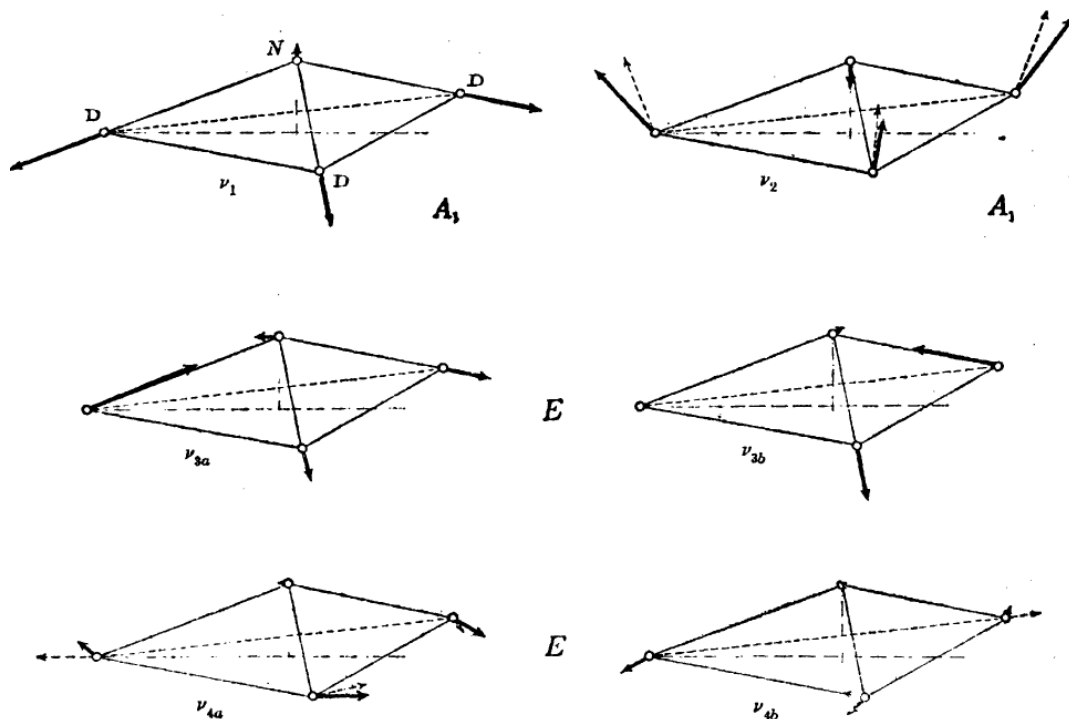


Grupy a symetrie II

- vibrace pyramidy 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 - Herzberg II, pyramidální XY_3 (C_{3v}); normální módy
 $3N-6=6$ vibrací, povolené v IR i Ramanově rozptylu, dvě jsou dvojnásobně
 degenerované

(rozhájit chování v izolované molekule a v molekulárním krystalu)



| Molecule | Observed frequencies (cm^{-1}) | | | |
|---------------|---|-------------------|---------|---------|
| | ν_1 | ν_2 | ν_3 | ν_4 |
| NH_3 | 3337 | 950 ⁴⁵ | 3414 | 1628 |
| ND_3 | 2419 | 749 ⁴⁵ | 2555 | 1191 |
| PH_3 | 2327 | 991 ⁴⁵ | 2421 | 1121 |
| PD_3 | 1694 | 730 ⁴⁵ | — | 806 |

FIG. 45. Normal vibrations of the ND_3 molecule.—The vibrations are drawn to scale for ND_3 (see p. 177) in oblique projection. (For 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 ν_2 and ν_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 ν_{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 ν_{3a} and ν_{4a} are symmetric, ν_{3b} and ν_{4b} antisymmetric with respect to the plane of symmetry through the left D nucleus, that is, the plane of the paper.

