Федеральное агентство по науке и инновациям
Федеральное государственное научное учреждение
«Научно-исследовательский радиофизический институт»

Препринт № 529

ЛЕКЦИИ ПО ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ КОНЕЧНЫХ ГРУПП

IV. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ И ИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Г. М. Жислин

Нижний Новгород 2009

УДК 539.18

Жислин Г. М. Лекции по теории представлений конечных групп. IV. Пространственные группы и их представления // Препринт НИРФИ № 529. — Нижний Новгород: НИРФИ, 2009. 51 с.

В работе изучаются группы G пространственной симметрии кристаллов и их представления. Для произвольных кристаллов устанавливаются возможные типы *точечной* симметрии и вид функций, *трансляционная* симметрия которых определяется волновым вектором k (теорема Блоха с учетом условия Борна – фон Кармана). Исследована связь между (нормальными) неприводимыми представлениями группы вектора k и неприводимыми представлениями группы G.

Работа поддержана грантом РФФИ 08-01-00209

9. Симметрия кристаллов*

Пути, что лягут пред вами,
чужими не пройти ногами.
Низами

Введение

В настоящей работе мы изучаем симметрию кристаллов. Рассматривается трансляционная и точечная симметрия бесконечных и конечных кристаллов и структура группы симметрии кристалла без включений и с включениями. Исследуется связь неприводимых представлений пространственной группы G симметрии кристалла и групп H_k симметрии волновых векторов k из зоны Бриллюэна и проводится построение неприводимых представлений группы G по неприводимым представлениям группы H_k и звезде вектора k.

Изложенный материал примыкает к работам [1–3] и при их использовании представляет замкнутое достаточно подробное введение в теорию симметрии кристаллов.

§ 9.1. Бесконечный кристалл и его симметрия

п.1. Кристаллом мы назовем бесконечную периодическую решетчатую структуру, в узлах которой находятся тождественные атомы. Чтобы описать кристалл, фиксируем у него произвольный узел, положение которого мы примем за начало координат, и рассмотрим три некомпланарных вектора a_1, a_2, a_3, соединяющих этот узел с тремя соседними. Выбор векторов a_i неоднозначен; мы всегда будем брать их так, чтобы они образовывали правый базис в R^3 и чтобы длины их были минимальными по сравнению с другими возможностями (рис. 9.1). В силу периодичности кристалла в направлениях a_i, $i = 1, 2, 3$, любой узел решетки кристалла в базисе $a = (a_1, a_2, a_3)$ имеет координаты

* Мы продолжаем нумерацию глав [1–3].

$n = (n_1, n_2, n_3)$, где числа n_i принадлежат множеству $\mathbb{Z}$ целых чисел. Полагая $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, $i = 1, 2, 3$. мы получим *все*

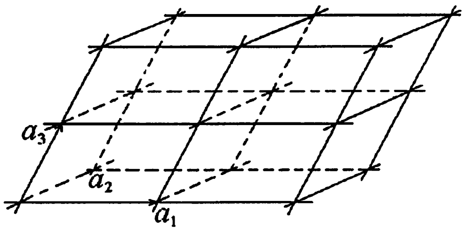

Рис. 9.1

узлы решетки. Поэтому в качестве математической модели бесконечного кристалла можно рассматривать множество точек

$$Z_a = \{n \mid n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots, \quad i = 1, 2, 3\}.$$

Это множество называется решеткой Браве, вектора n называются векторами решетки, а (базисные) векторы a_1, a_2, a_3 — основными векторами решетки. Параллелепипед, построенный на основных векторах — элементарный параллелепипед. Очевидно, его объем $V_a = (a_1, [a_2, a_3])$.

п.2. Определение. Группа G_a преобразований в R^3, переводящих решетку Браве в себя, называется группой пространственной симметрии кристалла.

Другими словами

$$G_a = \{g \mid gZ_a = Z_a, \quad g \text{ — обратимые операторы в } R^3\}.$$

Основное отличие кристалла от молекулы “по симметрии” — это наличие в группе симметрии кристалла сдвигов (трансляций) на вектора решетки, т.е. наличие трансляционной симметрии. Действительно, пусть c — произвольный вектор из R^3 и t_c — оператор сдвига в R^3 на вектор c:

$$t_c r := r + c, \quad \forall r \in R^3.$$

Тогда для любых $n' = \sum\limits_{i=1}^{3} n'_i a_i \in Z_a$ и $n = \sum\limits_{i=1}^{3} n_i a_i \in Z_a$, имеем

$$t_{n'} n = n + n' = \sum_{i=1}^{3} (n_i + n'_i) a_i \in Z_a.$$

Таким образом решетка Браве инвариантна относительно трансляций на вектора решетки и, значит, $t_{n'} \in G_a$ при $\forall n' \in Z_a$.

Пусть

$$\tau_a = \Big\{ t_{n'} \mid n' = \sum_{i=1}^{3} n'_i a_i, \quad \forall n' \in Z_a \Big\}.$$

Множество τ_a — группа по умножениию: при $\forall n',\ n'' \in Z_a$

$$t_{n'} t_{n''} r = t_{n'}(r + n'') = r + n'' + n' = t_{n''+n'} r, \quad (t_{n'})^{-1} = t_{-n'} \text{ и т. д.}$$

Группа τ_a называется группой трансляционной симметрии кристалла. Очевидно, τ_a — подгруппа группы G_a. Так как $t_{n'} = t_{n'_1 a_1} t_{n'_2 a_2} t_{n'_3 a_3}$ и $t_{n'_i a_i} = t_{a_i}^{n'_i}$[1], то $\tau_a = \tau_{a_1} \times \tau_{a_2} \times \tau_{a_3}$, где $\tau_{a_i} = \{ t_{a_i}^{n'_i} \mid n'_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \}$, то есть группа τ_a есть прямое произведение трех бесконечных циклических групп τ_{a_i}.

п.3. Обсудим теперь вращательную симметрию кристалла.

Определение. Максимальная подгруппа преобразований из полной группы вращений $O(3)$, переводящих решетку Браве в себя, называется группой точечной симметрии кристалла.

Обозначим эту группу через K_a. По определению, $K_a = \{\beta \mid \beta \in O(3),\ \beta Z_a = Z_a\}$. Элементы $\beta \in K_a$ называются преобразованиями точечной симметрии кристалла (точечными преобразованиями). Ясно, что они определяются пространственной структурой решетки Z_a. Однако некоторые заключения об элементах β из K_a можно сделать в самом общем случае — не конкретизируя вид решетки Браве. Так как, очевидно, $i \in K_a$ (i — инверсия в R^3) и так как для $\forall \beta' \in O(3)$ выполняется $\beta' = \beta i$

[1] Так как $t_{-a_i} = t_{a_i}^{-1}$, то при $n'_i < 0$ мы полагаем $t_{a_i}^{n'_i} = \left(t_{a_i}^{-1}\right)^{|n'_i|} = t_{n'_i a_i}$.

или $\beta' = \beta$ для какого-либо $\beta \in O^+(3)$, то далее рассматриваем только $\beta \in O^+(3)$. Включение $\beta \in K_a$ эквивалентно условию $\beta n \in Z_a$ при $\forall n \in Z_a$, и, значит, условиям

$$\beta a_s \in Z_a, \quad s = 1, 2, 3.$$

Пусть $\|\beta\|_a = (\beta_{st})$ — матрица вращения β из K_a в базисе $a = (a_1. a_2, a_3)$. Тогда

$$\beta a_i = \sum_{j=1}^{3} \beta_{ji} a_j,$$

где β_{ji} — целые числа. Следовательно, след $\operatorname{Tr}\|\beta\|_a = \sum\limits_{j=1}^{3} \beta_{jj}$ матрицы $\|\beta\|_a$ есть целое число. Выберем в R^3 новый (ортонормированный) базис $e = (e_1, e_2, e_3)$ так, чтобы вектор e_3 лежал на оси вращения ℓ оператора β и совпадал с ℓ по направлению. Тогда в базисе e матрица вращения β будет иметь вид

$$\|\beta\|_e = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где φ — угол поворота, осуществляемого вращением β около оси ℓ. Так как $\operatorname{Tr}\|\beta\|_e = \operatorname{Tr}\|\beta\|_a$, то величина $\operatorname{Tr}\|\beta\|_e = 2\cos\varphi + 1$ есть целое число. Следовательно, возможные значения $\cos\varphi$ суть $0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1$, т. е. возможные значения φ — это $0, \pi, \frac{\pi}{2}, \frac{3}{2}\pi, \frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$. Известно, что если какая-либо система имеет ось симметрии n-го порядка, то группа симметрии данной системы содержит повороты около этой оси на углы $\frac{2\pi}{n}k$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$. Поэтому записывая возможные значения угла φ в виде

$$\varphi = 0,\ \frac{2\pi}{2},\ \frac{2\pi}{4},\ \frac{2\pi}{4}\cdot 3,\ \frac{2\pi}{6},\ \frac{2\pi}{3},\ \frac{2\pi}{3}\cdot 2,\ \frac{2\pi}{6}\cdot 5,$$

мы видим, что возможные значения порядков осей симметрии кристалла равны 2, 3, 4, 6. Значит, оси других порядков в кристалле невозможны. А что касается осей порядков 2, 3, 4, 6, то наши рассуждения конечно не доказывают существования кристаллов, у которых имеются оси симметрии данных порядков. Однако такие кристаллы действительно существуют [5].

п.4. В зависимости от типа точечной симметрии кристалла — т. е. от группы K_a - решетки Браве делятся на 7 классов, называемых сингони́ями [5]. Мы не будем их перечислять, но в качестве примера приведем одну из простейших сингоний — моноклинную с симметрией $K_a = C_{2h}$. Такая симметрия возникает, если основные вектора a_1 и a_2 произвольны, вектор a_3 перпендикулярен к a_1, a_2 и является осью 2-го порядка (рис. 9.2,*а*).

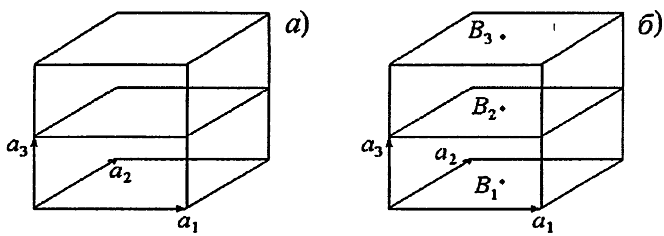

Рис. 9.2

До сих пор мы рассматривали кристаллы без включений, т. е. ситуацию, когда кристалл содержит тождественные атомы только в узлах решетки и ничего кроме них. Однако фактически в большинстве случаев внутри каждой элементарной ячейки кристалла и (или) на её гранях возможны включения атомов, вообще говоря, других элементов. Не нарушая трансляционную симметрию кристалла такие включения, как правило, понижают точечную симметрию. Другими словами, если кристалл без включений обладал точечной симметрией группы K_a, то после появления включений точечная симметрия будет определяться некоторой подгруппой $K'_a \subseteq K_a$.

Для того, чтобы $K'_a = K_a$, включения должны располагаться специальным образом. Так, для моноклинной сингонии чтобы симметрия C_{2h} сохранилась после появления включений достаточно, чтобы атомы включения B_i (тождественные между собой, но, вообще говоря, отличные от атомов в узлах решетки Браве) располагались в середине верхней и нижней граней элементарной ячейки (рис. 9.2,*б*). Такой тип ячеек называется базоцентрированным.

§ 9.2. Конечный кристалл. Условие Борна – фон Кармана

п.1. Реальные кристаллы не являются бесконечными, и поэтому говорить об их трансляционной инвариантности невозможно. Действительно, пусть Y_0 — конечный кристалл. Тогда при любой трансляции: а) часть атомов кристалла Y_0 окажется вне его; б) для тех атомов, которые при трансляции остаются внутри Y_0, их новые положения могут быть "не эквивалентны" исходным. Дадим математическое описание ситуации. Рассмотрим конечный кристалл Y_0, имеющий форму параллелепипеда, ребра которого параллельны векторам a_1, a_2, a_3, а их длины соответственно равны $N_1|a_1|$, $N_2|a_2|$, $N_3|a_3|$, где N_i — число элементарных ячеек конечного кристалла Y_0 в направлении a_i. В реальных кристаллах числа N_i достаточно велики: $N_i \geq 10^6$. Введем в кристалле Y_0 систему координат, направив её оси по векторам a_1, a_2, a_3, а начало поместим в левую нижнюю вершину передней грани (рис. 9.3).

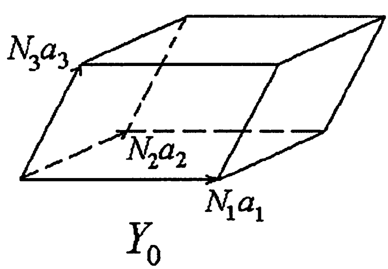

Рис. 9.3

Очевидно, координаты всех узлов Y_0 есть целые числа $n = (n_1, n_2, n_3)$, где $0 \leq n_i \leq N_i$. Фиксируем $n' = \sum_{i=1}^{3} n'_i a_i$, где $n'_i \in \mathbb{Z}$. Тогда $t_{n'}n = n + n' = \sum_{i=1}^{3}(n_i + n'_i)a_i$. Вернемся теперь к проблемам а), б), о которых мы говорили выше. Мы видим, что после трансляции $t_{n'}$ все узлы $n = (n_1, n_2, n_3)$, для которых $n_i > N_i - n'_i$ или $n_i < -n'_i$ хотя бы для одного значения i, окажутся вне Y_0 — это иллюстрация к ситуации а). Обсудим теперь проблему б). Если, например, узел n расположен вблизи одной из граней (т. е. хотя бы одна из его координат n_i "не сильно" отличается от 0 или от N_i), а узел $n+n'$ оказывается вблизи центра кристалла Y_0, то ясно, что с физической точки зрения положения n и $n+n'$ одного и того же атома не эквивалентны. Действительно, в узле n атом испытывает воздействие других атомов в основном "с одной стороны", а в узле $n+n'$ — со всех сторон. Однако, поскольку общее число узлов $N = N_1N_2N_3$ очень велико ($\geq 10^{18}$), а число состояний n и сдвигов n', при которых положения n и $n + n'$ существенно не эквивалентны, сравнительно мало, то условились считать, что *всегда* узлы $n \in Y_0$ и $t_{n'}n$ эквивалентны, если $n' + n_0 \in Y_0$. Тем самым снимается проблема б). Решение проблемы а) рассматривается в п.2.

