому маємо таку таблицю характерів: при $n = 2k + 1$

C_n	e	c_n	c_n^{-1}	$\dots$	c_n^l	c_n^{-l}	$\dots c_n^{-k}$
A	1	1	1	$\dots$	1	1	$\dots$
E_1	1	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/\mathrm{n}}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/n}$	$\dots$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\dots$
	1	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/n}$	$\dots$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\dots$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
E_m	1	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\dots$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\dots$
	1	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\dots$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\dots$
$\dots E_k$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
C_{ni}	i	c_{ni}	c_{ni}^{-1}	$\dots$	ic_n^l	ic_n^{-l}	$\dots ic_n^{-k}$

C_1		e	
	C_i	e	$\mathbf{i}$
	C_s	e	$\sigma_\mathbf{h}$
	C_2	e	$\mathbf{c_2}$
A	A_g A' A	1	1
	A_u A'' B	1	-1
	C_{2h}	$\mathbf{i}$	σ_h

C_{4i}^{2d}	e	c_2	$\mathbf{c_{4i}}$	c_{4i}^{-1}
C_4	e	c_2	$\mathbf{c_4}$	c_4^{-1}
A	1	1	1	1
B	1	1	-1	-1
E	1	-1	i	$-\mathrm{i}$
	1	-1	$-\mathrm{i}$	i
C_{4h}	$\mathbf{i}$	σ_h	c_{4i}	c_{4i}^{-1}

C_3		e	$\mathbf{c_3}$	c_3^{-1}			
	C_{3i}^{3d}	e	c_3	c_3^{-1}	i	$\mathbf{c_{3i}}$	c_{3i}^{-1}
	C_{6i}^{3h}	e	c_3	c_3^{-1}	σ_h	$\mathbf{c_{6i}}$	c_{6i}^{-1}
	C_6	e	c_3^{-1}	c_3	c_2	$\mathbf{c_6}$	c_6^{-1}
A	A_g A' A	1	1	1	1	1	1
E	E_g E' E_2	1	q	q^2	1	q	q^2
		1	q^2	q	1	q^2	q
	A_u A'' B	1	1	1	-1	-1	-1
	E_u E'' E_1	1	q	q^2	-1	$-q$	$-q^2$
		1	q^2	q	-1	$-q^2$	$-q$
	C_{6h}	$\mathbf{i}$	c_{3i}^{-1}	c_{3i}	σ_h	c_{6i}	c_{6i}^{-1}

C_2		e	$\mathbf{c_2}$		
	C_{2h}	e	$\mathbf{c_2}$	$\mathbf{i}$	σ_h
	C_{2v}	e	$\mathbf{c_2}$	$\sigma_\mathbf{v}$	σ'_v
	D_2	e	$\mathbf{c_2}$	$\mathbf{u_2}$	u'_2
A	A_g A_1 A	1	1	1	1
B	B_g B_1 B_2	1	-1	1	-1
	A_u A_2 B_3	1	1	-1	-1
	B_u B_2 B_1	1	-1	-1	1
	D_{2h}	$\mathbf{i}$	σ_h	σ_v	σ'_v

C_{4v}	e	c_2	$2\mathbf{c_4}$	$2\sigma_\mathbf{v}$	$2\sigma'_v$
D_{4i}^{2d}	e	c_2	$2\mathbf{c_{4i}}$	$2\mathbf{u_2}$	$2\sigma'_v$
D_4	e	c_2	$2\mathbf{c_4}$	$2\mathbf{u_2}$	$2u'_2$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0
D_{4h}	$\mathbf{i}$	σ_h	$2c_{4i}$	$2\sigma_v$	$2\sigma'_v$

C_{3v}		e	$2\mathbf{c_3}$	$3\sigma_\mathbf{v}$			
D_3		e	$2\mathbf{c_3}$	$3\mathbf{u_2}$			
	D_{3i}^{3d}	e	$2c_3$	$3\mathbf{u_2}$	i	$2\mathbf{c_{3i}}$	$3\sigma_v$
	D_{6i}^{3h}	e	$2c_3$	$3\mathbf{u_2}$	σ_h	$2\mathbf{c_{6i}}$	$3\sigma'_v$
	C_{6v}	e	$2c_3$	$3\sigma_\mathbf{v}$	c_2	$2\mathbf{c_6}$	$3\sigma'_v$
	D_6	e	$2c_3$	$3\mathbf{u_2}$	c_2	$2\mathbf{c_6}$	$3u'_2$
A_1	A_{1g} A'_1 A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	A_{2g} A'_2 A_2	1	1	-1	1	1	-1
E	E_g E' E_2	2	-1	0	2	-1	0
	A_{1u} A''_1 B_1	1	1	1	-1	-1	-1
	A_{2u} A''_2 B_2	1	1	-1	-1	-1	1
	E_u E'' E_1	2	-1	0	-2	1	0
	D_{6h}	$\mathbf{i}$	$2c_{3i}$	$3\sigma_v$	σ_h	$2c_{6i}$	$3\sigma'_v$

