ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

LXIII 1976 5

УДК 519.45 : 539.3

МАТЕМАТИКА

М. Л. Бурышкин

О регулярном представлении пространственной группы симметрии в усеченном случае

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Р. А. Александряном 12/V 1976)

В работе [1] рассматривалась задача о разложении вектор-функций $p_{\cdot\varphi}$ ($\varphi = 1, 2, \ldots, m_{\nu}$), заданных на области Ω^* с конечной группой H^* симметрии и преобразующихся по неприводимому представлению τ_{ν} подгруппы $H \subset H^*$. Естественно поставить аналогичную задачу для вектор-функций $p_{k\nu\varphi}$ ($\varphi = 1, 2, \cdots, m_{k\nu}$), область определения которых обладает пространственной группой G^* симметрии и которые преобразуются по $m_{k\nu}$-мерному неприводимому представлению $\tau_{k\nu}$ со звездой $\{k\}$ подгруппы $G \subset G^*$. Для механических приложений характерно, что числа основных векторов подгрупп G_t^* и G_t трансляций групп G^* и G одинаковы и, следовательно, соответствующее регулярное представление группы G^*—конечномерно. Указанный тип регулярного представления, как и в [1], будет называться усеченным. Нетрудно указать на два более частных случая: точечно-усеченный, при котором $G_t = G_t^*$, а точечная подгруппа $H \subset G$ является подгруппой по отношению к точечной подгруппе $H^* \subset G$, и трансляционно-усеченный, при котором $H = H^*$, а $G_t \subset G_t^*$.

В данной работе исследуются разложения вектор—функций $p_{k\nu\varphi}$ ($\varphi = 1, 2, \cdots, m_{k\nu}$), заданных на области Ω^*, в точечно-усеченном случае и намечается путь решения такой задачи в общем случае усечения. При этом вид группы G^* симметрии области Ω^* ограничивается следующим условием:

$$g^* = t_a h^* \qquad \forall g^* \in G^*, \tag{1}$$

где $t_a^* \in G_t^*$—трансляция на некоторый вектор a; $h^* \in H^*$.

Группа H^* разбивается на $\varkappa$ левых смежных классов относительно своей подгруппы H. Пусть h_t^* $(t=1, 2, \cdots, \varkappa)$ — элементы группы H^*, порождающие эти смежные классы, а $h^{(1)*}$ — единичный элемент. Тогда согласно условию (1) пространство L, натянутое на вектор-функции $h^{(t)*}p_{k_\nu,\varphi}$ $(t=1, 2, \cdots, \varkappa;\ \nu=1, 2, \cdots, \varkappa;\ \varphi=1, 2, \cdots \cdots, m_{k_\nu})$ инвариантно относительно всех элементов группы G^* и, следовательно, преобразуется по ее регулярному представлению T.

Среди линейных комбинаций вектор-функций $p_{k,\varphi}$ $(\varphi=1, 2, \ldots, m_k)$ найдется m_ν линейно-независимых вектор-функций $p_k^{(s)}$ $(s=1, 2, \cdots m_\nu)$, которые под действием трансляций из G_t преобразуются в соответствии с вектором k (m_ν — размерность неприводимого представления τ_ν группы этого вектора). Известно, что под действием трансляций вектор-функция $h^{(t)*}p_k^{(s)}$ $(s=1, 2, \cdots, m_\nu;\ t=1, 2, \cdots, \varkappa)$ преобразуется по вектору $h^{(t)*}k$ ([3]). В связи с этим, так как звезда $\{k\}$ неприводима, а $H\subset H^*$, очевидна

Теорема 1. *В точечно-усеченном случае звездой регулярного представления группы G^* является неприводимая относительно этой группы звезда $\{k\}^*$.*

Соответствующая группе H^* точечная группа H_k^* вектора k, вообще говоря, отлична от группы H_k. Без нарушения общности дальнейшего изложения можно полагать, что $h^{(t)*}\in H_k^*$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa_k)$, где $\varkappa_k\leqslant\varkappa$, причем смежные классы $h^{(t)*}H$ $(\varkappa\geqslant t>\varkappa_k)$ не содержат элементов группы H_k^*. Легко заметить, что смежные относительно подгруппы $H_k\subset H^*$ классы $h^{(t)*}H_k$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa_k)$ в совокупности образуют группу H_k^*. Действительно, если элемент $h\in H_k$, то $h^{(t)*}h\in H_k^*$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa_k)$, и напротив, если $h\in H/H_k$, то $h^{(t)*}h\overline{\in} H_k^*$ $(t=1, 2, \ldots \ldots, \varkappa_k)$, так как иначе $h^{-1}(h^{(t)*})^{-1}k=k$ и $h^{-1}\in H_k$, что невозможно.

