

Точкові групи

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@iop.kiev.ua)

19 вересня 2011 р.

1	Група обертань	1
2	Представлення групи обертань	1
3	Елементи симетрії точкових груп	3
4	Точкові групи	4
5	Представлення точкових груп	7
6	Кубічна симетрія	10
7	Додаток	11
7.1	Генерація групи ікосаедра за твірними елементами	11

§1. Група обертань

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

$$R(\alpha, \theta, \phi) = R_z(\phi)R_y(\theta)R_z(\alpha)R_y(-\theta)R_z(-\phi),$$

де

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

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

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

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”

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

які генерують поворот

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

і задовольняють комутаційні співвідношення $[L_i, L_j] = ie_{ijk}L_k$.

§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} , $m = -l, \dots, l$. Інфінітезимальні оператори представляються відомими у квантовій