T	e	$4\mathbf{c_3}$	$4c_3^{-1}$	$3\mathbf{u_2}$
A	1	1	1	1
E	1	q	q^2	1
	1	q^2	q	1
F	3	0	0	-1
T_h	i	$4\mathbf{c_{3i}}$	$4c_{3i}^{-1}$	$3\sigma_v$

T_d	e	$8c_3$	$3u_2$	$6\mathbf{c_{4i}}$	$6\sigma_\mathbf{v}$
O	e	$8u_3$	$3c_2$	$6\mathbf{c_4}$	$6\mathbf{u_2}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
F_1	3	0	-1	1	-1
F_2	3	0	-1	-1	1
O_h	i	$8u_{3i}$	$3\sigma_h$	$6\mathbf{c_{4i}}$	$6\sigma_v$

Y	e	$12\mathbf{c_5}$	$12c_5^2$	$15\mathbf{u_2}$	$20u_3$
A	1	1	1	1	1
F_1	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	-1	0
F_2	3	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	-1	0
G	4	-1	-1	0	1
H	5	0	0	1	-1
Y_h	i	$12\mathbf{c_{5i}}$	$12c_{5i}^3$	$15\sigma_v$	$20u_{3i}$

Табл. 4: Представлення точкових груп розбиті за класами і порядком головної осі, $q = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}/3}$. Генератори виділені жирним шрифтом. Для прямих добутків з групою інверсії вказаний лише правильний порядок нових класів, що з'являються, самі ж представлення можна відновити за прикладом груп C_i, C_{3i}, C_{2h}, D_{3i}. Групи C_2 і C_{2h} зустрічаються в таблиці двічі з міркувань кращої наочності. Верхнім індексом вказані альтернативні позначення груп, інверсійні осі замінюються в цьому випадку на дзеркальні так: $c_{3i} = s_6^{-1}$, $c_{4i} = s_4^{-1}$, $c_{6i} = s_3^{-1}$. Самопредставлення груп такі: $C_{3,4,6}$ і $D_{3,4,6}$ – E, $T_{,h}$ – F, T_d – F_2, $O_{,h}$ і $Y_{,h}$ – F_1.

і при $n = 2k$

C_{ni}	e	$(-1)^k c_2$	c_{ni}	c_{ni}^{-1}	$\ldots$	c_{ni}^l	c_{ni}^{-l}	$\ldots c_{ni}^{-k+1}$
C_n	e	c_2	c_n	c_n^{-1}	$\ldots$	c_n^l	c_n^{-l}	$\ldots c_n^{-k+1}$
A	1	1	1	1	$\ldots$	1	1	$\ldots$
B	1	1	-1	-1	$\ldots$	$(-1)^l$	$(-1)^l$	$\ldots$
E_1	1	-1	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/n}$	$\ldots$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\ldots$
	1	-1	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/n}$	$\ldots$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi l/n}$	$\ldots$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
E_m	1	$(-1)^m$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\ldots$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\ldots$
	1	$(-1)^m$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m/n}$	$\ldots$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi ml/n}$	$\ldots$
$\ldots E_{k-1}$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
C_{nh}	i	σ_h	c_{ni}	c_{ni}^{-1}	$\ldots$	ic_n^l	ic_n^{-l}	$\ldots ic_n^{-k}$

причому якщо k непарне, то група $C_{2k,i}$ має елемент σ_h, і в цьому випадку представлення позначаються інакше: $A', A'', E_1', E_1'', E_2', \ldots$

Елементи груп класу D_n представляються в загальному випадку двовимірними матрицями, значення яких на твірних елементах таке:

$$\mathrm{T}[c_n] = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m/n} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi m/n} \end{pmatrix}, \ \mathrm{T}[\sigma] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Не для всіх m такі представлення будуть незвідними, тому одержимо при $n = 2k + 1$