п.2. Метод преодоления трудностей, возникающих при $t_{n'}n \notin \notin Y_0$, был предложен Борном и фон Карманом. Их идея состоит в следующем. Заполним всё пространство R^3 кристаллами Y_α, тождественными Y_0, перенося кристалл Y_0 с "вмороженной" в него координатной системой параллельно самому себе, и после этого отождествим узлы кристаллов Y_α и Y_0, которые имеют одинаковые локальные координаты. Рассмотрим узлы $M_\alpha \in Y_\alpha$ и $M_0 \in Y_0$, локальные координаты которых $n(\alpha)$ и n соответственно в кристаллах Y_α и Y_0 одинаковы, т. е. $OM_0 = O_\alpha M_\alpha$

(рис. 9.4). Ясно, что $OM_\alpha = OO_\alpha + O_\alpha M_\alpha$, где вектор $OO_\alpha = (k_1N_1, k_2N_2, k_3N_3)$ соединяет начала координат в кристаллах Y_0 и Y_α и числа $k_i \in \mathbb{Z}$ зависят от α. Поэтому мы можем за-

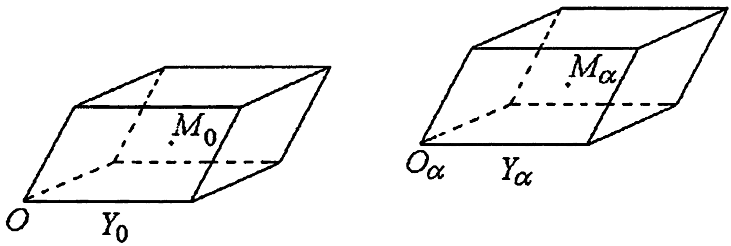

Рис. 9.4

писать, что $M_\alpha = t_{OO_\alpha} M_0 = t_{k_1N_1a_1}\, t_{k_2N_2a_2}\, t_{k_3N_3a_3}\, M_0$. Согласно Борну – фон Карману отождествляем точки M_0 и M_α. Это означает, что мы должны приравнять оператор t_{OO_α} к единичному (тождественному) оператору I, т. е. должны положить

$$t_{a_1}^{k_1N_1}\, t_{a_2}^{k_2N_2}\, t_{a_3}^{k_3N_3} = I \quad \text{при} \quad \forall k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}.$$

Следовательно,

$$t_{a_1}^{N_1} = t_{a_2}^{N_2} = t_{a_3}^{N_3} = I. \tag{9.1}$$

Равенства (9.1) дают математическую формулировку идеи (условия) Борна – фон Кармана. При их выполнении результат действия оператора трансляции $t_{n'}$ на любой узел $n \in Y_0$ лежит в Y_0 при $\forall\, n'$. Действительно, вектор $t_{n'}n$ можно записать в виде

$$t_{n'}n = \sum_{i=1}^{3}(n_i + n_i')\, a_i = \sum_{i=1}^{3}(k_iN_i + n_i'')\, a_i = \sum_{i=1}^{3} k_iN_ia_i + n'', \tag{9.2}$$

где $k_i \in \mathbb{Z}$, $n'' = (n_1'', n_2'', n_3'')$, $0 \le n_i'' < N_i$. Поэтому в силу (9.1),

$$t_{n'}n = t_{a_1}^{k_1N_1}\, t_{a_2}^{k_2N_2}\, t_{a_3}^{k_3N_3}\, n'' = n'' \in Y_0.$$

Отметим, что условия (9.1) приводят к необходимости отождествления между собой и некоторых узлов исходного кристалла. А именно, в силу (9.1) узлы $n = (n_1, n_2, n_3)$ и $\tilde{n} = (\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3)$ из Y_0 отождествляются, если при $\forall j,\ 1 \le j \le 3$, выполняется $|n_j - \tilde{n}_j| = N_j$ или $n_j = \tilde{n}_j$.

Задание. Докажите, что отождествляемые между собой узлы n и $\tilde{n}$ лежат на противоположных гранях кристалла Y_0 и одновременно на концах отрезков:

а) параллельных какому-либо из векторов $N_s a_s$, $N_s a_s \pm N_t a_t$, $s, t = 1, 2, 3$, $s \neq t$;

б) ? (заполнить самостоятельно).

п.3. Группа трансляций $\tau_a = \tau_{a_1} \times \tau_{a_2} \times \tau_{a_3}$ — бесконечная для бесконечного кристалла — становится конечной при условии (9.1), ибо бесконечные группы τ_{a_j} превращаются в конечные:

$$\tau_{a_j} = \left\{ t_{a_j}^s \mid s = 0, 1, \ldots, N_j - 1,\ t_{a_j}^{N_j} = t_{a_j}^0 = e_0 \right\}, \quad j = 1, 2, 3,$$

где $e_0 = I$ — единичный элемент группы τ_{a_j}. Группа τ_{a_j} — циклическая порядка N_j. Следовательно, она изоморфна группе $C_{N_j} = \left\{ C_z \left(\frac{2\pi}{N_j} s \right) \mid s = 0, 1, \ldots, N_j - 1 \right\}$ вращений вокруг оси z на углы, кратные $\frac{2\pi}{N_j}$. Представления группы C_{N_j} известны [3], поэтому в силу изоморфизма группа τ_{a_j} имеет те же неприводимые представления, что и группа C_{N_j}, т. е.

$$t_{a_j} \to e^{i \frac{2\pi}{N_j} p_j}, \quad p_j \in \mathbb{Z}, \quad 0 \le p_j < N_j,$$

где числа p_j определяют типы (неприводимых) представлений группы τ_{a_j}. При фиксированном $p = (p_1, p_2, p_3)$ и $n = \sum_{s=1}^{3} n_s a_s$ имеем

$$t_n = t_{a_1}^{n_1} t_{a_2}^{n_2} t_{a_3}^{n_3} \to e^{2\pi i \sum_{j=1}^{3} p_j n_j}.$$

Таким образом одномерная матрица $D_n^{(p)}$ неприводимого представления $t_n \to D_n^{(p)}$ типа p группы τ_a имеет вид

$$D_n^{(p)} = e^{2\pi i \sum\limits_{j=1}^{3} p_j n_j}. \tag{9.3}$$

В силу (9.2), (9.3) чтобы перебрать все $N = N_1 N_2 N_3$ не эквивалентных неприводимых представлений группы τ_a достаточно перебрать все значения $p_j = 0, 1, \ldots, N_j - 1$, $j = 1, 2, 3$. Заметим, однако, что выбор значений p_j для описания всех неприводимых представлений группы τ_a не однозначен. Действительно, пусть вектор $p = (p_1, p_2, p_3)$ — фиксирован, $d_j \in \mathbb{Z}$, $\tilde{p}_j = p_j + d_j N_j$ и $\tilde{p} = (\tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \tilde{p}_3)$. Тогда очевидно $D_n^{(p)} = D_n^{(\tilde{p})}$ для $\forall n$, т. е. одно и то же неприводимое представление группы τ_a может определяться разными векторами p и $\tilde{p}$ при условии, что $p - \tilde{p} = (d_1 N_1, d_2 N_2, d_3 N_3)$, $d_j \in \mathbb{Z}$. Следовательно, для перебора всех неприводимых представлений группы τ_{a_j} можно взять $p_j = \big(d_{0j} N_j, d_{1j} N_j + 1, d_{2j} N_j + 2, \ldots, d_{N_j - 1, j} N_j + (N_j - 1)\big)$ при любых $d_{sj} \in \mathbb{Z}$, $j = 1, 2, 3$, $s = 0, 1, \ldots, N_j - 1$.

§ 9.3. Обратная решетка. Зона Бриллюена

п.1. Для описания неприводимых представлений группы τ_a в физике принято использовать так называемую обратную решетку Z_b. Основные вектора b_1, b_2, b_3 этой решетки определяются формулами

$$b_1 = \frac{[a_2, a_3]}{\big(a_1, [a_2, a_3]\big)}, \quad b_2 = \frac{[a_3, a_1]}{\big(a_2, [a_3, a_1]\big)}, \quad b_3 = \frac{[a_1, a_2]}{\big(a_3, [a_1, a_2]\big)}. \tag{9.4}$$

В силу (9.4) $(b_j, a_i) = 0$ при $j \neq i$, $(b_j, a_j) = 1$, $j = 1, 2, 3$ и кроме того объем $V_b = \big(b_1, [b_2, b_3]\big)$ элементарного параллелепипеда, построенного на основных векторах обратной решетки, равен $V_a^{-1} = \big(a_1, [a_2, a_3]\big)^{-1}$. Если вектора a_1, a_2, a_3 взаимно ортогональны, то, очевидно, вектора b_1, b_2, b_3 тоже взаимно ортогональны и $|b_i| = |a_i|^{-1}$.

Вектора $\ell = \ell_1 b_1 + \ell_2 b_2 + \ell_3 b_3$, $\ell_i \in \mathbb{Z}$, называются векторами обратной решетки Z_b, концы векторов ℓ назовем узлами решетки Z_b. Таким образом

$$Z_b = \{\ell \mid \ell = \sum_{s=1}^{3} \ell_s b_s, \ \ \ell_s = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\}.$$

Пусть $p_i \in \mathbb{Z}$, $i = 1, 2, 3$ и $p = (p_1, p_2, p_3)$. Положим,

$$k := 2\pi \left(\frac{p_1 b_1}{N_1} + \frac{p_2 b_2}{N_2} + \frac{p_3 b_3}{N_3} \right). \tag{9.5}$$

В силу свойств векторов b_i

$$(k, n) = 2\pi \left(\sum_{j=1}^{3} \frac{p_j b_j}{N_j}, \sum_{t=1}^{3} n_t a_t \right) = 2\pi \sum_{j=1}^{3} \frac{n_j p_j}{N_j}$$

и поэтому вследствие (9.3)

$$D_n^{(p)} = e^{i(k,n)}. \tag{9.6}$$

Таким образом мы видим, что при $p_j \in \mathbb{Z}$, $j = 1, 2, 3$, вектор k однозначно определяет неприводимое представление группы τ_a. В то же время одному и тому же неприводимому представлению группы τ_a могут отвечать различные значения k.

Задание. Докажите, что

1. Вектора $k = 2\pi \sum_{j=1}^{3} \frac{p_j b_j}{N_j}$ и $\tilde{k} = 2\pi \sum_{j=1}^{3} \frac{\tilde{p}_j b_j}{N_j}$ задают одно и тоже неприводимое представление группы τ_a тогда и только тогда, когда существует такой вектор ℓ обратной решетки, что

$$k - \tilde{k} = 2\pi \ell. \tag{9.7}$$

2. Вектор k не определяет представление группы τ_a, если в (9.5) $p_j \notin \mathbb{Z}$ хотя бы для одного значения j.

п.2. Вектор k называется волновым вектором.

Определение. Область в пространстве, которая содержит волновые вектора k, отвечающие всем различным неприводимым представлениям группы τ_a, называется зоной Бриллюена (далее ЗБ), если для $\forall k, \tilde{k} \in$ ЗБ, $k \neq \tilde{k}$, вектора k и $\tilde{k}$ определяют различные неприводимые представления группы τ_a.

Ясно, что ЗБ определена не однозначно. Простейшая ЗБ это параллелепипед $\mathbb{B} = B_1 \ldots B_8$, подобный элементарному параллелепипеду обратной решетки, но с ребрами, увеличенными в 2π раз (рис. 9.5). Здесь начало координат в базисе b_1, b_2, b_3 помещено в точку B_1, $B_1B_2 = 2\pi b_1$, $B_1B_4 = 2\pi b_2$, $B_1B_5 = 2\pi b_3$. При этом из каждой пары противоположных граней параллелепипеда $\mathbb{B}$ мы должны оставить лишь одну (почему?). Например, оставляем грани $B_1B_2B_3B_4$, $B_1B_2B_6B_5$, $B_1B_4B_8B_5$, а грани $B_5B_6B_7B_8$, $B_4B_3B_7B_8$, $B_2B_3B_7B_6$ — отбрасываем. Полученная таким образом зона Бриллюена — назовем её ЗБ1 — содержит все вектора k, получающиеся по формуле (9.5) с $p_j = 0, 1, \ldots, N_j - 1$, $j = 1, 2, 3$.

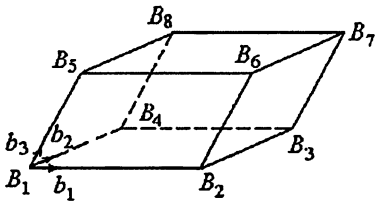

Рис. 9.5

Из предыдущего следует, что вместо этой ЗБ1 мы можем взять любую другую ЗБ, получающуюся сдвигом всего параллелепипеда $\mathbb{B}$ или каких-то его частей на $2\pi\ell$ с произвольными векторами ℓ обратной решетки для каждой части. Обычно стараются выбрать в качестве ЗБ область в R^3, обладающую в базисе b_1, b_2, b_3 максимальной симметрией. В некоторых случаях удается выбрать ЗБ в виде шара $\left(\text{если } |b_1| = |b_2| = |b_3| \text{ и угол между } b_i, b_j \text{ при } i \neq j \text{ равен } \dfrac{\pi}{3}\right)$.

