



TARTU RIIKLIK ÜLIKOOL

N. KRISTOFFEL JA K. REBANE

RÜHMATEOORIA
JA SELLE RAKENDUSI
MOLEKULIDE NING
KRISTALLIDE FÜÜSIKAS

TARTU 1961

XII

A-359

TARTU RIIKLIK ÜLIKOO

EKSPERIMENTAALFÜÜSIKA KATEEDER

N. KRISTOFFEL JA K. REBANE

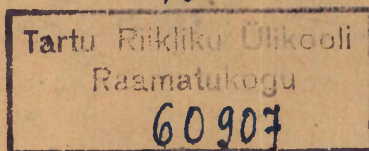
**RÜHMATEOORIA
JA SELLE RAKENDUSI
MOLEKULIDE NING
KRISTALLIDE FÜÜSIKAS**

TARTU 1961

20

Тартуский государственный университет
ЭССР, г. Тарту, ул. Юликооли, 18
Н. Кристоффель и К. Ребане
ТЕОРИЯ ГРУПП И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ В ФИЗИКЕ
КРИСТАЛЛОВ И МОЛЕКУЛ
На эстонском языке

N



Vastutav toimetaja L. Tuvikene
Korrektor E. Oja

TRÜ Rotaprint 1961. Trükipoognaid 7,25.
Tir. 200 eks. MB 00658. Tell. nr. 453.

Hind rbl. 0.22

SISSEJUHATUS.

Rühma mõiste on kaasaja matemaatika üks tähtsamaid üldistavaid mõisteid. Rühmateooria on tänapäeval iseseisev laia uurimisväljaga matemaatiline distsipliin.

Rühmateooria tekkis teisenduste rühmade uurimisest seoses algebraliste võrrandite teooriaga. Rühma mõiste selgel kujul toodi matemaatikasse 19. sajandi algul. Rühmateooria arenes möödunud sajandi jooksul põhijoontes endiselt seoses algebraliste võrrandite teooriaga. Sajandi lõpul lahendas Jevgraf Stepanovitš Fjodorov, kes oli tuntud teadlane nii kristallograafias kui geomeetrias, rühmateoreetiliste meetodite abil kristallograafia keskse probleemi: kristallide kõikvõimalike ruumvõrede klassifitseerimise ülesande. Tema töö oli ühtlasi esimeseks näiteks ja eeskujuks rühmateooria vahetust rakendamises loodusteaduses. Pärast Fjodorovi tööd on järjest laienenud selle teooria rakendamine loodusteadustes, eelkõige füüsikas. Seoses kvantmehaanika arenemisega sai rühmateooria füüsika eriti tähtsaks matemaatiliseks abidistsipliiniks.

Rühmateooriat rakendatakse füüsikas kristallide, molekulide, aatomite, väljade, aja ja ruumi sümmeetria uurimiseks ning sümmeetriaomaduste kasutamiseks väga mitmesuguste ülesannete lahendamisel. Rühmateooria on tema rakenduste seisukohalt füüsikas eelkõige sümmeetria teooria.

Käesoleva loengukursuse eesmärk on õpetada füüsikuid-eksperimentaatoreid rakendama rühmateooriat molekulide ja kristallide füüsikas. Loengukonspektis on antud punktrühmade üheste esituste tabelid - abimaterjal kristalli lisanditsentri ja molekulide punktsümmeetriaga seotud ülesannete lahendamiseks.

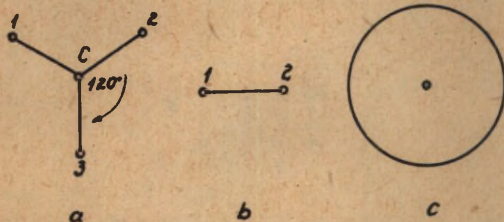
Konspektile vastav kursus loeti autorite poolt fakultatiivse ainenä 1959.a. kevadsemestril füüsikaosakonna optika eriharu 4. ja 5. kursuse õliõpilastele. Kursus eeldab kvantmehaanika aluste ja lineaaralgebra tundmist füüsikutele-eksperimentaatoritele loetavate kursuste ulatuses.

Loengukursuse koostamisel, eriti aga konspekti vormistamisel, on kasutatud eelkõige L. Landau ja J. Lifšitsi "Kvantmehaanika" (Л. Ландау, Е. Лифшиц "Квантовая механика", ч. I, ГИИТЛ, 1948). Mõned konspekti osad, mida on loengukursusega võrreldes tunduvalt laiendatud, on otseselt võetud sellest raamatust.

I. KEHADE SÜMMEETRIA.

§ 1. Sümmeetriateisendused. Ruumilise sümmeetria kolm põhiteisendust.

Sümmeetriliseks nimetame keha, mis pärast teatavat liikumist katab iseend, kusjuures mitte kõik keha punktid ei ühti eneste esialgsete asenditega.



Joon. 1

Joonisel 1 toodud tasapinnalised kujundid on sümmeetrilised. Nii kattub kujund a iseendaga pöördel 120° võrra ümber punkti C. Seejuures aga läheb näiteks punkt 1 üle punkt 2 esialgsesse asendisse. Kujund b ühtib iseendaga pöördel 180° võrra ümber keskpunkti, kujund c - pöördel meelevaldse nurga võrra ümber ringi keskpunkti.

Kehade sümmeetriat kirjeldame ümberpaigutuste abil, mis viivad keha iseendaga ühtimisele. Neid ümberpaigutusi nimetame sümmeetria teisendusteks.

Iga sümmeetria teisendust võib vaadelda kolme sümmeetria teisenduse põhitüübi kombinatsioonina. Nendeks on:

1. Keha pööramine fikseeritud telje ümber.
2. Peegeldamine tasapinnalt.
3. Paralleelne nihe.

Viimane sümmeetria teisendus saab esineda ainult lõpmatu ulatusega kehade juures. Taoliste lõpmatu ulatusega kehadena vaadeldakse füüsikas kristalle. Molekulidel võivad esineda sümmeetria teisenduste põhitüübid 1 ja 2.

Vaatleme näitena lähemalt sümmeetria kirjeldamist juhul, kui on tegemist pööramisega ümber fikseeritud telje.

Kui keha ühtib iseendaga pärast pöret telje ümber nurga $2\pi/n$ võrra ($n = 2, 3, 4 \dots$), siis ütleme, et kehal on n -järku sümmeetriatelg C_n . Teisiti avaldame sama mõtet, öeldes, et kehal on olemas sümmeetriaelement: n -järku telg. Pöret nurga $k \cdot 2\pi$ ($k = 0, 1, 2 \dots$) võrra loeme samaväärseks pöörde puudumisega.

Pööramist nurga $\frac{2\pi}{n}$ võrra vaatleme pööramisoperatsioonina (sümmeetriaoperatsioonina) ja tähistame sama sümbooliga C_n nagu sümmeetriaelementigi. Kui on vaja eriti esile tõsta erinevust sümmeetriaelemendi ja sellele vastavate sümmeetriaoperatsioonide vahel, siis täiendame viimaste tähistusi operaatori märgiga ja kirjutame \hat{C}_n .

Kehal võib olla mitu ühesugust sümmeetriaelementi. Näiteks on kuubil 3 neljandat järku telge.

Igale sümmeetriaelemendile vastavad kaks või enam sümmeetriaoperatsiooni. Nii vastab n -järku teljele C_n n operatsiooni. Need oleksid:

\hat{C}_n - pööramine nurga $2\pi/n$ võrra.

$\hat{C}_n^2 = \hat{C}_n \hat{C}_n$ - pööramine nurga $2(2\pi/n)$ võrra

.....

$\hat{C}_n^n = \overbrace{\hat{C}_n \hat{C}_n \dots \hat{C}_n}^{n \text{ korda}} = \hat{E}$ - pööramine nurga 2π võrra, mis viib keha tagasi esialgsesse asendisse ja on samaväärne pöörde puudumisega. Vastavat operatsiooni nimetame ühikope-ratsiooniks \hat{E} .

Kui n on p kordne, kehtib seos:

$$\hat{C}_n^p = \hat{C}_{n/p},$$

kus indeks n/p tähendab pööret nurga $p(2\pi/n)$ võrra.

Ilma igasuguse sümmeetriata keha võib vaadelda kehana, millel on olemas ainult sümmeetria ühikelement, kusjuures viimasele vastab ainult üks sümmeetriaoperatsioon \hat{E} .

Küsimusi.

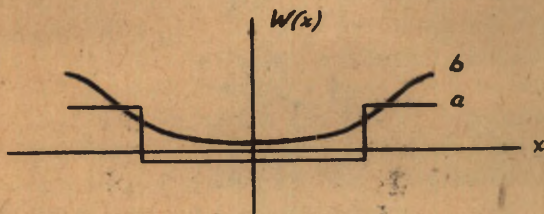
Millised sümmeetriateljed on kuubil?

Millised sümmeetriaoperatsioonid neile vastavad?

§ 2. Näide. Elektron ühemõttelises sümmeetrilises potentsiaalaugus.

Selgitame lihtsa näite najal, milliseid järeldusi saab teha ilma kvantmehaanika ülesannet lahendamata, kui arvestada ainult ülesande sümmeetriaomadusi.

Liikugu elektron ühemõttelises sümmeetrilises potentsiaalaugus $W(x)$. Sümmeetria all mõistame siin täpsemalt seda, et potentsiaal on paarisfunktsioon koordinaatide alguspunkti suhtes: $W(x) = W(-x)$.



Joon. 2.

Näiteks võib $W(x)$ olla kujutatav kõveratega a või b joonisel 2.

Meid huvitavad elektroni energiaspekter, statsionaarsete olekute lainefunktsioonid ja ülemineku tõenäosused häirituse (näit. valguse) toimel. Energiaspektri ja lainefunktsioonide leidmiseks tuleb lahendada Schrödingeri võrrand:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + W(x)\psi = E\psi. \quad (2.1)$$

Teades lainefunktsioone ja üleminekuid põhjustavat häiritust, saame mittestatsionaarse häiritusteooria abil arvutada üleminekute tõenäosused. Selline on tavaline lahendus-skeem. Teatavasti on aga tavaline skeem matemaatiliste raskuste tõttu täpselt realiseeritav ainult erandjuhtudel. Ka ligikaudsete võrrandi (2.1) lahendusvõtete rakendamine viib enamasti ületamatutele matemaatilistele raskustele. Õige tih-ti on aga füüsikaline pilt niisugune, et potentsiaali kuju ei ole teada, kuid on teada tema sümmeetriaomadused.

Just selline ülesanne on antud vaadeldavas näites: funktsioon $W(x)$ pole teada, Schrödingeri võrrandit ei saa lahenda hakata ning loomulikult ei tule ka konkreetse energiaspektri ja lainefunktsioonide leidmine kõne alla.

Siiski osutub võimalikuks küllaltki olulist teada saada lainefunktsioonide sümmeetriaomadustest, leida eeskirju energianivoode klassifitseerimiseks ja üleminekute valikureegleid. Saadav informatsioon on aga väärtuslikuks pidepunktiks eksperimendi tulemustes orienteerumisel, seega ka nähtuse füüsikalise olemuse mõistmisel. Arusaadavalt annab sageli olulisi tulemusi ka vastassuunaline talitusviis: valikureeglitest saab informatsiooni objekti sümmeetriaomaduste kohta. Spektroskoopia on füüsika haru, kus erakordselt laialdaselt rakendatakse kirjeldatud uurimismeetodit.

Asume nüüd vaadeldavat ülesannet lahendama. Lähtume Schrödingeri võrrandist (2.1), mille kohta teame, et $W(x) = W(-x)$. Tuletame meelde, et ühemõõtmelises potentsiaaluga on energiaspekter diskreetne ja igale energiatasemele vastab üksainus lainefunktsioon - kõduvust ei ole (vt. näit. [1])

lk. 79). Teisendame võrrandis (2.1) koordinaate, minnes x -lt üle $-x$ -le. Saame võrrandi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + W(-x)\psi(-x) = E\psi(-x). \quad (2.2)$$

Kuid $W(-x) = W(x)$ ning võrrand otsitava funktsiooni $\psi(-x)$ määramiseks on täpselt samasugune nagu $\psi(x)$ määrav võrrand.

Kui $\psi(x)$ oli omafunktsioon, mis vastas omaväärtusele E , siis ka $\psi(-x)$ on omafunktsioon, mis vastab samale omaväärtusele ($\psi(-x)$ rahuldab täpselt sedasama võrrandit!). Kuna aga meie ülesandes nivood on kõdumata, siis saab vaadeldavale energiale E kuuluda üksainus omafunktsioon. Sellepärast võivad $\psi(x)$ ja $\psi(-x)$ erineda ainult konstantse kordaja α võrra:

$$\psi(-x) = \alpha\psi(x). \quad (2.3)$$

(Teatavasti ei loeta uueks omafunktsiooniks lahendit, mis on avaldatav teiste omafunktsioonide lineaarse kombinatsioonina). α väärtuse leidmiseks teostame veelkord teisenduse $x \rightarrow -x$, mis annab:

$$\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha^2\psi(x). \quad (2.4)$$

Siit järeneb: $\alpha = \pm 1$.

Järelikult on võimalikud kahte liiki lainefunktsioonid, mis erinevad paarsuse poolest:

$$\begin{aligned} \psi_{(+)}(-x) &= \psi_{(+)}(x) - \text{paaris.} \\ \psi_{(-)}(-x) &= -\psi_{(-)}(x) - \text{paaritu.} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Kuna igale energianivoole kuulub üksainus lainefunktsioon, on ka nivoo sid otstarbekas klassifitseerida paarseiks (+) ja paarituiks (-) vastavalt nivoole kuuluva lainefunktsiooni paarsusele.

Täiendavalt on teada nn. ostsillatsiooniteoreem: lainefunktsioon $\psi_n(x)$, mis vastab diskreetse spektri $(n+1)$ -sele omaväärtusele E_n , muutub x lõplikel väärtusil nulliks n punktis. Järelikult saame klassifitseerida lainefunktsioonid ja energianivood:

Nivoo number	Lainefunktsiooni nullkohtade arv	Lainefunktsiooni ja nivoo paarsus
$n = 0$	0	+
$n = 1$	1	-
$n = 2$	2	+
$n = 3$	3	-
.....		

Nivoode klassifikatsioon nendele kuuluvate lainefunktsioonide sümmeetriomaduste järgi võimaldab püstitada valikureeglid.

Ülemineku tõenäosus $W_{nn'}$, nivooilt n nivoole n' on teatavasti võrdeline vastava häiritusoperaatori \hat{D} maatriks-elementi mooduli ruuduga:

$$W_{nn'} \sim |D_{n'n}|^2$$

$$D_{nn'} = \int \psi_n \hat{D} \psi_{n'} dx, \text{ kus}$$

Näiteks on optiliste üleminekute puhul diipollähenduses $\hat{D} \sim x$, kvadrupollähenduses $\hat{D} \sim x^2$ jne. Üleminekuid määravad integraalid võtavad kuju:

$$D_{nn'} \sim \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \cdot x \psi_{n'} dx \quad - \text{ diipolsed üleminekud,}$$

$$D_{nn'} \sim \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \cdot x^2 \psi_{n'} dx \quad - \text{ kvadrupolsed üleminekud.}$$

Arvestades integreeritava funktsiooni paarsust, saame alljärgnevad valikureeglid:

- 1) diipolüleminekud on lubatud erineva paarsusega nivoode vahel ja keelatud sama paarsusega nivoode vahel;
- 2) kvadrupolüleminekud on lubatud sama paarsusega nivoode vahel ja keelatud erineva paarsusega nivoode vahel.

Kui suured on lubatud üleminekute teoreetilised tõenäosused, selle kohta ei saa me ainult sümmeetriakaalutlustel midagi ütelda. Kuid ka saadud tulemused on küllalt olulised.

Sisuliselt samadel põhimõtetel ja põhiliselt samadel eesmärkidel toimub sümmeetriomaduste arvestamine ka rühma-

teooria abil. Vaadeldud lihtsaimal juhul oli kerge jõuda tulemustele ilma rühmateooria abita. Põhimõtteliselt on võimalik ka kõigi teiste ülesannete puhul toime tulla ilma rühmateooriata, kuid mõttekäigud muutuksid liiga keerukaiks, praktiliselt oleks võimatu nende abil eesmärgile jõuda. Otstarbekaks matemaatiliseks aparaadiks, mis võimaldab ühtse meetodika alusel saavutada sümmeetriast järgnevaid tulemusi, on rühmateooria.

II. ABSTRAKTSE RÜHMATEOORIA PÕHIMÕISTEID.

§ 3. Rühm.

Rühmaks nimetame sellist elementide hulka G^1 , mis rahuldab alljärgnevat nelja nõuet:

1. Hulgas G on defineeritud operatsioon - korrutamine, mis seab igale elementide paarile f ja g ühiselt vastasse sama hulga elemendi h .

Kirjutame $fg = h$, kuid rühmaoperatsiooni korrutamine ei tarvitse olla lihtsalt algebraline korrutamine.

Üldjuhul $fg \neq gf$, s.t. kommutatiivsuse seadus ei kehti.

2. Korrutamine on assotsiatiivne:

$$f(gh) = (fg)h, \quad (3.1)$$

kus f, g ja h on rühma G mistahes 3 elementi.

3. Hulk G sisaldab ühikelemendi e , s.t. sellise elemendi, et kõigi hulga G elementide puhul kehtib seos

$$ef = fe = f. \quad (3.2)$$

4. Iga elemendi f jaoks on hulgas G olemas element f^{-1} , mis rahuldab seost

¹ Me kasutame käesolevas konspektis rühmade tähistena allakriipsutatud tähti. Raamatus on tavaks saanud trükkida rühma tähised "rasvaste" tähtedega.

$$f^{-1}f = ff^{-1} = e, \quad (3.3)$$

olles seega vaadeldava elemendi f pöördelemendiks.

Kui elementide arv rühmas on lõplik, siis nimetame rühma G lõplikuks rühmaks ja elementide arvu temas rühma järguks. Vastasel korral on meil tegemist lõpmatu rühmaga.

Kui korrutamine on kommutatiivne, s.t. rühma elementide iga paari puhul kehtib võrdus $fg = gf$, siis nimetame rühma kommutatiivseks ehk Abeli rühmaks.

Täiendavaid märkusi.

Saab näidata, et:

- 1) $(gf)^{-1} = f^{-1}g^{-1}$,
- 2) rühm sisaldab vaid ühe ühikelemendi,
- 3) igal elemendil on olemas vaid üks pöördement.

Ülesanne: Kontrollida märkus 1) õigsus ning tõestada märkustes 2) ja 3) toodud väited!

Tsükliliseks nimetame rühma, mille kõik elemendid on avaldatavad ühe elemendi astmete kaudu, s.t. rühmas leidub element a , mida astendades

$$a, a^2, a^3, \dots, a^n = e \quad (3.4)$$

(siin $a^2 = aa$, \dots , $a^n = \underbrace{a a \dots a}_{n \text{ korda}}$),

saame kõik rühma elemendid.

Mittetsüklilise lõpliku rühma puhul peame mistahes elemendi a astmeid a, a^2, a^3, \dots moodustades samuti varem või hiljem jõudma ühikelemendini $a^n = e$ (vastasel korral saaksime lõpmatu arvu elemente), kuid saadav a astmete rida ei ammenda kõiki rühma elemente.

Olgu n vähim arv, mille puhul $a^n = e$. Arvu n nimetame elemendi a järguks, elementide a, a^2, \dots, a^n rida - rühma a^n perioodiks, mida tähistame $\{a\}$.

Näiteid.

Et saada hulka, mille võiks võtta uurimise alla seisukohalt, kas hulk on rühm või mitte, on vaja kaht asja:

- 1) öelda, millised objektid on hulga elementideks;
- 2) anda korrutamiseeskiri.

Hulk on rühm siis, kui kõik 4 rühma definitsioonis loetletud nõuet on täidetud.

Näide 1. Olgu antud täisarvude hulk $0, \pm 1, \pm 2, \dots$, milles korrutamiseks loeme tavalist algebraalist liitmist. Kas meil on tegemist rühmaga?

Veendume, et rühma definitsiooni kõik nõuded on rahuldatud. Algebraalise liitmise omadused tagavad nõuete 1 ja 2 täitmise:

1. $a + b = c$
2. $a + (b + c) = (a + b) + c$
3. Ühikelemendiks on arv 0.
4. Arvu a pöördelemendiks on sama absoluutväärtuse, kuid vastasmärgiga arv $-a$, s.t.

$$a^{-1} = -a.$$

Seega moodustab täisarvude hulk liitmise suhtes tõepoolest rühma, seejuures lõpmatu rühma.

Küsimusi.

1. Kas ka täisarvude $\pm 1, \pm 2, \dots$ hulk on rühmaks algebraalise liitmise suhtes?
2. Kas täisarvude $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ hulk on rühm algebraalise korrutamise suhtes? *e. ole pöördelise*

Näide 2. Positiivsete nullist suuremate ratsionaalarvude hulk moodustab rühma algebraalise korrutamise suhtes. Ühikelemendiks on 1, arvu a pöördelemendiks on $a^{-1} = \frac{1}{a}$.

Küsimus: Kui vaadeldavasse hulka kuuluks ka arv 0, kas siis oleks tegemist rühmaga?

Näide 3. Sageli on otstarbekas anda rühm tabeli näol.

Olgu hulga elementideks arvud 0, 1, 2, 3. Korrutamine tähendab algebralist liitmist, kuid kui summa on 4 või üle selle, siis tuleb anns lahutada 4 ja alles jääk lugeda korrutamise tulemuseks.

Tabeli kujul saame:

T a b e l 1.

	0	1	2	3
0	0	1	2	3
1	1	2	3	0
2	2	3	0	1
3	3	0	1	2

Tabelis 1 on igale elemendile vastavusse seatud üks rida ja üks veerg. Kahe elemendi korrutamise tulemuse leiame vaatava rea ja veeru ühisest ruudust. Rühm on kommutatiivne, sellepärast on tabel peadiagonaali suhtes sümmeetriline. Vastasel korral oleks tingimata vaja täiendavalt kokku leppida, kuidas kajastada elementide järjestust korrutises. (Võiks, näiteks, elemendi $a_1 a_2$ paigutada rea number a_1 ja veeru number a_2 ühisesse ruutu).

Ülesanne: Kontrollida, kas tabelis 1 antud rühm rahuldab kõiki rühma definitsioonis toodud nõudeid.

Mis on ühikelemendiks? Mis on elementide 0, 1, 2, 3 pöördelementideks? Kuidas neid tabelist kohe leida?

Näide 4. Hulga elemendid on arvud 1, 2, 3. Korrutamiseks on algebraline korrutamine, kuid tingimusel: kui korrutis on 4 või üle selle, siis loeme tulemuseks korrutisest 4 võrra väiksema arvu.

Ülesanne: Kontrollida, kas siin on tegemist rühmaga.

Näide 5. Hulga elementideks on ruumi pööramised Cartesluse ristkoordinaadistiku telgede ümber nurga π võrra ja lisaks veel samasuse operatsioon (e). Viimast võib vaadelda kas ruumi paigalejätmisena või pööramisena nurga $n \cdot 2\pi$ võrra (n - täisarv). Korrutamiseeskiri on: teostada pööramisi nõutavas järjekorras.

Rühmateoorias on kehtiv kokkulepe, et korrutises abc, kus a, b ja c tähendavad operatsioone, tuleb kõigepealt rakendada c, siis b ja viimasena a.

Koostame tabeli ja veendume, et on tegemist rühmaga.

T a b e l 2.

	e	$x\pi$	$y\pi$	$z\pi$
e	e	$x\pi$	$y\pi$	$z\pi$
$x\pi$	$x\pi$	e	$z\pi$	$y\pi$
$y\pi$	$y\pi$	$z\pi$	e	$x\pi$
$z\pi$	$z\pi$	$y\pi$	$x\pi$	e

$x\pi$ tähendab pööret nurga π võrra x telje ümber.

Korrutis $x\pi x\pi$ tähendab kaht järjestikku pööret nurga π võrra sama telje ümber, mille tulemuseks on pööre nurga 2π võrra. Järelikult saame $x\pi x\pi = e$.

Korrutis $x\pi y\pi$ tähendab pööramist nurga π võrra enne ümber y telje, siis ümber x telje. Kahe pöörde tulemusel jääb endisesse asendisse z telg. Seega on kahe pööramise tulemuseks pööre z telje ümber. Esimesel pöördel jääb x - telg paigale, teise pöörde tulemusel muudab aga oma suunda nurga π võrra. Sama tulemuse saame, kui teostame esmalt pöörde ümber x - telje. Järelikult on kahe vaadeldava pöörde tulemuseks pööre nurga π võrra z - telje ümber ja me võime kirjutada:

$$x^2 y^2 = y^2 x^2 = z^2 .$$

Tabelist 2 on näha, et rühma definitsiooni nõuded 1 ja 2 on rahuldatud, ühikelement e on olemas, iga elemendi pöördelemendiks on element ise. Järelikult on vaadeldaval juhul tõepoolest tegemist rühmaga.

Küsimus: Millised perioodid on olemas vaadeldavas rühmas? Missugust järku on elemendid x^2 , y^2 , z^2 ?

Näide 6. Rühma moodustavad kõikvõimalikud ruumi pöörded fikseeritud punkti O läbivate kõikvõimalike telgede ümber.

Kahe pöörde g_1 ja g_2 korrutis $g_1 g_2$ on pööre, mis toimub ruumiga, kui enne teostada pööre g_2 ja seejärel pööre g_1 . Iga pööre on antud, kui on antud pöördetelg ja pöördenurk.

Vaadeldavat rühma nimetame pöörete rühmaks.

Küsimus: Kas pöörete rühm on Abeli rühm?

Näide 7. Keha sümmeetriateisendused moodustavad rühma, mille elementideks on sümmeetriateisendused. Korrutamiseeskiri: rakendada teisendusi üksteise järel.

Näide 8. Olgu kehal sümmeetria C_3 , s.t. kehal on üksainus kolmandat järku sümmeetriatelg. Sümmeetriateisendused $C_3, C_3^2, C_3^3 = e$ moodustavad rühma. Rühm C_3 on Abeli rühm ja ka tsüklikline rühm.

§ 4. Alamrühm.

Alamrühmaks nimetame rühma alamhulka, kui ta omakorda on rühmaks sama korrutamiseoperatsiooni suhtes.

Näiteid.

Näide 1. Paarisarvud (null kaasa arvatud) paragrahvis 3 näites 1.

Näide 2. Pöörded fikseeritud telje ümber on alamrühmaks pöörete rühmas.

Rühma element võib kuuluda mitmesse alamrühma. Ühikelement kuulub kindlasti igasse alamrühma.

Periood $\{a\}$ on ise rühm. Periood on seega lähterühma alamrühm ja seejuures tsükliline alamrühm.

Selleks, et veenduda, kas lõpliku rühma vaadeldav elementide hulk on alamrühm, piisab kontrollist, kas iga kahe elemendi korrutis annab elemendi samast hulgast (alamrühmast).

Tõepoolest, lõpliku alamühma puhul peame saama $a^n = a^{n-1} \cdot a = e$. Seega on pöördelement ja ühikelement alamrühmas olemas. Korrutamise assotsiatiivsuse nõue on täidetud elementide kuuluvuse tõttu rühmas.

Lõplike rühmade alamrühmade kohta kehtib Lagrange'i teoreem:

Alamrühma järk on lõpliku rühma järgu jagaja.

Näiteks 15 elemendist koosnevas rühmas võivad olla kas kolmandat või viiendat järku alamrühmad.

Kui rühma järk on algarv, siis pole rühmal üldse alamrühmi (peale triviaalsete, s.o. iseenda ja e).

On õige ka väide: iga rühm, millel pole alamrühmi, on tingimata algarvulist järku ja peale selle tsükliline (mit-tetsüklilise rühma periood oleks alamrühmaks).