C_{nv}	e	$n\sigma_v$	$2c_n$	$\ldots$	$2c_n^l$	$\ldots 2c_n^k$
D_n	e	nu_{2h}	$2c_n$	$\ldots$	$2c_n^l$	$\ldots 2c_n^k$
A_1	1	1	1	$\ldots$	1	$\ldots$
A_2	1	-1	1	$\ldots$	1	$\ldots$
E_1	2	0	$2\cos\frac{2\pi}{n}$	$\ldots$	$2\cos\frac{2\pi l}{n}$	$\ldots$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
E_m	2	0	$2\cos\frac{2\pi m}{n}$	$\ldots$	$2\cos\frac{2\pi ml}{n}$	$\ldots$
$\ldots E_k$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
D_{ni}	i	$n\sigma_v$	$2c_{ni}$	$\ldots$	$2ic_n^l$	$\ldots 2ic_n^k$

і при $n = 2k$

D_{ni}	e	$(-1)^k c_2$	ku_{2h}	$k\sigma_v'$	$2c_{ni}$	$\ldots$	$2c_{ni}^l$	$\ldots 2c_{ni}^{k-1}$
C_{nv}	e	c_2	$k\sigma_v$	$k\sigma_v'$	$2c_n$	$\ldots$	$2c_n^l$	$\ldots 2c_n^{k-1}$
D_n	e	c_2	ku_{2h}	ku_{2h}'	$2c_n$	$\ldots$	$2c_n^l$	$\ldots 2c_n^{k-1}$
A_1	1	1	1	1	1	$\ldots$	1	$\ldots$
A_2	1	1	-1	-1	1	$\ldots$	1	$\ldots$
B_1	1	$(-1)^k$	1	-1	-1	$\ldots$	$(-1)^l$	$\ldots$
B_2	1	$(-1)^k$	-1	1	-1	$\ldots$	$(-1)^l$	$\ldots$
E_1	2	-2	0	0	$2\cos\frac{2\pi}{n}$	$\ldots$	$2\cos\frac{2\pi l}{n}$	$\ldots$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
E_m	2	$2(-1)^m$	0	0	$2\cos\frac{2\pi m}{n}$	$\ldots$	$2\cos\frac{2\pi ml}{n}$	$\ldots$
$\ldots E_{k-1}$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
D_{nh}	i	σ_h	$k\sigma_v$	$k\sigma_v'$	$2c_{ni}$	$\ldots$	$2ic_n^l$	$\ldots 2ic_n^{k-1}$

причому, знову ж таки, якщо k непарне, то група $D_{2k,i}$ має елемент σ_h, і представлення позначаються так: $A_1', A_2', A_1'', A_2'', E_1', E_1'', E_2', \ldots$

Незвідні представлення виключних груп знаходяться спеціальними методами (див. характери в табл. 4). Тривимірні представлення є самопредставленнями: у випадку октаедра F_1 і F_2 є самопредставленнями групами O і T_d, відповідно, у випадку ікосаедра F_1 – самопредставлення, F_2 – самопредставлення з альтернативним вибором похилої осі другого порядку. Три одновимірні представлення тетраедра відповідають представленням групи $C_3 \sim T/D_2$, два одновимірні і одне двовимірне представлення октаедра відповідають представленням групи $C_{3v} \sim T_d/D_2$. Чотиривимірне представлення G ікосаедра разом з одновимірним є самопредставленням групи $A_5 \sim Y$, п'ятивимірне представлення H також разом з одновимірним є одним з представлень групи S_6, діючої на шести парах протилежних вершин ікосаедра.

Все це підсумовано в табл. 4, де наведені незвідні представлення 32 точкових кристалографічних груп і груп ікосаедра.