Покажем, как можно несколько симметризовать ЗБ1 в общей ситуации. Разобьем ЗБ1 на 8 параллелепипедов, проведя плоскости через середины ребер противоположных граней. Получим 8 параллелепипедов $\Pi_1, \ldots, \Pi_8$, нумеруя Π_j номером j той вершины B_j параллелепипеда $\mathbb{B}$, которая содержится в Π_j. Далее полагаем

$$\left.\begin{aligned}
&\Pi'_1 = \Pi_1,\\
&\Pi'_j = \{M' \mid M' = M - 2\pi\ell(j),\ M \in \Pi_j\},\quad j = 2, 3, \dots 8,\\
&\text{где}\ \ \ell(2) = b_1,\quad \ell(3) = b_1 + b_2,\quad \ell(4) = b_2,\quad \ell(5) = b_3,\\
&\qquad \ell(6) = b_1 + b_3,\quad \ell(7) = b_1 + b_2 + b_3,\quad \ell(8) = b_2 + b_3.
\end{aligned}\right\} \tag{9.8}$$

В силу (9.8) и Задания 1 волновые вектора k из Π_j перейдут в волновые вектора k' из Π'_j, отвечающие тем же неприводимым представлениям, что и k. Поэтому в параллелепипеде

$$B' = \bigcup_{j=1}^{8} \Pi'_j$$

не потеряно ни одно значение k из ЗБ1 (конечно, с точностью до эквивалентных). Чтобы получить из параллелепипеда B' зону Бриллюена — которую мы назовем ЗБ2 — мы должны (так же, как и при построении ЗБ1) из каждой пары противоположных граней B' удалить одну. Если это сделать аналогично п.2, то можно записать, что

$$\text{ЗБ2} = \left\{ r \mid r = \sum_{j=1}^{3} x_j b_j,\ \ -\pi\,|b_j| \le x_j < \pi\,|b_j|,\ \ j = 1, 2, 3 \right\}.$$

Далее (если не сказано иное) мы всюду берем ЗБ = ЗБ1.

§ 9.4. Теорема Блоха. Правила отбора для трансляционной симметрии

п.1. Пусть k — волновой вектор из ЗБ. Найдем общий вид функций, принадлежащих представлению типа k. Операторы T_{t_n} представления группы τ_a, отвечающие трансляциям t_n, для краткости будем обозначать через $T(n)$. Наша цель состоит в том. чтобы найти общий вид функций $\psi^{(k)}(r)$, для которых $T(n)\psi^{(k)}(r) = e^{i(k,n)}\psi^{(k)}(r)$, где $T(n)\psi(r) = \psi(t_n^{-1}r) = \psi(t_{-n}r) = = \psi(r-n)$ при $\forall\,\psi(r)$. Предварительно заметим, что с учетом условия Борна – фон Кармана в качестве пространства представления $t_n \to T(n)$, в котором мы будем искать вид функций $\psi^{(k)}(r)$, мы должны рассматривать пространство L периодических функций $\psi(r)$:

$$\psi(r + d_1N_1a_1 + d_2N_2a_2 + d_3N_3a_3) = \psi(r) \quad \forall\, d_i \in \mathbb{Z}, \tag{9.9}$$

ибо только в этом случае можно отождествлять находящиеся в разных кристаллах точки с одинаковыми локальными координатами, как того требует условие Борна – фон Кармана.

Теорема Блоха. *Функции $\psi(r)$, принадлежащие в пространстве L волновому вектору k* (т. е. преобразующиеся по неприводимому представлению типа k группы τ_a) *имеют вид*:

$$\psi(r) = e^{-i(k,r)}\Phi(r), \tag{9.10}$$

где $\Phi(r)$ — произвольная функция, инвариантная относительно трансляций на вектора решетки Z_a.

Замечание. Иногда в литературе в формулировке теоремы Блоха можно увидеть $e^{i(k,r)}$ вместо $e^{-i(k,r)}$. Это означает лишь то, что там в определении вектора k правая часть формулы (9.5) взята со знаком минус.

п.2. **Доказательство.** Отметим сначала, что любая функция $\psi(r)$ вида

$$\psi(r) = e^{-i(k,r)}\,\Phi(r), \tag{9.11}$$

где функция $\Phi(r)$ инвариантна относительно сдвигов на вектора решетки Браве, действительно принадлежит представлению $D_n^{(k)}$ типа k группы τ_a, ибо

$$\begin{aligned} T(n)\,\psi(r) &= \psi(r-n) = e^{i(k,n)}e^{-i(k,r)}\Phi(r-n) = \\ &= e^{i(k,n)}e^{-i(k,r)}\Phi(r) = e^{i(k,r)}\psi(r). \end{aligned}$$

Пусть теперь $\psi(r) \in D_n^{(k)}$. Найдем общий вид функций $\psi(r)$. Так как $\psi(r) \in D_n^{(k)}$, то

$$T(n)\,\psi(r) = \psi(r-n) = e^{i(k,n)}\psi(r) \quad \text{при} \quad \forall\, n \in Z_a,$$

откуда

$$\psi(r) = e^{-i(k,n)}\,\psi(r-n) \quad \text{при} \quad \forall\, n \in Z_a. \tag{9.12}$$

Запишем функцию (9.12) в виде

$$\psi(r) = e^{-i(k,r)}\,\Phi(r), \tag{9.13}$$

где

$$\Phi(r) = e^{i(k,r-n)}\,\psi(r-n) \quad \text{при} \quad \forall\, n \in Z_a. \tag{9.14}$$

Пусть $n' \in Z_a$. В силу (9.14)

$$\Phi(r+n') = e^{i(k,r-n+n')}\,\psi(r-n+n'). \tag{9.15}$$

Очевидно, что разность $n - n'$ можно записать в виде

$$n - n' = \sum_{j=1}^{3} d_j N_j a_j + n'',$$

где $d_j = 0$ или $d_j = \pm 1$, а $n'' \in Z_a$. Так как $\psi(r) \in L$, то

$$\psi(r-n+n') = \psi(r-n'').$$

Кроме того, очевидно, что

$$e^{i(k,\sum\limits_{j=1}^{3} d_j N_j a_j)} = 1.$$

Поэтому и вследствие (9.15)

$$\Phi(r+n') = e^{i(k,r-n'')}\,\psi(r-n'').$$

Так как $n'' \in Z_a$, то в силу (9.14), $\Phi(r+n') = \Phi(r)$ и теорема Блоха следует из (9.13).

Замечание. Теорему Блоха можно доказать и используя введенные в [2, § 5.2] проекторы $P^{(k)}$ на подпространства функций трансляционной симметрии k, т. е. используя равенство

$$\psi(r) = P^{(k)}\psi(r) = \frac{1}{|\tau_a|} \sum_{n \in Z_a} e^{-i(k,n)}\, \psi(r-n),$$

где суммирование по n означает сумму по n_1, n_2, n_3, $n_j = 0, 1, \ldots, N_j - 1$, $j = 1, 2, 3$. Однако этот путь более громоздок, чем использованный нами.

п.3. Обсудим теперь трансляционные правила отбора. Пусть Q — возмущающий оператор, $\varphi^{(k)}$ и $f^{(k')}$ — функции, принадлежащие волновым векторам k и k'. Переход из состояния симметрии k в состояние симметрии k' под действием оператора Q называем запрещенным, если

$$\left(\varphi^{(k)}, Q f^{(k')}\right) = 0 \tag{9.16}$$

независимо ни от каких свойств функций $\varphi^{(k)}$ и $f^{(k')}$, кроме их трансляционной симметрии. Пусть $Q^{(m)} = P^{(m)}Q$, где m — произвольный волновой вектор, $\Gamma = \left\{m \mid m \in \text{ЗБ},\ Q^{(m)} \not\equiv 0\right\}$ и

$$c^{k,k'}(m) = \left(\varphi^{(k)}, Q^{(m)} f^{(k')}\right).$$

Тогда для выполнения (9.16) достаточно, чтобы

$$c^{k,k'}(m) = 0 \ \text{ для всех } \ m \ \text{ из } \ \Gamma. \tag{9.17}$$

Согласно общей теории [2, гл. VII], выполнение (9.17) независимо от "внутренних" свойств $\varphi^{(k)}$ и $f^{(k')}$ возможно лишь тогда, когда

$$D_n^{(m)} \times D_n^{(k')} \times \bar{D}_n^{(k)} \not\supset D_n^{(0)}, \quad \forall m \in \Gamma, \tag{9.18}$$

где $D_n^{(0)} \equiv 1$ — "матрица" тождественного представления. Так как все матрицы $D_n^{(m)}$, $D_n^{(k')}$, $D_n^{(k)}$ — одномерные, то (9.18) означает, что

$$D_n^{(m)}\, D_n^{(k')}\, \bar{D}_n^{(k)} \not\equiv 1, \quad \forall m \in \Gamma,$$

т. е. что при $\forall\, m \in \Gamma$

$$e^{i(m,n)}\, e^{i(k',n)}\, e^{-i(k,n)} \not\equiv 1. \tag{9.19}$$

Но $e^{i(m+k'-k.n)} \equiv 1$ при любом n только если представление типа $m+k'-k$ эквивалентно тождественному, т. е. если

$$m + k' - k = 2\pi\ell$$

для какого-либо вектора ℓ обратной решетки. Значит, условие запрещенности изучаемого перехода — условие равенства нулю элементов $c^{k,k'}(m)$ при $\forall\, m \in \Gamma$ — это неравенства

$$m + k' - k \neq 2\pi\ell \tag{9.20}$$

для $\forall\, m \in \Gamma$ и $\forall\, \ell$, $\ell = \sum\limits_{j=1}^{3} \ell_j b_j$, $\ell_j \in \mathbb{Z}$. Ясно, что для любых конкретных значений m, k', k проверка условий (9.20) не может вызвать затруднений. Далее тип m фиксируем. Если $k', k \in$ ЗБ1, то в силу (9.20) можно записать, что при $\forall\, m \in$ ЗБ1

$$c^{k,k'}(m) = b^{k,k'}(m) \sum_{\ell_1,\ell_2,\ell_3=-1}^{2} \delta_{m+k'-k,2\pi\ell},$$

а при $m = 0$

$$c^{k,k'}(0) = b^{k,k'}(0)\, \delta_{k',k}, \tag{9.21}$$

где $b^{k,k'}(m)$ — некоторая константа.

Таким образом, в частности, для трансляционно-инвариантного возмущающего оператора $Q = Q^{(0)}$ и $k, k' \in$ ЗБ1 переход запрещен при $k \neq k'$. Функции $\varphi^{(k)}$ и $f^{(k')}$ называются зацепляющимися, если $\exists \ell$, $\ell \in Z_b$, так, что $k' - k = 2\pi\ell$. Очевидно, что при $k', k \in$ ЗБ зацепление возможно только при $k' = k$.

п.4. В заключение рассмотрим вопрос о точечной симметрии обратной решетки. Пусть K_a и K_b — группы точечных преобразований, переводящих в себя соответственно решетки Z_a и Z_b. Докажем, что

$$K_a = K_b. \tag{9.22}$$

Пусть $n = \sum\limits_{i=1}^{3} n_i a_i$, $\ell = \sum\limits_{i=1}^{3} \ell_i b_i$, $n_i, \ell_i \in \mathbb{Z}$, $i = 1, 2, 3$. Так как $(a_j, b_s) = \delta_{js}$, то $(n, \ell) \in \mathbb{Z}$. Пусть $g \in K_a$. Тогда $gn \in Z_a$ и, значит, $(gn, \ell) \in \mathbb{Z}$. Так как оператор g — унитарен, то $(gn, \ell) = (n, g^{-1}\ell)$. Разложив $g^{-1}\ell$ по базису b_1, b_2, b_3 получим $g^{-1}\ell = \alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \alpha_3 b_3$ и, значит,

$$(gn, \ell) = n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2 + n_3\alpha_3 \in \mathbb{Z} \quad \text{при} \quad \forall\, n_1, n_2, n_3.$$

Полагая $n_j = 1$, $n_i = 0$, $i \neq j$, мы получим, что $\alpha_j \in \mathbb{Z}$, $j = 1, 2, 3$. А это значит, что $g^{-1}\ell \in Z_b$. Так как $\{g^{-1} \mid g \in K_a\} = \{g \mid g \in K_a\}$, то из последнего включения следует, что $g'\ell \in Z_b$ при $\forall\, g' \in K_a$ и, следовательно, $K_a \subseteq K_b$. Совершенно аналогично устанавливается включение $K_b \subseteq K_a$ (сделать самостоятельно). Из этих включений следует равенство (9.22).

10. Пространственные группы и их представления

Если ты не любопытен —
оставайся в дураках:
ты не сделаешь открытий,
не прославишься в веках

В. Шефнер

§ 10.1. Пространственные группы кристаллов без включений и с включениями

п.1. Группа симметрии кристалла называется пространственной группой. Рассмотрим сначала кристалл без включений. В этом случае группа симметрии состоит из всех трансляций группы $\tau_a = \left\{ t_n \mid n = \sum\limits_{i=1}^{3} n_i a_i,\ n_i \in \mathbb{Z},\ t_{N_j a_j} = I,\ j = 1, 2, 3 \right\}$, всех точечных преобразований группы $K_a = \{\beta \mid \beta \in O(3),\ \beta Z_a = Z_a\}$ и их произведений $t_n\beta$, βt_n, $t_n \in \tau_a$, $\beta \in K_a$. Положим

$$G_a = \{g \mid g = t_n\beta,\ t_n \in \tau_a,\ \beta \in K_a\}$$

и покажем, что множество элементов $g \in G_a$ есть группа по умножению элементов g как операторов в R^3. Предварительно установим следующие полезные соотношения для $\forall\,\omega_0, \omega_1, \omega_2 \in \in R^3$ и $\forall\,\beta_0, \beta_1, \beta_2 \in K_a$:

$$t_{\omega_1}\beta_1\, t_{\omega_2}\beta_2 = t_{\beta_1\omega_2+\omega_1}\beta_1\beta_2. \tag{10.1}$$

$$\beta_0 t_{\omega_0} = t_{\beta_0\omega_0}\beta_0, \tag{10.2}$$

$$(t_{\omega_0}\beta_0)^{-1} = t_{-\beta_0^{-1}\omega_0}\beta_0^{-1}, \tag{10.3}$$

где $t_\omega r = r + \omega$ при $\forall\, r, \omega \in R^3$.