Tõestame Lagrange'i teoreemi.

Olgu antud rühm G , milles on g elementi ja alamrühm $H \in G$ (H kuulub rühma G) milles on h elementi.

Vaidetaks, et $g = hm$, kus m on naturaalarv.

Tõestus.

1. Valime rühmas G elemendi g_1 , mis ei kuulu alamrühma H . (Kui sellist elementi ei leidu, siis $H = G$ ja $m = 1$).

2. Korrutame (näiteks paremalt) g_1 -ga läbi kõik alamrühma H elemendid. Saame alamrühma H elementide kompleksi ehk kõrvalklassi Hg_1 , milles on h elementi, kusjuures kõik elemendid on erinevad. (Vastasel korral peaks olema $h_1g_1 = h_2g_1$, selle võrduse korrutamisel paremalt g_1^{-1} jõuame aga vastuolule eelusega $h_1 = h_2$).

3. Kõrvalklassi elemendid kuuluvad rühma \underline{G} , kuid ükski neist ei kuulu alamrühma \underline{H} . Näitame seda, lähtudes vastupidisest eeldusest.

$$\text{Olgu } h_1 g_1 = h_2.$$

Korrutame võrdust vasakult h_1^{-1} -ga. Saame $g_1 = h_1^{-1} h_2$, s.t. g_1 peaks kuuluma alamrühma \underline{H} , mis on vastuolus p. 1-ga. Järelikult ükski kõrvalklassi element Hg_1 ei kuulu alamrühma \underline{H} .

4. Valime rühmas \underline{G} elemendi g_2 , mis ei kuulu ei alamrühma \underline{H} ega kõrvalklassi Hg_1 .

5. Moodustame kõrvalklassi Hg_2 . Ükski element sellest ei kuulu ei alamrühma \underline{H} ega kõrvalklassi Hg_1 .

Viimase väite esimene pool on juba tõestatud punktis 3, teise poole tõestuseks eeldame vastupidist, s.t. olgu

$$h_1 g_2 = h_2 g_1,$$

siis

$$h_1^{-1} h_1 g_2 = h_1^{-1} h_2 g_1$$

ehk

$$g_2 = h_1^{-1} h_2 g_1.$$

Seega g_2 peaks olema kõrvalklassist Hg_1 , mis on vastuolus punktis 4 tehtud valikuga.

6. Valime rühmas \underline{G} elemendi g_3 , mis ei kuulu ei alamrühma \underline{H} ega kõrvalklassidesse Hg_1 ja Hg_2 ning moodustame kõrvalklassi Hg_3 . Selle ükski element ei kuulu alamrühma ega varem saadud kõrvalklassidesse Hg_1 ja Hg_2 .

Valime analoogiliselt g_4 , moodustame Hg_4 jne., kuni oleme ammandanud lõpuks kõik rühma \underline{G} elemendid ja ei jää enam ühtki elementi, mis ei kuuluks juba kas alamrühma \underline{H} või mõnda kõrvalklassi Hg_i . Siis oleme rühma \underline{G} jaganud osadeks

$$H, Hg_1, Hg_2, \dots Hg_n.$$

7. Iga osa sisaldab aga h elementi, kus h on alamrühma \underline{H} järk. Järelikult

$$g = hm.$$

Ülesanded.

1. Kasutades Lagrange'i teoreemi, näidata, et rühma mis tahes elemendi a aste a^g (g on rühma järk) võrdub ühik-
elemendiga.

2. Tõestada, et kahe alamrühma ühised elemendid moodustavad alamrühma.

§ 5. Kaaselemendid (konjugeeritud elemendid) ja klass.

Rühma kaks elementi a ja b on teineteise kaaselementideks (ehk on teineteisega konjugeeritud), kui

$$a = b c b^{-1}, \quad (5.1)$$

kus c on sama rühma element.

Ülesanne. Näidata, et seose (5.1) kehtivuse korral on maksev seos $b = c^{-1} a c$.

Kui a on konjugeeritud b -ga ja b omakorda konjugeeritud c -ga, siis ka a on konjugeeritud c -ga.

Tõepoolest, seostest

$$b = p^{-1} a p \quad \text{ja} \quad c = q^{-1} b q,$$

kus p ja q on sama rühma elemendid, järgneb

$$c = q^{-1} p^{-1} a p q = (p q)^{-1} a (p q).$$

Seega võib rääkida rühma elementide kogust, millesse kuuluvad elemendid on kõik teineteisega konjugeeritud. Selliseid kogusid nimetame rühma **k l a s s i d e k s**.

Klassi omadusi.

1. Iga klass on täielikult määratud ühe tema elemendi etteandmisega.

Olgu antud element a . Kogu klassi, millesse kuulub a , saame kätte, kui moodustame korrutised $g a g^{-1}$ rühma kõigi elementidega. (Klassi mõnda elementi võime seejuures saada õige mitu korda).

2. Rühma element saab kuuluda ainult ühte klassi.
3. Ühikelement e moodustab alati omaette klassi, sest ta kommuteerub rühma kõigi elementidega.
4. Abeli rühmas moodustab iga element omaette klassi.
5. Ühte klassi kuuluvad elemendid on kõik sama järku.

Olgu

$$a^n = e \quad \text{ja} \quad b = cac^{-1}.$$

Siis on

$$b^n = (cac^{-1})^n = \underbrace{cac^{-1}cac^{-1} \dots cac^{-1}}_{n \text{ korda}}.$$

Rakendades assotsiatiivsuse seadust ja arvestades, et $c^{-1}c = e$, saame

$$b^n = ca^n c^{-1} = cec^{-1} = e.$$

Ülesanne. Näidata, et Abeli rühma iga element on omaette klass.

Küsimus. Kas rühma kõik elemendid saavad kuuluda ühte klassi?

§ 6. Normaalkogaja.

Olgu H alamrühm rühmas G .

Võtame G elemendi g_1 väljaspool alamrühma H ja moodustame g_1 abil alamrühma H kõigi elementide konjugeeritud elemendid. Saame elementide hulga, mida tähistame $g_1 H g_1^{-1}$ ja nimetame H -ga konjugeeritud alamrühmaks.

Veendume selles, et $g_1 H g_1^{-1}$ on tõepoolest alamrühm. Selleks on vaja näidata, et kõigi $g_1 h g_1^{-1}$ elemendipaaride korrutised on jällegi $g_1 H g_1^{-1}$ elemendid.

Olgu $h_1 \in H$ (h_1 kuulub hulka H) ja $h_2 \in H$. Siis $h_1 h_2 = h_3 \in H$.

Võtame kaks vastavat konjugeeritud alamrühma elementi: $g_1 h_1 g_1^{-1} \in g_1 H g_1^{-1}$ ja $g_1 h_2 g_1^{-1} \in g_1 H g_1^{-1}$ ning moodustame nende korrutise:

$$g_1 h_1 g_1^{-1} g_1 h_2 g_1^{-1} = g_1 h_1 h_2 g_1^{-1}.$$

Valides väljastpoolt alamrühma H erinevaid elemente g , saame rea konjugeeritud alamrühmi, mis osaliselt võivad teineteisega ühtida.

Võib juhtuda nii, et kõik alamrühmaga H konjugeeritud alamrühmad ühtivad H endaga. Sellisel juhul nimetame alamrühma H - d rühma G normaalkajaks.

Nii on näiteks iga alamrühm Abeli rühmas normaalajaaja.

§ 7. Rühmade otsekorrutis.

Vaatleme n -järku rühma A , mille elemendid on a_1, a_2, \dots, a_n ja m -järku rühma B , mille elemendid on b_1, b_2, \dots, b_m . Olgu kõik A elemendid (peale ühikelemendi e) erinevad B elementidest ja kommuteerugu nendega.

A ja B võivad olla näiteks sümmeetria teisenduste rühmad.

Korrutame iga A elemendi iga elemendiga rühmas B . Saame mn elemendi hulga, mis moodustab mn -järku rühma.

Saadud rühma tähistame $A \times B$ ja nimetame rühmade A ja B otsekorrutiseks.

Ülesanne: 1. Näidata, et otsekorrutis sisaldab tõepoolest mn elementi.

2. Tõestada, et $A \times B$ on tõepoolest rühm.

§ 8. Isomorfism ja homomorfism.

Isomorfism.

Kaks rühma F ja G on isomorfismid, kui nende elementide vahel kehtib üksühene vastavus

$$f \longleftrightarrow g \quad (f \in F; g \in G)$$

ja igast vastavuste paarist

$$f_1 \longleftrightarrow g_1; f_2 \longleftrightarrow g_2 \quad (f_1, f_2 \in F; g_1, g_2 \in G)$$

järgneb vastavus

$$f_1 f_2 \mapsto \varepsilon_1 \varepsilon_2 .$$

Seega on rühmad isomorfsed siis, kui a) on olemas üheühene vastavus elementide vahel ja b) sama vastavus jääb püsima pärast korrutamist.

Abstraktse rühmateooria seisukohalt ei erine isomorfsed rühmad teineteisest. Elementidel ja korrutamisseadusel võib aga isomorfsetel rühmadel olla hoopis erinev konkreetne mõte. Näiteks rühm, mille elementideks on värvid ja korrutamine tähendab värvide muundumist, võib olla isomorfne sümmeetriliste enduste rühmaga, samahästi aga ka rühmaga, mille elementideks on arvud ja korrutamiseks algebraline tehe arvudega.

Konkreetse rühma rühmateoreetilisel uurimisel on sageli kasulik uurida mõnda temaga isomorfset rühma, mille matemaatiline uurimine võib osutuda märksa ülevaatlikumaks ja lihtsamaks.

Näide. n -järku pöörete rühm fikseeritud telje ümber, mille elementideks on n pööret nurkade

$$\varphi_k = \frac{2\pi}{n} k \quad (k = 0, 1, \dots, n-1)$$

võrra ja korrutamine tähendab pöörete üksteise järel sooritamist, on isomorfne rühmaga, mille elementideks on n astme juured ühest

$$\sqrt[n]{1} = e^{i \frac{2\pi}{n} k}$$

ja korrutamine tähendab tavalist kompleksarvude algebralist korrutamist. Isomorfsus on määratud seosega:

$$\varphi_k \mapsto e^{i \varphi_k}$$

Ülesanne: Tõestada, et kõik kolmandat järku rühmad on omavahel isomorfsed.

Homomorfsus.

Rühm G on homomorfne rühmaga F , kui igale elemendile $g \in G$ saab seada vastavusse elemendi $f \in F$ nii, et vastavusest

Piirdome esialgu lõpliku ulatusega kehade vaatlemisega. Edaspidiste rakenduste suhtes tähendab see, et vaatleme molekuli de sümmeetriarühmi, jättes esialgu kõrvale kristallide spetsiifilised sümmeetriaomadused.

Lõpliku ulatusega keha (molekuli) sümmeetriarühma kuuluvad teisendused peavad kõik olema sellised, et vähemalt üks keha punkt jääb teisendusel paigale. Teiste sõnadega - molekuli kõikidel sümmeetriatelgedel ja sümmeetriapindadel peab olema vähemalt üks ühine lõikepunkt. Tõepoolest, vastasel korral võiksime teostada teineteise järel pöörded kahe erineva omavahel mittelõikuva telje ümber, mille tulemusel keha kõik punktid nihkuksid ega oleks võimalik lõpliku ulatusega keha ühtimine enese esialgse asendiga.

Sümmeetriarühmi, mille kõigi teisenduste puhul vähemalt üks punkt jääb paigale, nimetame **p u n k t r ü h m a d e k s**.

Lõpliku ulatusega kehade sümmeetriateisenduste rühmad on punktrühmad.

Asume nüüd konkreetsete punktrühmade süstemaatilisele uurimisele. Silmas pidades rakendusi molekuli de kvantmehaanikas, on meie eesmärgiks välja selgitada konkreetsete rühmade elemendid ja jaotada need klassideks.

§ 10. Punktrühma sümmeetriateisenduste geomeetrilisi omadusi.

Vaatleme võimalikke punktrühma sümmeetriaelemente.

1. n-järku sümmeetriatelg.

Kui keha ühtib iseendaga tema pööramiseel fikseeritud telje ümber nurga $\frac{2\pi}{n}$ võrra, siis ütleme, et kehal on olemas n-järku sümmeetriatelg ehk lihtsalt n-järku telg.

Vastavat sümmeetriaelementi tähistame C_n .

C_n olemasolu toob endaga kaasa n sümmeetriateisenduse olemasolu. Need teisendused vastavad keha pööramisele nurga $\frac{2\pi}{n}$; $2\frac{2\pi}{n}$; $3\frac{2\pi}{n}$... $n\frac{2\pi}{n}$ võrra ja

vastavaid sümmeetriarühma elemente tähistame $C_n, C_n^2, C_n^3 \dots$
 $\dots C_n^n = e.$

Kui $n = sp$, kus s on täisarv, siis

$$C_n^p = C_{n/p}. \quad (10.1)$$

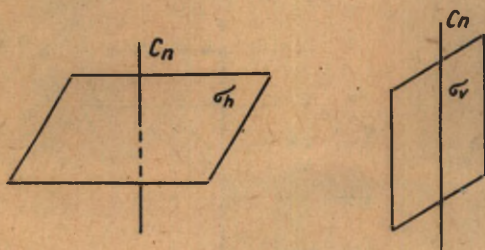
2. Sümmeetriatasand.

Kui keha ühtib iseendaga peegeldamisel tasapinnalt, siis seda tasapinda nimetame sümmeetriatasandiks ehk lihtsalt tasapinnaks. Nii vastavat sümmeetriaelementi kui ka tasapinnalt peegeldamise sümmeetriateisendust tähistame σ .

Kaks teineteisele järgnevat peegeldamist samalt tasapinnalt viivad keha tagasi esialgsesse asendisse. Järelikult

$$\sigma^2 = e. \quad (10.2)$$

Sageli on kehal üksainus telg või vaadeldakse keha üht telge tähtsaima sümmeetriateljena. Kui selline telg on fikseeritud, on mõtet vahet teha nende sümmeetriatasandite vahel, mis läbivad telge, ja nende vahel, mis on teljega risti. Esimesi ja nendega seotud sümmeetriateisendusi tähistame σ_v (vertikaalne tasapind), teisi ja nendega seotud sümmeetriateisendusi - σ_h (horisontaalne tasapind). (Vt. joonis 3).



Joon. 3

3. n-järku peegelduspööre.

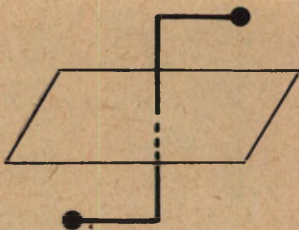
Kui mõlema eelloetletud operatsiooni - pöörde ja peegeldamise - üheaegne rakendamine viib keha iseenesega ühtima, siis on kohal sümmeetrialelement, mida nimetame peegelduspöördeteljeks.

Kehal on n -järku peegelduspöördetelg Oa , kui keha ühtib iseendaga pärast pöoret telje Oa ümber nurga $\frac{2\pi}{n}$ võrra ja järgnevat peegeldamist tasapinnalt, mis on risti teljega Oa .

Peegelduspöörde sümmeetrialelementi tähistame S_n , vastavaid sümmeetriateisendusi ehk sümmeetriarühma elemente $S_n, S_n^2, \dots, S_n^n = e$.

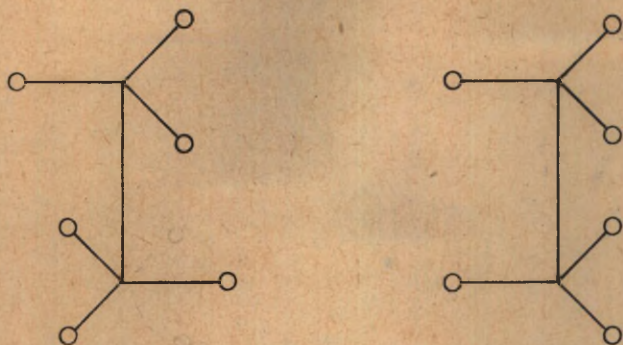
Peegelduspöördetelg on iseseisvaks sümmeetrialelemendiks ainult paarisarvulise n puhul ($n = 2s$).

Kui paaritud järku ($n = 2s + 1$) peegelduspööre viib keha iseenesega ühtima, siis peab kehal tingimata olema nii n -järku pöördetelg kui ka selle teljega risti olev sümmeetriatasand. Kehal on seega olemas sõltumatult $n = 2s + 1$ -järku pöördetelg ning sellega risti olev sümmeetriatasand σ_n . Peegelduspöörde teostamisel ühtib selline keha iseendaga juba otsekohe niihäästi pärast pöoret kui ka pärast peegeldamist. (Vt. joonised 4 ja 5).



Joon. 4

Kehal on sümmeetrialelement S_2 .



Joon.5

a) on olemas sümmeetrilise elemendid C_3 ja

S_6

b) on olemas sümmeetrilise elemendid C_3 ja σ_h .

S_3 tuleneb neist automaatselt, kuna $C_3 \sigma_h = S_3$

Ülesanne. 1. Joonistada keha, millel on olemas sümmeetrilise element S_4 .

2. Täiendada joonist 5 nii, et kehale jääks ainult sümmeetrilise element S_2 .

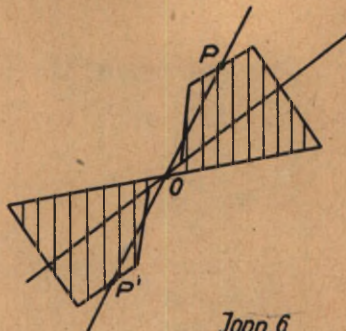
Peegelduspöörde definitsiooni kohaselt võime kirjutada:

$$S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n, \quad (10.3)$$

sest antud juhul ei olene tulemus peegeldamise ja pööramise järjekorrast.

4. Teist järku peegelduspöördetelg S_2 on tähtis erijuht. S_2 puhul räägime, et keha on sümmeetriline inversiooniteisenduse suhtes.

Inversiooniteisendus ehk lihtsalt inversioon viib keha punkti P üle punkti P', mis jääb sirgloigu OP pikendusele (O on C_2 -telje ja σ_h löikepunkt) parajasti nii kaugele, et $OP = OP'$ (Joonis 6).



Joon.6

Kui keha sümmeetriateisenduste rühm sisaldab inversiooni, räägime, et kehal on olemas sümmeetriatsenter.

Inversioonisümmeetriat ja vastavat teisendust tähistatakse I. (Kui on vaja eriti rõhutada vahet sümmeetriaelemendi ja vastava teisenduse vahel, tähistame viimast väikese tähega i).

Vaadeldavate sümmeetriateisenduste omaduste tõttu saame seosed:

$$I = i = S_2 = \sigma_h \sigma_2 = C_2 \sigma_h. \quad (10.4)$$

Korrutades seost (10.4) σ_h -ga, saame:

$$i \sigma_h = C_2 \sigma_2^2 = C_2. \quad (10.5)$$

Korrutades seost (10.4) C_2 -ga, saame:

$$i C_2 = \sigma_h C_2^2 = \sigma_h. \quad (10.6)$$

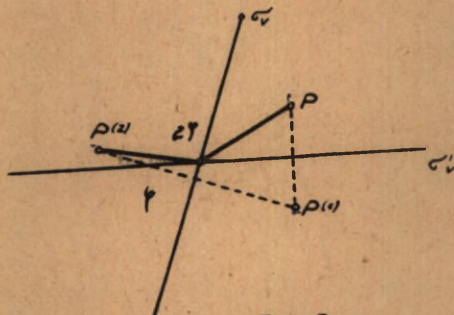
Seosed (10.4), (10.5) ja (10.6) väljendavad tõsiasja, et teist järku telg, temaga risti olev tasand ja sümmeetriatsenter on omavahel seotud: kahe elemendi olemasolul on automaatselt olemas ka kolmas.

Peegelduste ja pöörete geomeetrilisi omadusi.

1. Kahe erinevate telgede ümber teostatud pöörde korrutis on samaväärne pöördega kolmanda telje ümber, mis läbib kahe esimese lõikepunkti.

2. Vaatleme kaht tasandit ja kaht teineteisele järgnevat peegeldust neilt tasandilt. Joonise 7 abil võib veenduda, et kahe peegelduse korrutis annab pöörde, mille teljeks on tasandite lõikejoon, pöördenurk aga on kaks korda suurem tasanditevahelisest nurgast.

Tähistame: $\sigma_v \sigma_{v'} = C(2\psi)$. (10.7)



Joon.7

Ülesanne. Näidata, et $\sigma_v' \sigma_v = C(-2\psi)$.

3. Lähtume seosest (10.7). Korrutame seda vasakult σ_v -ga. Saame

$$\sigma_v^2 \sigma_v' = \sigma_v' = \sigma_v C(2\psi). \quad (10.8)$$

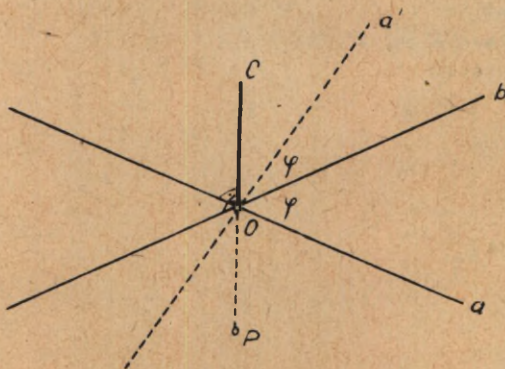
Tulemuse võib sõnastada nii:

Nurga ψ võrra pöörde korrutis peegeldusega pöördetelge läbivalt tasandilt σ_v on samaväärne peegeldusega tasandilt, mis läbib pöördetelge ja lõikab esimest tasandit nurga $\frac{\psi}{2}$ all.

4. Eelnevast järeldub, et telg C_2 ja kaks seda telge läbivat teineteisega risti olevat tasapinda σ_v ja σ_v' on seotud: kahe olemasolu tingib kolmanda olemasolu.

5. Vaatleme kaht pööret nurga φ võrra telgede Oa ja Ob ümber, mis lõikuvad nurga φ all. Näitame, et tulemuseks on pööre nurga 2φ võrra ümber telje Oc , mis on risti telgi Oa ja Ob sisaldava tasandiga (Joonis 8).

Joon. 8



Teame juba (vt. punkt I), et tulemus on pööre. Esimesel pöördel (joonise tasapinnas oleva sirge Oa ümber) sirge COP, mis on risti joonise tasapinnaga, muudab oma suuna vastupidiseks. Järgmisel pöördel (Ob ümber) pöördub sirge COP tagasi esialgsesse asendisse. Kahe pöörde summaarse pöörde puhul jääb COP paigale, olles seega pöördeteljeks. Pöördenurga leidmiseks on kõige lihtsam tee vaadelda nurki, mille võrra pöördub telg Oa (või Ob). Näiteks jääb Oa esimesel pöördel paigale. Teisel pöördel, mis toimub ümber Ob , nihkub ta uude asendisse Oa' , mis lõikub esialgse sirgega nurga 2φ all.

Pöörete järjekorra vahetamisel saame tulemuseks samuti pöörde COP ümber, kuid nurga -2φ võrra, s.t. vastassuunalise pöörde.

6. Kommutatiivsed on alljärgnevad sümmeetriateisendused:

- a. Kaks pööret ühe ja sama telje ümber.
- b. Kaks peegeldust ristuvatelt tasapindadelt. (Tulemuseks on pööre nurga κ võrra tasapindade lõikesirge ümber).
- c. Kaks pööret nurga κ võrra ristuvate telgede ümber (Tulemuseks on pööre nurga κ võrra kolmanda, eelmistega risti oleva sirge ümber).
- d. Pööre telje ümber ja peegeldus tasapinnalt σ_h .
- e. Inversioon ja kõikvõimalikud pöörded ja peegeldused: inversioon kommuteerub kõigi sümmeetriateisendustega.

§ 11. Punktrühma klasside leidmise abireegleid.

Üldine viis rühma klassideks jaotamiseks on meile teada. On vaja võtta element a_1 , moodustada kõikvõimalikud ba_1b^{-1} , kus b on rühma element. Saame klassi ba_1b^{-1} . Seejärel tuleb valida a_2 väljaspool ba_1b^{-1} , moodustada kõikvõimalikud ba_2b^{-1} jne., kuni kõik rühma elemendid on jaotatud klassideks.

Sümmeetriateisenduste rühmade puhul on klassideks jaotamine sageli lihtsam, kui võtta arvesse sümmeetriateisenduste omadusi.

Olgu element a pööre ümber sümmeetriatelje OA nurga φ võrra. Olgu g samasse rühma kuuluv teisendus (kas pööre või peegeldus), mis viib telje OA uude asendisse OB . Kaas-element

$$b = gag^{-1} \quad (11.1)$$

vastab siis pöördele telje OB ümber sama nurga φ võrra.

Veendume, et see on tõepoolest nii.

Otstarbekas on vaadelda teisenduse gag^{-1} mõju teljele OB enesele. Rakendame teisendust gag^{-1} teljele OB , alustades, nagu kokku lepitud, teisendusest g^{-1} . Element g viib telje OA üle asendisse OB , järelikult viib g^{-1} telje OB asendisse OA . a tähendab pööret ümber OA ja ei

muuda OA suunda. Lõpuks rakendame teisendust g , mis viib OA tagasi asendisele OB. Kogu teisenduse gag^{-1} tulemusel on jäänud paigale telg OB ja teisendus on seega pööre selle telje ümber.

Näitame, et ka pöördnurk on φ . Selleks meenutame, et ühte klassi kuuluvate elementide järgud on võrdsed. a ja b kohta teame seega, et

$$\begin{aligned} a^n &= e, \\ b^n &= e. \end{aligned} \quad (11.2)$$

Mõlemad elemendid on pöörded ja ka mõlemad annavad sama arvu n pöörete järele täispöörde (või $k \cdot 2\pi$). Järelikult on pöördenurgad võrdsed ka ühel pöördel.

Rühma elementide klassideks jaotamise seisukohalt saame järgmise tulemuse:

Reegel 1. Kaks pööret sama nurga võrra erinevate telgede ümber kuuluvad ühte klassi, kui rühma elementide seas leidub teisendus, mille abil saab ühe pöördetelje panna ühima teise pöördeteljega.

Sümmeetriatelgi, mis on keha sümmeetriarühma kuuluva teisenduse abil ühima pandavad, nimetame *e k v i v a - l e n t s e t e k s* telgedeks.

Analoogilise tulemuse võib saada peegelduste jaoks:

Reegel 2. Kaks peegeldust erinevatelt tasapindadelt kuuluvad ühte klassi, kui rühmas leidub teisendus, mis viib ühe tasapinna üle teiseks tasapinnaks. Sümmeetriatasandeid nimetame sellisel korral ekvivalentseteks.

Sama telje ümber teostatavate pöörete puhul kerkib küsimus, kas pöörded C_n^k ja $C_n^{-k} = C_n^{n-k}$ (viimast võib ju tõlgendada pöördena sama nurga võrra, kuid vastassuunalise telje ümber) kuuluvad ühte klassi? Reeglist 1 järeldub:

Reegel 3. Kui rühma elementide seas on *p ö ö r e*, mis muudab vaadeldava pöördetelje suuna vastupidiseks (pöörab telge nurga π võrra risttelje ümber), siis kuuluvad C_n^k ja $C_n^{-k} = C_n^{n-k}$ ühte klassi.

Reegel 4. Peegeldus teljega risti olevalt tasapinnalt muudab samuti pöördetelje suuna vastupidiseks ja võiks arvata, et ka σ_n olemasolu teeb C_n^k ja C_n^{-k} kaaselementideks. Kuid see siiski pole nii, sest peegeldamine muudab ühtlasi ka pööramise suunda. Sõnastame vastava reegli.

Reegel 4 σ_n olemasolu ei tee elemente C_n^k ja C_n^{-k} kaaselementideks.

