# ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП ИКОСАЭДРА

© А.Б.Ройцин, А.А.Климов, Л.В.Артамонов

Институт физики полупроводников Академии наук Украины,
252650 Киев, Украина
(Поступила в Редакцию 26 апреля 1995 г.
В окончательной редакции 12 июля 1995 г.)

Разработан метод получения и получены матрицы всех элементов всех неприводимых представлений групп икосаэдра.

1. Симметрии, содержащие пятиугольные мотивы, в течение длительного времени не вызывали интереса, так как считалось, что соответствующие им образования не реализуются в природе на атомном уровне. В силу этого таким симметриям, как $C_5$, $C_{5v}$, $D_5$, $D_{5h}$, $Y$, $Y_h$, особенно двум последним, не уделялось должного внимания, как это делалось, например, для известных 32-точечных групп [1–3]. Однако в последние годы появились многочисленные доказательства того, что подобные симметрии представляют не только академический интерес, но и отражают реальные структуры, в ряде случаев перспективные для применений [4].[1] По-видимому, наибольший интерес вызвало открытие фуллеренов (молекул $C_{60}$, обладающих икосаэдрической симметрией (ИС)) и создаваемых на их основе кристаллов — фуллеритов. При этом интерес представляют не только своеобразная структура и симметрия этой новой формы углерода, но и необычные свойства таких веществ. Было, например, показано, что при внедрении в них атомов других элементов могут возникать полупроводниковые, металлические, в том числе и сверхпроводящие свойства [6]. В связи с возможностью внедрения в фуллерены и фуллериты элементов различных групп периодической системы (вплоть до лантанидов и даже урана) [4,7,8] представляются актуальными исследования энергетической структуры, резонансных свойств и других характеристик примесных атомов (ионов) в поле ИС. Для решения этих и многих других задач физики молекул и конденсированных веществ, где проявляется ИС, необходимо знание свойств данной симметрии и соответствующей ей базы данных. Важное место в последней занимают матрицы неприводимых представлений (НП), нахождению которых посвящена данная статья.

[1] Вместе с тем отметим, что уже сравнительно давно изучались системы, для которых некоторые точечные симметрии (например, $C_{3v}$) благодаря специфическому расположению атомов аппроксимировались икосаэдрической [5].

2. Различают простую группу симметрии икосаэдра $Y$ и полную его группу симметрии $Y_h$. Группа $Y$ состоит лишь из поворотов вокруг осей симметрии. Имеются шесть осей пятого порядка и соответственно 24 поворота вокруг этих осей; десять осей третьего порядка и соответственно 20 поворотов; пятнадцать осей второго порядка и соответственно 15 поворотов вокруг этих осей. Вместе с единичным элементом общее число элементов в группе равно, таким образом, 60. С учетом инверсии общее число элементов в группе $Y_h$ будет 120. $Y_h = Y \times C_i$, где $C_i$ — группа инверсии. Характеры НП группы $Y_h$ приведены в табл. 1. Индексы $g$ и $u$ в ней означают соответственно четность и нечетность состояний по отношению к операциям инверсии. В табл. 1 все элементы группы перенумерованы, что позволяет привести правила последовательного получения всех элементов группы, исходя из их минимального числа (табл. 2). Это обстоятельство будет использовано при получении искомых матриц НП. В случае группы $Y$, как показал геометрический анализ операций симметрии группы на примере икосаэдра, в качестве генерирующих элементов можно выбрать два поворота вокруг разных осей пятого порядка. Здесь и далее для определенности выбраны элементы № 2 и 5, соответствующие поворотам на угол 72° вокруг осей $b \to a$ и $d \to c$, проходящих через вершины икосаэдра (рис. 1); стрелками указаны направления осей. Система координат выбрана следующим образом: ось $Z$ — вдоль направления $b \to a$, а другие оси указаны на рис. 2. В случае группы $Y_h$ к элементам № 2 и 5 в качестве генерирующего добавляется инверсия $I \equiv$ № 61, и любой элемент, начиная с № 61, получается из элементов группы $Y$ путем умножения на $I$. Поэтому в дополнение к табл. 2 символически можно написать $60 + n = I \times n$, где $n = 1, 2, \ldots, 60$.