Равенство (10.3) следует из (10.1), если там положить $\omega_1 = = \omega_0$, $\beta_1 = \beta_0$, $\omega_2 = -\beta_0^{-1}\omega_0$, $\beta_2 = \beta_0^{-1}$. Тогда в (10.1) $\beta_1\beta_2 = e_0$, $\beta_1\omega_2 + \omega_1 = 0$, и в правой части (10.1) получим $t_{\beta_1\omega_2+\omega_1}\beta_1\beta_2 = = e_0 = I$. Для проверки (10.1) и (10.2) достаточно применить входящие туда операторы к любому $r \in R^3$. Действительно,

$$t_{\omega_1}\beta_1\, t_{\omega_2}\beta_2\, r = t_{\omega_1}\beta_1(\beta_2 r + \omega_2) = \beta_1\beta_2 r + \beta_1\omega_2 + \omega_1 = t_{\beta_1\omega_2+\omega_1}\beta_1\beta_2 r$$

и (10.1) доказано. Далее, $\beta_0 t_{\omega_0} r = \beta_0(r + \omega_0) = \beta_0 r + \beta_0\omega_0 = = t_{\beta_0\omega_0}\beta_0 r$, т. е. (10.2) верно.

Используем теперь соотношения (10.1)–(10.3) в случае, когда вектора ω_i, $i = 0, 1, 2$, не произвольны, а принадлежат решетке Браве. В этом случае $\beta_1\omega_2 + \omega_1 \in Z_a$, $\beta_0\omega_0 \in Z_a$ и $-\beta_0^{-1}\omega_0 \in Z_a$. Поэтому из равенства (10.1) следует, что произведение элементов из G_a лежит в G_a, т. е. что G_a — группа. Равенство (10.3) дает выражение для обратного элемента g_0^{-1} при $g_0 = t_{\omega_0}\beta_0$, а равенство (10.2) показывает, что наряду с произведениями $t_n\beta$ группа G_a содержит и произведения $\beta_0 t_{\omega_0}$ при $\forall\,\beta_0 \in K_a$, $\omega_0 \in Z_a$. Во всех этих рассуждениях мы пользовались тем фактом, что $\beta n \in Z_a$ при $\forall\,\beta \in K_a$ и $\forall\, n \in Z_a$, т. е. что любые трансляции из τ_a можно сочетать с любыми точечными преобразованиями из K_a.

Вопрос. Верно ли равенство $G_a = \tau_a \times K_a$?

п.2. Принципиально иная по сравнению с п.1 ситуация возникает при изучении симметрии кристалла с включениями. Обозначим через Z решетку кристалла с включениями и через G — группу его симметрии. В этом случае возможна ситуация, когда при $\gamma \in K_a$ и некотором $d \in R^3$ выполняется $t_d \gamma Z = Z$, но $\gamma Z \neq Z$ и $t_d Z \neq Z$. Другими словами трансляция t_d на вектор d и точечное преобразование γ по отдельности не являются преобразованиями симметрии кристалла Z ($t_d \notin G$, $\gamma \notin G$), а их произведение — является ($t_d\gamma \in G$).

Примером кристалла, в котором имеет место описанная ситуация, является кристалл алмаза. Чтобы построить его решетку, возьмем кубическую решетку, в узлах которой находятся атомы углерода, поместим в центр каждой грани атом углерода и затем сдвинем полученную решетку в направлении главной диагонали куба на 1/4 её длины. Полученная таким образом решетка Z и есть решетка алмаза. Полное исследование симметрии Z весьма громоздко (с ним можно ознакомиться, например, в [4]), а здесь мы проследим лишь за несколькими узлами решетки Z, расположенными на главной диагонали (рис. 10.1).

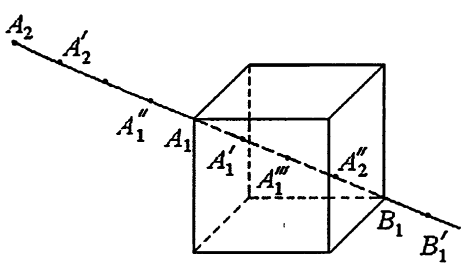

Рис. 10.1

Пусть A_2, A_1, B_1 — вершины кубов, последовательно расположенные на главной диагонали одного из кубов, $\ell = A_1 B_1$. После сдвига $t_{\frac{\ell}{4}}$ появились узлы A_2', A_1', B_1' (входящие в Z) такие, что $A_2A_2' = A_1A_1' = B_1B_1' = \dfrac{\ell}{4}$. Рассмотрим теперь два преобразования: трансляцию $t_{\frac{\ell}{4}}$ и инверсию i относительно узла A_1. Каждое из этих преобразований не переводит Z в Z. Действительно, например $iA_1' = A_1'' \notin Z$, $t_{\frac{\ell}{4}}A_1' = A_1''' \notin Z$, и, значит, $i \notin G$, $t_{\frac{\ell}{4}} \notin G$.

Рассмотрим теперь преобразование $g = t_{\frac{\ell}{4}}\, i$. Имеем

$$gA_2 = t_{\frac{\ell}{4}}\, iA_2 = t_{\frac{\ell}{4}}B_1 = B_1' \in Z,\ \ gA_2' = t_{\frac{\ell}{4}}A_2'' = B_1 \in Z,$$
$$gA_1 = A_1' \in Z,\ \ gA_1' = A_1 \in Z,\ \ gB_1 = A_2' \in Z,\ \ gB_1' = A_2 \in Z$$

и т. д. Таким образом преобразование $g = t_{\frac{\ell}{4}}i$ переводит рассмотренные нами узлы решетки алмаза в узлы этой же решетки. Можно доказать (см. [4]), что ситуация с любыми другими узлами аналогична, т. е. что $t_{\frac{\ell}{4}}iZ = Z$, несмотря на то, что $iZ \neq Z$, $t_{\frac{\ell}{4}}Z \neq Z$.

п.3. Рассмотренный пример показывает, что определение группы симметрии G кристалла с включениями не может быть таким же, как определение группы симметрии G_a кристалла без включений, где любые трансляции можно было комбинировать с любыми точечными преобразованиями. Чтобы дать новое определение, в первую очередь вместо точечной группы K_a ("работавшей" в кристалле без включений) введем в рассмотрение её подгруппу F, учитывающую возможные включения:

$$F = \left\{\beta \mid \beta \in K_a,\ \exists (n+d) \ \text{ так, что } \ t_{n+d}\beta Z = Z\right\}.$$

Здесь и далее через d мы обозначаем вектора, не являющиеся векторами решетки Браве Z_a, или нуль-вектор, а трансляцию t_{n+d} на вектор $(n+d) \notin Z_a$ назовем несобственной. Таким образом F — это множество таких преобразований из K_a, для каждого из которых найдется такая трансляция t_{n+d} (возможно, несобственная), что преобразование $t_{n+d}\beta$ переводит кристалл Z в себя. Покажем, что F — подгруппа группы K_a. Для этого достаточно установить, что произведение $\beta\beta' \in F$ при $\forall\, \beta$, $\beta' \in F$.

Так как $\beta, \beta' \in F$, то $\exists(n+d)$ и $(n'+d')$ так, что для элементов $g = t_{n+d}\beta$, $g' = t_{n'+d'}\beta'$ выполняется $gZ = Z$, $g'Z = Z$. Пусть $g'' = gg'$. Тогда, очевидно, $g''Z = gg'Z = gZ = Z$. В силу (10.1) с $\omega_1 = n+d$, $\beta_1 = \beta$, $\omega_2 = n'+d'$, $\beta_2 = \beta'$ имеем

$$g'' = t_{n''+d''}\beta'', \tag{10.4}$$

где $\beta'' = \beta\beta'$, $n'' = \beta n' + n \in Z_a$, $d'' = \beta d' + d$. Так как $g''Z = Z$, то мы получили, что для вращения $\beta'' = \beta\beta'$ нашелся такой сдвиг $n'' + d''$, что $t_{n''+d''}\beta''Z = Z$. Значит, $\beta'' = \beta\beta' \in F$, т. е. F — группа. Далее полезно заметить, что для элемента $g = t_{n+d}\beta$ в силу (10.3) с $\omega_0 = n+d$, $\beta_0 = \beta$ выполняется

$$(t_{n+d}\beta)^{-1} = t_{\hat{n}+\hat{d}}\beta^{-1}, \tag{10.5}$$

где $\hat{n} = -\beta^{-1}n \in Z_a$, $\hat{d} = -\beta^{-1}d$.

Разные группы F при одной и той же группе K_a определяют классификацию кристаллов по симметрии в зависимости от включений внутри одной и той же сингонии.

Теперь мы можем определить группу G пространственной симметрии кристалла с включениями. Положим

$$G = \{g \mid g = t_{n+d}\beta,\ \ \beta \in F,\ \ gZ = Z\}.$$

В силу (10.4) произведение $g'' = gg' \in G$ при $\forall\, g, g' \subseteq G$. Поэтому G — группа. Представления группы G мы начнем изучать в § 10.2. А здесь мы сделаем только два замечания, описывающих некоторые отличия групп G и G_a.

1. При $t_n\beta \in G_a$ выполняется $\beta t_n \in G_a$. При $t_{n+d}\beta \in G$ включение $\beta t_{n+d} \in G$ может не выполняться. Действительно, в силу (10.2) с $\beta_0 = \beta$, $\omega_0 = n+d$, мы имеем $g_0 := \beta t_{n+d} = t_{\beta n + \beta d}\beta$ и g_0 может не принадлежать G, что видно и из примера п. 2.

2. Пусть $g \to T_g$ — произвольное представление группы G. Тогда если $g = t_n\beta \in G$, то $\beta \in G$ (почему?) и $T_g = T_{t_n}T_\beta$. Однако при $g = t_{n+d}\beta \in G$ аналогичное равенство $T_g = T_{t_{n+d}}T_\beta$ в общем случае невозможно, ибо в общем случае $t_{n+d} \notin G$, $\beta \notin G$ и тогда операторы $T_{t_{n+d}}$ и T_β просто не определены.

§ 10.2. Разбиение пространства неприводимого представления пространственной группы. Звезда вектора k.

п.1. Пусть задан кристалл Z и группа его пространственной симметрии

$$G = \{g \mid g = t_{n+d}\beta, \ \ \beta \in F, \ \ gZ = Z\}.$$

Рассмотрим неприводимое представление $g \to T_g$ группы G операторами T_g, действующими в каком-либо конечномерном пространстве L. Так как $\tau_a = \{t_n \mid t_n Z = Z\} \subset G$, то мы можем рассмотреть представление $g \to T_g$ в L при $g = t_n \in \tau_a$, т. е. можно сузить рассматриваемое представление с группы G на её подгруппу τ_a. Разумеется, полученное при этом представление $t_n \to T(n), t_n \in \tau_a$, может оказаться приводимым в L. С помощью проекторов $P^{(k)}$ (см. Замечание к п.9.4.2) разобьем пространство представления L в сумму подпространств $L_k = P^{(k)}L$:

$$L = \sum_k \oplus L_k, \tag{10.6}$$

в каждом из которых представление $t_n \to T(n)$ имеет тип k, то есть при $q_k \in L_k$ выполняется $T(n)q_k = e^{i(k,n)}q_k$. Далее фиксируем какое-либо значение k. Пусть $g = t_{n+d}\beta \in G$, $q' = T_g q_k$, где $q_k \in L_k$. Ясно, что $q' \in L$. Выясним тип трансляционной симметрии вектора q'. Пусть $n_0 \in Z_a$. Вычислим $T(n_0)q' = T(n_0)T_g q_k$. Для этого заметим, что в силу (10.2)

$$t_{n_0}t_{n+d}\beta = t_{n+d}t_{n_0}\beta = t_{n+d}\beta t_{\beta^{-1}n_0},$$

то есть

$$t_{n_0}g = g t_{\beta^{-1}n_0}, \tag{10.7}$$

где $\beta^{-1}n_0 \in Z_a$. Так как представление есть гомоморфизм, то из (10.7) следует, что

$$T(n_0)T_g = T_g T(\beta^{-1}n_0). \tag{10.8}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} T(n_0)q' &= T(n_0)T_g q_k = T_g T(\beta^{-1}n_0)q_k = T_g e^{i(k,\beta^{-1}n_0)}q_k = \\ &= e^{i(\beta k,n_0)}q'. \end{aligned}$$

Следовательно, вектор q' из L обладает трансляционной симметрией типа βk. Значит, в разложении (10.6) должно присутствовать пространство $L_{\beta k}$, и мы можем сказать, что $T_g q_k \in L_{\beta k}$, или что

$$T_g L_k \subseteq L_{\beta k}. \tag{10.9}$$

Покажем, что на самом деле $T_g L_k = L_{\beta k}$. Действительно, взяв произвольный вектор $q_{\beta k} \in L_{\beta k}$ и применив к нему оператор $T_{g^{-1}}$ мы получим, что $T_{g^{-1}} q_{\beta k} \subseteq L_k$, или что

$$T_{g^{-1}} L_{\beta k} \subseteq L_k. \tag{10.10}$$

Так как операторы T_g и $T_{g^{-1}}$ — унитарны, то в силу (10.9), (10.10)

$$\dim L_k = \dim T_g L_k \leq \dim L_{\beta k}$$

и

$$\dim L_{\beta k} = \dim T_{g^{-1}} L_{\beta k} \leq \dim L_k.$$

Значит, $\dim L_k = \dim L_{\beta k}$ и поэтому $T_g L_k = L_{\beta k}$.

Из приведенных рассуждений следуют два заключения.

1. Если пространство L_k входит в сумму (10.6), то в эту же сумму входят все пространства $L_{\beta k}$, $\beta \in F$;

2. Все пространства $L_{\beta k}$ имеют одинаковую размерность и получаются из L_k применение операторов T_g при $g = t_{n+d}\beta$, $\beta \in F$.