Reegel 5. Peegeldus telge läbivalt tasapinnalt σ_v ei muuda telje suunda, kuid muudab pööramise suunda. Seega saame $C_n^{-k} = \sigma_v C_n^k \sigma_v^{-1}$. Järelikult C_n^k ja C_n^{-k} kuuluvad σ_v esinemisel ühte klassi.

Märkus. Kui vastassuunalised pöörded telje OA ümber sama nurga võrra on teineteise kaaselementideks, siis nimetame telge OA kahepoolseks teljeks.

Reegel 6. Inversioon kommuteerub punktrühma kõigi teisendustega ja on omaette klass.

Reegel 7. Olgu G rühm, mis ei sisalda inversiooni i ja I rühm kahest elemendist: e ja i . Nende otsekorrutus $G \times I$ on rühm, milles on kaks korda rohkem elemente kui rühmas G ; pool neist ühtivad rühma G elementidega, ülejäänud pool on saadud G elemendi korrutamisel i ga.

Rühm $G \times I$ sisaldab kaks korda rohkem klasse, kui neid sisaldas G . Igale klassile A rühmast G vastavad rühmas $G \times I$ kaks klassi: A ja $A.i$.

§12. Lõplike punktrühmade tüüpe.

Käesolevas paragrahvis me tutvume lühidalt konkreetsete füüsikalist huvi pakkuvate lõplike (elementide arv rühmas on lõplik¹) punktrühmadega. Nende rühmade elementide klassideks jaotamine toimub eelmistes paragrahvides antud reeglite kohaselt.

¹ Nn. pidevaid punktrühmi me vaatleme hiljem.

Me alustame lihtsamaist punktrühmadest, mis vastavad madalamale sümmeetriale ning lisame neile järjest uusi sümmeetrialelemente.

1. Rühmad C_n .

Lihtsaima sümmeetriaga kehal on vaid üks n-järku sümmeetriatelg. Rühm¹ C_n on pöörete rühm n-järku telje ümber. Tegemist on tsüklilise rühmaga ja iga element (elementide koguarv on n) moodustab omaette klassi. Rühm C_1 sisaldab ainult samasusteisendust E ja vastab sümmeetria puudumisele.

2. Rühmad S_{2n} .

See on "pöörete" rühm 2n-järku peegelduspöördetelje ümber. Ta sisaldab 2n elementi ja on tsükliline. Rühm $S_2 = C_1$ koosneb kahest elemendist: E ja I. Kui rühma järk on esitatav kujus $2n = 4p + 2$, siis rühma elementide hulgas on inversioon, kuna $(S_{4p+2})^{2p+1} = C_2 \sigma_h = I$. Selline rühm on kirjutatav järgmise otsakorrutisena $S_{4p+2} = C_{2p+1} \times C_1$.

3. Rühmad C_{nh} .

Rühma C_{nh} saame, kui kehal on n-järku sümmeetriatelg ja sellega ristuv sümmeetriatasand. Rühmas C_{nh} on 2n elementi: n pööret, mis kuuluvad C_n -le ja n peegelduspööret $C_n^k \sigma_h$, ($k = 1, \dots, n$), sealhulgas peegeldus $C_n^n \sigma_h = \sigma_h$. Kõik elemendid on kommuteeruvad ja klasside arv võrdub elementide arvuga (Abeli rühm). Kui $n = 2p$, siis on olemas sümmeetriatsenter, kuna $C_{2p}^p \sigma_h = C_2 \sigma_h = I$. Rühm $C_{1h} = C_1$ koosneb vaid kahest elemendist: E ja σ_h .

4. Rühmad C_{nv} .

Kui n-järku sümmeetriateljele lisada teda läbiv (vertikaalne) sümmeetriatasand, siis tingib viimase olemasolu automaatselt veel n - 1 teineteisega mööda telge nurkade $\frac{\pi}{n}$ all lõikuvate sümmeetriatasandite olemasolu. Rühm C_{nv} sisaldab seega 2n elementi: n pööret n-järku telje ümber ja n peegeldust σ_v vertikaalsetes tasandites. Joonisel 9 on näiteks toodud rühma C_{3v} sümmeetriatasandite ja telje süsteem.

¹ Tavaliselt tähistatakse rühma sümboleid "rasvaste" tähtedega. Meie kasutame rühma tähistusena C_n , et teda eristada pöördteisendusest C_n .



Joon. 9

Rühma elemendid ei ole siin enam kommutatiivsed. Klasside leidmiseks märgime eelkõige, et sümmeetriatelg on kahepoolne (telg läbib σ_v , mis, muutes pöörde suunda, teeb elemendid C_n^k ja C_n^{-k} konjugeerituiks). Klassideks jagunemine on erinev paaris- ja paariarvulise n jaoks. Kui $n = 2p+1$, on meil paaritu arv peegelduspindu

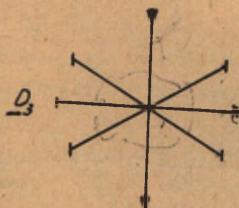
σ_v ja pöörded C_{2p+1} viivad iga σ_v järjestikku ühtimisele ülejäädud $2p$ peegelpinnaga. Kõik sümmeetriatasandid on seega ekvivalentsed ja peegeldused neis kuuluvad kõik ühte klassi. Kokku on veel $2p+1$ pööret, neist $2p$ on erinevad samasugusteisendusest. Kuna telg on kahepoolne, kuuluvad C_{2p}^k ja C_{2p}^{-k} ($k = 1, \dots, p$) ühte klassi ja me saame p kahest elemendist koosnevat klassi. E moodustab muidugi omaette klassi. Kokku saame rühma $C_{2p+1, v}$ jaoks $1+p+1 = p+2$ klassi.

Kui $n = 2p$, siis pööretega C_{2p} saab ühtimisele viia ainult ülejäägimisi peegelpindu. Naaberpindade ühteviimiseks oleks vaja pööret C_{np} , mis aga puudub rühmas. Seega $2p$ peegeldusoperatsiooni jagunevad kahte klassi, kummaski p elemendiga. $2p$ pöörde hulgas on $C_{2p}^{2p} = E$ ja $C_{2p}^p = C_2$, mis kommuteeruvad omavahel ja moodustavad kumbki omaette klassi. Telg on endiselt kahe-suunaline ja ülejäänud $2p-2$ pööret annavad paarikaupa veel $p-1$ klassi. Kokku on rühmal $C_{2p, v}$ $p+3$ klassi.

5. Rühmad D_n .

Lisades n -järku sümmeetriateljele temaga ristuva teist järku sümmeetriatelje, saame lisaks veel $n-1$ samasugust telge. Kokku saame n horisontaalset teist järku telge, mis lõikuvad nurkade $\frac{\pi}{n}$ all. Saadud rühm D_n sisaldab $2n$ elementi: n pööret n -järku telje ümber ja n pööret nurga võrra horisontaalsete teist järku telgede ümber. Viimaseid tähistame U_2 , et eristada neid pööretest C_2 nurga π võr-

ra vertikaalse telje ümber. Joonisel 10 on näiteks toodud D_3 sümmeetriatelgede süsteem.



Joon. 10

n -järku telg on kahepoolne, horisontaalsed teist järku teljed on kõik ekvivalentset, kui n on paartitu, ja moodustavad kaks mitteekvivalentset kogu, kui n on paaris. Rühmal D_{2p} on $p+3$ klassi: E , 2 klassi, millest kumbki sisaldab p pööret U_2 , pööre C_2 ja lõpuks $(p-1)$ klassi, millest igaüks sisaldab kahte pööret vertikaalse telje ümber.

Rühmal D_{2p+1} on $p+2$ klassi: E , $(2p+1)$ pööret U_2 ja p klassi, mis koosnevad kahest pöördest vertikaalse telje ümber.

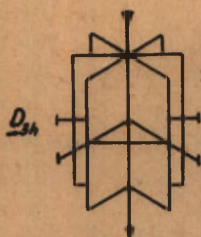
Erijuhuku on rühm $D_2 = V$, mis koosneb pööretest kolme teineteisega ristuva teist järku sümmeetriatelje ümber.

6. Rühmad D_{nh} .

Lisades rühma D_n sümmeetriatelgede süsteemile horisontaalse sümmeetriatasandi, mis läheb läbi n teist järku telje, saame automaatselt veel n vertikaalset sümmeetriatasandit, millest igaüks läbib vertikaalset telge ja üht teist järku telge. Saadav rühm D_{nh} sisaldab $4n$ elementi: rühma D_n $2n$ elemendile lisanduvad n peegeldust σ_v ja n peegeldus-pöördetsisendust $C_n^k \sigma_h$. Joonisel 11 on näiteks toodud rühma D_{3h} sümmeetriatelgede ja -tasandite süsteem. Peegeldus kummuteerab kõikide ülejäänud rühma elementidega. Seepärast võime rühma D_{nh} esitada järgmise otsekorrutisena $D_{nh} = D_n \times C_s$. Paarisarvulise n korral on rühma elementide hulgas inversioon, seega võib ka kirjutada

$$D_{2p,h} = D_{2p} \times C_i$$

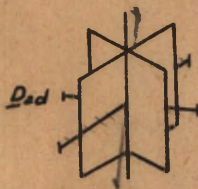
Rühmas D_{nh} on klasse kaks korda rohkem kui rühmas D_n . Pooled neist langevad ühte rühma D_n klassidega, ülejäänud tulenevad viimaste korrutamistest σ_h -ga. Peegeldused σ_v



Joon. 11

järku sümmeetriatelje vahel.

Ühe sellise tasandi lisamine toob endaga kaasa $n-1$ analoogilise tasandi olemasolu. Saame rühma D_{nd} . Joonisel 12 on näiteks toodud rühma D_{2d} sümmeetriatelgede- ja tasandite süsteem. Rühmas D_{nd} on $4n$ elementi. Rühma D_n $2n$ elemendile lisandub siin n peegeldust diagonaalsetes vertikaaltasandites σ_d ja n teisendust $G = U_2 \sigma_d$. Viimaste iseloomu



Joon. 12

kuuluvad kõik ühte klassi paaritu n korral ja moodustavad kaks klassi paarisarvulise n korral. Peegelduspöördeteisendused $\sigma_h C_n^k$ ja $\sigma_h C_n^{-k}$ on konjugeeritud.

7. Rühmad D_{nd} .

Lähtume jällegi rühmast D_n . Sümmeetriatasandid, mis läbivad vertikaalset telge, asetame aga nii, et nad poolitaksid nurga kahe naaberhorisontaalse teist

selgitamiseks arvestame, et $U_2 = \sigma_h \sigma_v$, kus σ_v on peegeldus antud teist järku telge läbivas vertikaaltasandis (elemente σ_h, σ_v omaette rühmas D_{nd} muidugi ei ole). Kuna tasapinnad, mis vastavad σ_v ja σ_d -le, lõikuvad mööda n -järku telge, moodustades nurga

$\frac{\pi}{2n}(2k+1)$, kus $k = 1, \dots, (n-1)$,

siis $\sigma_v \sigma_d = C_{2n}^{2k+1}$. Seega

$G = \sigma_h \sigma_v \sigma_d = \sigma_h C_{2n}^{2k+1} = S_{2n}^{2k+1}$ ja tegemist on peegelduspöördeteisendustega vertikaaltelje ümber. Viimane ei ole nüüd lihtsalt n -järku sümmeetriateljeks, vaid $2n$ -järku peegelduspöördeteljeks.

Teisendused σ_d viivad naabruses asuvad teist järku teljed üle teineteiseks. Seepärast on olenemata n -st kõik teist järku teljed ekvivalentsed. Samuti on ekvivalentsed

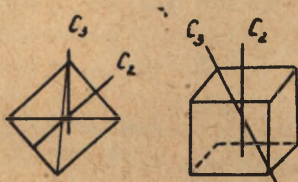
σ_d -le vastavad tasandid, teisendused S_{2n}^{2k+1} ja $S_{2n}^{-(2k+1)}$ on konjugeeritud.

Rühmas $D_{2p,d}$ on $2p+3$ klassi: E , pööre C_2 n -järku telje ümber, $p-1$ klassi kahest pöördest sama telje ümber, üks klass $2p$ pöördest U_2 , üks klass $2p$ peegeldusest σ_d ja p klassi kahest peegelduspöördeteisendusest.

Kui $h = 2p+1$, on rühma elementide hulgas inversioon, sest üks horisontaaltelgedest ristub seejuures vertikaaltasandiga. Seepärast $D_{2p+1,d} = D_{2p+1} \times C_2$; ja rühmal $D_{2p+1,d}$ on $2p+4$ klassi, mis tulenevad vahetult rühma D_{2p+1}^{p+2} klassist.

8. Rühm T .

Selle rühma sümmeetriatelgede süsteem kujutab endast tetraedri sümmeetriatelgede kogu. Siin on kolm ristuvat teist järku sümmeetriatelge ja neli kolmandat järku sümmeetriatelge. Pöörded kolmandat järku telgede ümber viivad teist järku teljed üle teineteiseks. Teist järku telgi võib vaadelda läbivatena kuubi vastastahkude keskpunkte, kolmandat järku telgi kuubi ruumdiagonaalidena (vt. joonis 13).



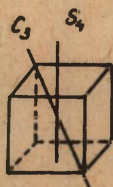
Joon. 13

Teist järku teljed on ekvivalentsed. Kolmandat järku teljed on samuti ekvivalentsed, kuna pöörded C_2 viivad nad üle teineteiseks, kuid nad ei ole kahepoolsed. 12 rühma T elementi jagunevad järgmiselt nelja klassi: E , kolm pööret C_2 , neli pööret C_3 , neli pööret C_3^2 .

9. Rühm T_d .

See rühm sisaldab kõik tetraedri sümmeetriateisendused. Ta telgede ja sümmeetriatasandite süsteemi saame, lisades rühma T telgedele sümmeetriatasandid, millest igaüks läbib üht teist järku ja kaht kolmandat järku telge. Analoo吉利-

selt rühmaga D_{2d} muutuvad teist järku teljed seejuures neljandat järku peegeldus-pöördetelgedeks. Kuus sümmeetria-tasandit läbiksid siis kaht kuubi vastasserva (vt. joonis 14).

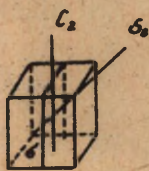


Joon. 14

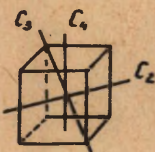
Sümmeetriatasandid on vertikaalse- teks kolmandat järku telgede suhtes ja viimased muutuvad nüüd kahepool- seteks. Vastavad sümmeetriateljed ja tasandid on kõik ekvivalenteed. Rüh- ma T_d 24 elementi jagunevad 5 klassiks järgnevalt: E, kaheksa pööret C_3 ja C_3^2 , kuus peegel- dust, kuus peegeldus-pöördetsen- dust S_4 ja S_4^3 , kolm pööret $C_2 = S_4^2$.

10. Rühm T_h .

Selle rühma saame rühmast T , lisades sümmeetriatsent- ri $T_h = T \times C_1$. Seetõttu saame kolm ristuvat sümmeetria- tasandit, millest igaüks läbib kahte teist järku telge. Kol- mandat järku sümmeetriateljed muutuvad kuundat järku pee- gelduspöördetelgedeks (vt. joonis 15). Rühmas on 24 elemen- ti, mis jagunevad 8 klassiks, viimased tulenevad otseselt rühma T klassidest.



Joon. 15



Joon. 16

11. Rühm O .

Rühma O sümmeetriatelgedeks on kuubi sümmeetriatelgedede süsteem: kolm neljandat järku telge läbi kuubi vae- tastahkude tsentrite, neli kolmandat järku telge läbi vastastippude ja kuus teist järku telge läbi vastas- külgede tsentrite (vt. joonis 16). Kõik sama järku teljed on ekvivalent- sed ja kahepoolsed. 24 rühma O ele- menti jagunevad viide klassi: E, kaheksa pööret C_3 ja C_3^2 , kuus pööret C_4 ja C_4^3 , kolm pööret C_2 , kuus pööret C_2 .



Joon. 17

12. Rühm O_h .

Rühm O_h on kuubi kõigist sümmeetriateisendustest koosnev rühm, me saame ta rühmast O sümmeetriatsentri lisamisel $O_h = O \times C_2$. Rühma O kolmandat järku sümmeetriateljed muutuvad nüüd kuueandat järku peegelduspöordetelgedeks. Lisaks saame veel kuus sümmeetriatasandit, mis läbivad kuubi vastasservi, ja kolm sümmeetriatasandit, mis on paralleelsed kuubi tahkudega (vt. joonis 17). 48 rühma O_h elementi jagunevad 10 klassi. Esimesed 5 klassi ühtivad rühma O klassidega, edasi järgnevad: I, kaheksa peegeldus-pöördeteisendust S_6 ja S_6^5 , kuus peegelduspöördeteisendust $C_4\sigma_h$, $C_4^3\sigma_h$ neljandat järku telje ümber, kolm peegeldust σ_h horisontaaltasandis neljandat järku telgede suhtes, kuus peegeldust σ_h vertikaaltasandis nende telgede suhtes.

IV. ESITUSTE TEORIA.

§ 13. Rühmade esitamine.

Rühmateooria rakendamisel tekib vajadus mitmesuguste operatsioonide teostamiseks rühma elementidega ning viimaste mõju uurimiseks füüsikalise süsteemi omadusi kirjeldavatele funktsioonidele. Seetõttu on otstarbekohane anda rühma elementidele ülevaatlik ning konkreetne matemaatiline kuju. Me kasutame siin rühmade isomorfisust, arvestades, et sümmeetriateisendusele vastab teatud koordinaadistiku lineaarteisendus. Mingile sümmeetriarühmale me seame vastavusse temaga isomorfse maatriksite rühma. Operatsioonid rühma elementidega taanduvad operatsioonidele maatriksitega, s.t. maatriksalgebra rakendamisele.

Vaatleme mingit sümmeetriarühma G . Selle rühma elementidele G_1 vastavad koordinaatide teisendused - sümmeetriateisendused. Olgu ψ füüsikalist süsteemi kirjeldav ühene koordinaatide funktsioon (füüsikalise süsteemi konfiguratsi-

oonruumis). Ψ võib olla näiteks lainefunktsiooni omadustega. Igal koordinaadistiku teisendusel, s.t. sümmeetriarühma \underline{G} elemendi rakendamisel teiseneb Ψ mingiks uueks funktsiooniks. Kui rühmas \underline{G} on g elementi, siis rakendades neid järjest, saame

$$\begin{aligned} G_1 \Psi &= \Psi_1 \\ G_2 \Psi &= \Psi_2 \\ \dots &\dots \\ G_g \Psi &= \Psi_g \end{aligned}$$

Kokku me saame g uut funktsiooni, nende hulgas ka endise Ψ (kuna \underline{G} sisaldab ühikelemendi). Kõik need funktsioonid ei pruugi olla lineaarselt sõltumatud. Olgu nendest g funktsioonist f tükki lineaarselt sõltumatud; rakendades nendele funktsioonidele Ψ_1, \dots, Ψ_f uuesti rühma \underline{G} elemente, me saame tagasi endised funktsioonid, ainult teises järjekorras. See on tingitud sellest, et kahe rühma elemendi korrutis (näit. $G_2 \Psi_1 = G_2 G_1 \Psi = G_k \Psi$) on jällegi rühma element. Seega teisenevad funktsioonid $\Psi_i (i = 1, \dots, f)$ sümmeetriarühma elementidele vastavate koordinaatteisenduste korral lineaarselt teineteise kaudu

$$\Psi_i' = \sum_k G_{ki} \Psi_k. \quad (13.1)$$

G_{ki} on konstandid, mis on määratud antud teisendusega. G_{ki} -de kogu, mis vastab antud teisendusele, moodustab antud teisenduse maatriksi.

Rühma elemente võib vaadelda operaatoritena, mis mõjuvad funktsioonidele Ψ_i

$$\Psi_i' = \hat{G} \Psi_i = \sum_k G_{ki} \Psi_k, \quad (13.2)$$

ja nende mõju võib uurida selle mõju taustal, mida avaldavad koordinaatteisendustele vastavad maatriksid aluseks võetud funktsioonisüsteemile.

Kuna funktsioonid $\Psi_i (i = 1, \dots, f)$ on lineaarselt sõltumatud, siis võime vaadelda neid ortonormeeritud süsteemina (kui see ei ole nii, siis on ortonormeerimine alati lä-

biviidav). Ortonormeeritud funktsioonisüsteemi ψ_i korral on aga maatriksil G_{ik} samad omadused nagu maatriksitel kvantmehaanikas. Nimelt, (13.2)-st leiame

$$G_{ki} = \int \psi_k^* \hat{G} \psi_i d\tau, \quad (13.3)$$

kus $d\tau$ on ruumielement.

Kahe rühma elemendi korrutisele vastab maatriks

$$(\hat{G}\hat{H})_{ki} = \sum_s G_{ks} H_{si}. \quad (13.4)$$

Rühma kõigile elementidele vastavate maatriksite kogu nimetatakse rühma esituseks. Funktsioone ψ_1, \dots, ψ_f , mille abil määratakse need maatriksid, nimetatakse esituse baasiks. Nende funktsioonide arv f määrab esituse dimensiooni.

Kuna rühma elementidele võib vastavusse seada mitmesuguseid maatrikseid, siis võib rühmal olla rida esitusi.

Vaatleme lähemalt esituse maatriksite omadusi.

Integraal $\int |\psi|^2 d\tau$ ei muutu mingi sümmeetriateisenduse korral, kuna integreerimine toimub üle kogu ruumi. Seepärast

$$\int (\hat{G}^* \psi^*) (\hat{G} \psi) d\tau = \int \psi^* \psi d\tau.$$

Tuues sisse transponeeritud operaatori \tilde{G} , saame

$$\int (\tilde{G}^* \psi^*) (\hat{G} \psi) d\tau = \int \psi \tilde{G} \hat{G}^* \psi^* d\tau = \int \psi^* \psi d\tau$$

kust ψ meelevaldsuse tõttu järgneb $\tilde{G} \hat{G}^* = 1$, ehk

$$\tilde{G}^* = \hat{G}^* = \hat{G}^{-1}. \quad (13.5)$$

See tähendab, et konjugeeritud operaator \hat{G}^* võrdub \hat{G} pöördoperaatoriga. Maatriks \hat{G} osutub niisiis unitaarseks. Maatriksvormis $(G_{kl})^* = G_{lk}^* = G_{kl}^{-1}$ ja

$$\sum_l G_{li}^* G_{lk} = \delta_{ik}. \quad (13.6)$$

Sümmeetriarühma esitus, mis teostatakse ortonormeeritud baasifunktsioonide süsteemi abil, on unitaarne, s.t. rühma elemente esitavad maatriksid on unitaarsed.

Mingi lineaarteisenduse \hat{S} abil me võime funktsioonisüsteemi ψ_1, \dots, ψ_f asemele saada uue funktsioonisüsteemi

ψ_1', \dots, ψ_f' , s.t. üle minna uuele esituse baasile

$$\psi_1' = \sum_k S_{k1} \psi_k, \quad \text{või} \quad \psi_1' = \hat{S} \psi_1. \quad (13.7)$$

ψ_1' abil me saame endise dimensiooniga uue rühma esituse, s.t. rühma elementidele vastavad operaatorid on samad, kuid muutuvad neid esitavad maatriksid ja baasifunktsioonid. Esitusi, mille baasid on saadud teineteisest lineaartehenduse teel, nimetatakse ekvivalentseteks. Lelame, kuidas on seotud ekvivalentsete esituste maatriksid. Selleks paneme tähele, et

$$\psi_1 = \sum_k S_{k1}^{-1} \psi_k' \quad (13.8)$$

ja rakendades (13.7) mõlemale poolele operaatorit \hat{G} , saame

$$\hat{G} \psi_1' = \sum_k S_{k1} \hat{G} \psi_k = \sum_{k,l} S_{k1} \hat{G}_{lk} \psi_l = \sum_{k,l,m} S_{k1} \hat{G}_{lk} S_{ml}^{-1} \psi_m' = \sum_m (\hat{S}^{-1} \hat{G} \hat{S})_{m1} \psi_m'.$$

Seega uues esituses oleks operaatorile \hat{G} vastav maatriks võrdne operaatori

$$\hat{G}' = \hat{S}^{-1} \hat{G} \hat{S} \quad (13.9)$$

maatriksiga vanas esituses.

Kui me tahame, et uue esituse baas oleks ortonormeeritud, peab teisendus \hat{S} olma unitaarne. Tõepoolest, asendades (13.7) tingimusse $\int \psi_1'^* \psi_k' d\tau = \delta_{ik}$, saame

$$\sum_{l,m} \int S_{li}^* \psi_l'^* S_{mk} \psi_m' d\tau = \sum_{l,m} S_{li}^* S_{mk} \delta_{ml} = \sum_l S_{li}^* S_{lk} = \delta_{ik}.$$

Rühma elemendi G karakteriks $\chi(G)$ nimetatakse elementi G esitava maatriksi diagonaalelementide summat (maatriksi jälg kvantmehaanikas). Osutub, et ekvivalentsete esituste maatriksite karakterid on võrdsed. Tõestuseks arvutame maatriksi \hat{G}' (13.9) karakteri

$$\chi(G') = \sum_i G'_{ii} = \sum_{i,k,l} S_{ik}^{-1} G_{kl} S_{li} = \sum_{k,l} G_{kl} \delta_{kl} = \sum_k G_{kk},$$

ehk

$$\chi(G') = \chi(G). \quad (13.10)$$

Esitusi on seetõttu otstarbekohane kirjeldada karakterite kaudu. Kuna ekvivalentsete esituste karakterid on võrdsed, siis on kergesti võimalik eraldada tõepoolest erinevaid esitusi ekvivalentsetest. Erinevate esituste all me mõistame ikka mitteekvivalentseid esitusi.

Teisendus \hat{S} valemis (13.9) võis olla meelevaldne unitaarne teisendus, sealhulgas ka rühma elemendile vastav teisendus. Viimasel juhul tähendaks seos

$$\hat{G}' = \hat{S}^{-1} \hat{G} \hat{S}$$

elementide G' ja G konjugeeritust ning G' ja G kuulumist ühte klassi. Me jõuame tähtsale järeldusele: ühte klassi kuuluvate elementide karakterid on võrdsed. Rühma ühikelemendile vastab samasusteisendus $E\psi = \psi$. Seepärast on E -d esitav maatriks igas esituses diagonaalne ja diagonaalelemendid on ühed (ühikmaatriks). Ühikmaatriksi karakter võrdub aga esituse dimensiooniga. Seega

$$\chi(E) = f. \quad (13.11)$$

§14. Taandamatud esitused ja nende omadused.

Vaatleme rühma f -dimensionaalse esituses. Viies läbi lineaarteisenduse (13.7), võivad baasifunktsioonid jaguneda f_1, f_2, \dots funktsiooni hulkadeks, rii et rühma kõigi elementide rakendamisel teisenevad iga hulga funktsioonid ainult teineteise kaudu, jättes puutumata funktsioonid teistest hulkadest. Sellist esitust nimetatakse taanduvaks.

Kui aga üksteise kaudu teisenevate baasifunktsioonide arvu ei saa vähendada mingi lineaarteisenduse abil, siis öeldakse, et nende funktsioonide poolt teostatav esitus on taandamatu.

Taanduva esituse baasifunktsioonide teatud lineaarteisendus jaotab baasifunktsioonid reaks funktsioonide kogudeks. Rühma elementide rakendamisel teiseneb iga selline kogu vastavalt mingile taandamatule esitusele. Kui osutub, et seejuures mitu erinevat funktsioonide kogu teiseneb vastavalt ühele taandamatule esitusele, öeldakse, et taandamatu esitus sisal-

dub taanduvas vastav arv kordi.

Taandamatud esitused on tähtsateks rühma iseloomustavateks näitajateks ja eriti olulised rühmateooria kvantmehaanilistes rakendustes. Vaatleme mõningaid taandamatute esituste omadusi, jättes ära keerulisemad tõestused.