Будем различать также двойные группы $Y'$ и $Y'_h$, введение которых необходимо для описания систем с полуцелыми значениями момента количества движения $J$. Группа $Y'$ получается из группы $Y$ путем добавления элемента $Q$ — вращения на угол $2\pi$, так что $Y' = Y \times Q$,

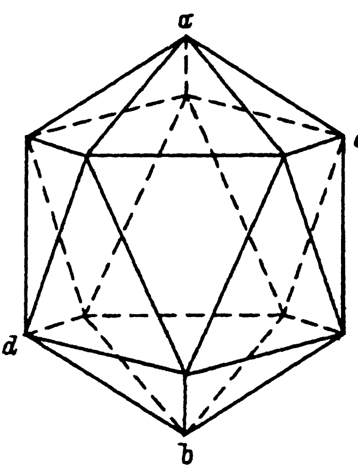


**Рис. 1.** Икосаэдр: 20 граней, 12 вершин, 30 ребер.

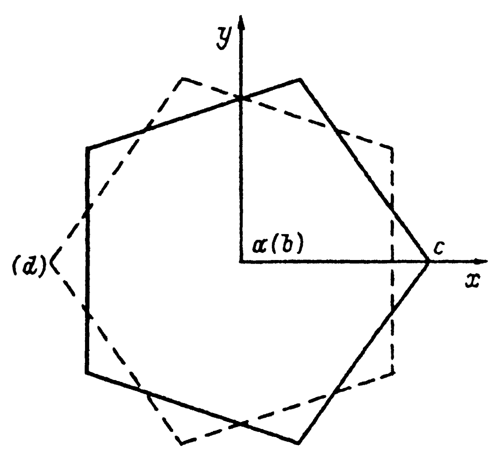


**Рис. 2.** Проекция икосаэдра на плоскость $xy$, проходящую через его центр и перпендикулярную оси $z$.

**Сплошной линией указана проекция части фигуры, расположенной над плоскостью, штриховой и буквами в скобках — под ней.**

**Таблица 1**

Характеры НП группы $Y_h$*

| НП | Классы | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $1E$ | $12C_5^{1,4}$ | $12C_5^{2,3}$ | $20C_3^{1,2}$ | $15C_2^1$ | $I$ | $12I \times C_5^{1,4}$ | $12I \times C_5^{2,3}$ | $20I \times C_3^{1,2}$ | $15I \times C_2^1$ |
| | 1 | 2–13 | 14–24 | 26–45 | 46–60 | 61 | 62–73 | 74–85 | 86–105 | 106–120 |
| $A_g$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $A_u$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | −1 | −1 | −1 | −1 | −1 |
| $F_{1g}$ | 3 | $\varepsilon_+$ | $\varepsilon_-$ | 0 | −1 | 3 | $\varepsilon_+$ | $\varepsilon_-$ | 0 | −1 |
| $F_{1u}$ | 3 | $\varepsilon_+$ | $\varepsilon_-$ | 0 | −1 | −3 | $-\varepsilon_+$ | $-\varepsilon_-$ | 0 | 1 |
| $F_{2g}$ | 3 | $\varepsilon_-$ | $\varepsilon_+$ | 0 | −1 | 3 | $\varepsilon_-$ | $\varepsilon_+$ | 0 | −1 |
| $F_{2u}$ | 3 | $\varepsilon_-$ | $\varepsilon_+$ | 0 | −1 | −3 | $-\varepsilon_-$ | $-\varepsilon_+$ | 0 | 1 |
| $G_g$ | 4 | −1 | −1 | 1 | 0 | 4 | −1 | −1 | 1 | 0 |
| $G_u$ | 4 | −1 | −1 | 1 | 0 | −4 | 1 | 1 | −1 | 0 |
| $H_g$ | 5 | 0 | 0 | −1 | 1 | 5 | 0 | 0 | −1 | 1 |
| $H_u$ | 5 | 0 | 0 | −1 | 1 | −5 | 0 | 0 | 1 | −1 |

* $C_n^m$ — $m$-кратный поворот вокруг оси $n$-го порядка; цифра перед обозначением элемента — число элементов в классе; $\varepsilon_\pm = (1 \pm \sqrt{5})/2$.

