

## Grupy a symetrie II

- vibrace pyramid  $XY_3$  ( $C_{3v}$ )
- pravidelný čtyřstěn:  $P(4)$  a bodová grupa  $T_d$
- notace pro bodové grupy (Schoenflies a mezinárodní)
- direktní součin matic a grup
- příklad  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$
- notace pro reprezentace
- operace symetrie na funkcích souřadnic
- bázové funkce

# Molekulární vibrace pyramidální $XY_3$ ( $C_{3v}$ ); normální módy - Herzberg II

$3N=12$  stupňů volnosti

**12-ti rozměrná (reducibilní) reprezentace v prostoru posunu atomů**

3 bez 3 translací a 3 rotací:  $N-6=6$  vibrací

**6-ti rozměrná (reducibilní) reprezentace v prostoru výchylek z rovnovážných poloh**

**Table 4.2.** Characters of the irreducible representations of the group  $C_{3v}$

Class:	$\mathcal{C}_1$	$\mathcal{C}_2$	$\mathcal{C}_3$
Element:	$E$	$C_3, C_3^{-1}$	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$E$	2	-1	0

$$\Gamma_{\text{mol.vib.}} = \Gamma^{\text{a.s.}} \otimes \Gamma_{\text{vec}} - \Gamma_{\text{trans}} - \Gamma_{\text{rot}}$$

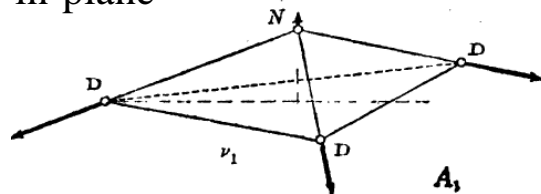
$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{mol.vib.}} &= (2A_1 + E) \otimes (A_1 + E) - (A_1 + E) - (A_2 + E) \\ &= 2A_1 + 2E.\end{aligned}$$

6 vibrací, povolené v IR i Ramanově rozptylu

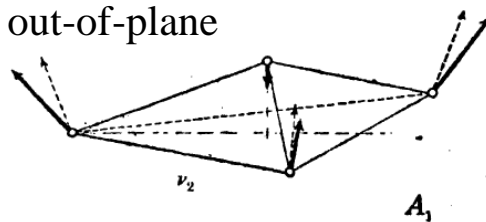
4 frekvence, dvě jsou dvojnásobně degenerované (mají 2 ortogonální vzory výchylek)

“breathing modes”

in-plane



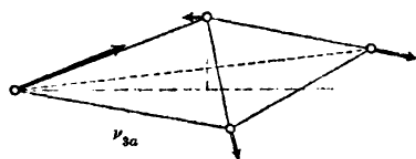
out-of-plane



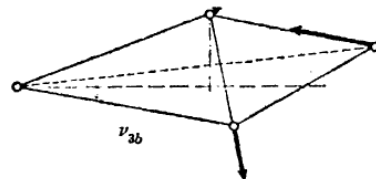
Molecule

Observed  
frequencies ( $\text{cm}^{-1}$ )

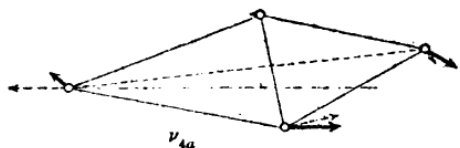
Molecule	Observed frequencies ( $\text{cm}^{-1}$ )			
	$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_3$	$\nu_4$
$\text{NH}_3$	3337	950 <sup>45</sup>	3414	1628
$\text{ND}_3$	2419	749 <sup>45</sup>	2555	1191
$\text{PH}_3$	2327	991 <sup>45</sup>	2421	1121
$\text{PD}_3$	1694	730 <sup>45</sup>	—	806



