Дж. Бирман

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СИММЕТРИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ. Т. 1

Монография известного американского физика-теоретика Дж. Бирмана посвящена применению теории пространственных групп к анализу оптических свойств кристаллической решетки. Монография содержит последовательное изложение теории пространственных групп и ее применения для исследования динамических и оптических свойств кристаллической решетки. Большое количество разобранных конкретных примеров делает книгу хорошим руководством по изучению практических приемов использования пространственной симметрии.

В русском издании книга выпущена в двух томах. Первый том содержит изложение теории пространственных групп, методов их приведения, а также вопросов динамики кристаллической решетки.

Книга представляет интерес для широкого круга научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов старших курсов, специализирующихся в области физики твердого тела.

Содержание

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Главная особенность симметрии кристаллов — пространственная периодичность их структуры. Теория пространственных групп, позволяющая эффективно учесть это свойство симметрии, успешно применяется при решении широкого круга задач физики твердого тела. Достаточно упомянуть такие хорошо известные области, как теория кристаллического поля, метод эффективной массы в теории полупроводников, расчеты электронных и фононных спектров твердых тел, анализ правил отбора для всевозможных оптических процессов. Во всех этих задачах учет симметрии позволяет не только упростить математическое описание, но и получить ряд точных результатов, вытекающих из общих свойств явления и не связанных с конкретной моделью.

Хотя формальная теория пространственных групп существует уже в течение длительного времени, ее практическое применение, в особенности экспериментаторами, тормозится известной сложностью и непривычностью математического аппарата. Между тем теория пространственных групп продолжает углубляться и совершенствоваться с одновременным расширением области ее применения.

Естественно, что практические навыки использования теории пространственных групп легче всего приобрести при изучении роли симметрии в конкретных физических задачах. В последние годы на русском языке вышло несколько монографий, написанных именно по такому принципу [115, 120, 121].

Предлагаемая вниманию советского читателя монография известного американского теоретика Дж. Бирмана, продолжая это направление, существенно дополняет литературу по теории симметрии кристаллов. В монографии дается обзор современного состояния теории пространственных групп с учетом новейших результатов, полученных, в частности, автором и его сотрудниками, и подробно излагаются методы практического использования аппарата теории в задачах динамики кристаллической решетки и оптических процессов, связанных с фононами.

Отличительная особенность монографии Дж. Бирмана — использование симметрии «от начала и до конца». Это означает, во-первых, что изложение самой теории колебаний решетки ведется с позиций свойств симметрии (в отличие от обычного подхода, где сначала строится теория, а затем проводится анализ свойств симметрии); во-вторых, это означает максимальное использование симметрии, что достигается построением матриц приведения (коэффициентов Клебша — Гордана). Книга Дж. Бирмана — первая монография, где излагается теория коэффициентов Клебша — Гордана для пространственных групп и приводятся их таблицы для ряда групп. Вторая характерная черта книги — подробнейший анализ оптических экспериментов с теоретико-групповой точки зрения и сравнение результатов, полученных разными методами. Этот материал служит как иллюстративным, так и учебным целям и показывает, каким образом и до какой глубины экспериментатор может использовать теорию групп при анализе своих результатов. Наконец, несомненную ценность книге придают обширные и подробные таблицы коэффициентов приведения для трех важнейших пространственных групп: алмаза, каменной соли и цинковой обманки.

Содержание монографии естественным образом делится на две части. Поэтому в русском издании она выпущена в двух томах. В первом томе излагается общая теория пространственных групп, рассматриваются методы их применения, а также вопросы динамической теории кристаллов. Основное внимание уделяется задаче разложения представлений на неприводимые составляющие, являющейся основой физических применений теории групп. Подробно излагаются и сопоставляются два различных метода вычисления коэффициентов приведения: метод линейных алгебраических уравнений и метод группы приведения. Такой способ изложения обладает несомненной педагогической ценностью, предоставляя читателю «свободу действий» при выборе метода или при проверке результатов.

Второй том посвящен теории колебаний кристаллической решетки и ее оптическим свойствам — инфракрасному поглощению и комбинационному рассеянию. С позиций теории симметрии проанализирован вопрос о критических точках функции распределения частот, определяющих особенности оптических спектров. Специальное внимание уделено анализу симметрии по отношению к обращению времени. Обсуждаются свойства симметрии ангармонических силовых постоянных, дипольных моментов и поляризуемостей высших порядков. Центральное место в этом разделе занимает обсуждение поляризационных эффектов в рассеянии света. Во втором томе рассматривается также применение всех результатов к кристаллам со структурой каменной соли и алмаза, представляющим собой важные примеры симморфной и несимморфной пространственных групп. Завершается книга кратким анализом роли эффектов, обусловленных нарушением симметрии, дефектами или внешними полями.

В целом книга имеет энциклопедический характер, так как в ней с единых позиций и в одинаковых обозначениях излагаются и теория пространственных групп, и динамика решетки, и теория оптических свойств решетки. В настоящее время книга Бирмана является единственным в своем роде пособием по конкретному применению теории пространственных групп к оптическим свойствам кристаллической решетки. Большое число разобранных до деталей примеров, относительная простота и ясность изложения делают книгу незаменимым руководством как для изучения практических приемов работы с пространственными группами, так и для постановки и решения новых задач.

Профессор Бирман известен своими теоретическими работами в области применения теории симметрии к проблеме фазовых переходов и в спектроскопии твердого тела. Успешное развитие аппарата пространственных групп и его широкое применение в последние 10—15 лет в значительной степени связаны с работами Бирмана и его сотрудников.

Книга Бирмана по замыслу автора не является исчерпывающим обзором, и поэтому список литературы не претендует на библиографическую полноту. Чтобы сохранить стиль автора, при переводе были добавлены лишь немногочисленные ссылки на доступные советскому читателю издания, в которых рассматриваются близкие вопросы, а также на источники, содержащие подробные списки литературы. Кроме того, исправлены замеченные опечатки и сделан ряд разъясняющих примечаний; это относится, в частности, к некоторым понятиям высшей алгебры.

В русское издание книги включены два дополнения, помещенные в конце второго тома. В первом из них, подготовленном сотрудницей автора профессором Р. Беренсон, излагаются полученные в последнее время результаты по применению кристаллических коэффициентов Клебша — Гордана в ряде задач спектроскопии твердого тела. Второе дополнение, написанное К. К. Ребане и В. В. Хижняковым, посвящено теории резонансного вторичного свечения кристаллов. Проблеме резонансного рассеяния в основном тексте книги уделено мало места, хотя автор подчеркивает то значение, которое она приобрела в последние годы. Указанное дополнение имеет целью на примере примесного центра в кристалле дать представление о том, каким образом при резонансном возбуждении в полосе поглощения благодаря свойственным кристаллу быстрым процессам колебательной релаксации подавляющая доля энергии трансформируется в люминесценцию и каким образом из общего потока вторичного свечения можно выделить две другие компоненты — рассеяние и горячую люминесценцию.

Перевод книги выполнен И. П. Ипатовой (предисловия автора, обозначения, т. 1, гл. 9—11, т. 2, гл. 1), А. В. Субашиевым (т. 1, гл. 1—8) и Г. С. Завтом (т. 2, гл. 2—4, приложения, дополнение 1).

К. К. Ребане, И. П. Ипатова

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Я испытываю удовлетворение от того, что перевод моей книги на русский язык позволит более широкому кругу читателей познакомиться с принципами и примерами практического применения методов теории групп в важной области физики твердого тела, а именно в исследовании оптических свойств, обусловленных колебаниями кристаллической решетки.

В области исследования оптических свойств твердых тел в последнее десятилетие произошел настоящий взрыв, вызванный, в частности, применением лазерных устройств для генерации и регистрации монохроматического излучения. Подтверждением такого развития служат, например, международные конференции по рассеянию света в твердых телах, проводимые регулярно с 1968 г., и новая серия советско-американских семинаров по теории рассеяния света в твердом теле, начавшаяся в 1975 г.

Важность применения теоретико-групповых методов для предсказания и анализа результатов новых экспериментальных исследований подтверждается снова и снова. Для получения правил отбора, отношений интенсивностей разрешенных процессов и т. п. требуется не только формальная теория групп, но теория групп в сочетании с наиболее современными методами динамической теории кристаллической решетки. В этом смысле область применения теории групп все расширяется, и можно говорить о самостоятельно развивающемся разделе математической физики, который должен быть в распоряжении каждого научного работника.

Несмотря на большой объем материала, который в русском издании занимает два тома, этот материал составляет лишь небольшую долю всех имеющихся приложений теории групп. Здесь не рассматриваются оптические процессы в магнитных системах, связанные, например, со спиновыми волнами; оптические процессы, обусловленные электронными возбуждениями, такими, как экситонное поглощение или рассеяние, а также применения теории групп в теории изменения симметрии при непрерывных фазовых переходах, не говоря уже о других важных областях. Я надеюсь, однако, что подробное рассмотрение всех специфических деталей теории оптических явлений, обусловленных инфракрасным поглощением и комбинационным рассеянием света колебаниями решетки, окажется не только наглядным, но и даст читателю смелость и основы для рассмотрения новых проблем, стоящих на переднем крае науки.

В настоящем издании исправлены все найденные опечатки и дана дополнительная литература, которая поможет читателю ориентироваться в текущих публикациях. Кроме того, добавлены короткая новая глава и таблицы, содержащие последние результаты работ по применению коэффициентов Клебша — Гордана для предсказания формы тензора рассеяния при наличии внешних электрического и магнитного полей или внешнего давления. Эти результаты будут полезны при анализе новых экспериментов.

Новая, существенная глава по теории резонансного комбинационного рассеяния и горячей люминесценции написана для этого издания К. К. Ребане и В. В. Хижняковым. Я считаю, что это направление будет интенсивно развиваться в ближайшем будущем и эта глава будет хорошим стимулом для такого развития.

Я надеюсь, что русское издание книги принесет пользу, и я буду признателен читателям, если они укажут неточности, опечатки или неясные места. Было бы особенно приятно узнать от читателей о многих новых интересных приложениях теории групп, стимулирование которых является одной из целей этой книги.

Я хочу воспользоваться случаем и принести свою благодарность К. К. Ребане, И. П. Ипатовой, Г. С. Завту и А. В. Субашиеву за их неоценимую помощь при подготовке настоящего издания.

Нью-Йорк, декабрь 1976 г. *Джозеф Л. Бирман*

Этот труд посвящается памяти моего глубоко чтимого отца Макса Бирмана (1901—1970)

Дж. Л. Б.

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Цель настоящей книги — дать научным работникам всестороннее и полное изложение вопросов применения теории групп к исследованию оптических свойств твердых тел (конденсированных сред), а именно инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света. Те же методы теории групп с соответствующими видоизменениями применяются в других областях физики, так что полное изложение может оказаться полезным и при анализе электронных свойств кристаллов, магнитных свойств и других свойств, обусловленных элементарными возбуждениями.

Предполагается, что читатель обладает элементарными сведениями в области теории групп и динамики решетки, содержащимися, например, в обычных учебниках [1—6]. Однако настоящая книга включает весь необходимый материал, и на случай, если читатель захочет вспомнить изложение некоторых вопросов, даны многочисленные ссылки на более простые учебники.

Во введении (§ 1 и 2) дается общий обзор содержащегося в книге материала. Некоторые читатели, возможно, захотят прочесть сначала также заключительные замечания (т. 2), чтобы получить дополнительное представление о материале книги.

Книга построена следующим образом. В § 1—65 описываются структура, неприводимые представления и коэффициенты Клебша — Гордана для кристаллических пространственных групп. В § 66—110 теория кристаллической симметрии с учетом сопредставлений применяется к классической динамике решетки. В § 111—118 и в т. 2, § 1—6 приводится квантовая теория колебаний кристаллической решетки и теория инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света. Здесь же в общем виде показана полезность применения теоретико-группового анализа к задачам такого типа. Наконец, в т. 2, § 7—36 дается детальное применение общей теории к оптическим спектрам инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света для диэлектриков со структурой алмаза и каменной соли (пространственные группы O_h^7 и O_h^5). Даны примеры идеальных и неидеальных кристаллов обоих типов.

Джозеф Л. Бирман

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

1. Описание кристалла

$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ — базисные векторы кристаллической решетки.

$\boldsymbol{R}_L$ — вектор решетки Бравэ.

l_1, l_2, l_3 — целочисленные компоненты вектора $\boldsymbol{R}_L$: $\boldsymbol{R}_L = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3$.

$\boldsymbol{r}$ — произвольный вектор в кристалле.

x_1, x_2, x_3 — компоненты вектора $\boldsymbol{r}$.

$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ — базисные векторы обратной решетки.

$\boldsymbol{B}_H$ — вектор обратной решетки.

h_1, h_2, h_3 — целочисленные компоненты вектора $\boldsymbol{B}_H$: $\boldsymbol{B}_H = h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2 + h_3\boldsymbol{b}_3$.

$\boldsymbol{k}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ — волновой вектор, параллельный вектору $\boldsymbol{b}_i$ $(i = 1, 2, 3)$; $\boldsymbol{k}_i = \dfrac{2\pi p_i}{N_i}\boldsymbol{b}_i$.

$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3$ — произвольный волновой вектор.

$\boldsymbol{r}^{\,l}_{\varkappa} \equiv \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — координата $\varkappa$-го атома в l-й элементарной ячейке.

$\boldsymbol{r}_\varkappa$ — координата $\varkappa$-го атома в элементарной ячейке, помещенной в начало координат.

$r_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — α-компонента вектора $\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$.

2. Элементы симметрии

$\boldsymbol{\varphi}$ — матрица ортогонального преобразования.

$\tilde{\boldsymbol{\varphi}}$ — матрица, транспонированная по отношению к матрице $\boldsymbol{\varphi}$.

$\boldsymbol{\varphi}^{-1}$ — матрица, обратная матрице $\boldsymbol{\varphi}$.

$\boldsymbol{\varepsilon}$ — единичная трехмерная матрица.

φ — угол поворота, определяемый матрицей $\boldsymbol{\varphi}$.

$\{\boldsymbol{\varepsilon} \mid \boldsymbol{R}_L\}$ — трансляция на вектор $\boldsymbol{R}_L$.

$\{\boldsymbol{\varphi} \mid 0\}$ — чистый поворот, определяемый матрицей $\boldsymbol{\varphi}$.

$\{\boldsymbol{\varphi} \mid \boldsymbol{t}(\boldsymbol{\varphi})\}$ — элемент симметрии общего вида, включающий поворот, определяемый матрицей $\boldsymbol{\varphi}$, и трансляцию на вектор $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{\varphi})$.

$\boldsymbol{\tau}(\varphi)$ — наименьший вектор, соответствующий повороту φ: $\boldsymbol{t}(\varphi) = \boldsymbol{\tau}(\varphi) + \boldsymbol{R}_L$.

$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^\sigma$ — операция трансляции, сопряженная с $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}$, полученная с помощью операции $\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$: $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^\sigma = \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$.

$\boldsymbol{R}_{L_{\sigma\rho}} = (\varphi_\sigma, \varphi_\rho)$ — элемент факторгруппы: $\boldsymbol{R}_{L_{\varphi\rho}} = (\varphi_\sigma, \varphi_\rho) = (\varepsilon \mid \varphi_\sigma \boldsymbol{\tau}_\rho + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho})$.

K — оператор обращения времени.

3. *Группы и представления*

$\mathfrak{T}_1$ — группа трансляций $\{\varepsilon \mid l\boldsymbol{a}_1\}$.

$\mathfrak{T}$ — трансляционная группа.

$\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ — трансляционная группа волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

$\mathfrak{P}$ — точечная группа.

$\mathfrak{P}(\boldsymbol{r})$ — точечная группа узла $\boldsymbol{r}$.

$\mathfrak{G}$ — пространственная группа.

$\mathfrak{G}_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} = \mathfrak{G}_S$ — разные обозначения элементов пространственной группы.

$\mathfrak{G}_{P(R)}$ — группа операторов преобразований.

$\mathfrak{G}_{D(R)}$ — группа матриц $D(R)$.

$\mathscr{G}$ — пространственно-временная группа симметрии.

$^*\boldsymbol{k}$ — звезда волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

$^*\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ — накрывающая группа волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ — пространственная группа канонического волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

$\Pi(\boldsymbol{k})$ — точечная группа волнового вектора $\boldsymbol{k}$: $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$.

$\mathfrak{C}$ — k-й класс группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

$C(\boldsymbol{k})$ — элемент класса $\mathfrak{C}(\boldsymbol{k})$.

$c(\boldsymbol{k})$ — порядок элемента $\mathfrak{C}(\boldsymbol{k})$.

$P_{mn}^{(l)}$ — идемпотентный оператор преобразования.

$D^{(l)}(R)$ — матрица, соответствующая элементу R в l-м представлении пространственной группы.

$\chi^{(l)}(R)$ — характер или след матрицы $D^{(l)}(R)$.

$D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ — m-е неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

$D^{(^*\boldsymbol{k})(m)}$ — m-е неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$, соответствующее звезде $^*\boldsymbol{k}$.

$\sum_l = \{\psi_\alpha\}$ — набор волновых функций $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_l$.

$\psi_\lambda^{(k_1)(m)}$ — λ-я блоховская функция с волновым вектором $\boldsymbol{k}$, преобразующаяся по представлению $D^{(k_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$.

$\dot{D}^{(k)(m)}(R)$ — матрица, тождественно равная матрице $D^{(k)(m)}(R)$ для $R \in \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и равная нулю в остальных случаях.

$\dot{\chi}^{(k)(m)}(R)$ — характер матрицы $\dot{D}^{(k)(m)}(R)$.

$r^{(k)}(\lambda, \mu)$ — система факторов проективного представления.

$\mathfrak{K}^{(\star k)(m)}$ — ядро представления $D^{(\star k)(m)}$.

$\mathfrak{R}$ — группа приведения.

$(^\star \boldsymbol{k} m ^\star \boldsymbol{k}' m' \mid {}^\star \boldsymbol{k}'' m'')$ — коэффициент приведения.

$(\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_\sigma\} m m' \mid \boldsymbol{k}'' m'')$ — коэффициент приведения для подгруппы.

$D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k')(m')}$ — прямое произведение представлений.

$[D^{(\star k)(m)}]_p$ — p-я симметризованная степень представления $D^{(\star k)(m)}$.

4. *Динамика решетки*

T — кинетическая энергия.

Φ — потенциальная энергия кристалла.

V — изменение потенциальной энергии $\Phi - \Phi_0$.

$\mathcal{L}$ — лагранжиан.

N — число элементарных ячеек в приближении Борна — Кармана.

r — число атомов в элементарной ячейке.

$\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — смещение $\varkappa$-го атома в l-й ячейке.

$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ — матрица силовых постоянных, определяемая выражением $\left(\dfrac{\partial^2\Phi}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \partial u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}}\right)\Bigg|_{u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}=0;\ u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}=0}$.

$[\boldsymbol{\Phi}]$ — матрица силовых постоянных с элементами $\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$.

$[\boldsymbol{u}]$ — матрица-столбец с элементами $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$.

$[\boldsymbol{M}]$ — диагональная матрица масс $[M]_{\substack{\varkappa\ \varkappa' \\ l\ l' \\ \alpha\ \beta}} = M_\varkappa \delta_{\varkappa\varkappa'} \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta}$.

$\boldsymbol{w}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — смещения, умноженные на корень квадратный из массы $\sqrt{M_\varkappa}\, \boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$.

$\zeta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — независящие от времени амплитуды смещений $\boldsymbol{w}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = e^{-i\omega t}\zeta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$.

$[\boldsymbol{D}]$ — матрица, связанная с матрицей Φ соотношением $D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa M_{\varkappa'}}}\, \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$.

$[\boldsymbol{e}_j]$ — собственный вектор матрицы $[D]$, соответствующий собственному значению ω_j^2.

$\boldsymbol{e}_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right)$ — компонента вектора $[\boldsymbol{e}_j]$.

q_j — нормальная координата колебания с вектором $[\boldsymbol{e}_j]$.

$\boldsymbol{e}\left(\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$ — собственный вектор динамической матрицы.

$\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$ — компонента вектора $\boldsymbol{e}\left(\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$.

$\boldsymbol{e}_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})$ — вектор в i-мерном пространстве с координатами $\boldsymbol{e}_\alpha\left(\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$.

$Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ — комплексная нормальная координата.

$\boldsymbol{\varepsilon}\left(\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\middle| t\right)$ — зависящий от времени собственный вектор, соответствующий волновому вектору $\boldsymbol{k}$.

ГЛАВА 1

Содержание и план книги

§ 1. Общее введение

Настоящая книга имеет своей целью развитие и иллюстрацию основных принципов и практики применения методов теории групп к анализу оптических процессов инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света кристаллической решеткой диэлектриков. Методы теории групп являются мощным математическим аппаратом, позволяющим объяснить и предсказать особенности оптических процессов. Наша цель состоит также в том, чтобы сделать эти методы как можно более доступными и ясными, а следовательно, как можно более широко используемыми.

Для достижения этих целей необходимо ясно представлять общий план, которому мы будем следовать. Сначала мы кратко изложим общую теорию кристаллических пространственных групп. Далее мы проанализируем следствия симметрии пространственных групп. Эти следствия в большой мере вытекают из предположения о существенном характере вырождения, которое основано на том, что физические состояния системы образуют базис для неприводимых представлений группы симметрии. Поэтому нам потребуется изложить теорию неприводимых представлений групп симметрии, а также теорию функций, образующих базис представлений. Вследствие тесной связи между состояниями системы и представлениями большое внимание уделяется развитию теории неприводимых представлений пространственных групп; излагается целый ряд методов, применявшихся в последнее время для нахождения неприводимых представлений. Непосредственным и естественным обобщением этого рассмотрения является получение правил отбора для переходов между состояниями. Для этого необходимо выполнить разложение прямого произведения двух неприводимых представлений на неприводимые составляющие.

На этом заканчивается первая часть книги, в которой, таким образом, дается описание симметрии физических состояний и находятся правила отбора для переходов.

Затем мы обращаемся к физической стороне вопроса и обсуждаем классическую и квантовую теории колебаний решетки. Теория строится так, чтобы удобно было получить следствия симметрии решетки. Поскольку уравнения движения инвариантны относительно преобразований симметрии кристаллической пространственной группы, а также относительно операции обращения времени, необходимо расширить группу симметрии таким образом, чтобы включить в нее антиунитарные операторы. Такое расширение может иметь существенные последствия для характеристики состояний системы, поэтому мы очень подробно рассматриваем роль антиунитарной операции симметрии: в этом случае физические состояния образуют базис для неприводимых копредставлений.

После этого мы опять обращаемся к физике и излагаем теорию оптических свойств кристаллической решетки — инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния. В этой теории взаимодействие между излучением и веществом рассматривается в рамках квантовой механики. Устанавливается связь между вероятностью переходов для поглощения и рассеяния света и величиной некоторых матричных элементов. Именно на этом этапе симметрия играет решающую роль, так как она определяет отличные от нуля матрнчные элементы.

Математическая формулировка правил отбора находит физические приложения при определении интенсивности процессов перехода. Именно здесь, при интерпретацин или предсказании оптических спектров, можно применить весь предшествующий анализ. Применение методов теории групп к динамике кристаллической решетки иллюстрируется на примерах определения энергии и симметрии колебательных состояний, а также анализа оптических спектров решетки кристаллов, нмеющих структуру алмаза (алмаз, кремний, германий), и кристаллов со структурой каменной соли (хлористый натрий). Прнводятся примеры задач для совершенных кристаллов и для кристаллов с точечными дефектами.

Резюмируем: симметрия играет центральную роль в классификации собственных состояний кристалла, рассматриваемого как система многих тел, состоящая из ионов и электронов. Нас интересуют здесь элементарные возбуждения, описывающие колебания решетки, т. е. фононы. Переходы между собственными состояниями вызываются возмущающими полями, и переход между некоторой заданной парой состояний разрешен, если соответствующий матричный элемент отличен от нуля. Равенство или неравенство нулю матричного элемента определяется симметрией начального состояния, конечного состояния и возмущающего поля. Точнее говоря, методы теории групп позволяют проанализировать вопрос: может ли происходить инфракрасное поглощение и комбинационное рассеяние при данном процессе, связанном с определенными изменениями колебательного состояния решетки и сопровождающим их изменением поля излучения?

Таким образом, в настоящей книге развиваются три главные взаимосвязанные темы:

теория кристаллических пространственных групп;

классическая и квантовая теория динамики решетки;

теория оптических свойств решетки (инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния)

и рассматриваются практические применения к анализу

фононных спектров и

оптических свойств кристаллов со структурой алмаза и каменной соли.

Хотя эти темы взаимосвязаны, мы стремились, чтобы рассмотрение каждого вопроса в настоящей книге было в достаточной мере законченным, так что вся книга достаточно самостоятельна по содержанию. Вводный материал, включающий обзор темы, ссылки на литературу и последовательное введение обозначений, излагается на среднем по трудности уровне. Как это характерно для наиболее активно развивающихся направлений физики, в которых ведутся интенсивные исследования, различные аспекты теории и ее применений разработаны в разной степени, и это обстоятельство проявилось в ряде мест в книге. Подробно излагая различные аспекты теоретического анализа, мы стремились осветить трудный и интересный вопрос о степени общности методов, что в случае необходимости должно облегчить рассмотрение других пространственных групп. Иллюстрация применения методов на кристаллах со структурой алмаза и каменной соли преследует как методические, так и педагогические цели, а также обусловлена важной ролью этих двух типов кристаллических структур в современных исследованиях, которая, по-видимому, сохранится и в будущем.

При написании книги предполагалось, что читатель обладает некоторыми знаниями по теории групп (которые могут быть почерпнуты в учебниках [1—3]), но не является специалистом в этой области. В частности, материал, доступный в литературе, лишь кратко упоминается, а не рассматривается подробно. Аналогичным образом предполагается знакомство читателя с основными сведениями по динамике решетки, имеющимися в широко известных книгах по этому вопросу [4—6].

Настоящая книга должна заполнить существующий пробел в литературе; по содержанию она связана с некоторыми близкими по теме книгами. Обсуждение теории представлений и копредставлений пространственных групп дает метод рассмотрения групп симметрии кристаллов, описанных ранее в книге по кристаллографии [7]. Этот метод необходим для получения важных в современной физике выводов, таких, как правила отбора для оптических и других переходов. Выполненный анализ влияния симметрии на динамику решетки является по существу продолжением рассмотрения, проведенного в работах [4—6]. Изложение теории взаимодействия излучения с веществом близко смыкается с обсуждением фононов и оптических процессов на основе теории многих тел в книгах [8,9]. Однако мы концентрируем внимание на вопросах, подлежащих анализу с точки зрения симметрии, таких, как структура ангармонического гамильтониана фононов, вопрос о смешивании колебаний и влиянии симметрии на структуру температурных фононных функций Грина. Благодаря углублению теоретического анализа и прогрессу в технике экспериментальных измерений достигнут существенный прогресс со времени издания более ранних обзоров по интерпретации инфракрасных спектров [10] и спектров комбинационного рассеяния [11]. Параллельно с углублением понимания свойств симметрии возрастает наше понимание динамической, микроскопической природы явлений, происходящих при взаимодействии света с веществом.

В заключение сделаем некоторые замечания о характере изложения. Мы сознательно отказались от лаконичного стиля изложения теории. Это обусловлено нашим желанием добиться повсюду в этой монографии точности и конкретности, даже в ущерб краткости и изяществу изложения. Мы не останавливались перед тем, чтобы дать подробное объяснение или вывод со всеми выкладками, если мы считали это необходимым. При решении вопроса о том, следует ли данный конкретный вопрос рассматривать во всех деталях, мы руководствовались тем, имеется ли в литературе его изложение в ясной форме, а также практикой обсуждения вопроса с коллегами. Мы предпочли показаться излишне многословными, чем быть настолько краткими, чтобы существовала возможность оказаться непонятными. Если изложение каких-то вопросов покажется некоторым читателям слишком подробным, мы надеемся, что эти пояснения, касающиеся стиля, будут достаточными, чтобы сохранить их интерес к проблеме в целом.

§ 2. План книги. Обзор содержания

Вследствие большого объема книги представляется полезным дать обзор ее содержания. Хотя все части изложения взаимосвязаны, главные разделы, отмеченные в § 1, в известной степени независимы, и их можно читать более или менее раздельно, обращаясь по мере необходимости к вопросам, рассмотренным ранее.

Книга разбита на параграфы, пронумерованные от 1 до 154. Параграфы сгруппированы в 17 глав. Формулы нумеруются в пределах каждого параграфа. Следует отметить, что первый параграф каждой главы представляет собой введение в эту главу. Введения служат нескольким целям. Они предназначены для пояснения основных особенностей последующего рассмотрения, обеспечивают ориентацию и последовательность изложения, а также устанавливают детальные взаимосвязи между параграфами и главами. Обычно несколько глав, взятые вместе, содержат изложение одной из основных тем.

В главах 2—7 и 9 излагается теория пространственных групп. В гл. 2 дается описание структуры кристаллических пространственных групп $\mathfrak{G}$ как групп симметрии трехмерного пространства кристалла. Особое внимание уделяется математической структуре кристаллических пространственных групп. Мы не приводим полного описания 230 пространственных групп, так как оно вместе с иллюстрациями имеется в литературе. В гл. 3 дается обзор стандартного материала по теории представлений конечных групп. Хотя этот материал широко известен, он необходим нам как основа для изложения теории представлений пространственных групп. В гл. 4 излагается теория представлений группы трансляций $\mathfrak{T}$. Неприводимые представления групп трансляций кристалла играют центральную роль в теории, поэтому важно рассмотреть их надлежащим образом, а также правильно ввести понятие первой зоны Бриллюэна. Далее в гл. 5 дается детальный вывод построения и свойств неприводимых представлений и векторных пространств кристаллической пространственной группы $\mathfrak{G}$. Этот материал оказывается центральным для характеристики собственных функций и собственных значений при их классификации по симметрии. Рассмотрение в главах 6 и 7 посвящено определению коэффициентов приведения для пространственных групп. Эти коэффициенты приведения являются основными входящими в рассмотрение величинами при определении правил отбора. С математической точки зрения они являются коэффициентами рядов Клебша — Гордана в разложении прямого произведения неприводимых представлений двух пространственных групп.

На этой стадии мы прерываем изложение теории групп и обращаемся к обсуждению классической теории колебаний решетки. После получения уравнений движения в гармоническом приближении в гл. 8 мы применяем теоретико-групповой анализ для того, чтобы продемонстрировать следующее положение: собственные векторы образуют линейное векторное пространство представления накрывающей группы, т. е. группы симметрии $\mathfrak{G}$. Затем, в гл. 9, мы излагаем теорию влияния антиунитарной симметрии. Вследствие сравнительно малой известности этого вопроса мы довольно подробно останавливаемся на анализе пространственно-временной группы симметрии $\mathcal{G}$, которая содержит обычные унитарные операторы пространственной симметрии плюс антиунитарные операторы, включающие операцию обращения времени. Полезно подчеркнуть, что в этом случае мы должны рассматривать математическую группу операторов симметрии, полученную непосредственно из динамических уравнений, а не из простых геометрических соображений. Антиунитарная симметрия приводит к новым результатам для динамики решетки: физические собственные векторы образуют линейное векторное пространство для копредставлений пространственно-временной группы $\mathcal{G}$. (В математической литературе копредставления известны также как полулинейные представления.)

Изложению классической и квантовой теории динамики решетки посвящены главы 8, 10, 11 и 12. Сначала в гл. 8 дается обзор классической теории колебаний решетки в гармоническом приближении; изложение основано на использовании симметрии при определении собственных векторов. Наиболее важным с точки зрения приложений представляется утверждение, сформулированное в § 85 в виде «леммы о существенном вырождении», позволяющее связать физическую теорию с теорией симметрии. Это утверждение, состоящее в том, что допустимое вырождение собственных значений и собственных векторов в физической системе является следствием симметрии этой системы, формулируется в физике неоднократно и дает ключ к пониманию многих различных ситуаций. Здесь оно возникает простым и естественным образом в легко изучаемой задаче о классической динамике решетки. В действительности это утверждение вполне общее и его применимость выходит за рамки гармонического приближения.

В гл. 10 на основе теории представлений изучаются и систематизируются различные вопросы классической динамики решетки. Рассмотрение включает теорию инвариантов, вычисление тензоров, влияние ангармонизма и обсуждение того, как, используя свойства симметрии, определить собственные векторы нормальных колебаний и, таким образом, факторизовать динамическую матрицу. Изложение квантовой динамики решетки в гл. 11 следует традиционному рассмотрению в рамках адиабатического приближения Борна — Оппенгеймера. Однако, развивая традиционное рассмотрение, мы строим здесь параллельно теорию симметрии собственных функций. Преобразование собственных функций решетки при преобразованиях симметрии дает удобный способ характеристики основного и возбужденных состояний системы связанных гармонических осцилляторов решетки. Такое рассмотрение позволяет также исследовать интересную внутреннюю связь между теорией симметрии системы, имеющей пространственную группу $\mathfrak{G}$ или пространственно-временную группу $\mathcal{G}$, и теорией симметрии системы тождественных частиц относительно перестановок. Последняя, по существу, описывается группой типа $SU(n)$. К сожалению, развитие теории копредставлений еще не достигло того уровня, когда все эти результаты могут быть получены из более общего рассмотрения. Резюмируя, можно сказать, что центральным вопросом излагаемой теории является классификация каждого классического или квантового состояния решетки по типу его поведения при преобразованиях симметрии или, более точно, характеристика состояния с помощью неприводимого представления или неприводимого линейного векторного пространства, которому принадлежит состояние.

Главный вопрос, рассматриваемый в гл. 12, представляет собой центральную тему книги — теорию взаимодействия излучения с веществом. Мы излагаем эту теорию, уделяя особое внимание процессам инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света решеткой. Сначала дается вывод методами квантовой механики с использованием обычной теории возмущений. Такое рассмотрение позволяет проанализировать оптическне процессы посредством анализа матричных элементов переходов для процессов инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния. В этом анализе основную роль с точки зрения теории симметрии играет теорема Вигнер — Эккарта, позволяющая установить отличные от нуля матричные элементы переходов. Теперь в нашем распоряжении имеются все необходимые сведения: симметрия начального и конечного состояния кристаллической решетки, а также симметрия оператора перехода. Определяя коэффициенты приведения, можно довести рассмотрение до конца и установить правила отбора. Это рассмотрение дает пример прямого, конкретного, легко обозримого и используемого приложения теории симметрии. Кроме того, применение правил отбора для интерпретации решеточных спектров представляет собой одну из наиболее полезных глав книги.

Затем мы кратко обсуждаем применение современных теорий многих тел для рассмотрения инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света решеткой методом температурных функций Грина или функций отклика. Мы делаем это для установления связи с некоторыми работами, ведущимися в настоящее время, а также, чтобы хотя бы коротко продемонстрировать использование симметрии и в этой области теории. В заключение дается краткое введение в одно из наиболее быстро развивающихся современных направлений, а именно в микроскопическую теорию оптических решеточных явлений. Переход к изучению процессов комбинационного рассеяния вблизи «резонанса» позволяет достигнуть больших результатов как в интерпретации экспериментальных данных, так и в теории этих явлений. Аналогичным образом, инфракрасная спектроскопия высокого разрешения открывает огромное количество деталей, доступных для интерпретации. Наше рассмотрение имеет целью дать общее представление об этой развивающейся области исследований.

Последняя важная задача применения общей теории симметрии к структурам алмаза и каменной соли рассмотрена в гл. 13—15. Как пояснялось в предыдущем параграфе, мы преследуем здесь двойную цель: проиллюстрировать применение теории на важных и распространенных системах, а также дать достаточно ясное обсуждение, чтобы читатель мог научиться применять теорию к любой другой системе, выбранной им самим. В гл. 15 рассматриваются неидеальные кристаллы с точечными дефектами, причем особое внимание уделено тем оптическим свойствам, которые обусловлены симметрией. И в этом случае теория применяется к рассмотрению кристаллов со структурой алмаза и каменной соли.

В заключение несколько слов о ссылках на литературу. Автор столкнулся с абсолютной невозможностью дать полные и подробные ссылки на всех многочисленных ученых, даже непосредственно работающих над задачами, составляющими основную тематику данной книги. Автор попытался произвести разумный отбор ссылок, чтобы помочь читателю найти собственный подход к литературе. Заинтересованный читатель легко сможет, руководствуясь последовательностью ссылок, углубиться в современные и предшествующие работы по выбранной им теме. Я старался быть полезным, снабжая читателя исходными указаниями или ссылками на труды международных конференций и подобные им издания. Мне самому приходилось производить отбор при использовании литературы, и я часто ссылаюсь на работы, которые оказались для меня полезными, в надежде, что они окажутся полезными также и для читателя. Однако я определенно не имел намерений ни игнорировать кого-либо из исследователей, ни исказить историческую последовательность или приоритет исследований.

ГЛАВА 2

Кристаллические пространственные группы

§ 3. Симметрия кристалла

В этой главе вводятся основные понятия, связанные с симметрией кристалла в конфигурационном пространстве [7, 12, 13, 16, 17].

Кристалл представляет собой трехмерное регулярное множество составляющих его элементов: нейтральных атомов, заряженных ионов, молекулярных комплексов и т. п. Операция симметрии или преобразование симметрии кристалла — это перестройка, взаимный обмен или перестановка составляющих элементов, которая оставляет неизменными, или инвариантными, относительные положения этих элементов и, таким образом, дает эквивалентный в отношении их ориентации кристалл.

Операция симметрии в конфигурационном пространстве может соответствовать «реальному», т. е. фактически выполнимому, преобразованию, такому, как поворот кристалла как целого вокруг некоторой оси в конфигурационном пространстве, совмещающий эквивалентные направления целого кристалла. С другой стороны, такая операция может соответствовать «воображаемому» преобразованию, такому, как инверсия положений всех атомов относительно некоторой фиксированной точки. При преобразовании симметрии возникает другой кристалл, который мы будем называть репликой исходного кристалла. Термин «реплика», который будет иногда использоваться, предназначен для передачи степени соответствия между исходным и преобразованным объектами, которая слабее, чем тождество, но сильнее, чем подобие. Реплика может быть наложена на исходный кристалл. Она имеет ту же ориентацию, что и исходный кристалл, по отношению к фиксированным внешним осям. Рассматриваемое преобразование на языке математики представляет собой конгруэнтное отображение кристалла на самого себя. Конкруэнтное отображение кристалла на самого себя дает реплику. Обратное утверждение *неверно*: не все конгруэнтные отображения, или превращения являются операциями симметрии.

Основным свойством симметрии кристалла является пространственная периодичность, которая характеризует расположение составляющих элементов. Трансляционная симметрия означает, что за начало координат можно выбрать любой узел, содержащий атом данного сорта, так как все такие атомы эквивалентны. При любом выборе начала координат должны получаться тождественные физические результаты. Очевидно, если кристалл содержит несколько сортов атомов или ионов (например KCl, NaCl), то эквивалентные атомы или ионы образуют подрешетку. Атомы подрешетки связаны между собой свойством эквивалентности при операциях трансляционной симметрии. Имеются также кристаллы, содержащие один химический элемент, для которых, однако, химическая тождественность атомов не означает структурную эквивалентность. В результате кристаллического упорядочения химически тождественные составляющие элементы, такие, как два атома Ge, могут принадлежать к различным трансляционным подрешеткам. При этом только атомы в пределах одной из подрешеток эквивалентны по отношению к трансляциям. В этом случае говорят, что кристалл имеет базис. В случае атомного кристалла, все атомы которого эквивалентны по отношению к трансляциям, кристаллическая решетка совпадает с решеткой Бравэ [7, 12, 13, 16].

Кроме конкретной трансляционной симметрии кристалл может иметь также симметрию относительно поворотов. В этом случае «бремя совместности» ложится целиком на элемент поворотной симметрии: он должен быть совместим с имеющейся трансляционной симметрией.

Далее, следствием определенного расположения элементов может быть наличие составных операций симметрии, состоящих из поворотов и нетривиальных трансляций. Такие плоскости скольжения или винтовые оси дают существенно новые преобразования. Разумеется любая допустимая операция поворотной симметрии может сочетаться с полной трансляцией решетки, давая составную операцию симметрии.

Совокупность поворотных, трансляционных и составных операций симметрии образует пространственную группу кристалла $\mathfrak{G}$. Перейдем теперь к обсуждению математической структуры и теории таких групп.

Математическая характеристика различных преобразований симметрии, входящих в пространственные группы, состоит в том, что они являются линейными, вещественными, неоднородными, дискретными (специальными аффинными) преобразованиями трехмерного евклидова пространства. Аффинное преобразование можно понимать как преобразование, переводящее одну точку в трехмерном пространстве в другую точку в трехмерном пространстве (активная интерпретация). С другой стороны, аффинное преобразование можно истолковывать как преобразование координат фиксированной точки в результате изменения системы координат, используемой для описания точки (пассивная интерпретация). В любой интерпретации это преобразование отражает «сопоставление» точки, координаты которой в прямолинейной системе координат есть (x_1, x_2, x_3), с точкой, имеющей координаты (x'_1, x'_2, x'_3). Такое сопоставление двух точек или двух троек чисел (компонент) задается преобразованием. Наиболее общее преобразование, допустимое для кристалла, имеет вид

$$\begin{aligned} x'_1 &= \varphi_{11}x_1 + \varphi_{12}x_2 + \varphi_{13}x_3 + t_1(\varphi_{ij}), \\ x'_2 &= \varphi_{21}x_1 + \varphi_{22}x_2 + \varphi_{23}x_3 + t_2(\varphi_{ij}), \\ x'_3 &= \varphi_{31}x_1 + \varphi_{32}x_2 + \varphi_{33}x_3 + t_3(\varphi_{ij}), \end{aligned} \tag{3.1}$$

где φ_{ij} — вещественные константы, а t_k — вещественные величины, которые могут зависеть от набора φ_{ij}. Среди всех афинных преобразований (3.1), связывающих тройки чисел (x_1, x_2, x_3) с тройками чисел (x'_1, x'_2, x'_3), выберем те, которые а) оставляют инвариантным квадрат расстояния между любыми двумя точками, т. е. метрику, и б) совместимы с определением решетки.

Пусть координаты двух точек до преобразования были (x_1, x_2, x_3) и (y_1, y_2, y_3) в декартовой системе координат. Квадрат расстояния между этими точками равен

$$d^2 = (x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2. \tag{3.2}$$

При аффинном преобразовании (3.1) тройка чисел (y_1, y_2, y_3) также преобразуется по закону

$$\begin{aligned} y'_1 &= \varphi_{11}y_1 + \varphi_{12}y_2 + \varphi_{13}y_3 + t_1(\varphi_{ij}), \\ y'_2 &= \varphi_{21}y_1 + \varphi_{22}y_2 + \varphi_{23}y_3 + t_2(\varphi_{ij}), \\ y'_3 &= \varphi_{31}y_1 + \varphi_{32}y_2 + \varphi_{33}y_3 + t_3(\varphi_{ij}), \end{aligned} \tag{3.3}$$

где φ_{ij} и t_k в (3.1) и (3.3) тождественно равны. Таким образом, инвариантность квадрата расстояния относительно преобразования записывается в виде

$$d'^2 = (x'_1 - y'_1)^2 + (x'_2 - y'_2)^2 + (x'_3 - y'_3)^2 = d^2. \tag{3.4}$$

Очевидно, (3.4) накладывает ограничение на возможный вид φ_{ij}. Это ограничение состоит в том, что однородное преобразование должно быть ортогональным при $t_k = 0$. (Ниже мы проанализируем ограничение, следующее из ортогональности, несколько подробнее: оно принимает разные формы в декартовых и недекартовых осях.)

Определение решетки (пункт «б») накладывает ограничения на некоторые из трансляций $t_k(\varphi_{ij})$. Наиболее важным является ограничение, возникающее из чисто трансляционной симметрии. Для чистой трансляции отличны от нуля только диагональные элементы φ, причем $\varphi_{jj}=1$, так что для чистых трансляций (3.1) принимает вид

$$x_j' = x_j + t_j(\varphi_{ij}=\delta_{ij}). \qquad (3.5)$$

Тогда ограничение на t_j состоит в том, что

$$t_j(\varphi_{ij}=\delta_{ij}) \quad \text{есть целое число.} \qquad (3.6)$$

Определение кристаллической решетки подразумевает, что она может быть воспроизведена одними целыми чистыми трансляциями [12].