п.2. Рассмотрим множество векторов $\{\beta_s k \mid \beta_s \in F,\ s = 1, 2, \ldots, |F|\}$, где $|F|$ — число элементов группы F. Будем считать элементы группы F занумерованными так, что для некоторого m вектора $k_j = \beta_j k$, $j = 1, 2, \ldots, m$, различны, а каждый из векторов $k_s = \beta_s k$ при $s > m$ совпадает с одним из векторов $k_1, \ldots, k_m$[2)]. Обычно в качестве β_1 берут единичный элемент, так что $k_1 = k$ и поэтому $k_j = \beta_j k_1$, $j = 1, 2, \ldots, m$. Множество $\text{З}(k) := \{k_1, k_2, \ldots, k_m\}$ называется звездой вектора k, а число m — порядком звезды.

Задание. Доказать, что если $k_j \in \text{З}(k)$, то $k \in \text{З}(k_j)$.

Так как в разложении (10.6) наряду с пространством L_k входят все пространства $L_{\beta_j k}$, $j = 2, \ldots, m$, то мы можем сказать, что каждый вектор k входит в (10.6) вместе со своей звездой. Однако пока нельзя утверждать, что

$$L = \sum_{i=1}^{m} \oplus L_{k_i},$$

ибо пока не исключен случай

$$L = \sum_{i=1}^{m} \oplus L_{k_i} + \sum_{\tilde{k},\, \tilde{k} \notin \text{З}(k)} \oplus L_{\tilde{k}},$$

где $\tilde{k} \notin \text{З}(k)$ означает, что $\tilde{k} \neq k_j$, $j = 1, 2, \ldots, m$.

п.3. Лемма. *Имеет место равенство*

$$L = \sum_{i=1}^{m} \oplus L_{k_i}. \tag{10.11}$$

[2)] Напомним (см. §9.3), что равенство векторов $k = \tilde{k}$ означает, что $\exists\, \ell$, $\ell \in Z_b$ так, что $k - \tilde{k} = 2\pi\ell$. Соответственно, неравенство $k \neq \tilde{k}$ значит, что $k - \tilde{k} \neq 2\pi\ell$ ни для каких ℓ из Z_b.

Доказательство. Пусть

$$\hat{L} := \sum_{i=1}^{m} \oplus L_{k_i} . \tag{10.12}$$

Ясно, что $\hat{L} \subseteq L$. Покажем, что $\hat{L} = L$. Для этого установим сначала включение $T_g L_{k_i} \subseteq \hat{L}$ при $\forall\, g \in G$, $i = 1, \ldots, m$. Пусть $g = t_{n+d}\beta$. По доказанному, $T_g L_{k_i} = L_{\beta\beta_i k_1}$. Пусть $\beta' = \beta\beta_i$. По определению звезды $З(k)$, $\beta' k_1 \in З(k_1)$ и значит $\exists s$, $1 \le s \le m$ так, что $T_g L_{k_i} = L_{k_s}$. Поэтому и в силу (10.12) $T_g L_{k_i} \subseteq \hat{L}$ и, значит, подпространство $\hat{L} \subseteq L$ инвариантно для операторов T_g. А так как представление $g \to T_g$ неприводимо в L, то $\hat{L} = L$.

Таким образом, мы доказали, что при сужении неприводимого представления $g \to T_g$, $g \in G$, в пространстве L с группы G на группу τ_a, пространство L разбивается в прямую сумму подпространств L_{k_i}, отвечающих звезде вектора k, и что в каждом из этих подпространств представление $t_n \to T(n)$ кратно неприводимому представлению типа k_i. Отметим, что в качестве исходного вектора k можно было взять любой из векторов k', для которых $P^{(k')}L \neq \{\theta\}$, т. е. любой из векторов k, для которого пространство L_k входит в разложение (10.6).

§ 10.3. Группа вектора k. Малые представления

п.1. Пусть

$$H_k = \{g \mid g \in G,\ \ g = t_{n+d}\beta,\ \ \beta \in F,\ \ \beta k = k\}.$$

Множество H_k является подгруппой G, так как для любых $g = t_{n+d}\beta \in H_k$, $g' = t_{n'+d'}\beta' \in H_k$ произведение $gg' \in H_k$, ибо в силу (10.1) $gg' = t_{\tilde{n}+\tilde{d}}\beta\beta'$, где $\beta\beta' k = \beta k = k$, а через $\tilde{n}$ и $\tilde{d}$ здесь и далее обозначаются вектора собственного и несобственного (при

$\tilde{d} \neq 0$) сдвигов, если их конкретные значения для нас не важны. Группа H_k называется группой вектора k. Она определяется выбранным вектором k и группой F.

Введем группу

$$F_k = \{\beta \mid \beta \in F,\ \ \beta k = k\}.$$

Ясно, что F_k — подгруппа F, и что

$$H_k = \{g \mid g \in G,\ \ g = t_{n+d}\beta,\ \ \beta \in F_k\}.$$

Группа H_k формально никак не связана с представлениями группы G. Однако на самом деле такая связь имеется. Пусть $g \to T_g$ — представление группы G, определенное в § 10.2, вектор k такой, что $P^{(k)}L \neq \{\theta\}$ и

$$H'_k = \{g \mid g \in G,\ \ T_g L_k = L_k\}.$$

Тогда $H'_k = H_k$. (Докажите это!)

п.2. Изучим некоторые свойства группы H_k. Разложим группу G на левые смежные классы по группе H_k:

$$G = \sum_{i=1}^{n'} g'_i H_k, \tag{10.13}$$

где $g'_i = t_{n(i)+d(i)}\beta'_i$ — некоторые элементы из G. Выбор этих элементов не однозначен (почему?). Поэтому мы для определенности фиксируем какой-либо набор g'_i, где $g'_1 = e_0$, а остальные g'_i, $i \geq 2$, — произвольны.

Лемма 1. *Множество* $З'(k) = \{k'_i \mid k'_i = \beta'_i k,\ \ i = 1, 2, \ldots, m'\}$ *совпадает со звездой вектора* k.

Доказательство. Чтобы получить звезду $З(k)$ вектора k нам надо рассмотреть вектора βk для всех $\beta \in F$ и выбрать из них различные. А чтобы получить все β из F достаточно перебрать все элементы g из G. В силу (10.13) любой элемент $g \in G$ имеет вид $g = g'_i g_0$, где $g_0 \in H_k$ и элементы g_0 и g'_i зависят от g.

Пусть $g_0 = t_{n_0+d_0}\beta_0$. Тогда $g = t_{\tilde{n}+\tilde{d}}\beta'_i\beta_0$, где $\beta_0 \in F_k$. Это значит, что

$$F = \{\beta \mid \beta = \beta'_i\beta_0,\ i = 1, 2, \dots, m';\ \beta_0 \in F_k\}. \tag{10.14}$$

Поскольку $\beta_0 k = k$, то в силу (10.14) $З(k) \subseteq З'(k)$, и нам остается показать только, что все элементы $З'(k)$ — различны. Докажем это от противного. Предположим, что $\exists\, i, j$, для которых $\beta'_i k = \beta'_j k$, т. е. $k = \beta'^{-1}_i \beta'_j k$ и, значит, $\beta'^{-1}_i \beta'_j \in F_k$. Поскольку $g'^{-1}_i g'_j = t_{\tilde{n}+\tilde{d}}\beta'^{-1}_i \beta'_j$, то $g'_0 := g'^{-1}_i g'_j \in H_k$. Значит $g'_j = g'_i g'_0$ и поэтому в силу Леммы о сдвиге [1], примененной к группе H_k, классы $g'_i H_k$ и $g'_j H_k$ совпадают, что невозможно. Следовательно, $\beta'_i k \neq \beta'_j k$ при $i \neq j$ и $З'(k) = З(k)$.

Следствие. Порядок m звезды вектора k равен $m' = |G|/|H_k|$.

Отметим, что хотя вектора из $З(k)$ определены однозначно (с точностью до нумерации), вращения β_i в равенстве $k_i = \beta_i k$ при фиксированном i определены лишь с точностью до произвольного множителя $\beta_0 \in F_k$ (т. е. вместо β_i можно взять $\beta_i\beta_0$). Для определенности считаем далее, что при построении $З(k)$ мы взяли $\beta_i = \beta'_i$, причем $\beta_1 = \beta'_1 = e_0$ — единичный элемент группы F. Далее штрихи у β'_i и у элементов g'_i в (10.13) опускаем и записываем (10.13) в виде

$$G = \sum_{i=1}^{m} g_i H_k. \tag{10.15}$$

Вопрос. Пусть элементы $\bar{g}_i = t_{\bar{n}(i)+\bar{d}(i)}\bar{\beta}_i$, $i = 1, 2, \dots, m$, из G таковы, что вектора $\bar{k}_i = \bar{\beta}_i k$, $i = 1, 2, \dots, m$, образуют $З(k)$. Будет ли верно разложение $G = \sum\limits_{i=1}^{m} \bar{g}_i H_k$? Ответ обосновать.

п.3. Представление $g \to T_g$ группы H_k в произвольном пространстве R назовем нормальным, если при $g = t_n \in \tau_a$ для любого вектора $q \in R$ выполняется $T_g q = T(n)q = e^{i(k,n)}q$, т. е.

если матрица $d(n) = \|T(n)\|$ оператора $T(n)$ в R имеет вид:

$$d(n) = \begin{pmatrix} e^{i(k,n)} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{i(k,n)} \end{pmatrix} = e^{i(k,n)}\, E_\mu, \quad \forall\, n \in Z_a,$$

где E_μ — единичная матрица размерности μ, $\mu = \dim R$. Другими словами представление группы H_k в пространстве R нормальное, если все вектора из R имеют трансляционную симметрию k. Нормальное представление группы H_k называется малым; иначе говоря, малое представление — это представление группы H_k в пространстве трансляционной симметрии k.

Рассмотрим произвольное представление $g \to T_g$ группы G в пространстве L. Тогда при $g \in H_k$ мы получим в пространстве $L_k = P^{(k)}L$ малое представление $g \to T_g$, порождаемое представлением пространственной группы G в L. Далее для краткости мы иногда будем называть представление группы G в L большим.

Лемма 2. *Если большое представление неприводимо, то порождаемое им в пространстве L_k малое представление группы H_k тоже неприводимо.*

Доказательство проведем от противного. Пусть $g \to T_g$ — неприводимое представление группы G в пространстве L. Предположим, что порожденное им представление $g \to T_g$ группы H_k в пространстве L_k приводимо, и обозначим через $\hat{L}_k$ подпространство L_k, инвариантное для операторов T_g, $g \in H_k$. Положим $\hat{L}_{k_i} = T_{g_i}\hat{L}_k$, где элементы g_i взяты из (10.15), и докажем, что пространство

$$\hat{L} = \sum_{i=1}^{m} \oplus \hat{L}_{k_i} \tag{10.16}$$

инвариантно для операторов T_g, $g \in G$. Имеем

$$T_g\hat{L}_{k_i} = T_gT_{g_i}\hat{L}_{k_1} = T_{gg_i}\hat{L}_{k_1}. \tag{10.17}$$

В силу (10.15) $gg_i = g_jg_0$ для некоторых j, $1 \le j \le m$, и $g_0 \in H_k$, зависящих от g_i и g. Поэтому

$$T_{gg_i}\hat{L}_{k_1} = T_{g_j g_0}\hat{L}_{k_1} = T_{g_j}T_{g_0}\hat{L}_{k_1} = T_{g_j}\hat{L}_{k_1} = \hat{L}_{k_j}. \tag{10.18}$$

Здесь использовано сделанное предположение об инвариантности подпространства $\hat{L}_k$ для операторов T_{g_0}, $g_0 \in H_k$. В силу (10.17) и (10.18) оператор T_g переводит каждое подпространство $\hat{L}_{k_i}$ в одно из подпространства $\hat{L}_{k_j}$, $1 \leq j \leq n$, где номер j зависит от i и от элемента g. Поэтому действие оператора T_g на пространство $\hat{L}$ выражается лишь в перестановке слагаемых в прямой сумме (10.16) и, значит, $\hat{L}$ инвариантно для T_g. Но представление $g \to T_g$, $g \in G$, неприводимо в L и поэтому или $\hat{L} = \{\theta\}$ или $\hat{L} = L$. Но оба равенства невозможны: первое — так как $\hat{L} \supset \hat{L}_k \neq \{\theta\}$, второе — так как $\dim \hat{L} = m \dim \hat{L}_k < m \dim L_k = \dim L$. Следовательно, рассматриваемое малое представление неприводимо.

11. Построение представлений пространственной группы

И куда ступила наша нога,
Оттуда мы не уйдем

Р. Киплинг

§ 11.1. Восстановление "большого" представления по известному малому

п.1. Малые представления играют основную роль в классификации больших представлений и в их построении. В настоящем параграфе мы докажем, что зная неприводимое представление группы H_k, порожденное некоторым неприводимым представлением $g \to T_g$ группы G, и зная звезду вектора k, мы можем восстановить представление $g \to T_g$, $g \in G$. Другими словами, мы докажем, что большое представление определяется малым (разумеется, с точностью до эквивалентного).

Итак, пусть нам задано неприводимое представление группы H_k в пространстве L_k, порожденное неприводимым представлением $g \to T_g$, $g \in G$, в пространстве L, т. е. нам заданы операторы T_g, $g \in H_k$, в пространстве L_k и пространство L. Выберем в L_k произвольный ортонормированный базис $e_1^{(1)}, \ldots, e_\mu^{(1)}$ и найдем матрицы $d(g)$ операторов представления T_g, $g \in H_k$, в пространстве L_k в этом базисе. После этого разложим пространство L в сумму (10.6) (мы можем это сделать не зная представления $g \to \to T_g$, $g \in G$, а используя только проекторы $P^{(k)}$ и знание звезды вектора k) и выберем абсолютно произвольно ортонормированные базисы $e_1^{(j)}, \ldots, e_\mu^{(j)}$ в пространствах L_{k_j}, $j = 2, 3, \ldots, m$, где $m = |З(k)|$. Вектора $e = \left(e_1^{(1)}, \ldots, e_\mu^{(1)}, \ldots, e_1^{(m)}, \ldots, e_\mu^{(m)}\right)$ образуют базис в пространстве L. Далее разложим группу G согласно (10.15) и введем в L еще один базис $\bar{e} = \left\{\bar{e}_i^{(j)},\ i = 1, 2, \ldots, \mu,\ j = = 1, 2, \ldots, m\right\}$, состоящий из (ортонормированных) векторов $\bar{e}_i^{(j)} = T_{g_j} e_i^{(1)}$, $i = 1, 2, \ldots, \mu$, $j = 1, \ldots, m$, где $\bar{e}_i^{(1)} = e_i^{(1)}$ (ибо $T_{g_1} = T_{e_0}$ — тождественный оператор). Отметим, что вектора $\bar{e}_i^{(j)}$ при $j \geq 2$ нам неизвестны, ибо при $j \geq 2$ не известны операторы T_{g_j}. Обозначим через P оператор перехода от базиса e к базису $\bar{e}$.

