

Б. А. МЕНЬ, А. Н. МЕНЬ, В. И. ЧЕРЕПАНОВ

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ПОВТОРЯЮЩИХСЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ В КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ С СИММЕТРИЕЙ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 11 V 1971)

При рассмотрении спектров примесных ионов и комплексов примесных ионов в кристаллах наибольшие трудности вызывает учет повторяющихся представлений, с которыми приходится иметь дело при переходе к кристаллическим полям более низкой симметрии или при учете многоэлектронных систем (тензорные произведения). Для характеристики повторяющихся представлений вводят дополнительные квантовые числа, как например, старшинство (Seniority number) ⁽¹⁾, квазимомент ⁽²⁾.

В данной работе предлагается теоретико-групповая классификация, позволяющая идентифицировать повторяющиеся представления. Идея такой классификации основана на чисто математическом анализе специфических свойств ряда конечных групп, к которым относятся все точечные кристаллографические группы.

Введем определения и сформулируем некоторые леммы и теоремы, необходимые для наших целей. Будем говорить, что группа G обладает п.с.-свойством (почти сверхразрешимая группа), если в ней можно найти инвариантный ряд с фактор-группами типов: 1) циклическая простого порядка; 2) четверная группа Клейна V_4 (E , (12) (34), (13) (24), (14) (23)).

Лемма 1. П.с.-свойство сохраняется для конечных прямых произведений п.с.-групп.

Лемма 2. П.с.-свойство сохраняется при переходе к подгруппе п.с.-группы.

Лемма 3. П.с.-свойство сохраняется для фактор-групп п.с.-группы.

Легко показать, что все точечные кристаллографические группы обладают п.с.-свойством.

Теорема 1. Индекс максимальной подгруппы M п.с.-группы G ($[G : M]$) будет простым числом или 4.

Поскольку все точечные группы симметрии, их прямые произведения и подгруппы их прямых произведений имеют порядок $2^n 3^m$, то по теореме 1

$$[G : M] = \begin{cases} 2, \\ 3, \\ 4. \end{cases} \quad (1)$$

Переход от G к M будем называть соответственно спуском на 2, 3 и 4. Покажем, что спуск на 2 и 3 будет элементарным спуском (не содержит повторяющихся представлений), для чего разложим ограничение характера $\chi(G)$ неприводимого представления группы G на подгруппу M по характерам неприводимых представлений $\eta_i(M)$ группы M

$$\chi(G) \downarrow M = \sum a_i \eta_i(M). \quad (2)$$

По теореме взаимности Фробениуса ⁽³⁾ получим для индуцированного представления $[\eta_i(M)]^G$

$$[\eta_i(M)]^G = a_i \chi(G) + \dots \quad (3)$$

Из (2) и (3) легко получить неравенство для размерности

$$\deg [\eta_i(M)]^G = [G : M] \deg \eta_i(M) \geq a_i \deg \chi(G) \geq a_i^2 \deg \eta_i(M), \quad (4)$$

или

$$[G : M] \geq a_i^2. \quad (5)$$

Итак, для $[G : M] = 2$ или 3 , $a_i < 2$, т. е. спуск G на M является элементарным. Спуск на 4 , вообще говоря, может и не быть элементарным.

Рассмотрим теперь другой класс групп, также содержащий все точечные кристаллографические группы. Назовем группу G π -группой, если существует вполне приводимая 2-подгруппа H такая, что G/H сверхразрешима. Под вполне приводимой 2-подгруппой H понимаем инвариантную подгруппу (порядки всех элементов которой, кроме E , равны 2), в которой для каждой меньшей инвариантной ($\triangleleft$) подгруппы K ($K < H$, $K \triangleleft G$) существует инвариантное дополнение L ($L < H$, $L \triangleleft G$, $K \oplus L = H$).

Лемма 4. *Прямое произведение конечного числа π -групп есть π -группа.*

Лемма 5. *Все подгруппы точечных групп симметрии есть π -группы.*

Лемма 6. *Пусть G есть π -группа, п.с.-группа и H — вполне приводимая 2-подгруппа, тогда $H = \sum H_i$, $H_i \triangleleft G$ порядок H_i ($|H_i|$) равен 2 или 4, если $|H_i|$ равен 4, то H_i изоморфно V_4 .*

Теорема 2. *Пусть G — π -группа, п.с.-группа $H < G$ и $C_G(H) = C_G(G) \equiv Z(G)$, тогда H — π -группа, п.с.-группа ($C_G(H)$ — централизатор H в G , $Z(G)$ — центр G).*

Лемма 7. *Всякая подгруппа K в прямой степени G^p ($G \times G \times \dots \times G$), содержащая диагональную подгруппу D (в D входят элементы типа $(g, g, \dots, g)$) удовлетворяет условию $C_{G^p}(K) = Z(G^p)$.*

Рассмотрим теперь спуск на 4. Введем понятие подгруппы, порожденной характером χ группы G . Q порождена χ , если она порождена всеми элементами, на которых $\chi \neq 0$.

Теорема 3. *Пусть $H < G$, $\varphi(H)$ — характер H , $\lambda(G) = [\varphi(H)]^G$, $\lambda(H) = a\varphi(H)$ ($\lambda(H) - \lambda$ на подгруппе H) и пусть Q порождена λ , тогда $H > Q$.*

Из строения вполне приводимых подгрупп у π -групп, п.с.-групп, рассмотренного в лемме 6, получаем теорему 4.

