Таким образом, функции (10.13) под действием операторов кубической группы симметрии преобразуются друг через друга, а следовательно, являются базисом некоторого представления этой группы.

Докажем теперь, что это представление будет неприводимым. Допустим противоположное. Тогда по крайней мере одно из полученных в результате приведения представлений должно быть одномерным, т. е. должна существовать такая ненулевая линейная комбинация функций (10.13), для которой действие каждого из операторов группы сводится к умножению на скаляр. Обозначим эту искомую комбинацию через $\psi(p)$:

$$\psi(p) = a\psi_1(p) + b\psi_2(p) + c\psi_3(p),$$

причем для определенности будем считать, что $c \neq 0$. Если теперь произвести поворот на 180° вокруг оси z, то согласно сказанному должно выполняться равенство

$$\alpha(a\psi_1 + b\psi_2 + c\psi_3) = (-a\psi_1 - b\psi_2 + c\psi_3),$$

где α — некоторая постоянная, или, что то же самое,

$$\alpha(ax + by + cz) = (-ax - by + cz).$$

Из последнего равенства непосредственно вытекает, что

$$\alpha = 1, \quad a = 0, \quad b = 0,$$

т. е. искомая комбинация имеет вид

$$\psi(p) = cR_1\psi_3(p).$$

Если теперь вспомнить, что при вращении вокруг пространственной диагонали куба функция $\psi_3(p)$ переходит в $\psi_1(p)$, то, очевидно, что и константа c также должна равняться нулю. Иными словами, искомой ненулевой линейной комбинации не существует. Это в свою очередь означает, что построенное трехмерное представление кубической группы является неприводимым.

Таким образом, атомные функции p-типа (10.13) образуют базис некоторого трехмерного неприводимого представления кубической группы симметрии, а следовательно, атомный уровень p-типа в поле кубической симметрии остается трехкратно вырожденным, т. е. не расщепляется.

в. d-уровень. Перейдем теперь к исследованию d-состояний. Совершенно аналогично предыдущему можно показать, что под действием операторов кубической группы симметрии из функций $\psi_1(d)$ возникают функции $\psi_2(d)$ и $\psi_3(d)$, что получающаяся система функций является базисом представления этой группы симметрии и что построенное *трехмерное* представление неприводимо. В то же время оставшиеся две функции $\psi_4(d)$ и $\psi_5(d)$ уже не могут быть получены из первых трех с помощью операторов симметрии. Более того, оказывается, что эти две функции сами образуют базис некоторого нового *двумерного* неприводимого представления кубической группы. Так как функции, преобразующиеся по различным неприводимым представлениям группы симметрии, относятся к различным уровням энергии, то из сказанного вытекает, что в поле кубической симметрии атомные уровни d-типа должны расщепляться на два уровня, один из которых будет двукратно, а другой трехкратно вырожденным.

г. Влияние понижения симметрии поля на вырожденные уровни. Аналогичный анализ в принципе может быть проделан для любого атомного уровня. Не останавливаясь больше на этом вопросе, мы несколько продолжим наш пример и проанализируем, каким образом изменяется полученная система уровней с понижением симметрии от кубической до тетрагональной. Соответствующая группа симметрии совпадает теперь с группой симметрии прямоугольного параллелепипеда, получающегося из куба путем его сжатия (или растяжения) вдоль одной из осей координат, например вдоль оси z. Поскольку в этом случае ось z уже не будет физически равноправной осям x и y (разумеется, оси x и y все еще равноправны между собой), то из преобразований симметрии куба следует исключить все те, которые переводят переменную z в переменные x или y. Таким образом, если взять, например, функцию $\psi_3(p)$, то действие на нее всех преобразований тетрагональной группы симметрии сводится к умножению ее на скаляр. Иными словами, эта функция теперь уже сама по себе служит базисом некоторого (одномерного) неприводимого представления тетрагональной группы симметрии. В то же время, так как среди преобразований тетрагональной группы содержатся преобразования, переводящие переменные x и y друг в друга, то функции $\psi_1(p)$ и $\psi_2(p)$ образуют базис другого (двумерного) неприводимого представления. Следовательно, мы можем сделать заключение, что трехкратно вырожденный в кубическом кристалле p-уровень в поле тетрагональной симметрии расщепляется на два уровня, один из которых не вырожден, а другой вырожден двукратно.

Совершенно аналогично можно показать, что трехкратно вырожденный в кубическом кристалле уровень d-типа [базисные функции $\psi_1(d)$, $\psi_2(d)$, $\psi_3(d)$] расщепится также на один невырожденный [базисная функция $\psi_1(d)$] и один двукратно вырожденный [базисные функции $\psi_2(d)$ и $\psi_3(d)$]. Двукратно вырожденный уровень d-типа [базисные функции $\psi_4(d)$, $\psi_5(d)$] расщепится на два невырожденных.