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

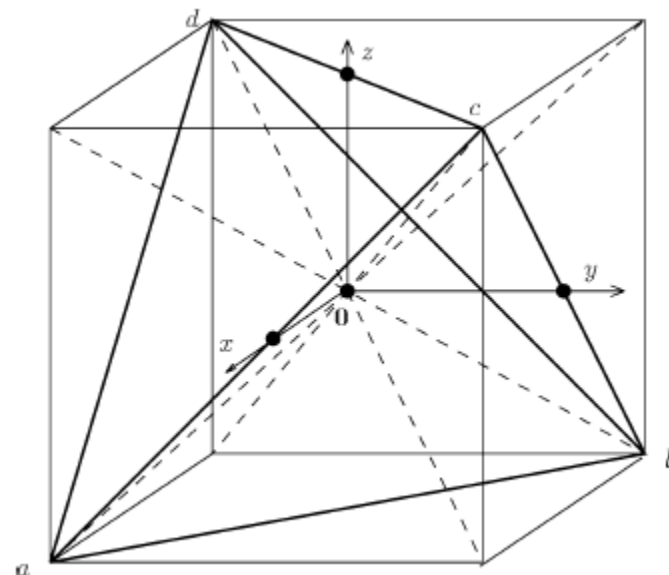
o $\pi/2$

šest zrcadlení σ_d (diagonální roviny)

řád grupy T_d je 24,

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

5 tříd, tabulka charakterů je matice 5x5



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 | Γ_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| A_2 | Γ_2 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| E | Γ_3 | 2 | 0 | 2 | 0 | -1 |
| T_1 | Γ_4 | 3 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| T_2 | Γ_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) | $8(3, 1)$ | $3(2^2)$ | $6(2, 1^2)$ | $6(4)$ |
|---------------|---------|-----------|----------|-------------|--------|
| Γ_1^s | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Γ_1^a | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| Γ_2 | 2 | -1 | 2 | 0 | 0 |
| Γ_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

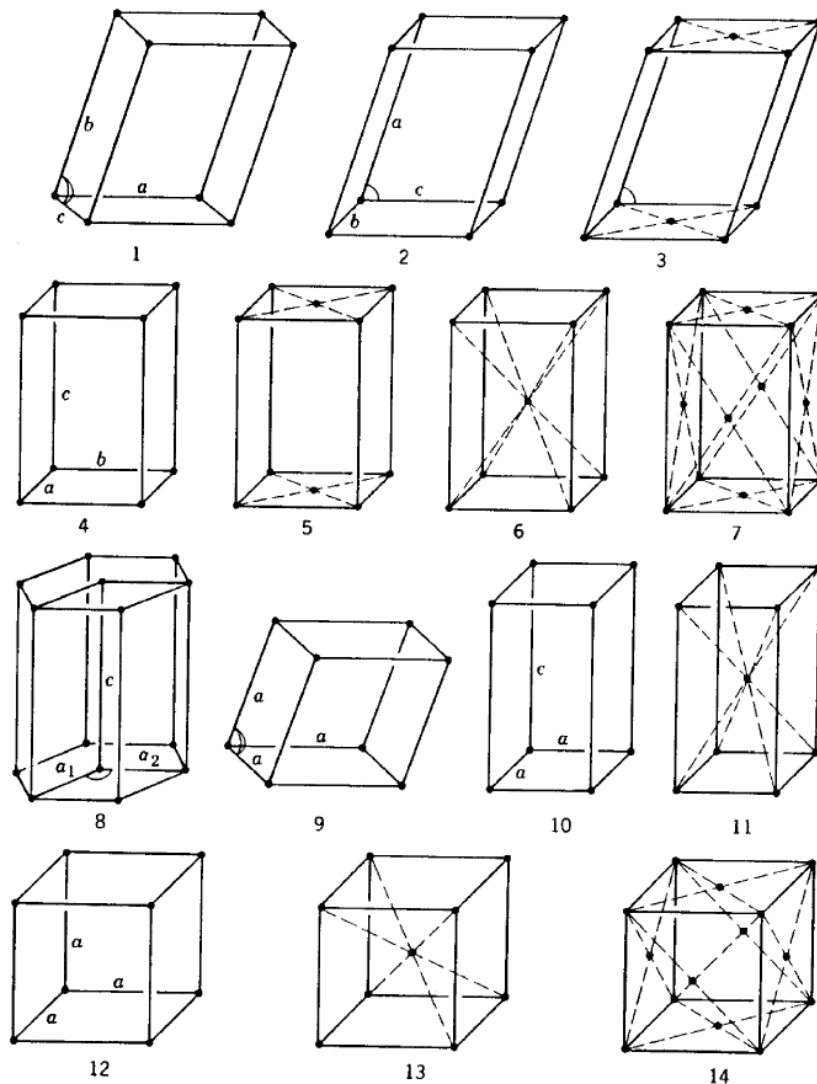
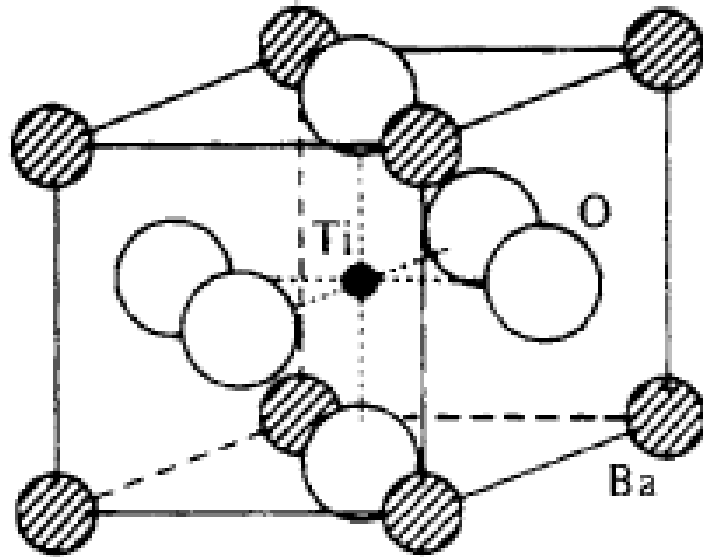


