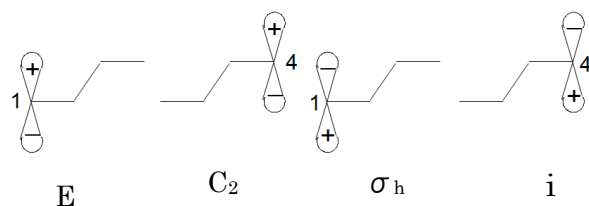
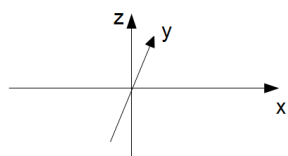
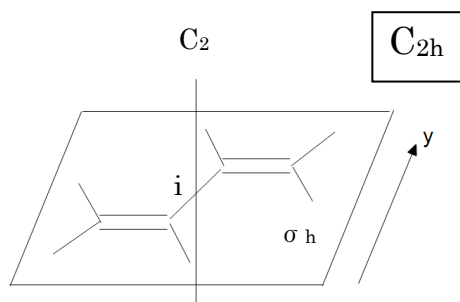


群：構成要素である元の集合で、元の間に結合法則が成り立つ二項演算が定義され、演算した結果も元であり、単位元が存在し、どの元も逆元を持つもの

点群：ものの形を保ったまま行う移動操作(対称操作)のうち、少なくとも1つの不動点を持つものを元とする群



	E	C ₂ (z)	σ _h	i
z	A _g	1	1	1
	A _u	1	-1	-1
x,y	B _g	-1	-1	1
	B _u	-1	1	-1

φ₁, φ₃
φ₂, φ₄

固有関数 ψ はその属する点群の既約表現の基底

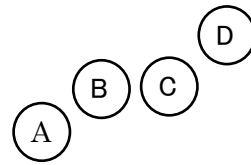
$$E: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$C_2: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\sigma_h: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$i: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

x,y,z も既約表現の基底



$$E: \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$$

$$C_2: \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} D \\ C \\ B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\sigma_h: \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$$

$$i: \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} D \\ C \\ B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$$

A,B,C,D は既約表現の基底ではない
可約表現の基底

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(A+D)や(B-C)は既約表現の基底