Rühma taandamatute esituste arv võrdub klasside arvuga r rühmas. Rühma elemendi $G_{(\alpha)1}$ karakteri taandamatus esituses number α tähistame $\chi(G)$. Taandamatute esituste maatrikselemendid rahuldavad mitmesuguseid ortogonaalsustingimusi:

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} = 0, \quad (14.1)$$

$\alpha \neq \beta$ eristavad kahte taandamatut esitust, summeerimine toimub üle kõigi rühma elementide. Mingi ühe taandamatu esituse korral

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\alpha)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{il} \delta_{km}, \quad (14.2)$$

kus g on rühma järk ja f_α -taandamatu esituse dimensioon. Nullist erinevaks osutub seega vaid maatrikselementide moodulite ruutude summa

$$\sum_G |G_{ik}^{(\alpha)}|^2 = \frac{g}{f_\alpha}.$$

Need kolm võrdust on ühendatavad:

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{km}. \quad (14.3)$$

Sellest valemist võime leida tähtsa ortogonaalsuse seose taandamatute esituste karakterite jaoks. (14.3)-st saame erijuhul

$$\sum_G G_{il}^{(\alpha)} G_{il}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{il}.$$

Summeerides selle võrduse mõlemaid pooli i ja l järgi, saame

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)*}(G) = g \delta_{\alpha\beta}. \quad (14.4)$$

$\alpha = \beta$ korral leiame

$$\sum_G |\chi^{(\alpha)}(G)|^2 = g, \quad (14.5)$$

s.t. taandamatu esituse karakterite moodulite ruutude summa võrdub rühma järguga. Seos (14.5) kõlbab esituse taandamatu-se kriteeriumiks. Taanduva esituse korral on see summa suurem g -st ja nimelt võrdne ng , kus n on temas sisalduvate taandamatute esituste arv.

§ 15. Taanduva esituse lahutamine taandumatuteks esitusteks.

Kui on teada taanduva esituse ja taandamatute esituste karakterid, on taanduva esituse lahutamine taandamatuteks hõlpsasti teostatav.

Olgu $\chi(G)$ mingi f -dimensionaalse taanduva esituse karakterid ja sisaldagu see esitus taandamatuid esitusi 1, 2, ... r , mis esinevad vastavalt $a^{(1)}$, $a^{(2)}$, ..., $a^{(r)}$ korda. Siis

$$\sum_{\beta=1}^r a^{(\beta)} f_{\beta} = f, \quad (15.1)$$

kus f_{β} tähistab taandamatute esituste dimensioone ja taanduva esituse karakterid on kirjutatavad kujus

$$\chi(G) = \sum_{\beta=1}^r a^{(\beta)} \chi^{(\beta)}(G). \quad (15.2)$$

Korrutame selle võrduse mõlemad pooli $\chi^{(\alpha)}(G)^*$ -ga ja summeerime üle kõigi rühma elementide. Arvestades (14.4), saame

$$a^{(\alpha)} = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G) \chi^{(\alpha)}(G)^*. \quad (15.3)$$

See valem ongi eeskirjaks mingi esituse lahutamisel taandamatuteks esitusteks.

Vaatleme nüüd esitust, mille dimensioon f võrdub rühma järguga g ja mida teostavad g funktsiooni $\bar{G}\psi$. Sellist esitust nimetatakse regulaarseks. Regulaarses esituses omab diagonaalelemente vaid ühikelemendile vastav maatriks

(vastasel korral peaks olema täidetud tingimus $G_1 G_k \psi = G_k \psi$, mis on võimalik vaid ühikelemendi jaoks). Seepärast $\chi(G) = 0$ kui $G \neq E$ ja $\chi(E) = g$. Selle esituse lahutamisel taandamatuteks esitusteks saame (15.3)-st $a^{(\alpha)} = \frac{1}{g} g f^{(\alpha)} = f^{(\alpha)}$, s.t. iga taandamatu esitus sisaldub regulaarses niimitu korra, kui suur on ta dimensioon. Asendades $a^{(\alpha)} = f^{(\alpha)}$ valemisse (15.1), leiame

$$f_1^2 + f_2^2 + \dots + f_r^2 = g. \quad (15.4)$$

Taandamatute esituste dimensioonide ruutude summa võrdub rühma järguga. Punktühikutes on see tingimus antud r ja g korral täidetav vaid ühesel viisil (f_r on muidugi täisarvud).

Erijuhul Abeli rühmade jaoks, kus $r = g$, järeldame, et kõik taandamatud esitused on ühemõõtmelised ($f_1 = \dots = f_r = 1$).

Taandamatute esituste dimensioonid on rühma järgu jagajateks.

Iga rühma taandamatute esituste hulgas on üks triviaalne, mida teostab üks kõigi rühma teisenduste suhtes invariantne baasifunktsioon. Kõik karakterid on selles esituses võrdsed ühega. Tegemist on nn. ühikesitusega.

§16. Esituste korrutamine.

Vaatleme kahte erinevat funktsioonide süsteemi

$$\psi_1^{(\alpha)}, \dots, \psi_{f_\alpha}^{(\alpha)} \quad \text{ja} \quad \psi_1^{(\beta)}, \dots, \psi_{f_\beta}^{(\beta)},$$

mis teostavad rühma kahte taandamatut esitust. Võttes korrutised $\psi_i^{(\alpha)} \psi_k^{(\beta)}$ ($i = 1, \dots, f_\alpha; k = 1, \dots, f_\beta$), me saame uue funktsioonisüsteemi, milles on $f_\alpha \cdot f_\beta$ funktsiooni. Selle süsteemi võime võtta rühma uue $f_\alpha f_\beta$ -dimensionaalse esituse baasiks. Saadud esitust nimetatakse taandamatute esituste α ja β otsekorrutiseks, ta osutub taandamatuks vaid siis, kui f_α või f_β võrdub ühega. Leiame nüüd otsekorrutise karakterid. Kui

$$\hat{G}\psi_1^{(\alpha)} = \sum_l G_{1l}^{(\alpha)} \psi_l^{(\alpha)}, \quad \hat{G}\psi_k^{(\beta)} = \sum_m G_{mk}^{(\beta)} \psi_m^{(\beta)}, \quad \text{siis}$$

$$\hat{G}\psi_1^{(\alpha)} \psi_k^{(\beta)} = \sum_{l,m} G_{1l}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)} \psi_l^{(\alpha)} \psi_m^{(\beta)},$$

ehk

$$\hat{G}\psi_{ik}^{(\alpha\beta)} = \sum_{l,m} (G^{(\alpha)} \times G^{(\beta)})_{lm,ik} \psi_{lm}^{(\alpha\beta)}, \quad \text{kus} \quad (16.1)$$

$$\psi_{ik}^{(\alpha\beta)} = \psi_1^{(\alpha)} \psi_k^{(\beta)}, \quad (G^{(\alpha)} \times G^{(\beta)})_{lm,ik} = G_{1l}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)}.$$

Seega me näeme, et uues esituses osutub rühma elemendile \hat{G} vastav maatriks esituste α ja β vastavate maatriksite otsekorrutiseks $G_{1l}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)}$. Selle maatriksi elemendid saame, korrutades igat elementi esimesest maatriksist iga elemendiga teisest maatriksist. Neid korrutisi on $(f_\alpha f_\beta)^2$ tükki, maatriks seega $f_\alpha f_\beta$ -dimensionaalne. Indeksitapaar (lm) tähistab uue maatriksi ridu ja (ik) veergusid.

Kirjutame näiteks välja järgmise maatriksite otsekorrutise

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} =$$

(1m)

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{13}b_{11} & a_{13}b_{12} & (11) \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{13}b_{21} & a_{13}b_{22} & (12) \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{23}b_{11} & a_{23}b_{12} & (21) \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{23}b_{21} & a_{23}b_{22} & (22) \\ a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{33}b_{11} & a_{33}b_{12} & (31) \\ a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{33}b_{21} & a_{33}b_{22} & (32) \end{pmatrix}$$

$$(ik) \quad (11) \quad (12) \quad (21) \quad (22) \quad (31) \quad (32)$$

Otsekorrutise karakteri tähistame $(\chi^{(\alpha)} \times \chi^{(\beta)})(G)$,
 tema leidmiseks tuleb (16.1)-s teha $l = i$ ja $m = k$:

$$(\chi^{(\alpha)} \times \chi^{(\beta)})(G) = \sum_{i,k} G_{ii}^{(\alpha)} G_{kk}^{(\beta)} = \sum_i G_{ii}^{(\alpha)} \sum_k G_{kk}^{(\beta)}.$$

Seega võrduvad otsekorrutise karakterid vastavate esituste karakterite korrutisega

$$(\chi^{(\alpha)} \times \chi^{(\beta)})(G) = \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)}(G). \quad (16,2)$$

Erijuhul võivad mõlemad korrutatavad taandamatud esitused ühtida. Meil oleks siis tegemist kahe funktsioonide koriga ψ_1, \dots, ψ_f ja $\varphi_1, \dots, \varphi_f$, mis teostavad sama taandamatu esituse. Esituse otsekorrutise iseendaga teostavad f^2 funktsiooni $\psi_i \varphi_k$ ning vastavad karakterid on

$$(\chi \times \chi)(G) = [\chi(G)]^2.$$

Saadud esituse võib jaotada kaheks väiksema dimensiooniga esituseks, viimased võivad üldiselt olla veel ikkagi taanduvad. Ühte neist teostavad $\frac{f(f+1)}{2}$ funktsiooni $\psi_i \varphi_k + \psi_k \varphi_i$ ja teise - $\frac{f(f-1)}{2}$ funktsiooni $\psi_i \varphi_k - \psi_k \varphi_i$ ($i \neq k$). On ju selge, et kummassegi süsteemi kuuluvad funktsioonid teisenevad ainult teineteise kaudu. Esimest nimetatakse esituse sümmeetriliseks korrutiseks iseendaga (tema karaktereid tähistatakse $[\chi]^2(G)$) ja teist - antisümmeetriliseks (karaktereid tähistatakse $\{\chi\}^2(G)$).

Sümmeetrilise korrutise karakterite arvutamiseks kirjutame

$$\begin{aligned} \hat{G}(\psi_i \varphi_k + \psi_k \varphi_i) &= \sum_{l,m} G_{il} G_{km} (\psi_l \varphi_m + \psi_m \varphi_l) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l,m} (G_{il} G_{km} + G_{im} G_{kl}) (\psi_l \varphi_m + \psi_m \varphi_l). \end{aligned}$$

Karakterid leiame siit

$$[\chi]^2(G) = \frac{1}{2} \sum_{i,k} (G_{il} G_{kk} + G_{ik} G_{ki}).$$

Arvestades, et $\sum_i G_{ii} = \chi(G)$ ja $\sum_{i,k} G_{ik} G_{ki} = \chi(G^2)$, saame

lõplikult

$$[\chi]^2 G = \frac{1}{2} \{ [\chi(G)]^2 + \chi(G^2) \}. \quad (16,3)$$

Analoogiliselt leiame antisümmeetrilise korrutise karakterite jaoks valemi

$$[\chi^2](G) = \frac{1}{2} \{ [\chi(G)]^2 - \chi(G^2) \}. \quad (16,4)$$

Kui funktsioonid ψ_i ja φ_i langevad ühte, on nende abil määratav vaid sümmeetriline korrutis, mida teostavad ψ_i^2 ja korrutised $\psi_i \psi_k$ ($i \neq k$).

Sageli tekib vajadus meelevaldse funktsiooni ψ esitamiseks vastavalt rühma taandamatutele esitustele teisenevate funktsioonide summana, s.t. kujus

$$\psi = \sum_{\alpha} \sum_i \psi_i^{(\alpha)} \quad (16,5)$$

kus funktsioonid $\psi_i^{(\alpha)}$ ($i=1, \dots, f_{\alpha}$) teisenevad vastavalt α -ndale taandamatule esitusele. Ulesanne taandub funktsioonide $\psi_i^{(\alpha)}$ leidmisele antud ψ abil ja ta lahenduseks on

$$\psi_i^{(\alpha)} = \frac{f_{\alpha}}{g} \sum_G G_{ii}^{(\alpha)*} \hat{G} \psi. \quad (16,6)$$

Valemi (16,6) õigsuses veendumiseks asetame siia ψ (16,5) järgi ning arvestame taandamatute esituste maatriksite ortogonaalsuse omadusi (14,3):

$$\begin{aligned} \frac{f_{\alpha}}{g} \sum_G G_{ii}^{(\alpha)*} \hat{G} \sum_{\beta} \sum_k \psi_k^{(\beta)} &= \frac{f_{\alpha}}{g} \sum_{\beta} \sum_{k,1} \sum_G G_{ii}^{(\alpha)*} G_{1k}^{(\beta)} \psi_1^{(\beta)} = \\ &= \frac{f_{\alpha}}{g} \sum_{\beta} \sum_{1,k} \frac{g}{f_{\alpha}} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{1k} \psi_1^{(\beta)} = \sum_k \delta_{1k} \psi_1^{(\alpha)} = \psi_1^{(\alpha)}. \end{aligned}$$

Asendades $\psi_1^{(\alpha)}$ valemist (16,6) avaldise (16,5) ja summeerides üle i , saame lihtsama avaldise meelevaldse funktsiooni ψ jaoks taandamatutele esitustele vastavate funktsioonide $\psi^{(\alpha)}$ kaudu (viimased ei kuulu juba mingi taandamatu esituse kindla rea juurde).

$$\psi = \sum_{\alpha} \psi^{(\alpha)}, \quad \psi^{(\alpha)} = \frac{f_{\alpha}}{g} \sum_G \chi^{(\alpha)}(G) \hat{G} \psi. \quad (16,7)$$

Lõpuks vaatleme, milliseid taandamatuid esitusi omab rühm C , mis ise on saadud kahe rühma A ja B otsekorrutise tulemusena, s.t. $C = A \times B$. Kui funktsioonid $\varphi_i^{(\alpha)}$ teostavad rühma A taandamatu esituse ja funktsioonid $\varphi_k^{(\beta)}$ rühma B taandamatu esituse, siis korrutatise $\varphi_i^{(\alpha)} \varphi_k^{(\beta)}$ on rühma $A \times B$ $f_\alpha f_\beta$ -dimensionaalse taandamatu esituse baasifunktsioonideks. Selle esituse karakterid saame vaatavate lähteestituste karakterite korrutamisel. Elemendile $C = AB$ rühmas $A \times B$ vastab karakter

$$\chi(C) = \chi^{(\alpha)}(A) \chi^{(\beta)}(B). \quad (16,8)$$

Korrutades niiviisi omavahel kõik rühmade A ja B taandamatud esitused, saame kõik rühma $A \times B$ taandamatud esitused.

§17. Punktrühmade taandamatud esitused.

Vaatleme nüüd konkreetset füüsikalist huvi pakkuvate sümmeetria punktrühmade taandamatuid esitusi. Molekulidel on põhiliselt vaid teist, kolmandat, neljandat ja kuuendat järku sümmeetriateljed. Seepärast vaatleme ainult järgmisi punktrühmi: $C_n, C_{nh}, C_{nv}, D_n, D_{nh}$ indeksi n väärtustega $n = 1, 2, 3$; ning lisaks veel T, T_d, T_h, O, O_h .

Punktrühmade taandamatute esituste karakterite arvutamiseks on olemas üldised meetodid, mille rakendamine on aga kaunis tülikas. Rühma klasside vahelistest seostest lähtuvad meetod on esitatud näiteks töös [2]. Meie vaatleme lihtsaimaid võimalusi.

Tsükliilise rühma korral on taandamatute esituste leidmine lihtne, sest nagu igal teiselgi Abeli rühmal, on nad kõik ühemõõtmelised. Olgu meil tegemist rühmaga C_n . Baasifunktsioonideks võime valida

$$\varphi = e^{ik\varphi} \quad k = 1 \dots g, \quad (17,1)$$

kus φ tähendab pöördenurka antud telje ümber. Neid funktsioone on parajasti g tükki, mis vastab taandamatute esitus-

te arvule (viimane võrdub siin rühma järguga). k erinevad väärtused $(17,1)$ -s annavad erinevate taandamatute esituste baasifunktsioonid. Pöördel nurga $\frac{2\pi}{g}l$ ($l = 1, \dots, g$) võrra (siin $g = n$) korrutatub funktsioon ψ teguriga $e^{\frac{2\pi i}{g}lk}$. Tõepoolest, olgu G tsüklilise rühma genereeriv element, s.t. ülejäänud rühma elemendid saame tema astendamisel. Ilmselt peab kehtima $G^g = E$, s.t. operaatori \hat{G} rakendamisel baasifunktsioonile võib viimane korrutada ainult $\sqrt[g]{1}$ -ga, seega

$$\hat{G}\psi = e^{\frac{2\pi i}{g}lk}\psi \quad (l, k = 1, \dots, g). \quad (17,2)$$

Tegur $e^{\frac{2\pi i}{g}lk}$ annabki meile rühma elementide karakterid taandamatutes esitustes. Indeks k eristab taandamatuid esitusi ja l erinevaid rühma elemente. Ühikesitusele vastab $k = g$, $l = 1, \dots, g$. Me kasutame edaspidi tähistusi $\epsilon = e^{\frac{2\pi i}{g}}$, $\omega = e^{\frac{2\pi i}{6}}$.

Isomorfsetel rühmal on samad taandamatud esitused, seepärast piisab vaid ühe rühma vaatlemisest nende hulgast.

Rühmaga C_{2h} on isomorfsed C_{2v} ja D_2 . Tegemist on Abeli rühmaga ning kõik taandamatud esitused on ühemõõtmelised. Neid on kaks korda rohkem kui rühmas C_2 , kuna esitused võivad olla sümmeetrilised ja antisümmeetrilised inversiooni suhtes. Kõik karakterid võrduvad ± 1 -ga, kuna iga elemendi ruut võrdub ühikelemendiga.

Rühmaga C_{3v} on isomorfe D_3 . Võrreldes rühmaga C_{3v} siin lisanduvad peegeldused σ_v , mis kuuluvad ühte klassi. Rühma C_3 esituse A baasifunktsioon võib olla sümmeetriline või antisümmeetriline peegelduste σ_v suhtes. Saame kaks ühemõõtmelist esitust. Rühma järk võrdub siin $g = 6$. Seega on ainuke võimalus, et lisandub veel üks kahemõõtmeline taandamatu esitus, kuna $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$. Selle esituse saame, valides baasiks rühma C_3 kahe viimase esituse baasifunktsioonid. Seejuures

$$\hat{C}_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon & \psi_1 \\ \epsilon^2 & \psi_2 \end{pmatrix}, \text{ st. } \hat{C}_3 = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{C}_3^2 = \begin{pmatrix} \epsilon^2 & 0 \\ 0 & \epsilon^4 \end{pmatrix}.$$

Kolmele peegeldusele vastavad maatriksid peavad olema sellised, et nende korrutised annaksid \hat{C}_3 või \hat{C}_3^2 . Nende kuju on

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \epsilon^2 \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix}.$$

Rühma C_{3v} esituses E saame seega karakteriteks $\chi(E) = 1$, $\chi(C_3) = -1$ ($\epsilon + \epsilon^2 = -1$) ja $\chi(C_2) = 0$.

Analoogiliselt leitakse rühmade C_{4v} ja C_{6v} taandamatud esitused.

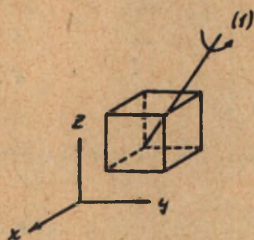
Vaatleme nüüd rühma T , mille saame rühmast D_2 , lisades sümmeetriselementidena pöörded nelja kolmandat järku telje ümber. Rühma D_2 esituse A baasifunktsioon korrutub pööretel 3-ndat järku telje ümber ϵ , ϵ^2 või $\epsilon^3 = 1$ -ga. Kolmandat järku teljed on ekvivalentzed. Esituse A asemel saame nüüd kolm ühemõtmelist taandamatut esitust (ühikesituse ja kaks kaaskompleksset esitust). Tingimusest $1 + 1 + 1 + x^2 = 12$ järgneb, et $x = 3$, s.t. peab olema veel üks kolmedimensionaalne taandamatu esitus. Selle me saame, võttes baasiks rühma D_2 esituste B_1 , B_2 ja B_3 baasifunktsioonid koos. Koordinaattelgi x, y, z võib vaadelda 2 järku telgedena, kolmandat järku teljed oleksid siis vastava kuubi diagonaalid. Esituse B_1 baasifunktsioon ei muutu pööretel x -telje ümber, kuid muudab märgi pööretel y ja z telje ümber. Siit saame pöörded C_2 esitavate maatriksite esimesed read. Uurides analoogiliselt esituste B_2 ja B_3 baasifunktsioone, saame

$$C_2^{(x)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(y)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(z)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Karakterid võrduvad - 1.

Vaatleme nüüd pöördeid kolmandat järku telgede ümber. Vaadeldavas esituses me võime baasifunktsioonideks võtta lihtsalt koordinaadid x, y, z . Pöördele $C_3^{(1)}$ vastab teinendus $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$, (vt. joonis 18) nii et

$$C_3^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$



Joon. 18

Tõepoolest,

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ z \\ x \end{pmatrix}.$$

Analoogiliselt leitakse ülejäänud maatriksite C_3 kujud. Vastavad karakterid on kõik nullid.

Elementidele C_3^2 vastavate maatriksite leidmine on nüüd lihtne. Näiteks,

$$\left(C_3^{(1)}\right)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ka siin on karakterid nullid.

Lõpuke vaatleme isomorfseid rühmi \underline{T} ja \underline{O} . Rühma \underline{T}_d saame rühmast \underline{T} , lisades peegeldused σ_d tasandites, millest iga üksik läbib kahte kolmandat järku telge. Rühma \underline{T} ühikesituse baasifunktsioon võib olla sümmeetriline või antisümmeetriline nende peegelduste suhtes, mis annab rühma \underline{T}_d jaoks kaks ühemõõtmelist esitust. Funktsioonid, mis korrutuvad ϵ või ϵ^2 -ga pööretel kolmandat järku telje ümber rühmas \underline{T} , lähevad üle teineteiseks peegelduse korral tasapinnas, mis läbib seda telge. Saame ühe kahemõõtmelise esituse. Lõpuke, rühma \underline{T} kolmemõõtmelisest esitusest saame kaks kolmemõõtmelist esitust rühma \underline{T}_d jaoks. Kokku saame

kaks ühemõttelist, ühe kahemõttelise- ja kaks kolmemõttelise-
list esitust, nii et tingimus $1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 = 24$
on täidetud.

Ülejäänud punktrühmade taandamatute esituste leidmine
on juba päris lihtne, arvestades, et need rühmad avalduvad
juba vaadeldud rühmade ning C_1 või C_3 otsekorrutistena.
Nimelt:

$$\begin{array}{lll}
 C_{3h} = C_3 \times C_3 & D_{2h} = D_2 \times C_1 & D_{6h} = D_6 \times C_1 \\
 C_{4h} = C_4 \times C_1 & D_{4h} = D_4 \times C_1 & T_h = T \times C_1 \quad (17,3) \\
 C_{6h} = C_6 \times C_1 & S_6 = C_3 \times C_1 & Q_h = Q \times C_1 .
 \end{array}$$

Igal sellisel otsekorrutisel on kaks korda rohkem taandama-
tuid esitusi võrreldes lähterühmaga. Pooled neist on sümmeet-
rilised -, pooled antisümmeetrilised inversiooni (või peegel-
duse C_3 korral) suhtes. Nende esituste karakterid saame
lähteasituse karakterite korrutamisel \pm 1-ga.

Saadud punktrühmade taandamatute esituste karakterid
on toodud lisa nr. 1.

Rühma elementide sümbolite ees seisvad arvud näitavad
elementide arvu vastavas klassis (tabelite veerud vastavad
erinevatele klassidele).

Ühedimensionaalseid esitusi tähistame A ja B -ga,
kahemõttelisi E -ga ja kolmemõttelisi F -ga.¹ Esituste
A baasifunktsioonid on sümmeetrilised - ja esituste B baas-
ifunktsioonid - antisümmeetrilised pöõretel rühma põhilise
sümmeetriatelje ümber. Peegelduse σ_h suhtes erineva süm-
meetriaga esitusi eraldame indeksitega "prim" ja "sekund".
Indeksid g ja u tähendavad vastavalt sümmeetriat ja an-
tisümmeetriat inversiooni suhtes. Nagu me hiljem näeme, tu-
leb füüsikalistest kaalutlustest vaadelda kahte kaaskomp-
lekset esitust koos ühe kaks korda suurema dimensiooniga
esitusena. x, y ja z esituse sümboli juures näitavad vasta-

¹ Rühma Q_h jaoks on toodud ka üks teine tähistusviis.

valt millisele taandamatule esitusele teisenevad koordinaadid iee. Põhilise sümmeetriatelje suunaks on kõikjal valitud z-telje suund.

V. RÜHMATEORIA JA KVANTMEHAANIKA.

§ 18. Taandamatud esitused ja termide klassifikatsioon.

Rühmateooria meetodid annavad lihtsa võimaluse füüsikalise süsteemi energiaseisundite klassifitseerimiseks.

Schrödingeri võrrand, mis kirjeldab vaadeldavat süsteemi, peab ilmselt olema invariantne selle süsteemi sümmeetriateisenduste suhtes. Tõepoolest, pärast sümmeetriateisenduse rakendamist saame oma süsteemi täpselt endisel kujul tagasi ning loomulikult ei saa midagi muutuda seda süsteemi kirjeldavas võrrandis, ja kui võrrandi kuju peakski muutuma, peab saadud võrrand olema täpselt samaväärne lähtevõrrandiga.

Olgu meil mingi vaadeldava süsteemi sümmeetriateisendus, millele vastava operaatori tähistame \hat{K} . Süsteemi Schrödingeri võrrand olgu

$$H\psi_{ni} = E_n\psi_{ni} \quad i = 1 \dots f. \quad (18,1)$$

Üldisuse mõttes me eeldame, et energia omaväärtus E_n on f-kordselt kordunud, s.t. talle vastab f erinevat omafunktsiooni, mis kuuluvad aga kõik ühele energiale E_n .

Rakendame nüüd (18,1) mõlemale poolele sümmeetriateisendust \hat{K}

$$\hat{K}(\hat{H}\psi_{ni}) = E_n\hat{K}\psi_{ni}. \quad (18,2)$$

Kuna võrrandid (18,1) ja (18,2) peavad olema samaväärsed, siis $\hat{K}\psi_{ni}$ peab andma energiaväärtusele E_n kuuluvate lainefunktsioonide ψ_{nk} ($k = 1 \dots f$) lineaarkombinatsiooni (a_{ik} on konstandid)

$$\hat{K}\psi_{ni} = \sum_k a_{ik}\psi_{nk}. \quad (18,3)$$

Valemite (18,1) ja (18,3) abil leiame

$$\hat{H}(\hat{K}\psi_{ni}) = \sum_k a_{ik}\hat{H}\psi_{nk} = E_n \sum_k a_{ik}\psi_{nk}$$

ning valemite (18,2) ja (18,3) järgneb teiselt poolt

$$\hat{K}(\hat{H}\psi_{ni}) = E_n \sum_k a_{ik}\psi_{nk}.$$

Võrreldes saadud tulemusi, näeme, et sümmeetriaoperaator kommuteerub hamiltoniaaniga

$$\hat{H}\hat{K} - \hat{K}\hat{H} = 0. \quad (18,4)$$

Seega on kehtiv võrrand

$$\hat{K}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{K}\psi) = E(\hat{K}\psi), \quad (18,5)$$

s.t. kui ψ on hamiltoniaani omafunktsioon omaväärtusel E , siis ka $\hat{K}\psi$ on samuti hamiltoniaani omafunktsiooniks samal energiaväärtusel.