Через L_k обозначается подпространство пространства L, натянутое на все вектор-функции из L, которые преобразуются под действием трансляций группы G_t соответственно вектору k.

Лемма. *Подпространство L_k порождается функциями* $h^{(t)*}p_k^{(s)}$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa_k;\ s=1, 2, \ldots, m_\nu)$.

В связи с вышесказанным, очевидно, что $h^{(t)*}p_k^{(s)}\in L_k$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa_k;\ s=1, 2, \ldots, m_\nu)$. С другой стороны, $h^{(t)*}p_{k_1}^{(s)}\overline{\in} L_k$ $(t=1, 2, \ldots, \varkappa;\ s=1, 2, \ldots, m_\nu)$ при $k_1\neq k$ и $h^{(t)*}p_k^{(s)}\overline{\in} L_k$ $(t=\varkappa_k+1, \varkappa_k+2, \ldots, \varkappa)$; Последние утверждения легко доказываются от противного. В самом деле, если $k_1\neq k$, то $h^{(t)*}k_1\neq k$, так как иначе в силу неприводимости звезды $\{k\}$ найдется элемент $h\in H/H_k$, для которого $hk=k_1$, и тогда $h^{(t)*}hk=k$, т. е. $h^{(t)*}h\in H_k^*$ и $h\in H_k$. Если же $h^{(t)*}k=k$ $(t=\varkappa_k+1, \varkappa_k+2, \ldots, \varkappa)$ то $h^{(t)*}\in H_k^*$.

Следует подчеркнуть, что все эквивалентные векторы из зоны Бриллуэна имеют в данной работе одинаковые обозначения.

Согласно теории представлений пространственных групп [3] $k\mu$-е неприводимое представление группы G^* встречается в представлении T $l^*_{k\mu}$ раз, причем $l^*_{k\mu}$ — число раз, которое μ-е неприводимое представление τ^*_{μ} точечной группы H^*_k входит в представление T_k этой группы, индуцируемое в подпространство L_k редуцированным относительно подгруппы $H^*_k \subset G^*$ представлением T.

Представление T_k точечной группы H^*_k является несомненно регулярным. В соответствии с приведенной выше леммой его следует рассматривать как усеченное относительно подгруппы $H_k \subset H^*_k$. Это позволяет использовать здесь результаты из [1]. Так удается установить, что

$$c^*_{k\mu} = \frac{1}{m_{Hk}} \sum_{h_k \in H_k} \chi_{\nu}(h_k^*) \overline{\chi_{\mu}(h_k)}, \tag{2}$$

где $\chi_{\nu}(h_k)$ и $\chi^*_{\mu}(h_k)$ — значения характеров неприводимых представлений τ_{ν} и τ^*_{μ} точечных групп H_k и H^*_k на элементе $h_k \in H_k \subset H^*_k$. Кроме того, оказывается, что в подпространстве $L^{(r)}_{k\mu} \subset L (r = 1, 2, \ldots$ $\ldots, l^*_{k\mu})$, преобразующемся по представлению $\tau^*_{k\mu}$, существует стандартный относительно представления $\tau_{k\nu}$ базис, в котором матрицы $\hat{\tau}^*_{k\mu}(g)$ операторов $\tau^*_{k\mu}(g)$ $(g \in H)$ квазидиагональны и состоят из $l^*_{k\mu} + 1$ блоков, причем первые $l^*_{k\mu}$ блоков равны матрице $\tau_{k\nu}(g)$, а представление группы G, порожденное последними блоками, не содержит представления $\tau_{k\nu}$. В связи с этим аналогию с работой [1] можно продолжить, если для матричных элементов неприводимых представлений $\tau_{k\nu}$, $\tau^*_{k\mu}$, представления T и для их характеров ввести функционал усреднения [3]. Используя ограниченность указанных элементов и характеров можно, следуя работам [1,2], показать, что справедлива

Теорема 2. *В точечно-усеченном случае имеет место следующее разложение*

$$p_{k\nu\varrho} = \sum_{\mu} \sum_{r=1}^{l^*_{k\mu}} p_{k\mu, (r-1)m_{k\nu}+\varrho, r} \quad (\varrho = 1, 2, \ldots, m_{k\nu}), \tag{3}$$

где индекс μ при суммировании пробегает номера всех неприводимых представлений $\tau^*_{k\mu}$ со звездой $\{k\}$, входящих в соответствии с формулой (2) *в регулярное представление T группы G^*; вектор-функции $p^*_{k\mu\varrho r}$ $(\varrho = 1, 2, \ldots, m^*_{k\mu})$, образующие базис подпространства $L^{(r)}_{k\mu} \subset L$ $(r = 1, 2, \ldots, l^*_{\mu})$, определяются из выражения*

$$p^*_{k\mu\varrho r} = \frac{m^*_{k\mu}}{m_{k\nu}} \sum_{\sigma=1}^{m_{\nu}} \sum_{l=1}^{\varkappa} \tau_{k\mu\varrho,(r-1)m_{k\nu}+\sigma} \quad (h^{(l)*}) h^{(l)*} p_{k\nu\sigma}; \tag{4}$$