**Таблица 2**

Правило последовательного получения всех элементов группы $Y$*

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|
| $14 = 2 \times 2$ | $10 = 7 \times 9$ | $35 = 2 \times 23$ | $48 = 27 \times 35$ |
| $20 = 2 \times 14$ | $18 = 6 \times 6$ | $30 = 2 \times 24$ | $49 = 31 \times 35$ |
| $8 = 2 \times 20$ | $24 = 6 \times 18$ | $33 = 2 \times 25$ | $50 = 26 \times 29$ |
| $17 = 5 \times 5$ | $12 = 6 \times 24$ | $26 = 36 \times 36$ | $51 = 27 \times 29$ |
| $23 = 5 \times 17$ | $22 = 10 \times 10$ | $37 = 27 \times 27$ | $52 = 28 \times 30$ |
| $11 = 5 \times 23$ | $4 = 22 \times 22$ | $38 = 28 \times 28$ | $53 = 31 \times 32$ |
| $3 = 2 \times 11$ | $16 = 4 \times 4$ | $29 = 39 \times 39$ | $54 = 32 \times 33$ |
| $7 = 11 \times 2$ | $1 = 2 \times 8$ | $40 = 30 \times 30$ | $55 = 26 \times 28$ |
| $15 = 3 \times 3$ | $27 = 2 \times 3$ | $41 = 31 \times 31$ | $56 = 30 \times 35$ |
| $21 = 3 \times 15$ | $28 = 2 \times 4$ | $42 = 32 \times 32$ | $57 = 26 \times 31$ |
| $9 = 3 \times 21$ | $32 = 2 \times 5$ | $43 = 33 \times 33$ | $58 = 27 \times 32$ |
| $19 = 7 \times 7$ | $44 = 2 \times 6$ | $34 = 44 \times 44$ | $59 = 28 \times 33$ |
| $25 = 7 \times 19$ | $31 = 2 \times 7$ | $45 = 35 \times 35$ | $60 = 29 \times 34$ |
| $13 = 7 \times 25$ | $36 = 2 \times 21$ | $46 = 27 \times 30$ | |
| $6 = 2 \times 9$ | $39 = 2 \times 22$ | $47 = 26 \times 34$ | |

* Перемножение следует производить, начиная со столбца 1 сверху вниз.

$Y'_h = Y' \times C_i$. Группы $Y'$ и $Y'_h$ содержат соответственно 120 и 240 элементов. В табл. 3 для краткости приведены лишь четыре НП группы $Y'$, соответствующих двузначным представлениям группы $Y$. Остальные пять НП группы $Y'$ можно получить из табл. 1 путем «раздвоения» первых четырех классов в соответствии с обозначениями столбцов табл. 3. При этом характеры в каждой паре классов будут одинаковы и совпадут с приведенными в табл. 1. В случае группы $Y'$ в качестве генерирующих элементов можно выбрать элементы № 2, № 5 и $Q$. Прави-

Таблица 3

Характеры НП группы $Y'$

| НП | Классы | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $1E$ | $1Q$ | $6C_5^1$ 2–7 | $6C_5^4$ 8–13 | $6C_5^2$ 14–19 | $6C_5^3$ 20–25 | $10C_3^1$ 26–35 | $10C_3^2$ 36–45 | $15C_2^1$ 46–60 |
| | 1 | $1'$ | $6QC_5^4$ $8'$–$13'$ | $6QC_5^1$ $2'$–$7'$ | $6QC_5^3$ $20'$–$25'$ | $6QC_5^2$ $14'$–$19'$ | $10QC_3^2$ $36'$–$45'$ | $10QC_3^1$ $26'$–$35'$ | $15QC_2^3$ $46'$–$60'$ |
| $E'_1$ | 2 | −2 | $\varepsilon_+$ | $-\varepsilon_+$ | $-\varepsilon_-$ | $\varepsilon_-$ | 1 | −1 | 0 |
| $E'_2$ | 2 | −2 | $\varepsilon_-$ | $-\varepsilon_-$ | $-\varepsilon_+$ | $\varepsilon_+$ | 1 | −1 | 0 |
| $G'$ | 4 | −4 | 1 | −1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 0 |
| $I'$ | 6 | −6 | −1 | 1 | 1 | −1 | 0 | 0 | 0 |

Примечание. Обозначения те же, что в табл. 1. Штрихами у цифр пронумерованы элементы, получающиеся из нештрихованных путем умножения последних на $Q$.