Pärast sümmeetriarühma elementide rakendamist funktsioonile, mis rahuldab Schrödingeri võrrandit mingil energia omaväärtusel, saame uuesti selle võrrandi lahendi sama energiaga.

Niisiis, sümmeetriateisenduste korral (milliseid omab antud füüsikaline süsteem, loomulikult!) teisenevad statsionaarsete seisundite omafunktsioonid, mis kuuluvad samale energiaväärtusele, teineteise kaudu¹, s.t. moodustavad sümmeetriarühma mingi esituse baasi. On väga oluline, et see esitus on taandamatu.

Tõepoolest funktsioonid, mis teisenevad teineteise kaudu sümmeetriateisendustel, peavad igal juhul kuuluma samale energiaväärtusele; kuid omaväärtuste kokkulangemine mitmel funktsioonide rühmal (milleks võib lahutada taanduva esituse baasi), mis ei teisene teineteise kaudu, oleks täiesti eba-

¹ $\hat{K}\psi_{ni}$ tulemuseks võib olla kas sama funktsioon ψ_{ni} , mõni teine funktsioon ψ_{nk} kõdunud f funktsiooni hul-
gast või viimaste lineaarkombinatsioon (18,3). Esimesed kaks juhtu on (18,3) erijuhud.

töenäoline juhus (kui ainult selleks ei ole erilisi põhjusi).

Seega vastab igale süsteemi energianivoole mingi selle süsteemi sümmeetriarühma taandamatu esitus. Selle esituse dimensioon määrab energianivoo kõdumise astme (erinevate lainefunktsioonide arvu, mis kuuluvad samale energiale ja sümmeetriateisenduste korral teisenevad teineteise kaudu).

Spektroskoopias mõistetakse termine klassifitseerimise all kindlale energianivoole vastavate lainefunktsioonide sümmetriaomaduste leidmist. Lihtsa võimaluse selleks annab meile rühmateooria. Igale termile tuleb omistada mingi süsteemi taandamatu esituse indeks. Erineva sümmeetriaga termide liike võib olla nii palju, kui palju on sümmeetriarühmal taandamatuid esitusi. Kindla sümmeetriaga, kuid erinevaid terme võib aga süsteemil olla ilmselt rohkem kui üks. Antud termile vastavad lainefunktsioonid teisenevad sümmetriateisendustel nagu vastava taandamatu esituse baasifunktsioonid. Teades taandamatut esitust, teame automaatselt ka uuritava termi kõdumise kordsust. Termide eneste paigutuse leidmine (energeetilises skaalas) eeldab juba vastava Schrödingeri võrrandi lahendamist.

Mõningad märkused on vajalikud kaaskomplekssete lainefunktsioonide kohta. Probleem seisneb Schrödingeri võrrandi sümmeetrias aja märgi muutumise suhtes.

Nagu teada, on magnetvälja puudumise korral (süsteem võib asuda aga välises elektriväljas) Schrödingeri võrrand invariantne aja märgi muutmise suhtes. Vaatame algul spiniga 0 osakest - teda kirjeldab just Schrödingeri võrrand, kuna elektroni spini arvestab Diraci võrrand.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}. \quad (18,6)$$

Statsionaarsete olekute puhul on $\psi(x,t)$ ajast sõltuv osa eraldatav

$$\psi(x,t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x). \quad (18,7)$$

Muudame nüüd võrrandis (18,6) aja märgi, s.t. $t \rightarrow -t$.

Siis saame

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(x,t) + V(x)\psi^*(x,t) = -i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t}, \quad (18,8)$$

kus
$$\psi^*(x,t) = e^{\frac{iE}{\hbar}t} \psi(x).$$

Saadud võrrand (18,8) on aga identne selle võrrandiga, mille me saaksime (18,6)-st, võttes seal võrduse mõlemast poolest kaaskompleksse ja aja märki mitte muutes. Seega on võrrandid (18,6) ja (18,8) samaväärsed ning võrrand (18,6) invariantne aja märgi muutmise suhtes. Teisendus $t \rightarrow -t$ rakendatuna lainefunktsioonile tähendab $\psi \rightarrow \psi^*$.

Olgu meil lainefunktsioonide kogu, mis kuulub mingile hamiltoniaani ruumilise sümmeetria tõttu kõdunud energilaväärtusele ja teiseneb vastavalt taandamatule esitusele D . Mõjudes sellele funktsioonide hulgale aja märgi muutmise operaatoriga, me saame jällegi mingi funktsioonide hulga, mis kuulub samale kõdunud energilaväärtusele, kui hamiltoniaan on invariantne aja märgi muutmise suhtes. See uus funktsioonide hulk teiseneb vastavalt kaaskomplekssele esitusele D^* ja võib olla kas algfunktsioonide lineaarne kombinatsioon või neist lineaarselt sõltumatu. Viimasel juhul oleks tegemist täiendava kõdumisega. Siin on võimalikud järgmised juhud:

- D ja D^* on mõlemad ekvivalentseid ühe reaalse taandumatu esitusega,
- D ja D^* on mitteekvivalentseid,
- D ja D^* on ekvivalentseid, kuid neid ei saa korraga teha reaalseks.

Uurimine näitab, et juhul a) täiendavat kõdumist ei ole, juhul b) kõdumise aste kahekordistub ja esitused D ja D^* vastavad samale energilaväärtusele. Juhul c) kahekordistub kõdumise kordsus.

Niisiis, kui ψ ja ψ^* moodustavad erinevate taandamatute esituste baasi ja süsteemi hamiltoniaan on invariantne teisenduse $t \rightarrow -t$ suhtes, tuleb neid kahte esitust vaadelda koos kui üht kaks korda suurema dimensiooniga esitust.

Millise juhuga a), b), c) on meil tegemist, võib kindlaks teha valemi abil

$$\sum_R \chi(G^2) = \begin{cases} g & \text{juht a)} \\ 0 & \text{juht b)} \\ -g & \text{juht c)}, \end{cases} \quad (18,9)$$

kus g on rühma järk ja $\chi(G^2)$ sümmeetriarühma elemendi ruudu karakter uuritavas taandamatus esituses D .

Poolarvulise spiniga osakeste korral on situatsioon veidi erinev. Lainefunktsioonideks on siin spinorid ja teisedusele $t \rightarrow -t$ ei vasta lihtsalt kaaskompleksse võtmine. $t \rightarrow -t$ -le vastab siin operaator, mis = spinori viimine kaaskompleksseks $\chi \hat{s}_y$, kus \hat{s}_y on üks Pauli maatriksitest.

Lähem uurimine näitab, et kõdumise kordsus kahekordistub nüüd juhtudel a) ja b), kuid mitte juhul c). Kui hamiltoniaan on invariantne aja märgi muutmise suhtes, on iga energianivoo igatahes vähemalt kahekordselt kõdunud ja seda kõdumist ei ole võimalik kaotada mingi välise elektriväljaga. Viimane tulemus on tuntud Kramersi teoreemi nime all.¹

Nii $s = 0$ kui ka $s = \frac{1}{2}$ korral jätab teisendus $t \rightarrow -t$ muutmatuks kõigi koordinaatide märgid, kuid muudab märgid vastupidiseks kõikidel momentidel.

Kui magnetväli on nullist erinev, puudub sümmeetria-teisenduse $t \rightarrow -t$ suhtes ning ψ ja ψ^* kuuluvad erinevatele energiatele.

§ 19. Termide lõhenemine.

Vaatleme nüüd termide lõhenemise probleemi. Süsteemi sümmeetria muutumisel muutub ka energianivoode klassifikatsioon. Veelgi enam, võib muutuda termide kõduvuse aste. Kui see väheneb, on meil tegemist termide lõhenemisega.

¹ Me ju teame, et antud kvantarvudega n, l ja m võivad sama energiat omada (magnetiliste mõjude puudumise korral) kaks elektroni ($s = \frac{1}{2}$), mis erinevad oma spinide projektsiooni poolest z -teljele.

Mõjugu mingi häiritus, millele vastab operaator \hat{V} , meie lähtesüsteemile, mille hamiltoniaan on \hat{H}_0 . Häirituks võib olla mingi väline väli, näiteks kristalli väli liisandi aatomi korral kristallis jne.

Häiritud süsteemi hamiltoniaaniks on

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (19,1)$$

Kui häirituse \hat{V} sümmeetria on sama nagu häirimata süsteemil või kõrgem, langeb häiritud süsteemi sümmeetria kokku \hat{H}_0 sümmeetriaga ning mingit termide lõhenemist ei toimu.

Kui aga häirituse sümmeetria on madalam kui \hat{H}_0 -i sümmeetria (vastates mingile häirimata süsteemi sümmeetriarühma alamrühmale), on häiritud süsteemi sümmeetria määratud häirituse \hat{V} sümmeetriaga.

Lainefunktsioonid, mis teostasid häirimata süsteemi sümmeetriarühma taandamatu esituse, annavad ka nüüd mingi esituse \hat{H} -le vastava madalama sümmeetriarühma jaoks, kuid see esitus võib juba osutada taanduvaks. Viimane asjaolu tähendabki kõdunud termide lõhenemist süsteemi sümmeetria alanemisel.

Kui häirituse \hat{V} sümmeetriarühm ei ole \hat{H}_0 sümmeetriarühma alamrühmaks, tuleb seisundeid vahetult klassifitseerida vastavalt \hat{H} -sümmeetriarühmale ning uute termide vahetu seostamine \hat{H}_0 termidega ei ole võimalik.

Termide lõhenemise uurimiseks, s.t. uue termide pildi leidmiseks tuleb lähterühma taandamatu esitus lahutada häirituse sümmeetriarühma taandamatuteks esitusteks. See taandamisprotsess on teostatav meile karakterite teooriast tuntud valemi (15,3) abil:

$$a^{(\alpha)} = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G) \chi^{(\alpha)}(G)^*.$$

Siin tähendab $\chi(G)$ rühma elemendi karakterit taandavas esituses, ta langeb lihtsalt kokku \hat{V} sümmeetriarühma elemendi karakteriga \hat{H}_0 esituses, millele vastab uuritav häirimata süsteemi energianivoo. $\chi^{(\beta)}(G)$ on \hat{V} sümmeetriarühma taandamatu esituse β karakterid. $a^{(\alpha)}$ näitab, mi-

tu korda vastav taandamatu esitus esineb taanduvas ning määrab seega termide lõhenemise pildi. Kui ainult üks $a^{(\alpha')} = 1$ ning kõik teised $a^{(\alpha')} = 0$, ei toimu lõhenemist. g on rühma järk.

Vaatleme mõningaid näiteid.

1. Kuidas lõheneb kolmekordselt kõdunud energianivoo, mis vastab sümmeetriarühma T_d taandamatule esitusele F_2 häirituse mõjul, mille sümmeetria on C_{3v} ?

Rühma C_{3v} elementide karakterid taanduvas esituses, mis vastab T_d taandamatule esitusele F_2 on (vt. vastavaid karakterite tabeleid lisas nr. 1)

	E	$2C_3$	$3C_2$
$\chi(G)$	3	0	1

Taandame selle esituse:

$$a(A_1) = \frac{1}{6}(1 \cdot 3 + 2 \cdot 0 + 3 \cdot 1) = 1$$

$$a(A_2) = \frac{1}{6}(3 + 0 - 3) = 0$$

$$a(E) = \frac{1}{6}(6 + 0 + 0) = 1$$

Seega me oleme leidnud, et $F_2 = A_1 + E$.

Esialgsest kolmekordselt kõdunud term lõheneb nüüd kaheks: kõdumata termiks A_1 ning kahekordselt kõdunud termiks E . Täiel määral kõdumine ei kao.

2. Eelmine ülesanne kui häirituse sümmeetria on madalam s.o. C_{2v} .

Analoogiliselt eelmise ülesandega saame

	E	C_2	σ_v	σ_v'
$\chi(G)$	3	-1	1	1

$$a(A_1) = \frac{1}{4}(3 - 1 + 1 + 1) = 1$$

$$a(B_2) = \frac{1}{4}(3 + 1 - 1 + 1) = 1$$

$$a(A_2) = \frac{1}{4}(3 - 1 - 1 - 1) = 0$$

$$a(B_1) = \frac{1}{4}(3 + 1 + 1 - 1) = 1$$

$$\text{ja } F_2 = A_1 + B_1 + B_2.$$

Sümmeetria C_{2v} korral toimub juba T_d kolmekordselt kõdunud termi täielik lõhenemine. Seda tulemust oleks olnud kerge ette näha, kuna rühmal C_{2v} on vaid ühedimensionaalsed esitused, s.t. selle sümmeetria korral ei saa olla kõdumist.

20. Jäävuse seadused.

Teeme veel mõned märkused nn. jäävuse seaduste kohta. Nagu teada, tähendab mingi operaatori (mis ei sisalda aega ilmutatud kujul) kommuteerumine hamiltoniaaniga, et sellele operaatorile vastav füüsikaline suurus on ajas jääv. Seega annavad (18,4) tüüpi valemid meile mitmesuguseid jäävuse seadusi.

Vaadeldes ruumi ja aja (neliruumi) mitmesuguseid sümmeetriaomadusi, jõuame vastavatele jäävuse seadustele mitmesuguste füüsikaliste suuruste jaoks, kuna neid sümmeetria-teisendusi esitavad operaatorid osutuvad just teatud füüsikalistele suurustele vastavateks operaatoriteks.

Ruumil ja ajal on järgmised sümmeetriaomadused:

1. Puudub ruumi absoluutne tsenter ja aja absoluutne alguspunkt, see tähendab invariantsust neliruumi koordinaadistiku nihete suhtes.

2. Kõik ruumisuurused on samaväärsed, mis tähendab invariantsust kolmruumi pöörete suhtes.

3. Neliruumi koordinaadistiku teisendustel peab kehtima relatiivsuspriintsiip, mis matemaatiliselt väljendub invariantuses Lorentzi teisenduste suhtes.

Nagu näitab lähem vaatlus, järgneb nõudest 1) energia-impulssvektori jäävus (kolmruumi nihetest impulsi kolme komponendi jäävus ja nõudest aja absoluutse alguspunkti puudumise suhtes energia jäävus).

Nõudest 2) järgneb impulssmomendi kolme komponendi jäävus.

Ning lõpuks, nõudest 3) järgneb masskeskme koordinaati-

de konstantsus.

Teisendused 1), 2) ja 3) kokku annavad 10-parametrilise neliruumi sümmeetriateisenduste rühma, millest järgnevad füüsikas tuntud 10 jäävuse seadust. See tulemus on tuntud Noetheri teoreemi nime all.

Vaatleme näiteks juhtu 1) kolmruumi koordinaadistiku nihke suhtes. Niisiis, me nõuame vaadeldava füüsikalise süsteemi hamiltoniaani invariantisust koordinaadistiku paralleelnihkel mistahes kaugusele. Õieti piisab selle tingimuse täitmisest mistahes lõpmata väikese paralleelnihke jaoks, kuna siis on ta täidetud ka iga lõpliku suurusega nihke jaoks.

Lõpmata väike paralleelnihke kaugusele $\delta \vec{r}$ tähendab teisendust $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \delta \vec{r}$. Seejuures teiseneb meelevaldne koordinaatide funktsioon $\psi(\vec{r})$ funktsiooniks

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \text{ grad } \psi(\vec{r}),$$

$$\text{kus grad } \psi(\vec{r}) = \frac{\partial \psi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \vec{k},$$

ehk

$$\psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \text{ grad}) \psi(\vec{r}). \quad (20,1)$$

Sulgudes olevat avaldist $1 + \delta \vec{r} \text{ grad}$ võib vaadelda kui lõpmata väikese nihke operaatorit, mis teisendab funktsiooni $\psi(\vec{r})$ funktsiooniks $\psi(\vec{r} + \delta \vec{r})$ - ks.

Nõue, et mingi teisendus \hat{K} ei muuda hamiltoniaani, tähendab, et $\hat{K}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{K}\psi)$, s.t.

$$\hat{K}\hat{H} - \hat{H}\hat{K} = 0,$$

ja need operaatorid kommuteeruvad.

Kuna ühikoperaator (korrutamise ühega) kommuteerub iga operaatoriga ja $\delta \vec{r}$ oli meelevaldne, peab antud juhul kehtima

$$\text{grad } \hat{H} - \hat{H} \text{ grad} = 0,$$

ehk

$$(-i\hbar \text{ grad}) \hat{H} - \hat{H} (-i\hbar \text{ grad}) = 0.$$

Kuid

$$\bar{p} = -i \hbar \text{ grad} \quad (20,2)$$

ongi impulssoperaator. Seega

$$\bar{p} \hat{H} - \hat{H} \bar{p} = 0, \quad (20,3)$$

mis aga tähendab, et

$$\dot{\bar{p}} = 0,$$

niisilgi impulsi jäävust.

Analoogilised on arutluskäigud ka teistel juhtudel.

Seega on füüsikas tuntud jäävuse seadused aja ja ruumi üldiste sümmeetriateisenduste peegelduseks.

§ 21. Valikureeglid häiritusteoorias.

Ülemineku tõenäosus ajaühiku kohta seisundist α seisundisse β on vastavalt häiritusteooriale võrdeline järgmise maatrikselemendi ruuduga

$$w_{\alpha\beta} \sim \left| \int \psi_{\beta} \hat{V} \psi_{\alpha} d\tau \right|^2 \quad (21,1)$$

kus \hat{V} on üleminekuid põhjustava häirituse operaator.

Valikureeglite leidmiseks, s.t. võimalike üleminekute kindlakstegemiseks, mis toimuvad häirituse \hat{V} mõjul, tuleb selgitada juhud, millal maatrikselment

$$\int \psi_{\beta} \hat{V} \psi_{\alpha} d\tau \quad (21,2)$$

osutub nullist erinevaks. See on hõlpsasti teostatav rühmateooria meetoditega.

Tõestame esialgu ühe teoreemi. Nimelt: olgu $\psi_1^{(\alpha)}$ ühe mitteühikulise taandamatu esituse baasifunktsioon. Siis integraal üle kogu ruumi sellest funktsioonist peab olema null

$$\int \psi_1^{(\alpha)} d\tau = 0. \quad (21,3)$$

Integraal üle kogu ruumi peab olema ilmselt invariantne mistahes sümmeetriateisenduse \hat{G} suhtes, kuna ta on mingi konstant, mille väärtus ei sõltu kogu ruumiga teostatavatest sümmeetriateisendustest (kui meil oleks tegemist ainult ühe

ruumitsaga, poleks see nii). Seega

$$\int \varphi_i^{(\alpha)} d\tau = \hat{G} \int \varphi_1^{(\alpha)} d\tau = \int \sum_k G_{ki}^{(\alpha)} \varphi_k^{(\alpha)} d\tau.$$

Summeerime nüüd selle võrduse üle kõigi rühma elementide. Seejuures korrutub võrduse vasak pool lihtsalt rühma järuga g

$$g \int \varphi_i^{(\alpha)} d\tau = \sum_k \int \varphi_k^{(\alpha)} \sum_G G_{ki}^{(\alpha)} d\tau,$$

kuid iga taandamatu mitteühikulise esituse jaoks kehtib indentselt

$$\sum_G G_{ki}^{(\alpha)} = 0,$$

mis on erijuhuks meile tuttavast valemist (14,3)

$$\sum_G G_{ki}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} = \frac{g}{f} \delta_{\alpha\beta} \delta_{kl} \delta_{im},$$

kui $G_{lm}^{(\beta)} = \delta_{lm}$. Seega olemegi tõestanud (21,3).

Kui φ_i kuulub taanduvale esitusele, on $\int \varphi_1 d\tau$ nullist erinev ainult sel juhul, kui see taanduv esitus sisaldab endas ühikesitust.

Maatrikselement (21,2) osutub nullist erinevaks ainult siis, kui kogu integraalilune funktsioon teiseneb vastavalt süsteemi sümmeetriarühma ühikesituse baasfunktsioonile. Teades häirituse \hat{V} sümmeetriat, on nüüd kerge leida valikureeglid.

Vaatleme algul üleminekuid skalaarse häirituse f mõjul, s.t. tuleb uurida skalaari maatrikselementi

$$\int \varphi_1^{(\alpha)} f \varphi_k^{(\beta)} d\tau. \quad (21,4)$$

Siin numereerivad indeksid i ja k kõdunud seisundeid. Teiseneagu $\varphi_i^{(\alpha)}$ ja $\varphi_k^{(\beta)}$ vastavalt taandamatutele esitustele $D^{(\alpha)}$ ja $D^{(\beta)}$. Nende korrutis teiseneb siis nagu vastavate esituste otsekorruktis $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$. Kuha f on invariantne kõigi teisenduste suhtes, teiseneb kogu integraalilune funktsioon nagu $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$.

(21,4) on nullist erinev ainult siis, kui $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$ sisaldab ühikesitust. Kuid $\alpha \neq \beta$ korral $D^{(\alpha)} \times D^{(\beta)}$ ei sisalda ühikesitust, aga kui $\alpha = \beta$, siis $D^{(\alpha)} \times D^{(\alpha)}$ sisaldab alati ühikesitust ja nimelt üks kord.

Skalaarse häirituse korral on võimalikud üleminekud ainult sama tüüpi seisundite vahel ($\alpha = \beta$), s.t. seisundite vahel, mis vastavad samale taandamatule esitusele.

Olgu nüüd üleminekuid põhjustavaks häirituseks vektori-aalne suurus, $V = \vec{A}$, näit. dipolmoment. Selle vektori komponendid A_x , A_y ja A_z teostavad sümmeetriarühma mingi esituse D_A .

Integraalilune funktsioon $\psi^{(\alpha)} \vec{A} \psi^{(\beta)}$ teiseneb nüüd nagu otsekorrutis $D^{(\alpha)} \times D_A \times D^{(\beta)}$. Lubatud ülemineku korral peab selles korrutises sisalduma ühikesitus. See tähendab, et korrutis $D^{(\alpha)} \times D_A$ peab sisaldama esitust $D^{(\beta)}$. Lahutades $D^{(\alpha)} \times D_A$ taandamatuteks esitusteks, leiamegi seisundid, millesse on võimalikud üleminekud $D^{(\alpha)}$ -st häirituse \vec{A} mõjul. Analooiliselt võib leida valikureeglid ka tensorhäirituse mõjul jne.

Konkreetse näitena vaatleme valikureegleid dipolüleminekute jaoks sümmeetriarühma O korral.

Dipolmoment \vec{M} teiseneb vastavalt taandamatule esitusele F_1 . Alljärgnevas tabelis 3 on toodud karakterid taanduvate esituste $D^{(\alpha)} \times D_{F_1}$ jaoks, nad on lihtsalt vastavate esituste karakterite $D^{(\alpha)}$ korrutised.

T a b e l 3.

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
$A_1 \times F_1$	3	0	-1	-1	1
$A_2 \times F_1$	3	0	-1	1	-1
$E \times F_1$	6	0	-2	0	0
$F_2 \times F_1$	9	0	1	-1	-1
$F_4 \times F_1$	9	10	1	1	1

Teostades nende esituste taandamise, leiame

$$F_1 \times A_1 = F_1, \quad F_1 \times A_2 = F_2, \quad F_1 \times E = F_1 + F_2$$

$$F_1 \times F_1 = A_1 + E + F_1 + F_2, \quad F_1 \times F_2 = A_2 + E + F_1 + F_2.$$

Siit järgnevad lubatud üleminekud

$$F_1 \leftrightarrow A_1, F_1, F_2, E; \quad F_2 \leftrightarrow A_2, E, F_2.$$

Kui arvestada ka sümmeetriat inversiooni suhtes, siis on kõik termid kas sümmeetrilised või antisümmeetrilised inversiooni suhtes (nn . paarsus). Tõepoolest, kaks korda järjest teostatud inversioon peab andma ühikteisenduse ning see-ga inversioonioperaatori I omaväärtusteks on ± 1 . Paaris ja paaritute seisundite korral vastavalt $I\psi = \psi$ või $I\psi = -\psi$ Diipolüleminekute korral on lubatud üleminekud ainult erineva paarsusega seisundite vahel, kuna $\vec{I}M = -\vec{M}$ (\vec{M} on tavaline polaarne vektor¹), s.t. selleks, et maatrikselemendis integraalilalne funktsioon ei muudaks inversiooni korral märki, peavad ψ_a ja ψ_b olema erineva paarsusega.

Kui diipolmomendi erinevad komponendid teisenevad erinevate taandamatute esituste järgi, tuleb valikureeglid leida eraldi iga komponendi jaoks.

Lisatud punktrühmade karakterite tabelites on esitused, millele vastavalt teisenevad diipolmomendi komponendid tähistatud x, y, z -ga esituse sümboli järel.

Senini me vaatlesime lõplikke rühmi, nüüd tutvume ka pidevate rühmadega, mis on eriti olulised vabade aatomite omaduste uurimisel.

¹ Polaarseteks vektoriteks nimetatakse selliseid, mis muudavad inversiooni korral märki. Aksiaalsed vektorid (näiteks kahe polaarsete vektori vektorkorrutis) ei muuda inversiooni tulemusel oma märki.

VI. PIDEVAD RÜHMAD.

§ 22. Pidevad punktrühmad.

Kõrvuti lõplike punktrühmadega eksisteerivad ka punktrühmad lõpmatu arvu elementidega (pidevad punktrühmad). Need on aksiaalse (telg-) ja sfäärilise (kera-) sümmeetria rühmad.

Lihtsaim aksiaalse sümmeetria rühm on C_{∞} , mille elementideks on pöörded $C(\varphi)$ meelevaldse nurga φ võrra ümber kindla telje. Seda rühma võib vaadelda kui rühma C_n piirväärtust

$$C_{\infty} = \lim_{n \rightarrow \infty} C_n. \quad (22,1)$$

Sümmeetriarühma $C_{\infty v}$, kus C_{∞} elementidele lisanduvad veel peegeldused σ_v mistahes tasapindades, mis läbivad telge, omab molekul, milles aatomid asuvad ühel sirgel. Kui selline molekul on sümmeetriline oma keskpunkti suhtes, s.t. sümmeetriarühma elementide hulgas on veel ka inversioon, on sümmeetriarühmaks $D_{\infty h} = C_{\infty v} \times C_i$.

Täieliku kera-sümmeetria rühm K_n sisaldab pööordeid meelevaldse nurga võrra ümber telje, mis läbib tsentrit ja peegeldusi mistahes tasapinnas, mis läbib seda punkti. See on isoleeritud aatomi sümmeetriarühm. Alamrühmaks on siin kolmemõõtmeline pöörete rühm K .

$$K_n = K \times C_n. \quad (22,2)$$

Elemente võib pidevas rühmas eristada ühe või mitme pidevalt muutuva parameetri väärtustega. Näiteks rühma K korral on nendeks kaks nurka, mis määravad telje suuna, ja kolmandaks pöördenuhk selle telje ümber.

Üldised lõplike punktrühmade omadused kehtivad ka pidevate rühmade korral. Ainult rühma järgu lõplikkusega seotud väited kaotavad loomulikult mõtte.

Rühmas $C_{\infty v}$ on kõik sümmeetriatasandid ekvivalentsed, s.t. kõik peegeldused σ_v moodustavad ühe klassi elementide pideva reaga. Pöördetelg on kahesuunaline. Siit tuleneb pi-

dev klasside rida, igaüks neist sisaldab 2 elementi $C(\pm \varphi)$.

Rühmas K on kõik teljed ekvivalentsed ja kahe-suunalised. Klassideks on pöörded $|\varphi|$ võrra mistahes telje ümber.