Отметим, что матрица $\|P\|$ имеет блочно-диагональный вид, где блоки суть квадратные матрицы $\|P_j\|$, $j = 1, 2, \ldots, m$, размерности μ операторов перехода P_j от $e_i^{(j)}$ к $\bar{e}_i^{(j)}$, $i = 1, 2, \ldots, \mu$:

$$\bar{e}_i^{(j)} = P_j e_i^{(j)} = P e_i^{(j)}. \tag{11.1}$$

Пусть $T'_g = P^{-1} T_g P$. Представление $g \to T'_g$ эквивалентно представлению $g \to T_g$.

п.2. Покажем, что операторы T'_g можно найти, зная только малое представление (и не зная операторов P). Имеем

$$T'_g\, e_i^{(j)} = P^{-1} T_g P\, e_i^{(j)} = P^{-1} T_g\, \bar{e}_i^{(j)}. \tag{11.2}$$

Далее

$$T_g\, \bar{e}_i^{(j)} = T_g T_{g_j}\, \bar{e}_i^{(1)} = T_{g g_j}\, e_i^{(1)}.$$

В силу (10.15) для каких-то g_s и $g_0 \in H_k$ выполняется $gg_j = g_s g_0$. Поэтому

$$T_g\, \bar{e}_i^{(j)} = T_{g_s g_0}\, e_i^{(1)} = T_{g_s} T_{g_0}\, e_i^{(1)} = T_{g_s} \sum_{p=1}^{\mu} d(g_0)_{pi}\, e_p^{(1)} =$$

$$= \sum_{p=1}^{\mu} d(g_0)_{pi}\, \bar{e}_p^{(s)}.$$

Подставляя выражение $T_g\, \bar{e}_i^{(j)}$ в (11.2) и учитывая (11.1), получим

$$T_g'\, e_i^{(j)} = \sum_{p=1}^{\mu} d(g_0)_{pi}\, e_p^{(s)}. \tag{11.3}$$

Равенство (11.3) выражает матричные элементы оператора T_g' в базисе e через известные матричные элементы $d(g_0)_{pi}$ матрицы малого представления. Отметим, что как видно из (11.3), матрица $\|T_g'\|$ не зависит от P. Таким образом, мы построили представление $g \to T_g'$ эквивалентное исходному представлению $g \to T_g$, используя только 1) знание представления группы вектора k (т. е. знание операторов T_g при $g \in H_k$ в пространстве L_k) и 2) знание звезды вектора k.

п.3. Покажем, что большое представление определяется малым однозначно. Действительно, пусть $g \to \tilde{T}_g$, $g \in G$, — какое-либо представление группы G, для которого в пространстве L_k выполняется $\tilde{T}_g = T_g$, $g \in H_k$. Покажем, что $T_g \sim \tilde{T}_g$, $g \in G$. Пусть базис e — тот же, что в п.1, а базис $\tilde{e} = \left\{\tilde{e}_i^{(j)},\ i = 1, \ldots, \mu,\ s = 1, 2, \ldots, m\right\}$ состоит из векторов $\tilde{e}_i^{(j)} = \tilde{T}_{g_j}\, e_i^{(1)}$. Обозначим через $\tilde{P}$ оператор перехода от базиса e к базису $\tilde{e}$: $\tilde{e}_i^{(j)} = \tilde{P} e_i^{(j)}$ и положим $T_g'' = \tilde{P}^{-1} \tilde{T}_g \tilde{P}$. Тогда в силу рассуждений п.2 (см. (11.3)) мы получим, что

$$T_g''\, e_i^{(j)} = T_g'\, e_i^{(j)}, \quad \forall\, i, j.$$

Следовательно, $T'_g \equiv T''_g \sim \tilde{T}_g$. Но $T'_g \sim T_g$ и, значит, представления $g \to T_g$ и $g \to \tilde{T}_g$ эквивалентны.

п.4. Вернемся теперь к соотношению (11.3) и обсудим вид матриц $D'_g = \|T'_g\|_e$. Разобьем D'_g на суперстроки и суперстолбцы так, что суперстолбец (суперстрока) с номером t состоит из μ столбцов (строк) с номерами $(t-1)\mu + t'$, $t' = 1, 2, \ldots, \mu$, $t = 1, 2, \ldots, m$. Тогда в силу (11.3) на пересечении j-го суперстолбца и s-й суперстроки будет находиться матрица коэффициентов разложения векторов $T'_g e_i^{(j)}$, $i = 1, 2, \ldots, \mu$, по векторам $e_p^{(s)}$, $p = 1, 2, \ldots, \mu$. Далее, в силу (11.3) в j-м суперстолбце матрицы D'_g не нулевым будет только блок, расположенный в s-й суперстроке, и этот блок совпадает с матрицей $d(g_0)$ малого представления; здесь номер суперстроки s и элемент g_0 из H_k определяются из справедливого в силу (10.15) равенства

$$gg_j = g_s g_0. \tag{11.4}$$

При этом в каждой суперстроке матрицы D'_g будет только один ненулевой блок. Действительно, общее число не нулевых блоков матрицы D'_g равно m (в каждом суперстолбце по одному). Поэтому если в одной из m суперстрок окажется не менее двух не нулевых блоков, то в какой-то другой суперстроке все блоки будут нулевыми и тогда $\det D'_g = 0$, что невозможно, ибо $\det D'_g = \det \|T_g\| \neq 0$.

В заключение полезно заметить, что при заданных представлении $g \to T_g$ и базисе $\bar{e}_i^{(s)} = T_{g_s} e_i^{(1)}$ матрица P в (11.1) определяется выбором базиса $e_i^{(s)}$. Этот выбор — произволен, но после того, как он сделан, мы получаем, что

$$T'_{g_s} e_i^{(1)} = e_i^{(s)}.$$

Это следует из (11.2) и (11.4) (проверить самостоятельно).

Задание. Вместо разложения (10.15) рассмотрим разложение

$$G = \sum_{i=1}^{m} \hat{g}_i H_k,$$

где $\hat{g}_i \in g_i H_k$, $\hat{g}_1 = e_0$. Далее вводим базисы e как и в п.1 и $\hat{e} = \{\hat{e}_i^{(j)}$, $i = 1, \ldots, \mu$, $j = 1, \ldots, m\}$, где $\hat{e}_i^{(j)} = T_{\hat{g}_j} e_i^1$. После этого построим представление $g \to \hat{T}_g$ аналогично представлению $g \to T'_g$. Найти связь между операторами T'_g и $\hat{T}_g$.

§ 11.2. Построение представлений пространственной группы

п.1. В § 11.1 мы восстановили — с точностью до эквивалентного — представление группы G по тому представлению группы H_k в пространстве L_k, которое порождается представлением группы G в пространстве L. Здесь мы рассмотрим близкую, но другую задачу. Фиксируем значение k из зоны Бриллюэна, построим группу H_k и зададим любое нормальное неприводимое представление H_k. Вопрос: существует ли такое неприводимое представление группы G, которое при сужении его на группу H_k совпадает с заданным малым представлением? Ответ — положительный — будет получен ниже и этот ответ позволяет классифицировать и строить большие представления с помощью малых.

Теорема. *Пусть $k = k_1$ — произвольный волновой вектор, $g \to T_g^0$ — нормальное неприводимое представление группы H_k в пространстве L_k. Тогда существует единственное (с точностью до эквивалентного) неприводимое представление $g \to T_g$, группы G в некотором пространстве $L \supseteq L_k$, для которого при $g \in H_k$ выполняется $T_g = T_g^0$ в L_k.*

Замечание. В условии теоремы говорится об операторном задании малого представления, однако это не является ограничением. Если малое представление было задано в матричной форме

$g \to d(g)$, $g \in H_k$ и $\mu = \dim d(g)$, то мы легко можем перейти к операторному представлению. Для этого достаточно взять произвольное линейное пространство L_k размерности μ, выбрать в нем ортонормированный базис $e_1^{(1)}, \dots, e_\mu^{(1)}$ и определить операторы T_g^0 в пространстве L_k соотношениями:

$$T_g^0 e_i^{(1)} := \sum_{j=1}^{\mu} d(g)_{ji} e_j^{(1)}, \quad g \in H_k.$$

Так мы получим представление $g \to T_g^0$ группы H_k *операторами* T_g^0 в L_k.

п.2. Доказательство теоремы. Единственность соответствующего представления — если оно существует — следует из § 11.1. Поэтому мы докажем только его существование и неприводимость.

Пусть $m = |G|/|H_k|$ — порядок звезды вектора k_1, $\mu = \dim L_{k_1}$. Рассмотрим $(m-1)$ экземпляров μ-мерных линейных пространств, которые обозначим L_{k_i}, $i = 2, 3, \dots, m$, и в каждом из них, и в L_{k_1} выберем ортонормированные базисы $e_1^{(i)}, \dots, e_\mu^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, \mu$. В качестве пространства представления группы G возьмем $L = \sum_{i=1}^{m} \oplus L_{k_i}$. Вектора $e_1^{(i)}, \dots, e_\mu^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, m$ образуют базис в L. Воспользовавшись разложением (10.15) находим элементы g_i, $i = 1, 2, \dots, m$ и определяем операторы T_{g_s} равенствами:

$$T_{g_s} e_j^{(1)} := e_j^{(s)}, \quad j = 1, 2, \dots, \mu, \quad s = 1, 2, \dots, m. \tag{11.5}$$

Далее определяем оператор T_g для $\forall\, g \in G$ на произвольном базисном элементе $e_j^{(s)}$, действуя аналогично § 11.1. А именно:

$$T_g e_j^{(s)} = T_g T_{g_s} e_j^{(1)} := T_{g g_s} e_j^{(1)}. \tag{11.6}$$

Подчеркнем, что в отличие от § 11.1 мы не можем здесь записать $T_g T_{g_s} e_j^{(1)} = T_{g g_s} e_j^{(1)}$, ибо в § 11.1 мы знали, что операторы

T'_g, $g \in G$, образуют представление, а об определяемых здесь операторах T_g, $g \in G$, мы заранее этого не знаем. Поэтому равенство (11.6) является (естественным) определением значения $T_g T_{g_s} e_j^{(1)}$ (через $T_{gg_s} e_j^{(1)}$). Далее из (10.15) следует, что для некоторого t и элемента $g_{0s} \in H_k$

$$gg_s = g_t g_{0s} \tag{11.7}$$

и мы полагаем

$$T_{g_t g_{0s}} e_j^{(1)} := T_{g_t} T_{g_{0s}} e_j^{(1)}, \tag{11.8}$$

ибо мы хотим, чтобы операторы T_h, $h \in G$, образовывали представление группы G. В силу (11.5)–(11.8) получаем

$$T_g e_j^{(s)} = T_{g_t} T_{g_{0s}} e_j^{(1)} = T_{g_t} \sum_{i=1}^{\mu} d(g_{0s})_{is} e_i^{(1)} = \sum_{i=1}^{\mu} d(g_{0s})_{is} e_i^{(t)}, \tag{11.9}$$

где $g_t g_{0s} = gg_s$. Именно равенство (11.9) является определением значения $T_g e_j^{(s)}$, а соотношения (11.6)–(11.8) лишь объясняют, почему определение именно таково.

п.3. Докажем, что определенные равенством (11.9) операторы T_g действительно образуют представление группы G. Пусть g', $f' \in G$. Нам достаточно проверить равенство

$$T_{g'f'} e_p^{(s)} = T_{g'} T_{f'} e_p^{(s)}, \quad p = 1, 2, \ldots, \mu, \quad s = 1, 2, \ldots, m. \tag{11.10}$$

В силу (11.9)

$$T_{g'f'} e_p^{(s)} = T_{g_i} T_{\tilde{g}_{0i}} e_p^{(1)} = \sum_{p'=1}^{\mu} d(\tilde{g}_{0i})_{p'p} e_{p'}^{(i)}, \tag{11.11}$$

где

$$g'f'g_s = g_i \tilde{g}_{0i}, \quad \tilde{g}_{0i} \in H_k. \tag{11.12}$$

Теперь вычислим правую часть (11.10). Имеем

$$T_{f'} e_p^{(s)} = T_{g_j} T_{g_{0j}} e_p^{(1)} = \sum_{p'=1}^{\mu} d(g_{0j})_{p'p} e_{p'}^{(j)}, \tag{11.13}$$

где

$$f'g_s = g_j g_{0j}, \quad g_{0j} \in H_k. \tag{11.14}$$

Применим к обеим частям (11.13) оператор $T_{g'}$. Тогда в силу (11.9) получим

$$T_{g'}T_{f'}\,e_p^{(s)} = \sum_{p'=1}^{\mu} d(g_{0j})_{p'p}\,T_{g'}\,e_{p'}^{(j)} = \sum_{p'=1}^{\mu} d(g_{0j})_{p'p} \sum_{s'=1}^{\mu} d(g_{0t})_{s'p'}\,e_{s'}^{(t)}, \tag{11.15}$$

где

$$g'g_j = g_t g_{0t}, \quad g_{0t} \in H_k. \tag{11.16}$$

Умножим (11.14) слева на g'. Тогда с учетом (11.16) мы получим

$$g'f'g_s = g'g_j g_{0j} = g_t\, g_{0t}\, g_{0j}.$$

Подставляя сюда выражение $g'f'g_s$ из (11.12), имеем

$$g_i \tilde{g}_{0i} = g_t\, g_{0t}\, g_{0j}$$

и, значит,

$$g_i = g_t, \quad \tilde{g}_{0i} = g_{0t}\, g_{0j}.$$

Так как элементы $g_{0t}, g_{0j} \in H_k$, то по условию

$$d(\tilde{g}_{0i}) = d(g_{0t})\, d(g_{0j}).$$

Учитывая это и сравнивая правые части равенств (11.11) и (11.15), мы видим, что соотношение (11.10) верно и, значит, определенные нами операторы T_g действительно образуют представление группы G.