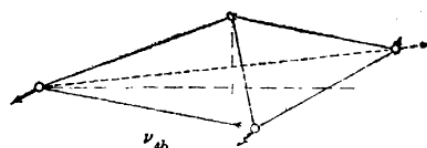
E



E



E



E

FIG. 45. Normal vibrations of the  $\text{ND}_3$  molecule.—The vibrations are drawn to scale for  $\text{ND}_3$  (see p. 177) in oblique projection. (For  $\text{NH}_3$  the large mass ratio of N to H would not have allowed the displacement vectors of N to be drawn to the same scale as those of H). Both components of the degenerate vibrations are shown. The broken-line arrows in  $\nu_2$  and  $\nu_4$  give the symmetry coordinates of Fig. 58 (see p. 155). They are added so that the form of the vibrations can be more clearly visualized. In  $\nu_{3b}$  there is a very small displacement (too small to show in the scale of the diagram) of the left D nucleus parallel to the line connecting the two other D nuclei (see also the discussion of Fig. 60 on p. 171). It should be noted that  $\nu_{3a}$  and  $\nu_{4a}$  are symmetric,  $\nu_{3b}$  and  $\nu_{4b}$  antisymmetric with respect to the plane of symmetry through the left D nucleus, that is, the plane of the paper.

Posoudit poměr frekvencí pro  $\text{NH}_3/\text{ND}_3$ , nepřímá úměra odmocnině z hmotnosti (?)

## Další příklad - $T_d$

Operace symetrie pravidelného čtyřstěnu (struktura ZnS):

identita  $E$ ,

osm rotací  $C_3$  kolem diagonál (čárkovaně),

tři rotace  $C_2$  kolem  $x, y, z$ ,

šest os  $S_4$  kolem  $x, y, z$ , odpovídajícím rotacím

$$o \pm\pi/2$$

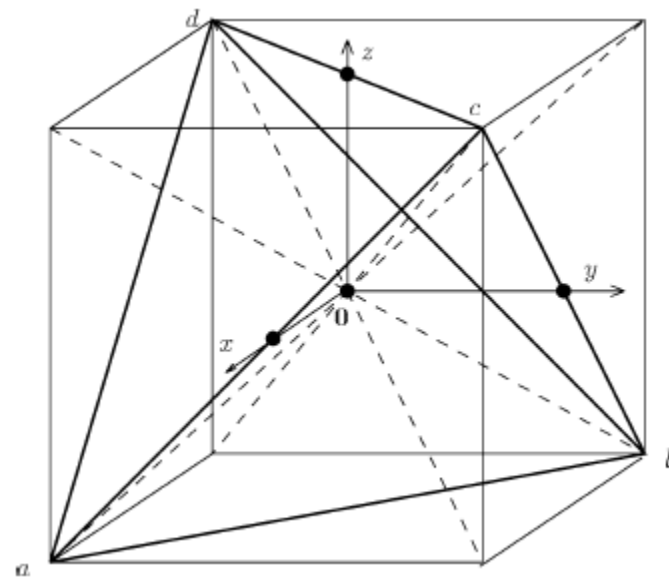
šest zrcadlení  $\sigma_d$  (diagonální roviny)

řád grupy  $T_d$  je 24,

je izomorfní s grupou permutací  $P(4)$ ,

5 tříd, tabulka charakterů je matice 5x5

všimneme si ortogonality řádků a sloupců



## Příklad - $T_d$

Tabulky charakterů grupy  $T_d$  ( $\bar{4}3m$ ) ze dvou zdrojů:

Inui, Tanabe, Onodera, Group theory and its applications in physics, Springer 1976

$T_d$		$E$	$6IC_4$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$8C_3$
$A_1$	$\Gamma_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	$\Gamma_2$	1	-1	1	-1	1
$E$	$\Gamma_3$	2	0	2	0	-1
$T_1$	$\Gamma_4$	3	1	-1	-1	0
$T_2$	$\Gamma_5$	3	-1	-1	1	0

M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, Group theory, Applications to the physics of Condensed Matter, Springer 2008

	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$E$	2	-1	2	0	0
$T_1$	3	0	-1	-1	1
$T_2$	3	0	-1	1	-1

## Příklad - $T_d$

Tabulky charakterů pro bodovou grupu  $T_d$  a (izomorfní) grupu  $P(4)$  z Dress\_2008.

Co vede označení tříd grupy  $P(4)$ , a jaká je souvislost s operacemi symetrie  $T_d$ ?  
Všimnout si rozdílného značení ireducibilních reprezentací.