Теорема 4. *Пусть G — π -группа, п.с.-группа, K — ее вполне приводимая 2-подгруппа, χ -неприводимый характер G и Q порождена χ , тогда $Q > K$.*

Используя изложенное, сформулируем основную теорему для спуска на 4.

Теорема 5. *У π -групп, п.с.-групп спуск на 4 элементарен.*

Доказательство. Пусть $\chi(G)$ — неприводимый характер G и хотя бы одно $a_i > 1$ в (2). Поскольку $[G : M] = 4$, имеем $\chi(\mu) = 2\eta(M)$, $[\eta(M)]^G = 2\chi(G)$. Пусть Q порождена $\chi(G)$, тогда по теореме 3 $M > Q$. Пусть K — вполне приводимая 2-подгруппа в G и G/K сверхразрешима. По теореме 4 $Q > K$. Значит, $M > K$, M/K максимальна в G/K и $[G/K : M/K] = 4$, что противоречит теореме Хупперта ⁽⁴⁾.

Пример 1. Спуск на группу меньшей симметрии $O \rightarrow V_4$, $\Gamma_3(0) = 2\Gamma_1(V_4)$. Для классификации повторяющихся представлений в группе V_4 надо найти максимальную подгруппу в O , содержащую V_4 . Эта группа T , $0 > T > V_4$. Разложим $\Gamma_3(0)$ на $T : \Gamma_3(0) = \Gamma_2(T) + \Gamma_3(T)$. Каждому из повторяющихся Γ представлений приписываем индекс $\Gamma_2(T)$ или $\Gamma_3(T)$. Соответствующие проектирующие операторы ⁽⁵⁾ имеют вид

$$\Gamma_1^{\Gamma_2}(V_4) \rightarrow \hat{P} = \frac{1}{12} \sum_{g \in T} \Gamma_2(g) \hat{g}, \quad \Gamma_3^{\Gamma_3}(V_4) \rightarrow \hat{P} = \frac{1}{12} \sum_{g \in T} \Gamma_3(g) \hat{g}. \quad (6)$$

Пример 2. Тензорное произведение. Группа T . $\Gamma_4 \times \Gamma_4 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4$. Возьмем группу $T \times T$. Элементу $(t_1 t_2)$ поставим в соответствие матрицу $t_1 \otimes \hat{t}_2$. Это представление $\Gamma_4 \# \Gamma_4$, как известно, неприводимо и на диагональной подгруппе D дает $\Gamma_4 \times \Gamma_4$. Найдем максимальную подгруппу M в $T \times T$, содержащую D . Можно показать, что $M = DC$, где $C = \{E\} \times V_4$. $T \times T > DC > D$. Рассмотрим наше представление на DC . Оно разлагается в сумму трех различных неприводимых представлений k, l, m ,

$$T \times T > DC > D,$$

$$\Gamma_4 \# \Gamma_4 \rightarrow k + l + m \rightarrow \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4. \quad (7)$$

Проведем дальнейшее разложение уже на D : $K = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3$, $l = \Gamma_4$, $m = \Gamma_4$.

Для идентификации повторяющихся представлений используем группу DC . Тогда одно из Γ получит индекс l , в другое — m . Соответствующие проектирующие операторы имеют вид

$$\begin{aligned} \Gamma_4^l \rightarrow \hat{P} &= \frac{1}{16} \left\{ \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [B \times C](gh)(\hat{gh}) + \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [C \times D](gh)(\hat{gh}) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [D \times B](gh)(\hat{gh}) \right\}, \\ \Gamma_4^{(m)} \rightarrow \hat{P} &= \frac{1}{16} \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [B \times D](gh)(\hat{gh}) + \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [C \times B](gh)(\hat{gh}) + \\ &\quad + \sum_{(gh) \in V_4 \times V_4} [D \times C](gh)(\hat{gh}), \end{aligned} \quad (8)$$

где B, C и D — характеры группы V_4 ,

	E	(12) (34)	(13) (24)	(14) (23)
B	1	-1	-1	1
C	1	-1	1	-1
D	1	1	-1	-1

Можно записать (8) в более простой форме тензорного произведения операторов Слейтера⁽⁵⁾. Обозначим операторы Слейтера для характеров B, C и D соответственно K_B, K_C, K_D , где

$$K_B = \frac{1}{4} \sum_{g \in V_4} B(g) \hat{g}, \quad K_C = \frac{1}{4} \sum_{g \in V_4} C(g) \hat{g}, \quad K_D = \frac{1}{4} \sum_{g \in V_4} D(g) \hat{g}; \quad (9)$$

тогда

$$\begin{aligned} \Gamma_4^{(l)} \rightarrow \hat{P} &= K_B \otimes K_C + K_C \otimes K_D + K_D \otimes K_B, \\ \Gamma_4^{(m)} \rightarrow \hat{P} &= K_B \otimes K_D + K_C \otimes K_B + K_D \otimes K_C. \end{aligned} \quad (10)$$

Институт металлургии
Уральского научного центра Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
4 V 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ J. R a s a h, Phys. Rev., 76, 1352 (1949). ² Д. С. Фарберов, Автореф. кандидатской диссертации, Свердловск, 1971. ³ Ч. Кэртис, И. Райнер, Теория представлений конечных групп и ассоциативных алгебр, «Наука», 1969. ⁴ М. И. Каргополов, Ю. И. Мерзляков, В. И. Ремесленников, Основы теории групп, Новосибирск, 1968. ⁵ Д. Слейтер, Электронная структура молекул, М., 1965.