Другие ограничения на возможные φ_{ij} и t_k (φ_{ij}) обусловлены тем, что все элементы симметрии должны быть взаимно согласованы. Например, хорошо известное следствие требования совместности состоит в том, что все допустимые трехмерные вращения сводятся к поворотам на углы $2\pi/n$, где $n=1, 2, 3, 4, 6$; $n=5$ исключается [12]; см. ниже (6.19).

§ 4. Подгруппа трансляций кристалла

Введем три линейно независимых вектора в пространстве кристалла $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$. Они могут быть выбраны различными способами, определяемыми соображениями общепринятости, удобства для данного конкретного случая и т. п. Будем считать, что во всех интересующих нас случаях этот выбор был сделан априори, следуя международному стандарту [12]. Модули этих векторов равны $|\boldsymbol{a}_j| = a_j$. Следовательно, векторы характеризуются длиной. Предположим, что начало координат выбрано в точке 0. Обычно условия, определяющие выбор начала координат и выбор векторов $\boldsymbol{a}_j$, формулируются одновременно и из одних и тех же соображений.

Предположим теперь, что начало координат 0 совпадает с узлом, в котором находится атом или ион. Тогда вектор, соединяющий точку 0 с произвольной точкой кристалла, представляется в виде

$$\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + x_3\boldsymbol{a}_3, \qquad (4.1)$$

где x_j — произвольные вещественные числа (безразмерные). Таким образом, тройка действительных чисел (x_1, x_2, x_3) определяет компоненты вектора $\boldsymbol{r}$ в системе координат, заданной векторами $(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3)$. Рассмотрим вектор

$$\boldsymbol{R}_L \equiv l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3, \qquad (4.2)$$

где l_j — действительные числа. Вектор такого вида называется вектором решетки в кристаллическом пространстве. Набор всех векторов решетки в кристаллическом пространстве соответствует выбору в качестве допустимых значений l_j всех действительных целых чисел.

Рассмотрим элементарную трансляцию решетки. Определим ее как такое преобразование, при котором вектор $\boldsymbol{r}$ переходит в вектор $\boldsymbol{r}'$, где

$$\boldsymbol{r}' = x_1'\boldsymbol{a}_1 + x_2'\boldsymbol{a}_2 + x_3'\boldsymbol{a}_3 \tag{4.3}$$

и

$$x_1' = x + l_1, \quad x_2' = x_2 + l_2, \quad x_3' = x_3 + l_3, \tag{4.4}$$

или

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_L. \tag{4.5}$$

Согласно определению решетки, единственное чисто трансляционное (конгруэнтное) преобразование симметрии, которое может иметь кристалл, — это трансляция на вектор решетки $\boldsymbol{R}_L$. Следовательно, (4.5) можно понимать как преобразование, связывающее две эквивалентные точки $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$. Это значит, что физические свойства кристалла, определенные в точках $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$, должны быть одинаковыми.

а. Операторы трансляции $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$. Для обозначения преобразования (4.5), а затем и более общего преобразования (3.1) оказывается удобным определить оператор $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$, задаваемый двумя символами. В этом параграфе первый символ не является необходимым, но он будет сохранен для последовательности изложения, а также для использования в дальнейшем. Оператор трансляции определяется соотношением

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_L. \tag{4.6}$$

Из (4.6) следует, что оператор, обратный $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$, можно определить соотношением

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1} \equiv \{\varepsilon\,|\,-\boldsymbol{R}_L\}, \tag{4.7}$$

где

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_L. \tag{4.8}$$

Таким образом,

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_L$$

и, подставляя $\boldsymbol{r}'$ из (4.6), получаем

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}\cdot\boldsymbol{r} = \{\varepsilon\,|\,\mathrm{R}_L\}\cdot\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}. \tag{4.9}$$

Следовательно, если ввести оператор тождественного (без трансляции) преобразования $\{\varepsilon\,|\,0\}$, где

$$\{\varepsilon\,|\,0\}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}, \tag{4.10}$$

то

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1} = \{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon\,|\,0\}. \tag{4.11}$$

Очевидно, теперь можно перейти к правилу последовательного выполнения двух операций трансляции. Так, если

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_L,$$

то

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}'' = \boldsymbol{r}' + \boldsymbol{R}_L = \boldsymbol{r} + 2\boldsymbol{R}_L, \tag{4.12}$$

или

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid 2\boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^2. \tag{4.13}$$

Следовательно, если $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}$ определяется согласно (4.6) и если ввести

$$\boldsymbol{R}_M = m_1\boldsymbol{a}_1 + m_2\boldsymbol{a}_2 + m_3\boldsymbol{a}_3, \tag{4.14}$$

где m_l — целые числа, и

$$\boldsymbol{R}_N = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3, \tag{4.15}$$

где n_l — целые числа (так что $\boldsymbol{R}_M$ и $\boldsymbol{R}_N$ — векторы решетки), то можно рассмотреть операторы

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_M, \tag{4.16}$$

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_N\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_N. \tag{4.17}$$

Очевидно, общее правило произведения (последовательного действия) этих операторов имеет вид

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_L) = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M \tag{4.18}$$

и

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M + \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M\}. \tag{4.19}$$

Если принять

$$\boldsymbol{R}_{M+L} \equiv \boldsymbol{R}_{L+M} = \boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M, \tag{4.20}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{M+L} = (m_1 + l_1)\boldsymbol{a}_1 + (m_2 + l_2)\boldsymbol{a}_2 + (m_3 + l_3)\boldsymbol{a}_3, \tag{4.21}$$

то, очевидно, $\boldsymbol{R}_{M+L}$, так же как $\boldsymbol{R}_L$ и $\boldsymbol{R}_M$, является вектором решетки. Таким образом, из (4.18) имеем

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L+M}\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\}. \tag{4.22}$$

Наконец, используя (4.18) и (4.22), легко показать, что

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_N\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{M+L}\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{N+M}\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}, \tag{4.23}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{N+M} = (n_1 + m_1)\boldsymbol{a}_1 + (n_2 + m_2)\boldsymbol{a}_2 + (n_3 + m_3)\boldsymbol{a}_3. \tag{4.24}$$

Заметим, что вследствие свойства простой аддитивности трансляций можно привести (4.23) к виду

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_N\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{M+L}\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{N+M+L}\}. \tag{4.25}$$

б. Группа трансляций $\mathfrak{T}$. Подведем итог. Операторы $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$ определены формулой (4.6). Оператор определен через его действие на вектор $\boldsymbol{r}$ в кристаллическом пространстве. Каждому вектору решетки $\boldsymbol{R}_L$ можно сопоставить соответствующий ему оператор трансляции $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}$. Так как вектором решетки является любой вектор вида (4.2) при $-\infty < l_j < +\infty$, ясно, что произведение двух операторов трансляции решетки дает оператор трансляции решетки. В совокупности операторов трансляции (4.6) имеется один с особыми свойствами — это оператор тождественного преобразования. Каждому оператору трансляции может быть сопоставлен другой оператор (обратный ему) таким образом, что произведение таких двух операторов дает оператор тождественного преобразования [см. (4.7)]. Наконец, произведение (последовательное применение) операторов трансляции обладает математическим свойством ассоциативности [см. (4.23)].

Таким образом, совокупность всех операторов трансляции $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}$ образует группу [1—3]. Эту группу мы будем обозначать $\mathfrak{T}$ и называть группой операторов трансляции кристалла. Некоторые свойства этой группы, являющиеся прямым следствием аддитивности векторов решетки, приводят к следствиям, важным для всего последующего рассмотрения.

Рассмотрим три вектора

$$\boldsymbol{R}_1 \equiv \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{R}_2 = \boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{R}_3 = \boldsymbol{a}_3, \tag{4.26}$$

которым соответствуют операторы

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\}, \quad \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_2\}, \quad \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_3\}. \tag{4.27}$$

Заметим, что

$$\{\varepsilon \mid l_1\boldsymbol{a}_1\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\}^{l_1}, \tag{4.28}$$

$$\{\varepsilon \mid l_2\boldsymbol{a}_2\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_2\}^{l_2}, \tag{4.29}$$

$$\{\varepsilon \mid l_3\boldsymbol{a}_3\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_3\}^{l_3}. \tag{4.30}$$

Следовательно,

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3\} = \tag{4.31}$$

$$= \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}^{l_1} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_2\}^{l_2} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_3\}^{l_3}. \tag{4.32}$$

в. Структура группы $\mathfrak{T}$. Из вышеизложенного следует, что группа $\mathfrak{T}$ является прямым произведением. Если определить $\mathfrak{T}_1$, группу, состоящую из всех операторов трансляции, построенных на $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\}$, т. е.

$$\{\varepsilon \mid l_1\boldsymbol{a}_1\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}^{l_1} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\}^{l_1} \tag{4.33}$$

для всех l_1, и аналогичным образом $\mathfrak{T}_2$ и $\mathfrak{T}_3$, то легко заметить, что

$$\mathfrak{T} = \mathfrak{T}_1 \otimes \mathfrak{T}_2 \otimes \mathfrak{T}_3. \tag{4.34}$$

Каждая из групп $\mathfrak{T}_1$, $\mathfrak{T}_2$ и $\mathfrak{T}_3$ является группой трансляций. Каждая группа в отдельности порождается одним элементом $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\}$, $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_2\}$ и $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_3\}$ соответственно и степенями этого элемента.

Очевидно, каждая из групп $\mathfrak{T}_1$, $\mathfrak{T}_2$ и $\mathfrak{T}_3$ является абелевой группой с одним образующим элементом. Поскольку

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_2\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_2\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_1\} \quad \text{и т. д.,} \tag{4.35}$$

все образующие элементы коммутируют; следовательно, группа $\mathfrak{T}$ — абелева группа и является прямым произведением.

Ясно, что, поскольку область возможных значений l_j охватывает все вещественные целые числа, число элементов, или порядок каждой из групп $\mathfrak{T}_1$, $\mathfrak{T}_2$ и $\mathfrak{T}_3$, бесконечно, а группа $\mathfrak{T}$ имеет трижды бесконечный порядок. С физической точки зрения оказывается неудобным рассматривать группы бесконечного порядка. Поэтому на этой стадии обычно вводятся периодические граничные условия Борна — Кармана.

г. Граничные условия Борна — Кармана [18, 19]. Рассмотрим группу $\mathfrak{T}_1$ и составляющие ее трансляции. Предположим, что имеется большое положительное число N_1, такое, что точки $\boldsymbol{r} - N_1\boldsymbol{a}_1$ и $\boldsymbol{r} + N_1\boldsymbol{a}_1$ в пространстве кристалла тождественны. Такая тождественность могла бы выполняться строго только в том случае, если кристалл в направлении $\boldsymbol{a}_1$ был бы кольцом. Однако если число N_1 достаточно велико, это предположение можно понимать как предположение о том, что кристалл разбивается на большие блоки, или основные области. Эти большие блоки повторяются так, чтобы воспроизвести весь кристалл. Поскольку расстояние между точками $\boldsymbol{r} - N_1\boldsymbol{a}_1$ и $\boldsymbol{r} + N_1\boldsymbol{a}_1$ составляет $2N_1$ шагов длиной $\boldsymbol{a}_1$ граничные условия Борна — Кармана можно записать в виде

$$\boldsymbol{r} - N_1\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{r} + N_1\boldsymbol{a}_1, \tag{4.36}$$

или

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + 2N_1\boldsymbol{a}_1. \tag{4.37}$$

Далее (4.37) можно переписать в операторной форме:

$$\{\varepsilon \mid 0\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid 2N_1\boldsymbol{a}_1\} \cdot \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}^{2N_1} \cdot \boldsymbol{r}. \tag{4.38}$$

Аналогичным образом пусть N_2 и N_3 — большие положительные числа, такие, что для произвольного $\boldsymbol{r}$

$$\{\varepsilon \mid 0\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid 2N_2\boldsymbol{a}_2\} \cdot \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_2\}^{2N_2} \cdot \boldsymbol{r}, \tag{4.39}$$

$$\{\varepsilon \mid 0\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid 2N_3\boldsymbol{a}_3\} \cdot \boldsymbol{r} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_3\}^{2N_3} \cdot \boldsymbol{r}. \tag{4.40}$$

Следовательно,

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}^{2N_1} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_2\}^{2N_2} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_3\}^{2N_3} = \{\varepsilon \mid 0\}. \tag{4.41}$$

Так как $\{\varepsilon \mid 0\}$ есть тождественный элемент в группах $\mathfrak{T}_1$, $\mathfrak{T}_2$, $\mathfrak{T}_3$ или $\mathfrak{T}$, то становится ясно, что условие Борна — Кармана фактически обращает группы бесконечного порядка в группы конечного (но большого) порядка. Возможна эквивалентная формулировка этого результата через допустимые значения, которые могут принимать индексы l_j. А именно: вектор решетки в кристаллическом пространстве, согласующийся с периодическим граничным условием Борна — Кармана, $\boldsymbol{R}_L$, можно теперь определить как

$$\boldsymbol{R}_L = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3, \quad \text{где} \quad -N_j < l_j \leqslant N_j, \tag{4.42}$$

и

$$\boldsymbol{R}_L + 2N_1\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{R}_L + 2N_2\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{R}_L + 2N_3\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{R}_L. \tag{4.43}$$

Очевидно, $\mathfrak{T}_1$ следует теперь рассматривать как абелеву группу порядка $2N_1$ с одним образующим элементом $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}$; это относится и к группам $\mathfrak{T}_2$ и $\mathfrak{T}_3$. Полную трансляционную группу $\mathfrak{T}$ следует рассматривать как абелеву группу с тремя образующими элементами, имеющую порядок N, где

$$N \equiv (2N_1)(2N_2)(2N_3) = 8N_1N_2N_3. \tag{4.44}$$

Другими словами, $\mathfrak{T}$ является прямым произведением абелевых подгрупп, на что и указывает (4.34).

д. **Свойство оператора $\{\varepsilon|\boldsymbol{t}\}$.** Из (4.6) видно что операторы $\{\varepsilon|\boldsymbol{t}\}$, если их применить к разности векторов $\boldsymbol{r}$, определены неполно. Действительно,

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}, \tag{4.45}$$

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}' + \boldsymbol{t}, \tag{4.46}$$

так что

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r} - \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'. \tag{4.47}$$

Но для $\rho \equiv \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$ имеем

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \rho = \rho + \boldsymbol{t}, \tag{4.48}$$

так что

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') + \boldsymbol{t}. \tag{4.49}$$

Таким образом,

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r} - \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r}' \neq \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}\} \cdot (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{4.50}$$

Поэтому следует различать операции (4.47) и (4.49). Это различие становится ясным, если рассмотреть физический смысл преобразования. Если мы хотим произвести жесткий сдвиг двух точек $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$ на равную величину $\boldsymbol{t}$, при котором сохраняется (или остается инвариантным) расстояние $\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$, то следует воспользоваться операцией (4.47). Если же требуется произвести жесткое смешение вектора $\boldsymbol{\rho} \equiv \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$, то нужно пользоваться (4.49). Этот вопрос не должен вызывать затруднений.

§ 5. Элементы поворотной симметрии: точечная группа кристалла

Рассмотрим случай простого кубического кристалла. Тогда в качестве векторов $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ из (4.1) можно взять тройку взаимно ортогональных векторов равной длины, так что $\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{a}_j = a_2\delta_{ij}$ и $|\boldsymbol{a}_i| = a$. Далее, рассматривая матрицу преобразования φ в декартовых координатах, запишем ее матричные элементы в виде $(\varphi)_{ij} = \varphi_{ij}$. Требование ортогональности φ следующее из (3.4), приводит к ограничениям, накладываемым на транспонированную матрицу $\tilde{\varphi}$ с элементами $(\tilde{\varphi})_{ij} = \tilde{\varphi}_{ij}$;

$$\varphi\cdot\tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}\cdot\varphi = \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{5.1}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — единичная матрица с размерами (3×3):

$$(\boldsymbol{\varepsilon})_{ij} = \delta_{ij}. \tag{5.2}$$

Вычисляя детерминант правой и левой частей (5.1), получаем

$$\det\varphi\cdot\tilde{\varphi} = (\det\varphi)^2 = 1, \tag{5.3}$$

или

$$\det\varphi = \pm 1. \tag{5.4}$$

Для собственных вращений

$$\det\varphi = +1 \quad \text{(собственные вращения)}. \tag{5.5}$$

Для несобственных вращений (или отражений)

$$\det\varphi = -1 \quad \text{(несобственные вращения)}. \tag{5.6}$$

В общем случае вращение может быть и собственным, и несобственным; мы будем их различать по мере необходимости.

Хорошо известно [1], что заданная вещественная унитарная (или ортогональная) матрица с помощью ортогонального преобразования может быть приведена к виду

$$\varphi = \pm\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5.7}$$

Как будет показано ниже, из требования совместности поворотов φ и трансляций решетки с необходимостью следует

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}, \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6. \tag{5.8}$$

Отметим, что преобразование, приводящее одну из матриц φ набора преобразований симметрии к виду (5.7), вообще говоря, не будет приводить к такому же виду какую-либо другую матрицу φ', даже из того же набора.

а. Операторы поворотов $\{\varphi|0\}$. Оператор $\{\varphi|0\}$ можно определить соотношением

$$\{\varphi|0\}\cdot \boldsymbol{r} \equiv \varphi\cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}', \tag{5.9}$$

где

$$\varphi\cdot \boldsymbol{r} = x_1'\boldsymbol{a}_1 + x_2'\boldsymbol{a}_2 + x_3'\boldsymbol{a}_3, \tag{5.10}$$

а x_1', x_2', x_3' определены соотношениями, аналогичными (3.1), но с $\boldsymbol{t}_l(\varphi)=0$:

$$x_1' = \varphi_{11}x_1 + \varphi_{12}x_2 + \varphi_{13}x_3,$$
$$x_2' = \varphi_{21}x_1 + \varphi_{22}x_2 + \varphi_{23}x_3,$$
$$x_3' = \varphi_{31}x_1 + \varphi_{32}x_2 + \varphi_{33}x_3.$$

Обратное вращение φ^{-1} обладает тем свойством, что для ортогональной матрицы $\varphi^{-1}=\tilde{\varphi}$, так что $\varphi^{-1}\cdot\varphi=\varepsilon$ аналогично (5.1). Соответственно в операторных обозначениях

$$\{\varphi|0\}^{-1} = \{\varphi^{-1}|0\} \tag{5.11}$$

и

$$\{\varphi|0\}^{-1}\cdot\{\varphi|0\} = \{\varphi^{-1}\cdot\varphi|0\} = \{\varepsilon|0\}, \tag{5.12}$$

где $\{\varepsilon\,|\,0\}$ — тождественное преобразование (4.10).

Для каждого конкретного кристалла в общем случае имеется целая совокупность матриц φ_σ, соответствующих преобразованию типа (3.1), которую мы обозначим

$$\varepsilon,\ \varphi_3,\ \varphi_3,\ \ldots,\ \varphi_p. \tag{5.13}$$

Каждая из матриц φ_σ вещественна и унитарна, и каждая удовлетворяет условию (5.1). Произведение двух поворотов дает также поворот:

$$\varphi_\sigma\cdot\varphi_\tau = \varphi_{\sigma\tau}. \tag{5.14}$$

В общем случае он принадлежит совокупности (5.13).

б. Точечная группа $\mathfrak{P}$. Полную совокупность различных поворотов, входящих в качестве однородной части в общее преобразование (3.1), будем описывать набором (5.13). Эта совокупность образует группу, которую принято называть точечной группой $\mathfrak{P}$ кристалла. Используя операторные обозначения, мы можем сказать, что набор из p операторов

$$\{\varepsilon|0\},\{\varphi_2|0\},\ \ldots,\ \{\varphi_p|0\} \tag{5.15}$$

составляет группу $\mathfrak{P}$. Очевидно, что правила умножения этих операторов имеют вид

$$\{\varphi_\sigma|0\}\cdot\{\varphi_\tau|0\} = \{\varphi_{\sigma\tau}|0\}, \tag{5.16}$$

где $\{\varphi_{\sigma\tau} \mid 0\}$ принадлежит совокупности (5.15). Заметим, что при этом не утверждается, что любая точка кристалла имеет симметрию $\mathfrak{P}$. Следует подчеркнуть, что $\mathfrak{P}$ является такой совокупностью преобразований общего вида (3.1), которая соответствует поворотам. Совокупность операторов (5.15) удовлетворяет групповым постулатам: в этой совокупности имеется тождественный элемент $\{\varepsilon \mid 0\}$; согласно (5.16), произведение двух операторов относится к этой же совокупности; для каждого оператора имеется обратный оператор; произведение обладает свойством ассоциативности. Следовательно, $\mathfrak{P}$ соответствует математическому понятию группы.

§ 6. Общий элемент симметрии кристалла: пространственная группа $\mathfrak{G}$

а. Оператор $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$. Для обозначения преобразования симметрии общего вида (3.1) введем оператор $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$:

$$\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\} \cdot \boldsymbol{r} = \varphi \cdot \boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}(\varphi) = \boldsymbol{r}'. \tag{6.1}$$

Отметим, что формула (6.1), переписанная в компонентах, совпадает с (3.1). Можно перечислить все операции в наборе или полной совокупности преобразований типа (3.1). Перечисление проще всего выполнить, группируя все операции, содержащие одинаковые повороты:

$$\begin{gathered}
\{\varepsilon \mid 0\},\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\},\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_2\},\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_3\},\ \ldots,\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\},\ \ldots; \\
\{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_2)\},\ \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_2) + \boldsymbol{a}_1\},\ \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_2) + \boldsymbol{a}_2\},\ \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_2) + \boldsymbol{a}_3\},\ \ldots \\
\ldots,\ \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_2) + \boldsymbol{R}_L\},\ \ldots; \qquad (6.2) \\
\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_p)\},\ \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_p) + \boldsymbol{a}_1\},\ \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_p) + \boldsymbol{a}_2\},\ \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_p) + \boldsymbol{a}_3\},\ \ldots \\
\ldots,\ \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi_p) + \boldsymbol{R}_L\},\ \ldots.
\end{gathered}$$

Отметим, что перечисление (6.2) выполнено таким образом, что величина $\boldsymbol{\tau}(\varphi_\sigma)$ определена соотношением

$$\boldsymbol{\tau}(\varphi_\sigma) = \boldsymbol{t}(\varphi_\sigma) - \boldsymbol{R}_L \equiv \boldsymbol{\tau}_\sigma, \tag{6.3}$$

т. е. $\boldsymbol{\tau}(\varphi_\sigma)$ есть наименьшая трансляция, совместимая с поворотом φ_σ и трансляцией на вектор решетки $\boldsymbol{R}_L$. Таким образом, имеются две возможности:

$$\boldsymbol{\tau}(\varphi) \text{ — нулевой вектор} \tag{6.4}$$

или

$$\boldsymbol{\tau}(\varphi) \text{ — вектор трансляции, не являющийся трансляционным вектором решетки.} \tag{6.5}$$

Иными словами, для любой операции пространственной группы трансляционная часть $\boldsymbol{t}(\varphi)$ либо равна одному из векторов решетки $R_L(\varphi)$, либо равна сумме вектора решетки (возможно, нулевого) и вектора трансляции $\tau(\varphi)$, называемого вектором нетривиальной (частичной) трансляции. Перечисление возможных совместных комбинаций φ_σ и $\tau(\varphi_\sigma)$ является задачей кристаллографии; оно приводит к выводу, что существуют всего 230 трехмерных пространственных групп [12, 13]. Будем считать, что эта описательная работа выполнена и ее результатами можно пользоваться по мере надобности. Перейдем теперь к рассмотрению математической структуры пространственных групп и тех их свойств, которые будут необходимы для последующего рассмотрения.

Замечание (см. ниже): выбор $\tau(\varphi)$ может быть неоднозначным, так как может оказаться, что наименьших эквивалентных векторов нетривиальных трансляций несколько, — в таком случае произвольно выбирается один из них.

Пространственная группа $\mathfrak{G}$ — это набор преобразований типа (3.1), переводящих кристалл в его реплику путем конгруэнтного отображения. Иначе можно сказать, что пространственную группу $\mathfrak{G}$ составляет набор операторов преобразований типа (6.1) (каждому преобразованию соответствует один оператор), которые переводят эквивалентные точки $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$ конфигурационного пространства друг в друга.

б. Групповые свойства операторов $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$. Чтобы показать, что совокупность операторов вида (6.1) образует математическую группу, установим сначала результат действия двух последовательных преобразований. Так, если

$$\{\varphi_2\,|\boldsymbol{t}(\varphi_2)\}\cdot\boldsymbol{r}=\varphi_2\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}(\varphi_2)=\boldsymbol{r}' \tag{6.6}$$

и

$$\begin{aligned}\{\varphi_3\,|\boldsymbol{t}(\varphi_3)\}\cdot\boldsymbol{r}'&=\varphi_3\cdot\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{t}(\varphi_3)=\\&=\varphi_3\cdot\varphi_2\cdot\boldsymbol{r}+\varphi_3\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_2)+\boldsymbol{t}(\varphi_3)=\boldsymbol{r}'',\end{aligned} \tag{6.7}$$

то из прямого сопоставления следует

$$\{\varphi_3\,|\boldsymbol{t}(\varphi_3)\}\cdot\{\varphi_2\,|\boldsymbol{t}(\varphi_2)\}=\{\varphi_3\cdot\varphi_2\,|\,\varphi_3\cdot\mathbf{t}(\varphi_2)+\boldsymbol{t}(\varphi_3)\}. \tag{6.8}$$

Итак, произведение операторов $\{\varphi_3\cdot\varphi_2\,|\,\varphi_3\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_2)+\boldsymbol{t}(\varphi_3)\}$, очевидно, является оператором преобразования симметрии с поворотной частью $\varphi_3\cdot\varphi_2$ и трансляционной составляющей $\varphi_3\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_2)+\boldsymbol{t}(\varphi_3)$. Если $\varphi_3\cdot\varphi_2=\varphi_4$, то $\boldsymbol{t}(\varphi_4)=\varphi_3\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_2)+\boldsymbol{t}(\varphi_3)$.

Используя правило умножения (6.8), нетрудно установить вид обратного оператора для произвольного оператора $\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}$. Операция, обратная повороту φ_σ, есть φ_σ^{-1}. Поэтому

$$\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}^{-1}=\{\varphi_\sigma^{-1}|-\varphi_\sigma^{-1}\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}. \tag{6.9}$$

Формулу (6.9) легко проверить:

$$\{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\} \cdot \{\varphi_\sigma^{-1} | -\varphi_\sigma^{-1} \cdot t(\varphi_\sigma)\} =$$
$$= \{\varphi_\sigma \cdot \varphi_\sigma^{-1} | -\varphi_\sigma \cdot \varphi_\sigma^{-1} \cdot t(\varphi_\sigma) + t(\varphi_\sigma)\} = \{\varepsilon | 0\}. \quad (6.10)$$

Заметим, что (6.9) определяет оператор, принадлежащий совокупности (6.1), так как его поворотная часть соответствует повороту, обратному разрешенному повороту, т. е. принадлежит совокупности (5.13), тогда как его трансляционная часть соответствует трансляции на вектор, полученный из вектора $-t(\varphi_\sigma)$ поворотом φ_σ^{-1}.

Наконец, можно убедиться в том, что умножение ассоциативно:

$$\{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\} \cdot \{\varphi_\tau | t(\varphi_\tau)\} \cdot \{\varphi_\mu | t(\varphi_\mu)\} =$$
$$= (\{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\} \cdot \{\varphi_\tau | t(\varphi_\tau)\}) \cdot \{\varphi_\mu | t(\varphi_\mu)\} =$$
$$= \{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\} \cdot (\{\varphi_\tau | t(\varphi_\tau)\} \cdot \{\varphi_\mu | t(\varphi_\mu)\}). \quad (6.11)$$

Резюмируем: совокупность операторов $\{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\}$, определенных согласно (6.1), образует группу [1]. Мы убедились в замкнутости бинарной алгебраической операции (умножения), в существовании тождественного элемента, в существовании обратного элемента и в ассоциативности бинарной алгебраической операции. Далее, вследствие наложения на группу $\mathfrak{T}$ условий Борна — Кармана, группа $\mathfrak{G}$ конечна, т. е. она состоит только из конечного числа операторов.

в. Совместность поворотов и трансляций. Из (6.9) следует, что если в пространственной группе $\mathfrak{G}$ имеется трансляция $t(\varphi_2)$ в качестве трансляционной части сложного элемента симметрии, то в $\mathfrak{G}$ должны входить и дополнительные элементы $\varphi_3 \cdot t(\varphi_2)$, получаемые из $t(\varphi_2)$ посредством поворота. Это позволяет рассматривать и систематизировать совместные операторы вращений и трансляций. Полное исследование условий совместности можно найти в других книгах [7, 12, 13]. Здесь мы отметим лишь один аспект этого вопроса. Если операция $\{\varphi_2 | t(\varphi_2)\}$ является чистой трансляцией $\{\varepsilon | R_L\}$, то

$$\{\varphi_\sigma | t(\varphi_\sigma)\} \cdot \{\varepsilon | R_L\} \cdot \{\varphi_\sigma^{-1} | -\varphi_\sigma^{-1} \cdot t(\varphi_\sigma)\} = \{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot R_L\} \quad (6.12)$$

тоже является трансляцией. Но поворот вектора решетки должен переводить его опять в вектор решетки, поэтому вектор $\varphi_\sigma \cdot R_L$ должен быть вектором решетки:

$$\varphi_\sigma \cdot R_L = R_{L'}, \quad (6.13)$$

и в компонентах

$$\sum_j (\varphi_\sigma)_{ij} l_j = l'_i, \tag{6.14}$$

где l_j, l'_j — целые числа. Поэтому в некоторой системе координат

$$(\varphi_\sigma)_{ij} \text{ состоит из целых чисел.} \tag{6.15}$$

В частности, след матрицы φ_σ равен

$$\operatorname{Sp}\varphi_\sigma = \sum_j (\varphi_\sigma)_{jj} = \text{целое число.} \tag{6.16}$$

С другой стороны, имеется система координат, в которой матрица φ_σ имеет вид (5.7):

$$\varphi_\sigma = \pm \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Известно, что след матрицы инвариантен относительно вращений системы координат, т. е.

$$\operatorname{Sp}\varphi_\sigma = \pm(2\cos + 1). \tag{6.17}$$

Следовательно, получаем уравнение

$$\pm(2\cos\varphi + 1) = \text{целое число,} \tag{6.18}$$

решение которого дает

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6. \tag{6.19}$$

Таким образом, (6.19) является хорошо известным условием совместности вращений и трансляций в трехмерном кристалле.

г. Оператор $\{\varphi|t\}$ в криволинейной системе координат [12]. В пространственных группах, для которых естественная тройка базисных векторов $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ неортогональна, обычно наиболее удобно использовать для поворотных элементов симметрии представление в виде тензоров второго ранга в криволинейных координатах [12]. Поскольку оператор в такой форме определяет линейное преобразование между $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$, его можно записать в виде

$$\varphi = \sum_{ij} \varphi_{ij} \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{b}_j,$$

где $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ — тройка векторов, обратных $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$: (6.20)

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = \delta_{ij}. \tag{6.21}$$

Очевидно, записывая

$$r' = \varphi \cdot r, \tag{6.22}$$

мы производим линейное преобразование, при котором компоненты (x_1, x_2, x_3) вектора r преобразуются в компоненты (x_1', x_2', x_3') вектора r'. Требование, чтобы преобразование поворота сохраняло расстояние между двумя точками, приводит к унитарности φ. Пусть φ_c — матрица, сопряженная φ; тогда

$$\varphi_c \equiv \sum_{ij} \varphi_{ij} b_j a_i. \tag{6.23}$$

Требование ортогональности дает

$$\varphi_c = \varphi^{-1}, \tag{6.24}$$

где

$$\varphi \cdot \varphi^{-1} = \varphi^{-1} \cdot \varphi = \varepsilon, \tag{6.25}$$

а ε — единичный тензор второго ранга в криволинейных координатах:

$$\varepsilon = \sum_i a_i b_i. \tag{6.26}$$

Очевидно,

$$r = \varepsilon r \tag{6.27}$$

для всех r. Тензоры второго ранга в криволинейных координатах можно преобразовывать по существу так же, как матрицы в декартовых координатах, которыми мы и будем пользоваться в этой книге.

Эквивалентное представление такого тензора второго ранга φ получается, если задать ось вращения единичным вектором u, параллельным этой оси, и угол поворота вокруг этой оси:

$$\varphi = \pm (uu + (\varepsilon - uu) \cos\varphi + \varepsilon \times u \sin\varphi). \tag{6.28}$$

Поскольку запись φ в виде матрицы имеет второстепенное значение с точки зрения целей настоящей книги, мы не будем давать исчерпывающего изложения этого вопроса [12].

Две пространственные группы, для которых будет дан подробный анализ, — это группа алмаза $Fd3m$, O_h^7 и группа каменной соли $Fm3m$, O_h^5. В обоих случаях кубическая симметрия позволяет в качестве естественного базиса взять тройку ортогональных векторов; поэтому наиболее простым оказывается представление φ в виде матрицы в декартовых координатах.

д. Порядок пространственной группы $\mathfrak{G}$. Из определения операторов пространственной группы в конфигурационном пространстве непосредственно следует, что пространственная группа $\mathfrak{G}$ имеет порядок $g_p N$, где g_p — порядок точечной группы

$\mathfrak{P}$, а N — порядок трансляционной группы $\mathfrak{T}$, определяемый формулой (4.44). В символическом виде

$$O(\mathfrak{G}) = O(\mathfrak{P}) \cdot O(\mathfrak{T}) = g_p N. \tag{6.29}$$

е. Инвариантность подгруппы трансляций $\mathfrak{T}$. Ясно, что набор операторов пространственной группы, входящих в $\mathfrak{T}$, т. е.

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}, \tag{6.30}$$

образует подгруппу полной пространственной группы. Рассмотрим оператор, сопряженный оператору (6.30) и полученный трансформированием произвольным оператором пространственной группы $\mathfrak{G}$, т. е.

$$\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}^{-1} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\} = \{\varepsilon \mid \varphi^{-1}\boldsymbol{R}_L\}. \tag{6.31}$$

Согласно определению решетки, оператор (6.31), являющийся оператором чистой трансляции, должен быть тоже оператором трансляции решетки

$$\{\varepsilon \mid \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L'}\}. \tag{6.32}$$

Поэтому подгруппа $\mathfrak{T}$ замкнута относительно сопряжения и является инвариантной, или нормальным делителем [1].

ж. Факторгруппа. Разложение группы $\mathfrak{G}$ по подгруппе $\mathfrak{T}$ записывается тогда в виде

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}_2\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}\mathfrak{T}, \tag{6.33}$$

где вектор $\boldsymbol{\tau}_\sigma$ может оказаться и нулем. Для данной пространственной группы $\mathfrak{G}$ выбор представителя каждого смежного класса в (6.33) неоднозначен (кроме случая, когда все $\boldsymbol{\tau}_\sigma = 0$). Это представляется очевидным, так как, если к элементу $\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$ добавить произвольный оператор трансляции решетки, то суммарный оператор будет принадлежать к тому же смежному классу. Возникающая при этом факторгруппа

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{T} = \mathfrak{F} \tag{6.34}$$

изоморфна точечной группе $\mathfrak{P}$, возникающей, если положить равными нулю все векторы трансляции в совокупности представителей смежных классов:

$$\mathfrak{P} = \{\varepsilon \mid 0\}, \{\varphi_2 \mid 0\}, \ldots, \{\varphi_p \mid 0\}, \tag{6.35}$$

что совпадает с (5.15).

Разумеется, элементами группы $\mathfrak{F}$ являются смежные классы, т. е. совокупности операторов; элементы группы $\mathfrak{P}$ — это отдельные операторы. На языке абстрактной теории групп эти группы изоморфны: $\mathfrak{F} \cong \mathfrak{P}$.

з. Симметрия узла. В общем случае в кристалле может не быть ни одной точки, имеющей симметрию $\mathfrak{P}$, несмотря на то что $\mathfrak{G}/\mathfrak{T} = \mathfrak{P}$. Узел будет иметь эту симметрию только в случае пространственных групп, у которых все $\tau_\sigma = 0$, т. е. для симморфных групп.

Группа симметрии точки $\boldsymbol{r}$ кристалла определяется как совокупность преобразований, переводящих кристалл в его реплику *и* оставляющих эту точку неподвижной.

В дальнейшем эта группа будет обозначаться как $\mathfrak{P}_{\text{узла}}(\boldsymbol{r})$ или просто $\mathfrak{P}(\boldsymbol{r})$. Эта группа называется группой симметрии узла. Группы симметрии узлов для всех пространственных групп приведены в международных таблицах [16]; в некоторых случаях приводится их подробная классификация. Отметим другое, часто используемое обозначение пространственной группы узла $\mathfrak{P}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, где $\boldsymbol{r} \equiv \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — выделенный узел кристаллической решетки. Это обозначение используется в § 148 [см. уравнение (148.2)].

§ 7. Пространственная группа $\mathfrak{G}$ как центральное расширение группы $\mathfrak{T}$ с помощью группы $\mathfrak{P}$ [20]

Группа $\mathfrak{G}$, имеющая нормальный делитель $\mathfrak{T}$, факторгруппа по которому есть $\mathfrak{G}/\mathfrak{T} = \mathfrak{P}$, является расширением группы $\mathfrak{T}$ с помощью группы $\mathfrak{P}$. Чтобы полностью определить структуру группы $\mathfrak{G}$, необходимо задать: 1) нормальный делитель $\mathfrak{T}$, 2) факторгруппу $\mathfrak{P}$, 3) систему автоморфизмов группы $\mathfrak{T}$, соответствующих каждому элементу в $\mathfrak{P}$, 4) систему факторов. Далее мы покажем, как применять математическую теорию расширения групп [1]) к пространственным группам.

Элементами группы $\mathfrak{T}$ являются $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$. Элементами группы $\mathfrak{P}$ являются $\{\varphi_\sigma|0\}$. Каждый элемент группы $\mathfrak{P}$ соответствует смежному классу группы $\mathfrak{G}$. В частности, элемент $\{\varphi_\sigma|0\}$ группы $\mathfrak{P}$ соответствует смежному классу $\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}\mathfrak{T}$ группы $\mathfrak{G}$, представителем которого является $\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}$. Тогда

$$\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \mathfrak{T} \to \{\varphi_\sigma | 0\}. \tag{7.1}$$

Сопоставим каждому элементу $\{\varphi_\sigma|0\}$ из $\mathfrak{P}$ отображение группы $\mathfrak{T}$ на $\mathfrak{T}$ (автоморфизм) согласно преобразованию

$$\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\} \rightleftarrows \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\rho\}^{-1} \{\varepsilon\, \boldsymbol{R}_L\} \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\}^\sigma \tag{7.2}$$

[1]) Пусть даны группы A и B. Группа G называется *расширением* группы A при помощи группы B, если в G можно найти нормальный делитель A', изоморфный A, факторгруппа по которому изоморфна B (см. [118], стр.72).— *Прим. ред.*

или

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^\sigma \equiv \{\varepsilon \mid \varphi_\sigma^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\}. \tag{7.3}$$

Рассмотрим разбиение группы $\mathfrak{G}$ на смежные классы по подгруппе $\mathfrak{T}$, определяемое равенством

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2 \mid \boldsymbol{\tau}_2\}\,\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\,\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_\rho \mid \boldsymbol{\tau}_\rho\}\,\mathfrak{T}. \tag{7.4}$$

Согласно (6.8), произведение двух представителей смежных классов равно

$$\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_\rho \mid \boldsymbol{\tau}_\rho\} = \{\varphi_\sigma \cdot \varphi_\rho \mid \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_\rho + \boldsymbol{\tau}_\sigma\}. \tag{7.5}$$

Введем обозначение $\varphi_\sigma \cdot \varphi_\rho \equiv \varphi_{\sigma\rho}$. В разложении (7.4) представителем смежного класса с такой поворотной частью является $\{\varphi_{\sigma\rho} \mid \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}\}$. Перепишем поэтому (7.5) в виде

$$\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_\rho \mid \boldsymbol{\tau}_\rho\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{\sigma\rho}\} \cdot \{\varphi_{\sigma\rho} \mid \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}\}, \tag{7.6}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{\sigma\rho} \equiv \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_\rho + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}. \tag{7.7}$$

Здесь $\boldsymbol{R}_{\sigma\rho}$ — вектор трансляции решетки и $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{\sigma\rho}\}$ — элемент группы $\mathfrak{T}$. Удобно ввести специальное обозначение $(\varphi_\sigma, \varphi_\rho)$ следующим образом:

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho) \equiv \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{\sigma\rho}\}. \tag{7.8}$$

Мы видим теперь, что произведение двух элементов из $\mathfrak{P}$ соответствует произведению двух представителей смежных классов группы $\mathfrak{G}$ с точностью до множителя, являющегося элементом группы $\mathfrak{T}$:

$$\text{в } \mathfrak{P}\text{:}\ \{\varphi_\sigma \mid 0\} \cdot \{\varphi_\rho \mid 0\} = \{\varphi_{\sigma\rho} \mid 0\}, \tag{7.9}$$

$$\text{в } \mathfrak{G}\text{:}\ \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_\rho \mid \boldsymbol{\tau}_\rho\} = (\varphi_\sigma, \varphi_\rho)\,\{\varphi_{\sigma\rho} \mid \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}\}. \tag{7.10}$$

Таким образом, закон умножения для группы $\mathfrak{P}$ таков же, как и для группы $\mathfrak{G}$ с точностью до множителя, являющегося элементом группы $\mathfrak{T}$. Совокупность p^2 элементов

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho \equiv \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{\sigma\rho}\}, \quad \sigma, \rho = 1, \ldots, p, \tag{7.11}$$

называется системой факторов, соответствующих расширению.

Система автоморфизмов $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^\sigma$ должна удовлетворять некоторым условиям совместности с законом умножения (7.10). Так, произведение двух автоморфизмов определяется как автоморфизм произведения, или, точнее,

$$\left(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^\sigma\right)^\rho = \{\varepsilon \mid \varphi_\rho^{-1} \cdot \varphi_\sigma^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid (\varphi_\sigma \cdot \varphi_\rho)^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} =$$

$$= \{\varepsilon \mid \varphi_{\sigma\rho}^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}^{\sigma\rho}. \tag{7.12}$$

При выводе (7.12) мы использовали определение (7.2), закон умножения (7.10), (7.11), а также тот факт, что группа $\mathfrak{T}$ является абелевой, т. е. циклической, группой, так что все элементы системы факторов коммутируют:

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho)(\varphi_\mu, \varphi_\lambda) = (\varphi_\mu, \varphi_\lambda)(\varphi_\sigma, \varphi_\rho), \tag{7.13}$$

так как они являются элементами группы $\mathfrak{T}$. Вследствие свойства (7.12) расширение $\mathfrak{T}$ с помощью $\mathfrak{P}$ называется центральным.