Для розкладу представлень групи обертань на незвідні представлення точкових груп використовується така таблиця характерів:

		e	c_2	c_n	i	σ	c_{ni}
S	χ_g^0	1	1	1	1	1	1
A	χ_g^1	3	-1	$1+2\cos(2\pi/n)$	3	-1	$1+2\cos(2\pi/n)$
	χ_u^0	1	1	1	-1	-1	-1
V	χ_u^1	3	-1	$1+2\cos(2\pi/n)$	-3	1	$-1-2\cos(2\pi/n)$
	χ_p^l	$2l+1$	$(-1)^l$	$\frac{\sin[(2l+1)\pi/n]}{\sin[\pi/n]}$	$(2l+1)p$	$(-1)^l p$	$\frac{\sin[(2l+1)\pi/n]}{\sin[\pi/n]} p$

§6. Кубічна симетрія (група m-3m)

Група O_h та її підгрупи займають особливе місце: вони часто зустрічаються в природі і мають багатий набір різних елементів симетрії. Елементами симетрії групи $O = 432$ є три осі четвертого порядку вздовж осей координат, чотири осі третього порядку вздовж головних діагоналей куба, та шість осей другого порядку вздовж малих діагоналей кубу. Їх представниками є, відповідно, елементи

$$c_4 = R(\pi/2, [001]) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \; u_{3K} = R(2\pi/3, [111]) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \; u_{2K} = R(\pi, [101]) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Твірними є будь-які два елементи з цієї трійки, оскільки $c_4 u_{2K} u_{3K} = 1$. Домноженням на інверсію одержимо, відповідно, елементи c_{4i}, u_{3iK}, σ_{vK}. Твірними елементами групи O_h будуть ті ж елементи, що й для групи O, але один з них замінений на інверсійний. У класах спряжених елементів окремо виділяються $c_2 \equiv c_4^2$ і $\sigma_h \equiv c_{4i}^2$.

Елементи кубічних груп зручно позначати за перетворенням трьох функцій $\{x, y, z\}$, при цьому рисочка зверху над функцією означає знак мінус перед нею (у векторному вигляді $x = (100)^{\mathrm{T}}$). Наприклад, $c_4 = \bar{y}xz$, $u_{3K} = zxy$, $u_{2K} = z\bar{y}x$, $i = \bar{x}\bar{y}\bar{z}$. За допомогою цих позначень рівність $c_4 u_{2K} u_{3K} = 1$ доводиться так:

$$\begin{array}{ccccccc} & & xyz & \xrightarrow{u_{2K}} & z\bar{y}x & & \\ \hline xyz & \xrightarrow[u_{3K}]{} & zxy & \to & y\bar{x}z & \to & xyz \\ \hline & & & & xyz & \xrightarrow[c_4]{} & \bar{y}xz \end{array}$$

Розклад представлень групи обертань на незвідні представлення групи O_h має вигляд

	1	3	2	4	$2'$	-1	-3	m	-4	m'	S	P	D	F	G	H					
	1	8	3	6	6	1	8	3	6	6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	.	.	.	1	.	1	.	1	.	S; G_1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	.	.	.	.	.	.	.	.	.	1	$xyz\left[x^4(y^2-z^2)+y^4(z^2-x^2)+z^4(x^2-y^2)\right]$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	.	.	.	.	.	.	1	.	.	.	$x^4(y^2-z^2)+y^4(z^2-x^2)+z^4(x^2-y^2)$
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	.	1	F_{xyz}
E_g	2	-1	2	0	0	2	-1	2	0	0	.	.	1	.	1	.	1	.	2	.	$D_{x'y'}, D_{z^2}$; $G_{x'y'z^2}, G_{z^4}$
E_u	2	-1	2	0	0	-2	1	-2	0	0	.	.	.	.	.	1	.	1	.	1	$xyz(x^2-y^2)$, $xyz(3z^2-r^2)$
F_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	0	-1	1	-1	.	.	.	.	1	.	1	.	2	.	$G_{yzy'z'}, G_{zxz'x'}, G_{xyx'y'}$
F_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	0	1	-1	1	.	1	.	1	.	2	.	2	.	3	P_x, P_y, P_z; $F_{x^3}, F_{y^3}, F_{z^3}$
F_{2g}	3	0	-1	-1	1	3	0	-1	-1	1	.	.	1	.	1	.	2	.	2	.	D_{yz}, D_{zx}, D_{xy}; $G_{yzx^2}, G_{zxy^2}, G_{xyz^2}$
F_{2u}	3	0	-1	-1	1	-3	0	1	1	-1	.	.	.	1	.	1	.	2	.	2	$F_{xy'z'}, F_{yz'x'}, F_{zx'y'}$

де штрихом позначаємо координати в іншій орієнтації, наприклад, функції $D_{x'y'}$ зазвичай позначаються $D_{x^2-y^2}$, що одне й теж після повороту на кут $\pi/4$. Одержані базисні функції часто використовують замість стандартних сферичних функцій. Їх явний вигляд і зв'язок із реальнозначними (тригонометричними) сферичними гармоніками наведені в табл. 5. Цікаво, що функції всіх представлень F_2 з табл. 5 можна одержати поворотом функції іншого представлення: $D_{x'y'}$, F_{xyz}, $G_{x'y'z^2}$. Для D^2 іноді використовують перевизначений базис $\{D_{x^2}, D_{y^2}, D_{z^2}, D_{yz}, D_{zx}, D_{xy}\}$, або навіть базис $\{x^2, y^2, z^2, yz, zx, xy\}$, який перетинається з D^0.