Таблица 4

Правило последовательного получения элементов группы $Y'$ *

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|
| $14 = 2 \times 2$ | $10' = 7' \times 9$ | $35' = 2 \times 23$ | $48 = 27' \times 35'$ |
| $20 = 2 \times 14$ | $18 = 6' \times 6'$ | $30 = 2 \times 24'$ | $49 = 31' \times 35'$ |
| $8 = 2 \times 20$ | $24' = 6' \times 18$ | $33 = 2 \times 25'$ | $50 = 26' \times 29'$ |
| $17 = 5 \times 5$ | $12 = 6' \times 24'$ | $26' = 36' \times 36'$ | $51 = 27' \times 29'$ |
| $23 = 5 \times 17$ | $22' = 10' \times 10'$ | $37 = 27' \times 27'$ | $52 = 28' \times 30$ |
| $11 = 5 \times 23$ | $4' = 22' \times 22'$ | $38 = 28' \times 28'$ | $53 = 31' \times 32$ |
| $3' = 2 \times 11$ | $16 = 4' \times 4'$ | $29' = 39' \times 39'$ | $54 = 32 \times 33$ |
| $7' = 11 \times 2$ | $1' = 2 \times 8$ | $40 = 30 \times 30$ | $55 = 26' \times 28'$ |
| $15 = 3' \times 3'$ | $27' = 2 \times 3'$ | $41 = 31' \times 31'$ | $56 = 30 \times 35'$ |
| $21' = 3' \times 15$ | $28' = 2 \times 4'$ | $42 = 32 \times 32$ | $57 = 26' \times 31'$ |
| $9 = 3' \times 21'$ | $32 = 2 \times 5$ | $43 = 33 \times 33$ | $58 = 27' \times 32'$ |
| $19 = 7' \times 7'$ | $44 = 2 \times 6'$ | $34' = 44 \times 44$ | $59 = 28' \times 33$ |
| $25' = 7' \times 19$ | $31' = 2 \times 7'$ | $45 = 35' \times 35'$ | $60 = 29' \times 34'$ |
| $13 = 7' \times 25'$ | $36' = 2 \times 21'$ | $46 = 27' \times 30$ | |
| $6' = 2 \times 9$ | $39' = 2 \times 22'$ | $47 = 26' \times 34'$ | |

* Перемножение следует производить, начиная со столбца 1 сверху вниз. Невключенные в таблицу оставшиеся 60 элементов получаются из приведенных в таблице путем умножения каждого элемента $n$ из таблицы на $Q$, т.е. $n = n' \times Q$ или $n' = n \times Q$.

Таблица 5

Разложение представления $D_J$
на НП групп икосаэдра $Y$ и $Y'$ *

| Целые $J$ | | Полуцелые $J$ | |
|---|---|---|---|
| $J$ | НП | $J$ | НП |
| 0 | $A$ | 1/2 | $E_1'$ |
| 1 | $F_1$ | 3/2 | $G'$ |
| 2 | $H$ | 5/2 | $I'$ |
| 3 | $F_2, G$ | 7/2 | $E_2', I'$ |
| 4 | $G, H$ | 9/2 | $G', I'$ |
| 5 | $F_1, F_2, H$ | 11/2 | $E_1', G', I'$ |
| 6 | $A, F_1, G, H$ | | |

* Вторые колонки показывают, какие НП содержатся в представлении $D_J$.

ло последовательного получения из них остальных элементов группы приведено в табл. 4. Характеры группы $Y_h'$ получаются из характеров группы $Y'$ путем умножения последних на характеры ($\pm 1$) группы $C_i$, так что в качестве генерирующих элементов здесь выступают элементы № 2, № 5, $Q$ и $I$. Таблицы характеров группы $Y_h'$ для краткости мы не выписываем.

**3**. Переходя к описанию методов получения матриц НП, отметим, что, используя методы теории групп [1–3] и табл. 1,3, можно получить разложение НП группы вращения $D_J$ на НП групп икосаэдра (ГИ) (табл. 5). Из табл. 5, в частности, видно, что для значений $J = 0, 1/2, \ldots, 2, 5/2$ $D_J$ «разлагается» лишь на одно НП, т.е. представление $D_J$ и соответствующее ему НП ГИ совпадают. Отсюда следует, что в качестве матриц таких НП ГИ можно выбрать матрицы НП группы вращений. Матричные элементы (МЭ) последних имеют следующий вид [9,10]:

$$D_J(\alpha,\beta,\gamma)_{ls} = i^{l-s}\Big[\exp i(l\alpha + s\gamma)\Big]\Big[(J+l)!(J-l)!(J+s)!(J-s)!\Big]^{1/2}\times$$
$$\times\sum_k(-1)^k\Big[k!(J-k+s)!(J-l-k)!(k-s+l)!\Big]^{-1}\times$$
$$\times\Big(\cos(\beta/2)\Big)^{2J-l-2k+s}\Big(\sin(\beta/2)\Big)^{2k-s+l}, \qquad (1)$$

где $l$ и $s$ принимают значения от $-J$ до $+J$, $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ — углы Эйлера, $k$ принимает значения, определяемые неравенствами $k \geqslant 0$, $k \geqslant s - l$, $k \leqslant J - l$, $k \leqslant J + s$.