а $\tau_{k\mu pf}(g^*)$ ($p, f = 1, 2, \ldots, m^*_{k\mu}$) — *pf-ый элемент матрицы* $\tau^*_{k\mu}(g^*)$, *записанной в стандартном относительно представления* τ_k *базисе.*

Пример. На рис. 1 изображена часть бесконечной дискретной области Ω^*, состоящей из точек x_i ($i = 1, 2, \ldots$) и обладающей группой $C^{(1)}_{6v}$ симметрии ([3]) (основные векторы a_1 и a_2 подгруппы G_t указаны на рисунке, вектор $a_3=0$). Там же приведено расположение плоскостей отражений $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_6$ и положительное направление поворотов C_α на угол α. Заданную на области Ω^* скалярную функцию можно представлять бесконечно-мерным вектором $p = \{p^{(1)}, p^{(2)}, \ldots\}$, где $p^{(i)}$ ($i=1, 2, \ldots,$) — значение функции p в точке x_i. Через b_j ($j = 1, 2$) обозначаются основные векторы обратной решетки.

На области Ω^* определена преобразующаяся по неприводимому представлению $\tau_{1/2b_1,2}$ группы $C^{(1)}_{6v}$ (основными являются векторы a_1 и a_2; подгруппа $H = \sigma$ состоит из отражения σ_6 и единичного элемента e) функция $p_{1/2b_1,2,1} = \{-1; -4; 0; 2; 3; 4; -4; -3; -2; 0; 4; 1; 1; 4; 0; -2; -3; -4; 4; 3; 2; 0; -4; -1; -1; -4; 0; 2; 3; 4; -4; -3; -2; 0; 4; 1 \cdots\}$. Легко видеть, что $H^* = C_{6v}$, $\varkappa = 6$, $m_{1/2b_1,2} = 1$, $H_{1/2b_1} = \sigma$, $H^*_{1/2b_1} = C_{2v}$ (группа C_{2v} включает в себя отражения σ_6 и σ_3, e и C_{180}), $\varkappa_{1/2b_1} = 2$. В качестве элементов $g^{(t)*}$ ($t = 1, 2, \ldots, 6$) можно выбрать повороты $e, C_{60}, C_{120}, \ldots, C_{300}$. Из формулы (2) следует, что $l^*_{1/2b_1,1} = l^*_{1/2b_1,4} = 0$, а $l^*_{1/2b_1,2} = l^*_{1/2b_1,3} = 1$ (номера неприводимых представлений точечных групп даются в обозначениях работы ([3]). На основании теоремы 2

$$p_{1/2b_1,2,1} = p^*_{1/2b_1,2,1,1} + p^*_{1/2b_1,3,1,1}.$$

Матрицы $\hat{\tau}^*_{1/2b_1,\mu}(h^*)$ ($\mu = 2, 3$) в стандартном относительно представления $\tau_{1/2b_1,2}$ базисе записываются в виде:

$$\hat{\tau}^*_{1/2b_1,2}(t_{a_1}) = \hat{\tau}^*_{1/2b_1,3}(t_{a_1}) = \begin{pmatrix} -1; & 0; & 0 \\ 0; & -1; & 0 \\ 0; & 0; & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\tau}^*_{1/2b_1,2}(t_{a_2}) = \hat{\tau}^*_{1/2b_1,3}(t_{a_2}) =$$

$$= \begin{pmatrix} 1; & 0; & 0 \\ 0; & -1; & 0 \\ 0; & 0; & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\tau}^*_{1/2b_1,2}(C_{60}) = \begin{pmatrix} 0; & 0; & -1 \\ 1; & 0; & 0 \\ 0; & 1; & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\tau}^*_{1/2b_1,2}(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 0; & -1; & 0 \\ -1; & 0; & 0 \\ 0; & 0; & 1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{\tau}^*_{1/2b_1,3}(C_{60}) = \begin{pmatrix} 0; & 0; & 1 \\ 1; & 0; & 0 \\ 0; & 1; & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\tau}^*_{1/2b_1,3}(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 0; & -1; & 0 \\ -1; & 0; & 0 \\ 0; & 0; & -1 \end{pmatrix}.$$

Базисы неприводимых подпространств $L^{(1)}_{1/2b_1,2}$ и $L^{(1)}_{1/2b_1,3}$ строятся согласно формуле (4). В частности,

$$p^*_{1/2b_1,2,1,1} = \frac{1}{2}\left(p_{1/2b_1,2,1} - C_{180}\, p_{1/2b_1,2,1}\right) = \frac{1}{2}\{3; -1; 2; 2; -1; 3; -3; 1;$$