Для элементов группы $\mathfrak{G}$ выполняется закон ассоциативности умножения, так что

$$\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot (\{\varphi_\rho | \boldsymbol{\tau}_\rho\} \cdot \{\varphi_\pi | \boldsymbol{\tau}_\pi\}) = (\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_\rho | \boldsymbol{\tau}_\rho\}) \cdot \{\varphi_\pi \boldsymbol{\tau}_\pi\}. \tag{7.14}$$

Используя (7.5), (7.8), получаем для левой части (7.14)

$$\begin{aligned} &\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot (\varphi_\rho, \varphi_\pi) \cdot \{\varphi_{\rho\pi} | \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi}\} = \\ &\quad = \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot (\varphi_\rho, \varphi_\pi) \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_\sigma \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_{\rho\pi} | \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi}\} = \\ &\quad = (\varphi_\rho, \varphi_\pi)^{\sigma^{-1}} \cdot (\varphi_\sigma \cdot \varphi_{\rho\pi}) \cdot \{\varphi_{\sigma\rho\pi} | \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\}, \end{aligned} \tag{7.15}$$

тогда как правая часть равна

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho) \cdot \{\varphi_{\sigma\rho} | \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}\} \cdot \{\varphi_\pi | \boldsymbol{\tau}_\pi\} = (\varphi_\sigma, \varphi_\rho) \cdot (\varphi_{\sigma\rho} \varphi_\pi) \{\varphi_{\sigma\rho\pi} | \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\}. \tag{7.16}$$

Следовательно, должно выполняться равенство

$$(\varphi_\rho, \varphi_\pi)^{\sigma^{-1}} \cdot (\varphi_\sigma, \varphi_{\rho\pi}) = (\varphi_\sigma, \varphi_\rho) \cdot (\varphi_{\sigma\rho}, \varphi_\pi). \tag{7.17}$$

Преобразуя это выражение, получаем для левой части

$$\begin{aligned} &\{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{R}_{\rho\pi}\} \cdot \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{\sigma\rho\pi}\} = \\ &\quad = \{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot (\varphi_\rho \cdot \boldsymbol{\tau}_\pi + \boldsymbol{\tau}_\rho - \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi}) + \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi} + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\} = \\ &\quad = \{\varepsilon | \varphi_\sigma \varphi_\rho \cdot \boldsymbol{\tau}_\pi + \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_\rho - \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi} + \varphi_\sigma \boldsymbol{\tau}_{\rho\pi} + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\}. \end{aligned} \tag{7.18}$$

Соответственно для правой части получаем

$$\begin{aligned} &\{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_\rho + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho}\} \cdot \{\varepsilon | \varphi_{\sigma\rho} \cdot \boldsymbol{\tau}_\pi + \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho} - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\} = \\ &\quad = \{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau}_\rho + \boldsymbol{\tau}_\sigma - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho} + \varphi_{\sigma\rho} \cdot \boldsymbol{\tau}_\pi + \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho} - \boldsymbol{\tau}_{\sigma\rho\pi}\}. \end{aligned} \tag{7.19}$$

Почленное сравнение полученных выражений показывает, что элементы системы факторов удовлетворяют равенству (7.17).

В заключение следует преобразовать закон умножения (6.8) для операторов пространственной группы к форме, удобной для установления связи с теорией расширения. Произвольный оператор пространственной группы $\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}$ можно записать в виде

$$\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\} \doteq \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_s\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}, \tag{7.20}$$

где R_s — вектор решетки и $\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}$ — представитель смежного класса. Далее, рассматривая R_p как вектор решетки, имеем

$$\{\varphi_\sigma|t(\varphi_\sigma)\}\cdot\{\varphi_\pi|t(\varphi_\pi)\}=$$
$$\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}\cdot\{\varphi_\pi|\tau_\pi\}=$$
$$=\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}\cdot\{\varphi_\pi|\tau_\pi\}=$$
$$=\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}^{\sigma^{-1}}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}\cdot\{\varphi_\pi|\tau_\pi\}=$$
$$=\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}^{\sigma^{-1}}(\varphi_\sigma,\varphi_\pi)\cdot\{\varphi_{\sigma\pi}|\tau_{\sigma\pi}\}. \qquad (7.21)$$

Таким образом, мы видим, что каждый элемент $\{\varphi_\sigma|t(\varphi_\sigma)\}$ группы $\mathfrak{G}$ может быть записан как упорядоченное произведение элемента из группы $\mathfrak{T}$ на представителя смежного класса, которому соответствует элемент группы $\mathfrak{P}$:

$$\{\varphi_\sigma|t(\varphi_\sigma)\}=\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}. \qquad (7.22)$$

Закон умножения для двух таких элементов имеет вид

$$\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}\cdot\{\varphi_\pi|\tau_\pi\}=$$
$$=\{\varepsilon|R_s\}\cdot\{\varepsilon|R_p\}^{\sigma^{-1}}\cdot(\varphi_\sigma,\varphi_\pi)\cdot\{\varphi_{\sigma\pi}|\tau_{\sigma\pi}\}, \qquad (7.23)$$

задавая тем самым систему автоморфизмов группы $\mathfrak{T}$

$$\{\varepsilon|R_p\}^{\sigma^{-1}}\equiv\{\varepsilon\,\varphi_\sigma\cdot R_p\} \qquad (7.24)$$

и систему факторов

$$(\varphi_\sigma,\varphi_\pi)=\{\varepsilon|R_{\sigma\pi}\}=\{\varepsilon|\varphi_\sigma\cdot\tau_\pi+\tau_\sigma-\tau_{\sigma\pi}\}. \qquad (7.25)$$

Для системы автоморфизмов выполняется правило (7.12), а для системы факторов — правило (7.17). Следовательно, определяющие свойства пространственной группы $\mathfrak{G}$ удовлетворяют условиям теоремы Шрейера. Поэтому пространственная группа $\mathfrak{G}$ является центральным расширением группы $\mathfrak{T}$ с помощью группы $\mathfrak{P}$ [20].

Соответственно математическая задача отыскания всех пространственных групп $\mathfrak{G}$ оказывается тождественной задаче о нахождении всех групп трансляции $\mathfrak{T}$, всех точечных групп $\mathfrak{P}$ и всех центральных расширений. Эта задача давно была полностью решена Шенфлисом и Федоровым. Результаты и полное перечисление 230 кристаллографических пространственных групп приведены в книге [7]. Мы будем использовать эти результаты по мере необходимости. При этом мы будем пользоваться как обозначениями Шенфлиса, так и сокращенными обозначениями Германа — Магуина [16].

Описание пространственной группы как расширения оказывается полезным при обсуждении теории представлений пространственных групп методом проективных представлений (§ 41—44). Поэтому в § 41—44 мы будем ссылаться на настоящий параграф.

§ 8. Симморфные пространственные группы

Из 230 пространственных групп 73 группы являются и симморфными. В этих группах все представители в разложении на смежные классы являются чистыми вращениями $\{\varphi_\sigma|0\}$; $\tau_\sigma=0$ для всех σ. Очевидно, в случае симморфных пространственных групп расширение группы $\mathfrak{T}$ при помощи группы $\mathfrak{P}$ является расщепляемым [20]. Это означает, что $\mathfrak{G}$ является полупрямым произведением групп $\mathfrak{T}$ и $\mathfrak{P}$. Иными словами, для симморфных пространственных групп система факторов задается равенством

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho) \equiv \{\varepsilon|0\} \text{ для всех } \sigma, \rho. \tag{8.1}$$

В этом случае разбиение группы $\mathfrak{G}$ на смежные классы по $\mathfrak{T}$ оказывается особенно простым:

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{T} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2|0\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_{g_p}|0\}\mathfrak{T}. \tag{8.2}$$

Очевидно, что сама совокупность представителей смежных классов

$$\{\varepsilon|0\},\ \{\varphi_2|0\},\ \ldots,\ \{\varphi_{g_p}|0\} \equiv \mathfrak{P} \tag{8.3}$$

является замкнутой относительно умножения и, следовательно, образует группу. Поэтому эта группа, совпадающая с точечной группой $\mathfrak{P}$, является группой симметрии некоторой реальной физической точки кристалла. Иначе говоря, $\mathfrak{P}$ является группой симметрии $\mathfrak{P}(0)$ узла, выбранного за начало координат, относительно которого производятся все преобразования поворота. Среди групп, которые будут анализироваться далее, пространственная группа каменной соли является симморфной группой[1]). Это группа O_h^5, или $Fm3m$. В совокупности смежных классов (8.2) группой трансляций $\mathfrak{T}$ является в этом случае непримитивная группа F (гранецентрированная кубическая группа), а точечной группой $\mathfrak{P}$ — полная кубическая группа O_h. Поэтому g_p равно 48, т. е. в (8.2) входят 48 смежных классов.

§ 9. Несимморфные пространственные группы

В остальных 157 несимморфных пространственных группах все (или хотя бы некоторые) $\tau_\sigma \neq 0$. Эти группы являются центральным расширением группы $\mathfrak{T}$ при помощи группы $\mathfrak{P}$ общего вида.

---

[1]) Этот вопрос подробно рассматривается в § 126 и последующих параграфах.

Вторая пространственная группа, которую мы изучим в этой книге [1]), — это пространственная группа структуры алмаза O_h^7 или $Fd3m$. Это довольно типичный представитель несимморфных групп. Группой трансляции снова является группа F (гранецентрированная кубическая), а точечной группой кристалла — группа O_h. Поэтому O_h^7 есть (нерасщепленное) расширение F при помощи O_h. Оказывается, однако, что для этой группы имеется упрощающее обстоятельство, которое может быть полезным при последующем использовании теории представлений. При явном выписывании 48 смежных классов в разложении $\mathfrak{G}$ по F можно показать, что

$$\mathfrak{G}/F = \mathfrak{T} + \{\varphi_2|0\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_{24}|0\}\mathfrak{T} + \{\boldsymbol{i}|\boldsymbol{\tau}\}\mathfrak{T} + \ldots\{\varphi_{48}|\boldsymbol{\tau}\}\mathfrak{T}. \quad (9.1)$$

Имеется 24 смежных класса, представители которых не связаны с нетривиальными трансляциями: $\boldsymbol{\tau}_\sigma = 0$, $\sigma = 1, \ldots, 24$ и $\boldsymbol{\tau}_\sigma = \boldsymbol{\tau}$, $\sigma = 25, \ldots, 48$, так что нетривиальная трансляция, входящая в остальные 24 смежных класса, одинакова для всех классов. Фактически имеется подгруппа группы $\mathfrak{G}$, состоящая из

$$\mathfrak{S} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2|0\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_{24}|0\}\mathfrak{T} \quad (9.2)$$

и совпадающая с симморфной пространственной группой T_d^2, или $F\overline{4}3m$. Следовательно, $\mathfrak{S} \equiv T_d^2$ есть подгруппа с индексом 2, и потому она является нормальным делителем; факторгруппа $\mathfrak{G}/\mathfrak{S}$ изоморфна группе четности (C_i). Следовательно,

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{S} = \mathfrak{S} + \{\boldsymbol{i}|\boldsymbol{\tau}\}\mathfrak{S}, \quad (9.3)$$

где

$$\mathfrak{G} = O_h^7, \quad \mathfrak{S} = T_d^2. \quad (9.4)$$

Поэтому каждый представитель смежного класса в разбиении (9.1) имеет вид либо

$$\{\varphi_\sigma|0\}, \quad \sigma = 1, \ldots, 24, \quad (9.5)$$

либо

$$\{\boldsymbol{i}|\boldsymbol{\tau}\}\cdot\{\varphi_\sigma|0\}, \quad \sigma = 1, \ldots, 24, \quad (9.6)$$

где (9.5) относится к первым 24 смежным классам, а (9.6) — к следующим 24 классам. Это упрощает задачу написания системы факторов. Так, поскольку

$$\{\varphi_\sigma|0\}\cdot\{\varphi_\rho|0\} = \{\varphi_{\sigma\rho}|0\}, \quad (9.7)$$

система факторов имеет вид

$$(\varphi_\sigma, \varphi_\rho) = \{\boldsymbol{\varepsilon}\,|\,0\}. \quad (9.8)$$

---

[1]) См. в § 126 и далее.

Согласно (9.6),

$$\{\varphi_\sigma | 0\} \cdot \{\boldsymbol{i} | \boldsymbol{\tau}\} = (\varphi_\sigma, \boldsymbol{i}) \cdot \{\boldsymbol{i}\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}\} \tag{9.9}$$

и

$$(\varphi_\sigma, \boldsymbol{i}) \equiv \{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\} = \{\varepsilon | \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{\tau}\}. \tag{9.10}$$

Наконец,

$$\{\boldsymbol{i}\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}\} \cdot \{\boldsymbol{i}\varphi_\rho | \boldsymbol{\tau}\} = (\boldsymbol{i}\varphi_\sigma, \boldsymbol{i}\varphi_\rho) \cdot \{\varphi_\sigma \cdot \varphi_\rho | 0\}, \tag{9.11}$$

$$(\boldsymbol{i}\varphi_\sigma, \boldsymbol{i}\varphi_\rho) \equiv \{\varepsilon | \boldsymbol{i}\varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}\}. \tag{9.12}$$

Очевидно, детальное установление всей системы факторов требует их нахождения только для 24 трансляций $(\varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{\tau})$, так как именно они являются определяющими в (9.10) и (9.12). Кроме того, далее будет показано, что трансляции в (9.12) просто выбираются из малого набора: нулевой трансляции и трансляции на один из базисных векторов (гранецентрированного кубического) кристалла (см. § 126).

§ 10. Некоторые подгруппы пространственной группы

Из структуры пространственной группы с очевидностью следует, что пространственная группа имеет целый набор подгрупп. В последующем изложении в этой книге у нас будет случай использовать некоторые из этих подгрупп.

Все пространственные группы содержат группу трансляций $\mathfrak{T}$ в качестве нормального делителя. Любая подгруппа $\mathfrak{T}_s$ группы $\mathfrak{T}$ будет одновременно и подгруппой группы $\mathfrak{G}$. Пусть подгруппа $\mathfrak{T}_s$ группы $\mathfrak{T}$ является нормальным делителем группы $\mathfrak{G}$. Очевидно, она является и нормальным делителем группы $\mathfrak{T}$, так как $\mathfrak{T}$ — абелева группа. Тогда одновременно с группой $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$ (т. е. факторгруппой $\mathfrak{P}$) можно определить факторгруппу $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}_s$. Однако если

$$\mathfrak{T}/\mathfrak{T}_s = \mathfrak{T}_s + \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_M\} \mathfrak{T}_s + \ldots, \tag{10.1}$$

то

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{T}_s = (\mathfrak{G}/\mathfrak{T}) \cdot (\mathfrak{T}/\mathfrak{T}_s). \tag{10.2}$$

В совокупности представителей смежных классов в разбиении $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}_s$ найдем всех представителей вида

$$\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_M\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}, \tag{10.3}$$

т. е. комбинации (произведения) представителей из $(\mathfrak{T}/\mathfrak{T}_s)$ и представителя из $\mathfrak{P}$. Ясно, что присутствуют все такие комбинации. Если индекс подгруппы $\mathfrak{T}_s$ группы $\mathfrak{T}$ равен s, то порядок факторгруппы $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}_s$ равен $(g_p \cdot s)$, где, как и раньше, g_p — порядок группы $\mathfrak{P}$. Ниже у нас будет случай использовать именно такое разбиение, как разбиение (10.2).

Для симморфных пространственных групп наиболее полезной с точки зрения применения теории представлений является точечная группа $\mathfrak{P}$.

Часто оказывается полезным разложение пространственной группы $\mathfrak{G}$ на подгруппы, являющиеся в свою очередь пространственными группами. (Например, как было показано в § 9, пространственная группа алмаза O_h^7, являющаяся типичной несимморфной пространственной группой, имеет как подгруппу с индексом 2 пространственную группу цинковой обманки T_d^2.) Предположим, что пространственная группа $\mathfrak{G}$ имеет подгруппу $\mathfrak{G}_a$, также являющуюся пространственной группой. Группа $\mathfrak{G}_a$ может включать (или не включать) в себя в качестве подгруппы полную группу трансляций $\mathfrak{T}$; для общности предположим, что она не включает $\mathfrak{T}$. Пусть $\mathfrak{T}_a$ — нормальная подгруппа трансляций, входящая в $\mathfrak{G}_a$, и пусть элементы $\mathfrak{T}_a$ равны

$$\mathfrak{T}_a = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}_{a1}\},\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}_{a2}\},\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}_{a3}\},\ \ldots; \tag{10.4}$$

тогда элементы $\mathfrak{G}_a$ можно записать в виде

$$\mathfrak{G}_a = \mathfrak{T}_a,\ \{\varphi_\alpha \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\alpha)\}\,\mathfrak{T}_a,\ \ldots,\ \{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}(\varphi_p)\}\,\mathfrak{T}_a. \tag{10.5}$$

Поскольку $\mathfrak{T}_a$ является нормальным делителем $\mathfrak{G}_a$, можно построить факторгруппу $\mathfrak{P}_a$ этой пространственной (под)группы:

$$\mathfrak{G}_a/\mathfrak{T}_a = \mathfrak{P}_a. \tag{10.6}$$

Очевидно, $\mathfrak{P}_a$ будет подгруппой группы $\mathfrak{P} = \mathfrak{G}/\mathfrak{T}$. Далее, поскольку $\mathfrak{G}_a$ есть подгруппа группы $\mathfrak{G}$, можно выполнить разбиение $\mathfrak{G}$ на смежные классы по $\mathfrak{G}_a$:

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}_a,\ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{t}_{a1}\}\,\mathfrak{G}_a,\ \ldots,\ \{\varphi_\beta \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\beta)\}\,\mathfrak{G}_a,\ \ldots,\ \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}\,\mathfrak{G}_a. \tag{10.7}$$

В (10.7) представители смежных классов включают, как обычно, элементы, входящие в $\mathfrak{G}$, но не входящие в $\mathfrak{G}_a$, а также имеется обычный произвол в выборе трансляционной части операторов вида $\{\varphi_\beta | \boldsymbol{t}(\varphi_\beta)\}$. Так как группа $\mathfrak{G}_a$ имеет все обычные свойства групп, то она имеет полный набор классов, возможные подгруппы и т. д.

Рассмотрим элемент $\{\varphi_\beta | \boldsymbol{t}(\varphi_\beta)\}$, входящий в группу $\mathfrak{G}$, но не входящий в $\mathfrak{G}_a$. Если составить набор элементов $\mathfrak{G}_b$ по правилу

$$\{\varphi_\beta \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\beta)\}^{-1} \cdot \mathfrak{G}_a \cdot \{\varphi_\beta \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\beta)\} = \mathfrak{G}_b, \tag{10.8}$$

то $\mathfrak{G}_b$ окажется пространственной группой, элементы которой можно легко получить из элементов группы $\mathfrak{G}_a$. В действительности $\mathfrak{G}_b$ также является подгруппой группы $\mathfrak{G}$ и подгруппы $\mathfrak{G}_a$ и $\mathfrak{G}_b$ являются сопряженными подгруппами группы $\mathfrak{G}$. Если p —

наименьшее число, для которого

$$\{\varphi_\beta \mid t(\varphi_\beta)\}^p = \{\varepsilon \mid R_L\}, \tag{10.9}$$

то можно построить ряд сопряженных подгрупп трансформированием элемента $\{\varphi_\beta | t(\varphi_\beta)\}$ и его степеней. Например,

$$\{\varphi_\beta \mid t(\varphi_\beta)\}^{-1} \cdot \mathfrak{G}_b \cdot \{\varphi_\beta \mid t(\varphi_\beta)\} = \mathfrak{G}_c \tag{10.10}$$

представляет собой еще одну такую пространственную группу. По каждой из этих пространственных групп можно выполнить разбиение на смежные классы вида (10.7). Часто удобно рассматривать взаимосвязанные разбиения группы $\mathfrak{G}$ на смежные классы, т. е. по сопряженным подгруппам. Разумеется, сопряженные подгруппы изоморфны.

Глава 3

Неприводимые представления и векторные пространства конечных групп

§ 11. Введение

Настоящая глава посвящена общей теории неприводимых представлений и неприводимых векторных пространств для конечных групп. Предполагается знакомство читателя с элементарными сведениями из теории представлений конечных групп [1—3]; эти сведения будут кратко изложены (для удобства читателя и для введения обозначений) в § 12—18.

Для установления связи между функциями и представлениями необходимо ввести в рассмотрение операторы преобразований, действующие в векторном пространстве функций. Рассматриваемая группа операторов гомоморфна совокупности операторов преобразования координат, составляющих пространственную группу кристаллов.

Обратимся теперь к содержанию последующих глав 4 и 5. Каждая пространственная группа $\mathfrak{G}$ содержит нормальную подгруппу трансляций $\mathfrak{T}$. Поскольку группа $\mathfrak{T}$ абелева (в действительности является прямым произведением трех циклических групп), ее неприводимые представления и неприводимые линейные векторные пространства одномерны. Неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})}$ характеризуются волновым вектором $\boldsymbol{k}$ и блоховским вектором $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ [21]. Набор допустимых значений $\boldsymbol{k}$ заполняет первую зону Бриллюэна кристалла и характеризует все неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$.

Для каждого $\boldsymbol{k}$ определен набор операторов из группы $\mathfrak{G}$, преобразующих блоховский вектор $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ в вектор с эквивалентным значением волнового вектора $\boldsymbol{k}$. Эта совокупность операторов образует группу волнового вектора $\boldsymbol{k}$, обозначаемую $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Она является подгруппой группы $\mathfrak{G}$. Определяются неприводимые представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Для этой цели можно использовать два метода. Будет рассмотрен метод лучевых (проективных или нагруженных) представлений, использующий представление структуры $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ как расширения. Кроме того, будет изложен метод малых групп. Среди всех неприводимых представлений $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ допустимыми для наших целей оказываются только некоторые. Будут определены эти допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, а также соответствующие им векторные пространства.

Последним шагом является разбиение $\mathfrak{G}$ на смежные классы по $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Далее неприводимые представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ используются для определения неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$. Неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$ характеризуются звездой волнового вектора $^*\boldsymbol{k}$ и индексом m допустимого представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$. Это построение определяет также структуру неприводимого векторного пространства, в котором задано представление $D^{(*\boldsymbol{k})(m)}$.

Все это рассмотрение базируется на предположении о том, что операторы преобразований являются линейными и унитарными (такие операторы возникают при рассмотрении преобразований чисто пространственной симметрии). Для учета симметрии по отношению к обращению времени необходимо рассматривать антиунитарные, антилинейные операторы. Эти операторы задают полулинейные представления, или, как их назвал Вигнер, «копредставления». Структура этих представлений устанавливается и обсуждается в гл. 9.

Изложенная выше методика применима к любой системе, имеющей симметрию кристаллической пространственной группы $\mathfrak{G}$. Рассмотрение электронов или в общем случае спинорных частиц усложняется вследствие необходимости расширить группу операторов преобразований, чтобы включить преобразования векторных индексов, происходящие, когда блоховский вектор пробегает свои значения в базисном векторном функциональном пространстве (если блоховский вектор не просто скалярная функция, а имеет спинорные индексы). Излагаемый здесь материал допускает такое обобщение.

Читателю, не знакомому с материалом, изложенным в § 12—18, рекомендуется пополнить свои знания, обратившись к учебникам [1—3][1]), прежде чем продолжать изучение этой книги.

§ 12. Операторы преобразований функций

Для последующего рассмотрения оказывается необходимым расширить круг используемых понятий, включив в него понятие оператора, преобразующего функцию. По определению $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$, согласно (6.1), имеем

$$\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\} \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}' = \varphi \cdot \boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}(\varphi). \tag{12.1}$$

Пусть $\psi(\boldsymbol{r})$ — скалярная функция пространственной переменной $\boldsymbol{r}$ в конфигурационном пространстве. Это означает, что в каждой точке $\boldsymbol{r}$ конфигурационного пространства определено (или известно) значение функции ψ.

[1]) Можно также рекомендовать книгу Петрашень и Трифонова [116].— *Прим. ред.*

Для компактности записи в нескольких последующих параграфах мы будем использовать сокращенное обозначение операторов симметрии $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$ одним символом S, Q, ... Так, например, $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\} = S$ и т. п. Определим теперь оператор P_S, который действует на (т. е. преобразует) функцию ψ, давая функцию $P_S\psi$. Это означает, что по заданным значениям функции ψ во всех точках конфигурационного пространства $\boldsymbol{r}$ определяются значения функции $P_S\psi$. Пусть S — оператор симметрии, преобразующий точку $\boldsymbol{r}$ в точку $\boldsymbol{r}'$:

$$S\cdot\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}', \tag{12.2}$$

где, разумеется, S является преобразованием симметрии пространственной группы типа $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$. Определим теперь оператор P_S равенством

$$P_S\psi(\boldsymbol{r}'(=\psi(\boldsymbol{r}), \tag{12.3}$$

т. е. функция $P_S\psi$ имеет то же значение в точке $\boldsymbol{r}'$, что и функция ψ в точке $\boldsymbol{r}$. Определение оператора P_S не задает симметрию функции ψ, а просто устанавливает правило для дальнейшего рассмотрения. Уравнение (12.3) можно переписать в нескольких эквивалентных формах:

$$P_S\psi(S\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r}), \tag{12.4}$$

или

$$P_S\psi(\boldsymbol{r})=\psi\left(S^{-1}\boldsymbol{r}\right). \tag{12.5}$$

Во всех случаях (12.2)—(12.4) следует понимать как соотношения между функциями. Операторы P_S, если не оговаривается специально другое, — это всегда *линейные и унитарные* операторы.

§ 13. Группа операторов, преобразующих функции

Пусть задана группа преобразований $\mathfrak{G}$ в конфигурационном или координатном пространстве кристалла. В случае необходимости мы можем обозначить эту группу через $\mathfrak{G}_{\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}}$, указывая с помощью индекса характер операторов, составляющих группу. Для компактности можно использовать для этой группы символическое обозначение $\mathfrak{G}_S$ (аналогично введенным выше обозначениям).

Согласно определению группового действия, если P и R входят в группу $\mathfrak{G}$, то

$$P\cdot R \quad \text{входит в } \mathfrak{G}_S. \tag{13.1}$$

Но каждому оператору P, R, S, ... группы $\mathfrak{G}_S$ можно сопоставить, согласно (12.2)—(12.5), оператор преобразования P_R. Таким способом можно получить совокупность операторов P_R,

$P_S, \ldots$. Чтобы показать, что эта совокупность образует группу, заметим, что если

$$r' = S \cdot r, \quad r'' = R \cdot r' = (R \cdot S) \cdot r, \tag{13.2}$$

то

$$\begin{gathered} (P_S\psi)\, r' = \psi(r), \\ (P_R(P_S\psi))\, r'' = (P_S\psi)\, r' = \psi(r). \end{gathered} \tag{13.3}$$

Следовательно, функция $(P_R(P_S\psi))$ имеет в точке r'' то же значение, что и функция ψ в точке r. Рассмотрим, с другой стороны, оператор P_{RS} в применении к функции ψ, такой, что

$$(P_{RS}\psi)(r'') = \psi(r). \tag{13.4}$$

Тогда

$$P_R P_S = P_{RS}, \tag{13.5}$$

т. е. произведение операторов $P_R P_S$ можно отождествить с одиночным оператором P_{RS}. Из этого следует, что

$$P_E,\ P_R,\ P_S,\ \ldots \text{ образуют группу } \mathfrak{G}_{P_R} \tag{13.6}$$

и что группы

$$\mathfrak{G}_R \text{ и } \mathfrak{G}_{P_R} \text{ гомоморфны.} \tag{13.7}$$

Согласно только что приведенному выводу, каждому оператору R сопоставляется один и только один оператор P_R по формуле (12.3), поэтому группы $\mathfrak{G}_R$ и $\mathfrak{G}_{P_R}$ в действительности являются изоморфными.

Необходимо, однако, со всей определенностью указать, что при рассмотрении конкретной физической задачи можно поступать иначе. А именно: можно сначала определить операторы преобразования P_R через преобразования функций, а затем показать, что набор P_R образует группу $\mathfrak{G}_{P_R}$. Соответствующие преобразования конфигурационного пространства можно восстановить по операторам P_R. В таком случае группа $\mathfrak{G}_{P_R}$ может оказаться гомоморфной, а не изоморфной группе $\mathfrak{G}_R$. Мы частично используем этот подход при обсуждении симметрии гамильтониана решетки. Но наиболее важным он оказывается при рассмотрении частиц, имеющих спин.

§ 14. Функции и представления

Предположим теперь, что для некоторой физической задачи задана замкнутая система из l линейно независимых функций

$$\psi_1,\ \psi_2,\ \ldots,\ \psi_l \equiv \{\psi_a\}. \tag{14.1}$$

Под словом «замкнутая» мы подразумеваем, что для рассматриваемой задачи любая произвольная функция φ_a может быть представлена в виде линейной комбинации функций $\{\psi_a\}$:

$$\varphi_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{l} c_{a\alpha}\psi_a. \tag{14.2}$$

Заметим, что здесь опущен индекс $\boldsymbol{r}$ координаты точки в конфигурационном пространстве, чтобы подчеркнуть функциональный характер соотношения. Совокупность $\{\psi_a\}$ можно рассматривать как набор векторов в гильбертовом пространстве.

Применим теперь оператор вида P_S к одной из функций

$$P_S\psi_a(S\boldsymbol{r}) = \psi_a(\boldsymbol{r}). \tag{14.3}$$

Но система $\{\psi_a\}$, по предположению, является замкнутой. Поэтому функция $P_S\psi_a$ не является линейно-независимой и может быть представлена в виде линейной комбинации функций:

$$P_S\psi_a = \sum_{n=1}^{l} D(S)_{na}\,\psi_n. \tag{14.4}$$

Отметим снова, что (14.4) устанавливает соотношение между функциями. Фиксируем теперь P_S, а в качестве выбранной функции ψ_a будем по очереди брать все функции системы $\{\psi_a\}$; тогда получим

$$P_S\psi_a = \sum_{n=1}^{l} D(S)_{na}\,\psi_n, \quad a = 1, \ldots, l. \tag{14.5}$$

Таким способом из (14.5) мы получим элементы матрицы $D(S)$ с размером $(l \times l)$. Если рассмотреть теперь оператор P_Q, то можно получить матрицу $D(Q)$. Выбирая в качестве оператора P_S по очереди все возможные операторы преобразований из группы $\mathfrak{G}_{P_S}$, получим совокупность матриц размера $(l \times l)$

$$D(E),\ D(P),\ \ldots,\ D(Q),\ \ldots. \tag{14.6}$$

Далее, из (14.4) и (13.5) нетрудно получить

$$P_R P_S\psi_a = P_R\Big(\sum_m D(S)_{ma}\,\psi_m\Big) = \sum_m D(S)_{ma}\,P_R\psi_m =$$
$$= \sum_m D(S)_{ma}\sum_n D(R)_{nm}\,\psi_n = \sum_n\Big(\sum_m D(R)_{nm}\,D(S)_{ma}\Big)\psi_n =$$
$$= \sum_n D(RS)_{na}\,\psi_n. \tag{14.7}$$

С другой стороны,

$$P_{RS}\psi_a = \sum_n D(RS)_{na}\,\psi_n. \tag{14.8}$$

Поэтому при перемножении матриц системы выполняется правило

$$D(R)\,D(S) = D(RS). \tag{14.9}$$

Следовательно,. совокупность матриц (14.6) образует матричную группу. При необходимости специальным образом выделить эту матричную группу мы будем обозначать ее $\mathfrak{G}_{D(R)}$.

Группа $\mathfrak{G}_{D(R)}$ является гомоморфным отображением групп $\mathfrak{G}_{P_R}$ и $\mathfrak{G}_R$. Матричная группа $\mathfrak{G}_{D(R)}$, базисом которой является замкнутая система функций $\{\psi_m\}$, образует представление групп $\mathfrak{G}_R$ и $\mathfrak{G}_{P_R}$. Система функций $\{\psi_a\}$ задает некоторое линейное векторное гильбертово пространство Σ, а отдельные функции ψ_m системы можно рассматривать как базисные векторы этого векторного пространства.

Аналогичным образом базисные векторы $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ прямоугольной системы координат задают трехмерное евклидово пространство, в котором существует кристалл. Систему $\{\psi_a\}$ часто также называют функциональным пространством, инвариантным относительно действия группы. Как правило, мы не будем употреблять для системы (14.1) термин «полная система», так как этот термин подразумевает наличие некоторых аналитических свойств, не являющихся необходимыми в настоящем рассмотрении.

§ 15. Неприводимые представления и пространства

Пусть инвариантное функциональное пространство, определенное в § 14, имеет размерность l. Если имеется система функций

$$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_m, \quad m < 1, \tag{15.1}$$

то инвариантное функциональное пространство расщепляется на два инвариантных подпространства. Если такое расщепление происходит, то далее мы будем считать, что эти инвариантные подпространства ортогональны.

Совокупность матриц D, образующих представление группы $\mathfrak{G}_{D(R)}$, можно полностью привести или разложить на неприводимые. После полного приведения каждая матрица представления имеет квазидиагональный вид

$$D(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) = \begin{pmatrix} \bar{D}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) & 0 \\ 0 & H(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) \end{pmatrix} \tag{15.2}$$

для всех преобразований $\{\varphi \mid \boldsymbol{\tau}(\varphi)\}$ группы $\mathfrak{G}$. В (15.2) матрицы $\bar{D}$ и H имеют размеры $(m \times m)$ и $(l-m)\times(l-m)$ соответственно.

Если пространство содержит несколько инвариантных ортогональных подпространств, то разложение (полное приведение) матрицы (15.2) принимает более общий вид квазидиагональной матрицы с несколькими квадратными матрицами на диагонали.

Соответственно можно написать

$$P_{\{\varphi|t(\varphi)\}}\psi_a=\sum_{n=1}^{m}\bar{D}(\{\varphi|t(\varphi)\})_{na}\psi_n,\quad a=1,\ \dots,\ m, \tag{15.3}$$

и

$$P_{\{\varphi|t(\varphi)\}}\psi_a=\sum_{m+1}^{l}H(\{\varphi|t(\varphi)\})_{na}\psi_n,\quad a=m+1,\ \dots,\ l, \tag{15.4}$$

для всех $\{\varphi|t(\varphi)\}$, входящих в группу $\mathfrak{G}$. И в этом случае соотношения (15.3), (15.4) можно обобщить при наличии нескольких инвариантных ортогональных пространств.

Неприводимым представлением является такая система матриц D или группа $\mathfrak{G}_{D(R)}$, которая не может быть разложена, т. е. для которой невозможно привести одновременно все матрицы к виду (15.2). Если задано матричное представление D группы $\mathfrak{G}$, его приводимость можно проверить, используя лемму Шура [1—3].

Так, пусть задано представление $D(\{\varphi|t(\varphi)\}$ и матрица M, такая, что

$$MD(\{\varphi|t(\varphi)\})=D(\{\varphi|t(\varphi)\})M. \tag{15.5}$$

Если *единственная* матрица M, удовлетворяющая этому уравнению, равна $M=mD(\{\varepsilon|0\})$, где m — константа, то представление D неприводимо. Неприводимые представления обычно обозначают добавлением верхнего индекса к символу матрицы, например $D^{(l)}$. Мы примем это обозначение.

Если для конечной группы $\mathfrak{G}$ задан набор неприводимых представлений $D^{(l)}$, $l=1,\ \dots,\ r$, то для определения того, все ли неприводимые представления $\mathfrak{G}$ есть в этом наборе, можно использовать несколько (по существу эквивалентных) критериев. В случае пространственных групп не все критерии удобно использовать. Так, если число классов группы $\mathfrak{G}$ равно r, то группа $\mathfrak{G}$ имеет r различных неприводимых представлений. Далее, если рассмотреть след, или характер, матрицы $D^{(l)}\{\varphi|t(\varphi)\}$, определенный формулой

$$\chi^{(l)}(\{\varphi|t(\varphi)\})\equiv\sum_{n}D^{(l)}(\{\varphi|t(\varphi)\})_{nn}, \tag{15.6}$$

то

$$\sum_{l=1}^{r}|\chi^{(l)}(\{\varepsilon|0\})|^2=g_pN, \tag{15.7}$$

где $\{\varepsilon|0\}$ — единичный элемент группы, а g_pN — порядок группы $\mathfrak{G}$. Обозначим произвольный элемент класса $\mathfrak{C}_k$ как C_k, а произвольный элемент обратного класса $\mathfrak{C}^{-1}$ как C_k^{-1}, и пусть число элементов в классе $\mathfrak{C}_k$ равно c_k. Тогда

$$\sum_{k=1}^{r} c_k \chi^{(l)}(C_k)\, \chi^{(l')}(C_k)^* = g_p N \delta_{ll'}. \qquad (15.8)$$

Наконец,

$$\sum_{l=1}^{r} c_k \chi^{(l)}(C_k)\, \chi^{(l)}(C_j) = g_p N \delta_{j,\, k^{-1}}. \qquad (15.9)$$

Формулы (15.7)—(15.9) соответствуют хорошо известным результатам теории конечных групп. Отметим, что эти формулы, разумеется, справедливы для всей группы в целом: суммирование ведется по всем неприводимым представлениям l или по всем классам k группы $\mathfrak{G}$. Формулы, подобные (15.7)—(15.9), применимы также к подгруппе группы $\mathfrak{G}$, если только она рассматривается как целое, т. е. как группа, имеющая свои собственные классы, и т. п.

В заключение напомним теорему Машке: любое представление конечной группы либо неприводимо, либо вполне приводимо (разложимо).

В последующем изложении мы будем обозначать систему функций, образующих неприводимое линейное векторное пространство, являющееся базисом неприводимого представления $D^{(l)}$ группы $\mathfrak{G}$, как

$$\sum\nolimits^{(l)} \equiv \{\psi_1^{(l)}, \ldots, \psi_m^{(l)}, \ldots, \psi_l^{(l)}\}, \qquad (15.10)$$

где l — размерность представления $D^{(l)}$.

В дальнейшем, если специально не предполагается противоположное, будем считать, что совокупность базисных функций (15.10) образует ортонормированную систему, т. е. определено соответствующее скалярное произведение, такое, что

$$(\psi_m^{(l)} \psi_{m'}^{(l')}) = \delta_{mm'} \delta_{ll'}, \qquad (15.11)$$

где $D^{(l)}$, $D^{(l')}$ $(l \neq l')$ — неэквивалентные неприводимые представления. Обычно

$$(\psi_m^{(l)}, \psi_{m'}^{(l')}) = \int d^3\boldsymbol{r}\, \psi_m^{(l)}(\boldsymbol{r})^*\, \psi_{m'}^{(l')}(\boldsymbol{r}). \qquad (15.12)$$

Поскольку мы считаем, что выполняется соотношение (15.11), можно ограничиться рассмотрением унитарных неприводимых представлений $D^{(l)}$:

$$D^{(l)+} = D^{(l)^{-1}} \qquad (15.13)$$

или

$$\widetilde{D^{(l)*}} = D^{(l)^{-1}}. \qquad (15.14)$$

§ 16. Идемпотентные операторы преобразований

Чтобы найти полный набор неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}_{P_R}$, можно действовать систематическим образом, используя алгебру группы $\mathfrak{G}$ над комплексным полем [3, 22]. Таким методом можно выполнить приведение или разложение этой алгебры на прямую сумму простых двусторонних идеалов[1]). При разложении возникает $g_p N$ операторов $P_{mn}^{(l)}$, обладающих свойством

$$P_{\mu\nu}^{(l)} \cdot P_{\sigma\tau}^{(l')} = P_{\mu\tau}^{(l)} \delta_{ll'} \delta_{\tau\sigma}. \tag{16.1}$$

Свойство (16.1) является основным свойством приведенной алгебры. При полном разложении алгебры операторы $P_{\mu\nu}^{(l)}$ полностью определяются через линейные комбинации базисных элементов $P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}$ группы $\mathfrak{G}_{P_R}$. Отсюда следует, что

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} P_{\mu\nu}^{(l)} = \sum_{\mu'} D^{(l)} (\{\varphi \mid t(\varphi)\})_{\mu\mu'} P_{\mu'\nu'}^{(l)}, \tag{16.2}$$

так что набор операторов $P_{\mu'\nu}^{(l)}$ можно использовать для нахождения матриц $D^{(l)}$ неприводимого представления. Набор алгебраических величин $P_{\mu\nu}^{(l)}$ обладает рядом взаимосвязанных свойств, позволяющих проверить правильность их нахождения. Следует подчеркнуть, что полное определение набора $P_{\mu\nu}^{(l)}$ является чисто алгебраической задачей, разрешимой для конкретной структуры группы $\mathfrak{G}$ как в принципе, так и практически.

Более общепринятым [23], хотя, быть может, и более трудным, является обратное построение. Сначала находят все матричные неприводимые представления $D^{(l)}$ группы $\mathfrak{G}$. Затем образуют операторы $P_{mn}^{(l)}$ вида

$$P_{mn}^{(l)} = \frac{l}{N g_p} \sum_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} D^{(l)} (\{\varphi \mid t(\varphi)\})_{mn}^{*} P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}. \tag{16.3}$$

Полный набор таких операторов выражает разложение алгебры на прямую сумму простых двусторонних идеалов.

В обоих случаях операторы $P_{\mu\nu}^{(l)}$ служат для нахождения соответствующим образом симметризованных функций $\psi_{\mu\nu}^{(l)}$ (т. е. являющихся правильными линейными комбинациями). Пусть $\Psi(\boldsymbol{r})$ — произвольная функция. Тогда

$$P_{\mu\nu}^{(l)} \Psi \equiv \psi_{\mu\nu}^{(l)} \tag{16.4}$$

[1]) С понятием двусторонних (правых, левых) идеалов алгебры можно познакомиться, например, в книге [116], стр. 272—280.— *Прим. ред.*

представляет собой функцию, принадлежащую строке μ и столбцу ν линейного векторного пространства. Это пространство замкнуто, неприводимо и является базисом неприводимого представления $D^{(l)}$ группы $\mathfrak{G}$. Можно заметить, что для полного использования свойств операторов $P_{\mu\nu}^{(l)}$ необходимо характеризовать проектируемые ими функции как индексом строки, так и индексом столбца в соответствии с индексами операторов идеала. При фиксированном μ (или ν) набор l функций с ν (или μ) $= 1, \ldots, l$ образует компоненты неприводимого векторного пространства.

Используя характеры неприводимых представлений группы, можно построить более слабый набор операторов проектирования, чем (16.3). Операторы

$$P^{(l)} \equiv \frac{l}{Ng_p} \sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(l)} (\{\varphi \mid t(\varphi)\})^* P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} \tag{16.5}$$

имеют свойство

$$P^{(l)}\Psi \equiv \psi^{(l)}. \tag{16.6}$$

Это означает, что $P^{(l)}$ дает функцию, принадлежащую неприводимому представлению l, независимо от номера строки. Функции $\psi^{(l)}$ в общем случае представимы в виде суммы функций, являющихся базисными для разных строк неприводимого представления $D^{(l)}$. Если имеются только характеры, а не полные матрицы представлений, часто удается построить лишь слабые операторы проектирования. Однако в принципе при достаточном усердии можно построить как слабые, так и сильные операторы проектирования, используя прямые алгебраические методы, описанные в работах [3, 22].

§ 17. Прямые произведения

а. Прямые произведения представлений. Пусть векторное пространство $\Sigma^{(l)}$, определяемое согласно (15.10), является базисом представления $D^{(l)}$ группы $\mathfrak{G}$, и пусть система l' функций $\{\psi_{a'}\}$, образующих линейное векторное пространство $\Sigma^{(l')}$, является базисом представления $D^{(l')}$ группы $\mathfrak{G}$. Тогда набор $l \cdot l'$ функций $\{\psi_a \cdot \psi_{a'}\}$, $a = 1, \ldots, l$, $a' = 1, \ldots, l'$, образует линейное пространство $\Sigma^{(l \otimes l')}$ и является базисом представления $D^{(l)} \otimes D^{(l')}$ группы $\mathfrak{G}$. Векторное пространство $\Sigma^{(l \otimes l')}$ называется пространством прямого произведения, а $D^{(l)} \otimes D^{(l')}$ — прямым произведением представлений. Часто удобно, хотя и не обязательно, брать в качестве $D^{(l)}$ и $D^{(l')}$ неприводимые представления. В приведенном ниже обсуждении мы будем считать, что определяется именно прямое произведение неприводимых представлений.

Матричные элементы прямого произведения матриц имеют вид

$$\left(D^{(l)} \otimes D^{(l')}\right)_{\alpha\gamma\beta\delta} = D^{(l)}_{\alpha\beta} \cdot D^{(l')}_{\gamma\delta}, \qquad (17.1)$$

причем точка в правой части равенства (17.1) означает обычное перемножение двух комплексных чисел $D^{(l)}_{\alpha\beta}$ и $D^{(l')}_{\gamma\delta}$. В (17.1) подразумевается, что все матрицы соответствуют одному и тому же элементу группы:

$$(D^{(l)} \otimes D^{(l')})(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) = D^{(l \otimes l')}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\} =$$
$$= D^{(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) \otimes D^{(l')}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}). \qquad (17.2)$$

Равенство (17.2) дает несколько разных эквивалентных способов записи прямого произведения матриц. Прямое произведение представлений (17.2) также является представлением группы $\mathfrak{G}$ [1]. Поэтому группа $\mathfrak{G}$ гомоморфно отображена на группу $\mathfrak{G}_{D^{l \otimes l'}}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\})$, так что каждому элементу $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$ соответствует матрица из (17.2).