L	IR	Y^{cubic}	label	real harmonics
0	A_{1g}	S	S	$\tilde{Y}_{00}$
1	F_{1u}	P_x	X	$\tilde{Y}_{11}$
		P_y	Y	$\tilde{Y}_{1-1}$
		P_z	Z	$\tilde{Y}_{10}$
2	E_g	$D_{x'y'}$	$X2$	$\tilde{Y}_{22}$
		D_{z^2}	$Z2$	$\tilde{Y}_{20}$
	F_{2g}	D_{yz}	YZ	$\tilde{Y}_{2-1}$
		D_{zx}	ZX	$\tilde{Y}_{21}$
		D_{xy}	XY	$\tilde{Y}_{2-2}$
3	A_{2u}	F_{xyz}	XYZ	$\tilde{Y}_{3-2}$
	F_{1u}	F_{x^3}	$X3$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}\,\tilde{Y}_{31} + \sqrt{\frac{5}{8}}\,\tilde{Y}_{33}$
		F_{y^3}	$Y3$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}\,\tilde{Y}_{3-1} - \sqrt{\frac{5}{8}}\,\tilde{Y}_{3-3}$
		F_{z^3}	$Z3$	$\tilde{Y}_{30}$
	F_{2u}	$F_{xy'z'}$	$XY2$	$-\sqrt{\frac{5}{8}}\,\tilde{Y}_{31} - \sqrt{\frac{3}{8}}\,\tilde{Y}_{33}$
		$F_{yz'x'}$	$YZ2$	$\sqrt{\frac{5}{8}}\,\tilde{Y}_{3-1} - \sqrt{\frac{3}{8}}\,\tilde{Y}_{3-3}$
		$F_{zx'y'}$	$ZX2$	$\tilde{Y}_{32}$
4	A_{1g}	G_1	$S4$	$\sqrt{\frac{7}{12}}\,\tilde{Y}_{40} + \sqrt{\frac{5}{12}}\,\tilde{Y}_{44}$
	E_g	$G_{x'y'z^2}$	$X2Z2$	$\tilde{Y}_{42}$
		G_{z^4}	$Z4$	$-\sqrt{\frac{5}{12}}\,\tilde{Y}_{40} + \sqrt{\frac{7}{12}}\,\tilde{Y}_{44}$
	F_{1g}	$G_{yzy'z'}$	$YZY2$	$-\sqrt{\frac{7}{8}}\,\tilde{Y}_{4-1} - \sqrt{\frac{1}{8}}\,\tilde{Y}_{4-3}$
		$G_{zxz'x'}$	$ZXZ2$	$\sqrt{\frac{7}{8}}\,\tilde{Y}_{41} - \sqrt{\frac{1}{8}}\,\tilde{Y}_{43}$
		$G_{xyx'y'}$	$XYX2$	$\tilde{Y}_{4-4}$
	F_{2g}	G_{yzx^2}	$YZX2$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}\,\tilde{Y}_{4-1} + \sqrt{\frac{7}{8}}\,\tilde{Y}_{4-3}$
		G_{zxy^2}	$ZXY2$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}\,\tilde{Y}_{41} - \sqrt{\frac{7}{8}}\,\tilde{Y}_{43}$
		G_{xyz^2}	$XYZ2$	$\tilde{Y}_{4-2}$