$-2;\ -2;\ 1;\ -3;\ -3;\ 1;\ -2;\ -2;\ 1;\ \ -3;\ 3;\ -1;\ 2;\ 2;\ -1;\ 3;\ 3;\ -1;$
$2;\ 2;\ -1;\ 3;\ -3;\ 1;\ -2;\ -2;\ 1;\ -3;\cdot\ \cdot\ \cdot\},\ p^*_{1/2b_1,2,2,1} = \frac{1}{2}(C_{60}\,p_{1/2b_1,2,1} -$
$- C_{240}\,p_{1/2b_1,2,1}) = \frac{1}{2}\{1;\ -3;\ 3;\ -1;\ 2;\ 2;\ -1;\ 3;\ -3;\ 1;\ -2;\ -2;\ -1;\ 3;$
$-3;\ 1;\ -2;\ -2;\ 1;\ -3;\ 3;\ -1;\ 2;\ 2;\ -1;\ 3;\ -3;\ 1;\ -2;\ -2;\ 1;\ -3;\ 3;$

$$-1;\ 2;\ 2;\cdot\ \cdot\ \cdot\},\ p^*_{1/2b_1,3,1,1} = \frac{1}{2}(p_{1/2b_1,2,1} + C_{180}\,p_{1/2b_1,2,1})$$

и т. д.

Этот простой пример достаточно полно иллюстрирует результаты исследования, проведенного для точечно-усеченного случая.

Что же касается общего случая усечения регулярного представления пространственной группы, то он характеризуется тем, что подгруппы H и G_t группы H являются нетривиальными подгруппами по отношению соответственно к группам H^* и G_t^*.

Через G' обозначается пространственная группа, состоящая из элементов подгрупп H^* и G_t и их всевозможных произведений. Легко видеть, что задачу о разложении вектор-функций $P_{k,\varphi}(\varphi = 1,2,\ldots, m_k)$ и порожденного ими регулярного представления в общем случае усечения можно решать последовательно, используя только результаты для точечно- и трансляционно-усеченного случаев. В самом деле, выбирая в качестве группы симметрии области Ω^* группу G', нетрудно с помощью формулы (2) и теоремы 2 разложить пространство L на подпространства, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы G'. Базисные функции этих подпространств заданы на области с группой G^* симметрии, вследствие чего порожденное ими регулярное представление является трансляционно-усеченным.

Одесский инженерно-строительный инситут

Մ. Լ. ԲՈՒՐԻՇԿԻՆ

Հատած դեպքում սիմետրիայի տարածական խմբի ռեգուլյար ներկայացման մասին

Ներկա աշխատանքում ուսումնասիրվում է սիմետրիայի G^* խմբով օժտված Ω^* տիրույթում որոշված, $G\subset G^*$ կետային-հատած ենթախմբի τ_k (m_k չափի) չբերվող ներկայացմամբ ձևափոխվող $p_{k\varphi}$ ($\varphi=1, 2, \ldots, m_k$) վեկտոր-ֆունկցիայի վերլուծությունը։ Տեքստն էապես հենվում է (1) աշխատանքի արդյունքների վրա։

Ընտրված գծային G^* խմբի սկալյար ներկայացման վերջնական ստրուկտուրան բերված է թեորեմ 1-ում և (2) բանաձևում։

Թեորեմ 2—ում ապացուցվում է, որ P_{k_γ} վեկտոր—ֆունկցիան թույլատրում է (3) վերլուծությունը, ընդ որում (3)—ում G^* խմբի $\tau^*_{k_1}$ չբերվող ներկայացումներով ձևափոխվող կոմպոնենտները գտնվում են (4) առնչություններից։ Բերված տեսությունը լուսաբանված է թվային օրինակով։ Որպես առաջնային, վերցված է դիսկրետ տիրույթում տրված (նկ. 1), $G^{(1)}_{2v}$ սիմետրիայի խմբով և $C_s^{(3)} \subset C_{2v}^{(1)}$ խմբի $\tau_{1/2b_1,2}$ ներկայացումով ձևափոխվող սկալյար վեկտոր—ֆունկցիան։

Ստացված արդյունքները կարող են էֆեկտիվ կիրառվել մեխանիկայի կետային-հատված սիմետրիայով օժտված խնդիրներում։

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *М. Л. Бурышкин*, ДАН АрмССР, т. LXIII, № 4 (1976). [2] *И. Г. Каплан*, Симметрия многоэлектронных систем, Изд. «Наука», М., 1969. [3] *Г. Я. Любарский*, Теория групп и ее применение в физике, ГИФМЛ, 1958.