п.4. Докажем, что построенное представление неприводимо. Если бы представление $g \to T_g$ было приводимо, то для некоторого подпространства $\hat{L} \subset L$, $\hat{L} \neq \{\theta\}$, мы имели бы $T_g\hat{L} = \hat{L}$ при $\forall\, g \in G$. Пусть $\hat{L}_{k_1} = \hat{L} \cap L_{k_1}$. Так как оба подпространства — $\hat{L}$ и L_{k_1} — инвариантны для операторов T_g, $g \in H_k$, то $T_g\hat{L}_{k_1} = \hat{L}_{k_1}$, $g \in H_k$. Поэтому и так как $\hat{L}_{k_1} \subset L_{k_1}$ и представление $g \to T_g$, $g \in H_k$, неприводимо в пространстве L_{k_1}, мы получаем, что или $\hat{L}_{k_1} = \{\theta\}$ или $\hat{L}_{k_1} = L_{k_1}$. Если $\hat{L}_{k_1} = L_{k_1} \subseteq \hat{L}$, то $L_{k_i} = T_{g_i} L_{k_1} \subseteq \hat{L}$ и, значит, $L \equiv \sum\limits_{i=1}^{n} \oplus L_{k_i} \subseteq \hat{L}$, что невозможно, ибо $\hat{L} \subset L$. Если $\hat{L}_{k_1} = \{\theta\}$, то $\hat{L}_{k_i} = L_{k_i} \cap \hat{L} = \{\theta\}$ при $\forall i$. Действительно, если $q \in \hat{L}_{k_i}$, то $T_{g_i^{-1}} q \in \hat{L}_{k_1} = \{\theta\}$ и, значит, $q = \theta$. Поэтому $\hat{L}_{k_i} = \{\theta\}$. $i = 1, 2, \ldots, m$, и значит $P^{(k_i)} \hat{L} = \{\theta\}$ для любого волнового вектора k_i из зоны Бриллюена. Следовательно, $\hat{L} \equiv \sum\limits_{i=1}^{m} P^{(k_i)} \hat{L} = \{\theta\}$, что невозможно. Таким образом, неприводимость построенного представления доказана.

Задание. Рассмотрите любое из пространств L_{k_j}, построенных нами в ходе доказательства, и докажите, что для $\forall\, q \in L_{k_j}$ выполняется $T_{t_n} q = e^{i(k_j, n)} q$.

п.5. В заключение параграфа обсудим те упрощения, которые возникают в общей теории при рассмотрении кристаллов, в группе симметрии которых отсутствуют элементы $g = t_{n+d}\beta$ с несобственными трансляциями на вектора $n + d \notin Z_a$. Другими словами, мы рассматриваем случай, когда

$$G = G_a = \big\{ g \mid g = t_n \beta,\ n \in Z_a,\ \beta \in K \subseteq K_a \big\},$$

где K — группа точечной симметрии рассматриваемого кристалла: $\beta Z = Z$. Таким образом мы допускаем и наличие включений, лишь бы они не приводили к появлению в группе G элементов $g = t_{n+d}\beta$ с $n + d \notin Z_a$.

В рассматриваемой ситуации, очевидно,

$$H_k = \big\{ g \mid g = t_n \beta,\ t_n \in \tau_a,\ \beta \in K,\ \beta k = k \big\}$$

и (см. п.10.3)

$$F_k = \big\{ \beta \mid \beta \in K,\ \beta k = k \big\}.$$

Так как $F_k \subset H_k$, то любое представление группы H_k порождает представление группы F_k.

Лемма. *Если нормальное представление группы H_k неприводимо, то оно остается неприводимым после сужения его с H_k на F_k.*

Доказательство. Если представление группы H_k было задано в матричной форме $g \to D_g$, то мы перейдем к операторному заданию. Для этого в произвольном линейном пространстве R размерности $\mu = \dim D_g$ введем какой-либо ортонормированный базис e и определим в R операторы T_g как операторы, для которых $\|T_g\|_e = D_g$. Таким образом мы получаем в пространстве R операторное представление $g \to T_g$ группы H_k, являющееся при $g = \beta \in F_k$ представлением $\beta \to T_\beta$ группы F_k. Лемма утверждает, что представление $\beta \to T_\beta$, $\beta \in F_k$, неприводимо в R. Предположим, что это не так, т. е. что это представление приводимо. Тогда найдется подпространство $R' \subset R$, $R' \neq \{\theta\}$, такое, что $T_\beta q' \in R'$ при $\forall\, q' \in R'$ и $\forall\, \beta \in F_k$. Так как представление группы H_k — нормальное, то в этом представлении элементам t_n отвечают диагональные матрицы $e^{i(k,n)}E_\mu$ (E_μ — единичная матрица размерности μ), и, значит, операторы $T(n)$ действуют на $\forall\, q \in R$ как операторы умножения на $e^{i(k,n)}$. Поэтому $T(n)\,T_\beta q' = e^{i(k,n)}T_\beta q'$ при $\forall\, q' \in R$ и, значит, при $g = t_n\beta$, $\beta \in F_k$ имеем

$$T_g q' = T_{t_n\beta} q' = T(n) T_\beta q' = e^{i(k,n)} T_\beta q' \in R' \quad \text{при} \quad \forall\, q' \in R',$$

т. е. подпространство R' из R инвариантно для операторов T_g при $\forall\, g \in H_k$. Следовательно, представление $g \to T_g$, $g \in H_k$, приводимо в R, что противоречит условию Леммы. Значит представление $\beta \to T_\beta$, $\beta \in F_k$, неприводимо в R.

п.6. Приведенные рассуждения показывают, что для задания малого представления достаточно задать неприводимое представление $\beta \to T_\beta$ группы F_k в некотором пространстве R, определить операторы $T(n)$ на любых $q \in R$ равенством $T(n)q = e^{i(k,n)}q$ и положить $T_g = T(n)T_\beta$ при $g = t_n\beta \in H_k$. После этого R превращается в пространство функций трансляционной симметрии k и мы получаем нормальное малое представление $g \to T_g$, $g \in H_k$. Если представление группы F_k было задано в матричной форме $\beta \to d(\beta)$, то при $g = t_n\beta \in H_k$ полагаем

$$\|T_g\| = e^{i(k,n)}d(\beta)$$

и получаем нормальное малое представление в матричной форме.

Далее, поскольку элементы $g_i = t_{n(i)}\beta_i$ из (10.15) могут быть записаны в виде $g_i = \beta_i t_{\beta_i^{-1}n(i)}$, где $\beta_i^{-1}n(i) \in Z_a$, то в силу Леммы о сдвиге [1] $g_iH_k = \beta_iH_k$ и, значит, в рассматриваемой ситуации в (10.15) можно взять $g_i = \beta_i$, где β_i, $i = 1, 2, \ldots, m$, — вращения, порождающие звезду вектора k, то есть

$$G = \sum_{i=1}^{m} \beta_i H_k. \tag{11.17}$$

Из этого равенства следует, что

$$F \equiv K = \sum_{i=1}^{m} \beta_i F_k. \tag{11.18}$$

Действительно, так как в силу (11.17) для $\forall\, g = t_n\beta$ найдутся $\beta_i \in K$, $\beta_0 \in F_k$, $t_{n_0} \in \tau_a$ так, что

$$t_n\beta = \beta_i t_{n_0}\beta_0 = t_{\beta_i n_0}\,\beta_i\,\beta_0,$$

то

$$t_n\beta r = \beta r + n = \beta_i\beta_0 r + \beta_i n_0$$

при $\forall r$ и, значит, $\beta = \beta_i\beta_0$. Таким образом $\forall \beta$ из K принадлежит одному из смежных классов $\beta_j F_k$, т. е. (11.18) доказано.

§ 11.3. Как это работает: пример

п.1. Рассмотрим пример, иллюстрирующий применение общего подхода § 11.1, § 11.2 к конкретной ситуации. Для простоты ограничимся случаем квадратной решетки Браве. Группа точечной симметрии K_a такой решетки — это группа D_4, т. е. система имеет ось 4-го порядка, перпендикулярную к плоскости чертежа и четыре оси ℓ_i, $i = 1, 2, 3, 4$, второго порядка, расположенные в плоскости чертежа так, что углы между соседними осями равны $\dfrac{\pi}{4}$. Вид участка решетки Браве с четырьмя элементарными ячейками дан на рис. 11.1. Длина стороны ячейки $|a_1| = |a_2|$. Обратная решетка — тоже квадратная: $|b_1| = |b_2| = |a_1|^{-1}$. Группа

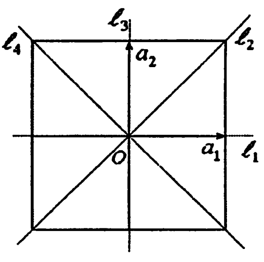

Рис. 11.1

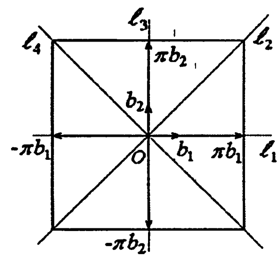

Рис. 11.2

K_b симметрии обратной решетки совпадает с K_a. Симметризованная зона Бриллюэна ЗБ = ЗБ2 представлена на рис. 11.2. Это квадрат с центром в начале координат, со стороной $2\pi|b_1|$, причем левая и нижняя сторона квадрата в ЗБ не входят. Волновые вектора k, определяющие типы неприводимых представлений группы τ_a, имеют вид

$$k = 2\pi\left(\frac{p_1 b_1}{N_1} + \frac{p_2 b_2}{N_2}\right),$$

где

$$-N_1 < 2p_1 \le N_1, \quad -N_2 < 2p_2 \le N_2.$$

Оси симметрии ЗБ — это четыре оси ℓ_i, $i = 1, 2, 3, 4$, второго порядка и ось z 4-го порядка, перпендикулярная к плоскости квадрата в точке O. Обозначим через $C_\ell(\varphi)$ вращение на угол φ около оси ℓ и положим $e_0 = C_z(0)$, $C_{\ell_i} = C_{\ell_i}(\pi)$, $C_4^1 = C_z\left(\dfrac{2\pi}{4}\right)$. Тогда

$$K_b = \{\beta \mid \beta = \beta_j,\ j = 1, \ldots, 8,\ \beta_1 = e_0,\ \beta_{i+1} = C_{\ell_i},\ i = 1, 2, 3, 4,\\ \beta_6 = C_4^1,\ \ \beta_7 = C_4^2,\ \ \beta_8 = C_4^3\}.$$

п.2. Переходим к применению общей схемы. Фиксируем произвольный волновой вектор k из ЗБ, находящийся в общем положении, т. е. не лежащий на осях симметрии второго порядка и такой, что его конец не находится на границе ЗБ. Положим $k_i = \beta_i k$, $i = 1, 2, \ldots, 8$ (рис. 11.3). Очевидно, что все вектора k_i — различные. Следовательно, $З(k) = \{k_1, k_2, \ldots, k_8\}$, $F_k = \{\beta_1\}$. Далее $H_k = \{g \mid g = t_n\beta_1 = t_n,\ t_n \in \tau_a\} = \tau_a$. Так как группа F_k имеет единственное — единичное — представление, то мы начинаем построение, взяв произвольное одномерное пространство L_k. Пусть $q^{(1)}$ — нормированный элемент из L_k. Определим на нем операторы представления $g \to T_g$, $g \in H_k$, равенством

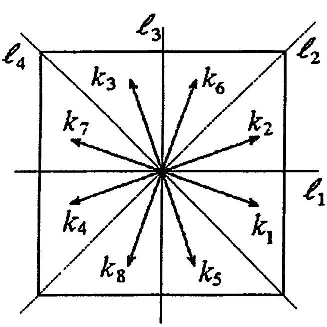

Рис. 11.3

$$T_g q^{(1)} = e^{i(k,n)}\, q^{(1)}, \quad g = t_n,$$

т. е. мы задаем нормальное представление группы H_k. Далее рассмотрим еще 7 произвольных одномерных пространств L_{k_j}, $j = 2, \ldots, 8$, и в качестве пространства большого представления возьмем $L = \sum\limits_{j=1}^{8} \oplus L_{k_j}$ (где $L_{k_1} = L_k$). Нормированные элементы пространств L_{k_j} обозначим $q^{(j)}$, $j = 2, \ldots, 8$, и в качестве базиса в L выберем набор $q^{(1)}, \ldots, q^{(8)}$.

Определим теперь операторы T_g, $g \in G$, сначала на $q^{(1)}$, а потом на любом базисном векторе пространства L. Положим $T_{\beta_j} q^{(1)} := q^{(j)}$, $T_{t_n\beta_j}\, q^{(1)} = e^{i(k_j,n)}\, q^{(j)}$ и при $g = t_n\beta_s$

$$T_g q^{(j)} \equiv T_{t_n\beta_s}\, q^{(j)} := T_{t_n}\, T_{\beta_s}\, T_{\beta_j}\, q^{(1)} = e^{i(k_p,n)}\, q^{(p)}, \qquad (11.19)$$

где индекс p определяется из равенства $\beta_p = \beta_s\beta_j$. Например, при $s = 2$, $j = 3$ получаем $p = 6$ и т. д. Таким образом, мы определили значения оператора T_g при $\forall\, g \in G$ на всех базисных векторах $q^{(j)}$, $j = 1, 2, \ldots, 8$, и тем самым задали большое представление полностью. Мы видим, что каждому волновому вектору k, находящемуся в общем положении, отвечает одно восьмимерное представление группы G, матричные элементы которого определяются равенствами (11.19). В рассматриваемом случае “суперстроки” и “суперстолбцы” (§ 11.2) превращаются просто в строки и столбцы ($\mu = 1$). Согласно (11.19) в j-ом столбце матрицы $\|T_g\|$ при $g = t_n\beta_s$ элементы во всех строках, кроме p-й будут нулевыми, а в p-й строке будет элемент $\|T_g\|_{pj} = e^{i(k_p,n)}$, где p (как мы уже говорили) определяется условием $\beta_p = \beta_s\beta_j$.