Непосредственно из геометрических построений можно показать, что для элемента № 2 $\alpha = 72°$, $\beta = \gamma = 0$, для элемента № 5 $\alpha = \gamma = 18°$, $\sin\beta = 2\cos\beta = 2/\sqrt{5}$. Этих данных достаточно, чтобы на основании (1) построить матрицы генерирующих элементов для НП $A(J = 0)$,

$F_1(J=1)$, $H(J=2)$, $E'_1(J=1/2)$, $G'(J=3/2)$, $I'(J=5/2)$,[2] а также приводимых представлений (ПП) $D_3$ и $D_{7/2}$, использованных далее.

Для получения матриц элемента № 2 оставшихся НП ($E'_2$, $F_2$ и $G$) использовался тот факт, что циклическая группа $C_5$, имеющая лишь одномерные НП, является подгруппой ГИ, а элемент № 2 соответствует элементу группы $C_5$. С этой целью на первом этапе с помощью таблицы характеров устанавливалось, какие НП группы $C_5$ содержатся в представлениях $E'_2, F_2, G, D_3 = F_2+G$ и $D_{7/2} = E'_2+I'$ ГИ. На втором этапе с помощью формулы (1) были получены матрицы элемента № 2 для представлений $D_3$ и $D_{7/2}$. Сопоставление полученных на втором этапе диагональных матриц с элементами одномерных матриц — характеров группы $C_5$ — позволило установить, какие из них (согласно результатам первого этапа) относятся к искомым НП $E'_2$, $F_2$ и $G$. В результате для последних были получены диагональные матрицы для элемента № 2, МЭ которых служат характеры НП группы $C_5$.

Для получения элемента № 5 использовались два подхода. Первый основан на решении системы уравнений для МЭ. Необходимое количество уравнений находилось из требования унитарности матриц (условия ортонормированности их МЭ) и равенства суммы диагональных элементов определенным значениям характеров (табл. 1 и 3). Таким способом были найдены матрицы НП $E'_2$ и $F_2$. Второй подход основан на предварительном отыскании функций, реализующих искомое НП. Этим способом было найдено НП $G$. Поскольку $D_3 = F_2 + G$, предварительно по известным матрицам представлений $D_3$ и $F_2$ методом фактического разложения ПП ($D_3$) на неприводимые [3,10] были найдены функции $\varphi_i^{F_2}$, реализующие НП $F_2$, в виде линейной комбинации функций $\psi_M^3$ представления $D_3$ [3]

$$\varphi_{1,3}^{F_2} = \pm\sqrt{3/5}\psi_{\mp2}^3 - \sqrt{2/5}\psi_{\pm3}^3, \quad \varphi_2^{F_2} = \psi_0^3. \tag{2}$$

Искомое выражение для функций $\varphi_i^G$ НП $G$ было представлено в следующем виде:

$$\varphi_i^G = \sum_{M=-3}^{3} k_{Mi}\psi_M^3. \tag{3}$$

Коэффициенты $k_{Mi}$ из (3) находились из условия ортонормированности функций (2), (3) и условия удовлетворения функциями (3) преобразования, соответствующего элементу № 2. В результате имеем

$$\varphi_{1,4}^G = \sqrt{3/5}\psi_{\mp3}^3 \mp \sqrt{2/5}\psi_{\pm2}^3, \quad \varphi_{2,3}^G = \psi_{\mp1}^3. \tag{4}$$

На основании (4) и матрицы элемента № 5 представления $D_3$ получена искомая матрица НП $G$ элемента № 5.

[2] Матрицы элементов $I$ и $Q$ всех НП отличаются от матриц единичного элемента только общим знаком.

[3] Здесь и далее первый (второй) индекс соответствует верхнему (нижнему) знаку.