Ka esituse mõiste üldistub pidevate rühmade korral analoogiliselt. Iga taandamatu esitus sisaldab pideva maatriksite rea, kuid teineteise kaudu teisenevate baasifunktsioonide arv on lõplik. Viimased võib valida alati nii, et esitus oleks unitaarne. Pidevatel rühmal on lõpmata palju taandamatuid esitusi, kuid nad moodustavad diskreetse rea. Summeerimine üle rühma elementide asendub nüüd integreerimisega

$$\sum_G \rightarrow \int d\tau_G.$$

Vaatleme nüüd lähemalt kolmemõõtmelise pöörete rühma esitusi. Me oleme nendega õieti tuttavad juba kvantmehaanikast. On ju summaarse impulssmomenti operaator lõpmata väikese pöörded operaator. Ta omaväärtused j iseloomustavad lainefunktsioonide käitumist ruumiliste pöörete suhtes. Antud j -le vastab $(2j + 1)$ erinevat omafunktsiooni, mis erinevad pöördimpulsi projektsiooni poolest valitud teljele ja kuuluvad kõik $(2j + 1)$ -kordselt kõdunud energianivoole. Koordinaadistiku pööramisel teisenevad need funktsioonid teineteise kaudu, teostades pöörete rühma taandamatu esituse. j on kas täis- või poolik arv, seega on taandamatute esituste dimensioonid $2j + 1$ kõik täisarvud 1, 2, 3 ...

Kuna ühe klassi elementide karakterid on võrdsed, piisab vaid z -telje ümber teostatavate pöörete vaatlemisest. $C_z(\varphi)$ korral määrab lainefunktsiooni käitumise pöördimpulsi z -komponendi omaväärtus m , mis antud j korral omab väärtusi vahemikus $-j \leq m \leq j$.

$$C_z(\varphi)\varphi_m^j = e^{im\varphi}\psi_m^j. \quad (22,3)$$

Seega on teisendusmaatriks $2j + 1$ funktsiooni teisendamisel $C_z(\varphi)$ korral järgmine:

$$\begin{pmatrix} e^{-1j\varphi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-i(j-1)\varphi} & & \vdots \\ \vdots & & 1 & \\ \vdots & & & e^{i\varphi} \\ 0 & \dots & 0 & e^{ij\varphi} \end{pmatrix} \quad (22,4)$$

Siit leiame j -nda taandamatu esituse karakteri jaoks

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \frac{e^{i(j+1)\varphi} - e^{-1j\varphi}}{e^{i\varphi} - 1} \quad (22,5)$$

või lõplikult

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}} \quad (22,6)$$

Selle valemi alusel toimubki kolmemõtmelise pöörete rühma taandamatute esituste karakterite arvutamine.

Kui j on poolik arv, tulevad sisse mõningad komplikatsioonid. Nimelt $\chi(\varphi + 2\pi) = -\chi(\varphi)$ (täisarvulise j korral $\chi(\varphi + 2\pi) = \chi(\varphi)$). Pöördel 2π võrra, mis vastab ühikelemendile, muudavad esituse baasifunktsioonid märki. Poolarvulise j -ga esitused osutuvad kahesteks. Igale rühma elemendile vastab kaks maatriksit vastasmärgiliste karakteritega. Neid probleeme me vaatleme lähemalt järgmises paragrahvis.

Vabal aatomil on ka sümmeetria inversiooni suhtes, mis, nagu me juba teame, määrab seisundi paarsuse. Üksiku osakes jaoks, nagu teada

$$\psi \sim P_1^m(\cos\theta)e^{im\varphi}.$$

Sfäärilises koordinaadistikus tähendab inversioon järgmisi teisendusi

$$\bar{r} \rightarrow -\bar{r}, \text{ ehk } r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.$$

Seega inversiooni korral $e^{im\varphi}$ korrutub $(-1)^m$ -ga ja

$$P_1^m(-\cos\theta) = (-1)^{1-m} P_1^m(\cos\theta) \quad \text{ning inversiooni mõju}$$

kogu lainefunktsioonile on

$$I = (-1)^l. \quad (22,7)$$

Paarisarvulise impulsmomendi omaväärtusega seisundid osutuvad inversiooni suhtes paaris seisundeiks.

Kuna diipolüleminekud on võimalikud ainult erineva paarisusega seisundite vahel, siis rahuldab tuntud valikureegel $\Delta l = \pm 1$ ilmselt seda nõuet.

Aatomi hamiltoniaan on veel invariantne elektronide transpitsioonide (vahetuste) suhtes vastavalt mikroosakes- te eristamatuse printsiibile. Mitterelativistlikus lähendus- es on süsteemi koordinaat- ja spinfunktsioonid eraldatavad (kogu lainefunktsioon on nende korrutis). Võib rääkida trans- positsioonide rühma taandamatutest esitustest, mis teostatak- se koordinaatfunktsioonide poolt. Transpitsioonide rühma taandamatu esitus määrab ära aatomi koguspini.

Nende küsimuste põhjalikum esitus on toodud näiteks Lan- dau ja Lifšitsi "Kvantmehaanikas".

§ 23. Lõplike punktrühmade kahesed esitused.

Nagu me nägime, vastavad süsteemi seisunditele poolar- vulise spiniga jrd seega ka poolarvulise summaarse impulss- momendiga selle süsteemi punktrühma kahesed esitused. See on nii pidevate kui ka lõplike punktrühmade korral.

Lõplike punktrühmade kaheste esituste leidmiseks kasu- tame Bethe poolt antud meetodit.

Toome puhtformaalselt sisse uue rühma elemendi Q -pöör- de nurga 2π võrra. Loeme

$$Q \neq E, \quad \text{kuid} \quad Q^2 = E. \quad (23,1)$$

Siis, nagu kerge näha

$$C_n^n = Q \quad \text{ja} \quad C_n^{2n} = E. \quad (23,2)$$

Kuna inversioon kommuteerub iga pöördega, on endiselt $I^2 = 1$. Seevastu, arvestades, et $\sigma_h = I C_2$

$$\sigma^2 = Q \quad \text{ja} \quad \sigma^4 = E. \quad (23,3)$$

Resultaadina me saame fiktiivse rühma, millel on kaks korda rohkem elemente kui lähterühmas. Need on nn. kahesed punktrühmad. Nende sissetoomise mõte seisneb järgnevas. Tegelikult punktrühma kahesed esitused osutuvad vastava kahese rühma jaoks juba tõealisteks esitusteks ning siin on raken-datavad endised rühmateooria meetodid ja laused.

Klasside arv kaheses rühmas on suurem kui lähterühmas, kuid üldiselt mitte kaks korda.

Kuna Q kommuteerub iga rühma elemendiga, on ta alati ise üheks klassiks. Kui pöördetelg on kahesuunaline, siis kaheses rühmas osutuvad elemendid C_n^k ja $C_n^{2n-k} = QC_n^{n-k}$

konjugeerituiks ja kuuluvad ühte klassi.

Pöörded C_2 ja C_2Q kuuluvad kaheses rühmas alati samasse klassi. Sel juhul (22,6) järgi $\chi(C_2) = 0$ ja kahesust tegelikult ei ole $\chi(\mathcal{F}) = \chi(3\mathcal{F})$.

Kaheseid rühmi tähistatakse indeksiga "prim" rühma sümboli juures. Kahesed rühmad C_n' on tsüklilised. Kõik nende taandamatud esitused on ühemõõtmelised ja kergesti leitavad.

Vaatleme näiteks elementide klassideks jagunemist rühmas T' . Rühmas T on teist järku teljed ekvivalentseid ja kahesuunalised, kolmandat järku teljed on aga ainult ekvivalentseid. Seepärast jagunevad rühma T' 24 elementi klassideks järgmiselt:

$$3C_2 \\ E; Q; 3C_2Q; 4C_3; 4C_3^2; 4C_3Q; 4C_3^2Q.$$

Kahese punktrühma taandamatute esituste hulka kuuluvad:

- 1) kõik esitused, mis langevad kokku lihtrühma üheste esitustega (sealjuures Q -le vastab ühkmaatriks nagu E -legi)
- 2) lihtrühma kahesed esitused, seejuures Q -le vastab maatriks -1 . Edasi me vaatleme vaid viimaseid.

Vaatleme lühidalt nende esituste leidmist rühma T' jaoks. Siin jagunevad 24 elementi 7-esse klassi. Seega peab olema üldse 7 taandamatut esitust. 4 neist langevad kokku rühma T esitustega. Ülejäänud kolme esituse ruutude summa peab olema 12, ainuke võimalus selleks on $4+4+4 = 12$

ja seega kõik need esitused on kahemõõtmelised. Kuna $\chi(C_2) = \chi(C_2Q) = 0$, on see nii kõigis kolmes esituses. Üks esitustest peab plema vähemalt reaalne, sest kompleksesitused võivad esineda ainult kaaskomplekssete paaridena. Olgu selles esituses näiteks \hat{C}_3 diagonaalkujus. Et $C_3^3 = Q$, siis $a_1^3 = a_2^3 = -1$. $\chi(C_3) = a_1 + a_2$ reaalsuse tingimusest järgneb $a_1 = -e^{\frac{2\pi i}{3}}$ ja $a_2 = -e^{-\frac{2\pi i}{3}}$. Siit järgneb $\chi(C_3) = 1$, $\chi(C_3^2) = a_1^2 + a_2^2 = -1$. Järelikult $\chi(C_3Q) = -1$ ja $\chi(C_3^2Q) = 1$. Ülejäänud kaks esitust leiame võrdluse teel kahe ühedimensionaalse kaaskomplekse esitusega rühmast T . Analooiliselt leitakse esitused teiste kaheste rühmade jaoks.

Esitused, mis lisanduvad kahestes rühmades lihtrühmade ühestele esitustele, on toodud lisas nr. 2.

Poolarvulise spiniga süsteemide omaduste rühmateoreetilisel uurimisel tuleb niisiis kasutada vastavaid kaheleid punktrühmi.

§ 24. Impulssmomentide liitmine.

Rühmateooria meetodid võimaldavad kergesti leida ka vektormudelitest tuntud momentide liitmise reeglid.

Olgu J_1 ja J_2 kahe osakese impulssmomentid. Osakesevahelise võimaliku mõju jätame arvestamata. Nende osakeste energianivoodele vastavad siis $(2J_1 + 1)$ - ja $(2J_2 + 1)$ -dimensionaalsed pöörete rühma esitused D_{J_1} ja D_{J_2} . Seejuures on esituste baasifunktsioonideke kummagi osakese lainefunktsioonid $\varphi_{J_1, m_1}^{(1)}$ ja $\varphi_{J_2, m_2}^{(2)}$,

$$m_1 = -J_1, -J_1 + 1, \dots, J_1.$$

Kui vaadelda mõlemat osakest koos ühe süsteemina, siis kirjeldavad J_1 ja J_2 korral kõiki liitsüsteemi seisundeid lainefunktsioonid $\varphi_{J_1, m_1}^{(1)}$ ja $\varphi_{J_2, m_2}^{(2)}$. Need $(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)$ funktsioonid teostavad pöörete rühma esituse, mis

on D_{j_1} ja D_{j_2} otsekorrutis ($D_{j_1} \times D_{j_2}$). Lahutades ta taandamatuteks osadeks, leiame seega liitsüsteemi summaarse impulsemomendi j võimalikud väärtused.

Karakterid esituses ($D_{j_1} \times D_{j_2}$) on esituste D_{j_1} ja D_{j_2} karakterite korrutised. Tähistades $\epsilon = e^{i\varphi}$, (22,5) alusel, saame

$$\chi^{(j_1)}(\varphi) \chi^{(j_2)}(\varphi) = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \epsilon^{m_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \epsilon^{m_2} = \sum_{m_2} \epsilon^{m_2} \frac{\epsilon^{j_1+1} - \epsilon^{-j_1}}{\epsilon - 1}.$$

See avaldis tuleb esitada taandamatute esituste D_j karakterite summana, s.t. kujus

$$\sum_j \frac{\epsilon^{j+1} - \epsilon^{-j}}{\epsilon - 1}.$$

Võrrutades mõlemad avaldised, korrutades ($\epsilon - 1$)-ga ning avaldades summeerimise m_2 - järgi, leiame

$$\begin{aligned} & \epsilon^{j_1+j_2+1} + \epsilon^{j_1+j_2} + \dots + \epsilon^{j_1-j_2+1} - \epsilon^{-(j_1-j_2)} - \dots - \epsilon^{-(j_1+j_2)} = \\ & = \sum_j (\epsilon^{j+1} - \epsilon^{-j}). \end{aligned}$$

Kombineerides paariviisi "+" ja "-" märgiga liikmeid, näeme, et summaarne impulsmoment j peab läbima väärtusi $j_1 - j_2$ ja $j_1 + j_2$ vahel, seejuures iga väärtust üks kord. Järelikult

$$D_{j_1} \times D_{j_2} = D_{j_1+j_2} + D_{j_1+j_2-1} + \dots + D_{j_1-j_2}. \quad (24,1)$$

See on aga üldtuntud impulsmomentide liitmise reegel.

Rühmateooria võimaldab ka vastata küsimusele, milline on tõenäosus süsteemil omada kindlat j väärtust antud j_1 , j_2 ja m_1 , m_2 korral.

See tõenäosus on määratud reaksarenduse kordajate mooduli ruutudega, kui me arendame funktsioonid $\psi_{j_1, m_1}^{(1)} \times \psi_{j_2, m_2}^{(2)}$, mis kirjeldavad süsteemi seisundeid antud j_1 , m_1 , j_2 ja

m_2 -ga, ritta funktsioonide $\psi_{j,m}$ järgi, mis kirjeldavad seisundeid antud j_1, j_2, j ja m -ga. Siinjuures $m=m_1+m_2$.

$$\psi_{j_1, m_1}^{(1)} \psi_{j_2, m_2}^{(2)} = \sum_j C_{m_1 m_2}^j \psi_{j, m_1+m_2}. \quad (24,2)$$

Arvutus, millel meil siinkohal pole võimalik peatuda, annab

$$C_{m_1 m_2}^j = \sqrt{\frac{(j+j_1-j_2)! (j-j_1+j_2)! (j_1+j_2-j)! (j+m)! (j-m)! (2j+1)!}{(j+j_1+j_2+1)! (j_1-m_1)! (j_1+m_1)! (j_2-m_2)! (j_2+m_2)!}} \times \\ \times \sum_k \frac{(-1)^{k+j_2+m_2} (j_1+j_2+m_1-k)! (j_1-m_1+k)!}{(j-j_1+j_2-k)! (j+m-k)! k! (k+j_1-j_2-m)!}. \quad (24,3)$$

Summeerimine üle täisarvude k taandub summeerimisele suurimast arvust 0 või (j_2-j_1+m) kuni väiksemani $(j+m)$ ja $(j-j_1+j_2)$ -st.

Vaatleme näiteks momentide liitmist juhul $j_1 = 1$ ja $j_2 = 1$ ($m_1, m_2 = -1, 0, 1$). Siis $j = 2, 1, 0$ ja $m = -2, -1, 0, 1, 2$.

Juht $m_1 = m_2 = 0$ esineb üks kord. Arvutades (24,3) alusel leiame

$$[C_{00}^0]^2 = \frac{1}{3}, \quad [C_{00}^1]^2 = 0, \quad [C_{00}^2] = \frac{2}{3}.$$

Nagu peabki olema, on nende tõenäosuste summa üks. Kuna $m_1 = m_2 = 0$ korral on mõlemad momendid risti z -teljega, on loomulik, et j väärtus 1 siin realiseeruda ei saa. $j = 2$ realiseerumine omab kaks korda suuremat tõenäosust kui $j = 0$ korral.

$m_1 = 1, m_2 = 0$ tüüpi juhtusid on kokku neli. Siin

$$[C_{10}^0]^2 = 0, \quad [C_{10}^1]^2 = \frac{1}{2}, \quad [C_{10}^2]^2 = \frac{1}{2}.$$

$m_1 = 1, m_2 = -1$ tüüpi juhtusid on kaks. Arvutus annab

$$[C_{1-1}^0]^2 = \frac{1}{3}, \quad [C_{1-1}^1]^2 = \frac{1}{2}, \quad [C_{1-1}^2]^2 = \frac{1}{6}.$$

Lõpuks on veel kaks $m_1 = m_2 = 1$ tüüpi juhtu (teiseks on $m_1 = m_2 = -1$). Siin

$$[C_{11}^0]^2 = 0, \quad [C_{11}^1]^2 = 0, \quad [C_{11}^2]^2 = 1.$$

Summeerides antud j esinemise tõenäosused, leiame

$$j = 0 \quad \frac{1}{3} + 4 \cdot 0 + 2 \cdot \frac{1}{3} + 2 \cdot 0 = 1$$

$$j = 1 \quad 0 + 4 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot 0 = 3$$

$$j = 2 \quad \frac{2}{3} + 4 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot 1 = 5.$$

Seega me saime iga j esinemise jaoks täpsemalt õige statistilise kaalu (kõdumise kordsuse). Liites momendid $j_1 = 1$ ja $j_2 = 1$, esinevad summaarse impulssmomenti väärtused $j = 0, 1, 2$ vastavalt 1, 3 ja 5 korda, mis antud j väärtuse korral erinevad $m = m_1 + m_2$ väärtuste poolest.

VII. ENERGIASEISUNDID KRISTALLIDES.

§ 25. Termide lõhenemine kristallis.

Elektronseisundid aatomis, mis asub kristallis, erinevad vaba aatomi seisunditest. Rangelt võttes omavad mõtet vaid kogu kristalli elektronseisundid. Kui aga aatom (ioon, lisandtsenter jne.) on suhteliselt nõrgas interaktsioonis ülejäänud kristalliga, võib viimast vaadelda välise häiriva välja allikana. Seejuures toimub kristalli välja mõjul vaba aatomi kõdunud seisundite lõhenemine. Oluliseks osutub siin just elektriväli, kuna magnetilised interaktsioonid on liiga nõrgad. See väli omab sümmeetriat, mis on määratud: a) kristallivõre sümmeetriaga b) vaadeldava aatomi asukohaga võ-

res ning ei saa olla kõrgem kui kristallvõre sümmeetriale vastaval punktrühmal.

Kui täiendav energia kristalli väljas on väike võrreldes elektroni energiaga vabas aatomis, siis ei lõhuta seost üksikute elektronide orbitaalsete momentide vahel ning samuti nende spinmomentide vahel. Summaarne pöördimpulss J säilitab mõtte. Lõhenemise pilt ei olene siin väljatugevusest, sellest sõltub vaid lõhenemise suurus. Tegemist on nn. nõrga välja juhuga, mis on üheks sagedamini esinevaks juhuks ning me piirdume selle vaatlemisega.

Kui lõhenemise suurus on kristalli välja mõjul suurem kui erinevate multiplettide vaheline kaugus, on meil tegemist nn. tugeva välja juhuga. Üldiselt rääkides oleneb välja "tugevuse aste" ka vaadeldavast energianivoost. Kõrgete ergastatud seisundite jaoks võib väli näiteks juba osutada "tugevaks", kuigi madalamate seisundite jaoks ta oli veel nõrk.

Võrreldes vaba aatomiga, on sümmeetria aatomi jaoks kristallis alati madalam: sfääriline sümmeetria asendub ühele lõplikule punktrühmale vastava sümmeetriaga. $2J+1$ kordselt kõdunud vaba aatomi term lõheneb kristallis. Lõhenemise pildi leidmiseks tuleb leida karakterid $2J+1$ mõõtmelises esituses, mille teostavad vaba aatomi lainefunktsioonid kristalli punktrühmale. Nad on arvutatavad valemi (22,6) abil. See esitus tuleb lahutada kristalli punktrühma taandamatuteks esitusteks.

Kristalli sümmeetriarühm kujutab endast üldiselt translatsioonide rühma ja punktrühma otsekorrutist (vaata edasi), kuid lisandiaatomi viimisel kristalli kaob translatsioonisümmeetria ja kristallvõre sõlmes asuvale lisandiaatomile ülejäänud kristalli poolt mõjuva elektrivälja sümmeetria on määratud kristalli punktrühmaga.

Kui kristalli punktrühm sisaldab inversiooni, siis aatomi viimisel kristalli termi paarsus ei muutu ning seega pole oluline termi uurimine I ja temast tulenevate IC_n suhtes.

Nagu me teame, tuleb poolarvulise J korral vaadelda

kaheseid punktrühmi.

Kui vaadeldaval aatomil on paarisarv elektrone, on kristallis võimalikud kõdumise kordsused 1, 2 ja 3, kuna lihtsa-
tel punktrühmadel on ainult selliste dimensioonidega esitusi.

Paaritu elektronide arvu korral on võimalikud kõdumise
kordsused 1, 2 ja 4, kuna kahestel rühmal on vaid sellise
dimensiooniga esitusi, kus $Q = -\hat{1}$. Kuna $J = \frac{3}{2}$ korral
 $2J + 1 = 4$, siis iga vaba aatomi term, millel $J > \frac{3}{2}$ kris-
tallis osutub tingimata lõhenenuks.

Vaatleme mõningaid näiteid.

1. Kuidas lõhenevad vaba aatomi termid, millel $J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ ja 3 kuubilise sümmeetriaga kristallis? Arvutus-
tulemused on lühidalt kokku võetud alljärgnevas tabelis (on
toodud karakterid $2J + 1$ -dimensionaalsetes taanduvates esi-
tustes ning vastav taandamise tulemus). Punktrühmadeks on
siin vastavalt Q_n ja Q'_n .

T a b e l 4.

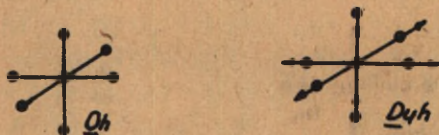
J	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$	
0	1	1	1	1	1	$= A_1$
1	3	0	-1	-1	1	$= F_1$
2	5	-1	1	1	-1	$= E+F_2$
3	7	1	-1	-1	-1	$= A_2+F_1+F_2$

J	E	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_4^2$	$3C_4$	$3C_4^3$	$3C_4$	$6C_2$	
$\frac{1}{2}$	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	$= E'$
$\frac{3}{2}$	4	-4	-1	1	0	0	0	0	0	$= G'$

P-term, millel $J = 1$, kuubilises kristallis veel ei lõ-
hene. Lõhenemine algab D-termist ($J = 2$), mis lõheneb üheks

kahekordselt (E) ja üheks kolmekordselt (F_2) kõdunud termiks. Poolarvulise J -ga termide lõhenemine algab $J = \frac{3}{2}$ -st, mis lõheneb $E\frac{1}{2} + G'$ -ks.

2. Kuidas lõheneb lisandiatomi P -term kuubilises kristallis, kui temale mõjuva kristalli elektrivälja sümmeetria alaneb D_{4h} -le naaberaatomite tasakaaluasendite muutumisel nagu alljärgneval joonisel 19.



Joon. 19

Sümmeetria O_h korral vastab P -termile esitus F_{1u} (vastavad lainefunktsioonid teisenevad nagu vektori komponendid x, y, z). Inversiooni suhtes on see esitus paaritu. Kuna termi omadused inversiooni suhtes ei muutu ta lõhenemisel, võime me rühmade O_h ja D_{4h} asemel vaadelda lihtsalt rühmi O ja D_4 ($O_h = O \times C_i$ ja $D_{4h} = D_4 \times C_i$), nagu me talitasime eelmises ülesandeski.

D_4 elementide karakterid taanduvas esituses, mis vastab F_1 -le O -s on

	E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U_2'$
$\chi(G)$	3	-1	1	-1	-1

Edasi leiame

$$a(A_2) = \frac{1}{8}(3 - 1 + 2 + 2 + 2) = 1; a(E) = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1.$$

Ülejäänud D_4 taandamatute esituste esinemise kordsusi me

ei pruugi arvutada, kuna nad peavad ilmselt olema nullid. Peab ju taandamatute esituste dimensioonide summa võrduma taanduva esituse dimensiooniga (siin just $1 + 2 = 3$). Niisiis

$$F_{1u} = A_{2u} + E_u,$$

term F_{1u} lõheneb kaheks: kõdumata ja kahekordselt kõdunud termiks.

3. Leida lõhenemise pilt heksagonaalse (D_{6h}) ja tetragonaalse (D_{4h}) sümmeetria jaoks, kui $J = 0, 1, 2$. Nagu me teame, piisab vaid rühmade D_6 ja D_4 vaatlemisest

J	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3U_2$	$3U_2'$	
0	1	1	1	1	1	1	= A_1
1	3	-1	0	2	-1	-1	= $A_2 + E_1$
2	5	1	-1	1	1	1	= $A_1 + E_2 + E_1$

Heksagonaalse sümmeetriaga kristallis lõheneb vaba aatomi P-term juba kaheks. Tetragonaalse sümmeetria korral leiame

J	E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U_2'$	
0	1	1	1	1	1	= A_1
1	3	-1	1	-1	-1	= $A_2 + E$
2	5	1	-1	1	1	= $A_1 + B_1 + B_2 + E$

Veelgi madalama, rombiline sümmeetriaga (D_{2h}) kristallis toimub vaba aatomi termide täielik lõhenemine, kuna punktrühmal D_{2h} on vaid ühedimensionaalseid esitusi.

§ 26. Elektronide lainefunktsioonid kristallides.

Kristallvõres on aatomid korrapäraselt paigutatud kristallvõre sõlmedesse, mis on määratud vektoritega

$$\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (26,1)$$

kus \vec{a}_i on võre põhivektorid ja n_i täisarvud. Kristallis olevale elektronile mõjub seega perioodiline väli

$$U(\vec{r} + \vec{a}) = U(\vec{r}). \quad (26,2)$$

Defineerime nn. translatsiooni operaatori

$$\hat{T} n_1 n_2 n_3 \vec{r} = \vec{r} + \vec{a}. \quad (26,3)$$

Arvestades (26,2), kommuteerub \hat{T} ilmselt hamiltoniaaniga \hat{H}

$$\hat{T}\hat{H} = \hat{H}\hat{T} \quad (26,4)$$

ja seega on neil ühised omafunktsioonid. Kui $\psi(\vec{r})$ on mingi statsionaarse seisundi omafunktsioon, siis ka

$$\hat{T}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}) \quad (26,5)$$

on omafunktsiooniks samal energiaväärtusel. Sel juhul

$$\psi(\vec{r}) = \lambda \psi(\vec{r} + \vec{a}) \quad (26,6)$$

$$|\lambda| = 1.$$

Kõige üldisemaks seda tüüpi funktsiooniks on nn. Blochi funktsioon

$$\psi_{s\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{s\vec{k}}(\vec{r}), \quad (26,7)$$

kusjuures \vec{k} on mingi meelevaldne reaalne vektor ja funktsioon u on perioodiline funktsioon võre perioodiga

$$u_{s\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = u_{s\vec{k}}(\vec{r}). \quad (26,8)$$

Translatsiooni korral teisenevad need funktsioonid järgnevalt

$$\hat{T}\psi_{s\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{a}}\psi_{s\vec{k}}(\vec{r}) \quad (26,9)$$

$$\hat{T}_{s\vec{k}}(\vec{r}) = u_{s\vec{k}}(\vec{r}). \quad (26,10)$$

Funktsioonid $\psi_{s\vec{k}}(\vec{r})$ teostavad mingi translatsioonide rühma esituse. \vec{k} nimetatakse elektroni kvaasiimpulsi perioodilises väljas. Translatsioonide rühma iga element kommuteerub teisega, näiteks $T_{n_1} T_{n_2} = T_{n_2} T_{n_1}$, tegemist on Abeli tüüpi rühmaga. Rühma järk on siin lõpmatu.

Igale elektroni statsionaarsele seisundile perioodilises väljas vastab mingi kindel kvaasiimpulsi \vec{k} väärtus. See vastavus ei ole aga üks-ühene. Antud \vec{k} korral võib E omada rea diskreetseid väärtusi, milliseid numereerib indeks n . $E = E_n(\vec{k})$ on neljadimensionaalne hüperpind. Rühmateooria abil on võimalik välja selgitada rida selle pinna üldisi omadusi ilma Schrödingeri võrrandi lahendamiseta.