Fig. 9.3. The fourteen Bravais space lattices illustrated by a unit cell of each: (1) triclinic, simple; (2) monoclinic, simple; (3) monoclinic, base centered; (4) orthorhombic, simple; (5) orthorhombic, base centered; (6) orthorhombic, body centered; (7) orthorhombic, face centered; (8) hexagonal; (9)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

Perovskitová (CaTiO₃) krystalová struktura - BaTiO₃

O_h¹ (Pm3m)

Ti v centrální (a) pozici v krychli, Ba v pozici (b), O v pozici (c)



(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 |
| σ (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} | $\bar{3} \frac{2}{m}$ ($\bar{3}m$) |
| | 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 $E_A E_B$,

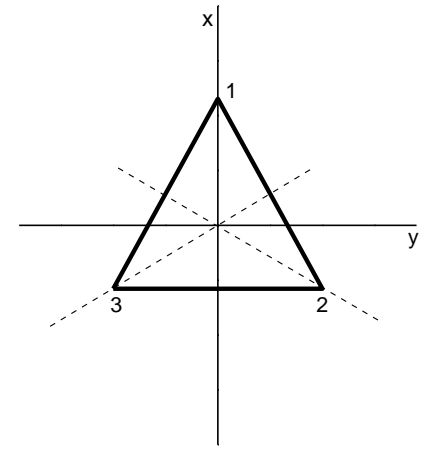
3. inverzní prvek... $A_i^{-1} B_j^{-1}$, neboť $A_i^{-1} B_j^{-1} A_i B_j = E_A E_B$,

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 NH_3);

bez této asymetrie přibude další operace symetrie:

σ_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 | σ |
|-------|-----|----------|
| 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} | $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ | σ_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 | σ_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 | Γ_1 | Γ_1 |
| A_2 | Γ_2 | Γ_2 |
| E | Γ_3 | Γ_{12} |
| T_1 | Γ_4 | Γ_{15} |
| T_2 | Γ_5 | Γ_{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 | σ_z | σ_y | σ_x |
|----------|--------------|-----------------|-----|----------|----------|----------|-----|------------|------------|------------|
| A_g | Γ_1^+ | x^2, y^2, z^2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| B_{1g} | Γ_2^+ | xy | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| B_{2g} | Γ_3^+ | xz | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 |
| B_{3g} | Γ_4^+ | yz | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| A_u | Γ_1^- | xyz | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| B_{1u} | Γ_2^- | z | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 |
| B_{2u} | Γ_3^- | y | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| B_{3u} | Γ_4^- | x | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 |

Operace symetrie působící na funkce souřadnic

Rotace o úhel α 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_α 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} :

$$E \quad \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$C_3 \quad \begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$C_3^{-1} \quad \begin{bmatrix} y \\ z \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\sigma_1 \quad \begin{bmatrix} y \\ x \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\sigma_2 \quad \begin{bmatrix} x \\ z \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\sigma_3 \quad \begin{bmatrix} z \\ y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

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:

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