Все полученные указанными выше способами матрицы в общем случае являются комплексными. В принципе этих данных достаточно для решения любой задачи, требующей знания явного вида матриц НП. Однако в ряде случаев удобно использовать действительные матрицы, соответствующие, например, обычным преобразованиям координат или векторов. В связи с этим рассмотрим еще действительные матрицы НП $F_1$, описывающие преобразование координат $x$, $y$, $z$. Матрицы преобразования тензоров, описывающих в общем случае ПП, могут быть получены индуктивно из закона преобразования координат, не вызывая принципиальных трудностей. Преобразования координат в общем виде можно представить так [9,11]:

$$x = l_1 x' + l_2 y' + l_3 z' \quad y = m_1 x' + m_2 y' + m_3 z' \quad z = n_1 x' + n_2 y' + n_3 z',$$

где $l_i$, $m_i$, $n_i$ — направляющие косинусы новых осей ($x'$, $y'$, $z'$) по отношению к старым ($x$, $y$, $z$), которые через углы Эйлера выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} l_1 &= \cos\alpha\cos\gamma - \sin\alpha\cos\beta\sin\gamma, & m_1 &= \sin\alpha\cos\gamma + \cos\alpha\cos\beta\sin\gamma, \\ l_2 &= -\cos\alpha\sin\gamma - \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma, & m_2 &= -\sin\alpha\sin\gamma + \cos\gamma\cos\alpha\cos\beta, \\ l_3 &= \sin\alpha\sin\beta, & m_3 &= -\cos\alpha\sin\beta, \end{aligned}$$

$$n_1 = \sin\beta\sin\gamma, \qquad n_2 = \sin\beta\cos\gamma, \qquad n_3 = \cos\beta. \tag{5}$$

Подставляя в (5) значения $\alpha = 72°$, $\beta = \gamma = 0$ и $\alpha = \gamma = 18°$, $\sin\beta = (1/2)\cdot\cos\beta = 1/\sqrt{5}$, получим соответственно матрицы для элементов № 2 и 5. Отметим, наконец, связь между функциями $\varphi^1_M$, реализующими комплексное НП $F_1$, и координатами $x$, $y$, $z$ $\varphi^1_{\mp 1} = \pm x - iy$, $\varphi^1_0 = \sqrt{2}z$.

Полученные описанными выше методами матрицы генерирующих элементов для всех НП систематизированы в Приложении. Используя эти данные в табл. 2,4 мы получили матрицы всех элементов всех НП групп $Y$, $Y_h$, $Y'$, $Y'_h$.[4] С помощью соответствующих критериев правильность матриц была проверена, и многие из них уже опробованы в работе. Из явных выражений матриц, приведенных в Приложении, видно, что содержащиеся в них МЭ крайне громоздки. Если еще учесть, что размерности матриц достаточно велики, можно заключить, что их многократное непосредственное перемножение в соответствии с табл. 2 и 4 практически нереально. В связи с этим нами была разработана программа для ЭВМ, позволившая реализовать в полном объеме получение этих матриц.

Для приложений часто важно знать и матрицы оператора инверсии времени $\Theta$ для каждого НП. Они получаются на основании приведенных выше результатов. В случае НП $A$, $E'_1$, $F_1$, $G'$, $H$ и $I'$, следующих непосредственно из представлений группы вращений, базисными функциями являются $\psi^J_M$. Для них, согласно [12] имеем

$$\Theta\psi^J_m = (-1)^{J-m}\psi^J_{-m}. \tag{6}$$

[4] Из-за недостатка места в журнальной статье мы здесь их не приводим. Они будут опубликованы отдельным изданием.

В случае НП $E_2'$, $F_2$ и $G$ в качестве базисных функций можно выбрать линейные комбинации функций $\psi^J_M$. Для НП $F_2$ и $G$ они приведены в (2) и (4). Для НП $E_2'$ фактическое разложение ПП $D_{7/2}$ на неприводимые $E_2'$ и $I'$ [3,10] дает

$$\varphi^{E_2'}_{1,2} = \sqrt{3/10}\,\psi^{7/2}_{\mp 7/2} \mp \sqrt{7/10}\,\psi^{7/2}_{\pm 3/2}. \tag{7}$$

Совместное применение формул (2), (4), (6) и (7) позволяет без труда найти закон преобразования функций $\varphi_i^{E_2'}$, $\varphi_J^{F_2}$ и $\varphi_k^G$ под действием оператора $\Theta$.