Kvaasiimpulss ei ole üheselt määratud. Ta väärtusega on määratud lainefunktsiooni käitumine translatsioonide korral, seejuures korrutub lainefunktsioon teguriga $e^{i\vec{k}\vec{a}}$. Kõik \vec{k} väärtused, mille korral see tegur meelevaldsete \vec{a} jaoks omab sama väärtust, on füüsikaliselt ekvivalentsed ja vastavad samale elektroni seisundile.

Antud \vec{k} juures on selline omadus vektoril

$$\vec{k} + 2\pi\vec{b}, \quad (26,11)$$

kus \vec{b} on nn. pöördvõre vektor

$$\vec{b} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3 \quad (26,12)$$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_k = \delta_{ik}. \quad (26,13)$$

Tõepoolest

$$e^{i(\vec{k}+2\pi\vec{b})\vec{a}} = e^{i\vec{k}\vec{a}} \cdot e^{2\pi i(n_1m_1+n_2m_2+n_3m_3)} = e^{i\vec{k}\vec{a}}.$$

Pöördvõre vektorid avalduvad põhivõre vektorite kaudu järgmiselt

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{V} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$$

$$\vec{b}_2 = \frac{1}{V} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \quad (26,14)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{1}{V} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 .$$

$V = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ on võre elementaarraku ruumala.

Füüsikaliselt erinevad \vec{k} väärtused asuvad ühes pöördvõre elementaarrakus. \vec{k} väärtuste hulga võib kitsendada piirkonnale

$$-\pi \leq \vec{k} \vec{a} \leq \pi . \quad (26,15)$$

Seega peab olema ka

$$E_n(\vec{k} + 2\pi\vec{b}) = E_n(\vec{k}). \quad (26,16)$$

Elektroni energia perioodilises väljas on samuti perioodiline funktsioon pöördvõre perioodidega. Kui \vec{k} väärtused on valitud vahemikus (26,15), siis asuvad kõik $E_n(\vec{k})$ väärtused pöördvõre elementaarrakus - esimeses nn. Brillouini tsoonis ja n numereerib üksikuid energiatsoone.

Kuna ideaalses kristallis on olemas translatsioonisümmeetria, piisab detailsete sümmeetriaomaduste (punktrühma) vaatlemisest ühe elementaarraku ulatuses. Ülejäänud elementaarrakkude jaoks me saame vastavad omadused translatsioonide abil. Kogu kristalli sümmeetriarühm on translatsioonide rühma ja punktrühma otsekorrutis. Seejuures võib translatsioonide kombineerumine peegelduste ja pööretega punktrühmast viia uute sümmetriaelementide tekkimisele. Nendeks on kruviteljed ja peegeldus-nihketasandid. Võre omab n -ndat järku kruvitelge, kui ta teiseneb iseendaks pöördel nurga $\frac{2\pi}{n}$ võrra ja samaaegsel nihkel kindlale kaugusele d mööda seda telge. Teostades seda operatsiooni n korda, me lihtsalt nihutame võret nd võrra mööda telge. Peegeldusnihketasandi olemasolu korral teiseneb võre iseendaks peegeldamisel selles tasandis ja samaaegsel nihkel kaugusele d kindlat sirget mööda, mis asub selles tasandis. Kahekordne peegeldamine peegeldus-nihketasandis viib lihtsalt nihkele $2d$ võrra.

Nagu teada, on olemas 7 nn. kristallide süsteemi ehk

süngooniad. Selle klassifikatsiooni aluseks on kristallograafiliste telgede süsteem. Need teljed määratakse kristalli kolme külgtahu lõikejoontena. Mingi neljas kristalli tasapind, lõigates telgi, eraldab neil lõigud a , b , c (telgedevahelisi nurki tähistame α, β, γ ; $\alpha = \angle c, b$). Kristallide süsteemid ja nende karakteristikud on toodud tabelis 5.

Tabel 5.

Süsteem	Karakteristikud
Trikliinne	$\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ, c \leq a \leq b$
Monokliinne	$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ; c \leq a; b$ - meelev.
Rombiline	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; c < a < b$
Tetragonaalne	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b \neq c$
Trigonaalne	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ; a = b = c$
Heksagonaalne	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ; a = b; c$ - meelev.
Kuubiline	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b = c$

Kristalli translatsioonssümmeetria ei põhjusta mingite suundade ekvivalentsust kristallis. Seepärast on kristalli makroskoopilised omadused määratud tema sümmeetriatelgede ja -tasandite süsteemiga. Selliste sümmeetriaelementide kogu nimetatakse kristallide klassideks ja nad kujutavad endast meile tuttavaid punktrühmi. Antud kristalli klassi sümmeetriaelementide kogu võib olla vasem kui kristallilisel süsteemil, millesse ta kuulub. On ju teada, et suurel hulgal kristallidel on struktuur, mille saame mitme antud süsteemi juurde kuuluva nn. Bravais'i ruumvõre nihutamisel teineteise sisse. See võib aga viia ainult sümmeetriaelementide arvu kaahanemisele. Tabelis 6 on toodud 32 kristalli klassi (punktrühma) jagunemine kristallide süsteemide vahel. Igas klasside reas sisaldab viimane kõik antud süsteemi sümmeetriaelemendid.

T a b e l 6.

Süsteem	Klassid
Trikliinne	C_1, C_1
Monokliinne	C_2, C_2, C_{2h}
Rombiline	C_{2v}, D_2, D_{2h}
Tetragonaalne	$C_4, D_{2d}, C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}$
Trigonaalne	$C_3, C_3, C_{3v}, D_3, D_{3d}$
Heksagonaalne	$C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}$
Kuubiline	T, T_h, T_d, O, O_h

Vaatleme nüüd kristalli punktrühma sümmeetriast tulevaid järeldusi. Olgu meil kristalli punktrühmas n -ndat järku telg. Pöõret nurga φ võõra selle telje ümber iseloomustab vastava aatomi lainefunktsiooni ψ -st sõltuv osa, mille võib valida järgmiselt:

$$\psi(\varphi) = \psi_0(\varphi) e^{ia\varphi}. \quad (26,17)$$

Elektrontihedus

$$\psi^*(\varphi)\psi(\varphi) = \psi_0^*(\varphi)\psi_0(\varphi) \quad (26,18)$$

peab ilmselt jääma invariantseks pöõrdel $\frac{2\pi}{n}$ võõra ja seega

$$\psi_0\left(\varphi + \frac{2\pi}{n}\right) = \psi_0(\varphi). \quad (26,19)$$

ψ ühesuse nõõdest järgneb, et φ -le 2π lisamisel $e^{ia\varphi}$ ei tohi muutuda

$$e^{ia(\varphi + 2\pi)} = e^{ia\varphi}, \text{ ehk } e^{ia2\pi} = 1, \quad (26,20)$$

kust

$$a = \dots -3, -2, -1, 0, 1, 2 \dots$$

Vaatleme nüüd funktsiooni (26,17) teisenemist pöõrdel $\frac{2\pi}{n}$ võõra

$$C_n \varphi(\varphi) = \varphi\left(\varphi + \frac{2\pi}{n}\right) = \varphi_0(\varphi) e^{ia\left(\varphi + \frac{2\pi}{n}\right)}$$

$$= \varphi_0 e^{ia\varphi} e^{ia\frac{2\pi}{n}} = \varphi(\varphi) e^{ia\frac{2\pi}{n}}$$

Paneme tähele, et $a' = a + kn$, kus k on täisarv, annab sama kordaja $e^{ia\frac{2\pi}{n}}$, sest $e^{ia'\frac{2\pi}{n}} = e^{i(a+kn)\frac{2\pi}{n}} = e^{ia\frac{2\pi}{n}} \cdot e^{i2\pi k}$.

on määratud vaid liidetava täpsuseni, mis on mingi n -kordne. Võimalike pöörete seisukohalt on erinevad vaid n erinevat a väärtust, näit. vahemikus $-\frac{n}{2}$ kuni $\frac{n}{2}$. Neid väärtusi nimetatakse kristalliliseks kvantarvuks μ .

$$a = \mu \pmod{n}. \quad (26,21)$$

Selline kirjutusviis tähendab, et a väärtused, mis erinevad teineteisest n -i või tema kordse võrra, annavad sama μ . Väärtused $-\frac{n}{2}$ ja $\frac{n}{2}$ loetakse paarisarvulise n korral võrdseiks.

Paaritu elektronide arvu korral peab olema täidetud tingimus $e^{ia4\pi}$ ning a omandab kõiki poolearvulisi väärtusi, μ aga n erinevat a väärtust.

Alljärgnevas tabelis 7 on toodud võimalikud μ väärtused juhtudel $n = 1, 2, 3, 4$.

Tabel 7.

	μ	μ
$n = 1$	0	$\frac{1}{2}$
$n = 2$	0, 1	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$n = 3$	-1, 0, 1	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
$n = 4$	-1, 0, 1, 2	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
	Paarisarv elektrone	Paaritu arv elektrone

μ kirjeldab kvaasimomendi väärtust antud telje suhtes ning klassifitseerib seisundeid antud taandamatu esituse ula-

tuses.

Inversiooni olemasolu toob jällegi sisse seisundite jagunemise paaris- ja paarituteks seisunditeks.

Kuid peegelduspöõrete $\bar{S}_n = IC_n$ korral teisenevad paaris ja paaritud funktsioonid erinevalt, vastavalt:

$$S_n \psi(\varphi) = IC_n \psi(\varphi) = +1 \cdot \psi(\varphi) e^{i\mu \frac{2\pi}{n}}$$

$$S_n \psi(\varphi) = IC_n \psi(\varphi) = -1 \psi(\varphi) e^{i\mu \frac{2\pi}{n}} = \psi(\varphi) e^{i(\mu \pm \frac{n}{2}) \frac{2\pi}{n}}$$

Seega kirjeldab üldiselt seisundeid kvantarv

$$\mu = \begin{cases} \mu & \text{paaris seisundid} \\ \mu \pm \frac{n}{2} & \text{paaritud seisundid.} \end{cases} \quad (26,22)$$

Näiteks rühma Q jaoks, klassifitseerides seisundeid kvaasimomendi järgi C_4 -telje suhtes, on võimalikud seisundid:

A_0	$E_{\pm \frac{1}{2}}$
A_2	$E_{\pm \frac{3}{2}}$
$E_{0,2}$	$G_{\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}}$
$F_{0, \pm 1}$	
$F_{2, \pm 1}$	

Paaris arv
elektrone

Paaritu arv
elektrone

Rühma Q_n korral tuleb veel juurde seisundite jagunemine paaris- ja paarituiks, seega on neid kaks korda rohkem kui Q jaoks.

Kuidas leida lainefunktsioonide nurkadest sõltuvad osad, mis teiseksid vastavalt antud punktrühma taandamatutele esitustele?

Lainefunktsioon ise võetakse siin kujul

$$\psi_{\Gamma_1, \mu}(\bar{r}) = \sum_1 \frac{f_1(r)}{r} K_{1, \Gamma_1}^{(\mu)}(\theta, \varphi). \quad (26,23)$$

Otsitavad nurkadest sõltuvad osad on $K_{1, \Gamma_1}^{(\mu)}$, neid nimetatakse võre-harmonikuteks, nad kujutavad endast sobivaid kerafunktsioonide lineaarkombinatsioone

$$K_{1, \Gamma_1}^{(\mu)}(\theta, \varphi) = \sum_n A_{1n} \Gamma_{1n}^{(\mu)} \gamma_{1n}(\theta, \varphi). \quad (26,24)$$

Võre-harmonikud teisenevad sümmeetriaoperatsioonide korral nagu kristalli punktrühma taandamatute esituste Γ_1 baasifunktsioonid. μ näitab rida teisendusmaatriksis (numereerib kõdunud seisundeid). Radiaalosa $f_1(r)$ sõltub $E(\bar{k})$ -st. Vahel valitakse ta kujul $B_1 f_1(r)$, kusjuures koefitsiendid B_1 määratakse hääretingimustest elementaarraku pinnal.

Rida (26,23) algab liikmest $l = l'$, mis vastab vaadeldava seisundi kvantarvule l' vabas aatomis.

Võre-harmonikute saamismeetod on lühidalt järgmine:

1. Koostatakse tabel, mis näitab iga Γ_1 igale μ -le vasta-va funktsiooni teisenemist iga punktrühma kuuluva sümmeetriaoperatsiooni korral (ka iga ühte klassi kuuluva elemendi jaoks eraldi). 2. Edasi konstrueeritakse iga Γ_1 jaoks l -ndat järku kerafunktsioonidest lineaarkombinatsioonid, mis teiseksid saadud tabeli kohaselt. Kindla l -i korral ei saa konstrueerida kõikidele Γ_1 -dele vastavaid funktsioone. Igal Γ_1 -l reas l -i järgi jääb osa liikmeid vahele. Loomulikult on erinevate l -dega sama tüüpi Γ_1 funktsioonid erinevad. 3. Lõpuks jagatakse saadud funktsioonid r^l -ga ja ortonormeeritakse.

Võre-harmonikud on leitud kõikide võretüüpide jaoks [5]. Me vaatleme vaid kuubilise sümmeetriaga kristallidele vastavaid nn. kuupharmonikuid, mis on toodud tabelis 8. Tabeli esimeses reas on toodud funktsioonitüübid vastavalt 0 taandamatutele esitustele (paaritu termi korral tuleb lihasada esitusele indeks u ja paaris termi korral indeks g , vaadeldes rühma Q_h). Teises reas on toodud vaba aatomi ter-

Tabel 8.

	A_1	A_2	E	F_1	F_2
1	s	f	d	p, f	d, f
0	y_{00}				
1				y_{10} $\sqrt{2} y_{11}$ $\sqrt{2} y_{1-1}$	
2			y_{20} $\sqrt{2} y_{22}$		$\sqrt{2} y_{21}$ $\sqrt{2} y_{2-1}$ $\sqrt{2} y_{2-2}$
3		$\sqrt{2} y_{3-2}$		y_{30} $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{5}{8}} y_{33} - \sqrt{\frac{3}{8}} y_{31} \right]$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{2}{8}} y_{3-3} + \sqrt{\frac{3}{8}} y_{3-1} \right]$	$\sqrt{2} y_{32}$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{3}{8}} y_{33} + \sqrt{\frac{5}{8}} y_{31} \right]$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{3}{8}} y_{3-3} - \sqrt{\frac{5}{8}} y_{3-1} \right]$
4	$\sqrt{\frac{2}{3}} [y_{40} + y_{44}]$		$\sqrt{2} y_{42}$ $\sqrt{\frac{5}{12}} y_{40} - \sqrt{\frac{14}{12}} y_{44}$	y_{40} $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{7}{8}} y_{41} - \sqrt{\frac{1}{8}} y_{43} \right]$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{7}{8}} y_{4-1} + \sqrt{\frac{1}{8}} y_{4-3} \right]$	$\sqrt{2} y_{4-2}$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{1}{8}} y_{41} + \sqrt{\frac{7}{8}} y_{43} \right]$ $\sqrt{2} \left[\sqrt{\frac{1}{8}} y_{4-1} - \sqrt{\frac{7}{8}} y_{4-3} \right]$

mide tähistused, millele vastavad need esitused.

Antud 1 korral on olemas $2l + 1$ kuupharmonikut (mis alates $l = 2$ jagunevad erinevate sümmeetriate vahel) kooskõlas vaba aatomi energiaseisundi kõdumise kordusega.

Nagu teada,

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos \theta) \cos m\varphi$$

$$Y_{l-m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos \theta) \sin m\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} Y_{lm}^2(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \begin{cases} 1 & \text{kui } m = 0 \\ \frac{1}{2} & \text{kui } m \neq 0. \end{cases}$$

Meie poolt vaadeldavad kuupharmonikud on normeeritud ühele

$$\int \left[K_{l, \Gamma_1}(\mu) \right]^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 1. \quad (26.24)$$

Vaba aatomi s -tüüpi lainefunktsioon kuulub kuubilises kristallis esitusele A_1 . Vastav rida omab kuju

$$f_0(r) Y_{00}(\theta, \varphi) + f_4(r) \sqrt{\frac{2}{3}} \left[Y_{40}(\theta, \varphi) + Y_{44}(\theta, \varphi) \right] + \dots$$

Seega tuleb kuubilises kristallis vaba aatomi s -funktsioonile juurde g -tüüpi lisa. p -funktsioon kristalli asetamisel kuulub F_1 -le ja siin lisandub p -seisundile f -tüüpi lisa jne.

Kui kristalli sümmeetriat arvestatakse ainult nullindas lähenduses, siis igat tüüpi Γ_1 kuupharmoniku jaoks võetakse reast madalaima l -ga liige (see vastab vaba aatomi vaadeldavale orbitaalse pöördimpulsi kvantarvule 1). p -seisundil, mis kuubilises kristallis ei lõhene, on seejuures lihtsalt $A_{1m}^{F_1(\mu)} = \delta_{m\mu}$.

Nullindas lähenduses säilitavad suletud elektronikihid (sama l -ga $2(2l + 1)$ elektroni kindla n korral) kristallis sfäärilise sümmeetria nagu vabas aatomiski, vaatamata

sellele, et sama alakihi elektronid võivad "jaguneda" erinevate taandamatute esituste vahel. Kõrgemates lähendustes, kus reas (26,23) võetakse rohkem liikmeid, ei ole see enam nii.

VIII. MOLEKULIDE NORMAALVÕNKUMISED.

§27. Molekulide normaalvõnkumiste sümmeetria.

Vaatleme nüüd paljuaatomiliste molekulide võnkumisi. Kõige selle molekuli N osakesest (aatomituumast), mis sooritavad perioodilisi võnkumisi kindlate tasakaaluasendite ümber. Tuumade tasakaalulise konfiguratsiooni korral on molekulil kindel sümmeetria, millele vastab üks sümmeetria punktrühmadest. Me lepime algusest peale kokku, et tuumade nihked tasakaaluasenditest on väikesed võrreldes tasakaaluasenditevaheliste kaugustega, kuna enamik siin paragrahvis kasutatavaid eeldusi, eelkõige sõltumatute normaalkoordinaatide sissetoomine on õiged vaid tuumade väikeste nihete jaoks. Tuumade nihete korral tasakaaluasendist muutub üldiselt molekuli sümmeetria. Lähtudes molekuli tasakaalulisest sümmeetriast, osutub võimalikuks klassifitseerida rühmateooria meetodite abil tuumade nihete korral tekkivaid konfiguratsioone, s.t. määrata molekulide võnkumiste sümmeetriaomadused.

Mittelineaarsel molekulil on $3N-6$ võnkumise vabadusastet, kuna summaarsest vabadusastmete arvust $3N$ vastavad translatoorsele liikumisele 3 - ja molekuli kui terviku pöörliikumisele samuti 3 vabadusastet. Lineaarsel molekulil, milles kõik tuumad asuvad ühel sirgel, on võnkumise vabadusastmete arv $3N-5$.

Molekuli võnkeenergia on esitatav kujus

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \dot{Q}_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 Q_{\alpha}^2. \quad (27,1)$$

$N-6$ suurust Q_{α} , mis on lineaarkombinatsioonid tuumade

nihetest, nimetatakse molekuli võnkumiste normaalkoordinaatideks. Märgitud lineaarkombinatsioonid on valitud selliselt, et võnkeenergia E oleks normaalkoordinaatide ja vastavate kiiruste $\dot{Q}_{\alpha i} = \frac{dQ_{\alpha i}}{dt}$ ruutude summa (vastav bilineaarne vorm on diagonaalkujus). Seega on normaalvõnkumised sõltumatud, nad ei mõjosta teineteist. Indeks α eristab normaalvõnkumiste sagedusi (molekuli omavõnkesagedusi) ω_{α} ja $i = 1 \dots f_{\alpha}$ märgib erinevaid normaalvõnkumisi sama võnkesagedusega. f_{α} on seega sageduse ω_{α} esinemise kordsus molekuli võnkespektris. Esimene liige valemis (27,1) on kiineetiline -, teine - potentsiaalne energia.

Molekuli energia ei tohi muutuda kõigi antud molekuli korral võimalike sümmeetriateisenduste rakendamisel. Sellistel teisendustel teiseneb molekuli tuumade tasakaaluline konfiguratsioon iseendaks ning võnkeenergia, mis vastab tuumade nihetele tasakaalulisest konfiguratsioonist, tuleb täpselt sama. Seega peab molekuli võnkeenergia olema invariantne molekuli sümmeetriateisenduste suhtes. Sellest järgneb, et võnkumiste normaalkoordinaadid peavad seejuures teisenema lineaarselt teineteise kaudu ja nimelt nii, et iga antud α korral $\sum_i Q_{\alpha i}^2$ ei muutuks.

Järelikult teostavad normaalkoordinaadid $Q_{\alpha i}$, mis kuuluvad antud molekuli omavõnkesageduse ω_{α} juurde, mingi molekuli sümmeetria punktrühma esituse. Sageduse ω_{α} esinemise kordsus molekuli võnkespektris määrab selle esituse dimensiooni. Esituse taandamatus järgneb siin samadest argumentidest nagu energiaseisunditegi korral kvantmehaanikas. Kaks komplekselt konjugeeritud esitust vastavad samale võnkesagedusele kahekordselt suurema esinemiskordsusega. Molekulide normaalvõnkumiste, s.t. nende kuju ja sageduste ω_{α} väljaarvutamine vastavast sekulaarvõrrandite süsteemist on üsna keeruline ülesanne. Rühmateooria võimaldab meil hõlpsasti määrata normaalvõnkumiste sümmeetriaomadused (kuju) ja leida erinevate sageduste esinemise kordsuse. Sageduste eneste arvutamiseks tuleb juba lahendada vastav võrrandsüsteem.

Molekulide normaalvõnkumiste klassifitseerimiseks tuleb leida esitus, mille teostavad korruga kõik võnkumiste normaalkoordinaadid $Q_{\alpha 1}$ (nimetame teda täisesituseks). See esitus on taanduv ning lahutades ta taandamatuteks esitusteks, leiame normaalvõnkumiste sümmeetriaomadused ja võnkesageduste kordsused. Kui täisesitus sisaldab mingit taandamatut esitust mitmekordselt, siis tähendab see mitme erineva sageduse olemasolu samade sümmeetriaomadustega võnkumiste jaoks.

Kuidas aga leida täisesitust? Me teame, et esituse karakterid on invariantseid ta baasifunktsioonide lineaarteesenduste suhtes. Kuna normaalvõnkumised on lineaarkombinatsioonid tuumade nihete komponentidest u_1 (ristkoordinaadistikus), siis viimased me võimegi valida täisesituse baasifunktsioonideks. Vastavad karakterid on kergesti arvutatavad.

Mingi rühma elemendi G karakteri arvutamisel tulevad arvesse vaid need tuumad, mille tasakaaluasendid jäävad paigale antud sümmeetriateisenduse korral. Kui tuum A läheb sümmeetriaoperatsiooni tulemusel uude asukohta, kus enne asus samasugune tuum B , siis teisenevad nihkekomponendid u_A ja u_B teineteise kaudu ja C -d kujutavas maatriksis on vastavad diagonaalelemendid nullid. Kui aga tuum jääb paigale, siis teisenevad tema nihke komponendid vaid teineteise kaudu ja me saame maatriksis G diagonaalelemendid sõltumatult teisete tuumade nihetest.

Vaatleme pööret $C(\varphi)$ nurga φ võrra kindla sümmeetriatelje ümber. Seejuures jääb pöördeteljel asuv tuum paigale. Tema nihete komponendid võnkumistes olgu u_x, u_y, u_z . Valides sümmeetriatelje suunaks z -telje, saame nihete teiseneemiseeskirja $C(\varphi)$ rakendamisel järgmises kujus:

$$u_x' = u_x \cos \varphi + u_y \sin \varphi$$

$$u_y' = -u_x \sin \varphi + u_y \cos \varphi$$

$$u_z' = u_z$$

Vastava maatriksi diagonaalelementide summa on $1 + 2 \cos \varphi$.

Kui antud sümmeetriateljel asub N_c tuuma, oleks $3N$ nihke u_i poolt teostatava esituse karakter $N_c (1 + 2 \cos \varphi)$. Meid huvitavad aga ainult molekulide võnkumised. Seepärast tuleb saadud avaldisest lahutada molekuli kui terviku nihkele ja pöördle vastavad karakterid. Esimene neist on polaarne, teine - aksiaalne vektor. Pöörde $C(\varphi)$ korral on aga nende karakterid võrdsed: $1 + 2 \cos \varphi$ kummalgi. Seega saame pöörde elemendi karakteri jaoks täisesituses

$$\chi(C) = (N_c - 2) (1 + 2 \cos \varphi) . \quad (27,2)$$

Ühikolemendi karakteri leiame saadud avaldisest, tehes $N_c = N$ ja $\varphi = 0$:

$$\chi(E) = 3N - 6 . \quad (27,3)$$

Analoogiliselt võime arvutada peegelduspöördle $S(\varphi)$ vaetava karakteri. Siin toimub pööre $C(\varphi)$ z-telje ümber koos järgneva peegeldusega xy tasandis. Teljel asuva tuuma nihke komponentide teisenemiseeskirjad tulevad järgmised:

$$\begin{aligned} u_x' &= u_x \cos \varphi + u_y \sin \varphi \\ u_y' &= -u_x \sin \varphi + u_y \cos \varphi \\ u_z' &= -u_z . \end{aligned}$$

Diagonaalelementide summa on siin $(-1 + 2 \cos \varphi)$, ning esituses, mille teostavad kõik $3N$ nihet, saame karakteriks $N_g(-1 + 2 \cos \varphi)$, kusjuures N_g on teisenduse $S(\varphi)$ poolt mõjustamata tuumade arv. Selliseks tuumaks võib ilmselt olla ainult koordinaatide alguses asuv ning N_g võib olla ainult kas 0 või 1. Molekuli masskeskme nihkele vastab siin karakter $-1 + 2 \cos \varphi$. Pöördevektorile vastava karakteri leiame järgmiselt. Arvestame, et

$$S(\varphi) = C(\varphi) \sigma_h = C(\varphi) C_2 I = C(\varphi + \pi) I .$$

Seetõttu on otsitav karakter $1 \cdot (1 + 2 \cos(\varphi + \pi)) = 1 - 2 \cos \varphi$. Summa $(-1 + 2 \cos \varphi) + (1 - 2 \cos \varphi) = 0$ ja peegelduspöörde karakter täisesituses osutub lihtsalt

võrdsaks

$$\chi(S) = N_6(-1 + 2 \cos \varphi) . \quad (27,4)$$

Sellest valemist võime leida karakteri peegelduse jaoks mingis tasapinnas ($\varphi = 0$)

$$\chi(S) = N_6 . \quad (27,5)$$

N_6 on peegeldustasapinnas olevate tuumade arv. Inversiooni karakteri jaoks saame ($\varphi = \pi$)

$$\chi(I) = -N_6 . \quad (27,6)$$

N_1 on inversioonist puutumate tuumade arv ($N_1 = 0,1$).

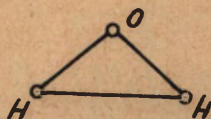
Seega me võime arvutada täisesituse karakterid ning edasine tuundamatuteks esitusteks lahutamine toimub standardsete meetoditega.

Lineaarsete molekulide korral on olukord lihtsam. Võnkumistele vastav vabadusastmete arv on $3N-5$. Võimalikud on võnkumised, mille korral tuumad jäävad ühele sirgele, ja võnkumised, kus see ei ole nii. N osakese liikumisel mööda sirget on vabadusastmete arv N , üks neist vastab molekuli kui terviku nihkele. Seepärast on normaalvõnkumisi, mis ei muuda molekuli lineaarsust $N-1$ (üldiselt erinevate sagedustega). Ülejäänud $(3N-5) - (N-1) = 2N-4$ võnkumist rikuvad molekuli lineaarsust. Neile võnkumistele vastavad sagedused on kahekordselt kõdunud, s.t. on $N-2$ kahekordselt kõdunud sagedust.