Всякое представление конечной группы приводимо (теорема Машке), поэтому (17.2) можно разложить на сумму неприводимых представлений. Используя определение характера или следа (15.6) и вычисляя след от (17.2), получаем

$$\chi^{(l \otimes l')}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) = \chi^{(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\})\, \chi^{(l')}(\{\varphi \mid (\varphi)\}) =$$
$$= \mathrm{Sp}\,[D^{(l)} \otimes D^{(l')}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\})]. \qquad (17.3)$$

б. Коэффициенты приведения. Определим теперь коэффициенты приведения для прямого произведения неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$. Обозначим через $(ll'|m) \geqslant 0$ число, показывающее, сколько раз неприводимое представление $D^{(m)}$ входит в разложение представления $D^{(l \otimes l')}$ на неприводимые составляющие. Тогда

$$D^{(l \otimes l')} = \sum_m \oplus (ll' \mid m)\, D^{(m)}. \qquad (17.4)$$

Аналогично для векторных пространств имеем

$$\Sigma^{(l \otimes l')} = \sum_m \oplus (ll' \mid m)\, \Sigma^{(m)}. \qquad (17.5)$$

В (17.4) и (17.5) суммирование следует понимать как определение прямой суммы, на что указывает символ $\oplus$:

$$D^{(l \otimes l')} = (ll' \mid 1)\, D^{(1)} \oplus (ll' \mid 2)\, D^{(2)} \oplus \ldots. \qquad (17.6)$$

Ряды вида (17.6) или (17.4) известны под названием рядов Клебша — Гордана, а числа $(ll'|m)$ часто называют «коэффициентами Клебша — Гордана». Мы предпочитаем использовать термин «коэффициенты приведения» во избежание путаницы с обычными коэффициентами Клебша — Гордана (см. § 18).

Вычисляя след каждой матрицы в (17.4), получаем

$$\chi^{(l\otimes l')}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})=\sum_m (ll'\,|\,m)\,\chi^{(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}). \tag{17.7}$$

В (17.7) суммирование производится по всем неприводимым представлениям группы $\mathfrak{G}$, а сумма теперь является обычной арифметической суммой. Коэффициенты приведения можно определить эквивалентным образом, используя соотношения ортонормировки:

$$(ll'\,|\,m)=\frac{1}{g_pN}\sum_{\mathfrak{G}}\chi^{(l\otimes l')}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\cdot\chi^{(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})^{*}, \tag{17.8}$$

где суммирование производится по всем элементам группы $\mathfrak{G}$. Выражение (17.8) можно переписать в несколько более компактной форме

$$(ll'\,|\,m)=\frac{1}{g_pN}\sum_k c_k\chi^{(l\otimes l')}(C_k)\,\chi^{(m)}(C_k)^{*}, \tag{17.9}$$

где сумма является обычной арифметической суммой. В (17.9) входят величины c_k, определяющие число элементов в классе k; C_k — типичный элемент класса $\mathfrak{C}_k$, а также характеры, определенные выше.

Коэффициенты приведения характеров непосредственно используются в физических приложениях. С их помощью получаются правила отбора для разрешенных оптических процессов, процессов рассеяния и др. Одна из основных целей нашей книги состоит в определении коэффициентов приведения для пространственных групп. Как будет показано ниже, формулы (17.4) и (17.7) позволяют определить полный набор коэффициентов $(ll'|m)$.

в. Неприводимые представления прямого произведения групп [20]. При анализе подгруппы трансляций $\mathfrak{T}$ полезный результат связан с понятием неприводимых представлений внутреннего прямого произведения групп. Группа $\mathfrak{H}$ называется внутренним прямым произведением двух групп $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$:

$$\mathfrak{H}=\mathfrak{A}\otimes\mathfrak{B}, \tag{17.10}$$

если каждый элемент группы $\mathfrak{H}$ может быть однозначным образом записан как «произведение» одного элемента из группы $\mathfrak{A}$ на один элемент из $\mathfrak{B}$:

$$H_k=A_l\cdot B_j=B_j\cdot A_l \tag{17.11}$$

и все элементы из $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$ коммутируют. Если $\Gamma^{(a)}$ есть неприводимое представление группы $\mathfrak{A}$, а $\Gamma^{(b)}$ — неприводимое представление группы $\mathfrak{B}$, то неприводимые представления $\Gamma^{(h)}$ группы $\mathfrak{H}$

определяются формулой

$$\Gamma^{(h)} = \Gamma^{(a)} \otimes \Gamma^{(b)} = \Gamma^{(b)} \otimes \Gamma^{(a)}, \tag{17.12}$$

где a и b пробегают все возможные значения индексов (соответствующих неприводимым представлениям) для групп $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$.

Как станет ясно из дальнейшего, анализ неприводимых представлений полупрямого произведения групп или групп, являющихся расширением одной группы при помощи другой, оказывается значительно более сложным и его не удается свести к такому компактному и простому результату, как (17.12). Этот анализ составляет основное содержание подробного рассмотрения, проводимого в нескольких последующих параграфах.

§ 18. Коэффициенты Клебша — Гордана

В настоящем параграфе завершается анализ, начатый в § 17. Там мы ввели в рассмотрение прямое произведение представлений и, согласно (17.4), коэффициенты приведения. Коэффициенты приведения показывают, сколько раз каждое неприводимое представление содержится в прямом произведении представлений.

Более полный анализ можно выполнить в том случае, когда прямое произведение представлений в виде (17.1) или в виде (17.2), подобном (17.1), преобразуется унитарной матрицей и при этом приводится к полностью приведенной или блочно-диагональной форме. Матричные элементы унитарной матрицы, преобразующей одновременно все матрицы к приведенной форме, называются коэффициентами Клебша — Гордана. Эти матричные элементы имеют также и другой важный и близко связанный с предыдущим смысл: они являются элементами матрицы, преобразующей пространство прямого произведения [левая часть равенства (17.5)] в неприводимые пространства [правая часть равенства (17.5)]. Другими словами, эти матричные элементы позволяют определить «правильные линейные комбинации» произведений функций (каждое из этих произведений содержит по одной функции из каждого пространства), являющихся базисом для неприводимого представления пространства прямого произведения. Как вскоре выяснится, коэффициенты приведения содержат меньшую информацию.

а. Определение коэффициентов Клебша — Гордана. Напомним еще раз равенство (15.10) и рассмотрение, приведенное в § 17. Пусть

$$\Sigma^{(l)} \equiv \{\psi_1^{(l)}, \ldots, \psi_l^{(l)}\} \to D^{(l)} \text{ группы } \mathfrak{G}, \tag{18.1}$$

$$\Sigma^{(l')} \equiv \{\psi_1^{(l')}, \ldots, \psi_{l'}^{(l')}\} \to D^{(l')} \text{ группы } \mathfrak{G}, \tag{18.2}$$

$$\Sigma^{(l \otimes l')} \equiv \{\psi_1^{(l)}\psi_1^{(l')}, \ldots, \psi_m^{(l)}\psi_{m'}^{(l')}, \ldots, \psi_l^{(l)}\psi_{l'}^{(l')}\} \to D^{(l \otimes l')} \text{ группы } \mathfrak{G}, \tag{18.3}$$

где стрелка указывает на представление, базисом которого являются приведенные функции. Предположим теперь, что $(ll' \mid l'') = 1$. Мы хотим определить единственную систему l'' функций, образующих базис представления $D^{(l'')}$ и являющихся некоторыми определенными линейными комбинациями произведений $\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}$. Если $(ll' \mid l'') > 1$, то существует $(ll' \mid l'')$ правильных линейных комбинаций из набора базисных функций (18.3) и каждая такая линейная комбинация дает линейно-независимую функцию $\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}$, где $\gamma = 1, \ldots, (ll' \mid l'')$, преобразующуюся как базис строки μ'' представления $D^{(l'')}$. Это имеет мест, когда $D^{(l'')}$ входит в $D^{l \otimes l'}$ кратное число раз, а γ называют иногда индексом кратности. Коэффициенты $\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right)$, входящие в эти правильные линейные комбинации и называемые коэффициентами Клебша — Гордана или коэффициентами векторного сложения, определены равенством

$$\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma} = \sum_{\mu\mu'} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right) \psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}. \tag{18.4}$$

Для $(ll' \mid l'')$ эти коэффициенты определяются однозначно с точностью до фазы, т. е. если умножить каждый коэффициент (все μ, μ' и μ'') на одинаковую фазу, то получится то же пространство $\Sigma^{(l'')}$, умноженное на фазу.

Если $(ll' \mid l'') > 1$, скажем $(ll' \mid l'') = 2$, то

$$\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma_1} = \sum_{\mu\mu'} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma_1 \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right) \psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')} \tag{18.5}$$

и

$$\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma_2} = \sum_{\mu\mu''} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma_2 \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right) \psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}. \tag{18.6}$$

Но любая линейная комбинация функций $\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma_1}$ и $\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma_2}$ также преобразуется как базисная функция $D^{l''}$; поэтому любая линейная комбинация коэффициентов $\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma_1 \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right)$ и $\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma_2 \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right)$ также дает правильную линейную комбинацию произведений $\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}$.

Таким образом, для $(ll' \mid l'') > 1$ выбор коэффициентов Клебша — Гордана неоднозначен. Любые линейные комбинации этих коэффициентов одинаково правильны.

С другой стороны, произведения $\psi_{\mu}^{(l')}\psi_{\mu'}^{(l')}$ можно записать в виде линейной комбинации функций $\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma}$:

$$\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')} = \sum_{\gamma l''\mu''} \begin{pmatrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{pmatrix}\!\!\left|\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\right) \psi_{\mu''}^{(l'')}. \tag{18.7}$$

Предположим, что все рассматриваемые неприводимые представления унитарны; тогда

$$\left(\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\right) = \left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)^*, \tag{18.8}$$

$$\sum_{l''\mu''\gamma}\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)\left(\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l & l' \\ \bar{\mu} & \bar{\mu}' \end{matrix}\right) =$$

$$= \sum_{l''\mu''\gamma}\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)\left(\begin{matrix} l & l' \\ \bar{\mu} & \bar{\mu}' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)^* = \delta_{\mu\bar{\mu}}\delta_{\mu'\bar{\mu}'}, \tag{18.9}$$

и

$$\sum_{\mu\mu'}\left(\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\right)\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \bar{\gamma} \\ \bar{\mu}'' & \end{matrix}\right) =$$

$$= \sum_{\mu\mu'}\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)^*\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} \bar{l}'' & \gamma \\ \bar{\mu}'' & \end{matrix}\right) = \delta_{l''\bar{l}''}\delta_{\mu''\bar{\mu}''}\delta_{\gamma\bar{\gamma}}. \tag{18.10}$$

Следует особо отметить, что для выполнения условия унитарности (18.8) в случае кратности $\gamma > 1$ необходимо предположить, что все отдельные базисы $\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma}$ выбраны ортонормированными. Это означает, что можно определить соответствующее скалярное (внутреннее) произведение, такое, что

$$\left(\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma},\ \psi_{\mu''}^{(l'')\gamma'}\right) = \int d^3\boldsymbol{r}\,\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma*}\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma'} = \delta_{\gamma\gamma'}.$$

Этому условию легко удовлетворить, используя метод Грамма — Шмита для построения ортонормированных функций по системе линейно-независимых функций.

Докажем теперь, что матрица, образованная коэффициентами Клебша — Гордана, выполняет приведение прямого произведения матриц (17.1), (17.2). Вспомним определение оператора P_R преобразующего функции согласно (14.3), (14.4). Применяя P_R к обеим частям равенства (18.4), получаем

$$P_R\psi_{\mu''}^{(l'')\gamma} = \sum_{\mu\mu'}\left(\begin{matrix} l & l' \\ \mu & \mu' \end{matrix}\middle|\begin{matrix} l'' & \gamma \\ \mu'' & \end{matrix}\right)\sum_{\nu\nu'} D^{(l)}(R)_{\nu\mu}D^{(l')}(R)_{\nu'\mu'}\psi_{\nu}^{(l)}\psi_{\nu'}^{(l')}. \tag{18.11}$$

Но

$$P_R \psi^{(l'')\gamma}_{\mu''} = \sum_{\bar{\mu}''} D^{(l'')}(R)_{\bar{\mu}''\mu''} \psi^{(l'')}_{\bar{\mu}''}, \tag{18.12}$$

или

$$\sum_{\bar{\mu}''} D^{(l'')}(R)_{\bar{\mu}''\mu''} \sum_{\bar{\nu}\bar{\nu}'} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \bar{\nu} & \bar{\nu}' & \bar{\mu}'' & \end{array} \right) \psi^{(l)}_{\bar{\nu}} \psi^{(l')}_{\bar{\nu}'} =$$

$$= \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array} \right) D^{(l)}(R)_{\nu\mu} D^{(l')}(R)_{\nu'\mu'} \psi^{(l)}_{\nu} \psi^{(l')}_{\nu'}. \tag{18.13}$$

Произведения $\psi^{(l)}_{\nu}\psi^{(l')}_{\nu'}$ линейно-независимы, поэтому

$$\sum_{\bar{\mu}''} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \nu & \nu' & \bar{\mu}'' & \end{array} \right) D^{(l'')}(R)_{\bar{\mu}''\mu''} = \sum_{\mu\mu'} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array} \right) D^{(l)}(R)_{\nu\mu} D^{(l')}(R)_{\nu'\mu'}. \tag{18.14}$$

Равенство (18.14) можно переписать в более удобной форме, если обе его части умножить на $\left(\begin{array}{cc|cc} l'' & \gamma & l & l' \\ \mu'' & & \bar{\nu} & \bar{\nu}' \end{array} \right)$, просуммировать по $l'' \mu'' \gamma$ и использовать затем равенство (18.9). Тогда получим

$$\sum_{l''\mu''\gamma} \sum_{\bar{\mu}''} \left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \nu & \nu' & \bar{\mu}'' & \end{array} \right) D^{(l'')}(R)_{\bar{\mu}''\mu''} \left(\begin{array}{cc|cc} l'' & \gamma & l & l' \\ \mu'' & & \bar{\gamma} & \bar{\nu}' \end{array} \right) =$$

$$= \sum_{\mu\mu'} \delta_{\bar{\nu}\mu} \delta_{\bar{\nu}'\mu'} D^{(l)}(R)_{\nu\mu} D^{(l')}(R)_{\nu'\mu'} = D^{(l)}(R)_{\nu\bar{\nu}} D^{(l')}(R)_{\nu'\bar{\nu}'}. \tag{18.15}$$

Таким образом, коэффициенты Клебша — Гордана являются элементами унитарной матрицы, которая преобразует прямое произведение $D^{(l)} \otimes D^{(l')}$ к приведенному виду.

Еще яснее это можно показать, если рассмотреть унитарную матрицу $U^{(l \otimes l')}$, преобразующую $D^{(l)} \otimes D^{(l')}$ в полностью приведенную матрицу Δ. Тогда

$$U^{-1} D^{(l)}(R) \otimes D^{(l')}(R)\, U = \Delta(R)$$

или

$$D^{(l)}(R) \otimes D^{(l')}(R) = U \Delta(R) \widetilde{U}^*. \tag{18.16}$$

Элементы матрицы Δ обычно записывают как $\Delta_{l''\nu'', \bar{l}''\bar{\nu}''}$, где

$$\Delta_{l''\nu'', \bar{l}''\bar{\nu}''} = \delta_{l''\bar{l}''} D^{(l'')}_{\nu''\bar{\nu}''}. \tag{18.17}$$

Если $(ll' | l'') > 1$, то удобно (без какой-либо потери общности) записывать Δ в такой форме, чтобы $D^{(l'')}$ входили в Δ в виде последовательных блоков, т. е.

$$\Delta_{l''\gamma\nu'',\,\bar{l}''\bar{\gamma}\bar{\nu}''}=\delta_{l''\bar{l}''}\delta_{\gamma\bar{\gamma}}D^{(l'')}_{\nu''\bar{\nu}''},\tag{18.18}$$

где $\gamma=1,\ \ldots,\ (ll'\,|\,l'')$.

Уравнение (18.16) можно переписать в виде

$$\sum_{l''\gamma\nu''}\sum_{\bar{l}''\bar{\gamma}\bar{\nu}''}U^{(l\otimes l')}_{\nu\nu',\,l''\gamma\nu''}\Delta(R)_{l''\gamma\nu'',\,\bar{l}''\bar{\gamma}\bar{\nu}''}U^{(l\otimes l')^{-1}}_{\bar{l}''\bar{\gamma}\bar{\nu}'',\,\bar{\nu}\bar{\nu}'}=\left(D^{(l)}(R)\otimes D^{l'}(R)\right)_{\nu\nu',\,\bar{\nu}\bar{\nu}'}$$

или

$$\sum_{l''\gamma}\sum_{\nu''\bar{\nu}''}U^{(l\otimes l')}_{\nu\nu',\,l''\gamma\nu''}D^{(l'')}(R)_{\nu''\bar{\nu}''}U^{(l\otimes l')*}_{\bar{\nu}\bar{\nu}',\,l''\gamma\bar{\nu}''}=D^{(l)}(R)_{\nu\bar{\nu}}D^{(l')}(R)_{\nu'\bar{\nu}'}.\tag{18.19}$$

Сравнивая (18.19) и (18.15), видим, что

$$U^{(l\otimes l')}_{\nu\nu',\,l''\gamma\nu''}=\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma\\ \nu & \nu' & \nu'' & \end{array}\right)\tag{18.20}$$

и что коэффициенты Клебша — Гордана являются элементами унитарной матрицы, выполняющей приведение $D^{(l)}\otimes D^{(l')}$. По-видимому, полезно отметить, что матрица (18.20) имеет несимметричные значки, так как строки матрицы U имеют индексы, соответствующие прямому произведению матриц [это видно из (18.16)], тогда как столбцы нумеруются индексами, относящимися к приведенной матрице, т. е. индексами отдельного неприводимого представления и индексом кратности. В полностью приведенной форме матрица Δ имеет блочный вид

$$\Delta(R)=\begin{vmatrix} D^{(1)}(R)\ \ldots & & \\ \vdots & \vdots & \\ & \ldots\ D^{(l'')}(R)\ \ldots & \\ & \vdots & \vdots \\ & & \ldots\ D^{(r)}(R) \end{vmatrix}.\tag{18.21}$$

б. Вычисление коэффициентов Клебша — Гордана. Нетрудно получить еще одну форму уравнения (18.15), позволяющую вычислять коэффициенты Клебша — Гордана. Умножим обе части (18.17) на $D^{(\bar{l}'')}(R)^{*}_{\bar{\nu}''\bar{\nu}''}$, просуммируем по R и используем ортогональность неприводимых представлений. Тогда получим

$$\sum_{l''\gamma}\sum_{\bar{\mu}''\mu''}\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma\\ \nu & \nu' & \bar{\mu}'' & \end{array}\right)\left(\begin{array}{cc|cc} l'' & \gamma & l & l'\\ \mu'' & & \bar{\nu} & \bar{\nu}' \end{array}\right)\delta_{l''\bar{l}''}\delta_{\bar{\mu}''\nu''}\delta_{\mu''\bar{\nu}''}\frac{g}{\bar{l}''}=$$

$$=\sum_{R}D^{(\bar{l}'')}(R)^{*}_{\nu''\bar{\nu}''}D^{(l)}(R)_{\nu\bar{\nu}}D^{(l')}(R)_{\nu'\bar{\nu}'},\tag{18.22}$$

или

$$\sum_{\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma \\ \nu & \nu' & \nu'' & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma \\ \bar\nu & \bar\nu' & \bar\nu'' & \end{pmatrix}^* =$$

$$= \frac{l''}{g}\sum_{R} D^{(l'')}(R)^*_{\nu''\bar\nu''}\, D^{(l)}(R)_{\nu\bar\nu}\, D^{(l')}(R)_{\nu'\bar\nu'}. \qquad (18.23)$$

Рассмотрим сначала случай $(ll' \mid l'') = 1$. При этом

$$\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \nu & \nu' & \nu'' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \bar\nu & \bar\nu' & \bar\nu'' \end{pmatrix} = \frac{l''}{g}\sum_{R} D^{(l'')}(R)^*_{\nu''\bar\nu''}\, D^{(l)}(R)_{\nu\bar\nu}\, D^{(l')}(R)_{\nu'\bar\nu'}. \qquad (18.24)$$

Если положить в (18.24) $\nu = \bar\nu$, $\nu' = \bar\nu'$ и $\nu'' = \bar\nu''$, то можно определить, какие из коэффициентов отличны от нуля. Отыскав отличный от нуля коэффициент, скажем при $\bar\nu = \nu_0$, $\bar\nu' = \nu'_0$ и $\bar\nu'' = \nu''_0$, можно выбрать его фазу так, чтобы он был вещественным, затем фиксировать $\bar\nu = \nu_0$, $\bar\nu' = \nu'_0$ и $\bar\nu'' = \nu''_0$ и далее рассмотреть все возможные значения ν, ν' и ν''. Такая процедура дает всю матрицу коэффициентов Клебша — Гордана для $(ll' \mid l'') = 1$.

Для $(ll' \mid l'') > 1$ систематический метод нахождения всех $(ll' \mid l'')$ наборов коэффициентов был предложен Костером [24]. Заметим, что выражение, входящее в левую часть уравнения (18.23):

$$\sum_{\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma \\ \nu & \nu' & \nu'' & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma \\ \bar\nu & \bar\nu' & \bar\nu'' & \end{pmatrix}^*$$

при фиксированных значениях $\bar\nu$, $\bar\nu'$ и $\bar\nu''$ является линейной комбинацией коэффициентов Клебша — Гордана. Но так как любая линейная комбинация также является правильной, можно отдельно вычислять величины

$$\begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma_1 \\ \nu & \nu' & \nu'' & \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} l & l' & l'' & \gamma_{(ll' \mid l'')} \\ \nu & \nu' & \nu'' & \end{pmatrix}$$

до тех пор, пока мы уверены, что матрицы, получаемые для γ и γ', ортогональны.

Следовательно, мы можем поступать так же, как в случае $(ll' \mid l'') = 1$, находя отличный от нуля коэффициент, фиксируя $\bar\nu = \nu_0$, $\bar\nu' = \nu'_0$ и $\bar\nu'' = \nu''_0$ и придавая ν, ν' и ν'' все возможные значения. Это дает матрицу коэффициентов Клебша — Гордана для $\gamma = 1$. Выберем теперь ν_0, ν'_0, ν''_0, не совпадающие с первой тройкой и дающие другие отличные от нуля коэффициенты. Положим $\bar\nu = \nu_0$, $\bar\nu' = \nu'_0$ и $\bar\nu'' = \nu''_0$, и пусть ν, ν', ν'' принимают все возможные значения. Это дает второй набор коэффициентов, который можно ортогонализовать по отношению к первому. Эту процедуру можно продолжить до получения всех $(l\,l'|l'')$ наборов коэффициентов.

в. Преобразование коэффициентов Клебша — Гордана. Для последующего рассмотрения полезно показать, как преобразуется матрица коэффициентов Клебша — Гордана при преобразованиях подобия представлений $D^{(l)}$, $D^{(l')}$ и $D^{(l'')}$. Пусть A — унитарная матрица; тогда

$$\bar{D}^{(l)} = AD^{(l)}A^{-1}, \quad \bar{D}^{(l')} = A'D^{(l')}A'^{-1}, \quad \bar{D}^{(l'')} = A''D^{(l'')}A''^{-1}. \tag{18.25}$$

Преобразованные базисные функции при этом имеют вид

$$\varphi_{\mu}^{(\bar{l})} = \sum_{\lambda} A_{\lambda\mu}^{-1}\psi_{\lambda}^{(l)}, \quad \varphi_{\mu'}^{(\bar{l}')} = \sum_{\lambda'} A'^{-1}_{\lambda'\mu'}\,\psi_{\lambda'}^{(l')}, \quad \varphi_{\mu''}^{(\bar{l}'')} = \sum_{\lambda''} A''^{-1}_{\lambda''\mu''}\psi_{\lambda''}^{(l'')}. \tag{18.26}$$

Если матрицу коэффициентов Клебша — Гордана в исходном базисе функций $\{\psi\}$ обозначить для простоты как $U^{(l\otimes l')}$, а для преобразованного базиса $\{\varphi\}$ как $V^{(l\otimes l')}$, то мы получим

$$\varphi_{\mu''}^{(\bar{l}'')} = \sum_{\lambda''} A''^{-1}_{\lambda''\mu''}\psi_{\mu''}^{(l'')} = \sum_{\lambda''} A''^{-1}_{\lambda''\mu''} \sum_{\lambda\lambda'} U^{(l\otimes l')}_{\lambda\lambda',\, l''\lambda''}\psi_{\lambda}^{(l)}\psi_{\lambda'}^{(l')} =$$

$$= \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} A''^{-1}_{\lambda''\mu''}U^{(l\otimes l')}_{\lambda\lambda',\,\lambda''l''} \sum_{\mu\mu'} A_{\mu\lambda}A'_{\mu'\lambda'}\varphi_{\mu}^{(\bar{l})}\varphi_{\mu'}^{(\bar{l}')}. \tag{18.27}$$

Но

$$\varphi_{\mu''}^{(l'')} = \sum_{\mu\mu'} V^{(\bar{l}\otimes\bar{l}')}_{\mu\mu',\,\bar{l}''\mu''}\varphi_{\mu}^{(\bar{l})}\varphi_{\mu'}^{(\bar{l}')}, \tag{18.28}$$

так что

$$V^{(\bar{l}\otimes\bar{l}')}_{\mu\mu',\,\bar{l}''\mu''} = \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} (A\otimes A)_{\mu\mu',\,\lambda\lambda'}U_{\lambda\lambda',\,l''\lambda''}A''^{-1}_{\lambda''\mu''}, \tag{18.29}$$

или

$$V = (A\otimes A)UA''^{-1}. \tag{18.30}$$

г. Метод операторов проектирования. Еще один метод получения коэффициентов Клебша — Гордана состоит в использовании операторов проектирования. Оператор проектирования $P^{(l'')}_{\mu''\nu''}$, определяемый равенством

$$P^{(l'')}_{\mu''\nu''} = \frac{l''}{g}\sum_{R} D^{(l'')}(R)^*_{\mu''\nu''}P_R, \tag{18.31}$$

имеет следующие свойства:

$$P^{(l'')}_{\mu''\mu''}\psi^{(l'')}_{\mu''} = \psi^{(l'')}_{\mu''}, \tag{18.32}$$

$$P^{(l'')}_{\mu''\nu''}\psi^{(l'')}_{\nu''} = \psi^{(l'')}_{\mu''}, \tag{18.33}$$

$$P^{(l'')}_{\mu''\nu''}F = \psi^{(l'')}_{\mu''}, \tag{18.34}$$

где F — произвольная линейная комбинация базисных функций:

$$F=\sum_{l}\sum_{\mu}\psi_{\mu}^{(l)}.$$

Операторы проектирования можно использовать для нахождения базисных функций представлений $D^{(l)}$ и $D^{(l')}$, затем образовать произведения $\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu}^{(l')}$ и далее использовать (18.34) для проектирования тех линейных комбинаций произведений, которые преобразуются как $\psi_{\mu''}^{(l'')}$. Таким образом, операторы проектирования можно использовать для нахождения коэффициентов Клебша — Гордана. Поскольку в этом методе требуется сначала вычислить базисные функции, проще использовать (18.23), для чего требуется только знание представлений. Однако, если базисные функции известны, операторы проектирования позволяют произвести хорошую проверку коэффициентов, вычисленных с использованием (18.23), так как, согласно (18.32), должно выполняться равенство

$$P_{\mu''\mu''}^{(l'')}\sum_{\mu\mu'}\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right)\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}=\sum_{\mu\mu'}\left(\begin{array}{cc|cc} l & l' & l'' & \gamma \\ \mu & \mu' & \mu'' & \end{array}\right)\psi_{\mu}^{(l)}\psi_{\mu'}^{(l')}. \qquad (18.35)$$

ГЛАВА 4

Неприводимые представления группы трансляций кристалла $\mathfrak{T}$

§ 19. Введение

В нескольких последующих параграфах (§ 20—25) рассматриваются неприводимые представления группы трансляций кристалла $\mathfrak{T}$. Обсуждаются основные понятия: волновой вектор $\boldsymbol{k}$, блоховский вектор $\psi(\boldsymbol{k})$, зона Бриллюэна, соотношение полноты и ортонормированности для неприводимых представлений, а также прямое произведение неприводимых представлений группы $\mathfrak{T}$. Так как $\mathfrak{T}$ является абелевой группой (точнее, прямым произведением трех более простых абелевых групп), математическая теория здесь очень проста. Однако для обсуждения представлений пространственной группы необходимо изложить этот материал в удобной для нас форме.

§ 20. Неприводимые представления группы $\mathfrak{T}$

В этом параграфе мы рассмотрим неприводимые представления одномерной группы трансляций $\mathfrak{T}_1$. Из (4.33) следует, что $\mathfrak{T}_1$ является абелевой группой с образующим элементом $\{\varepsilon|\boldsymbol{a}_1\}$.

Абелева группа имеет столько же классов $\mathfrak{C}_k$, сколько элементов, и каждый класс включает один элемент. Таким образом, в $\mathfrak{T}_1$ каждый элемент $\{\varepsilon|l_1\boldsymbol{a}_1\}$ является единственным элементом своего класса $\mathfrak{C}_{l_1}$. Поэтому абелева группа имеет столько же одномерных неприводимых представлений, сколько элементов. Обозначим неприводимое представление группы $\mathfrak{T}_1$ как $D^{(k_1)}$. Тогда, поскольку, согласно (4.41),

$$\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\}^{2N_2} = \{\varepsilon\,|\,0\}, \tag{20.1}$$

должно выполняться равенство

$$D^{(k_1)}\left(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\}^{2N_1}\right) = D^{(k_1)}\left(\{\varepsilon\,|\,0\}\right) = 1. \tag{20.2}$$

Но

$$D^{(k_1)}\left(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\}^{2N_1}\right) = \left[D^{(k_1)}\left(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\}\right)\right]^{2N_1} = 1. \tag{20.3}$$

Следовательно, величина $D^{(k_1)}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\})$ должна быть равна одному из $2N_1$ корней из единицы:

$$D^{(k_1)}\left(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{a}_1\}\right) = \exp - (2\pi i p_1/2N_1), \tag{20.4}$$

где
$$p_1 = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ (2N_1 - 1). \tag{20.5}$$

Более удобно отсчитывать p_1 иначе, а именно
$$p_1 = -N_1,\quad (-N_1 + 1),\ \ldots,\ 0,\ \ldots,\ (N_1 - 1). \tag{20.6}$$

Набор $2N_1$ возможных значений p_1 дает в (20.4) совокупность из $2N_1$ допустимых корней из единицы. Другими словами, (20.6) означает, что p_1 принимает набор целых значений (20.6) с точностью до $2N_1$. Поэтому каждое разрешенное значение p_1 эквивалентно значению $p_1 + 2N_1$:
$$p_1 \doteqdot p_1 + 2N_1. \tag{20.7}$$

Эквивалентность p_1 и $p_1 + 2N_1$ означает, что эти две величины дают совпадающие значения корня из единицы (20.4) и потому неразличимы. Для еще большего упрощения обозначений мы введем векторную терминологию, основанную на построении обратной решетки.

§ 21. Обратная решетка

По данной тройке векторов $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ в конфигурационном пространстве (§ 4) можно определить [12] тройку обратных векторов $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$, обладающих свойством
$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}_j = \delta_{ij} \tag{21.1}$$
Из (21.1) следует
$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{|\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3|}. \tag{21.2}$$

Остальные векторы получаются циклической перестановкой. Обратные векторы $\boldsymbol{b}_j$ образуют пространство, называемое обратным. Очевидно, что в обратном пространстве можно рассматривать векторы вида
$$\boldsymbol{\eta} = y_1\boldsymbol{b}_1 + y_2\boldsymbol{b}_2 + y_3\boldsymbol{b}_3, \tag{21.3}$$
где y_j — числа из интервала $-\infty < y_j < \infty$.

Вектор вида (21.3) имеет размерность обратной длины, так как, очевидно, эту размерность имеют векторы $\boldsymbol{b}_j$; если компоненты y_j непрерывно изменяются в пределах своих интервалов, то векторы $\boldsymbol{\eta}$ заполняют обратное пространство.

Рассмотрим теперь вектор в обратном пространстве, определенный равенством
$$\boldsymbol{B}_H = h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2 + h_3\boldsymbol{b}_3, \tag{21.4}$$
где h_j — целые числа. Набор всех таких векторов обратной решетки определяет сетку в обратной решетке. Можно просто

считать, что эта сетка или решетка определяется совокупностью точек, соответствующих концам векторов обратной решетки. В нашем рассмотрении обратную решетку следует считать просто системой точек; как будет показано, с этими точками связаны неприводимые представления группы трансляций $\mathfrak{T}$. Мы не будем использовать теорию нагруженного обратного (или Фурье) пространства, развитую Эвальдом [25].

Можно определить вектор, параллельный вектору $\boldsymbol{b}_1$, формулой

$$\boldsymbol{k}_1 \equiv \left(\frac{2\pi p_1}{2N_1}\right)\boldsymbol{b}_1, \tag{21.5}$$

где

$$p_1 = -N_1, \quad -N_1+1, \ldots, N_1-1, \tag{21.6}$$

а $2N_1$ определено в (4.41) и (20.1) как размер области Борна — Кармана в направлении $\boldsymbol{b}_1$.

Набор таких векторов, компоненты которых заданы рациональными дробными числами, очевидно, образует плотную, но дискретную последовательность. Эти векторы обладают свойством

$$-\pi\boldsymbol{b}_1 \leqslant \boldsymbol{k}_1 < \pi\boldsymbol{b}_1. \tag{21.7}$$

Обратим внимание на знак неравенства в правой части (21.7), который обусловлен тем, что все $(2N_1)$ корней из единицы, входящие в (20.4), должны быть независимыми.

Заметим, что эти векторы определены в соответствии с (20.4)—(20.7) и ограничены в области вблизи начала координат обратной решетки. Чтобы теперь привести вектор (21.4) в соответствие с (20.4), будем считать, что $\boldsymbol{k}_1 = \pi\boldsymbol{b}_1$ и $\boldsymbol{k}_1 = -\pi\boldsymbol{b}_1$ соответствуют одному и тому же вектору.

Поэтому, используя (20.5), можно переписать (20.4) в виде

$$D^{(\boldsymbol{k}_1)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_1\}) = \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1. \tag{21.8}$$

Такая форма одномерной матрицы неприводимого представления группы $\mathfrak{T}_1$ оказывается очень удобной.

§ 22. Неприводимые представления группы $\mathfrak{T} = \mathfrak{T}_1 \otimes \mathfrak{T}_2 \otimes \mathfrak{T}_3$

Очевидно, для группы $\mathfrak{T}_2$ можно просто повторить все рассуждения, только что использованные применительно к $\mathfrak{T}_1$. Соответственно определим

$$\boldsymbol{k}_2 = \frac{2\pi p_2}{2N_2}\boldsymbol{b}_2, \tag{22.1}$$

где

$$p_2 = -N_2, \quad -N_2+1, \ldots, N_2-1, \tag{22.2}$$

и, следовательно,

$$\pi \boldsymbol{b}_2 < \boldsymbol{k}_2 < \pi \boldsymbol{b}_2. \tag{22.3}$$

Поэтому, если обозначить неприводимые представления группы $\mathfrak{T}_2$ через $D^{(\boldsymbol{k}_2)}$, то

$$D^{(\boldsymbol{k}_2)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_2\}) = \exp - i\boldsymbol{k}_2 \cdot \boldsymbol{a}_2. \tag{22.4}$$

Наконец, повторяя те же рассуждения для $\mathfrak{T}_3$, определим

$$\boldsymbol{k}_3 \equiv \left(\frac{2\pi p_3}{2N_3}\right) \boldsymbol{b}_3, \tag{22.5}$$

где

$$p_3 = -N_3, \quad -N_3 + 1, \ \ldots, \ N_3 - 1, \tag{22.6}$$

и, следовательно,

$$-\pi \boldsymbol{b}_3 \leqslant \boldsymbol{k}_3 < \pi \boldsymbol{b}_3. \tag{22.7}$$

Обозначая затем неприводимые представления группы $\mathfrak{T}_3$ через $D^{(\boldsymbol{k}_3)}$, получаем

$$D^{(\boldsymbol{k}_3)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{a}_3\}) = \exp - i\boldsymbol{k}_3 \cdot \boldsymbol{a}_3. \tag{22.8}$$

Далее, группа $\mathfrak{T}$ является прямым произведением групп, поэтому применимо рассмотрение, приводящее к формулам (17.10)—(17.12). Соответственно обозначим неприводимые представления группы $\mathfrak{T}$ через $D^{(\boldsymbol{k})}$; тогда

$$D^{(\boldsymbol{k})} = D^{(\boldsymbol{k}_1)} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_2)} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_3)}. \tag{22.9}$$

Таким образом, используя (22.9), можно найти матрицу, соответствующую любому произвольному элементу группы $\mathfrak{T}$ и относящуюся к любому из допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{T}$. Отметим, что имеется $(2N_1) \cdot (2N_2) \cdot (2N_3)$ таких представлений, задаваемых выбором p_1, p_2 и p_3. Это число совпадает с числом элементов и классов группы $\mathfrak{T}$. Поэтому (22.9) действительно дает все неприводимые представления группы $\mathfrak{T}$.

§ 23. Волновой вектор. Первая зона Бриллюэна

Рассмотрим теперь элемент группы $\mathfrak{T}$

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3\}. \tag{23.1}$$

В представлении $D^{(\boldsymbol{k})}$ ему соответствует матрица

$$D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L, \tag{23.2}$$

где полный волновой вектор $\boldsymbol{k}$ определяется равенством

$$\boldsymbol{k} \equiv \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3 = 2\pi\left(\frac{p_1}{2N_1}\right)\boldsymbol{b}_1 + 2\pi\left(\frac{p_2}{2N_2}\right)\boldsymbol{b}_2 + 2\pi\left(\frac{p_3}{2N_3}\right)\boldsymbol{b}_3, \tag{23.3}$$

а p_1, p_2, p_3 выбраны согласно (21.5), (22.2) и (22.3). В явном виде

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L = l_1\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{a}_3, \tag{23.4}$$

где l_j — целые числа, или

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L = 2\pi\left(\frac{l_1p_1}{2N_1} + \frac{l_2p_2}{2N_2} + \frac{l_3p_3}{2N_3}\right). \tag{23.5}$$

Рассмотрим два волновых вектора $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$, где

$$\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + 2\pi\boldsymbol{B}_H. \tag{23.6}$$

Легко убедиться, что если $D^{(\boldsymbol{k})}$ дается формулой (23.2), то

$$D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) = \exp - i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L = \exp - i\,(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L + 2\pi\boldsymbol{B}_H\cdot\boldsymbol{R}_L). \tag{23.7}$$

Но

$$2\pi\boldsymbol{B}_h\cdot\boldsymbol{R}_L = 2\pi\,(h_1l_1 + h_2l_2 + h_3l_3), \tag{23.8}$$

где все h_j и l_j — целые числа. Следовательно,

$$D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) = \exp - i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}). \tag{23.9}$$

Таким образом, если $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ — два волновых вектора, связанных соотношением (23.6), то они определяют одно и то же неприводимое представление группы $\mathfrak{T}$. Заметим также соответствие этого вывода с выводом, следующим из (20.7). Сформулируем результат. Набор всех векторов $\boldsymbol{k}$ в обратной решетке, где $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3$ и

$$-\pi\boldsymbol{b}_1 \leqslant \boldsymbol{k}_1 < \pi\boldsymbol{b}_1, \quad -\pi\boldsymbol{b}_2 \leqslant \boldsymbol{k}_2 < \pi\boldsymbol{b}_2, \quad -\pi\boldsymbol{b}_3 \leqslant \boldsymbol{k}_3 < \pi\boldsymbol{b}_3, \tag{23.10}$$

определяет набор всех неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$. Этот набор всех независимых векторов $\boldsymbol{k}$ в обратной решетке заполняет объем и поверхность полиэдрической ячейки, находящейся в начале координат обратной решетки. Определенная таким образом ячейка в форме многогранника называется первой зоной Бриллюэна кристалла [26]. Она имеет полную симметрию точечной группы пространственной группы. Поэтому первая зона Бриллюэна содержит все векторы $\boldsymbol{k}$, удовлетворяющие неравенствам (23.10). Однако из двух векторов $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$, удовлетворяющих (23.6), только один должен быть включен в эту зону.

Можно дать и другое определение первой зоны Бриллюэна, лучше согласующееся с общепринятыми трактовками математической кристаллографии. Согласно Шенфлису, основную ячейку кристалла можно определить путем следующего геометрического построения. Построим векторы, выходящие из начала координат к первым, вторым и т. д. соседним с началом координат атомам. Построим плоскости, пересекающие перпендикулярно середины этих векторов. Геометрическое место точек, расположенных на поверхности и внутри области, ограниченной этими плоскостями, определяет область в пространстве, известную как основная ячейка Шенфлиса. Эта ячейка обладает симметрией точечной группы кристалла. Если последовательно смещать эту ячейку из начала координат на векторы решетки, оказывается, что ячейки образуют плотную упаковку, заполняя пространство без промежутков. Ячейка Шенфлиса является трехмерным решением задачи Гильберта о возможных неэквивалентных способах заполнения трехмерного пространства многогранниками. На несколько лет позднее Шенфлиса ячейка в форме многогранника и ее свойства были заново открыты Вигнером и Зейцем [27]. Эту ячейку часто называют многогранником Вигнера — Зейца.

Отметим, что для построения зоны Бриллюэна или ячейки обратного пространства методом Шенфлиса следует прежде всего видоизменить обратную решетку, построенную на векторах обратной решетки (21.3). Рассмотрим пространственную решетку, определенную векторами

$$2\pi \boldsymbol{B}_H = 2\pi h_1 \boldsymbol{b}_1 + 2\pi h_2 \boldsymbol{b}_2 + 2\pi h_3 \boldsymbol{b}_3. \tag{23.11}$$

Видоизменение тривиальным образом сводится к умножению всех векторов обратной решетки на 2π. Следуя Эвальду, будем называть решетку, заданную конечными точками векторов $2\pi\boldsymbol{B}_H$, решеткой Фурье. Тогда первая зона Бриллюэна получается путем построения Шенфлиса в решетке Фурье.

Набор из $(2N_1)\cdot(2N_2)\cdot(2N_3)$ точек $\boldsymbol{k}$-пространства в первой зоне Бриллюэна определяет полный набор неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$.

С другой стороны, первую зону Бриллюэна можно определить как набор из $(2N_1)\cdot(2N_2)\cdot(2N_3)$ точек $\boldsymbol{k}$-пространства, задающих полный набор неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$. При использовании последнего определения [28] нет необходимости считать, что все точки первой зоны Бриллюэна заключены в замкнутом многограннике. Единственное ограничение на значения $\boldsymbol{k}$ состоит в том, что из совокупностей $\boldsymbol{k}_1$, $\boldsymbol{k}_1'$, ..., удовлетворяющих (23.6), следует использовать только одну. Так, например, согласно общепринятому определению зоны Бриллюэна, следует считать принадлежащей этой зоне только одну из пары точек, находящихся на противоположных гранях зоны. Вторая оказывается лишней; выбор одной точки из пары произволен.

§ 24. Условия полноты и ортонормированности для представлений $D^{(k)}$

Проверим теперь соотношения полноты и ортонормированности (15.7)—(15.9), используя неприводимые представления $D^{(k)}$ в пространстве блоховских векторов $\psi^{(k)}$. Заметим, что в записи (15.7)—(15.9) эти соотношения относятся ко всей группе $\mathfrak{G}$. При использовании их для $\mathfrak{T}$ следует положить $g_p = 1$.

Поскольку неприводимые представления одномерны, сумма (15.7) равна

$$\sum_{l=1}^{r} \cdot 1 = \sum_{\mathfrak{T}} \cdot 1 = (2N_1)(2N_2)(2N_3), \tag{24.1}$$

причем последнее равенство следует из того, что для абелевой группы число классов определяется равенством

$$r = (2N_1) \cdot (2N_2) \cdot (2N_3) \tag{24.2}$$

и равно числу элементов группы.