В заключение отметим, что в литературе [13,14] для ряда элементов и некоторых НП и групп ИС также приводятся матрицы НП. Сопоставление соответствующей части наших результатов с этими данными оказалось, однако, затруднительным в силу выбора различных базисов, которые в этих работах не указываются, и наличия в них неточностей (например, сумма диагональных элементов матриц в ряде случаев не совпадает с характерами).

Работа выполнена при поддержке Госкомитета по науке и технологии Украины.

## ПРИЛОЖЕНИЕ. Матрицы генерирующих элементов № 2 и 5 ГИ[5]

### а) Однозначные НП

НП $A$ № 2=(1), № 5=(1).

НП $F_1$ (комплексное)

$$\overset{\text{№ 2}}{\begin{pmatrix} c_7^* & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & c_7 \end{pmatrix}}, \quad \overset{\text{№ 5}}{\begin{pmatrix} c_{27}^* & c_{21} & -a_4^- \\ c_{21} & a_2 & -c_{21}^* \\ -a_4^- & -c_{21}^* & c_{27} \end{pmatrix}},$$

НП $F_1$ (действительное)

$$\overset{\text{№ 2}}{\begin{pmatrix} a_8 & -a_6 & 0 \\ a_6 & a_8 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}, \quad \overset{\text{№ 5}}{\begin{pmatrix} a_9 & -a_7 & a_4^- \\ a_7 & a_8 & -a_5 \\ a_4^- & a_5 & a_2 \end{pmatrix}}.$$

НП $F_2$

$$\overset{\text{№ 2}}{\begin{pmatrix} -c_6 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -c_6^* \end{pmatrix}}, \quad \overset{\text{№ 5}}{\begin{pmatrix} -c_{28}^* & -c_{20}^* & -a_4^+ \\ -c_{20}^* & -a_2 & c_{20} \\ -a_4^+ & c_{20} & -c_{28} \end{pmatrix}}.$$

[5] Для удобства введены следующие общие обозначения: буквой $a_i$ обозначены только действительные, буквой $b_i$ — мнимые и буквой $c_i$ — комплексные МЭ.

НП $G$

№ 2 $\qquad$ № 5

$$\begin{pmatrix} -c_6^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_7^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c_6 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} -c_{17} & -c_1^* & c_2^2 & a_2 \\ -c_1^* & -c_{16}^* & -a_2 & c_2 \\ c_2^* & -a_2 & -c_{16} & -c_1 \\ a_2 & c_2 & -c_1 & -c_{17}^* \end{pmatrix}.$$

НП $H$

№ 2 $\qquad$ № 5

$$\begin{pmatrix} -c_6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_7^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c_6^* \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} c_{10}^* & c_{24} & -c_{22}^* & -c_{25} & a_3^- \\ c_{24} & -c_{11}^* & c_{23} & -a_3^+ & c_{25}^* \\ -c_{22}^* & c_{23} & -a_1 & -c_{23}^* & -c_{22} \\ -c_{25} & -a_3^+ & -c_{23}^* & -c_{11} & -c_{24}^* \\ a_3^- & c_{25}^* & -c_{22} & -c_{24}^* & c_{10} \end{pmatrix}.$$

b) Двузначные НП

НП $E_1'$

№ 2 $\qquad$ № 5

$$\begin{pmatrix} c_6^* & 0 \\ 0 & c_6 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} c_8^* & b_3^- \\ b_3^- & c_8 \end{pmatrix}.$$

НП $E_2'$

№ 2 $\qquad$ № 5

$$\begin{pmatrix} -c_7^* & 0 \\ 0 & -c_7 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} -c_9 & b_3^+ \\ b_3^+ & -c_9^* \end{pmatrix}.$$

НП $G'$

№ 2 $\qquad$ № 5

$$\begin{pmatrix} -c_7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_6^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c_7^* \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} c_{12}^* & c_4 & -c_5^* & -b_1^- \\ c_4 & c_{13}^* & b_1^+ & -c_5 \\ -c_5^* & b_1^+ & c_{13} & -c_4^* \\ -b_1^- & -c_5 & -c_4^* & c_{12} \end{pmatrix}.$$

НП $I'$

№ 2

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c_7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_6^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c_7^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