	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$E$	2	-1	2	0	0
$T_1$	3	0	-1	-1	1
$T_2$	3	0	-1	1	-1

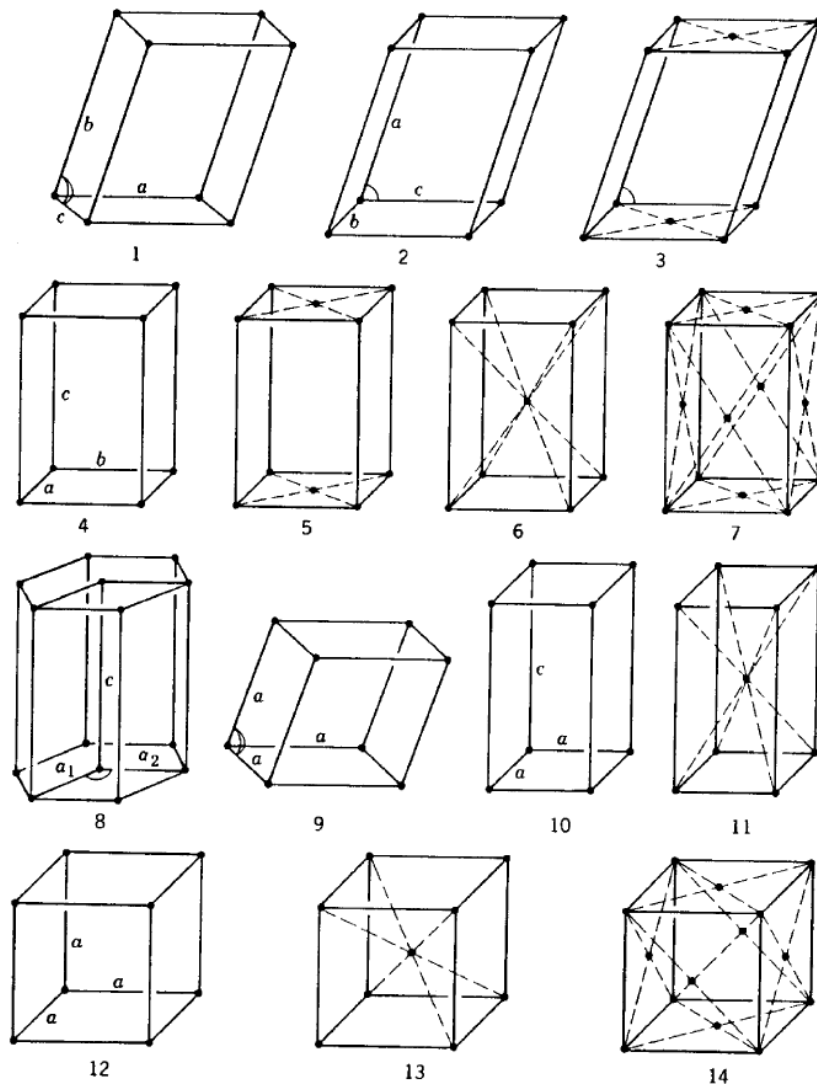
$P(4)$	$(1^4)$	$8(3, 1)$	$3(2^2)$	$6(2, 1^2)$	$6(4)$
$\Gamma_1^s$	1	1	1	1	1
$\Gamma_1^a$	1	1	1	-1	-1
$\Gamma_2$	2	-1	2	0	0
$\Gamma_3$	3	0	-1	1	-1
$\Gamma_{3'}$	3	0	-1	-1	1

## 14 Bravaisových mřížek

základ pro 230 prostorových  
grup v 3D (73 symorfních,  
157 nesymorfních - mají  
šroubové osy a skluzové  
roviny)