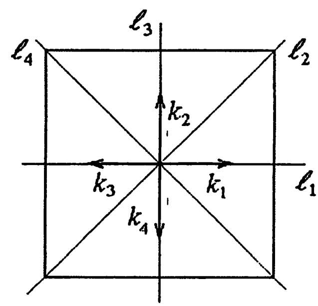

Рис. 11.4

п.3. Рассмотрим теперь случай, когда вектор k находится на одной из осей симметрии, но конец его по-прежнему не лежит на границе ЗБ и $k \neq 0$. Пусть $k = k_1$ лежит на оси ℓ_1. Тогда (рис. 11.4)

$$k_1 = C_4^0 k_1 = C_{\ell_1} k_1, \quad k_2 = C_4^1 k_1 = C_{\ell_2} k_1,$$

$$k_3 = C_4^2 k_1 = C_{\ell_3} k_1, \quad k_4 = C_4^3 k_1 = C_{\ell_4} k_1. \qquad (11.20)$$

Мы видим, что $З(k) = \{k_1, k_2, k_3, k_4\}$, $F_k = \{e, C_{\ell_1}\}$, и что разложение (11.18) можно записать в виде

$$K_a = D_4 = \sum_{j=1}^{4} C_4^{j-1} F_k. \tag{11.21}$$

Пусть $H_k = \{g \mid g = t_n\beta,\ t_n \in \tau_a,\ \beta \in F_k\}$. Так как группа F_k имеет всего два неприводимых (одномерных) представления $\beta \to \to d_0^{(s)}(\beta)$ (где $d_0^{(1)}(e_0) = d_0^{(2)}(e_0) = 1$, $d_0^{(1)}(C_{\ell_1}) = 1$, $d_0^{(2)}(C_{\ell_1}) = -1$), то, согласно вышесказанному, и группа H_k имеет только два неприводимых (одномерных) представления $g \to d^{(s)}(g)$, где

$$d^{(s)}(g) = d_0^{(s)}(\beta)\, e^{i(k,n)}, \quad g = t_n\beta, \quad t_k \in \tau_a, \quad \beta \in F_k, \quad s = 1, 2. \tag{11.22}$$

Теперь берем произвольное одномерное линейное пространство $L_k = L_{k_1}$ и определим на нем операторы $T_g^{(s)}$ s-го представления группы H_k. Пусть $q^{(1)}$ — нормированный базисный элемент в L_{k_1}. Положим

$$T_g^{(s)} q^{(1)} = d^{(s)}(g)\, q^{(1)}, \quad g \in H_k. \tag{11.23}$$

Рассмотрим далее три произвольных одномерных пространства L_{k_j}, $j = 2, 3, 4$, и в качестве пространства большого представления возьмем $L = \sum\limits_{j=1}^{4} \oplus L_{k_j}$. Нормированные базисные вектора пространств L_{k_j} обозначим через $q^{(j)}$ и в качестве базиса в L возьмем набор $q^{(1)}$, $q^{(2)}$, $q^{(3)}$, $q^{(4)}$. Определим теперь оператор $T_g^{(s)}$ s-го большого представления сначала на пространстве L_{k_1} при $g \notin H_k$, а потом на любом векторе $q^{(j)}$ при $\forall\ g \in G$. Пусть $\beta' = C_4^{j-1}$, $j = 1, 2, 3, 4$, и $g' = t_{n'}\beta'$. Положим

$$T_{g'}^{(s)}\, q^{(1)} = T(n')\, T_{\beta'}^{(s)}\, q^{(1)} = e^{i(k_j, n')}\, q^{(j)}, \tag{11.24}$$

где значение j однозначно определяется вращением β' из формулы $k_j = C_4^{j-1} k_1$ (см. (11.20)). Далее с учетом (11.22)–(11.24) полагаем

$$T_g^{(s)} q^{(j)} = T^{(s)}(n)\, T_\beta^{(s)}\, T_{\beta'}^{(s)} = d_0^{(s)}(\beta_0)\, e^{i(k_p, n)}\, q^{(p)}, \tag{11.25}$$

где элемент β_0 из F_k и значение p однозначно определяются из равенства

$$\beta\beta' = \beta_p\beta_0,$$

вытекающего из (11.21). Например, при $\beta = C_{\ell_3}$, $\beta' = C_4^2$, мы получаем $\beta_p = C_4^0 = e$ (т. е. $p = 1$), $\beta_0 = C_{\ell_1}$: при $\beta = C_{\ell_1}$, $\beta' = C_4^1$ имеем $\beta_p = C_4^3$ $(p = 3)$, $\beta_0 = C_{\ell_1}$ и т. д.

Задание. Рассмотреть случай вектора k, $k \neq 0$, лежащего на оси симметрии ℓ_2; конец k не лежит на границе ЗБ.

п.4. Рассмотрим теперь вектор k не лежащий ни на одной из осей симметрии, но имеющий конец на границе зоны Бриллюена (рис. 11.5). Полагаем

$$k_1 = k = C_4^0 k, \quad k_2 = C_{\ell_1} k_1, \quad k_3 = C_4^1 k_1, \quad k_4 = C_{\ell_2} k_1,$$
$$k_5 = C_4^2 k_1, \quad k_6 = C_{\ell_3} k_1, \quad k_7 = C_4^3 k_1, \quad k_8 = C_{\ell_4} k_1.$$

Так как $k_1 - k_6 = k_2 - k_5 = 2\pi b_1$ и $k_3 - k_8 = k_4 - k_7 = 2\pi b_2$, то согласно § 9.3 мы можем записать, что $k_1 = k_6$, $k_2 = k_5$, $k_3 = k_8$, $k_4 = k_7$. Поэтому звезда вектора k состоит из четырех векторов: $З(k) = \{k_1, k_2, k_3, k_4\}$ и $F_k = \{e_0, C_{\ell_3}\}$. Ситуация аналогична разобранной в п.3 с той лишь разницей, что здесь другая группа F_k, другая звезда вектора k и в разложении (11.18) будут другие β_i. Однако эта разница не влияет на вывод: каждому вектору k в описанной ситуации отвечают 2 четырехмерных неприводимых представления группы G.

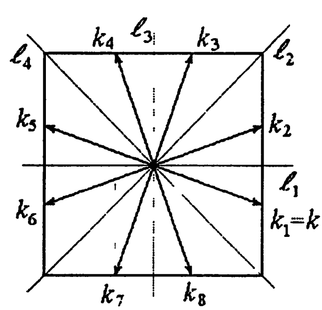

Рис. 11.5

Задание. Построить эти представления.

п.5. Пусть теперь $k = \pi b_1$ (в случае $k = \pi b_2$ рассуждения аналогичны). Очевидно (рис. 11.6)

$$k_1 \equiv k = C_4^0 k_1 = C_{\ell_1} k_1,$$
$$k_2 = C_{\ell_2} k_1 = C_4^1 k_1, \quad k_3 = C_{\ell_3} k_1 = C_4^2 k_1,$$
$$k_4 = C_{\ell_4} k_1 = C_4^3 k_1.$$

Так как $k_1 - k_3 = 2\pi b_1$ и $k_2 - k_4 = 2\pi b_2$, то $k_3 = k_1$, $k_4 = k_2$.

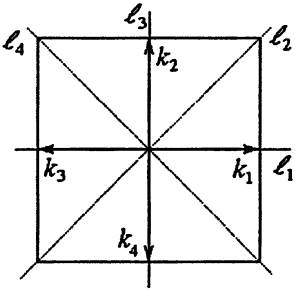

Рис. 11.6

Поэтому

$$З(k) = \{k_1, k_2\}, \quad F_k = \left\{\beta \mid \beta = e_0,\ C_{\ell_1},\ C_{\ell_3},\ C_4^2\right\}.$$

Выражение (11.18) перепишется в виде

$$D_4 = \sum_{j=1}^{2} C_4^{j-1} F_k. \tag{11.26}$$

Группа F_k совпадает с группой D_2 (симметрия D_2 порождается осью 2-го порядка и двумя перпендикулярными к ней и к друг другу осями второго порядка). Группа D_2 имеет 4 неприводимых не эквивалентных (одномерных) представления $\beta \to d_0^{(s)}(\beta)$, где числа $d_0^{(s)}(\beta)$, $s = 1, 2, 3, 4$, приведены в [3, § 8.4]. Пусть $H_k = \{g \mid g = t_n\beta,\ t_n \in \tau_a, \beta \in F_k\}$. Согласно п.11.2.6 группа H_k

(как и группа F_k) будет иметь четыре не эквивалентных неприводимых (одномерных) представления: $g \to d^{(s)}(g)$, где

$$d^{(s)}(g) := d_0^{(s)}(\beta)\, e^{i(k,n)}, \quad g = t_n\beta, \quad \beta \in F_k,$$

каждое из которых порождает свое неприводимое двумерное представление группы G. Построение этого представления осуществляется так же, как в пп.3, 4, но здесь мы возьмем не 4, а 2 (порядок звезды вектора k) одномерных пространства: L_{k_1} и L_{k_2} и положим $L = L_{k_1} \oplus L_{k_2}$. Далее выбираем базисные элементы $q^{(j)}$ в L_{k_j}, $j = 1, 2$, базис $q^{(1)}, q^{(2)}$ в L и определяем операторы $T_g^{(s)}$ сначала при $g \in H_k$ на L_{k_1}, а потом для $\forall g$ на L_{k_j} совершенно аналогично п.4, и т. д. Таким образом мы можем построить 4 двумерных неприводимых не эквивалентных представления группы G.

Задание. Выписать формулы для матричных элементов $d^{(s)}(g)_{21} = \|T_g^{(s)}\|_{21}$ s-го неприводимого представления группы G при $g = t_n C_4^1$, $t_n C_{\ell_3}$.

п.6. Рассмотрим вектор $k = k_1 = \pi b_1 + \pi b_2$, т. е. вектор k, расположенный на оси ℓ_2 с концом на границе ЗБ. Имеем (рис. 11.7)

$$k = k_1 = C_4^0 k_1 = C_{\ell_2} k_1, \qquad k_2 = C_4^1 k_1 = C_{\ell_3} k_1,$$
$$k_3 = C_4^2 k_1 = C_{\ell_4} k_1, \qquad k_4 = C_4^3 = C_{\ell_1} k_1.$$

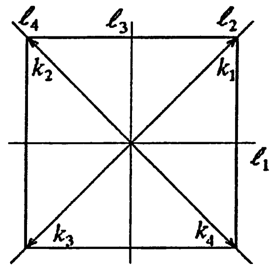

Рис. 11.7

Поскольку $k_1 - k_2 = 2\pi b_1$, $k_1 - k_3 = 2\pi b_1 + 2\pi b_2$, $k_1 - k_4 = 2\pi b_2$, то $k_1 = k_2 = k_3 = k_4$. Следовательно, $З(k_1) = \{k_1\}$. $F_k = K_a = D_4$. Неприводимые представления группы $F_k = D_4$ найдены в [3]: это 4 одномерных представления $\beta \to d^{(s)}(\beta)$, $s = 1, 2, 3, 4$, и одно двумерное: $\beta \to \|d^{(5)}(\beta)\|$. В рассматриваемом случае группа $H_k = \{g \mid g = t_n\beta,\ t_n \in \tau_a,\ \beta \in F_k\}$ совпадает с группой G, ибо $F_k = K_a$; поэтому нам достаточно построить неприводимые нормальные представления группы H_k. Чтобы получить одномерные представления $g \to T_g^{(s)}$, $s = 1, 2, 3, 4$, группы H_k, возьмем четыре одномерных пространства $L_k^{(s)}$, $s = 1, 2, 3, 4$, и на их элементах $q(s)$ определим операторы $T_g^{(s)}$, $g = t_n\beta$, равенствами

$$T_g^{(s)} q(s) = d^{(s)}(\beta)\, e^{i(k,n)} q(s), \quad s = 1, 2, 3, 4. \tag{11.27}$$

Для построения двумерного представления $g \to T_g^{(5)}$ возьмем произвольное двумерное пространство $L_k^{(5)}$, выберем в нем любой базис q_1, q_2 и положим при $g = t_n\beta$

$$T_g^{(5)} q_t = e^{i(k,n)} \sum_{t'=1}^{2} d^{(5)}(\beta)_{t't}\, q_{t'}. \tag{11.28}$$

Таким образом для $k = \pi b_1 + \pi b_2$ группа G имеет пять неприводимых представлений: четыре одномерных и одно двумерное. Эти представления определены равенствами (11.27), (11.28).

Задание. Рассмотреть случай $k = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жислин Г. М. Лекции по теории представлений конечных групп (общая теория). I // Препринт НИРФИ № 409. — Н. Новгород: НИРФИ, 1995. 42 с.

2. Жислин Г. М. Общая теория представлений конечных групп. II. — Н. Новгород: Нижегородский ун-т, 1995. 43 с.

3. Жислин Г. М. Лекции по теории представлений конечных групп. III // Препринт НИРФИ № 522. — Н. Новгород: НИРФИ, 2009. 44 с.

4. Киреев П. С. Введение в теорию групп и её применение в физике твердого тела. — М.: Высшая школа, 1979.

5. Петрашень М. И., Трифонов Д. Е. Применение теории групп в квантовой механике. — М.: Наука, 1967.

Жислин Григорий Моисеевич

Лекции по теории представлений конечных групп.
IV. Пространственные группы и их представления

Подписано в печать 20. 10. 2009 г. Формат 60 × 84/16.
Бумага писчая. Объем 3,21 усл. п. л.
Тираж 50. Заказ 5590

Отпечатано в НИРФИ
Нижний Новгород, ул. Большая Печерская, 25