Notations
$S = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\; 1$
$P_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\; x$
$D_{x'y'} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\; (x^2 - y^2)$
$D_{z^2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\; (3z^2 - r^2)$
$D_{xy} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\; xy$
$F_{xyz} = \sqrt{\frac{105}{4\pi}}\; xyz$
$F_{x^3} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\; x(5x^2 - 3r^2)$
$F_{xy'z'} = \sqrt{\frac{105}{16\pi}}\; x(y^2 - z^2)$
$G_1 = \sqrt{\frac{21}{64\pi}}\; \left[r^4 - 5(x^2y^2 + y^2z^2 + z^2x^2)\right]$
$\equiv \sqrt{\frac{21}{64\pi}}\; \left[5(x^4 + y^4 + z^4) - 3r^4\right]$
$G_{x'y'z^2} = \sqrt{\frac{45}{64\pi}}\; (x^2 - y^2)(7z^2 - r^2)$
$G_{z^4} = \sqrt{\frac{15}{64\pi}}\; (r^4 + 4z^2r^2 - 7z^4 - 14x^2y^2)$
$G_{xyx'y'} = \sqrt{\frac{315}{16\pi}}\; xy(x^2 - y^2)$
$G_{xyz^2} = \sqrt{\frac{45}{16\pi}}\; xy(7z^2 - r^2)$
$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
$x', y' = \frac{1}{\sqrt{2}}\; (x \pm y)$

Табл. 5: Сферичні функції в кубічній симетрії.

Таблиця множення представлень групи O має вигляд

	A_2	E	F_1	F_2
A_2	A_1	E	F_2	F_1
E		$A_1 + A_2 + E$	$F_1 + F_2$	$F_1 + F_2$
F_1			$A_1 + E + F_1 + F_2$	$A_2 + E + F_1 + F_2$
F_2				$A_1 + E + F_1 + F_2$

§7. Симетрія еліпсоїда (група mmm)

Група mmm має 16 підгруп, які зручно параметризувати чотирма бітами згідно табл. 6.

subG	x	y	z	i
1	0	0	0	0
m_x	1	0	0	0
m_y	0	1	0	0
m_z	0	0	1	0
2_x	0	1	1	0
2_y	1	0	1	0
2_z	1	1	0	0
222	1	1	1	0
-1	0	0	0	1
$2/m_x$	1	0	0	1
$2/m_y$	0	1	0	1
$2/m_z$	0	0	1	1
$mm2_x$	0	1	1	1
$mm2_y$	1	0	1	1
$mm2_z$	1	1	0	1
mmm	1	1	1	1

Табл. 6: Параметризація підгруп групи mmm.

Розклад представлень групи обертань на незвідні представлення групи mmm має вигляд

	1	2_z	2_y	2_x	-1	m_z	m_y	m_x	0	1	2	3	4	5	0	1	2	3
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	.	2	.	3	.	S		$D_{z^2}, D_{x'y'}$	
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	.	.	1	.	2	.			D_{xy}	
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	.	.	1	.	2	.			D_{zx}	
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	.	.	1	.	2	.			D_{yz}	
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	.	.	.	1	.	2				F_{xyz}
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	.	1	.	2	.	3		P_z		$F_{z^3}, F_{zx'y'}$
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	.	1	.	2	.	3		P_y		$F_{y^3}, F_{yz'x'}$
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	.	1	.	2	.	3		P_x		$F_{x^3}, F_{xy'z'}$

§8. Додаток

8.1. Означення теорії груп

Група $G = G_0 \leftthreetimes G_1$ – *розширення групи* G_0 за допомогою групи G_1, якщо G_0 – інваріатна підгрупа і $G/G_0 \sim G_1$. Якщо G_1 підгрупа G, то це *напівпрямий добуток* $G_0 \rtimes G_1$, якщо ж G_1 інваріатна підгрупа, то *прямий добуток* $G_0 \times G_1$.

Відображення спряження $\varphi_h : g \to hgh^{-1}$.

Інваріантна підгрупа складається з повних класів спряжених елементів, тобто $\forall g \in G \; gHg^{-1} \subset H$.

8.2. Представлення груп

Розглядаємо лише унітарні представлення в гільбертовому просторі: $T_{g^{-1}} = T_g^{-1} = T_g^{+}$.

Характери незвідних представлень утворюють повну ортогональну систему функцій у просторі сталих на класах спряжених елементів функцій.