řada příkladů v

Dresselhaus, Dresselhaus &  
Jorio

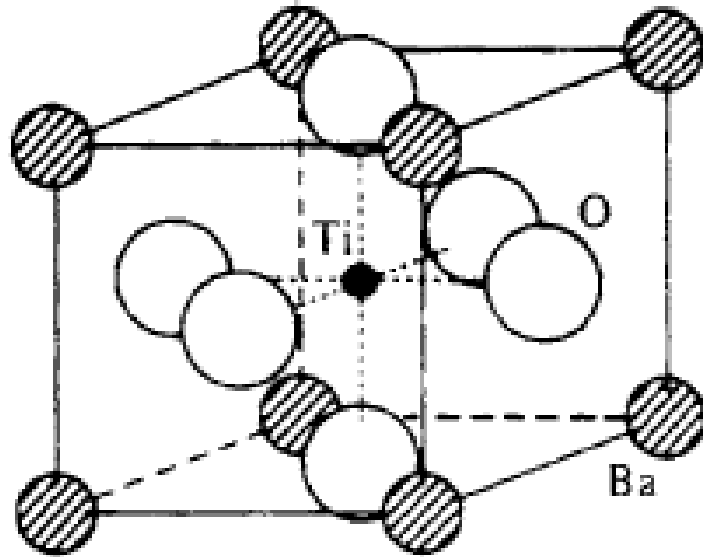


**Fig. 9.3.** The fourteen Bravais space lattices illustrated by a unit cell of each: (1) triclinic, simple; (2) monoclinic, simple; (3) monoclinic, base centered; (4) orthorhombic, simple; (5) orthorhombic, base centered; (6) orthorhombic, body centered; (7) orthorhombic, face centered; (8) hexagonal; (9) rhombohedral; (10) tetragonal, simple; (11) tetragonal, body centered; (12) cubic, simple; (13) cubic, body centered and (14) cubic, face centered

## Perovskitová ( $\text{CaTiO}_3$ ) krystalová struktura - $\text{BaTiO}_3$

$O_h^1$  ( $\text{Pm}3\text{m}$ )

Ti v centrální (a) pozici v krychli, Ba v pozici (b), O v pozici (c)  
iont Ti v centru krychle je „malý“, ferroelektrický fázový přechod





(Krystalografické) bodové grupy – dvě hlavní konvence pro označování:  
Schoenfliesova a „mezinárodní“ (Hermann-Maguin, international)

Translační symetrie omezuje  $n$ -násobné rotační osy  $C_n$  na  $n=1,2,3,4$  a  $6$ .

Schoenflies	international
$C_n$	1,2,3,4,6
$\sigma$ (zrcadlení)	m
$S_n$ (rotačně-inverzní osa)	$\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

Symbol m pro rovinu zrcadlení nerozlišuje mezi vertikální, horizontální a diagonální rovinou; místo toho,

$n/m$  znamená horizontální rovinu kolmou k  $n$ -násobné ose,

$nm$  znamená horizontální rovinu obsahující  $n$ -násobnou osu.

## Bodové grupy – dvě hlavní konvence pro 32 krystalografických bodových grup

Crystal system	Schönflies symbol	International symbol (abbreviated)
Cubic	$O_h$	$\frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m} (m\bar{3}m)$
	O	432
	$T_d$	$\bar{4}3m$
	$T_h$	$\frac{2}{m} \bar{3} (m\bar{3})$
	T	23
Tetragonal	$D_{4h}$	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} (4/mmm)$
	$D_4$	422
	$D_{2d}$	$\bar{4}2m$
	$C_{4v}$	4mm
	$C_{4h}$	$\frac{4}{m} (4/m)$
	$S_4$	$\bar{4}$
	$C_4$	4
Orthorhombic	$D_{2h}$	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} (mmm)$
	$D_2$	222
	$C_{2v}$	2mm

## Bodové grupy – dvě hlavní konvence pro 32 krystalografických bodových grup

Crystal system	Schönflies symbol	International symbol (abbreviated)
Hexagonal	$D_{6h}$	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (6/mmm)
	$D_6$	622
	$D_{3h}$	$\bar{6}m2$
	$C_{6v}$	6mm
	$C_{6h}$	$\frac{6}{m}$ (6/m)
	$C_{3h}$	$\bar{6}$
	$C_6$	6
	Trigonal	$D_{3d}$
$D_3$		32
$C_{3v}$		3m
$C_{3i}(S_6)$		$\bar{3}$
$C_3$		3
Monoclinic	$C_{2h}$	$\frac{2}{m}$ (2/m)
	$C_{1h}(C_s)$	m
Triclinic	$C_2$	2
	$C_i$	$\bar{1}$
	$C_1$	1

## Direktní součin matic

Nechť jsou  $A$  a  $B$  matice s  $l_{Ac} l_{Ar}$  a  $l_{Bc} l_{Br}$  prvky:

$A_{ij}$ ,  $i=1, \dots, l_{Ar}$ ,  $j=1, \dots, l_{Ac}$ , and  $B_{km}$ ,  $k=1, \dots, l_{Br}$ ,  $m=1, \dots, l_{Bc}$ .