Поскольку $D^{(k)}$ одномерны, матрица и ее характер совпадают: $D^{(k)} = \chi^{(k)}$. Поэтому из (15.8) имеем

$$\sum_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}} D^{(k)}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) D^{(k')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})^* - \sum_{l_1}\sum_{l_2}\sum_{l_3} \exp - i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L - \boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L) =$$
$$= \sum_{l_1 l_2 l_3} \exp - 2\pi i\left(\frac{l_1(p_1 - p_1')}{2N_1} + \frac{l_2(p_2 - p_2')}{2N_2} + \frac{l_3(p_3 - p_3')}{2N_3}\right). \tag{24.3}$$

В (24.3) значения (p_1, p_2, p_3) и (p_1', p_2', p_3') следует выбрать согласно (21.6), (22.2) и (22.6), а суммирование по значениям (l_1, l_2, l_3) следует проводить в соответствии с условиями Борна — Кармана, т. е. в соответствии с (4.42) $-N_j < l_j \leqq N_j$. Это суммирование легко выполняется. Для иллюстрации вычислим сумму по l_j. При этом удобно заменить интервал суммирования на интервал $0 \leqslant l_j < 2N_1$. Тогда

$$\sum_{l_1=0}^{2N_1-1} \exp - (2\pi i y_1 l_1) = \frac{1 - e^{-2\pi i y_1 (2N_1)}}{1 - e^{-2\pi i y_1}}, \tag{24.4}$$

где

$$y_1 \equiv \frac{p_1 - p_1'}{2N_1}. \tag{24.5}$$

Изменение интервала суммирования на результат не влияет. Функция, стоящая в правой части (24.4), исчезающе мала, за исключением случая, когда величина y_1 равна целому числу:

$$y_1 = n_1. \tag{24.6}$$

Тогда эта функция равна $(2N_1)$. Тройная сумма (24.3) определяется произведением трех таких сомножителей, так что

$$\sum_{\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})\, D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})^* = (2N_1)(2N_2)(2N_3)\,\Delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'). \quad (24.7)$$

Функция $\Delta(\boldsymbol{\eta})$ обладает свойством [4]

$$\Delta(\boldsymbol{\eta}) = \begin{cases} 1 & \text{при } \boldsymbol{\eta} = 2\pi \boldsymbol{B}_H, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (24.8)$$

В (24.8) $\boldsymbol{B}_H$ — вектор обратной решетки. Но так как мы специально ограничили разрешенные значения вектора $\boldsymbol{k}$ областью внутри или на поверхности первой зоны Бриллюэна, вектор $\boldsymbol{B}_H = 0$ (два вектора, различающиеся на вектор обратной решетки, определяют эквивалентные неприводимые представления, из которых следует брать лишь одно). Очевидно, функция (24.4) в пределе $N_1 \to \infty$, $N_2 \to \infty$, $N_3 \to \infty$ совпадает с дельта-функцией; при достаточно больших N_1, N_2, N_3 можно считать, что погрешности малы. Таким образом, мы доказали (15.8).

Проверим теперь для представлений $D^{(\boldsymbol{k})}$ свойство (15.9). Равенство (15.9) записывается в виде

$$\sum_{\boldsymbol{k}} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})\, D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\}) =$$

$$= \sum_{p_1 p_2 p_3} \exp - 2\pi i \left(\frac{p_1(l_1+m_1)}{2N_1} + \frac{p_2(l_2+m_2)}{2N_2} + \frac{p_3(l_3+m_3)}{2N_3} \right). \quad (24.9)$$

Выполним теперь суммирование по разрешенным значениям (p_1, p_2, p_3), определенным формулами (21.6), (22.2), (22.6). Используя результаты (24.3) и (24.7), можно непосредственно выписать результат

$$\sum_{\boldsymbol{k}} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})\, D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\}) = (2N_1)(2N_2)(2N_3)\,\Delta(\boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M), \quad (24.10)$$

где

$$\Delta(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 1 & \text{при } \boldsymbol{r} = 0, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (24.11)$$

Дельта-функция (24.11) относится к пространству кристалла или конфигурационному пространству. Следовательно, чтобы (24.10) было отлично от нуля, должно выполняться условие

$$\boldsymbol{R}_L = -\boldsymbol{R}_M. \quad (24.12)$$

Однако (24.12) просто означает, что в подгруппе $\mathfrak{T}$, рассматриваемой как группа, элементы $\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\}$ и $\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_M\}$ должны представлять собой обратные классы. Действительно, так как каждый элемент $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$ является единственным элементом в своем классе в группе $\mathfrak{T}$, класс, обратный классу $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$, включает единственный элемент $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}^{-1} = \{\varepsilon|-\boldsymbol{R}_L\}$. Таким образом, мы доказали справедливость (15.9) для $D^{(\boldsymbol{k})}$.

§ 25. Неприводимые векторные пространства группы $\mathfrak{T}$. Блоховские векторы

Обратимся теперь к линейным векторным пространствам $\Sigma^{(\boldsymbol{k})}$, в которых заданы неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})}$, группы $\mathfrak{T}$. Векторы, образующие это пространство, являются функциями, которые обычно называют блоховскими функциями.

Каждое неприводимое представление $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$ одномерно, поэтому отдельная блоховская функция или блоховский вектор образует соответствующее неприводимое линейное векторное пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})}$. Пусть $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ — блоховская функция. Тогда из (14.5) имеем

$$P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})} = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,\psi^{(\boldsymbol{k})} = \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L\psi^{(\boldsymbol{k})}. \tag{25.1}$$

Равным образом из (12.5) получаем

$$P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \psi^{(\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r}\right) = \\ = \psi^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_L\}\cdot\boldsymbol{r}) = \psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_L). \tag{25.2}$$

Следовательно, для блоховской функции $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ имеем

$$\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_L) = \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L\psi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}). \tag{25.3}$$

Поскольку каждая блоховская функция образует неприводимое векторное пространство для группы $\mathfrak{T}$, каждая из $(2N_1)\cdot(2N_2)\times\times(2N_3)$ функций линейно-независима от остальных. Это очень важное свойство, которым мы вскоре воспользуемся. Заметим, что на этой стадии рассуждений существование блоховских векторов было постулировано на совершенно общих теоретико-групповых основаниях. До сих пор этот вектор не связывался с конкретным дифференциальным уравнением или уравнением в частности производных, описывающим динамику какой-либо физической системы.

Для получения блоховской функции $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ из произвольной функции $\overline{\Psi}$ можно использовать оператор проектирования (16.3) группы $\mathfrak{T}$. Мы знаем и имеем все необходимое для построения и использования такого оператора. В данном случае все неприводимые представления одномерны, и, следовательно, подставляя одномерную матрицу, т. е. комплексное число $D^{(\boldsymbol{k}^*)}$, в (16.3) мы получим для оператора $P^{(\boldsymbol{k})}$:

$$P^{(\boldsymbol{k})}=\frac{1}{N}\sum_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\,P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}. \tag{25.4}$$

Легко убедиться, что

$$P^{(\boldsymbol{k})}\overline{\Psi}=\psi^{(\boldsymbol{k})} \tag{25.5}$$

и что для функции $\psi^{(\boldsymbol{k})}$, определенной равенством (25.5), имеет место соотношение

$$P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})}=D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,\psi^{(\boldsymbol{k})}, \tag{25.6}$$

как и следовало ожидать.

Быть может, полезно подчеркнуть, что оператор $P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}$ можно использовать для проверки того, что $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ является блоховским вектором и для определения его волнового вектора $\boldsymbol{k}$ по матрице $D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L$. И наоборот, функция, умножающаяся на $D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})$ при действии оператора $P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}$, является блоховским вектором с волновым вектором $\boldsymbol{k}$.

§ 26. Прямое произведение в группе $\mathfrak{T}$

Проиллюстрируем теперь теоремы (17.4)—(17.6), относящиеся к понятию прямого произведения. Так, если $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ является блоховской функцией, образующей инвариантное и неприводимое пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})}$, а $\psi^{(\boldsymbol{k}')}$ образует пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}')}$, то их произведение

$$\psi^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi^{(\boldsymbol{k}')} \tag{26.1}$$

образует пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k}')}$. Но из соотношений

$$P_{\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi^{(\boldsymbol{k}')}=D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,\psi^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi^{(\boldsymbol{k}')}= \tag{26.2}$$

$$=\exp-[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}_L]\,\psi^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi^{(\boldsymbol{k}')}= \tag{26.3}$$

$$=D^{(\boldsymbol{k}\oplus\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,\psi^{(\boldsymbol{k})}\psi^{(\boldsymbol{k}')} \tag{26.4}$$

следует, что $\Sigma^{(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k}')}$ также является неприводимым пространством. Таким образом, волновой вектор $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$ или равен волновому вектору из первой зоны Бриллюэна, или же эквивалентен (отличаясь на $2\pi\boldsymbol{B}_H$) волновому вектору из первой зоны Бриллюэна.

Коэффициенты приведения для прямого произведения в группе $\mathfrak{T}$ особенно просты: лишь один из них, соответствующий разрешенному значению $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$, отличен от нуля, т. е.

$$D^{(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k}')}=D^{(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')},$$

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k}')}=\Sigma^{(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')},$$

как следует из формул (17.4), (17.5).

ГЛАВА 5

Неприводимые представления и векторные пространства пространственных групп

§ 27. Введение

Данная глава, включающая § 27—51, является одной из наиболее важных глав всей книги. В ней излагается общая теория неприводимых представлений пространственных групп. Рассматриваются как случай симморфных, так и случаи несимморфных групп. Излагаемый здесь материал применим к любой системе многих тел, обладающей симметрией пространственной группы; с другой стороны, любая такая система, инвариантная относительно группы преобразований, образующих пространственную группу $\mathfrak{G}$, обладает свойствами, согласующимися с неприводимыми представлениями группы $\mathfrak{G}$.

В дальнейшем изложении мы прежде всего будем считать, что нам известны неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$, и установим целый ряд свойств этой матричной группы. При этом главную роль играет тот факт, что $\mathfrak{T}$ является нормальной подгруппой $\mathfrak{G}$. Вследствие этого блоховские векторы $\psi^{(\boldsymbol{k})}$, являющиеся базисными для неприводимых представлений группы $\mathfrak{T}$, можно использовать всюду в качестве составляющих элементов для неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$. Неприводимые представления $\mathfrak{G}$ заданы в пространстве, образуемом совокупностью s блоховских векторов $\{\psi^{(\boldsymbol{k})}, \psi^{(\boldsymbol{k}_2)}, \ldots, \psi^{(\boldsymbol{k}_s)}\}$. Набор из s волновых векторов $\{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}_2, \ldots, \boldsymbol{k}_s\}$, соответствующих этой совокупности, образует звезду $^*\boldsymbol{k}$. При этом имеются две возможности: либо $s = p$, либо $s < p$, где p — индекс подгруппы $\mathfrak{T}$ группы $\mathfrak{G}$ (т. е. порядок факторгруппы $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$).

Первый случай соответствует звезде общего типа; рассмотрение таких представлений оказывается простым.

Второй случай соответствует звезде специального типа, и при его рассмотрении проявляются новые особенности неприводимых представлений пространственных групп. Рассмотрение звезды специального типа приводит к понятию пространственной группы волнового вектора $\boldsymbol{k}$, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, и к задаче о неприводимых представлениях группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Допустимые неприводимые представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ индуцируют неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$. Построив неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$, мы проверим для них соотношения полноты и ортонормированности.

Математическая сторона теории, разработанная Клиффордом [23, 29] и связанная со структурой группы $\mathfrak{G}$ или $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ как расширения группы $\mathfrak{T}$ при помощи $\mathfrak{P}$ [или $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$], будет рассмотрена в § 36. Читателю, интересующемуся в основном более абстрактными аспектами теории, можно рекомендовать прочесть сначала § 36, а затем вернуться к § 28—35. Согласно нашему опыту, принятый нами несколько более индуктивный характер изложения оказывается предпочтительным для физиков-теоретиков и экспериментаторов, которым и адресована эта книга [26, 28, 30—32] [1]).

§ 28. Неприводимые представления $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$

Необходимо ввести некоторые обозначения. Символ

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}) \tag{28.1}$$

используется для обозначения матрицы, соответствующей элементу $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$ в неприводимом представлении группы $\mathfrak{G}$, обозначаемом символами $(^\star\boldsymbol{k})(m)$. Эти символы подробно поясняются ниже. Для любого неприводимого представления [т. е. для заданных $(^\star\boldsymbol{k})(m)$] матрицы (28.1) должны перемножаться так же, как элементы группы, т. е., например,

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi_l)\}\cdot D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_n\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi_n)\}) =$$
$$= D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l\varphi_n\,|\,\varphi_l\cdot\boldsymbol{t}(\varphi_n)+\boldsymbol{t}(\varphi_l)\}). \tag{28.2}$$

Предположим, что неприводимое представление имеет размерность

$$\dim D^{(\star\boldsymbol{k})(m)} = (s\cdot l_m). \tag{28.3}$$

Тогда в неприводимом линейном векторном пространстве $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ имеются $(s\cdot l_m)$ векторов, образующих базис представления $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$.

Здесь следует подчеркнуть, что для понимания последующего важно ясно представлять себе следующие математические понятия:

а) пространственная группа $\mathfrak{G}$, состоящая из операций преобразования координат $\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\}$, и изоморфная ей пространственная группа $\mathfrak{G}$, состоящая из операторов $P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}}$, действующих на функции;

б) матричная группа $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, образующая матричное представление (в данном случае неприводимое) группы $\mathfrak{G}$;

---

[1]) Полные таблицы неприводимых представлений пространственных групп можно найти в [17, 119].— *Прим. ред.*

в) соответствующее векторное функциональное пространство, которое при действии на него операторов $P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}$ дает представления $D^{(\star k)(m)}$.

Далее, будем считать, что пространство $\Sigma^{(\star k)(m)}$ символически представлено вектор-строкой, содержащей $(s \cdot l_m)$ базисных векторов $\eta_\alpha^{(m)}$:

$$\Sigma^{(\star k)(m)} = \left\{\eta_1^{(m)}, \eta_2^{(m)}, \ldots, \eta_{s \cdot l_m}^{(m)}\right\}. \tag{28.4}$$

Представление $D^{(\star k)(m)}$ задано этим пространством:

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}\eta_\alpha^{(m)} = \sum_{\beta=1}^{(s \cdot l_m)} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})_{\beta\alpha}\, \eta_\beta^{(m)}, \quad \alpha = 1, \ldots, (s \cdot l_m). \tag{28.5}$$

В уравнении (28.5) $\eta_\alpha^{(m)}$ — любой из $(s \cdot l_m)$ базисных векторов пространства $\Sigma^{(\star k)(m)}$. Таким образом, для всего пространства и представления можно написать

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}\Sigma^{(\star k)(m)} = \Sigma^{(\star k)(m)} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}). \tag{28.6}$$

§ 29. Представление группы $\mathfrak{T}$, полученное ограничением представления $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$

Поскольку $D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})$ является представлением группы, то

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\}) \tag{29.1}$$

является представлением подгруппы $\mathfrak{T}$. Это представление мы будем называть ограниченным представлением: оно получается, если набор рассматриваемых элементов $\{\varphi \mid t(\varphi)\}$ ограничить элементами подгруппы $\mathfrak{T}$. Как представление группы $\mathfrak{T}$, $D^{(\star k)(m)}$, согласно теореме Машке, либо неприводимо, либо разлагается в сумму нериводимых представлений группы $\mathfrak{T}$. Будем считать, что (29.1) выбрано в полностью приведенной форме для всех трансляций из $\mathfrak{T}$:

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\}) =$$

$$= \begin{pmatrix} \mathrm{I\!I}_1 \exp - ik_1 \cdot R_L & 0 & 0 \ldots 0 \\ 0 & \mathrm{I\!I}_2 \exp - ik_2 \cdot R_L & \ldots \\ 0 & \ldots & \mathrm{I\!I}_s \exp - ik_s R_L \end{pmatrix}. \tag{29.2}$$

В (29.2) входят единичные матрицы $\mathbf{I}_\alpha$ размера $(l_\alpha \times l_\alpha)$:

$$\mathbf{I}_1 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & 1 & & & \vdots \\ \vdots & & 1 & & \\ 0 & & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad \text{размера } (l_1 \times l_1) \text{ и т. д.} \tag{29.3}$$

Таким образом, мы предположили, что в представление $D^{(\star k)(m)}$ неприводимое представление $D^{(k_1)}$ группы $\mathfrak{T}$ входит l_1 раз, $D^{(k_2)}$ входит l_2 раз, ..., $D^{(k_s)}$ входит l_s раз. Предположение о том, что $D^{(\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})$ имеет форму (29.2), не накладывает на наше рассмотрение никаких существенных ограничений. Величины $\exp - i\boldsymbol{k}_\alpha \cdot \boldsymbol{R}_L$ являются (одномерными) матрицами неэквивалентных неприводимых представлений группы $\mathfrak{T}$. Поскольку эти матрицы неэквивалентны, векторы $\boldsymbol{k}_\alpha$ различимы и неэквивалентны, т. е.

$$\boldsymbol{k}_1 \neq \boldsymbol{k}_2 + 2\pi \boldsymbol{B}_H \text{ и т. д.} \tag{29.4}$$

Поэтому первые l_1 функций пространства $\Sigma^{(\star k)(m)}$ мы можем отождествить с блоховскими функциями (или блоховскими векторами), характеризуемыми волновым вектором $\boldsymbol{k}_1$:

$$\{\eta_1^{(m)}, \dots, \eta_{l_1}^{(m)}\} \equiv \{\psi_1^{(k_1)(m)}, \dots, \psi_{l_1}^{(k_1)(m)}\}. \tag{29.5}$$

В (29.5) мы ввели обозначение

$$\psi_{\lambda_1}^{(k_1)(m)}, \quad \lambda_1 = 1, \dots, l_1, \tag{29.6}$$

для блоховской функции с волновым вектором $\boldsymbol{k}_1$; дополнительный индекс m объясняется ниже, а индекс λ_1 нумерует l_1 возможных функций. Аналогичным образом следующие l_2 функций образуют набор

$$\psi_{\lambda_2}^{(k_2)(m)}, \quad \lambda_2 = 1, \dots, l_2 \tag{29.7}$$

и т. д., так что в общем случае

$$\psi_{\lambda_\alpha}^{(k_\alpha)(m)}, \quad \lambda_\alpha = 1, \dots, l_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, s. \tag{29.8}$$

Эти результаты можно кратко свести к следующему:

$$D^{(\star k)(m)} \downarrow l_1 D^{(k_1)} \oplus l_1 D^{(k_2)} \oplus \dots \oplus l_s D^{(k_s)} \tag{29.9}$$

и

$$\Sigma^{(\star k)(m)} \downarrow l_1 \Sigma^{(k_1)} \oplus l_2 \Sigma^{(k_2)} \oplus \dots \oplus l_s D^{(k_s)}. \tag{29.10}$$

Подразумевается, что в выражениях (29.9) и (29.10) левая часть представляет собой неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$, а правая часть выражает разложение ограниченного представления на неприводимые представления группы $\mathfrak{T}$.

В заключение выпишем, используя (29.2), выражение для следа матрицы

$$\operatorname{Sp} D^{(\star \boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) = \sum_{\alpha=1}^{(s)} l_\alpha \exp - i\boldsymbol{k}_\alpha \cdot \boldsymbol{R}_L. \tag{29.11}$$

§ 30. Преобразование блоховских векторов операторами поворотов

Прежде чем продолжить изучение представления $D^{(\star \boldsymbol{k})(m)}$, нам потребуется некоторый промежуточный результат. Основными составляющими блоками для представлений являются блоховские векторы $\psi^{(\boldsymbol{k})}$, и нам следует рассмотреть преобразованные функции. Таким образом, пусть $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ — блоховский вектор с волновым вектором $\boldsymbol{k}$, так что, согласно (25.6),

$$P_{\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}} \psi^{(\boldsymbol{k})} = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) \psi^{(\boldsymbol{k})}. \tag{30.1}$$

Рассмотрим функцию

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \psi^{(\boldsymbol{k})}. \tag{30.2}$$

Из равенства

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\} = \{\varphi \mid \tau_\lambda\} \cdot \{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} \tag{30.3}$$

получаем для (30.2)

$$\begin{aligned} P_{\{\varepsilon \mid R_L\}} \cdot \left(P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \psi^{(\boldsymbol{k})}\right) &= P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \cdot P_{\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}} \psi^{(\boldsymbol{k})} = \\ &= D^{(\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\}\right) P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \psi^{(\boldsymbol{k})}. \end{aligned} \tag{30.4}$$

Но

$$\begin{aligned} D^{(\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\}\right) &= \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \left(\varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\right) = \\ &= \exp - i(\varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{R}_L = D^{(\boldsymbol{k}_\lambda)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}), \end{aligned} \tag{30.5}$$

где

$$\boldsymbol{k}_\lambda \equiv \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k} \tag{30.6}$$

есть некоторый волновой фактор. Можно выделить два случая:

$$\boldsymbol{k}_\lambda = \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \tag{30.7}$$

$$\boldsymbol{k}_\lambda = \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{30.8}$$

В случае (30.7) $D^{(\boldsymbol{k}_\lambda)}$ эквивалентно представлению $D^{(\boldsymbol{k})}$; в случае (30.8) эти представления неэквивалентны. Используя (30.4) и (30.5), получаем

$$P_{\{\varepsilon \mid R_L\}} \cdot \left(P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}\psi^{(k)}\right) = D^{(k_\lambda)}(\{\varepsilon \mid R_L\}) \cdot \left(P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}\psi^{k}\right). \quad (30.9)$$

Следовательно, если мы рассмотрим оператор $P_{\{\varepsilon \mid R_L\}}$ как пробный оператор аналогично (25.6), то получим, что функция

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}\psi^{(k)} \quad (30.10)$$

является функцией с волновым вектором k_λ.

Очевидно, что для любого оператора смежного класса $\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}\mathfrak{T}$ преобразованная функция обладает аналогичным свойством. Так,

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}}\psi^{(k)} \quad \text{принадлежит } \Sigma^{(k_\lambda)}, \quad (30.11)$$

а

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}}\Sigma^{(k)} = \Sigma^{(k_\lambda)}. \quad (30.12)$$

§ 31. Сопряженные представления группы $\mathfrak{T}$

Результаты, полученные в § 30, позволяют ввести важное понятие. В § 10 было приведено определение сопряженных подгрупп группы $\mathfrak{G}$. Применим аналогичные рассуждения к подгруппе $\mathfrak{T}$ группы $\mathfrak{G}$. Будем считать, что фиксированный элемент $\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}$ группы $\mathfrak{G}$ производит отображение $\mathfrak{T}$ на себя:

$$\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}^{-1}\,\mathfrak{T}\,\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\} \to \mathfrak{T}. \quad (31.1)$$

Ясно, что это отображение является внутренним автоморфизмом (сопряжением) группы $\mathfrak{G}$, определяемым согласно правилу

$$\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}^{-1}\{\varepsilon \mid R_L\} \cdot \{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\} = \{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}. \quad (31.2)$$

Соответствующие элементы сопряженных подгрупп связаны соотношением (31.2).

Рассмотрим теперь матрицы $\{\varepsilon \mid R_L\}$ и $\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}$ неприводимого представления $D^{(k)}$ группы $\mathfrak{T}$. Они имеют вид

$$D^{(k)}(\{\varepsilon \mid R_L\}) = \exp - ik \cdot R_L \quad (31.3)$$

и, согласно (30.5),

$$D^{(k)}(\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}) = \exp - ik \cdot (\varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L) = D^{(k_\lambda)}(\{\varepsilon \mid R_L\}). \quad (31.4)$$

Представления

$$D^{(k)} \text{ и } D^{(k_\lambda)} \text{ являются сопряженными} \quad (31.5)$$

представлениями группы $\mathfrak{T}$. Отметим, что элемент $\{\varepsilon \mid R_L\}$ представляется такой же матрицей, построенной в пространстве $\Sigma^{(k_\lambda)}$

согласно (30.12), что и сопряженный [в соответствии с (31.2)] элемент $\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\}$ в пространстве $\Sigma^{(\boldsymbol{k})}$.

Очевидно, поскольку представление $D^{(\boldsymbol{k})}$ неприводимо, то и $D^{(\boldsymbol{k}_\lambda)}$ неприводимо; последнее непосредственно следует из леммы Шура. Заметим, что с точки зрения подгруппы $\mathfrak{T}$, рассмотренной выше, отображение элементов

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \rightleftarrows \{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\} \tag{31.6}$$

является внешним автоморфизмом. С точки зрения группы $\mathfrak{G}$ (31.6) показывает, что отображение внутреннее. Напомним, что математическое различие между внутренним и внешним автоморфизмом определяется тем, принадлежат (случай внутреннего автоморфизма) или не принадлежат (случай внешнего автоморфизма) элементы, с которыми производится сопоставление, совокупности, образующей группу [13].

§ 32. Характеристика ограниченных представлений

Вернемся теперь к (29.2) и к пространству представления $\Sigma^{(\star k)(m)}$. Рассмотрим подпространство представления (29.5), образованное первыми l_1 функциями, каждая из которых служит базисом представления $D^{(\boldsymbol{k}_1)}$ группы $\mathfrak{T}$. Имеются две возможности: эти l_1 функций либо определяют пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ полностью, либо нет. Если

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)} \to \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \quad (l_1 \text{ раз}), \tag{32.1}$$

то набор волновых векторов $\boldsymbol{k}_\alpha$ состоит из единственного вектора $\boldsymbol{k}_1$. Все l_1 функций в (29.5) могут быть различными, но иметь один и тот же волновой вектор $\boldsymbol{k}_1$. Если же пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ не исчерпывается первыми l_1 функциями, то эти l_1 функций не образуют инвариантное, или замкнутое, подпространство относительно всех операторов группы $\mathfrak{G}$. Тогда должен существовать оператор $P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}$ группы $\mathfrak{G}$, такой, что

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \neq \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)}. \tag{32.2}$$

Согласно (30.12),

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})}, \tag{32.3}$$

где

$$\boldsymbol{k}_{1\lambda} = \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_\lambda. \tag{32.4}$$

Тогда при действии $P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}$ каждая из l_1 функций переходит в функцию с волновым вектором $\boldsymbol{k}_{1\lambda}$, что дает в точности l_1

функций пространства

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})} \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})} \ (l_1 \text{ раз}).$$

Эти l_1 функций линейно-независимы и являются линейно-независимыми по отношению к исходным l_1 функциям.

Теперь у нас имеется $2l_1$ функций. Если и они не полностью исчерпывают инвариантное пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, то должен существовать оператор $P_{\{\varphi_\mu | \tau_\mu\}}$, такой, что

$$P_{\{\varphi_\mu | \tau_\mu\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \not\equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \not\equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})}. \tag{32.5}$$

Ясно, что

$$P_{\{\varphi_\mu | \tau_\mu\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\mu})}, \tag{32.6}$$

где

$$\boldsymbol{k}_{1\mu} = \varphi_\mu \cdot \boldsymbol{k}_1. \tag{32.7}$$

Будем действовать таким способом до тех пор, пока $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ не окажется полностью исчерпанным; получим

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)} = l_1\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} \oplus l_1\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})} \oplus \ldots \oplus l_1\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\mu})} \oplus \ldots \oplus l_1\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1s})}. \tag{32.8}$$

Необходимо подчеркнуть, что пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ должно быть исчерпано конечным числом таких шагов. На каждом шагу этой процедуры встает альтернатива: либо инвариантное пространство оказывается полностью разложенным на предшествующие компоненты, либо нет. Если нет, приведение продолжается.

Каждое получаемое пространство [такое, как в (32.5) и (32.6)] содержит l_1 линейно-независимых функций, и компоненты полного разложения ортогональны, так как векторы $\boldsymbol{k}_\alpha$ неэквивалентны. Сравнивая (32.8) с (29.2), (29.9)—(29.11), немедленно устанавливаем тождественность набора $\{l_\alpha\}$ и набора $\{\boldsymbol{k}_\alpha\}$ из (29.2). Поэтому

$$l_1 = l_2 = \ldots = l_s \equiv l_m, \tag{32.9}$$

так что размерности всех подпространств, входящих в $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, должны быть одинаковы. Каждое такое подпространство соответствует отдельному неприводимому представлению группы $\mathfrak{T}$, взятому l_m раз. Набор волновых векторов $\boldsymbol{k}_\alpha$ не произволен, а полностью определен, если задан один его представитель. Пусть $\boldsymbol{k}$ — канонический волновой вектор набора; тогда весь набор волновых векторов мы будем называть звездой $\boldsymbol{k}$:

$$\star\boldsymbol{k} \equiv \{\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k},\ \boldsymbol{k}_2 = \varphi_2 \cdot \boldsymbol{k},\ \ldots,\ \boldsymbol{k}_s = \varphi_s \cdot \boldsymbol{k}\}. \tag{32.10}$$

Подведём итог: полное неприводимое пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ отдельного неприводимого представления группы $\mathfrak{G}$ может быть разложено на s ортогональных подпространств:

$$\Sigma^{(\star k)(m)} = \Sigma^{(k)(m)} \oplus \Sigma^{(k_2)(m)} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(k_s)(m)}, \qquad (32.11)$$

где каждое такое подпространство соответствует одному неприводимому представлению группы $\mathfrak{T}$. Все подпространства $\Sigma^{(k_\mu)(m)}$ имеют одинаковую размерность и задают неприводимые представления $D^{(k_\mu)}$ группы $\mathfrak{T}$ одинаковое для всех μ число раз l_m. Представления $D^{(k_\mu)}$ при $\mu = 1, \ldots, s$ являются неэквивалентными неприводимыми представлениями группы $\mathfrak{T}$.

§ 33. Блочная структура матриц представления $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$

Из (32.10) и (32.11) следует, что в неприводимом векторном пространстве $\Sigma^{(\star k)(m)}$ задано определенное упорядочение. Так, первые l_m функций относятся к волновому вектору $k_1 = k$, следующие l_m — к волновому вектору k_2 и т. д. в соответствии с (32.10). Следовательно, каждую матрицу представления $D^{(\star k)(m)}$ можно разбить на отдельные блоки матриц с размерами $(l_m \times l_m)$ в соответствии с упорядочением волновых векторов в (32.10). Матрицу с размерами $(l_m \times l_m)$ в правом верхнем углу будем обозначать $D^{(k_1)(m)}$ аналогичным образом будем обозначать каждый матричный блок с размерами $(l_m \times l_m)$. Так, $D^{(k_\lambda)(m)}$ означает матрицу, связывающую пространства $\Sigma^{(k_\mu)(m)}$ и $\Sigma^{(k_\lambda)(m)}$. Тогда имеем

$$D^{(\star k)(m)} = \begin{Vmatrix} D_{11}^{(k_1)(m)} & \ldots & D_{1s}^{(k_s)(m)} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ D_{s1}^{(k_1)(m)} & \ldots & D_{ss}^{(k_s)(m)} \end{Vmatrix} \qquad (33.1)$$

для каждой матрицы представления. В частности, для любого элемента группы $\mathfrak{T}$ матрица (33.1) диагональна, так что

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\})_{\mu\nu} = \left(D^{(\star k_\mu)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\})\right)_{\mu\nu}\delta_{\mu\nu} =$$
$$= \Pi_m (\exp - i k_\mu \cdot R_L)\, \delta_{\mu\nu}, \qquad (33.2)$$

где Π_m — единичная матрица с размерами $(l_m \times l_m)$. Рассмотрим теперь тождество

$$\{\varepsilon \mid R_L\} \cdot \{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\} = \{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\} \cdot \{\mid \varepsilon\, \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}. \qquad (33.3)$$

Для представления (33.1) имеем

$$D^{(^\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\})\, D^{(^\star k_\nu)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}) =$$
$$= D^{(^\star k)(m)}\left(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}\right) D^{(^\star k)(m)}\left(\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}\right). \quad (33.4)$$

Рассмотрим блочный матричный элемент $\mu\nu$ матрицы (33.4) и используем (33.2):

$$D^{(k_\mu)(m)}(\{\varepsilon \mid R_L\})_{\mu\mu} D^{(k_\nu)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}_{\mu\nu} =$$
$$= D^{(k_\nu)(m)}\left(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}\right)_{\mu\nu} D^{(k_\nu)(m)}\left(\{\varepsilon \mid \varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\}\right)_{\nu\nu}. \quad (33.5)$$

При фиксированном (но произвольном) $\{\varphi_\lambda | t(\varphi_\lambda)\}$ это равенство выполняется для всех элементов $\{\varepsilon | R_L\}$ группы $\mathfrak{T}$. Все матрицы в (33.5) порядка l_m. Далее, согласно (33.2), для (33.5) имеем

$$(\exp - ik_\mu \cdot R_L)\, D^{(k_\nu)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\})_{\mu\nu} =$$
$$= D^{(k_\nu)(m)}\left(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi)\}\right)_{\mu\nu}\left(\exp - ik_\nu \cdot \left(\varphi_\lambda^{-1} \cdot R_L\right)\right). \quad (33.6)$$

Из (33.6) следует

$$D^{(k_\mu)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\})_{\mu\nu} = 0 \quad (33.7)$$

для всех случаев, кроме случая

$$k_\mu = \varphi_\lambda k_\lambda + 2\pi B_H, \quad (33.8)$$

т. е. если сопряженные неприводимые представления $D^{(k_\mu)(m)}$ и $D^{(k_{\nu\lambda})(m)}$ группы $\mathfrak{T}$ не являются эквивалентными. Но для каждого μ равенство (33.8) может выполняться только при одном значении k_ν, так как волновые векторы звезды (32.10) по определению неэквивалентны. Как следует из определения k_ν через канонический волновой вектор k и из групповых свойств операторов φ_λ, это значение k_ν единственно.

Равенство (33.7), очевидно, показывает, что в блочном разложении (33.1) в каждой строке и столбце отличен от нуля только один блочный матричный элемент. Далее, блочная форма полного представления показывает, что диагональные теперь матрицы представления $D^{(^\star k)(m)}$ осуществляют перестановку l_1-мерных подпространств друг с другом.

Резюмируем: блочно-диагональная форма $D^{(^\star k)(m)}$ соответствующая порядку перечисления подпространств (32.11), имеет вид

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) = \begin{pmatrix} D^{(k_1)(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})_{11} & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & & \ddots & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & D^{(k_s)(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})_{ss} \end{pmatrix} \quad (33.9)$$

или, более точно,

$$D^{(\star k)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) = \\ = \begin{pmatrix} \Pi_m \exp - i\boldsymbol{k}_1 \cdot \boldsymbol{R}_L & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Pi_m \exp - i\boldsymbol{k}_\nu \cdot \boldsymbol{R}_L & & \\ \vdots & & \ddots & \\ & & & \Pi_m \exp - i\boldsymbol{k}_s \cdot \boldsymbol{R}_L \end{pmatrix} \quad (33.10)$$

где Π_m — единичная матрица порядка l_m. Кроме того, для произвольного оператора группы $\mathfrak{G}$ в этом представлении имеем

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\lambda)\}) = \\ = \begin{pmatrix} 0 & \dots 0 & 0 & \dots \\ 0 & \vdots & \vdots & \\ \vdots & & D^{(k_\nu)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\lambda)\})_{\mu\nu} & \\ & & \vdots & \\ D^{(k_\lambda)(m)}(\{\varphi_\lambda \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\lambda)\})_{\lambda 1} & & \vdots & \\ & & 0 & \dots \\ \vdots & & \vdots & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (33.11)$$

Пространством представления $D^{(\star k)(m)}$ является пространство $\Sigma^{(\star k)(m)}$, состоящее из s ортогональных подпространств [см. (32.11)].

§ 34. Группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ канонического вектора $\boldsymbol{k}$

Рассматривая неприводимое представление $D^{(^*\boldsymbol{k})(m)}$ в целом, найдем, что некоторые из матриц типа (33.10), (33.11) имеют отличные от нуля блочные матричные элементы с $\mu = 1$, $\nu = 1$. Для таких матриц подпространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ является инвариантным. Это означает, что представляемый такими матрицами оператор $P_{\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}}$ диагонален в подпространстве $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$. В соответствии с нашими обозначениями в (33.1) имеем

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid t(\varphi_\lambda)\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)} D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}(\{\varphi_\lambda | t(\varphi_\lambda)\})_{11}. \tag{34.1}$$

Изучим сначала этот класс операторов.

Ясно, что (34.1) применимо для всех операторов группы $\mathfrak{T}$. Может оказаться, что других операторов, обладающих этими свойствами, в группе $\mathfrak{G}$ нет.

Однако из (30.12) следует

$$P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_{1\lambda})}, \tag{34.2}$$

где

$$\boldsymbol{k}_{1\lambda} = \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k}_1. \tag{34.3}$$

В (34.2) и (34.3) пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)}$ образовано одним блоховским вектором $\psi^{(\boldsymbol{k}_1)}$. Тогда, если, как в (30.7),

$$\varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_1 + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \tag{34.4}$$

то $\boldsymbol{k}_1$ и $\boldsymbol{k}_{1\lambda}$ задают эквивалентные неприводимые представления группы $\mathfrak{T}$. Если выполняется (34.4), то все l_m-мерное пространство, состоящее из l_m линейно-независимых совокупностей (29.5), каждая из которых имеет волновой вектор $\boldsymbol{k}_1$, будет инвариантным относительно действия этого оператора $P_{\{\varphi_\lambda \mid \tau_\lambda\}}$. Если (34.4) выполняется для поворотной части φ_λ оператора $\{\varphi_\lambda | \tau_\lambda\}$, то это же свойство имеет и любая степень этого оператора.

Пусть $\{\varphi_\mu | \tau_\mu\}$ — другой оператор, такой, что

$$\varphi_\mu \cdot \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_1 + 2\pi \boldsymbol{B}'_H, \tag{34.5}$$

где $\boldsymbol{B}'_H$ — вектор обратной решетки, возможно отличный от $\boldsymbol{B}_H$ из (34.4). Тогда степени этого оператора также обладают таким свойством.

Наконец, все произведения $\{\varphi_\lambda | \tau_\lambda\} \cdot \{\varphi_\mu | \tau_\mu\}$, а также степени и произведения таких операторов, тоже обладают свойством переводить $\boldsymbol{k}_1$ в эквивалентный волновой вектор.

Таким способом можно перечислить набор операторов $P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}}$ каждый из которых при действии на отдельный блоховский вектор переводит этот вектор в эквивалентный блоховский вектор:

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)}. \tag{34.6}$$

Совокупность всех таких операторов, очевидно, образует группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, называемую пространственной группой волнового вектора $\boldsymbol{k}$. Группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ представляет собой подгруппу группы $\mathfrak{G}$. Она может быть разложена на смежные классы по $P_{\mathfrak{T}}$, где $P_{\mathfrak{T}}$ —группа операторов, действующих на функции, изоморфная группе $\mathfrak{T}$:

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) = P_{\mathfrak{T}} + \ldots + P_{\{\varphi_{l_\lambda} | t(\varphi_{l_\lambda})\}} P_{\mathfrak{T}} + \ldots + P_{\{\varphi_{l_\chi} | t(\varphi_{l_\lambda})\}} P_{\mathfrak{T}}. \tag{34.7}$$

Ясно, что для каждого оператора из (34,7) l_m-мерное пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$ является замкнутым.

Тогда набор матриц $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}(\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\})_{11}$ [являющихся, согласно (33.1), l_m-мерными матричными компонентами $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$] задает представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ из (34.7). Важно понимать, однако, что это представление не является представлением общего вида, но построено на базисе инвариантного пространства $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$, так что в этом представлении

$$D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\}) = \Pi_m \exp - i\boldsymbol{k}_1 \cdot \boldsymbol{R}_L. \tag{34.8}$$

Поэтому группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ может быть построена, как это и было сделано, на основании совершенно общих соображений. Однако из всех представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ в $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ можно использовать только те представления, для которых выполняется равенство (34.8). Представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, удовлетворяющие условию (34.8), называются *разрешенными* или *допустимыми.*

Иногда может оказаться полезным рассмотреть фактор-группу или точечную группу волнового вектора

$$\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}, \tag{34.9}$$

и при необходимости мы будем использовать это обозначение.

§ 35. Неприводимость допустимых представлений $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$

Докажем, что допустимые представления $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$ должны быть неприводимыми представлениями группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$. По предложению, представление $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ является неприводимым представлением группы $\mathfrak{G}$, построенным на базисе неприводимого пространства $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ [см. (32.11)].

Пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ является инвариантным и образует базис представления $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$. Предположим, что $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ может быть разложено на инвариантные подпространства, и, следовательно, $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ разлагается на соответствующие неприводимые по отношению к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$ составляющие, т. е.

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m')} \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m'')}, \tag{35.1}$$

$$D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)} = D^{(\boldsymbol{k}_1)(m')} \oplus D^{(\boldsymbol{k}_1)(m'')}. \tag{35.2}$$

Пусть размерность пространства $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m')}$ равна $l_{m'}$, а размерность пространства $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m'')}$ равна $l_{m''}$, так что $l_{m'} + l_{m''} = l_m$.

Используя $l_{m'}$ функций пространства $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m')}$, построим последовательность пространств аналогично (32.2), (32.5); получаем

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}_\nu)(m')} \equiv P_{\{\varphi_\nu | \tau_\nu\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m')}, \tag{35.3}$$

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}_s)(m')} \equiv P_{\{\varphi_s | \tau_s\}} \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m')}. \tag{35.4}$$

Таким образом, мы получаем объединенное пространство

$$\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m')} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)} \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_\nu)(m')} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_s)(m')}, \tag{35.5}$$

а также второе пространство

$$\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m'')} = \Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m'')} \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_\nu)(m'')} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k}_s)(m'')}. \tag{35.6}$$

Поэтому

$$\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)} = \Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m')} \oplus \Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m'')}. \tag{35.7}$$

Повторяя теперь в обратном порядке рассуждения § 32, видим, что пространство $\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m')}$ должно быть инвариантным относительно всех операций группы $\mathfrak{G}$ и представляет собой базис представления $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m')}$. Аналогичные утверждения справедливы для $\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m'')}$ и $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m'')}$.

Таким образом, если $\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ приводимо [в соответствии с (35.7)], то $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ также будет приводимым:

$$D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)} = D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m')} \oplus D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m'')}. \tag{35.8}$$

Но это противоречит предположению о неприводимости представления $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$. Поэтому пространство $\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ не может быть разложено по типу (35.7). Следовательно, $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ должно быть неприводимым инвариантным пространством. Это доказывает, что допустимое представление $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$ должно быть также и неприводимым.

Эти два требования допустимости (34.8) и неприводимости полностью определяют возникающие представления $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$. Прежде чем рассмотреть методы нахождения представлений $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ покажем, что полное неприводимое представление $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$ может быть построено по представлению $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$.

§ 36. Представление $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$, индуцированное представлением $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$

В этом параграфе будет показано, что неприводимое представление полной пространственной группы $\mathfrak{G}$ является представлением, индуцированным с помощью неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_1)$ в $\mathfrak{G}$. Таким образом, для определения представления $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ достаточно полностью знать представление $D^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}$.

Согласно (34.7), разложение группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ по группе $\mathfrak{T}$ имеет вид

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{T} + \left\{\varphi_{l_2} \middle| \boldsymbol{\tau}_{l_2}\right\}\mathfrak{T} + \ldots + \left\{\varphi_{l_\lambda} \middle| \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\right\}\mathfrak{T} + \ldots + \left\{\varphi_{l_k} \middle| \boldsymbol{\tau}_{l_k}\right\}\mathfrak{T}. \tag{36.1}$$

Заметим, что мы сохраняем индекс l, чтобы всегда относить его к одному из l_k представителей смежных классов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ является, очевидно, подгруппой полной пространственной группы $\mathfrak{G}$. Поэтому разложение группы $\mathfrak{G}$ на смежные классы по $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ можно записать в виде

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\,\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_s \mid \boldsymbol{\tau}_s\}\,\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \tag{36.2}$$

Мы всегда сохраняем индекс σ, чтобы относить его к одному из представителей s смежных классов в (36.2); элемент $\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$, очевидно, входит в группу $\mathfrak{G}$, но *не* в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Этот факт очевиден, но он оказывается очень важным при последующем изложении.

Предположим теперь, что мы располагаем полным набором из r допустимых неприводимых представлений пространственной группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Эти представления мы будем обозначать

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda} \middle| \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda} + \boldsymbol{R}_L\right\}\right), \quad m = 1, \ldots, r. \tag{36.3}$$

Заметим, что матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ определены только для элементов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. В (36.3) индекс m служит для обозначения одного из r допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$; мы считаем, что матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ имеют порядок l_m. Используем теперь следующий прием [33]. Определим «матрицу с точкой» $\dot{\boldsymbol{D}}^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\})$ соотношением

$$\dot{D}^{(\boldsymbol{k})(m)}(X) = \begin{cases} 0, & \text{если } X \text{ не принадлежит } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \\ D^{(\boldsymbol{k})(m)}, & \text{если } X \text{ принадлежит } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \end{cases} \tag{36.4}$$

В (36.4) X — элемент пространственной группы, а 0 — нулевая матрица порядка l_m.

