match no. 14 pp. 43-46 1983

ANMERKUNGEN ZU DEN CHARAKTERTAFELN DER PUNKT-GRUPPEN S_{4M+2}

Oskar E. Polansky

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie

D-4330 Mülheim(Ruhr), B.R.D.

(Received: April 1983)

In vielen weitverbreiteten Gruppentafeln /1/ werden die Punktgruppen S_{4M+2} als Direktprodukt konstruiert, worin i die

$$S_{4M+2} = C_{2M+1} \times i \qquad (1)$$

Inversion darstellt. Da die Punktgruppen C_i, C_{2M+1} und S_{4M+2} alle Abelisch sind, werden auch die Charaktere der Gruppentafel von S_{4M+2} durch Multiplikation der Charaktere von C_i und C_{2M+1} gewonnen; sie sind daher durch positive und negative Potenzen der (2M+1)-ten Einheitswurzel, $\exp\{2ij\pi/(2M+1)\}$, welche die Charaktere von C_{2M+1} bilden, dargestellt, darin ist $i = \sqrt{-1}$. Im Gegensatz hierzu werden die Charaktere von S_{4M} durch Potenzen der 4M-ten Einheitswurzel, $\exp\{2ij\pi/4M\}$, ausgedrückt. Dadurch wird der Anschein eines prinzipiellen Unterschiedes der Punktgruppen $\{S_{4M}\}$ und $\{S_{4M+2}\}$ erweckt. So zeigt ein Blick auf die Charaktertafeln von S_{4M} und C_{4M} die Isomorphie dieser beiden Punktgruppen an, während dies für die Charaktertafeln von S_{4M+2} und C_{4M+2} nicht zutrifft: die ersteren enthalten Potenzen von $\exp\{2i\pi/(2M+1)\}$, die letzteren die von $\{2i\pi/(4M+2)\}$.

$$\chi(S_{4M+2}) = \exp\{i[2\ell\pi/(4M+2)]\},$$
$$0 \leqq \ell \leqq 4M+1; \qquad (6)$$

für den Charakter von $S_{4M+2}^{2M+2m+1}$ in der Darstellung Γ_ℓ ergäbe sich daraus:

$$\chi(S_{4M+2}^{2M+2m+1}) = \exp\{i[2\ell\pi/(4M+2)](2M+2m+1)\} =$$
$$= \exp\{i\ell\pi\}\cdot\exp\{i[4m\ell\pi/(4M+2)]\} =$$
$$= (-1)^\ell\cdot\exp\{i[4m\ell\pi/(4M+2)]\}. \qquad (7)$$

Um den Vergleich der Gln. (5) und (7) möglichst durchsichtig zu machen, ist hier ein anderer Buchstabe, ℓ, als Laufindex der irreduzierbaren Darstellungen gewählt.

(4) Wie die Inspektion der Gln. (5) und (7) zeigt, werden durch sie die gleichen Sätze komplexer Zahlen erzeugt; sie sind daher äquivalent. Die Charaktertafel von S_{4M+2} darf daher in der gleichen Weise wie die von S_{4M} konstruiert werden. Man erhält für sie:

S_{4M+2}	E	S_{4M+2}^{2k+1}	C_{2M+1}^m	i
Γ_ℓ	1	ω_ℓ^{2k+1}	ω_ℓ^{2m}	$(-1)^\ell$

$\omega_\ell = \exp\{2i\ell\pi/(4M+2)\}$, $0 \leqq \ell \leqq 4M+1$

Die darin aufgeführten Darstellungen Γ_ℓ entsprechen den nach Gl. (1) erhaltenen Darstellungen wie folgt:

ℓ:	j =	ℓ ist ungerade	ℓ ist gerade
$\ell=0$	0	-	A_g
$1\leq\ell\leq 2M$	ℓ	Γ_{ju}	Γ_{jg}
$\ell=2M+1$	0	A_u	-
$2M+2\leq\ell\leq 4M+1$	$\ell-(2M+1)$	Γ_{ju}	Γ_{jg}

(5) Wie die in Abschnitt (4) gegebene Charaktertafel zeigt, sind die Punktgruppen S_{2N} und C_{2N} isomorph, u.zw. unabhängig davon, ob N gerade oder ungerade ist.

/1/ Siehe z.B.: H. Eyring, J. Walter, G.E. Kimball, Quantum Chemistry, John Wiley & Sons, New York 1964; E.B. Wilson Jr., J.C. Decius, P.C. Cross, Molecular Vibrations, McGraw-Hill Book Comp., New York 1955; u.a.m.

Es wird hier gezeigt, daß diese Unterschiede nur scheinbare sind, d.h. daß die Charaktertafel von S_{4M+2} durch die positiven, geraden und ungeraden Potenzen der (4M+2)-ten Einheitswurzel korrekt dargestellt werden kann.

(1) Die Inversion i und die Rotation C^m_{2M+1} sind mit der Drehspiegelung S_{4M+2} wie folgt verknüpft:

$$i = S^{2M+1}_{4M+2}, \qquad C^m_{2M+1} = S^{2m}_{4M+2}. \tag{2}$$

(2) Der Satz der Drehspiegelungen $\{S^{2k+1}_{4M+2} | 0 \leq k \leq 2M\}$ wird entsprechend Gl. (1) durch die Multiplikation von E und $\{C^m_{2M+1} | 1 \leq m \leq 2M\}$ mit i erzeugt; mit Hilfe der Ausdrücke von Gl. (2) erhält man

$$i \cdot C^m_{2M+1} = S^{2M+2m+1}_{4M+2} \quad . \tag{3}$$

Die Charaktere der Drehspiegelungen werden dementsprechend wie folgt gebildet:

$$\chi(S^{2M+2m+1}_{4M+2}) = \chi(i) \cdot [\chi(C_{2M+1})]^m \ , \tag{4}$$

das ist in den Repräsentationen Γ_{jg} bzw. Γ_{ju} :

$$\chi(S^{2M+2m+1}_{4M+2}) = \begin{cases} = +\exp\{i[2mj\pi/(2M+1)]\} \ \ldots \ \Gamma_{jg} \ , \\ = -\exp\{i[2mj\pi/(2M+1)]\} \ \ldots \ \Gamma_{ju} \ . \end{cases} \tag{5}$$

(3) Stünde Gl. (1) nicht zur Verfügung, müßte man die Charaktere von S^{2k+1}_{4M+2} aus der Fundamentalbeziehung

$$(S_{4M+2})^{4M+2} = E$$

herleiten und erhielte