Matice  $C=A \times B$ , označovaná jako **direktní součin**, je tvořena  $l_{Ar} l_{Ac} l_{Br} l_{Bc}$  všemi součiny  $A_{ij} B_{km} = C_{ik,jm}$ . Alternativní symbol je  $C=A \otimes B$ .

Pro zacházení s maticemi je vhodné pravoúhlé uspořádání prvků.

Pár symbolů  $ik$  označuje řádky, pár  $jm$  sloupce pravoúhlého pole

$l_{Ar} l_{Br}$  řádků a  $l_{Ac} l_{Bc}$  sloupců matice  $C$ .

Vodítkem pro definici násobení matic vzniklých direktním součinem je požadavek, aby „transformace“ byly reprezentovány postupným násobením matic:

$A'' = A' A$  reprezentuje operaci  $A$  následovanou operací  $A'$ ;

podobně  $B'' = B' B$  a  $C'' = C' C = A' A \times B' B$ . Prvky direktního součinu jsou

$$(C' C)_{ik,jm} = \sum_p \sum_q A'_{ip} A_{pj} B'_{kq} B_{qm} = \sum_p \sum_q A'_{ip} B'_{kq} A_{pj} B_{qm} = \sum_p \sum_q C'_{ik,pq} C_{pq,jm},$$

což vyjde s použitím obvyklého pravidla “řádek-krát-sloupec” s maticemi  $C'$  a  $C$ .

Pravoúhlé uspořádání prvků  $A \times B$  :

$$A \times B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1l_{Ac}}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2l_{Ac}}B \\ \cdot & & & \\ A_{l_{Ar}1}B & A_{l_{Ar}2}B & \dots & A_{l_{Ar}l_{Ac}}B \end{bmatrix},$$

kde  $B$  je pravoúhlý blok

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1l_{Bc}} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2l_{Bc}} \\ \cdot & & & \\ B_{l_{Br}1} & B_{l_{Br}2} & \dots & B_{l_{Br}l_{Bc}} \end{bmatrix}.$$

## Direktní součin grup

Dvě grupy,

$G_A$  s prvky  $A_i, i=1, \dots, n_A$ , a

$G_B$  s prvky  $B_j, j=1, \dots, n_B$ , takové že  $A_i B_j = B_j A_i$  pro všechny jejich prvky,

tvoří grupu - **direktní součin** -  $G_A \times G_B$  tvořenou všemi  $A_i B_j$ .

Všechny čtyři axiomy jsou splněny:

1.  $A_i B_j A_k B_l = (A_i A_k)(B_j B_l)$ ,

2. jednotkový prvek je  $E_A E_B$ ,

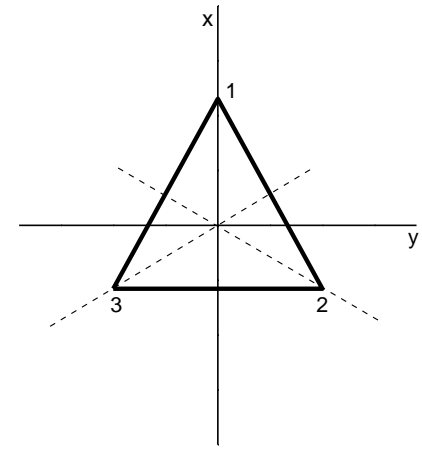
3. inverzní prvek...  $A_i^{-1} B_j^{-1}$ , neboť  $A_i^{-1} B_j^{-1} A_i B_j = E_A E_B$ ,

4. násobení je asociativní.

Jestliže  $G_A$  a  $G_B$  nemají žádný společný prvek (jednotku bychom asi mohli považovat za společnou), řád  $G_A \times G_B$  je  $n_A n_B$ .