Ортогональність матричних елементів операторів незвідних представлень:

$$\sum_{g\in G} \overline{\left(T_g^{\Gamma}\right)_{ij}} \left(T_g^{\Gamma'}\right)_{i'j'} = \frac{|G|}{\dim \Gamma} \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{ii'} \delta_{jj'}.$$

Задача розкладу заданого представлення Λ групи G на незвідні зводиться до знаходження унітарного оператора U такого, що матриці $U^{+} T_g^{\Lambda} U$ мають сумісний по всім $g \in G$ блочно-діагональний вид, де кожен блок відповідає незвідному представленню. Матриці U мають аналогічний блочний вигляд

$\left(U^{\Gamma_1} \quad U^{\Gamma_2} \quad \ldots\right)$, де U^Γ – $\dim\Lambda \times \dim\Gamma$ унітарні матриці, такі що $U^{\Gamma+}T_g^\Lambda U^{\Gamma'} = \delta_{\Gamma\Gamma'}T_g^\Gamma$, а $P^\Gamma = U^\Gamma U^{\Gamma+}$ – ермітовий проектор на простір представлення Γ. Матриці U^Γ будуються за наведеною нижче схемою.

Зафіксуємо незвідне представлення Γ. Введемо позначення: $N = |G|$, $n = \dim\Lambda$, $d = \dim\Gamma$, ν – кратність Γ в Λ. Розглянемо оператори

$$P^\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{d}{N}\sum_{g\in G}\overline{\left(T_g^\Gamma\right)_{\beta\alpha}}T_g^\Lambda, \quad \alpha,\beta = \overline{1,d}.$$

Вони мають такі властивості:[2]

$$1)\ P^{\Gamma+}_{\alpha\beta} = P^\Gamma_{\beta\alpha}, \quad 2) P^{\Gamma+}_{\alpha\beta}P^{\Gamma'}_{\alpha'\beta'} = \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\beta\beta'}P^\Gamma_{\alpha'\alpha}, \quad 3)\ T_g^\Lambda P^\Gamma_{\alpha\beta} = \sum_\gamma P^\Gamma_{\alpha\gamma}\left(T_g^\Gamma\right)_{\gamma\beta}.$$

З другої і третьої тотожностей випливає, що при фіксованих α і x множина $\left\{P^\Gamma_{\alpha\beta}x,\ \beta = \overline{1,d}\right\}$ є ортогональною системою векторів, що перетворюються по представленню Γ. З першої і другої тотожностей випливає, що $P^\Gamma_{\alpha\alpha}$ – ермітів проектор на ν-вимірний підпростір, який містить по одному вектору з кожного Γ. Додамо також, що $P^\Gamma = \sum_{\alpha=1}^d P^\Gamma_{\alpha\alpha} \equiv \frac{d}{N}\sum_{g\in G}\overline{\chi_g^\Gamma}T_g^\Lambda$ – ермітів проектор на Γ^ν.

Використовуючи одержані проектори, будуємо матриці U^Γ наступним чином. Зафіксуємо α, наприклад, $\alpha = 1$ і в просторі, одержаному проектором P^Γ_{11}, введемо ортонормований базис $\left\{e^\Gamma_\mu,\ \mu = \overline{1,\nu}\right\}$ (ортонормуємо множину векторів-стовпчиків матриці P^Γ_{11}). Тоді

$$\left(U^\Gamma_\mu\right)_{i\beta} = \frac{d}{N}\sum_{g\in G}\overline{\left(T_g^\Gamma\right)_{\beta 1}}\left(T_g^\Lambda e^\Gamma_\mu\right)_i, \quad i = \overline{1,n},\ \beta = \overline{1,d}.$$

Покажемо, що одержані матриці здійснюють унітарне перетворення на Γ:

$$\left(U^{\Gamma+}_\mu T_g^\Lambda U^{\Gamma'}_\Lambda\right)_{\alpha\beta} = \sum_{ij}\overline{\left(U^\Gamma_\mu\right)_{i\alpha}}\left(U^{\Gamma'}_\Lambda\right)_{j\beta}\left(T_g^\Lambda\right)_{ij} = \frac{d^2}{N^2}\sum_{hf}\left(T_h^\Gamma\right)_{\alpha 1}\overline{\left(T_f^{\Gamma'}\right)_{\beta 1}}\sum_{ij}\overline{\left(T_h^\Lambda e^\Gamma_\mu\right)_i}\left(T_g^\Lambda\right)_{ij}\left(T_f^\Lambda e^{\Gamma'}_\nu\right)_j$$