Как и раньше, запишем матрицу $D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p | \tau_p\})$ в форме блочной матрицы, т. е. $D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p | \tau_p\})_{\sigma\tau}$, где индексы σ и τ относятся соответственно ко всем строкам, имеющим одинаковый волновой вектор k_σ, и ко всем столбцам, имеющим одинаковый волновой вектор k_τ, где $k_\sigma = \varphi_\sigma \cdot k$ и $k_\tau = \varphi_\tau \cdot k$. Сравнивая $D^{(\star k)(m)}$ с (33.1), видим, что $D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p | t_p\})_{\sigma\tau}$ представляет собой блочную матрицу с размерами $(l_m \times l_m)$, которая показывает, как l_m функций $\psi_\alpha^{(k_\tau)(m)}$ преобразуются при действии оператора преобразования $\{\varphi_p | t_p\}$ в l_m функций $\psi_\beta^{(k_\sigma)(m)}$, $\beta = 1, \ldots, l_m$.

Рассматривая теперь систему (29.5) из функций, относящихся к вектору k:

$$\psi_1^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k)(m)}, \tag{36.5}$$

где (36.5) представляет собой пространство $\Sigma^{(k)(m)}$, предположим, что любой элемент пространства $\Sigma^{(k_\sigma)(m)}$ может быть получен следующим образом:

$$\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)} = \{\varphi_\sigma | \tau_\sigma\} \psi_\alpha^{(k)(m)}, \quad \alpha = 1, \ldots, l_m. \tag{36.6}$$

Согласно (36.6), каждый блоховский вектор пространства $\Sigma^{(k_\sigma)(m)}$ может быть построен путем преобразования соответствующего блоховского вектора пространства $\Sigma^{(k)(m)}$ под действием одного и того же представителя смежного класса $\{\varphi_\sigma | \tau_\sigma\}$. Таким образом, имеется взаимно однозначное соответствие между отдельными блоховскими векторами в $\Sigma^{(k)(m)}$ и отдельными блоховскими векторами в $\Sigma^{(k_\sigma)(m)}$. Далее, без потери общности можно считать, что выбор базисных векторов в каждом из пространств $\Sigma^{(k_\sigma)(m)}$, $\sigma = 1, \ldots, s$, сделан в соответствии с (36.6). Напомним, что определение индексов σ и τ следует из (36.2).

При выборе базисных векторов согласно (36.6) можно немедленно выписать блочные матрицы представления $D^{(\star k)(m)}$ для представителей смежных классов в (36.2); получаем

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_\sigma | \tau_\sigma\})_{\sigma 1} = \mathrm{I}_m, \tag{36.7}$$

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_\sigma | \tau_\sigma\})_{1\sigma} = \mathrm{I}_m, \tag{36.8}$$

где $\mathbf{I}_m$ — единичная матрица порядка l_m, а индекс 1 соответствует $\boldsymbol{k}_1 \equiv \boldsymbol{k}$. Матрицы (36.7) и (36.8) являются единственными отличными от нуля блоками в первом столбце и строке матриц для представителей смежных классов.

Рассмотрим элемент пространственной группы вида

$$\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\, \{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}\, \{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1}, \tag{36.9}$$

где, как обычно, σ и τ соответствуют представителям смежных классов в (36.3). Образуем блочный матричный элемент $\sigma\tau$ для матрицы, соответствующей элементу (36.9) в неприводимом представлении пространственной группы. Тогда

$$\begin{aligned} D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}&\left(\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\, \{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}\, \{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1}\right)_{\sigma\tau} = \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\})_{\sigma\mu}\, D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}_{\mu\nu} \times \\ &\times D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1}\right)_{\nu\tau} = D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\})_{11}. \end{aligned} \tag{36.10}$$

При выводе (36.10) использованы равенства (36.7) и (36.8). Заметим, однако, что блок матрицы с индексами $\sigma = 1$, $\tau = 1$ всегда относится к случаю, когда оператор $P_{\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}}$ переводит пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$ в себя, т. е. этот оператор входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Следовательно, если элемент $\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}$ не входит в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то блок $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\})_{11}$ с индексами $\sigma = 1$, $\tau = 1$ представляет собой, разумеется, нулевую матрицу порядка l_m. Поэтому

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\})_{11} = \begin{cases} 0, & \text{если } \{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\} \text{ не входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \\ D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p | \boldsymbol{\tau}_p\}), & \text{если } \{\varphi_p | \boldsymbol{\tau}_p\} \text{ входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \end{cases} \tag{36.11}$$

где матрица $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ неприводима.

Так, например, пусть $\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\}$ — произвольный элемент группы $\mathfrak{G}$, а $\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$ и $\{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\}$ — некоторые из представителей смежных классов в разложении (36.2), и пусть $\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\}$ принадлежит смежному классу $\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\, \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда

$$\{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\} = \{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_{l_\lambda} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\} \cdot \{\varepsilon \,|\, \boldsymbol{R}_L\}, \tag{36.12}$$

где $\{\varepsilon \,|\, \boldsymbol{R}_L\}$ — некоторый элемент группы $\mathfrak{T}$. Далее имеем

$$\{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \,|\, \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\tau \,|\, \boldsymbol{\tau}_\tau\} = \{\varphi_{l_\lambda} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\} \cdot \{\varepsilon \,|\, \boldsymbol{R}_L\}, \tag{36.13}$$

где выражение в правой части представляет собой элемент группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Используя затем (36.4) и (36.11), можно сразу же выписать выражение для всех блоков матрицы

$D^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p | \tau_p\})_{\sigma\tau}$. Имеем

$$D^{(\star k)(m)\prime}(\{\varphi_p | \tau_p\})_{\sigma\tau} = \dot{D}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma | \tau_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p | \tau_p\} \cdot \{\varphi_\tau | \tau_\tau\}\right). \quad (36.14)$$

Равенство (36.14) дает решение задачи для всех пространственных групп $\mathfrak{G}$, как симморфных, так и несимморфных. Оно выражает матричные блоки, составляющие полную матрицу, через известные для каждого элемента группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ матрицы $D^{(k)(m)}$. Тогда матрицу $D^{(\star k)(m)}$ можно легко построить из блоков (36.14), расположив их соответствующим образом в большой матрице.

На этой стадии рассмотрения необходимо подчеркнуть одно важное обстоятельство. В каждом неприводимом представлении $D^{(\star k)(m)}$, группы $\mathfrak{G}$ необходимо выбрать один волновой вектор $\boldsymbol{k}$, которому соответствуют индексы $\sigma = 1$, $\tau = 1$ блока матрицы, и считать этот волновой вектор каноническим волновым вектором $\boldsymbol{k}$ звезды (32.10). Выбор волнового вектора из волновых векторов $^\star\boldsymbol{k}$ в качестве канонического для данной звезды может быть сделан совершенно произвольно. Однако, после того как вектор $\boldsymbol{k}$ фиксирован, он задает определенное подпространство $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, содержащую конкретные элементы, а также представителей смежных классов. Поэтому выбор $\boldsymbol{k}$ для данной звезды менять нельзя. Важно сохранять вектор $\boldsymbol{k}$ фиксированным в течение всего рассмотрения, хотя он и произволен. Если в качестве канонического волнового вектора выбран какой-нибудь другой вектор $\boldsymbol{k}$ той же звезды, то это лишь приведет к преобразованию подобия для представления $D^{(\star k)(m)}$, переводящему это представление в эквивалентное. Поскольку мы занимаемся анализом представлений, мы должны рассматривать конкретную форму матрицы $D^{(\star k)(m)}$ и блочных матричных элементов типа (33.1) и должны обращать внимание на преобразование подобия.

Процедура, выражаемая равенством (36.14), согласно которой матрицы допустимого неприводимого представления $D^{(k)(m)}$ подгруппы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ используются для построения неприводимого представления $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$, получила название «индуцирование представления группы с помощью представления ее подгруппы». Она уже давно известна в математической литературе со времен работ Фробениуса и Шура. Более компактные современные описания этой процедуры имеются в обычных учебниках [22], но вывод, приведенный выше в § 26—36, ближе всего следует работе Клиффорда [23].

Наконец, примем во внимание, что имеются случаи, когда требуется знание действительно всех матричных элементов матрицы $D^{(\star k)(m)}$. Так, например, пусть $\psi^{(k_\tau)(m)}$ — элемент пространства

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}_\tau)(m)} \equiv \left\{\psi_1^{(\boldsymbol{k}_\tau)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(\boldsymbol{k}_\tau)(m)}\right\}. \tag{36.15}$$

Пусть

$$P_{\{\varphi_p \mid t(\varphi_p)\}} \equiv P_{\{\varphi_p\}} \tag{36.16}$$

является элементом группы $\mathfrak{G}$. Тогда мы имеем

$$P_{\{\varphi_p\}}\psi_b^{(\boldsymbol{k}_\tau)(m)} = \sum_{\sigma=1}^{s}\sum_{\beta=1}^{l_m} D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\})_{(\sigma a)(\tau b)}\psi_a^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)}, \tag{36.17}$$

где

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\})_{(\sigma a)(\tau b)}$$

представляет собой элемент ab матричного блока, входящего в правую часть равенства (36.14):

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\})_{(\sigma a)(\tau b)} \equiv \left(D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\hat{\varphi_p}\}_{\sigma\tau})\right)_{ab} =$$
$$= \left(\dot{D}^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_\sigma\})^{-1}\cdot\{\varphi_p\}\cdot\{\varphi_\tau\}\right)_{ab}. \tag{36.18}$$

Разумеется, если $\{\varphi_p\}$ входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\tau)$, то единственным отличным от нуля блоком матрицы будет блок с индексом $\sigma=\tau$ и пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k}_\tau)(m)}$ преобразуется в себя. В случаях, когда нам потребуется точное выражение для результата действия элемента группа $\mathfrak{G}$ на один из элементов пространства $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, мы будем следовать форме записи в (36.17), (36.18). Обратим внимание на сокращенные обозначения в (36.16)—(36.18), которые будут иногда использоваться, однако всегда с повторением их определения во избежание недоразумений. Так, $\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{t}(\varphi_\sigma)\}$ сокращенно записывается в виде $\{\varphi_\sigma\}$.

§ 37. Характеры представлений $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$; индуцированные характеры

Следуя логике рассмотрения в § 36, в частности относящейся к обозначениям, будем обозначать характер матрицы (36.3) как

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{t}_{l_\lambda}\}) \equiv \operatorname{Sp} D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{t}_{l_\lambda}\}). \tag{37.1}$$

В этом случае также использование обозначений (36.4) позволяет ввести характеры с точкой $\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}$ для всех элементов полной группы $\mathfrak{G}$:

$$\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}(X) = \begin{cases} 0, & \text{если } X \text{ не входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \\ \chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(X), & \text{если } X \text{ входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \end{cases} \tag{37.2}$$

Из (36.14), (37.1), (37.2) определим след любого элемента группы $\mathfrak{G}$ для неприводимого представления $D^{(\star k)(m)}$. Получим

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}) = \sum_{p=1}^{s} \dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}). \quad (37.3)$$

Заметим, что для любого характера с точкой либо аргумент

$$\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\} \quad (37.4)$$

принадлежит группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, либо характер с точкой обращается в нуль. Рассмотрим теперь подробнее случай, когда $\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}$ является элементом группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, т. е. рассмотрим

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}) = \sum_{\sigma=1}^{s} \dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}). \quad (37.5)$$

Элемент $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ в группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ входит в некоторый класс. Класс элемента $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ представляет собой максимальный набор элементов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, сопряженных элементу $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$, где сопряжение выполняется с помощью элементов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Однако сопряжение, которое явно выписано в (37.5), выполняется с помощью представителей смежных классов $\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}$, которые именно *не* входят в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Поэтому сопряженный элемент $\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}$ может входить в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, но вполне может при этом оказаться в другом классе группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, чем $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$. Тем самым отдельные отличные от нуля члены в (37.5) могут быть, а могут и не быть равными; другими словами,

$$\dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}) = \dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}),$$

если аргументы (т. е. элементы) действительно входят в один и тот же класс группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ или если оказывается, что в частном случае рассматриваемого представления два различных класса представления имеют одинаковые характеры. Каждый случай должен анализироваться отдельно; хотя некоторые общие правила и могут быть получены, они имеют слишком ограниченное значение для практических целей.

Как и в случае матриц $D^{(\star k)(m)}$, представляется полезным подчеркнуть, что выбор канонического волнового вектора для звезды произволен, но фиксирован на всем протяжении анализа. Заметим, в частности, что для вычисления (37.5) необходимо конкретизировать индексы σ представителей смежных классов по подгруппе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, что требует конкретного выбора одного вектора $\boldsymbol{k}$ в звезде $^\star\boldsymbol{k}$.

Очевидно, нам все еще остается решить несколько задач. Следует показать, как практически получить все допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ каждой группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Далее, следует показать, как можно построить все неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$. Наконец, используя соотношения ортонормированности и полноты для характеров группы, необходимо доказать, что были определены действительно все неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$. Эти задачи рассмотрены в последующих параграфах.

§ 38. Допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$: звезда общего типа при $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})=\mathfrak{T}$

При определении допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ в зависимости от структуры и размерности звезды волнового вектора $^*\boldsymbol{k}$ (32.10) следует различать два главных случая. В первом случае $^*\boldsymbol{k}$ содержит g_p независимых неэквивалентных волновых векторов:

$$^*\boldsymbol{k}=\left\{\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k},\ \boldsymbol{k}_2=\varphi_2\cdot\boldsymbol{k}_1,\ \ldots,\ \boldsymbol{k}_{g_p}=\varphi_{g_p}\cdot\boldsymbol{k}\right\}, \qquad (38.1)$$

т. е. каждое отдельное преобразование поворота из группы $\mathfrak{P}=\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$, примененное к каноническому волновому вектору $\boldsymbol{k}$, дает независимый волновой вектор. В этом случае звезда $^*\boldsymbol{k}$ имеет столько лучей, сколько преобразований поворота в группе $\mathfrak{P}$, поэтому $s=g_p$, $^*\boldsymbol{k}$ называется «звездой общего типа». Во втором случае, когда $s<g_p$, звезду $^*\boldsymbol{k}$ называют «звездой специального типа»; он будет рассмотрен в следующих параграфах.

В случае звезды общего типа (38.1) пространственная группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})=\mathfrak{T}$, т. е. равна группе трансляций. В этом случае допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ имеют размерность 1, т. е.

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon\mid 0\})=1. \qquad (38.2)$$

Ясно далее, что при этом полное подпространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$ состоит из одного блоховского вектора $\psi^{(\boldsymbol{k})}$, так что

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})=\exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L. \qquad (38.3)$$

Неприводимое пространство $\Sigma^{(^*\boldsymbol{k})(m)}$ (32.11) имеет вид

$$\Sigma^{(^*\boldsymbol{k})(m)}=\Sigma^{(\boldsymbol{k}_1)(m)}\oplus\ldots\oplus\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{g_p})(m)} \qquad (38.4)$$

или

$$\Sigma^{(^*\boldsymbol{k})(m)}=\left\{\psi^{(\boldsymbol{k})},\ \psi^{(\boldsymbol{k}_2)},\ \ldots,\ \psi^{(\boldsymbol{k}_{g_p})}\right\}. \qquad (38.5)$$

Неприводимое представление $D^{(^*\boldsymbol{k})(m)}$ имеет размерность g_p. Явный вид $D^{(^*\boldsymbol{k})(m)}$, а также система характеров будут приведены ниже. Отметим также, что в этом случае индекс m является излишним, так как группа $\mathfrak{T}$ имеет только одномерные неприводимые представления; мы оставляем его, чтобы сохранить последовательность в обозначениях.

§ 39. Допустимые неприводимые представления $D^{(k)(m)}$. Звезда специального типа. Метод малой группы

Рассмотрим теперь случай, когда $s < g_p$, так что в звезде $^*\boldsymbol{k}$ содержится меньше лучей, чем отдельных операций поворотов в группе $\mathfrak{P}$. Очевидно, в этом случае группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ не сводится к тривиальной, а представляет собой, как в (36.1), пространственную группу, имеющую дополнительных представителей смежных классов, кроме тождественного. Было предложено несколько полезных методов определения допустимых неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, которые мы рассмотрим последовательно. В настоящем параграфе мы изложим метод малой группы, который, по-видимому, был впервые использован применительно к теории пространственных групп в работе Херринга [31].

Все нужные нам допустимые неприводимые представления характеризуются тем, что для любого элемента группы $\mathfrak{T}$ выполняется равенство

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}) = (\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L)\,\mathbf{I}_m, \tag{39.1}$$

где $\mathbf{I}_m$ — единичная матрица с размерами $(l_m \times l_m)$. Предположим, что в группе $\mathfrak{T}$ имеется элемент $\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\}$, обладающий свойством

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k}) = 2\pi\varkappa, \tag{39.2}$$

где $\varkappa$ — любое целое число. Тогда для этого элемента, очевидно, имеем

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\}) = \mathbf{I}_m = D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid 0\}). \tag{39.3}$$

Элемент $\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\}$ представляет собой чистую трансляцию; векторный индекс $\boldsymbol{k}$ написан для того, чтобы отметить, что $\boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})$ удовлетворяет равенству (39.2). Набор всех элементов $\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\}$ очевидным образом составляет группу, являющуюся подгруппой группы $\mathfrak{T}$. Эта подгруппа может оказаться тривиальной, состоящей только из элемента $\{\varepsilon | 0\}$, однако часто это не так. Предположим, что эта подгруппа нетривиальна, и будем обозначать ее символом $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, где

$$\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) \text{ совокупность } \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\}. \tag{39.4}$$

Тогда по отношению к допустимым неприводимым представлениям $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ все матрицы, представляющие элементы группы

$\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, равны, согласно (39.3), единичной. Набор матриц $D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})\})$ представляет собой ядро представления.

Определим представителей смежных классов абелевой факторгруппы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ согласно разложению

$$\mathfrak{T} = \mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_2}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_t}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}), \tag{39.5}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\bar{\boldsymbol{k}}), \quad \alpha = 1, \ldots, t, \tag{39.6}$$

является вектором решетки, не входящим в $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, и будем считать, что группа $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ имеет порядок t. Мы используем обозначение $\bar{\boldsymbol{k}}$ ($\boldsymbol{k}$ с чертой), чтобы отметить, что (39.6) не входит в группу $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Тогда можно разложить группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ на смежные классы по $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Чтобы избежать неудобства в обозначениях, мы запишем это разложение прямо через операторы группы преобразований координат $\{\varphi \mid \tau\}$ вместо группы операторов (34.7), действующих на функции, так как переход от одной группы к другой выполняется легко. При этом мы получаем

$$\begin{aligned}\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) &+ \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_2}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_t}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \\ &+ \{\varphi_{l_2} \mid \tau_2\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \{\varphi_{l_2} \mid \tau_{l_2} + \boldsymbol{R}_{L_2}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \ldots \\ \ldots &+ \{\varphi_{l_2} \mid \tau_{l_2} + \boldsymbol{R}_{L_t}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_{l_k} \mid \tau_{l_k} + \boldsymbol{R}_{l_t}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}).\end{aligned} \tag{39.7}$$

Фактор-группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ состоит из $(l_k \cdot t)$ смежных классов:

$$\{\varphi_{l_\alpha} \mid \tau_{l_\alpha} + \boldsymbol{R}_{L_\beta}(\bar{\boldsymbol{k}})\}\,\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}), \quad l_\alpha = 1, \ldots, l_k, \quad \beta = 1, \ldots, t. \tag{39.8}$$

Допустимое неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ будет также являться допустимым неприводимым представлением группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Единственное различие между ними относится к тем элементам группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, которые входят в ядро (или центр) представления и поэтому эквивалентны тождественному элементу $\{\varepsilon \mid 0\}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

В методе малой группы рассматривают группу, гомоморфную совокупности (39.8), а именно группу

$$\Pi(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}), \tag{39.9}$$

как абстрактную группу из $(l_k \cdot t)$ элементов и любым обычным методом находят все ее неприводимые представления. Из набора всех неприводимых представлений отбираются для использования только допустимые. Чтобы получить систему характеров для неприводимых представлений группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ как абстрактной группы, требуется сначала построить таблицу умножения группы.

Заметим теперь, что набор представителей смежных классов

$$\{\varphi_{l_\alpha} | \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha} + \boldsymbol{R}_{l_\beta}(\overline{\boldsymbol{k}})\}, \quad l_\alpha = 1, \ldots, l_k, \quad \beta = 1, \ldots, t, \tag{39.10}$$

не является замкнутым относительно умножения. Чтобы восстановить свойства замкнутости, следует иметь в виду, что матрица, представляющая любой из элементов группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, для допустимых представлений удовлетворяет равенству (39.3) и поэтому преобразуется как абстрактный тождественный элемент $\{\varepsilon,|0\}$. Следовательно, закон умножения для $(l_k \cdot t)$ элементов мы определяем таким образом, чтобы обеспечивалась замкнутость, а именно:

$$\{\varphi_{l_\alpha} | \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha} + \boldsymbol{R}_{L_\beta}(\overline{\boldsymbol{k}})\} \{\varphi_{l_\gamma} | \boldsymbol{\tau}_{l_\gamma} + \boldsymbol{R}_{L_\delta}(\overline{\boldsymbol{k}})\} = \{\varphi_{l_\alpha} \cdot \varphi_{l_\gamma} | \boldsymbol{\tau}_{l_{\alpha\gamma}} + \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\} =$$

$$= \{\varepsilon | R_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\} \cdot \{\varphi_{l_{\alpha\gamma}} | \boldsymbol{\tau}_{l_{\alpha\gamma}}\}, \tag{39.11}$$

где β, δ, $\varepsilon = 1, \ldots, t$, и

$$\boldsymbol{\tau}_{l_{\alpha\gamma}} + \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}}) \equiv \varphi_{l_\alpha} \cdot \{\tau_{l_\gamma} + \boldsymbol{R}_{L_\delta}(\overline{\boldsymbol{k}})\} + \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha} + \boldsymbol{R}_{L_\beta}(\boldsymbol{k}) + \boldsymbol{R}_L(\overline{\boldsymbol{k}}). \tag{39.12}$$

В (39.12) $\boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})$ — любой вектор решетки из группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Во всех практических случаях, в которых применялся данный метод, вектор решетки $\boldsymbol{R}_{L\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})$ определяется однозначно. Если предположить, что это так, то закон умножения (39.11), (39.12) однозначно определяет произведение смежных классов, возникающее при перемножении.

При выполнении правила (39.11) набор $(l_k \cdot t)$ представителей смежных классов обладает замкнутостью и изоморфен абстрактной группе $\Pi(\boldsymbol{k})$. Для этой группы можно обычным образом получить таблицу умножения, структуру классов и коэффициенты перемножения классов. Если определить коэффициенты перемножения для классов $\mathfrak{C}_i^{(\boldsymbol{k})}$, $\mathfrak{C}_j^{(\boldsymbol{k})}$ и $\mathfrak{C}_l^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ равенством

$$\mathfrak{C}_i^{(\boldsymbol{k})} \mathfrak{C}_j^{(\boldsymbol{k})} = \sum (ij | l)^{(\boldsymbol{k})} \mathfrak{C}_l^{(\boldsymbol{k})}, \tag{39.13}$$

то характеры неприводимых представлений удовлетворяют соотношению

$$c_i^{(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\mathfrak{C}_i^{(\boldsymbol{k})}) \cdot c_j^{(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\mathfrak{C}_j^{(\boldsymbol{k})}) = l_\mu \sum_l (ij | l)^{(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\mathfrak{C}_l^{(\boldsymbol{k})}) \cdot c_l^{(\boldsymbol{k})}, \tag{39.14}$$

где l_μ — размерность неприводимого представления $\chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$, а $c_l^{(\boldsymbol{k})}$ — порядок класса $\mathfrak{C}_l^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$. Для характеров допустимых неприводимых представлений $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ должно выполняться соотношение

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L(\overline{\boldsymbol{k}})\}) = l_m \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L(\overline{\boldsymbol{k}}) \text{ для допустимых } m. \tag{39.15}$$

Заметим, что в (39.15) мы используем вектор трансляции решетки $\boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})$, так как для любого вектора $\boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{k})$ группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ этот результат тривиален вследствие (39.2). Поскольку вектор $\boldsymbol{k}$ известен, равенство (39.15) представляет собой важное ограничение на индекс неприводимого представления и позволяет однозначно определить допустимые представления, которые в последующем будут всегда обозначаться индексом $\mu = m$.

Наконец, характеры неприводимых представлений группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ удовлетворяют условию полноты

$$\sum_j c_j^{(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\mathfrak{C}_j)\, \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\mathfrak{C}_j)^* = l_k \cdot t, \tag{39.16}$$

где $(l_k \cdot t)$ — порядок группы $\Pi(\boldsymbol{k})$. Очень важно заметить, что условие (39.16) применимо к характерам $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$ как допустимых, так и запрещенных представлений и, далее, что все величины в (39.16) относятся к группе $\Pi(\boldsymbol{k})$, в которой классы и т. д. определяются путем нахождения сопряженных элементов группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ с помощью элементов из $\Pi(\boldsymbol{k})$. Напомним еще раз, что $\Pi(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$.

§ 40. Запрещенные неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$. Метод малой группы

Элиот и Лаудон [34], анализируя некоторые правила отбора для структуры алмаза, отметили полезность использования запрещенных неприводимых представлений группы $\Pi(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Ниже мы вернемся к анализу правил отбора, проведенному этими авторами, а сейчас сконцентрируем внимание на значении представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, когда μ является индексом запрещенного представления.

Очевидно, *все* неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ являются гомоморфными отображениями абстрактной группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, состоящей из набора представителей смежных классов (39.10), замкнутого относительно умножения согласно (39.11) и (39.12).

Предположим теперь, что у нас есть какое-нибудь допустимое неприводимое представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, и рассмотрим матрицу, представляющую элемент $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\}$:

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\}) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\, \boldsymbol{\Pi}_m. \tag{40.1}$$

Вычисляя прямое произведение этой матрицы само на себя, получаем

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\}) \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\}) = \exp - 2i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L(\bar{\boldsymbol{k}})\, \Pi_m \otimes \Pi_m. \tag{40.2}$$

Ясно, что (40.2) представляет собой квадратную матрицу с размерами $(2l_m \times 2l_m)$, которая преобразуется при трансляциях как система матриц с волновым вектором

$$\boldsymbol{k}' = 2\boldsymbol{k}. \tag{40.3}$$

Тогда полное представление прямого произведения $P(\boldsymbol{k})$

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m)} \tag{40.4}$$

должно соответствовать волновому вектору $\boldsymbol{k}'$ в (40.3).

С другой стороны, согласно теореме Машке, любое представление абстрактной группы либо неприводимо, либо разложимо. Поэтому представление (40.4) разлагается в прямую сумму неприводимых составляющих, соответствующих вектору $\boldsymbol{k}$:

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m)} = \sum_{\mu} (mm \mid \mu)\, D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}, \tag{40.5}$$

причем в (40.5) допустимы все значения μ. Согласно предыдущим утверждениям, представление (40.5) соответствует волновому вектору $\boldsymbol{k}$. Следовательно, некоторые запрещенные неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, $\mu \neq m$, группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ можно отождествить с представлениями, соответствующими в действительности волновому вектору $2\boldsymbol{k}$. Поэтому представление прямого произведения вида (40.4) является одновременно представлением, соответствующим вектору $\boldsymbol{k}$ (которое может быть запрещенным), и представлением, соответствующим вектору $2\boldsymbol{k}$, которое может оказаться неприводимым.

Выбирая снова допустимое и принадлежащее $\Pi(\boldsymbol{k})$ представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, можно рассмотреть его многократные внутренние прямые произведения

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes \ \ldots \ \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m)} = [D^{(\boldsymbol{k})(m)}]_p, \quad p \leqslant t, \tag{40.6}$$

получая в каждом случае снова некоторое представление абстрактной группы операторов $\Pi(\boldsymbol{k})$, которая в действительности соответствует волновому вектору $p\boldsymbol{k}$.

Следовательно, можно заключить, что все допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ при $\mu \neq m$ связаны с набором волновых векторов, получаемых из вектора $\boldsymbol{k}$:

$$\boldsymbol{k},\ 2\boldsymbol{k},\ \ldots,\ t\boldsymbol{k}. \tag{40.7}$$

Соотношение между запрещенными представлениями $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$, $\mu \neq m$, и неприводимыми представлениями группы $\mathfrak{T}$ можно установить, рассматривая таблицу характеров представлений $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ и сравнивая

$$D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}, \quad \mu \neq m \quad \text{группы} \quad \Pi(\boldsymbol{k}) \tag{40.8}$$

и

$$D^{(p\boldsymbol{k})(m)} \quad \text{группы} \quad \Pi(p\boldsymbol{k}), \quad p = 1, \ldots, t, \tag{40.9}$$

где t — целое число, равное индексу подгруппы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ группы $\mathfrak{T}$.

Полезно резюмировать рассуждения двух последних параграфов. Для нахождения допустимых неприводимых представлений $D^{(k)(m)}$, соответствующих каноническому волновому вектору $\boldsymbol{k}$ (которые будут затем использованы для построения индуцированных неприводимых представлений $D^{(^*k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$), была построена абстрактная группа $\Pi(\boldsymbol{k})$. Однако при рассмотрении $\Pi(\boldsymbol{k})$ как некоторой абстрактной группы возникают как допустимые представления $D^{(k)(m)}$, так и запрещенные представления $D^{(k)(u)}$. Было показано, что последние, являясь неприводимыми представлениями абстрактной группы операторов $\Pi(\boldsymbol{k})$, соответствуют совокупности волновых векторов (40.7), для которых представление $D^{(k)(u)}$ либо неприводимо, либо приводимо. В первом случае

$$D^{(k)(\mu)} \stackrel{\bullet}{\cong} D^{(pk)(m)}, \tag{40.10}$$

а в последнем

$$D^{(k)(\mu)} \doteqdot \sum_m \oplus (\mu \mid m) D^{(pk)(m)}. \tag{40.11}$$

В любом случае главная проблема состоит в том, что если рассматривать группу $\Pi(\boldsymbol{k})$ как абстрактную группу, т. е. как совокупность смежных классов (39.10), замкнутую согласно (39.11) и (39.12), то возникающие неприводимые представления группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ *только после* этого должны быть разделены на допустимые и запрещенные. Вообще говоря, невозможно определить только допустимые представления, за исключением случаев, когда вся совокупность (40.7) стягивается в точку, как, например, для $\boldsymbol{k} = (0, 0, 0)$.

§ 41. Допустимые неприводимые представления $D^{(k)(m)}$, рассматриваемые как проективные представления

Метод малой группы, рассмотренный в § 39 и 40, требует построения новой группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}) = \Pi(\boldsymbol{k})$ и определения всех ее неприводимых представлений, чтобы можно было отобрать затем допустимые. Метод проективных представлений, излагаемый в нескольких последующих параграфах, в принципе требует построения проективных, или лучевых, представлений только для уже имеющихся групп, в частности для 32 кристаллических точечных групп. На практике метод проективных представлений включает в себя некоторую дополнительную задачу об определении допустимых представлений $D^{(k)(m)}$, так что в большинстве случаев ни один из методов не имеет каких-либо практических преимуществ. Однако метод проективных представлений имеет принципиальное значение с точки зрения понимания структуры представления $D^{(k)(m)}$ и связи этого представления с исходной точечной группой кристалла $\mathfrak{P}$. Впервые в теории пространственных групп этот метод был использован Дёрингом [33, 35—38][1]).

Структура группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ определяется разложением (36.1). Очевидно, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ является расширением группы $\mathfrak{T}$. Поскольку подгруппа $\mathfrak{T}$ является нормальной подгруппой, мы рассмотрим факторгруппу

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T} = \mathfrak{P}(\boldsymbol{k}). \tag{41.1}$$

Факторгруппа $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ изоморфна некоторой кристаллической точечной группе $\mathfrak{P}$. Произведение двух представителей смежных классов в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ имеет вид

$$\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\} = \{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}\}, \tag{41.2}$$

где

$$\varphi_{l_{\lambda\mu}} = \varphi_{l_\lambda}\cdot\varphi_{l_\mu}, \tag{41.3}$$

$$\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu}} \equiv \varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{\tau}_{l_\mu} - \boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}} + \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}. \tag{41.4}$$

Здесь $\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu}}$ — вектор решетки, а $\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}$ — нетривиальная трансляция, соответствующая оператору $\varphi_{l_{\lambda\mu}}$. Вследствие свойства ассоциативности умножения (6.7) для элементов пространственной группы векторы решетки взаимосвязаны. Из равенств

$$\begin{aligned}
(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\})\cdot\{\varphi_{l_\nu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\nu}\} &= \{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}\}\cdot\{\varphi_{l_\nu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\nu}\} = \\
&= \{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}\}\cdot\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu,\nu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda\mu\nu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu\nu}}\} = \\
&= \{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu,\nu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda\mu\nu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu\nu}}\} = \\
&= \{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot(\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}\cdot\{\varphi_{l_\nu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\nu}\} = \\
&= \{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\{\cdot\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\mu\nu}}|\tau_{l_{\mu\nu}}\} = \\
&= \{\varepsilon|\varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}}\}\cdot\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_{l_{\mu\nu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\mu\nu}}\} = \\
&= \{\varepsilon|\varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu\nu}}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda\mu\nu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu\nu}}\}
\end{aligned} \tag{41.5}$$

прямым сравнением получим

$$\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu,\nu}}\} = \{\varepsilon|\varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu\nu}}\}. \tag{41.6}$$

Определение величин $\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu,\nu}}$ и $\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu\nu}}$ следует обозначению, введенному в (41.4). Произведение (41.2), записанное для допустимого неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ имеет

[1]) Проективные представления были использованы в применении к физике твердого тела в книге Любарского [49] при исследовании вырождения электронных зон. В книге Бира и Пикуса [115] можно найти не только таблицы характеров, но также и матрицы для всех неэквивалентных проективных представлений 32 точечных групп. — *Прим. ред.*

вид

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)\cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}\right)= \\ = D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}\}\right)\cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_{\lambda\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}\}\right)= \\ = \left(\exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}\right)\Pi_m\cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_{\lambda\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}\}\right). \quad (41.7)$$

Введем величину

$$r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu) \equiv \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}. \quad (41.8)$$

Тогда (41.7) можно записать в виде

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)\cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}\right)= \\ = r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)\,\Pi_m D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_{\lambda\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda\mu}}\}\right). \quad (41.9)$$

Очевидно, для каждой пары представителей смежных классов $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$, $\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ определена величина $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)$:

$$r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu) = \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}, \quad \lambda, \mu = 1, \ldots, l_{\boldsymbol{k}}. \quad (41.10)$$

Следовательно, имеется $(l_{\boldsymbol{k}})^2$ величин $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)$. Они называются системой факторов.

Рассмотрим теперь точечную группу $\mathfrak{P}$, изоморфную группе $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, элементами которой являются l_k поворотов:

$$\mathfrak{P} = \varepsilon, \quad \varphi_{l_2}, \ldots, \varphi_{l_\lambda}, \ldots, \varphi_{l_k} \approx \mathfrak{P}(\boldsymbol{k}). \quad (41.11)$$

Они перемножаются по правилу

$$\varphi_{l_\lambda}\cdot\varphi_{l_\mu} = \varphi_{l_{\lambda\mu}}. \quad (41.12)$$

Предположим теперь, что у нас имеется неприводимое представление $D^{(j)}$ группы $\mathfrak{P}$. Тогда для этого представления группы $\mathfrak{P}$ имеем

$$D^{(j)}\left(\varphi_{l_\lambda}\right)\cdot D^{(j)}\left(\varphi_{l_\mu}\right) = D^{(j)}\left(\varphi_{l_{\lambda\mu}}\right). \quad (41.13)$$

Сравнивая (41.9) и (41.13), видим, что матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, соответствующие l_k представителям смежных классов $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ для допустимого неприводимого представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, перемножаются «почти» так же, как матрицы для неприводимого представления $D^{(j)}$ группы $\mathfrak{P}$ порядка l_k. «Различие» заключается в численном множителе $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)$ присутствующем в произведении (41.9). Другими словами, набор матриц $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ представляет собой почти обычное или векторное представление группы $\mathfrak{P}$. Набор матриц

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}, \quad (41.14)$$

являющихся отображением элементов группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$:

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right) \rightleftarrows \varphi_{l_\lambda}, \quad (41.15)$$

образует лучевое (проективное, или нагруженное) представление абстрактной группы $\mathfrak{P}$ с системой факторов $r^{(k)}(\lambda, \mu)$ [33], если умножение в группе $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ определено равенством

$$\varphi_{l_\lambda} \cdot \varphi_{l_\mu} = \varphi_{l_{\lambda\mu}} \tag{41.16}$$

и закон умножения для матриц имеет вид

$$D^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}\right) \cdot D^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_\mu} | \tau_{l_\mu}\}\right) = \\ = r^{(k)}(\lambda, \mu) D^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_{\lambda\mu}} | \tau_{l_{\lambda\mu}}\}\right), \tag{41.17}$$

где $r^{(k)}(\lambda, \mu) = 1$, причем

$$r^{(k)}(\lambda, \mu) r^{(k)}(\lambda\mu, \nu) = r^{(k)}(\lambda, \mu\nu) r^{(k)}(\mu, \nu). \tag{41.18}$$

Остается показать, что для системы факторов $r^{(k)}(\lambda, \mu)$, определенной соотношениями (41.8) и (41.10), выполняется равенство (41.18). Из (41.18) имеем

$$r^{(k)}(\lambda, \mu) \cdot r^{(k)}(\lambda\mu, \nu) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \left(\boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda\mu,\nu}}\right), \tag{41.19}$$

что равно

$$\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \left(\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\mu\nu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu\nu}}\right), \tag{41.20}$$

если использовать (41.6). Но так как, согласно (34.7),

$$\left(\boldsymbol{k} \cdot \varphi_{l_\lambda}\right) = \varphi_{l_\lambda}^{-1} \cdot \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \tag{41.21}$$

то (41.20) можно переписать как

$$\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \left(\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu\nu}}\right) \tag{41.22}$$

и затем записать (41.22) в виде

$$r^{(k)}(\lambda, \mu\nu) r^{(k)}(\mu, \nu), \tag{41.23}$$

что и доказывает (41.18). Следовательно, набор из l_k^2 величин $r^{(k)}(\lambda, \mu)$ обладает свойствами системы факторов неприводимого проективного представления кристаллографической точечной группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$.

§ 42. Проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Накрывающая группа $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$ [33]

Теперь наша задача состоит в том, чтобы определить те неприводимые проективные, или лучевые, представления кристаллографической точечной группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, которые имеют правильную систему факторов $r^{(k)}(\lambda, \mu)$. Чтобы произвести такой выбор, необходимо сначала получить и рассмотреть все неприводимые проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. При этом может оказаться, что некоторые из них уже обладают необходимыми свойствами; более вероятна ситуация, когда для получения правильной системы факторов требуется выполнить калибровочное преобразование. Поэтому необходимо построить теорию проективных, или лучевых, представлений группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Для сохранения последовательности в обозначениях мы будем обозначать элементы группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ символами, принятыми и в (36.1) и (41.11). Однако теория, которая будет построена, имеет общий характер и применима к проективным представлениям любой конечной группы $\mathfrak{P}$. Калибровочные преобразования рассматриваются в § 43.

Следуя Шуру, предположим, что имеется группа $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$, называемая группой представлений или накрывающей группой группы $\mathfrak{P}$. Свойства $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$ рассмотрены ниже. Пусть $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$ является расширением некоторой абелевой группы A с помощью группы $\mathfrak{P}$, таким, что группа A представляет собой нормальную подгруппу группы $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$; A содержится в центре[1]) группы $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$, таким образом,

$$\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})/A \approx \mathfrak{P}. \tag{42.1}$$

Пусть группа A имеет порядок m, так что порядок каждого элемента группы $A \leqslant m$. Обозначим элементы группы A следующим образом:

$$A\colon E_1, A_2, \ldots, A_m. \tag{42.2}$$

Тогда для всех элементов группы $\mathfrak{P}^*$, согласно определению центра группы, имеем

$$A_k \varphi_{l_\lambda} = \varphi_{l_\lambda} A_k, \tag{42.3}$$

где A_k — произвольный элемент группы A, φ_{l_λ} — любой из элементов группы $\mathfrak{P}^*$. Предположим, что у нас имеется такая группа $\mathfrak{P}^*$, и мы выполним разложение $\mathfrak{P}^*$ на смежные классы по A:

$$\mathfrak{P}^* = A + \Phi_{l_2} A + \ldots + \Phi_{l_k} A, \tag{42.4}$$

где Φ_{l_λ} представитель смежного класса из группы $\mathfrak{P}^*/A$. Представители смежных классов в (42.4) выбираются так, чтобы они соответствовали элементам группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Для произведения двух представителей смежных классов имеем

$$\Phi_{l_\lambda} \Phi_{l_\mu} = \Phi_{l_{\lambda\mu}} A(\lambda, \mu) = A(\lambda, \mu) \Phi_{l_{\lambda\mu}}, \tag{42.5}$$

где мы использовали равенство (42.3) и $A(\lambda, \mu) \equiv A_{\lambda\mu}$ — некоторый элемент группы A.

---

[1]) *Множество всех инвариантных элементов группы G составляет подгруппу группы G, называемую центром группы G (см. [118], стр. 72).— Прим. ред.*

Пусть ${}^{\star}D^{(j)}$ — обычное неприводимое представление группы $\mathfrak{P}^{\star}(k)$; тогда из (42.5) следует

$$
{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\lambda})\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\mu}) = {}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{\lambda\mu})\,{}^{\star}D^{(j)}(A_{\lambda\mu}) = {}^{\star}D^{(j)}(A_{\lambda\mu})\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{\lambda\mu}). \tag{42.6}
$$

Однако, поскольку $A_{\lambda\mu}$ принадлежит центру, для *фиксированного* элемента $A_{\lambda\mu}$ и при *любом* Φ_{l_ν} из (42.3) получаем

$$
{}^{\star}D^{(j)}(A_{\lambda\mu})\,{}^{\star}D(\Phi_{l_\nu}) = {}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\nu})\,{}^{\star}D^{(j)}(A_{\lambda\mu}). \tag{42.7}
$$

Но представление ${}^{\star}D^{(j)}$ неприводимо; следовательно, согласно лемме Шура,

$$
{}^{\star}D^{(j)}(A_{\lambda\mu}) = r(\lambda, \mu)\cdot \mathrm{I}_j, \tag{42.8}
$$

где I_j — единичная матрица порядка l_j, а $r(\lambda, \mu)$ — константа. Далее, так как группа A абелева, то $|r(\lambda, \mu)| = 1$. Поэтому, если мы действительно имеем какое-либо неприводимое представление группы $\mathfrak{P}^{\star}$, то оно обладает свойством

$$
{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\lambda})\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\mu}) = r(\lambda, \mu)\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_{\lambda\mu}}). \tag{42.9}
$$

Это именно то свойство, которое необходимо, чтобы можно было рассматривать ${}^{\star}D^{(j)}$ как проективное представление группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, так как вследствие ассоциативности умножения в группе $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ величины $r(\lambda, \mu)$ представляют собой набор, удовлетворяющий условию (41.18). Разумеется, чтобы соотношение (42.9) для $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ не было тривиальным, требуется, чтобы $r(\lambda, \mu) \neq 1$. Это в свою очередь требует, чтобы группа $\mathfrak{P}^{\star}$ не представляла собой полупрямое произведение группы A на P, но являлась расширением более общего типа. Это означает, что если бы группа $\mathfrak{P}^{\star}$ оказалась полупрямым произведением, то в (42.5) произведение двух представителей смежных классов снова было бы равно представителю смежного класса, но *не* помноженному на элемент группы A. В случае расщепляемого расширения в (42.5) все $A_{\lambda\mu} = E$ и $r(\lambda, \mu) = 1$.