## Direktní součin grup - příklad

Operace symetrie rovnostranného trojúhelníka  
(Schoenfliesova notace)



tvoří bodovou grupu  $C_{3v} \{E, 3\sigma_v, 2C_3\}$ , pokud je horní a dolní strana trojúhelníka odlišitelná (například „pyramidové“ molekuly typu  $\text{NH}_3$ );

bez této asymetrie přibude další operace symetrie:

$\sigma_h$ , zrcadlení v horizontální rovině.

Protože  $\sigma_h\sigma_h = E$ , grupa  $C_{1h} \{E, \sigma_h\}$  je cyklickou grupou řádu 2.

Horizontální zrcadlení komutuje se všemi prvky  $C_{3v}$ , celková symetrie je tedy popsána grupou  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$  s 12-ti prvky

$\{E, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, C_3, C_3^2, \sigma_h, \sigma_h\sigma_1, \sigma_h\sigma_2, \sigma_h\sigma_3, \sigma_hC_3, \sigma_hC_3^2\}$ .

Direktní součin grup – příklad  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$ , tabulka násobení

s jednodušší notací  $P(3)$ :  $\sigma_1 \equiv A, \sigma_2 \equiv B, \sigma_3 \equiv C, C_3 \equiv D, C_3^2 \equiv F$ ; dále  $\sigma_h \equiv S$ :

vpravo vlevo	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

	E	S
E	E	S
S	S	E

vpravo vlevo	E	A	B	C	D	F	S	SA	SB	SC	SD	SF
E	E	A	B	C	D	F				?		
A	A	E	D	F	B	C						
B	B	F	E	D	C	A		?				
C	C	D	F	E	A	B						
...												



Příklad  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$ , třídy, ireducibilní reprezentace

šest tříd:

$$\{E\}, \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}, \{C_3, C_3^2\},$$

$$\{\sigma_h\}, \{\sigma_h\sigma_1, \sigma_h\sigma_2, \sigma_h\sigma_3\}, \{\sigma_h C_3, \sigma_h C_3^2\}$$

hledáme matici 6x6 s charaktery ireducibilních reprezentací direktního součinu

(z Inui, Tanabe, Onodera, Group theory and its applications in physics, Springer 1976)

**Table 4.2.** Characters of the irreducible representations of the group  $C_{3v}$

Class:	$\mathcal{C}_1$	$\mathcal{C}_2$	$\mathcal{C}_3$
Element:	$E$	$C_3, C_3^{-1}$	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$E$	2	-1	0

**Table 4.3.** Irreducible representations of the group  $C_s$

	$E$	$\sigma$
$A'$	1	1
$A''$	1	-1

Příklad  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$ , charaktery ireducibilních reprezentací

matice 3x3 ( $C_{3v}$ ) je pro  $D_{3h}$  3x zopakovaná, dolní diagonální blok má opačné znamení díky druhé ireducibilní reprezentaci  $C_{1h}$ , s charakterem  $A''=(1,-1)$

**Table 4.4.** Characters of the irreducible representations of the group  $D_{3h} = C_{3v} \times C_s$

	$E$	$C_3, C_3^{-1}$	$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	$\sigma_h$	$C_3\sigma_h, C_3^{-1}\sigma_h$	$U_1, U_2, U_3$
$A_1 \times A' = A'_1$	1	1	1	1	1	1
$A_2 \times A' = A'_2$	1	1	-1	1	1	-1
$E \times A' = E'$	2	-1	0	2	-1	0
$A_1 \times A'' = A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_2 \times A'' = A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1
$E \times A'' = E''$	2	-1	0	-2	1	0

Direktní součin grup – příklad  $D_{3h} = C_{3v} \times C_{1h}$ , třídy, ireducibilní reprezentace

jiná notace pro některé třídy

(charaktery z M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, Group theory, Applications to the physics of Condensed Matter, Springer 2008)

řádky a sloupce jsou odlišné (ortogonální) → lze najít korespondenci s předchozí verzí tabulky (charaktery jsou stejné)

Table A.14. Character table for group  $D_{3h}$  (hexagonal)