№ 5

$$\begin{pmatrix} -b_4^+ & c_{26} & -c_3^* & -c_{19} & c_{13}^* & b_4^- \\ c_{26} & -c_{15}^* & c_{19} & -c_{18}^* & -b_2^+ & c_{13} \\ -c_3^* & c_{19} & -c_{14}^* & b_2^- & -c_{18} & c_{19}^* \\ -c_{19} & -c_{18}^* & b_2^- & -c_{14} & -c_{19}^* & -c_3 \\ c_{13}^* & -b_2^+ & -c_{18} & -c_{19}^* & -c_{15} & -c_{26}^* \\ b_4^- & c_{13} & c_{19}^* & -c_3 & -c_{26}^* & b_4^+ \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$
\begin{aligned}
&a_1 = 1/5, && a_6 = R^+/2q, && b_1^\pm = iN^\pm/5,\\
&a_2 = 1/p, && a_7 = R^+/2qp, && b_2^\pm = iR^\pm/5q,\\
&a_3^\pm = (3 \pm p)/10, && a_8 = (p-1)/4, && b_3^\pm = iR^\pm/pq,\\
&a_4^\pm = (p \pm 1)/2p, && a_9 = (3p+1)/4p, && b_4^\pm = iU^\pm/5pq,\\
&a_5 = R^+/qp,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&c_{1,2} = a_2/2 + iN^\pm/2p, && c_{16,17} = a_4^\pm/2 + b_3^\mp/2,\\
&c_3 = 1/qp + iN^+/5q, && c_{18,19} = a_4^\pm/q + qb_2^\mp/2,\\
&c_{4,5} = t/2p + itN^\pm/10, && c_{20,21} = a_4^\pm/q + qb_3^\mp/2,\\
&c_{6,7} = (p \pm 1)/4 + iR^\mp/2q, && c_{22,23} = t(p \pm 1)/10q + itR^\mp/10,\\
&c_{8,9} = (p \pm 1)/4 + iR^\mp/2pq, && c_{24,25} = a_3^\pm + b_2^\pm,\\
&c_{10,11} = (p \pm 1)/20 + iU^\pm/10q, && c_{26} = (3+p)/4p + b_2^+/2,\\
&c_{12,13} = a_4^\pm/2 + pb_4^\pm/2, && c_{27,28} = (3 \pm p)/4p + b_3^\pm/2,\\
&c_{14,15} = a_4^\pm/2 + b_2^\mp/2,
\end{aligned}
$$

$$
i^* = \sqrt{-1},\quad p = \sqrt{5},\quad t = \sqrt{3},\quad q = \sqrt{2},\quad R^\pm = \sqrt{5 \pm p},
$$

$$
N^\pm = \sqrt{5 \pm 2p},\quad U^\pm = \sqrt{25 \pm 11p},
$$

* — знак комплексного сопряжения.

## Список литературы


[1] Хамермеш Н. Теория групп. М. (1966). 587 с.
[2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М. (1989).767 с.
[3] Любарский Г.Я. Теория групп и ее приложение в физике. М. (1957). 354 с.
[4] Ройцин А.Б. Природа, *8*, 10 (1993).
[5] Judd B.R. Proc. Roy. Soc. Ser. **A 241**, *1224*, 122 (1957); McLellan A.G. J. Chem. Phys. **34**, *4*, 1350 (1961).
[6] Локтев В.М. ФНТ **18**, *3*, 217 (1992).
[7] Bethune D.S., Johnson R.D., Salem J.R., de Vries M.S., Yannoni C.S. Monthly nature **1**, *11*, 67 (1993); Елецкий А.В. УФН **164**, *9*, 1007 (1994).
[8] Dresselhaus G., Dresselhaus M.S., Eklund P.C. Phys. Rev. **B 5**, *12*, 6923 (1992); Satpathy S., Antropov V.P., Andersen O.K., Jepsen O., Gunnarsson O., Liechtenstein A.I. Phys. Rev. **B 46**, *3*, 1773 (1992); Martins J.L., Troullier N. Phys. Rev. **B 46**, *3*, 1754 (1992).
[9] Смирнов В.И. Курс высшей математики. М. (1958). Т. 3. Ч. 1. 328 с.
[10] Ройцин А.Б. Некоторые применения теории симметрии в задачах радиоспектроскопии. Киев (1973). 100 с.
[11] Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. М. (1964). 609 с.
[12] Вигнер Е. Теория групп. М. (1961). 444 с.
[13] Raynal J. J. Math. Phys. **25**, *5*, 1187 (1984).
[14] Weeks D.E., Harter W.G. J. Chem. Phys. **90**, *9*, 4744 (1989).