$$= \frac{d^2}{N^2}\sum_{hf}\left(T_h^\Gamma\right)_{\alpha 1}\overline{\left(T_f^{\Gamma'}\right)_{\beta 1}}\left\langle e^\Gamma_\mu\right| T^\Lambda_{h^{-1}gf}\left|e^{\Gamma'}_\nu\right\rangle \overset{h^{-1}gh=h'}{=} \frac{d^2}{N^2}\sum_{\gamma\delta}\sum_{h'f}\left(T_g^\Gamma\right)_{\alpha\gamma}\left(T_f^\Gamma\right)_{\gamma\delta}\overline{\left(T^\Gamma_{h'}\right)_{1\delta}}\overline{\left(T_f^{\Gamma'}\right)_{\beta 1}}\left\langle e^\Gamma_\mu\right| T^\Lambda_{h'}\left|e^{\Gamma'}_\nu\right\rangle$$

$$= \frac{d}{N}\sum_{\gamma\delta}\sum_{h'}\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\gamma\beta}\delta_{\delta 1}\left(T_g^\Gamma\right)_{\alpha\gamma}\overline{\left(T^\Gamma_{h'}\right)_{1\delta}}\left\langle e^\Gamma_\mu\right| T^\Lambda_{h'}\left|e^{\Gamma'}_\nu\right\rangle = \delta_{\Gamma\Gamma'}\left(T_g^\Gamma\right)_{\alpha\beta}\left\langle e^\Gamma_\mu\right| P^\Gamma_{11}\left|e^\Gamma_\nu\right\rangle = \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\mu\nu}\left(T_g^\Gamma\right)_{\alpha\beta}.$$

Якщо ж цікавитися лише кратностями незвідних представлень, можна скористатися простою формулою

$$\nu = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\overline{\chi_g^\Gamma}\chi_g^\Lambda \equiv \frac{1}{|G|}\sum_{g\in C}N_g^C\overline{\chi_g^\Gamma}\chi_g^\Lambda,$$

де C – представники класів спряжених елементів групи G, а N_g^C – число елементів у класі, представником якого є елемент g.

Для розкладу тензорного добутку використовуємо формули

$$\chi_g^{\Gamma_1\times\Gamma_2} = \chi_g^{\Gamma_1}\chi_g^{\Gamma_2}, \quad \chi_g^{[\Gamma^2]} = \frac{1}{2}\left(\chi_g^\Gamma\right)^2 + \frac{1}{2}\chi^\Gamma_{g^2}, \quad \chi_g^{\{\Gamma^2\}} = \frac{1}{2}\left(\chi_g^\Gamma\right)^2 - \frac{1}{2}\chi^\Gamma_{g^2}.$$

8.3. Генерація групи ікосаедра за твірними елементами

Для групи Y твірними елементами є поворот навколо головної осі $a = u_{5Y}$ і поворот навколо найближчої осі другого порядку $b = u_{2h}$. Тоді маємо такі нетривіальні класи

$12c_5$ & $12c_5^2$	$a^q,\ a^pba^qba^{-p}$	$p = \overline{0,4},\ q = (1,4)$ & $(2,3)$
$15u_2$	$a^pba^qba^{-q}ba^{-p},\ p = \overline{0,4}$	$q = \overline{0,2}$
$20u_3$	$a^{p\pm1}ba^{-p},\ a^{p\pm1}ba^{\pm3}ba^{-p}$	$p = \overline{0,4}$

[2] Доведення в книжці Голод П. І., Симетрія. . . (2005)

Вісь другого порядку перпендикулярна до основної дається виразом $b' = c_2 = a^2ba^{-2}ba^2b$ і разом з u_{5Y} генерує підгрупу $D_5 = C_5 \cdot \{1, b'\}$, де $C_5 = \{1, a, a^2, a^3, a^4\}$. Тоді $Y = \{1, C_5b\} \cdot D_5 \equiv \{a^i, a^iba^j, a^ib', a^iba^jb'\}$. Зауважимо, що $c = ab$ – найближча до осей u_{2h} і u_{5Y} вісь третього порядку така, що $\{a, b, c\}$ – правоорієнтована трійка.

На практиці, як і для групи тетраедра, зручно вибирати "кубічну" систему координат так, що 8 вершин ікосаедра з координатами $|x| = |y| = |z| = 1/\sqrt{3}$ утворюють куб, а решта 12 вершин утворюють 3 взаємно перпендикулярні прямокутники, один з яких має координати $x = 0$, $y = \pm\frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{3}}$, $z = \pm\frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{3}}$, а решта утворюються поворотами третього порядку навколо головної осі куба.