$D_{3h} = D_3 \otimes \sigma_h (\bar{6}m2)$			$E$	$\sigma_h$	$2C_3$	$2S_3$	$3C'_2$	$3\sigma_v$
$x^2 + y^2, z^2$	$R_z$	$A'_1$	1	1	1	1	1	1
		$A'_2$	1	1	1	1	-1	-1
	$z$	$A''_1$	1	-1	1	-1	1	-1
		$A''_2$	1	-1	1	-1	-1	1
$(x^2 - y^2, xy)$	$(x, y)$	$E'$	2	2	-1	-1	0	0
$(xz, yz)$	$(R_x, R_y)$	$E''$	2	-2	-1	1	0	0

## Bodové grupy: označení reprezentací

Chemická notace (Mulliken, 1933) běžná v molekulární fyzice nebo v mřížové dynamice. Používá symboly

$A$  a  $B$  pro jednorozměrné reprezentace ( $B$  tehdy, je-li lichá při nejmenší rotaci kolem hlavní osy),

$E$  pro dvojrozměrné reprezentace,

$T, U, V, W$  pro reprezentace dimenze 3, 4, 5, 6.

Fyzikální (Bethe, 1929; Koster, Dimmock, Wheeler and Statz, 1963):

$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$ ; v novější literatuře o kondenzovaných látkách.

Alternativně, občas (Bouckaert, Smoluchowski and Wigner, 1935);

příklad pro  $T_d$ :

Mulliken	KDWS	BSW
$A_1$	$\Gamma_1$	$\Gamma_1$
$A_2$	$\Gamma_2$	$\Gamma_2$
$E$	$\Gamma_3$	$\Gamma_{12}$
$T_1$	$\Gamma_4$	$\Gamma_{15}$
$T_2$	$\Gamma_5$	$\Gamma_{25}$

## Bodové grupy: označení reprezentací

Mullikenovo značení má další pravidlo:

jestliže grupa obsahuje inverzi, symbol reprezentace má další index, buď

“g” (gerade) pro sudou paritu při inverzi, nebo

“u” (ungerade) pro lichou paritu.

Příklad ortorombické bodové grupy  $D_{2h}=D_2 \times C_I$ ,  $C_I=\{E, I\}$  je cyklická grupa řádu 2.

$D_{2h}$		Basis	$E$	$C_{2z}$	$C_{2y}$	$C_{2x}$	$I$	$\sigma_z$	$\sigma_y$	$\sigma_x$
$A_g$	$\Gamma_1^+$	$x^2, y^2, z^2$	1	1	1	1	1	1	1	1
$B_{1g}$	$\Gamma_2^+$	$xy$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
$B_{2g}$	$\Gamma_3^+$	$xz$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$B_{3g}$	$\Gamma_4^+$	$yz$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
$A_u$	$\Gamma_1^-$	$xyz$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$B_{1u}$	$\Gamma_2^-$	$z$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
$B_{2u}$	$\Gamma_3^-$	$y$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
$B_{3u}$	$\Gamma_4^-$	$x$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

## Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Rotace o úhel  $\alpha$  v rovině  $(x,y)$ :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \cos \alpha - y \sin \alpha \\ x \sin \alpha + y \cos \alpha \end{bmatrix} = R(\alpha) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad R(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}, \quad R^{-1}(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}.$$

Tato transformace souřadnic transformuje také jejich funkce,  $f(x,y)$ , jako jsou například  $f_1(x,y)=x$ ,  $f_2(x,y)=x^2+y^2$ ,  $f_3(x,y)=x^2-y^2$ ,  $f_4(x,y)=xy$ ,  $f_5(x,y)=x^3-3xy^2, \dots$

Transformované funkční hodnoty jsou

$$f'(x', y') = f(x, y),$$

transformovaná funkce vychází z originální působením operátoru  $P_R$  (působícím na funkce):

$$f' = P_R f, \quad P_R f(x', y') = f(x, y) = f(x' \cos \alpha + y' \sin \alpha, y' \cos \alpha - x' \sin \alpha).$$

Explicitní tvar transformované funkce je tedy

$$P_R f(x, y) = f(x \cos \alpha + y \sin \alpha, y \cos \alpha - x \sin \alpha).$$

## Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Rotace  $R_\alpha$  transformuje komplexní funkci dvou reálných argumentů  $f_{c1}(x,y)=x+iy$  do

$$P_R f_{c1}(x, y) = x \cos \alpha + y \sin \alpha + i(y \cos \alpha - x \sin \alpha) = e^{-i\alpha} f_{c1}(x, y).$$

Pro  $f_2(x,y)=x^2+y^2$ ,  $f_3(x,y)=x^2-y^2$ ,  $f_4(x,y)=xy$ , dostáváme následující příklady transformací:

$$f_2' = x^2 + y^2 = f_2,$$

$$f_4' = -\cos \alpha \sin \alpha (x^2 - y^2) + (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) xy = -\cos \alpha \sin \alpha f_3 + (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) f_4.$$

## Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Pro každou transformaci  $R$  třírozměrného vektoru  $\mathbf{r}=(x,y,z)$ ,  $\mathbf{r}'=R\mathbf{r}$ , dostaneme transformovanou funkci pomocí následujícího pravidla:

$$P_R f(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}'), \text{ i.e.,}$$

$$P_R f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}).$$

Dvě po sobě následující operace  $R$  and  $S$  transformují libovolnou funkci  $f$  následujícím způsobem:

$$P_S P_R f(\mathbf{r}) = P_S [P_R f(\mathbf{r})] = P_S g(\mathbf{r}) = g(S^{-1}\mathbf{r}) = f(R^{-1}S^{-1}\mathbf{r}),$$

kde  $g=P_R f$ .

Složené působení operace  $R$  (provedené prvně) a  $S$  je součin  $SR$ :

$$P_{SR} f(\mathbf{r}) = f[(SR)^{-1}\mathbf{r}] = f(R^{-1}S^{-1}\mathbf{r}),$$

vedoucí ke stejnému výsledku jako součin  $P_S P_R$ . Můžeme tedy použít stejný symbol pro operace  $R$  a  $P_R$ :

$$Rf(\mathbf{r}) \equiv f(R^{-1}\mathbf{r}).$$



## Bázové funkce reprezentace

Soubor nezávislých funkcí  $f_1, f_2, \dots, f_d$  označíme jako **bázi**  $d$ -rozměrné reprezentace, tvořené maticemi s prvky  $D_{kl}(A_i)$ , je-li

$$A_i f_l = \sum_{k=1}^d D_{kl}(A_i) f_k \quad \text{pro } A_i \in G.$$

To je podmínka pro uzavřenost souboru funkcí pro operace grupy  $G$ .

Jednotlivé funkce z tohoto souboru se označují jako bázové funkce, nebo bázové vektory.

$l$ -tý bázový vektor je lineární kombinací s koeficienty z  $l$ -tého sloupce matic reprezentace; „přísluší k  $l$ -tému sloupci“.

Následující (reducibilní) 3-rozměrná reprezentace  $P(3)$  může být použita jako transformace funkcí  $f_1=x, f_2=y, f_3=z$  prvky  $C_{3v}$ :

$$\begin{array}{ccc}
 E & C_3 & C_3^{-1} \\
 \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} y \\ z \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \\
 \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 \\
 \begin{bmatrix} y \\ x \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} x \\ z \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} z \\ y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}
 \end{array}$$

Její charakter je

$$P_3 = A_1 + E,$$

je ortogonální k  $A_2$

(projekce na  $A_2$

je nulová)

	$E$	$3\sigma_v$	$2C_3$
$P_3$	3	1	0
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	-1	1
$E$	2	0	-1

## Funkce

$$f_{A_1} = f_1 + f_2 + f_3 = x + y + z$$

je invariantní při všech operacích z  $C_{3v}$ ;

tvoří **bázi reprezentace  $A_1$** , nebo, **transformuje se jako  $A_1$** .

Podobně, funkce

$$f_{E_1} = (2x - y - z) / \sqrt{6}, \quad f_{E_2} = (y - z) / \sqrt{2}$$

tvoří bázi ireducibilní reprezentace  $E$ .

Bázi reprezentace  $A_2$  dostaneme například z polynomů třetího řádu:

$$f_{A_2} = x(y^2 - z^2) + y(z^2 - x^2) + z(x^2 - y^2).$$