Võnkumisi, mille korral ei rikuta molekuli tsentraalsümmeetriat, nimetatakse paarilisteks ja vastasel korral paarituteks võnkumisteks.

§ 28. Näited. H_2O -ja UF_6 tüüpi molekulide normaalvõnkumised.

Vaatleme vee molekuli normaalvõnkumisi. H_2O molekul on näidatud joonisel 20, sümmeetriarühmaks on siin C_{2v} . Pööre



Joon. 20

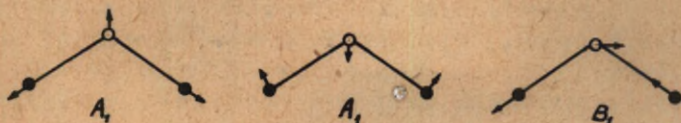
teist järku telje ümber jätab paigale hapniku aatomi, peegeldus molekuli tasapinnas kõik kolm aatomit ja peegeldus σ'_v ainult hapniku aatomi. Normaalkvõnkumiste arv on 3. Rühma C_{2v} karakteriteks täisesituses on seega

E	C_2	σ_v	σ'_v
3	1	3	1

Selle esituse taandamine annab

$$2 A_1 + B_1 .$$

Seega on olemas kaks täissümmeetrilist normaalkvõnkumist ($2 A_1$), mis ei riku H_2O molekuli sümmeetriat C_{2v} . Kolmanda normaalkvõnkumise sümmetriaomadused on määratud esituse B_1 omadustega. Võnkesagedused igal neist kolmest võnkumisest on erinevad (esitused A_1 ja B_1 on ühedimensionaalsed). H_2O -tüüpi molekuli normaalkvõnkumised on näidatud joonisel 21. Normaalkvõnkumiste kuju väljajoonistamiseks lähtume täissümmeetrilisest võnkumisest, mis ei muuda molekuli sümmeetriat. Muutes tuumade nihkeid, leiame üha madalama sümmeetriaga oluliselt erinevate võnkumiste kuju.



Joon. 21

H_2O molekuli tegelik võnkumine on esitatav nende leitud normaalkvõnkumiste lineaarkombinatsioonina.

Edasi vaatleme UF_6 - tüüpi molekuli normaalkvõnkumisi

(vt. joonis 22). Sümmetriarühmaks on siin O_h . Selline sümmetria on ka asenduslikul lisandtsentril NaCl tüüpi võrega kristallis, kui arvestada ainult lisandi lähimate naabrite nihkumisi.



Joon. 22

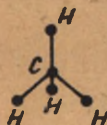
Rühma O_h elementide karakterite jaoks täisesituses leiame:

E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$	I	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_v$	$6S_4$
15	0	-1	1	1	-3	0	5	3	-1

Selle esituse taandamine annab

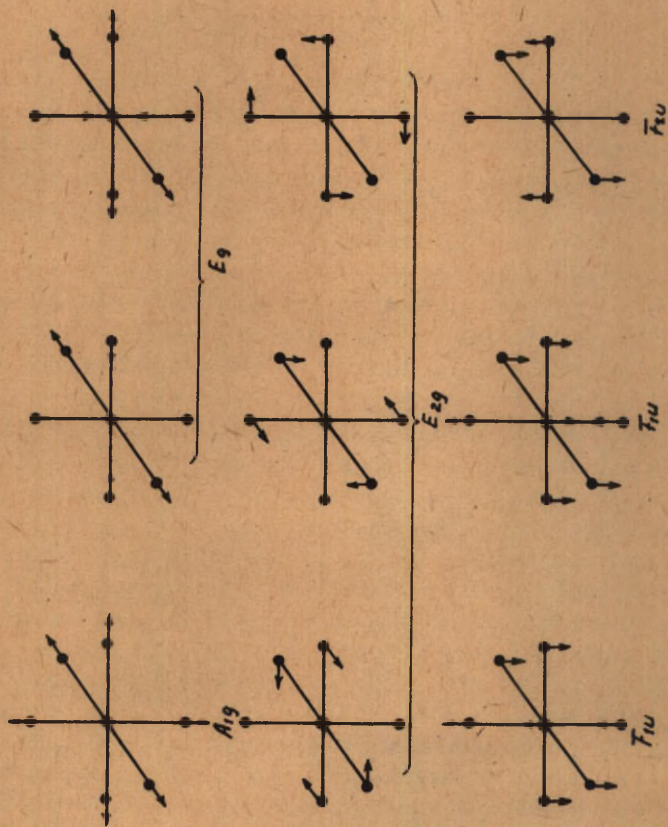
$$A_{1g} + E_g + F_{2g} + 2 F_{1u} + F_{2u} .$$

15-st normaalvõnkumisest on viimased 9 paaritud (häiritakse molekuli tsentraalsümmetria). Erinevaid võnkumiste sümmetria tüüpe on 5. A_{1g} -le vastab täissümmetiline võnkumine. On olemas kaks erinevat E_g -tüüpi võnkumist võrdse sagedusega (s.t. need võnkumised on kahekordselt kõdunud), ning kolmekordselt kõdunud võnkumised F_{2g} ja F_{2u} . $2 F_{1u}$ -le vastab kaks kolmekordselt kõdunud võnkumist. Seega on erinevaid eagedusi molekulil UF_6 kokku 6. Normaalvõnkumised on toodud joonisel 23, kusjuures paaritute võnkumiste jaoks on antud vaid üks võnkumine igast kolmekordselt kõdunud tüübist.



Ülesanded:

1. Leida metaani molekuli CH_4 normaalvõnkumised. Sümmetriarühmaks on T_d . Normaalvõnkumised: $A_1, E, 2 F_2$.



Joan. 23

2. Leida $O_h F_8$ tüüpi molekuli normaalvõnkumised. Sümmeetriarühmaks on O_h . Normaalvõnkumised: A_{1g} , E_g , $2F_{2g}$, A_{2u} , E_u , $2F_{1u}$, F_{2u} .



§ 29. Jahn-Telleri efekt.

Teatud kindla sümmeetriaga molekul, s.t. molekul, milles aatomituumad on paigutatud sümmeetriliselt, võib omada kõdunud energiaseisundeid, kui molekuli sümmeetriarühmal on taandamatuid esitusi, mille dimensioonid on suuremad ühest. Me räägime siin "orbitaalsest" kõdumisest (kvantarvu m_l järgi), jättes spini arvestamata, kuna paljuaatomilistel molekulidel on ta mõju tühine.

Teiselt poolt me teame, et aatomituumad sooritavad molekulides võnkumisi, milliste sümmeetriaomadused on kergesti määratavad rühmateooria abil. Molekuli normaalvõnkumiste hulgas on täissümmeetrilisi, mis ei muuda vaadeldava molekuli sümmeetriat, ning kõrvuti nendega mittetäissümmeetrilisi võnkumisi, mis rikuvad olemasolevat sümmeetriat.

Molekuli optilised elektronid on interaktsioonis nende võnkumistega. Kerkib küsimus, kas ei või elektronide interaktsioon mittetäissümmeetriliste võnkumistega, üldiselt kõdunud elektronseisundi korral, viia molekuli tasakaalulise sümmeetria alanemisele. Siis osutuks meie molekuli endine tasakaaluline sümmeetriline konfiguratsioon ebastabiilseks ja sümmeetria alanemine võiks viia kõdumise kadumisele.

Selleks, et molekuli antud konfiguratsioon oleks stabiilne, peab tema energia funktsioonina tuumadevahelistest kaugustest antud tuumade asendi korral omama minimumi. See tähendab, et molekuli energia muutus tuumade väikeste nihete korral antud sümmeetrilisest konfiguratsioonist ei tohi sisaldada lineaarset liiget nende nihete suhtes.

Tuumade nihked on määratud molekuli võnkumiste normaalkoordinaatidega $Q_{\alpha 1}$ (1 tähistab α -tüüpi kõdunud normaal-

võnkumisi). Olgu H_0 molekuli hamiltoniaan antud sümmeetrilise konfiguratsiooni korral. Hamiltoniaani jaoks, mis vastab mingile tuumade väikeste nihete tõttu tekkinud uuele konfiguratsioonile, saame:

$$H = H_0 + \sum_{\alpha, i} V_{\alpha, i} Q_{\alpha, i} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, i, \beta, k} W_{\alpha, i, \beta, k} Q_{\alpha, i} Q_{\beta, k} + \dots \quad (29,1)$$

Siin olenevad $V_{\alpha, i}$ ja $W_{\alpha, i, \beta, k}$ ainult elektronide koordinaatidest.

Normalkoordinaadid $Q_{\alpha, i}$ teisenevad vastavalt molekuli sümmeetriarühma taandamatutele esitustele. Vaadeldes H käitumist sümmeetriateisenduste korral, me võime aga $Q_{\alpha, i}$ lugeda muutumatuteks ning vaadelda teisenevate suurustena koefitsiente $V_{\alpha, i}$ ja $W_{\alpha, i, \beta, k}$. Seejuures $V_{\alpha, i}$ teisenevad vastavalt samadele taandamatutele esitustele nagu $Q_{\alpha, i}$.

Nagu öeldud, huvitab meid lähemalt teine liige (29,1)-s. Olgu meil tegemist mingi kõdunud elektronseisundiga, millele vastavad lainefunktsioonid on ψ_s . Mittetäissümmeetrilised võnkumised viivad üldiselt vastava kõdunud termi lõhenemisele. Lõhenemise suuruse leidmiseks me peame rakendama häiritusteooriat, seejuures häiritusmaatriksi elementideks on

$$V_{st} = \sum_{\alpha, i} Q_{\alpha, i} \int \psi_s V_{\alpha, i} \psi_t d\tau. \quad (29,2)$$

ψ_s ja ψ_t on lainefunktsioonid, mis kuuluvad vaadeldavale kõdunud elektronseisundile. Lõhenemise suurus lineaarsete liikmeteni $Q_{\alpha, i}$ suhtes leitakse vastavate sekulaarvõrrandite

$$\sum_t (V_{st} - \Delta E \delta_{st}) a_t = 0 \quad (29,3)$$

lahendamisel, kus a_t on koefitsiendid, mis määravad uue lainefunktsiooni ψ kõdunud lainefunktsioonide lineaarkombinatsioonina

$$\psi = \sum_t a_t \psi_t. \quad (29,4)$$

Molekuli sümmeetriline konfiguratsioon osutub stabiilseks, kui $Q_{\alpha 1}$ suhtes puudub lineaarne lõhenemine, s.t. kõik (29,3) lahendid $\Delta E = 0$, mis on võimalik vaid siis, kui ka iga $V_{st} = 0$.

Maatrikselement (29,2) on võrdne nulliga, kui

$$\int \psi_s V_{\alpha 1} \psi_t d\tau = 0.$$

Nagu me teame, on selline integraal nullist erinev ainult juhul, kui integraalilaine funktsioon teiseneb vastavalt ühikesitusele (või omab sellist osa).

Kui ψ_s ja ψ_t teisenevad vastavalt taandamatule esitusele Γ_{el} , siis nende korrutis teiseneb vastavalt selle esituse sümmeetrilisele korrutisele iseendaga: $[\Gamma_{el}^2]_S \cdot V_{\alpha 1}$, nagu märgitud, teiseneb $Q_{\alpha 1}$ -le vastava taandamatu esituse Γ_q järgi.

Seega on (29,2) nullist erinev, kui korrutis

$$[\Gamma_{el}^2] \times \Gamma_q$$

sisaldab endas ühikesitust või, samuti kui $[\Gamma_{el}^2]_S$ sisaldab endas Γ_q -d.

Kui meil on tegemist kõdumata elektronseisundiga, siis $[\Gamma_{el}^2]_S = \Gamma_1$, kus Γ_1 on ühikesitus. Seega Γ_q võib olla samuti ainult ühikesitus - talle vastab täissümmeetriline molekuli normaalkõikumine.

Niisiis, kõdumata elektronseisundis võib toimuda küll tuumade tasakaaluasendite muutus, kuid see vastab täissümmeetrilisele kõikumisele ega riku seega molekuli sümmeetriat. Näiteks molekuli üleminekul ühest orbitaalselt kõdumata elektronseisundist teise võivad muutuda tuumadevahelised tasakaalulised kaugused, kuid säilib endine molekuli sümmeetria. Selles mõttes võib öelda, et molekuli kõdumata elektronseisundites on elektronid interaktsioonis ainult täissümmeetrilise kõikumisega.

Ka kõdunud seisundite korral võivad toimuda täissümmeetrilised tasakaaluasendite nihked, kuna $[\Gamma_{el}^2]_S$ sisaldab alati Γ_1 -te. Kuid siin võivad esineda ka mittetäissümmeetrilisi

sed tuumade tasakaaluasendite nihked, mis on põhjustatud interaktsioonist normaalkvõnkumistega, millele vaetavad taandamatud esitused sisalduvad $\left[\begin{matrix} 2 \\ e_1 \end{matrix} \right]_g$ taandamatuteks esitusteks lahutamise tulemusel. Seda tingimust ei rahulda küll antud elektronseisundi korral kõik võimalikud mittetäissümmeetrilised molekuli normaalkvõnkumised (muuhulgas langevad välja kõik inversiooni suhtes paaritutele esitustele vastavad võnkumised, s.t. võnkumised, mis rikuvad tsentraalsümmeetriat, kuna $\left[\begin{matrix} 2 \\ e_1 \end{matrix} \right]_g$ ei sisalda paarituid esitusi), kuid nagu näitasid H. Jahn ja E. Teller 1937.a., leidub antud kõdunud elektronseisundi jaoks ikka vähemalt üks selline võnkumine, interaktsioon, millega viib tasakaalulise sümmeetria alanemisele.

Erandiks on lineaarsed molekulid, mille korral (29,2) tüüpi maatrikselendid kõdunud seisundite jaoks on identsest nullid.

Seega me olemegi jõudnud nn. Jahn-Telleri teoreemini:

Mitmeaatomse mittelineaarse molekuli kõdunud elektronseisundites osutub tuumade täissümmeetriline konfiguratsioon ebastabiilseks. Tuumad püüavad nihkuda nii, et alanenud sümmeetria tõttu toimuks vähemalt kõdumise astme kahanemine, s.t. vaetava termini lõhenemine.

Viimane nähtus on tuntud Jahn-Telleri efekti nime all.

Vaatleme näiteks UO_6 tüüpi oktaedraalset molekuli.

Sümmeetriarühmake on siin O_h , kuna meil on 7 aatomit, saame 15 normaalkvõnkumist: A_{1g} , E_g , F_{2g} , $2F_{4u}$, F_{2u} (vt. § 28). Viimast kaht tüüpi võnkumised on inversiooni suhtes paaritud ja Jahn-Telleri efektile arvesse ei tule.

Kõdunud termid võivad olla järgmiste sümmeetriatega:

E_g , E_u , F_{1g} , F_{1u} , F_{2g} ja F_{2u} . Nende esituste sümmeetriliste korrutiste iseendaga taandamatuteks esitusteks lahutamine annab

$$\left[\begin{matrix} E_g^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = \left[\begin{matrix} E_u^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = A_{1g} + E_g$$

$$\left[\begin{matrix} F_{1g}^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = \left[\begin{matrix} F_{1u}^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = \left[\begin{matrix} F_{2g}^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = \left[\begin{matrix} F_{2u}^2 \\ g \end{matrix} \right]_g = A_{1g} + E_g + F_{2g}$$

Nagu näha, esaldab igaüks neist vähemalt ühte E_g ja F_{2g} -st, ning orbitaalselt kõdunud elektroneisundis, UO_6 tüüpi molekuli tasakaaluline sümmeetria peab Jahn-Telleri efekti tõttu tulema madalam kuubilisest.

Lõplike punktrühmade taandamatute esituste
karakterite tabelid.

\underline{C}_1	\underline{C}_2	\underline{C}_3	E	I
			E	C_2
			E	σ
A_g	A; z	A; x, y	1	1
$A_u; x, y, z$	B; x, y	$A''; z$	1	-1

\underline{C}_3	E	C_3	C_3^2
A; z	1	1	1
$B; x \pm iy$	1	ϵ	ϵ^2
	1	ϵ^2	ϵ

\underline{C}_{2h}	\underline{C}_{2v}	\underline{D}_2	E	C_2	σ_h	I
			E	C_2	σ_v	σ_v^2
			E	C_2^x	C_2^y	C_2^z
A_g	$A_1; z$	A_1	1	1	1	1
B_g	$B_2; y$	$B_3; x$	1	-1	-1	1
$A_u; z$	A_2	$B_1; z$	1	1	-1	-1
$B_u; x, y$	$B_1; x$	$B_2; y$	1	-1	1	-1

\underline{C}_3	D_3	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
		E	$2C_3$	$3U_2$
$A_1; z$	A_1	1	1	1
A_2	$A_2; z$	1	1	-1
$E; x, y$	$E; x, y$	2	-1	0

\underline{C}_4	\underline{S}_4	E	C_4	C_2	C_4^3
		E	S_4	C_2	S_4^3
$A; z$	A	1	1	1	1
B	$B; z$	1	-1	1	-1
$E; x \pm iy$	$E; x \pm iy$	1	i	-1	-i
		1	-i	-1	i

\underline{C}_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
$A; z$	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
$E_2; x \pm iy$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω

C_{4v}			E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_v'$	
D_4			E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U_2$	
D_{2d}			E	C_2	$2S_4$	$2U_2$	$2\sigma_d$	
$A_1; z$	A_1	A_1	1	1	1	1	1	
A_2	$A_2; z$	A_2	1	1	1	-1	-1	
B_1	B_1	B_1	1	1	-1	1	-1	
B_2	B_2	$B_2; z$	1	1	-1	-1	1	
$E; x,y$	$E; x,y$	$E; x,y$	2	-2	0	0	0	
D_6			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3U_2$	$3U_2$
C_{6v}			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_v$	$3\sigma_v'$
D_{3h}			E	σ_h	$2C_3$	$2S_6$	$3U_2$	$3\sigma_v'$
A_1	$A_1; z$	A_1	1	1	1	1	1	1
$A_2; z$	A_2	A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	B_2	A_1''	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	B_1	$A_2; z$	1	-1	1	-1	-1	1
E_2	E_2	$E; x,y$	2	2	-1	-1	0	0
$E_1; x,y$	$E_1; x,y$	E''	2	-2	-1	1	0	0
T			E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$		
	A		1	1	1	1		
	E		1	1	ϵ	ϵ^2		
			1	1	ϵ^2	ϵ		
	$F; x,y,z$		3	-1	0	0		

\underline{O}		E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
	T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	-1	-1
E	E	2	-1	2	0	0
F_2	$F_2; x,y,z$	3	0	-1	1 ^v	-1
$F_1; x,y,z$	$F_1; x,y,z$	3	0	-1	-1	1

\underline{D}_{2h}	E	C_2^x	C_2^y	C_2^z	I	σ_v	σ_v'	σ_v''
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{2g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
A_{1u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
$B_{3u}; x$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
$B_{1u}; z$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
$B_{2u}; y$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

\underline{C}_{4h}	E	C_4	C_2	C_4^3	I	S_4^3	σ_h	S_4
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
B_g	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E_g	1	i	-1	-i	1	i	-1	-i
	+1	-i	-1	i	1	-i	-1	i
A_u, z	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_u	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
E_u, x^+1y	1	i	-1	-i	-1	-i	1	i
	1	-i	-1	i	-1	i	1	-i

D_{4h}	E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U_2'$	I	6_h	$2S_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
B_{1g}	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
B_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
E_g	2	-2	0	0	0	2	-2	0	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}; z$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
B_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1
$E_u; x,y$	2	-2	0	0	0	-2	2	0	0	0

C_{3h}	E		C_3	C_3^2	6_v	S_3	S_3^{-1}
	S_6	E	C_3	C_3^2	I	S_6^5	S_6
A	A_g	1	1	1	1	1	1
E	E_g	1	ξ	ξ^2	1	ξ	ξ^2
		1	ξ^2	ξ	1	ξ^2	ξ
A''	$A_u; z$	1	1	1	-1	-1	-1
E''	$E_u; x \pm iy$	1	ξ	ξ^2	-1	$-\xi$	$-\xi^2$
		1	ξ^2	ξ	-1	$-\xi^2$	$-\xi$

D_{3d}	E	$2C_3$	$3U_2$	I	$2S_6$	$3\sigma_x$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1
E_g	2	-1	0	2	-1	0
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1
$A_{2u}; z$	1	1	-1	-1	-1	1
$E_u; x,y$	2	-1	0	-2	1	0

\underline{C}_{6h}	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	σ_h	S_6	S_3	I	S_3^{-1}	S_6^5
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_u	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E_{1g}	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
$E_{2u}; x^{\pm 1}y$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω
$A_u; z$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
B_g	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$	-1	$-\omega^2$	ω	-1	$-\omega^2$	ω
E_{1u}	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2	-1	ω	$-\omega^2$	-1	ω	$-\omega^2$
	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$	-1	$-\omega$	$-\omega^2$	1	ω	ω^2
E_{2g}	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω	-1	ω^2	ω	1	$-\omega^2$	$-\omega$
	1	ω^2	ω	1	ω	ω^2	1	ω^2	ω	1	ω^2	ω
\underline{D}_{6h}	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3U_2$	$3U_2$	I	σ_h	$2S_6$	$2S_3$	$3C_2'$	$3C_2''$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
B_{1g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1
E_{2g}	2	2	-1	-1	0	0	2	2	-1	-1	0	0
E_{1g}	2	-2	-1	1	0	0	2	-2	-1	1	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}; z$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
E_{2u}	2	2	-1	-1	0	0	-2	-2	1	1	0	0
$E_{1u}; x, y$	2	-2	-1	1	0	0	-2	2	1	-1	0	0

T_h	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$	I	36_h	$4S_6$	$4S_6$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
E_g	1	1	ϵ	ϵ^2	1	1	ϵ	ϵ^2
F_g	1	1	ϵ^2	ϵ	1	1	ϵ^2	ϵ
F_g	3	-1	0	0	3	-1	0	0
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
E_u	1	1	ϵ	ϵ^2	-1	-1	$-\epsilon$	$-\epsilon^2$
E_u	1	1	ϵ^2	ϵ	-1	-1	$-\epsilon^2$	$-\epsilon$
$F_u; x,y,z$	3	-1	0	0	-3	1	0	0

O_h	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$	I	$8S_6$	36_h	66_d	$6S_4$
$A_{1g}(\Gamma_1)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2g}(\Gamma_2)$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
$E_g(\Gamma_3)$	2	-1	2	0	0	2	-1	2	0	0
$F_{1g}(\Gamma_4)$	3	0	-1	-1	1	3	0	-1	-1	1
$F_{2g}(\Gamma_5)$	3	0	-1	1	-1	3	0	-0	1	-1
$A_{1u}(\Gamma_1')$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}(\Gamma_2')$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
$E_u(\Gamma_3')$	2	-1	2	0	0	-2	1	-2	0	0
$F_{1u}(\Gamma_4'); x,y,z$	3	0	-1	-1	1	-3	0	1	1	-1
$F_{2u}(\Gamma_5')$	3	0	-1	1	-1	-3	0	1	-1	1

L i s a 2.

Punktrühmade kaheste esituste karakterite tabel.

\underline{D}_2'	E	Q	$c_2(x)$	$c_2(y)$	$c_2(z)$
			$c_2(x)Q$	$c_2(y)Q$	$c_2(z)Q$
E'	2	-2	0	0	0

\underline{D}_3'	E	Q	c_3	c_3^2	$3U_2$	$3U_2Q$
			c_3^2Q	c_3Q		
E_1'	1	-1	-1	1	1	-1
	1	-1	-1	1	-1	1
E_2'	2	-2	1	-1	0	0

\underline{D}_6'	E	Q	c_2	c_3	c_3^2	c_6	c_6^5	$3U_2$	$3U_2'$
			c_2Q	c_3^2Q	c_3Q	c_6^5Q	c_6Q	$3U_2Q$	$3U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
E_2'	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
E_3'	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0

\underline{D}_4'	E	Q	c_2	c_4	c_4^3	$2U_2$	$2U_2'$
			c_2Q	c_4^3Q	c_4Q	$2U_2Q$	$2U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
E_2'	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

\underline{T}'	E	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$4C_3Q$	$4C_3^2Q$	$3C_2$	$3C_2Q$
E'	2	-2	1	-1	-1	1	0	0
G'	2	-2	ε	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε^2	0	0
	2	-2	ε^2	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε	0	0

\underline{Q}'	E	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_4^2$	$3C_4$	$3C_4^3$	$6C_2$
			$4C_3^2Q$	$4C_3Q$	$3C_4^2Q$	$3C_4^3Q$	$3C_4Q$	$6C_2Q$
E_1'	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
E_2'	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
G'	4	-4	-1	1	0	0	0	0

KIRJANDUS.

1. Ландау Л., Лифшиц Е., Квантовая механика ч. I, ГИТТЛ, 1948.
2. Любарский Г.Я., Теория групп и ее применение в физике, ГИТТЛ, 1957.
3. Багавантам С., Венкатарайуду Г., Теория групп и ее применение к физическим проблемам, ИИЛ, 1959.

TÄIENDAV KIRJANDUS.

1. Ельяшевич М.А., Спектры редких земель, ГИТТЛ, 1953.
2. Соколов А.В., Широковский В.П., УФН, 60, вып. 4, 617, 1956.
3. Bethe, H., Ann. Phys., 2, 133, 1929.
4. Van der Lage, F., Bethe, H., Phys.Rev., 71, No 9, 612, 1947.
5. Bell, D., Rev. Mod. Phys., 26, No 3, 311, 1954.
6. Jahn, H., Teller, E., Proc.Roy. Soc., A.161, 220, 1937.

SISUKORD.

	Lk.
SISSEJUHATUS	3
I. KEHADE SÜMMEETRIA	5
§1. Sümmetriateisendused. Ruumilise sümme- ria kolm põhiteisendust	5
§2. Näide. Elektron ühemõõtmelises sümmeetrili- ses potentsiaalaugus	7
II. ABSTRAKTSE RÜHMATEOORIA PÕHIMÕISTEID	11
§3. Rühm	11
§4. Alamrühm	16
§5. Kaaselemendid (konjugeeritud elemendid) ja klass	19
§6. Normaalgaja	20
§7. Rühmade otsekorrutis	21
§8. Isomorfsus ja homomorfsus	21
III. SÜMMETRIATEISENDUSTE PUNKTRÜHMAD	23
§9. Punktrühm	23
§10. Punktrühma sümmeetriateisenduste geomeet- rilisi omadusi	24
§11. Punktrühma klasside leidmise abiregleid	31
§12. Lõplike punktrühmade tüüpe	33
IV. ESITUSTE TEOORIA	40
§13. Rühmade esitamine	40
§14. Taandamatud esitused ja nende omadused	44
§15. Taanduva esituse lahutamine taandamatu- teks esitusteks	46
§16. Esituste korrutamine	47

§17. Punktrühmade taandamatud esitused	51
V. RÜHMATEOORIA JA KVANTMEHAANIKA	56
§18. Taandamatud esitused ja termide klassifikatsioon	56
§19. Termide lõhenemine	60
§20. Jäävuse seadused	63
§21. Valikureeglid häiritusteoorias	65
VI. PIDEVAD RÜHMAD	69
§22. Pidevad punktrühmad	69
§23. Lõplike punktrühmade kahesed esitused	72
§24. Impulssmomentide liitmine	74
VII. ENERGIASEISUNDID KRISTALLIDES	77
§25. Termide lõhenemine kristallis	77
§26. Elektronide lainefunktsioonid kristallides	82
VIII. MOLEKULIDE NORMAALVÖNKUMISED.	92
§27. Molekulide normaalvõnkumiste sümmeetria	92
§28. Näited. H ₂ O- ja UF ₆ -tüüpi molekulide normaalvõnkumised	96
§29. Jahn-Telleri efekt	100
LISA 1	105
LISA 2	112
KIRJANDUS	115

Rbl. 0.22

XII
NA-350