Основная теорема Шура гласит: *все* проективные неприводимые представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ являются неприводимыми представлениями группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$, ограниченными на подгруппе $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Вследствие закона ассоциативности [который можно далее применить к (42.5), чтобы ограничить порядок образующих элементов A_μ группы A] число различных неэквивалентных расширений группы A с помощью $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, задающих различные проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, конечно. Расширение $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ наименьшего порядка, дающее все различные проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, называется группой представлений или накрывающей группой группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Любое большее расширение группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ на другие подобные группы, как можно показать, дает проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, не являющиеся различными. Определение всех накрывающих групп $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ для всех кристаллографических групп было завершено Шуром. Для всех таких групп имеются таблицы для систем характеров неприводимых представлений [38]. Поэтому мы будем считать задачу определения всех неэквивалентных неприводимых представлений группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ решенной, так же как и задачу об ограничении проективных представлений группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ на подгруппе $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$.

§ 43. Калибровочные преобразования проективных представлений [33]

При нахождении проективных представлений группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ по гоморфизмам группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ одновременно конкретизируется система факторов проективного представления, а именно система, соответствующая (42.7). Рассмотрим проективное представление группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, ${}^{\star}D^{(j)}$, такое, что

$$ {}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\lambda})\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\mu}) = r(\lambda, \mu)\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_{\lambda\mu}}), \tag{43.1} $$

а также другое проективное представление ${}^{\star}\overline{D}^{(j)}$, связанное с первым соотношением

$$ {}^{\star}\overline{D}^{(j)}(\Phi_{l_\lambda}) = c_\lambda {}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\lambda}), \quad \lambda = 1, \ldots, l_k, \tag{43.2} $$

где c_λ — константа, равная по модулю единице. Очевидно, если используются матрицы с чертой, то возникает другое проективное представление группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ с системой факторов $\bar{r}(\lambda, \mu)$:

$$ {}^{\star}\overline{D}^{(j)}(\Phi_{l_\lambda})\,{}^{\star}D^{(j)}(\Phi_{l_\mu}) = \bar{r}(\lambda, \mu)\,{}^{\star}\overline{D}^{(j)}(\Phi_{l_{\lambda\mu}}), \tag{43.3} $$

где

$$ \bar{r}(\lambda, \mu) = r(\lambda, \mu)\frac{c_\lambda c_\mu}{c_{\lambda\mu}}. \tag{43.4} $$

Говорят, что проективные представления, для которых выполняется соотношение (43.2), связаны калибровочным преобразованием; тогда системы факторов связаны соотношением (43.4). Такие проективные представления ${}^{\star}D^{(j)}$ и ${}^{\star}\overline{D}^{(j)}$ называются проективно-эквивалентными (p-эквивалентными). Проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, не являющиеся проективно-эквивалентными, называются различными представлениями.

В частности, калибровочное преобразование необходимо для проективных представлений, возникающих при ограничении представлений ${}^{\star}D^{(j)}$ накрывающей группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$, чтобы гарантировать действительное соответствие полученных проективных представлений допустимым представлениям $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ и, таким образом, допустимым представлениям $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Это означает, что одна из возникающих задач состоит в нахождении постоянных c_λ, таких, что

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right) = c_\lambda^\star D^{(l)}\left(\Phi_{l_\lambda}\right). \tag{43.5}$$

Более определенно, нам требуется калибровочное преобразование от калибровки (42.7) к калибровке $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)$, соответствующей (41.10):

$$r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu) = \frac{c_\lambda c_\mu}{c_{\lambda\mu}}\, r(\lambda, \mu) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}. \tag{43.6}$$

Выбор величин c_λ, требуемых для выполнения (43.6), разумеется, неоднозначен, однако, для нас это несущественно. Будем считать, что набор $\{c_\lambda\}$, удовлетворяющий (43.6), найден, так что построены допустимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. На практике легче всего получить характеры $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$. Производя некоторые дополнительные вычисления, можно построить также и полные матрицы; недавно опубликованы таблицы таких матриц [38] [1]).

§ 44. Соотношение между методом малой группы и методом проективных представлений

Чтобы обсудить соотношение между методом малой группы и методом проективных представлений, необходимо сначала сопоставить малую группу $\Pi(\boldsymbol{k})$, заданную соотношением (39.9):

$$\Pi(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}), \tag{44.1}$$

и накрывающую группу $\mathfrak{P}^\star(\boldsymbol{k})$, полученную расширением точечной группы

$$\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}. \tag{44.2}$$

Простейший и наиболее прямой путь сравнения двух групп заключается в перемножении представителей смежных классов, соответствующих элементам точечной группы $\mathfrak{P}$, лежащей в основе построения.

Рассмотрим сначала группу $\Pi(\boldsymbol{k})$; воспользуемся соотношением (39.11). Для $\Pi(\boldsymbol{k})$ имеем

$$\{\varphi_{l_\alpha} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha}\} \cdot \{\varphi_{l_\beta} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\beta}\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\} \cdot \{\varphi_{l_\alpha} \cdot \varphi_{l_\beta} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_{\alpha\beta}}\}, \tag{44.3}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}}) = \varphi_{l_\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau}_{l_\beta} + \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha} - \boldsymbol{\tau}_{l_\beta} \tag{44.4}$$

---

[1]) Полные таблицы неприводимых представлений пространственных групп можно найти также в работе [119].— *Прим. ред.*

представляет собой вектор решетки, не входящий в группу $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Элемент $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}$, рассматриваемый как абстрактный элемент, не коммутирует с другими представителями смежных классов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Поэтому $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}$ не входит в центр группы $\Pi(\boldsymbol{k})$.

Однако для допустимого неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ из (39.15) имеем

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\,\Pi_m. \tag{44.5}$$

Элементы $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}$ являются представителями смежных классов в группе $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, которая представляет собой абелеву группу порядка t, порожденную одним образующим элементом порядка t. Поэтому величина $\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})$ равна корню степени t из единицы.

Хотя $\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}$ не коммутирует с другими элементами группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ (за исключением чистых трансляций), справедливо соотношение

$$\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\} \cdot \{\varphi_{l_{\alpha\beta}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}\} = \{\varphi_{l_{\alpha\beta}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}\} \cdot \{\varepsilon \mid \varphi_{l_{\alpha\beta}}^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}. \tag{44.6}$$

Соотношение (44.6) выполняется для абстрактных элементов. Для допустимого неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ должно выполняться равенство

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon \mid \varphi_{l_{\alpha\beta}}^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right) = \left(\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \left(\varphi_{l_{\alpha\beta}}^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\right)\right)\Pi_m =$$
$$= \left(\exp - i\left(\varphi_{l_{\alpha\beta}} \cdot \boldsymbol{k}\right) \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\right)\Pi_m. \tag{44.7}$$

Но из определения группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ имеем

$$\varphi_{l_{\alpha\beta}} \cdot \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \tag{44.8}$$

поэтому

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\varepsilon \mid \varphi_{l_{\alpha\beta}}^{-1} \cdot \mathrm{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}}) = D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right). \tag{44.9}$$

Далее, используя (44.3), (44.6), (44.9), для представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ получаем

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\alpha} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\alpha}\}\right) \cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\beta} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\beta}\}\right) =$$
$$= D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right) \cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_{\alpha\beta}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}\}\right) =$$
$$= D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_{\alpha\beta}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}\}\right) \cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\}\right). \tag{44.10}$$

Следовательно, в представлении $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})\})$ принадлежат центру матричной группы, поэтому, согласно лемме Шура, поскольку $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ образует неприводимое представление группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, эти матрицы являются скалярными постоянными величинами, помноженными на единичные матрицы. Эти постоянные приведены в (44.5).

Таким образом, мы видим, что матрицы допустимых неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ малой группы образуют проективное представление абстрактной группы $\mathfrak{P}$ или $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, система факторов которого имеет вид

$$r^{(\boldsymbol{k})}(\alpha, \beta) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}}). \tag{44.11}$$

Сравним теперь равенства (44.3) и (41.2). Ясно, что $\boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\overline{\boldsymbol{k}})$ в (44.3) равно $\boldsymbol{R}_{L_{\alpha\beta}}$ в (41.2). В обоих случаях трансляции одинаковы, если не учитывать различия в обозначениях. Поэтому система факторов (44.11) действительно соответствует системе

$$r^{(\boldsymbol{k})}(\alpha, \beta) = \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\alpha,\beta}}. \tag{44.12}$$

Сравнивая (44.12) с (43.6), видим, что это соотношение действительно определяет каноническую калибровку, требуемую для проективных представлений группы $\mathfrak{P}$. Поэтому допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ являются проективными представлениями группы $\mathfrak{P}$, имеющими требуемую каноническую калибровку, соответствующую волновому вектору $\boldsymbol{k}$.

В таком случае группу $\Pi(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ можно рассматривать как расширение абелевой группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ с помощью группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$. Элементы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ не входят в центр расширенной абстрактной группы, хотя в матричном представлении $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ соответствующие им матрицы входят в центр матричной группы. Действительно, если рассматривать $\Pi(\boldsymbol{k})$ как расширение $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ с помощью $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, то легко понять, что совокупность элементов

$$\left\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\overline{\boldsymbol{k}})\right\}, \quad \alpha = 1, \ldots, t \tag{44.13}$$

является циклической нормальной подгруппой порядка t группы $\Pi(\boldsymbol{k})$. Поэтому неприводимые представления группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ представляют собой корни степени t из единицы. Следовательно, если образующим элементом группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ является элемент

$$\left\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\boldsymbol{k})\right\}, \tag{44.14}$$

то все неприводимые представления группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ имеют вид

$$D\left(\left\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\overline{\boldsymbol{k}})\right\}\right) = \exp - 2\pi i p/t, \quad p = 0, \ldots, t-1. \tag{44.15}$$

Для данного $\boldsymbol{k}$, как правило, имеется только одно значение p, совместимое с соотношением

$$\exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\overline{\boldsymbol{k}}) = \exp - 2\pi i p/t. \tag{44.16}$$

Следуя в точности методу, изложенному в § 36, 37, можно использовать все неприводимые представления (44.15) группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ для построения индуцированных неприводимых представлений группы $\Pi(\boldsymbol{k})$. Очевидно, допустимое представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ индуцировано с помощью того представления группы $\mathfrak{T}/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, которому соответствует правильное значение p, определяемое из (44.15). В таком случае ясно также, почему запрещенное представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ соответствует набору волновых векторов (40.7). Это представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ индуцировано с помощью иных представлений, чем те, для которых p определяется соотношением (44.15). Это доказательство дополняет прямое доказательство, приведенное в § 40.

Напомним, что, согласно теории Шура, расширение *наименьшего* порядка $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ абелевой группы A с помощью группы $\mathfrak{P}$ является накрывающей группой, если полный набор неприводимых, не ассоциированных и не p-эквивалентных проективных представлений группы $\mathfrak{P}$ можно получить путем ограничения всех векторных представлений ${}^{\star}D$ группы $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$. По этой терминологии группа $\Pi(\boldsymbol{k})$ представляет собой «достаточно расширенную группу». Ее неприводимые векторные представления при ограничении включают в себя все неприводимые проективные представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, однако эти представления входят более одного раза, с различными, но ассоциированными системами факторов. Это и понятно, так как переход от канонического волнового вектора $\boldsymbol{k}$ представления к какому-либо другому вектору, входящему в набор векторов, полученных из вектора $\boldsymbol{k}$, соответствует просто калибровочному преобразованию с системой факторов вида $\exp - i(p - p')\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_\varepsilon}(\tilde{\boldsymbol{k}})$, равных по модулю единице.

Резюмируем: группа $\mathfrak{P}^{\star}(\boldsymbol{k})$ является накрывающей группой, неприводимые векторные представления ${}^{\star}D$ которой дают при ограничении все неприводимые не p-эквивалентные проективные представления группы $\mathfrak{P}$. Эти ограниченные представления, чтобы получить из них допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, в общем случае требуют калибровочного преобразования. Допустимые неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ являются одновременно проективными представлениями группы $\mathfrak{P}$ с правильной системой факторов.

Преимущество использования малой группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ состоит в том, что для получения $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ не требуется дополнительного калибровочного преобразования и, кроме того, запрещенные представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ также могут оказаться полезными. Недостатком является то, что группа $\Pi(\boldsymbol{k})$ представляет собой большую группу, систему характеров которой обычно приходится строить для каждого случая снова, и это часто требует утомительных вычислений.

Достоинство метода проективных представлений при использовании группы $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$ заключается в том, что все основные проективные представления, которые когда-либо могут потребоваться, можно определить для всех групп $\mathfrak{P}$ раз и навсегда. Действительно, после того как они протабулированы, дополнительные вычисления не требуются. Однако для получения нужной системы факторов $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu)$ из системы факторов, возникающих из группы $\mathfrak{P}^*(\boldsymbol{k})$, необходимо произвести калибровочное преобразование; в этом недостаток метода.

С теоретической точки зрения метод проективных представлений кажется более предпочтительным как по причине его краткости, так и вследствие его общности. Задача нахождения правильных систем факторов и выполнения соответствующих этим системам калибровочных преобразований представляется невысокой платой за такую степень общности; применение к структуре алмаза см. в т. 2, § 8 и в приложении Г.

§ 45. Полное представление $D^{(*\boldsymbol{k})(m)}$ для симморфных групп: пример

Симморфная пространственная группа представляет собой расщепляемое расширение группы $\mathfrak{T}$ с помощью группы $\mathfrak{P}$, или, иначе, полупрямое произведение группы $\mathfrak{T}$ на группу $\mathfrak{P}$.

В этом случае набор представителей смежных классов в разложение $\mathfrak{G}$ на смежные классы по подгруппе $\mathfrak{T}$ является замкнутым без какого-либо искусственного или произвольного предположения о правиле умножения. Поэтому точечная группа $\mathfrak{P}$, содержащаяся в $\mathfrak{G}$, является настоящей подгруппой. Разложение $\mathfrak{G}$ на смежные по $\mathfrak{T}$ классы по представителям смежных классов $\{\varphi|0\}$, представляющих собой чистые повороты из группы $\mathfrak{P}$, имеет вид

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{T} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2|0\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_{g_p}|0\}\mathfrak{T}. \qquad (45.1)$$

а. Звезда общего типа. В случае звезды общего типа в набор (38.1) входят g_p различных волновых векторов, и неприводимое векторное пространство $\Sigma^{(*\boldsymbol{k})(m)}$ состоит из g_p линейнонезависимых блоховских функций:

$$\{\psi^{(\boldsymbol{k})}, \psi^{(\boldsymbol{k}_2)}, \ldots, \psi^{(\boldsymbol{k}_p)}\} \equiv \Sigma^{(*\boldsymbol{k})(m)}. \qquad (45.2)$$

Когда каждое векторное пространство (блоховская функция) одномерно, одномерное неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ просто совпадает с неприводимым представлением группы $\mathfrak{T}$, т. е. для канонического вектора $\boldsymbol{k}$ имеем

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}) = \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L. \qquad (45.3)$$

Поэтому разложение $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}$ на смежные классы совпадает с разложением $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$, т. е. равенства (36.1) и (45.1) тождественны. Теперь можно выписать, используя (36.14), точное выражение для полных матриц $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$.

Для элементов группы $\mathfrak{T}$ имеем

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) = \begin{vmatrix} \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \exp - i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_L & & \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & \exp - i\boldsymbol{k}_{g_p}\cdot\boldsymbol{R}_L \end{vmatrix}. \tag{45.4}$$

Для элементов $\{\varphi_p|0\}$, являющихся представителями смежных классов, из (36.14) получаем блочные матрицы

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\,|\,0\})_{\sigma\tau} = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad \varphi_\sigma^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_\tau = \varepsilon, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \tag{45.5}$$

Общий вид полной матрицы совпадает с видом матрицы перестановок:

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)} = \begin{vmatrix} 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ & \dots & 0 & \dots & 1 \\ 1 & & & 0 & \\ \vdots & & & & \vdots \\ & & \dots & & 0 \end{vmatrix}. \tag{45.6}$$

Для произвольного элемента $\{\varphi_p\,|\,\boldsymbol{R}_L\}$ простое перемножение матриц из (45.4) и (45.6) дает

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) = D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p\,|\,0\}) =$$

$$= \begin{vmatrix} 0 & \dots \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \exp - i\boldsymbol{k}_\sigma\cdot\boldsymbol{R}_L & \dots\ 0\ \dots & \exp - i\boldsymbol{k}_\tau\cdot\boldsymbol{R}_L \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ & & 0 \end{vmatrix}. \tag{45.7}$$

б. Звезда специального типа. Для симморфной пространственной группы звезда специального типа имеет такой канонический волновой вектор $\boldsymbol{k}$, что группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ сама является нетривиальной симморфной пространственной группой:

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{T} + \{\varphi_{l_2}|0\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_{l_k}|0\}\mathfrak{T}. \tag{45.8}$$

Поскольку точечная группа $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ является подгруппой группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, проективные представления представляют собой векторные представления. Следовательно, $\mathfrak{P}^\star(\boldsymbol{k}) \approx \mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, т. е. накрывающая группа изоморфна обычной кристаллографической точечной группе.

Это важное утверждение следует из того, что произведение двух представителей смежных классов из (45.8) является снова представителем смежного класса, так что система факторов $r^{(\boldsymbol{k})}(\lambda, \mu) = 1$. Поэтому неприводимые представления группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ совпадают с обычными хорошо известными неприводимыми представлениями точечных групп. Так, например, для группы O_h или O неприводимые представления могут иметь размерность $l_m = 1, 2, 3$. Разумеется, и в этом случае равенство (36.14) дает решение задачи во всей его полноте.

Рассмотрим теперь случай, когда звезда $^\star\boldsymbol{k}$ содержит s различных волновых векторов, а порядок группы $\mathfrak{P}$, как и раньше, равен l_k. Представителей смежных классов будем обозначать в соответствии с обозначениями в (36.1) и (36.2). Далее, чтобы избежать громоздких выражений, рассмотрим частный случай, когда

$$\{\varphi_l|0\} \quad \text{входит в} \quad \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{45.9а}$$

$$\{\varphi_2^{-1}\varphi_l\varphi_\sigma|0\} \quad \text{входит в} \quad \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{45.9б}$$

$$\{\varphi_\tau^{-1}\varphi_l\varphi_\tau|\varphi\} \quad \text{входит в} \quad \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \tag{45.9в}$$

При этих условиях неприводимая матрица имеет вид

$$D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l|0\}) =$$

$$= \begin{bmatrix} D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l|0\} & 0 & & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_2^{-1}\varphi_l\varphi_\sigma|0\}) & \ldots \\ \vdots & 0 & & & \\ \vdots & & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ \vdots & & & D^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_\tau^{-1}\varphi_l\varphi_\tau|0\}) & \ldots \end{bmatrix}. \tag{45.10}$$

Как и раньше в случае звезды общего типа, матрица, представляющая произвольный элемент $\{\varphi_p|\boldsymbol{R}_L\}$, получается умножением диагональной матрицы, соответствующей трансляции, на (45.10).

Таким методом можно получить все неприводимые представления симморфной группы для заданной звезды и выбранного канонического волнового вектора этой звезды. Соответственно определяются неприводимые векторные пространства: $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$ для представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ и $\Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ для представления $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$.

Если представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ не одномерно и $l_m = 2$ или 3, векторное пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$ также многомерно. Полезно, быть может, обратиться снова к первоначальному обсуждению в § 32 и 33, чтобы восстановить в памяти вывод этого утверждения.

§ 46. Полное представление $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ для несимморфных групп

В случае звезды общего типа неприводимые представления $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ для несимморфных групп имеют точно такой же вид (45.3), (45.4), как и для симморфных групп, за исключением того, что теперь представителями смежных классов являются элементы $\{\varphi_\alpha | \boldsymbol{\tau}_\alpha\}$, причем по крайней мере для некоторых значений α $\boldsymbol{\tau}_\alpha \neq 0$.

В случае звезды специального типа проще всего применить метод проективных представлений. Будем считать, что, выполнив калибровочное преобразование, мы получим допустимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ из представлений $^\star D$ группы $\mathfrak{P}^\star(\boldsymbol{k})$. В таком случае мы определим матрицу $D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)$ для каждого представителя $\{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ смежных классов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и снова, чтобы получить полную матрицу неприводимого представления $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$, следует использовать основную формулу (36.14). Рассмотрим частный случай, когда

$$\{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\} \quad \text{входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{46.1а}$$

$$\{\varphi_{l_2} | \boldsymbol{\tau}_2\}^{-1} \cdot \{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \quad \text{входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{46.1б}$$

$$\{\varphi_\tau | \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1} \cdot \{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}\} \cdot \{\varphi_\tau | \boldsymbol{\tau}_\tau\} \quad \text{входит в } \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \tag{46.1в}$$

Элементы (46.1б) и (46.1в) можно переписать в виде

$$\{\varphi_{l_2} | \boldsymbol{\tau}_2\}^{-1} \cdot \{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\bar{2}l\sigma}}\} \cdot \{\varphi_{l_2}^{-1} \cdot \varphi_l \cdot \varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_{\bar{2}l\sigma}\}, \tag{46.2}$$

где $\boldsymbol{R}_{L_{\bar{2}l\sigma}}$ — вектор решетки, и

$$\{\varphi_\tau | \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1} \cdot \{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\} \cdot \{\varphi_\tau | \boldsymbol{\tau}_\tau\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\tau}l\tau}}\} \cdot \{\varphi_\tau^{-1} \cdot \varphi_l \cdot \varphi_\tau | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\tau}l\tau}\}. \tag{46.3}$$

В (46.2) и (46.3) в правую часть входят элементы, являющиеся представителями смежных классов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, помноженными на чистые трансляции. Поэтому для допустимых представлений $D^{(k)(m)}$ имеем

$$D^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_2}|\boldsymbol{\tau}_2\}^{-1}\cdot\{\varphi_l|\boldsymbol{\tau}_l\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_\sigma\}\right)=$$
$$=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\overline{2}L\sigma}}D^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_2}^{-1}\cdot\varphi_l\cdot\varphi_\sigma|\boldsymbol{\tau}_{\overline{2}l\sigma}\}\right). \quad (46.4)$$

Аналогичное выражение получается для матрицы, соответствующей элементу (46.3). Следовательно, структура полной матрицы $D^{(^\star k)(m)}(\{\varphi_l|\boldsymbol{\tau}_l\})$ подобна структуре матрицы (45.10), за тем исключением, что все представители смежных классов включают в себя соответствующие нетривиальные трансляции и, что более важно, такие элементы, как (46.1б) и (46.1в), могут содержать отличные от нуля трансляции, приводящие к появлению нетривиальных фазовых множителей, как это видно в (46.4). Следует подчеркнуть, что матрицы проективных представлений применимы только к тем представителям смежных классов, которые изоморфны абстрактным элементам группы $\mathfrak{P}$. Таким образом, в этих матрицах обязательно возникнут обусловленные входящими в (46.2) и (46.3) трансляциями фазовые множители, которые необходимо учитывать.

С другой стороны, если для получения $D^{(k)(m)}$ используется метод малой группы, то матрицы $D^{(k)(m)}$ определяются не только для представителей смежных классов $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}$, но также и для элементов вида $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_\lambda+\boldsymbol{R}_{L_\alpha}(\boldsymbol{k})\}$, образующих группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Это обстоятельство в принципе не приводит к затруднениям. Однако при построении матриц необходимо удостовериться, что включены все необходимые множители; это, в частности, означает проверку всех произведений вида (46.1б) и (46.1в).

§ 47. Полный набор представлений $D^{(^\star k)(m)}$ для пространственной группы

Имея в своем распоряжении результаты предыдущих параграфов, мы можем теперь указать способ, которым можно получить все неприводимые представления $D^{(^\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$.

Необходимо построить первую зону Бриллюэна согласно рецепту, содержащемуся в § 23. Первая зона Бриллюэна является геометрическим местом всех волновых векторов $\boldsymbol{k}$, определяющих полный набор неэквивалентных неприводимых представлений группы трансляций $\mathfrak{T}$. Для каждого волнового вектора $\boldsymbol{k}$ в первой зоне Бриллюэна определим звезду $^\star\boldsymbol{k}$, действуя на вектор $\boldsymbol{k}$ каждым из g_p различных поворотов φ_μ группы $\mathfrak{P}$. Из набора векторов

$$\varphi_\mu \cdot \boldsymbol{k} \equiv \boldsymbol{k}_\mu, \quad \mu = 1, \ldots, g_p \tag{47.1}$$

только $s \leqslant g_p$ являются неэквивалентными, т. е. такими, что

$$\boldsymbol{k}_\sigma \equiv \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{47.2}$$

Набор неэквивалентных векторов $\boldsymbol{k}$ образует звезду ${}^*\boldsymbol{k}$:

$${}^*\boldsymbol{k} = \{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}_2, \ldots, \boldsymbol{k}_s\}. \tag{47.3}$$

Таким способом N волновых векторов зоны оказываются сгруппированными в различные несвязанные звезды. Каждая звезда характеризуется заданием ее канонического вектора $\boldsymbol{k}$. После того как для данной звезды указан канонический вектор $\boldsymbol{k}$, он считается фиксированным.

Рассмотрим звезду ${}^*\boldsymbol{k}$. Для канонического вектора $\boldsymbol{k}$ звезды определяется группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Затем методом проективных представлений или методом малой группы находится полный набор допустимых неэквивалентных неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$. Из каждого отдельного представления методом индуцирования, выражаемым равенством (36.14), получается отдельное неприводимое представление $D^{({}^*\boldsymbol{k})(m)}$ полной пространственной группы $\mathfrak{G}$.

Совокупность всех представлений

$$D^{({}^*\boldsymbol{k})(m)} \text{ для всех допустимых } m \text{ и для всех } {}^*\boldsymbol{k} \tag{47.4}$$

представляет собой полный набор неэквивалентных неприводимых представлений пространственной группы $\mathfrak{G}$.

§ 48. Доказательство полноты набора представлений $D^{({}^*\boldsymbol{k})(m)}$

Чтобы продемонстрировать полноту набора представлений $D^{({}^*\boldsymbol{k})(m)}$ (47.4), мы используем соотношение для характеров (15.7), переписанное применительно к пространственным группам. Согласно (37.3), характер произвольного элемента равен

$$\chi^{({}^*\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}) = \sum_{\sigma=1}^{s} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\right), \tag{48.1}$$

где индекс $\sigma \neq 1$ относится к представителям смежных классов группы $\mathfrak{G}$ [но не группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$], а $\sigma = 1$ соответствует тождественному элементу.

Наше доказательство полноты является модификацией подобного доказательства, данного впервые Дёрингом и Целером

[39]. Требуется показать, что

$$\sum_{{}^\star k}\sum_{m} \left| \chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\}) \right|^2 = g_p N, \tag{48.2}$$

где g_p — порядок группы $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$ (т. е. число различных поворотных элементов в $\mathfrak{G}$), N — число трансляций в группе $\mathfrak{T}$, суммирование в левой части выполняется по всем звездам ${}^\star\boldsymbol{k}$ в зоне и по всем допустимым неприводимым представлениям группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Ограничение суммирования «допустимыми» m в (48.2) является неудобным, но может быть снято. Например, если для получения допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ использовать метод малой группы, то следует рассматривать группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, где $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ включает в себя все элементы симметрии из группы $\mathfrak{T}$, матрицы которых в данном представлении совпадают с матрицей тождественного элемента. Как было показано в § 39 и 40, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ является группой порядка $(t \cdot l_k)$. Следовательно, если рассматривать все неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})\,(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, то соответствующие им характеры удовлетворяют соотношениям

$$\sum_{\text{все } m} |\chi^{(\boldsymbol{k})\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\})|^2 = \sum_{\text{все } m} |l_m|^2 = l_k t, \tag{48.3}$$

где l_m — размерность допустимого неприводимого представления. Как показано в § 38, 39 и 44, среди t целых чисел 0, 1, ..., $(t-1)$ только одно $t' = 1$ соответствует допустимому неприводимому представлению. Тогда

$$\sum_{\text{допустимые } m} |\chi^{(\boldsymbol{k})\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\})|^2 = \sum_{\text{допустимые } m} |l_m|^2 = l_k. \tag{48.4}$$

Такой же точно результат получается и методом проективных представлений. В последнем случае его можно трактовать как соотношение полноты для проективных представлений группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ соответствующих специальной допустимой системе факторов (43.6), полученной каноническим преобразованием в § 43. Напомним, что группа $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ содержит l_k смежных классов, а группа $\mathfrak{P}^\star(\boldsymbol{k})$ состоит из l_k элементов.

Для произвольной звезды, имеющей s лучей,

$$\chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\}) = s \cdot l_m, \tag{48.5}$$

так что

$$\left|\chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\})\right|^2 = s^2 l_m^2. \tag{48.6}$$

Но так как звезда содержит s векторов, то можно считать, что каждый вектор дает вклад в сумму (48.2), равный $\left(s \cdot l_m^2\right)$. Заменим суммирование по звездам в (48.2) суммой по всем векторам в зоне следующим образом:

$$\sum_{\star_k}\sum_{m}\left|\chi^{(\star k)\,(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\})\right|^2=\sum_{\star_k}\sum_{m}s\cdot(l_m)^2=\sum_{k}s\cdot l_k. \qquad (48.7)$$

Однако l_k совпадает с порядком группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$, а произведение $s\cdot l_k$ равно

$$s\cdot l_k=g_p, \qquad (48.8)$$

где g_p — порядок полной точечной группы кристалла $\mathfrak{P}$. Используя (48.8), можно вынести выражение в (48.7) из-под знака суммы. Тогда с учетом равенства

$$\sum_{k}=N, \qquad (48.9)$$

где N — число различных неэквивалентных волновых векторов в первой зоне Бриллюэна, равное числу трансляций в группе $\mathfrak{T}$, получаем доказательство соотношения (48.2). Следовательно, мы видим, что набор, входящий в (48.4), действительно представляет собой полный набор неэквивалентных неприводимых представлений. Таким образом, процедура, описанная в § 47, дает все представления $D^{(\star k)\,(m)}$ группы $\mathfrak{G}$.

§ 49. Доказательство соотношений ортогональности и нормировки для представлений $D^{(\star k)\,(m)}$

Докажем теперь соотношения ортогональности и нормировки. Они, разумеется, должны выполняться, поскольку, как мы знаем, представления неприводимы. Во-первых, нам следует перейти в (48.1) от суммирования по представителям смежных классов вида $\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}$, определенных соотношением (36.2), к суммированию по всем представителям смежных классов. Заметим, что если элемент $\left\{\varphi_{l_\lambda}\,\middle|\,\tau_{l_\lambda}\right\}$ входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то необходимым и достаточным условием того, что элемент

$$\left\{\varphi_{l_\lambda}\,\middle|\,\tau_{l_\lambda}\right\}^{-1}\cdot\left\{\varphi_p\,\middle|\,\tau_p\right\}\cdot\left\{\varphi_{l_\lambda}\,\middle|\,\tau_{l_\lambda}\right\} \qquad (49.1)$$

входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, является принадлежность элемента $\{\varphi_p|\tau_p\}$ группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Следовательно, расширение суммирования в (48.1) на всех представителей смежных классов дает всего лишь множитель $1/l_k$, где l_k — порядок группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}$. При этом мы учитываем, что вследствие единственности разложения $\mathfrak{G}$ на смежные классы по подгруппе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ любой представитель смежного класса может быть записан в виде

$$\left\{\varphi_q\,\middle|\,\tau_q\right\}=\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\tau_\sigma\right\}\cdot\left\{\varphi_{l_\lambda}\,\middle|\,\tau_{l_\lambda}\right\}. \qquad (49.2)$$

Таким образом, вместо (48.1) можно записать

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\})=\frac{1}{l_k}\sum_{q=1}^{g_p}\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_q|\boldsymbol{\tau}_q\}^{-1}\cdot\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}\cdot\{\varphi_q|\boldsymbol{\tau}_q\}\right), \tag{49.3}$$

где суммирование выполняется без ограничения по всем представителям смежных классов $\{\varphi_q|\boldsymbol{\tau}_q\}$ в группе $\mathfrak{G}$.

Рассмотрим типичный элемент группы $\mathfrak{G}$ в виде

$$\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\}. \tag{49.4}$$

Тогда соотношение ортогональности и нормировки, которое следует доказать, имеет вид

$$\sum_{\boldsymbol{R}_L}\sum_p\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\})\,\chi^{(\star k')(m')}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\})^*=$$
$$=g_pN\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\delta_{mm'}, \tag{49.5}$$

где сумма вычисляется по всем элементам группы $\mathfrak{G}$.

Характер с точкой для произвольного элемента (49.4) связан простым соотношением с характером с точкой для одного элемента — представителя смежного класса. Так,

$$\dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\})=(\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\,\dot{\chi}^{(k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}). \tag{49.6}$$

Поэтому характер этого элемента в полном представлении равен

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\})=$$
$$=\frac{1}{l_k}\sum_{q=1}^{g_p}\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_q|\boldsymbol{\tau}_q\}^{-1}\cdot\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\}\cdot\{\varphi_q|\boldsymbol{\tau}_q\}\right)=$$
$$=\frac{1}{l_k}\sum_q\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varepsilon|\varphi_q^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_L\}\cdot\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q|\boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\}\right). \tag{49.7}$$

В выражении (49.7) мы выделили трансляцию $\varphi_q^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_L$, поскольку она зависит от индекса узла в решетке L, и ввели обозначение

$$\boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\equiv\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\boldsymbol{\tau}_q+\varphi_q^{-1}\cdot\boldsymbol{\tau}_p-\varphi_q^{-1}\cdot\boldsymbol{\tau}_q. \tag{49.8}$$

Теперь следует подставить (49.7) в левую часть соотношения (49.5). Получаем для левой части

$$\sum_{\boldsymbol{R}_L}\sum_p\sum_q\sum_{q'}\left(\frac{1}{l_k}\right)^2\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varepsilon|\varphi_q^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_L\}\cdot\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q|\boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\}\right)\times$$
$$\times\dot{\chi}^{(k')(m)}\left(\{\varepsilon|\varphi_{q'}^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_L\}\cdot\{\varphi_{q'}^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_{q'}|\boldsymbol{t}_{\bar{q}'pq'}\}\right)^*. \tag{49.9}$$

Упростим последние два сомножителя (49.9), используя (49.6); тогда для их произведения получаем

$$\exp - i\left(\boldsymbol{k}_q - \boldsymbol{k}'_{q'}\right) \cdot \boldsymbol{R}_L \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\left\{\varphi_q^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_q \middle| \boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\right\}\right) \times \\ \times \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m)}\left(\left\{\varphi_{q'}^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_{q'} \middle| \boldsymbol{t}_{\bar{q}'pq'}\right\}\right), \quad (49.10)$$

где в соответствии с нашими обозначениями

$$\left(\boldsymbol{k}_q - \boldsymbol{k}_{q'}\right) \cdot \boldsymbol{R}_L = \boldsymbol{k} \cdot \left(\varphi_q^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L - \varphi_{q'}^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L\right). \quad (49.11)$$

Используя (49.10), можно выполнить суммирование по всем $\boldsymbol{R}_L$; тогда получим

$$\sum_L \exp - i\left(\boldsymbol{k}_q - \boldsymbol{k}'_{q'}\right) \cdot \boldsymbol{R}_L = N\delta\left(\boldsymbol{k}_q - \boldsymbol{k}'_{q'}\right), \quad (49.12)$$

где

$$\delta\left(\boldsymbol{k}_q - \boldsymbol{k}'_{q'}\right) = \begin{cases} 1, & \text{если } \varphi_q \cdot \boldsymbol{k} = \varphi_{q'} \cdot \boldsymbol{k}' + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (49.13)$$

Но *оба* вектора $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ являются каноническими векторами своих звезд, поэтому из (49.13) следует два условия:

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' \quad (49.14)$$

и

$$\varphi_q^{-1} \cdot \varphi_{q'} = \varphi_{l_\lambda}, \quad (49.15)$$

где φ_{l_λ} входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Два условия (49.14) и (49.15) позволяют выполнить остающиеся суммирования, так как теперь в произведении (49.10) оба характера с точкой относятся к одной и той же группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, так что можно связать аргументы этих двух характеров. Соответственно (49.9) принимает вид

$$\sum_p \sum_q \sum_\lambda \left(\frac{1}{l_k}\right)^2 \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\left\{\varphi_q^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_q \middle| \boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\right\}\right) \times \\ \times \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}^{-1} \cdot \varphi_q^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_q \cdot \varphi_{l_\lambda} \middle| \boldsymbol{t}_{\lambda\bar{q}pq\lambda}\right\}\right)^*, \quad (49.16)$$

где индекс суммирования q' обозначен как λ.

Однако, поскольку φ_{l_λ} представляет собой один из $l_\varkappa$ поворотов группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, для одного значения q существует только $l_\varkappa$ значений q', для которых выполняется (49.15). Поэтому в сумме по λ имеется только $l_\varkappa$ членов. Но согласно аргументам, приведенным для элемента $\left\{\varphi_{l_\lambda} \middle| \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\right\}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ в (49.1), имеем равенство

$$\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m')}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}^{-1} \cdot \varphi_q^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_q \cdot \varphi_{l_\lambda} \middle| \boldsymbol{t}_{\lambda\bar{q}pq\lambda}\right\}\right)^* = \\ = \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m')}\left(\left\{\varphi_q^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \varphi_q \middle| \boldsymbol{t}_{\bar{q}pq}\right\}\right)^*, \quad (49.17)$$

которое не зависит от λ. Следовательно, суммирование по λ просто сокращает один множитель l_k.

Теперь остается вычислить

$$\frac{N}{l_k}\sum_p\sum_q \dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q\,|\,t_{\bar{q}pq}\}\right)\dot{\chi}^{(k)(m')}\left(\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q\,|\,t_{\bar{q}pq}\}\right)^*. \tag{49.18}$$

В (49.18) суммирование по p и q выполняется по всем представителям смежных классов группы $\mathfrak{G}$, а неприводимое представление $\boldsymbol{k}$ фиксировано.

При фиксированном q в сумму по p каждый элемент группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}$ входит только один раз, так что имеем

$$\sum_p \dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q\,|\,t_{\bar{q}pq}\}\right)\dot{\chi}^{(k)(m')}\left(\{\varphi_q^{-1}\cdot\varphi_p\cdot\varphi_q\,|\,t_{\bar{q}pq}\}\right)^* = l_k\delta_{mm'}. \tag{49.19}$$

Остающаяся сумма дает число, равное порядку группы $\mathfrak{P}$:

$$\sum_q = g_p. \tag{49.20}$$

Комбинируя результаты (49.13), (49.20) и (49.12), получаем соотношение (49.5), которое и требовалось доказать.

§ 50. Построение представления $D^{(k)(m)}$ индуцированием из групп, заданных в подпространствах

В этом параграфе мы коротко изложим другой метод получения системы характеров $\chi^{(k)(m)}$ допустимых неприводимых представлений $D^{(k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Этот метод основан на общей теории построения индуцированных представлений группы по представлениям подгруппы. Теория построения полных неприводимых представлений $D^{(\star k)(m)}$ пространственной группы индуцированием из представлений $D^{(\star k)(m)}$, изложенная в § 36, 37, использует тот же общий метод. В частности, обсуждаемое ниже приложение общей теории групп к теории пространственных групп было впервые предложено Заком [40, 41].

Метод Зака основан на построении последовательности нормальных подгрупп пространственной группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, причем последней подгруппой является группа $\mathfrak{T}$. Эта последовательность обладает тем свойством, что порядок факторгруппы по отношению к нормальной подгруппе группы равен только 2 или 3. Другими словами, будем считать, что группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ имеет нормальную подгруппу $\mathfrak{N}_1(\boldsymbol{k})$, такую, что

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{N}_1(\boldsymbol{k}) + \ldots + x_{1n_1}\mathfrak{N}_1(\boldsymbol{k}), \quad n_1 \leqslant 3, \tag{50.1}$$

где $x_{1n_1} \equiv \{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_\lambda\}$ — некоторый представитель смежного класса группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Пусть $\mathfrak{N}_1(\boldsymbol{k})$ имеет нормальную подгруппу $\mathfrak{N}_2(\boldsymbol{k})$, такую, что

$$\mathfrak{N}_1(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{N}_2(\boldsymbol{k}) + \ldots + x_{2n_2}\mathfrak{N}_2(\boldsymbol{k}), \quad n_2 \leqslant 3. \tag{50.2}$$

Продолжим этот процесс до тех пор, пока не придем к группе $\mathfrak{T}$, т. е.

$$\mathfrak{N}_{i-1} = \mathfrak{T} + \ldots + x_{in_i}\mathfrak{T}. \quad n_i \leqslant 3. \tag{50.3}$$

Остановимся теперь на процессе построения индуцированных неприводимых представлений при переходе от нормальной подгруппы $\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k})$ к следующей группе $\mathfrak{N}_\alpha(\boldsymbol{k})$, где

$$\mathfrak{N}_\alpha(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}) + \ldots + x_{\beta n_\beta}\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}). \tag{50.4}$$

Обозначим символом ${}^\beta\chi^{(j)}$ систему характеров j-го неприводимого представления группы $\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k})$. Следовательно, каждому элементу N_β группы $\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k})$ приписывается характер ${}^\beta\chi^{(j)}(N_\beta)$. Система характеров ${}^\alpha\chi$ для представления ${}^\alpha D$, индуцированная из ${}^\beta\chi^{(j)}$, может быть получена способом, в точности сходным с (37.3). Поэтому система характеров дается формулой

$$^\alpha\chi\left(x_{\beta n_\beta}N_\beta\right) = \sum_{\beta'=1}^{n_\beta} {}^\beta\dot{\chi}^{(j)}\left(x^{-1}_{\beta' n_{\beta'}} \cdot x_{\beta n_\beta}N_\beta \cdot x_{\beta' n_{\beta'}}\right), \tag{50.5}$$

где

$$^\beta\dot{\chi}^{(j)}(y) = \begin{cases} 0, & \text{если } y \text{ не входит в } \mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}), \\ {}^\beta\chi^{(j)}(y), & \text{если } y \text{ входит в } \mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}). \end{cases} \tag{50.6}$$

Отметим, что $x_{\beta n_\beta}$ — представитель смежного класса в разложении по смежным классам (50.4). Следовательно, $x_{\beta n_\beta}$ является элементом группы $\mathfrak{N}_\alpha(\boldsymbol{k})$, но не группы $\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k})$, за исключением случая $n_\beta = 1$, когда $x_{\beta n_1} = E$ (т. е. тождественному элементу). Отметим также, что для элемента $x_{\beta n_\beta}N_\beta$, не входящего в $\mathfrak{N}_\beta$ (т. е. при $n_\beta \neq 1$), ${}^\alpha\chi = 0$, тогда как для элемента N_β правая часть равенства (50.5) представляет собой сумму членов, соответствующих сопряженным неприводимым представлениям группы $\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k})$.

Пусть для конкретности $n_\beta = 2$, тогда из (50.5) имеем

$$^\alpha\chi(N_\beta) = {}^\beta\chi^{(j)}(N_\beta) + {}^\beta\chi^{(j)}(x^{-1}N_\beta x). \tag{50.7}$$

Если ${}^\beta D^{(j)}$ — неприводимое представление группы $\mathfrak{N}_\beta$, характер которого для элемента N_β равен ${}^\beta\chi^{(j)}(N_\beta)$, то сопряженное неприводимое представление ${}^\beta\bar{D}^{(j)}$ определяется равенством

$$^\beta\bar{D}^{(j)}(N_\beta) \equiv {}^\beta D^{(j)}(x^{-1}N_\beta x). \tag{50.8}$$

Следовательно,

$$^\beta\bar{\chi}^{(j)}(N_\beta) \equiv {}^\beta\chi^{(j)}(x^{-1}N_\beta x). \tag{50.9}$$

В (50.7)—(50.9) представители смежных классов обозначены, опуская индексы, через x. Для произвольного элемента xN_β, не входящего в $\mathfrak{N}_\beta$, имеем

$$^{\alpha}\chi(xN_\beta)=0. \tag{50.10}$$

В рассматриваемом случае следует тщательно исследовать, является ли индуцированное представление $^{\alpha}D$ неприводимым [в отличие от этого индуцированное представление $D^{(\star k)(m)}$ из (37.3) неприводимо, как было показано в § 30—37]. Здесь следует различать два случая (рассматриваем по-прежнему $n_\beta=2$):

$$\text{а) } {}^{\beta}D^{(j)} \text{ не эквивалентно } {}^{\beta}\overline{D}^{(j)}, \tag{50.11}$$

$$\text{б) } {}^{\beta}D^{(j)} \text{ эквивалентно } {}^{\beta}\overline{D}^{(j)}. \tag{50.12}$$

В случае «а» [см. (50.11)] представление $^{\alpha}D$ неприводимо вследствие неэквивалентности ограниченных представлений $^{\alpha}D$ группы $\mathfrak{N}_\alpha$ на подгруппе $\mathfrak{N}_\beta$. Доказательство аналогично приведенному в предыдущих параграфах. В случае «б», когда $^{\beta}D^{(j)}$ эквивалентно представлению $^{\beta}\overline{D}^{(j)}$, легко показать, что индуцированное представление $^{\alpha}D$ является приводимым представлением группы $\mathfrak{N}_\alpha$. Запишем подробно систему характеров для этого представления:

$$^{\alpha}\chi(N_\beta)=2\,{}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta), \quad \text{если } N_\beta \text{ входит в } \mathfrak{N}_\beta, \tag{50.13}$$

$$^{\alpha}\chi(x)=0, \quad \text{если } x \text{ не входит в } \mathfrak{N}_\beta. \tag{50.14}$$

Образуем следующую сумму по всем элементам N_α группы $\mathfrak{N}_\alpha$:

$$\sum_{\mathfrak{N}_\alpha}|{}^{\alpha}\chi(N_\alpha)|^2=\sum_{\mathfrak{N}_\beta}|{}^{\beta}\chi(N_\beta)|^2=4\sum_{\mathfrak{N}_\beta}|{}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta)|^2=4g_\beta, \tag{50.15}$$

где g_β — порядок группы $\mathfrak{N}_\beta$; при выводе использованы (50.13) и (50.14). Но порядок группы $\mathfrak{N}_\alpha$ равен $g_\alpha=2g_\beta$. Поэтому, если мы обозначим неприводимое представление группы $\mathfrak{N}_\alpha$ через $^{\alpha}D^{(i)}$, а соответствующую систему характеров через $^{\alpha}\chi^{(i)}$, то для этой системы имеем

$$\sum_{\mathfrak{N}_\alpha}|{}^{\alpha}\chi^{(i)}(N_\alpha)|^2=g_\alpha=2g_\beta. \tag{50.16}$$

Сравнивая соотношение (50.16) с (50.15), непосредственно видим, что представление $^{\alpha}D$ группы $\mathfrak{N}_\alpha$ приводимо. Представление $^{\alpha}D$ можно представить в виде суммы неприводимых составляющих

$$^{\alpha}\chi(N_\alpha)=\sum_{i}(i\,|\,{}^{\alpha}\chi^{(i)}(N_\alpha). \tag{50.17}$$

где $(j|$ — числа, большие или равные нулю. Подставляя (50.17) в (50.15), получаем

$$\sum_{\mathfrak{N}_\alpha}\sum_{j}\sum_{j'}(j|(j'|^{*}\,{}^{\alpha}\chi^{(j)}(N_\alpha)\,{}^{\alpha}\chi^{(j')}(N_\alpha)^{*}=\sum_{j}|(j|\,|^{2}g_\alpha=4g_\beta=2g_\alpha, \tag{50.18}$$

$$\sum_{j}|(j|\,|^{2}=2. \tag{50.19}$$

В таком случае для двух различных неприводимых представлений существует единственное решение при $(j|=1$. Иначе,

$$(j|=(\bar{j}|=1, \tag{50.20}$$

а

$$^{\alpha}\chi={}^{\alpha}\chi^{(j)}+{}^{\alpha}\chi^{(j)}. \tag{50.21}$$

Очевидно, что представление $^{\alpha}D$ имеет размерность $2l_j$, где l_j — размерность представления $^{\beta}D^{(j)}$. Но теорема взаимности Фробениуса показывает, что для представлений подгруппы $\mathfrak{P}_\beta$ характеры ограниченных представлений можно определить следующим образом:

$$^{\alpha}\chi^{(j)}(N_\beta)={}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta), \tag{50.22}$$

$$^{\alpha}\chi^{(\bar{j})}(N_\beta)={}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta). \tag{50.23}$$

Таким образом,

$$\dim{}^{\alpha}\chi^{(j)}=\dim{}^{\alpha}\chi^{(\bar{j})}=l_j. \tag{50.24}$$

Наконец, из (50.7), (50.22) и (50.23) получим

$$^{\alpha}\chi^{(j)}(xN_\beta)=-{}^{\alpha}\chi^{(\bar{j})}(xN_\beta). \tag{50.25}$$

Дать в общем виде точное и явное выражение для характеров $^{\alpha}\chi^{(j)}(xN_\beta)$ элементов xN_β для j-го неприводимого представления группы $\mathfrak{N}_\alpha$, по-видимому, невозможно. Такое выражение можно получить в частном случае, когда x коммутирует со всеми элементами группы $\mathfrak{N}_\alpha$ (и, следовательно, $\mathfrak{N}_\beta$), т. е. когда

$$xN_\beta=N_\beta x. \tag{50.26}$$

Разумеется, в этом случае группа $\mathfrak{N}_\alpha$ является прямым произведением группы $\mathfrak{N}_\beta$ и факторгруппы $\mathfrak{N}_\alpha/\mathfrak{N}_\beta$. Далее, если для системы матриц $^{\alpha}D^{(j)}$ неприводимого представления оказывается, что $^{\alpha}D^{(j)}(x)$ принадлежит ядру представления, то

$$^{\alpha}D^{(j)}(x)\,{}^{\beta}D^{(j)}(N_\beta)={}^{\beta}D^{(j)}(N_\beta)\,{}^{\alpha}D^{(j)}(x). \tag{50.27}$$

Но представление $^{\beta}D^{(j)}$ группы $\mathfrak{N}_\beta$ неприводимо, поэтому, по лемме Шура, имеем

$$^{\alpha}D^{(j)}(x)=\text{const}\,{}^{\beta}D^{(j)}(E). \tag{50.28}$$

Чтобы определить эту константу, рассмотрим величину

$$^{\alpha}D^{(l)}(x)^2 = {}^{\alpha}D^{(l)}(x^2) = (\text{const})^{2\,\beta}D^{(l)}(E). \tag{50.29}$$

Так как x^2 является элементом группы $\mathfrak{N}_\beta$, то

$$^{\alpha}D^{(l)}(x^2) = {}^{\beta}D^{(l)}(x^2). \tag{50.30}$$

Вычислим след матриц (50.29) и (50.30); тогда получим

$$^{\beta}\chi^{(l)}(x^2) = (\text{const})^2 \cdot l_l, \tag{50.31}$$

или

$$\text{const} = [^{\beta}\chi^{(l)}(x^2)/l_l]^{1/2}. \tag{50.32}$$

Следовательно,

$$^{\alpha}\chi^{(l)}(x) = [^{\beta}\chi^{(l)}(x^2)/l_l]^{1/2} \cdot l_l. \tag{50.33}$$

Вообще, для произвольного элемента группы $x\mathfrak{N}_\beta$ в этом случае имеем

$$^{\alpha}\chi^{(l)}(xN_\beta) = \pm\,[^{\beta}\chi^{(l)}(x^2)/l_l]^{1/2}\,{}^{\beta}\chi^{(l)}(N_\beta). \tag{50.34}$$

Обозначения в (50.34) имеют обычный смысл.

Аналогичным образом можно проанализировать случай $N_\beta = 3$. При этом разложение на смежные классы (50.4) имеет вид

$$\mathfrak{N}_\alpha(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}) + x\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}) + x^{-1}\mathfrak{N}_\beta(\boldsymbol{k}). \tag{50.35}$$

Система характеров индуцированного представления снова определяется соотношением (50.5). Подобно (50.11), (50.12), следует различать два случая:

$$\text{а) } {}^{\beta}D^{(l)} \text{ не эквивалентно } {}^{\beta}\bar{D}^{(l)},\ {}^{\beta}\bar{\bar{D}}^{(l)}, \tag{50.36}$$

$$\text{б) } {}^{\beta}D^{(l)} \text{ эквивалентно } {}^{\beta}\bar{D}^{(l)},\ {}^{\beta}\bar{\bar{D}}^{(l)}. \tag{50.37}$$

Заметим, что сопряженные с ${}^{\beta}D^{(l)}$ представления при этом равны [см. (50.8)]

$$^{\beta}\bar{D}^{(l)}(N_\beta) \equiv {}^{\beta}D^{(l)}(x^{-1}N_\beta x), \tag{50.38}$$

$$^{\beta}\bar{\bar{D}}^{(l)}(N_\beta) \equiv {}^{\beta}D^{(l)}(xN_\beta x^{-1}). \tag{50.39}$$

В случае «а» система характеров индуцированных представлений

$$^{\alpha}\chi^{(l)}(N_\beta) = {}^{\beta}\chi^{(l)}(N_\beta) + {}^{\beta}\bar{\chi}^{(l)}(N_\beta) + {}^{\beta}\bar{\bar{\chi}}^{(l)}(N_\beta), \tag{50.40}$$

$$^{\alpha}\chi^{(l)}(xN_\beta) = 0$$

является неприводимой, т. е. соответствует неприводимому представлению ${}^{\alpha}D^{(l)}$ группы $\mathfrak{N}_\alpha$. В случае «б» индуцированное представление разлагается в сумму трех неприводимых представлений одинаковой размерности l_j, равной размерности характера ${}^{\beta}\chi^{(j)}$. Система характеров для неприводимого представления может быть получена затем с помощью тех же рассуждений, которые привели к соотношению (50.34): матрицы ${}^{\alpha}D^{j}(x)$ и ${}^{\alpha}D^{j}(x^{-1})$ входят в центр группы матриц ${}^{\alpha}D^{(j)}$, поэтому, согласно лемме Шура, эти матрицы равны константам. Так как элемент x^3 входит в группу $\mathfrak{N}_\beta$, то его характер ${}^{\beta}\chi^{(j)}(x^3)$ известен из приведения группы $\mathfrak{N}_\beta$. Следуя выводу, аналогичному выводу соотношений (50.27)—(50.34), получаем полную систему характеров для неприводимых составляющих в виде

$$ {}^{\alpha}\chi^{(j)}(N_\beta) = {}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta), \tag{50.41} $$

$$ {}^{\alpha}\chi^{(j)}(xN_\beta) = \exp(2\pi i p/3)\left[{}^{\beta}\chi^{(j)}(x^3)/l_j\right]^{1/3}\,{}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta), \qquad p = 1,\ 2,\ 3. \tag{50.42} $$

$$ {}^{\alpha}\chi^{(j)}(x^{-1}N_\beta) = \exp(2\pi i p/3)\left[{}^{\beta}\chi^{(j)}(x^{-3})/l_j\right]^{1/3}\,{}^{\beta}\chi^{(j)}(N_\beta) \qquad p = 1,\ 2,\ 3. \tag{50.43} $$

Ясно, что метод Зака для индуцирования с помощью подгрупп индекса 2 или 3 существенным образом использует принадлежность матриц представителей смежных классов (x и x^2) центру матричного представления. Поэтому эти матрицы равны константам, величины которых определяются соотношениями типа (50.27)—(50.34). По этой причине данный метод применим только к определенным несимморфным группам. Можно заметить, что метод Зака существенно использует свойство разрешимости пространственных групп $\mathfrak{G}$ [т. е. то, что индексы в последовательности нормальных подгрупп (50.1)—(50.3) являются простыми числами, последнее из которых равно единице]. Это же свойство было отмечено Зейтцем в его первой работе по приведению пространственных групп [30].

Ясно, что процесс индуцирования с помощью подгрупп может быть продолжен до тех пор, пока мы не получим набор допустимых неприводимых характеров $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Далее, полная система характеров $\chi^{({}^{\star}\boldsymbol{k})(m)}$ получается, согласно (37.3), индуцированием на группу $\mathfrak{G}$ из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Ясно также, что системы характеров $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$, получаемые либо по Заку, либо методом малой подгруппы, либо методом проективных представлений, должны быть тождественными. Можно произвести прямое сравнение метода Зака с другими методами, если использовать структуру кристаллографических точечных групп, в частности их ряды разложения, так как все эти группы разрешимы. Такое сравнение весьма трудоемко, поэтому мы его не приводим.

Подводя итог, мы можем отметить, что были даны три метода определения допустимых неприводимых представлений

$D^{(k)(m)}$. Следует ли использовать метод проективных представлений, метод малой группы или метод индуцирования Зака, если он применим, — это диктуется только соображениями удобства. Теперь можно считать, что эта часть задачи решена, полагая, что выполнено построение всех представлений $D^{(*k)(m)}$.

§ 51. Соотношения совместности для $D^{(*k)(m)}$ и процедура ограничения представлений

Иногда нужно знать соотношение между неприводимыми представлениями $D^{(*k)(m)}$ и неприводимыми представлениями $D^{(*k')(m')}$ для звезды с близким значением волнового вектора [28]. Иначе говоря, пусть канонические векторы $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ звезд $^*\boldsymbol{k}$ и $^*\boldsymbol{k}'$ расположены в зоне рядом, т. е.

$$\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \varkappa, \tag{51.1}$$

где $\varkappa$ — малый вектор. Так как свойства индуцированных представлений полностью определяются свойствами малых представлений, достаточно рассмотреть допустимые представления $D^{(k)(m)}$ и $D^{(k')(m')}$.

Свойства допустимых представлений $D^{(k)(m)}$ и $D^{(k')(m')}$ полностью обусловлены соответствующими им группами $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$. Обратимся к ситуации, когда рассматривается переход от точки $\boldsymbol{k}$ высокой симметрии к близкой точке $\boldsymbol{k}'$, такой, что

а) группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ изоморфна группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ (51.2)

или

б) группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ является подгруппой группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. (51.3)

В случае «а», когда группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ изоморфна $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$, возникает одинаковый набор допустимых неприводимых представлений $D^{(k)(m)}$ и $D^{(k')(m')}$. Так как эти две группы изоморфны, можно установить взаимно однозначное соответствие набора $D^{(k)(m)}$ с набором $D^{(k')(m')}$. Предположим далее, что при $\varkappa \to 0$

$$D^{(k')(m')} \to D^{(k)(m)}, \tag{51.4}$$

поэтому можно идентифицировать индексы m и m'. Предположение о том, что в случае «а» $D^{(k')(m')}$ плавно переходит в $D^{(k)(m)}$ при $\varkappa \to 0$, по-видимому, не требует дальнейшего обсуждения.

В случае «б», когда группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ является подгруппой $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, ясно, что при переходе к $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ некоторые элементы группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ оказываются «утерянными». Это может иметь место, если $\boldsymbol{k}$ — точка высокой симметрии, тогда как $\boldsymbol{k}'$ находится на соседней линии или же представляет собой точку с более низкой симметрией вблизи точки $\boldsymbol{k}$. Назовем представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, рассматриваемое для элементов подгруппы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$, ограничением представления на подгруппу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$, т. е. [11, 12]

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \downarrow \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'). \tag{51.5}$$

Рассматриваемое как представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$, $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ должно быть в общем случае разложимо на неприводимые представления:

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \downarrow = \sum_{m'} (\boldsymbol{k}m \downarrow m')\, D^{(\boldsymbol{k}')(m')}. \tag{51.6}$$

В (51.6) коэффициенты приведения $(\boldsymbol{k}m \downarrow m')$ являются положительными числами.

Исследование совместности связано с изучением соотношений между допустимыми представлениями $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ в соседних точках, таких, как $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$. Совместные представления связаны соотношением (51.6), если $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ является подгруппой группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и если коэффициент для совместной пары отличен от нуля.

Мы вернемся к рассмотрению вопроса о совместности в т. 2, гл. 3, где мы проанализируем конкретные случаи.

ГЛАВА 6

Коэффициенты приведения для пространственных групп. Метод полной группы

§ 52. Введение

В гл. 6 рассматривается математическая задача нахождения коэффициентов приведения для пространственных групп так называемым методом полной группы [42, 44]. В следующей, гл. 7 излагается метод подгруппы [34, 45—47].

В гл. 6 и 7 анализируется математическая задача определения представлений, содержащихся в приводимом представлении и имеющих вид прямого произведения двух неприводимых представлений. Следовательно, математическая задача в точности совпадает с задачей, рассмотренной в общем виде для конечных групп в § 17. Название «метод полной группы» просто отражает то обстоятельство, что на всех стадиях рассматриваются неприводимые представления $D^{(\star k)(m)}$ полной группы $\mathfrak{G}$ и, соответственно, все вычисления выполнены с использованием в принципе всех элементов симметрии группы $\mathfrak{G}$.

До сих пор метод полной группы успешно применялся для получения полного набора коэффициентов для ряда различных симморфных и несимморфных групп. Следует отметить, что он использовался также для анализа значительно более сложных случаев, чем те, к которым применялся метод подгруппы. Чтобы понимать в равной степени и теорию конечных групп, и общую теорию пространственных групп в целом, необходимо полностью разобраться в методе полной группы, и только тогда применять в специальных случаях метод подгруппы, соблюдая во избежание ошибок известную осторожность. В § 53—60 обсуждается структура представлений прямого произведения, полученных вычислением обычного и симметризованного прямого произведения неприводимых представлений $D^{(\star k)(m)}$ пространственной группы. Затем излагается основной принцип построения правил отбора для волновых векторов и звезд. Используя эти правила, можно определить все коэффициенты приведения и тем самым осуществить приведение.

§ 53. Прямое произведение представлений $D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k')(m')}$

Согласно рассмотрению в § 29 и 32, пространство $\Sigma^{(\star k)(m)}$, являющееся базисом для представления $D^{(\star k)(m)}$ имеет размерность $(s \cdot l_m)$. Оно образовано блоховскими векторами:

$$\left\{\psi_1^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_s)(m)}\right\} = \Sigma^{(\star k)(m)}. \qquad (53.1)$$

Пространство $\Sigma^{(\star k)(m)}$ задает представление $D^{(\star k)(m)}$:

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} \Sigma^{(\star k)(m)} = D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}) \Sigma^{(\star k)(m)}. \qquad (53.2)$$

Пространство $\Sigma^{(\star k')(m')}$, являющееся базисом для $D^{(\star k')(m')}$, имеет размерность $(s' \cdot l_{m'})$. Оно образовано блоховскими векторами $\psi_{\alpha'}^{(k'_\sigma)(m')}$. Аналогичным образом пространство

$$\left\{\psi_1^{(k')(m')}, \ldots, \psi_l^{(k'_s)(m')}\right\} = \Sigma^{(\star k')(m')} \qquad (53.3)$$

задает представление $D^{(\star k')(m')}$:

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} \Sigma^{(\star k')(m')} = D^{(\star k')(m')}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}) \Sigma^{(\star k')(m')}. \qquad (53.4)$$

Набор из $(s \cdot l_m)(s' \cdot l_{m'})$ функций, каждая из которых является произведением одной из функций $\psi_\alpha^{(k)(m)}$ на одну из функций $\psi_{\alpha'}^{(k')(m')}$, имеет вид

$$\left\{\psi_1^{(k)(m)}\psi_1^{(k')(m')}, \ldots, \psi_1^{(k)(m)}\psi_{l_m}^{(k')(m')}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_s)(m_s)}\psi_{l_m}^{(k'_s)(m'_s)}\right\} \equiv$$
$$\equiv \Sigma^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')} \qquad (53.5)$$

и представляет собой пространство прямого произведения. Оно задает представление прямого произведения

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} \Sigma^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')} =$$
$$= D^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}) \Sigma^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')}. \qquad (53.6)$$

Как и в (17.3), систему характеров представления прямого произведения $D^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')}$ легко получить в виде обычного арифметического произведения характеров сомножителей:

$$\chi^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')} = \chi^{(\star k)(m)} \cdot \chi^{(\star k')(m')} \qquad (53.7)$$

или подставляя в (53.7) в качестве аргумента конкретный элемент пространственной группы:

$$\chi^{(\star k \otimes \star k')(m \otimes m')}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}) = \chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}) \chi^{(\star k')(m')}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}). \qquad (53.8)$$

Подставляя в (53.8) выражение (37.3) или (49.3), можно записать равенство (53.8) через различные произведения характеров с точкой, относящихся к группам $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$. Получающиеся при этом формулы имели бы вид значительно более сложный, чем (53.8), так как включали бы двойную сумму по представителям смежных классов и результирующую сумму произведений характеров с точкой. Однако для поставленной здесь цели это не требуется; мы только отметим, что (53.8) содержит произведение отдельных характеров, для которых имеются выражения (37.3) и (49.3). Вывод этих выражений целиком содержит полную теорию представлений пространственных групп, включая теорию индуцированных представлений. Эти характеры с точкой будут использованы в § 62.

Из матриц представления прямого произведения $D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \otimes D^{(^\star\boldsymbol{k}')\,(m')}$ особенно простую диагональную форму имеют те, которые соответствуют элементам группы $\mathfrak{T}$. Это следует из соотношения (33.10), если его применить к отдельным матрицам, представляющим элементы пруппы $\mathfrak{T}$ в каждом из сомножителей. Таким образом, эта матрица имеет вид

$$D^{(^\star\boldsymbol{k}\otimes\,^\star\boldsymbol{k}')\,(m\,\otimes\,m')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\}) =$$
$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Pi}_{mm'} \exp i\left(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_1'\right)\boldsymbol{R}_L & \ldots\ 0 & \ldots\ 0 \\ 0\ \ldots & \boldsymbol{\Pi}_{mm'} \exp i\left(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_{s'}'\right)\boldsymbol{R}_L & 0 \\ 0\ \ldots & \ldots & \boldsymbol{\Pi}_{mm'} \exp i\left(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_{s'}'\right)\boldsymbol{R}_L \end{bmatrix}, \tag{53.9}$$

где $\boldsymbol{\Pi}_{mm'}$ — единичная матрица размером $(l_m l_{m'} \times l_m l_{m'})$. Величины $\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}_\sigma'$, возникающие в диагональных элементах матрицы (53.9), очевидно, включают в себя все возможные члены, содержащие по одному волновому вектору из каждой звезды $^\star\boldsymbol{k}$ и $^\star\boldsymbol{k}'$.

Для произвольного элемента пространственной группы матрица прямого произведения не имеет столь простого вида, как (53.9), однако в случае необходимости она может быть получена из (33.11). В принципе соотношение (58.3) описывает характеры настолько полно, насколько это может потребоваться для выполнения приведения произведений.

§ 54. Симметризованные степени представлений $\left[D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)}\right]_{(p)}$

а. Обычные степени представлений. Степени представления $D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)}$ можно определить точно таким же способом, какой использовался в § 53 при рассмотрении прямого произведения [19, 20]. Мы рассмотрим некоторые из этих степеней подробно, так как они нам понадобятся в последующем рассмотрении. Этот вопрос будет обсуждаться еще раз в § 117.

Рассмотрим сначала квадрат представления $D^{(^\star k)(m)}$. Согласно (53.1), неприводимое пространство $\Sigma^{(^\star k)(m)}$ образовано $(s \cdot l_m)$ блоховскими функциями $\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)}$, где $\sigma = 1, \ldots, s$, $\alpha = 1, \ldots, l_m$. Рассмотрим второе линейно независимое векторное пространство $\Sigma'^{(^\star k)(m)}$, образованное $(s \cdot l_m)$ блоховскими функциями $\psi_\alpha'^{(k_\sigma)(m)}$:

$$\Sigma'^{(^\star k)(m)} = \left\{\psi_1'^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}'^{(k_s)(m)}\right\}, \tag{54.1}$$

также являющееся базисом для того же неприводимого представления $D^{(^\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$. Необходимо подчеркнуть, что $(s \cdot l_m)$ функций $\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)}$, а также $(s \cdot l_m)$ функций $\psi_\alpha'^{(k_\sigma)(m)}$ линейно независимы, хотя оба набора образуют пространства (53.1) и (54.1), задающие одно и то же представление $D^{(^\star k)(m)}$. Рассмотрим теперь $(s \cdot l_m)^2$ функций, полученных при составлении всех возможных произведений одной из функций пространства $\Sigma^{(^\star k)(m)}$ на одну из функций пространства $\Sigma'^{(^\star k)(m)}$:

$$\psi_1^{(k)(m)}\psi_1'^{(k)m}, \ldots, \psi_1^{(k)(m)}\psi_{l_m}'^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_s)(m)}\psi_{l_m}'^{(k_s)(m)}. \tag{54.2}$$

Очевидно, что этот случай ничем не отличается от случая любого другого прямого произведения двух представлений. Так как, однако, представление, по которому преобразуется пространство произведений (54.2), представляет собой произведение $D^{(^\star k)(m)}$ само на себя, то это представление называется квадратом представления $D^{(^\star k)(m)}$. Оно имеет размерность $(s \cdot l_m)^2$ и обозначается

$$D^{(^\star k)(m)} \otimes D^{(^\star k)(m)} = \left[D^{(^\star k)(m)}\right]_2. \tag{54.3}$$

Отметим, что в (54.3) индекс, указывающий степень, записан не в скобках, так как это обычный, а не симметризованный квадрат представления.

Очевидно, эту процедуру можно продолжить. Можно составить $(s \cdot l_m)^3$ функций, выбирая каждый из трех сомножителей среди $(s \cdot l_m)$ элементов в одном из трех линейно независимых векторных пространств, $\Sigma^{(^\star k)(m)}$, $\Sigma'^{(^\star k)(m)}$, $\Sigma''^{(^\star k)(m)}$, образованных соответственно функциями

$$\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)} \quad \sigma = 1, \ldots, s; \quad \alpha = 1, \ldots, l_m; \tag{54.4}$$

$$\psi_\alpha'^{(k_\sigma)(m)} \quad \sigma = 1, \ldots, s; \quad \alpha = 1, \ldots, l_m; \tag{54.5}$$

$$\psi_\alpha''^{(k_\sigma)(m)} \quad \sigma = 1, \ldots, s; \quad \alpha = 1, \ldots, l_m. \tag{54.6}$$

Каждое из этих пространств в отдельности образует базис для одного и того же неприводимого представления $D^{(\star k)(m)}$. Тогда набор из $(s\cdot l_m)^3$ функций

$$\left\{\psi_1^{(k)(m)}\psi_1'^{(k)(m)}\psi_1''^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_s)(m)}\psi_{l_m}'^{(k_s)(m)}\psi_{l_m}''^{(k_s)(m)}\right\} \quad (54.7)$$

представляет собой базис для обычного куба представления $D^{(\star k)(m)}$, обозначаемого

$$D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k)(m)} = \left[D^{(\star k)(m)}\right]_3. \quad (54.8)$$

Символом

$$\left[D^{(\star k)(m)}\right]_p \quad (54.9)$$

обозначается p-я степень представления $D^{(\star k)(m)}$. Ясно также, что система характеров p-й степени представления легко выражается через систему характеров представления $D^{(\star k)(m)}$. Из (54.9) для произвольного элемента группы $\mathfrak{G}$ имеем

$$\mathrm{Sp}\left[D^{(\star k)(m)}\right]_p = \left[\chi^{(\star k)(m)}\right]_p = \left(\chi^{(\star k)(m)}\right)^p. \quad (54.10)$$

б. Симметризованные степени представлений. Обратимся теперь к представлению, в принципе отличающемуся от рассмотренных выше обычных степеней представлений, а именно к симметризованной степени представления $D^{(\star k)(m)}$. Рассмотрим снова пространство $\Sigma^{(\star k)(m)}$ из (53.1). Рассмотрим далее набор независимых произведений функций, составленных из всех возможных пар базисных функций этого же набора (53.1). Иначе говоря, образуем пространство вида

$$\begin{aligned}\{&\psi_1^{(k)(m)}\psi_1^{(k)(m)}, \psi_1^{(k)(m)}\psi_2^{(k)(m)}, \ldots, \psi_1^{(k)(m)}\psi_{l_m}^{(k)(m)}, \ldots \\ &\ldots, \psi_2^{(k)(m)}\psi_2^{(k)(m)}, \ldots, \psi_2^{(k)(m)}\psi_{l_m}^{(k)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_s)(m)}\psi_{l_m}^{(k_s)(m)}\} = \\ &= \left[\Sigma^{(\star k \otimes \star k)(m\otimes m)}\right]_{(2)}.\end{aligned} \quad (54.11)$$

Произвольная функция этого пространства имеет вид

$$\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)}\psi_\beta^{(k_\tau)(m)}, \quad \beta \geqslant \alpha, \quad \tau \geqslant \sigma. \quad (54.12)$$

Ограничения $\beta \geqslant \alpha$ и $\tau \geqslant \sigma$ исключают возможность двухкратного учета одного и того же произведения. В пространстве (54.11) имеется $\frac{1}{2}(s\cdot l_m)(s\cdot l_m + 1)$ независимых функций. Пространство (54.12) можно назвать пространством, образованным симметризованным произведением пространства $\Sigma^{(\star k)(m)}$ само на себя. Представление группы $\mathfrak{G}$, заданное этим пространством, получаем в виде

$$P_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}\left[\Sigma^{({}^\star k \otimes {}^\star k)\,(m \otimes m')}\right]_{(2)} =$$
$$= \left[D^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})\right]_{(2)} \left[\Sigma^{({}^\star k \otimes {}^\star k)\,(m \otimes m)}\right]_{(2)}. \tag{54.13}$$

Представление

$$\left[D^{({}^\star k)\,(m)}\right]_{(2)} \tag{54.14}$$

называется симметризованным квадратом представления $D^{({}^\star k)\,(m)}$; обратим внимание на общепринятое обозначение с индексом в скобках, используемое для этой величины, и его отличие от (54.3). Характеры для этого представления можно выразить через исходный набор характеров $\chi^{({}^\star k)\,(m)}$ по правилу

$$\mathrm{Sp}\left[D^{({}^\star k)\,(m)}\right]_{(2)} \equiv \left[\chi^{({}^\star k)\,(m)}\right], \tag{54.15}$$

$$\left[\chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})\right]_{(2)} = \frac{1}{2}\left\{\left(\chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\}^2)\right\}. \tag{54.16}$$

В (54.16) элемент, входящий в аргумент второго слагаемого, представляет собой просто квадрат элемента $\{\varphi \mid t\varphi\}$.

Аналогичным способом можно получить[1]) симметризованную третью степень представления $D^{({}^\star k)\,(m)}$, заданного в векторном пространстве $\Sigma^{({}^\star k)\,(m)}$. Можно образовать симметризованную третью степень векторного пространства

$$\left[\Sigma^{({}^\star k \otimes {}^\star k \otimes {}^\star k)\,(m \otimes m \otimes m)}\right]_{(3)}, \tag{54.17}$$

составленного из всех независимых произведений трех множителей, каждый из которых представляет собой блоховский вектор из одного и того же пространства $\Sigma^{({}^\star k)\,(m)}$. Функции, входящие в векторное пространство (54.17), имеют вид

$$\psi_\alpha^{(k_\rho)\,(m)} \cdot \psi_\beta^{(k_\sigma)\,(m)} \psi_\sigma^{(k_\tau)\,(m)}, \tag{54.18}$$
$$\rho,\ \sigma,\ \tau = 1, \ldots, s, \quad \alpha \leqslant \beta \leqslant \gamma, \quad \rho \leqslant \sigma \leqslant \tau.$$

Имеется $\frac{1}{6}(s \cdot l_m)(s \cdot l_m + 1)(s \cdot l_m + 2)$ функций вида (54.18). Векторное пространство (54.17) из блоховских векторов (54.18) является базисом представления

$$\left[D^{({}^\star k)\,(m)}\right]_{(3)}, \tag{54.19}$$

[1]) См. ниже в § 117.

которое называется симметризованной третьей степенью представления. И в этом случае можно показать, что

$$\mathrm{Sp}\left[D^{(^\star k)\,(m)}\right]_{(3)} = \left[\chi^{(^\star k)\,(m)}\right]_{(3)}, \tag{54.20}$$

где

$$\left[\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\right]_{(3)} = \frac{1}{6}\left\{\left(\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\right)^3 + \right.$$
$$\left. + 3\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\cdot\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}^2 + 2\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}^3)\right\}. \tag{54.21}$$

Можно также получить формулы для более высоких симметризованных степеней представлений, подобные выражениям (54.16) и (54.21).

В § 117 приведен вывод для характеров симметризованных степеней представления, специально приспособленный к задаче о колебаниях решетки. Антисимметризованные степени представлений, рассматриваемые в стандартных учебниках, в нашем рассмотрении не потребуются [2, 48, 49].

§ 55. Определение коэффициентов приведения

Согласно теореме Машке [50], любое представление конечной группы, заданное над полем комплексных чисел, либо неприводимо, либо разлагается в прямую сумму неприводимых представлений. Это утверждение можно применить к представлениям произведений, рассмотренным в § 53 и 54. Нам требуется разложить представление $D^{(^\star k\,\otimes\,^\star k')\,(m\,\otimes\,m')}$ прямого произведения на неприводимые составляющие. Определим коэффициенты полного приведения $(^\star\boldsymbol{k}m^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'')$ из основного уравнения, аналогичного (17.4):

$$D^{(^\star k\,\otimes\,^\star k')\,(m\,\otimes\,m')} = \sum_{k''}\sum_{m''} \oplus (^\star\boldsymbol{k}m^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'')\,D^{(^\star k'')\,(m'')}. \tag{55.1}$$

Суммирование в (55.1) ведется по всем звездам $^\star\boldsymbol{k}''$ и по всем допустимым неприводимым представлениям m'', которые могут возникнуть для данного $\boldsymbol{k}''$. Коэффициенты

$$(^\star\boldsymbol{k}m^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'') \tag{55.2}$$

являются целыми числами, которые обозначают, какие неприводимые представления $D^{(^\star k'')\,(m'')}$ и сколько раз встречаются в разложении.

Можно дать другое определение коэффициентов приведения, используя аналогично (17.7) систему характеров $\chi^{(^\star k)\,(m)}$. Тогда (55.1) запишется в виде

$$\chi^{(^\star k\,\otimes\,^\star k')\,(m\,\otimes\,m')} = \sum_{^\star k''}\sum_{m''} (^\star\boldsymbol{k}m^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'')\,\chi^{(^\star k'')\,(m'')} \tag{55.3}$$

или, применяя правило получения характера прямого произведения,

$$\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})\,(m)}\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}')\,(m')}=\sum_{^{\star}\boldsymbol{k}''}\sum_{m''}(^{\star}\boldsymbol{k}m^{\star}\boldsymbol{k}'m'\mid{}^{\star}\boldsymbol{k}''m'')\,\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}'')\,(m'')}. \quad (55.4)$$

В соотношениях (55.1), (55.3) и (55.4) подразумевается, что они выписаны для отдельного элемента $P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}}$ группы (или, как в (55.3), (55.4), для отдельного класса), поэтому для краткости в них опущены аргументы.

Чтобы определить коэффициенты приведения характеров, можно обычным образом, подобно (17.8), (17.9), использовать соотношение ортогональности и нормировки (49.5). В таком случае для определения этих коэффициентов имеем коэффициенты разложения характеров, которые можно определить по формуле

$$(^{\star}\boldsymbol{k}m^{\star}\boldsymbol{k}'m'\mid{}^{\star}\boldsymbol{k}''m'')=$$
$$=\frac{1}{g_pN}\sum_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}}\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\cdot\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}')\,(m')}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})\times$$
$$\times\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}'')\,(m'')}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})^{*}. \quad (55.5)$$

В (55.5) суммирование ведется по всем элементам группы $\mathfrak{G}$. Несмотря на очевидную сложность выполнения суммирования по всем элементам группы, аналогичного суммированию в (55.5), оказывается, что, используя (55.5), действительно можно вычислить коэффициенты приведения. Мы обсудим этот вопрос в нескольких следующих параграфах.

Аналогично определению обычных коэффициентов приведения $(^{\star}\boldsymbol{k}m^{\star}\boldsymbol{k}'m'\mid \boldsymbol{k}''m'')$, позволяющих разложить произведение двух произвольных неприводимых представлений пространственных групп, можно определить коэффициенты приведения для обычных и симметризованных степеней неприводимых представлений.

Так,

$$[\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})\,(m)}]_p=\sum_{^{\star}\boldsymbol{k}''}\sum_{m''}([^{\star}\boldsymbol{k}m]_p\mid{}^{\star}\boldsymbol{k}''m)\,\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}'')\,(m'')}. \quad (55.6)$$

Это выражение определяет коэффициенты приведения $([^{\star}\boldsymbol{k}m]_p\mid{}^{\star}\boldsymbol{k}''m'')$ для обычной степени представления $D^{(^{\star}\boldsymbol{k})\,(m)}$. Ясно, что этот коэффициент можно вычислить по формуле типа (55.5):

$$([^{\star}\boldsymbol{k}m]_p\mid{}^{\star}\boldsymbol{k}''m'')=$$
$$=\frac{1}{g_pN}\sum_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\}}[\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})\,(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})]_p\cdot\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k}'')\,(m'')}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}(\varphi)\})^{*}. \quad (55.7)$$

В (55.6) и (55.7) p может быть любым целым числом. Подобным образом коэффициенты приведения для симметризованных степеней представления имеют вид

$$[\chi^{(^\star k)(m)}]_{(p)} = \sum_{^\star k''} \sum_{m''} ([^\star km]_{(p)} \mid {}^\star k''m'')\, \chi^{(^\star k'')(m'')} \tag{55.8}$$

и

$$([^\star km]_{(p)} \mid k''m'') =$$
$$= \frac{1}{g_p N} \sum_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}} [\chi^{(^\star k)(m)}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})]_p\, \chi^{(^\star k'')(m'')}(\{\varphi \mid t(\varphi)\})^*. \tag{55.9}$$

§ 56. Правила отбора для волновых векторов

а. Коэффициенты приведения для звезды в случае простого произведения представлений. Чтобы получить полный набор коэффициентов приведения дальнейшее рассмотрение проведем в два этапа. В (55.4), (55.7) и (55.9) мы суммируем по всем звездам. Но фактически суммирование ведется по ограниченному числу звезд $^\star k''$.

Для определенности рассмотрим коэффициенты приведения из (55.4), а именно $(^\star km^\star k'm' \mid k''m'')$. Эти коэффициенты возникают при разложении обычного прямого произведения двух различных неприводимых представлений пространственной группы. Рассмотрим пространство (53.5). Типичная функция пространства (53.5) имеет вид

$$\psi_\alpha^{(k_\sigma)(m)} \cdot \psi_\beta^{(k'_\tau)(m')}, \quad \sigma = 1, \ldots, s, \quad \tau = 1, \ldots, s',$$
$$\alpha = 1, \ldots, l_m, \quad \beta = 1, \ldots, l_m, \tag{56.1}$$

Волновой вектор, определяющий закон преобразования произведения (56.1), равен

$$k_\sigma + k'_\tau \equiv k''_\nu, \tag{56.2}$$

где вектор k''_ν — один из лучей звезды $^\star k''$. Ясно, что в пространстве прямого произведения (53.5) возникают произведения функций с результирующими волновыми векторами, соответствующими всем $(s \cdot s')$ различным способам сложения каждого волнового вектора звезды $^\star k$ со всеми волновыми векторами звезды $^\star k'$.

Вследствие того что представления $D^{(^\star k \otimes {}^\star k')(m \otimes m')}$ и соответствующие пространства (53.5) разлагаются на сумму неприводимых представлений и пространств, эти $(s \cdot s')$ результирующих векторов должны выражаться в виде суммы полных звезд. Каждое возникающее представление $D^{(^\star k'')(m'')}$ характеризуется одной полной звездой. Чтобы определить полный набор звезд $^{\star}\boldsymbol{k}''$, появляющихся при образовании всех возможных комбинаций типа (56.2), введем обозначение для прямого произведения самих звезд:

$$^{\star}\boldsymbol{k} \otimes {}^{\star}\boldsymbol{k}' = \sum_{^{\star}\boldsymbol{k}''} \oplus ({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}' \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}'')\, {}^{\star}\boldsymbol{k}''. \tag{56.3}$$

Коэффициенты $({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}' | {}^{\star}\boldsymbol{k}'')$ являются коэффициентами приведения для волнового вектора; они равны целым числам. С помощью этих коэффициентов утверждение о том, что $(s \cdot s')$ векторов выражаются через сумму по полным звездам, можно записать в виде

$$s \cdot s' = \sum_{^{\star}\boldsymbol{k}''} ({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}' \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}'')\, s''. \tag{56.4}$$

Соотношение (56.4) можно также понимать как условие сохранения размерности, так как суммирование выполняется по всем звездам $^{\star}\boldsymbol{k}''$. Поскольку сложение волновых векторов коммутативно, имеем

$$^{\star}\boldsymbol{k} \otimes {}^{\star}\boldsymbol{k}' = {}^{\star}\boldsymbol{k}' \otimes {}^{\star}\boldsymbol{k} \tag{56.5}$$

и

$$({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}' \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}'') = ({}^{\star}\boldsymbol{k}'\,{}^{\star}\boldsymbol{k} \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}''). \tag{56.6}$$

Коэффициенты $({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}' \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}'')$ при $l_m = l_{m'} = 1$ определяют полную размерность всех неприводимых представлений со звездами $^{\star}\boldsymbol{k}''$ пространственной группы, входящих в разложение прямого произведения неприводимых представлений со звездами $^{\star}\boldsymbol{k}$ и $^{\star}\boldsymbol{k}'$ (независимо от m и m').

Часто коэффициенты приведения для волнового вектора можно получить прямой проверкой. Это, в частности, удобно для звезд высокой симметрии. В остальных случаях оказывается полезным систематическое перечисление членов в (56.2). Таким образом, можно составить прямоугольную таблицу, строки которой соответствуют лучам звезды $^{\star}\boldsymbol{k}$, а столбцы — лучам $^{\star}\boldsymbol{k}'$. Выпишем лучи звезды вектора $\boldsymbol{k}$:

$$^{\star}\boldsymbol{k} = (\boldsymbol{k},\ \varphi_2\boldsymbol{k},\ \ldots,\ \varphi_s\boldsymbol{k}) \tag{56.7}$$

и звезды вектора $\boldsymbol{k}'$:

$$^{\star}\boldsymbol{k}' = (\boldsymbol{k}',\ \varphi_2'\boldsymbol{k}',\ \ldots,\ \varphi_{s'}'\boldsymbol{k}'). \tag{56.8}$$

Поместим на пересечении σ-й строки и τ-го столбца таблицы элемент (волновой вектор)

$$\varphi_\sigma \cdot (\boldsymbol{k} + \varphi_\tau'\boldsymbol{k}') = \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} + \varphi_\sigma\varphi_\tau' \cdot \boldsymbol{k}'. \tag{56.9}$$

Это волновой вектор звезды $^{\star}(\boldsymbol{k} + \varphi_\tau'\boldsymbol{k}')$. Осуществляя такое построение, мы получим таблицу, в каждой строке которой присутствует одинаковое слагаемое (например, $\varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k}$); это не имеет места для столбцов. Однако каждый столбец таблицы содержит волновой вектор одной и той же звезды. В случае, который иллюстрируется в (56.9), все волновые векторы τ-го столбца входят в звезду ${}^\star(\boldsymbol{k} + \varphi'_\tau \cdot \boldsymbol{k}')$. В отдельных случаях может оказаться, что данная звезда ${}^\star\boldsymbol{k}$ содержит больше чем (s) лучей, т. е. $s'' > s$. Но тогда, чтобы свести все лучи к звезде ${}^\star\boldsymbol{k}''$, следует просто сложить несколько столбцов. Наоборот, если $s'' < s$, то одна и та же звезда может входить в данный столбец несколько раз. И этот случай не вызывает затруднений. В любом случае, после того как таблица составлена, легко догадаться, какие столбцы следует сложить.

Можно отметить, что, определяя коэффициенты приведения $({}^\star\boldsymbol{k}\,{}^\star\boldsymbol{k}' \mid {}^\star\boldsymbol{k}'')$ для волнового вектора, мы фактически выполняем разложение тех диагональных матриц представления прямого произведения, которые соответствуют элементам группы $\mathfrak{T}$. Матрицы (53.9) уже являются диагональными, и наше построение сводится к такой перегруппировке диагональных элементов, чтобы все векторы, входящие в одну звезду, оказались собранными вместе.

При $l_m > 1$ и $l_{m'} > 1$ достаточно лишь небольшого изменения рассуждений. Рассматривая снова векторное пространство (53.5), видим, что $l_m > 1$ и (или) $l_{m'} > 1$ означает только, что элементы данной звезды ${}^\star\boldsymbol{k}$ (или ${}^\star\boldsymbol{k}'$) входят в левую часть равенства (56.2) l_m раз. В этом случае кратность легко учесть. Имеем

$$(l_m{}^\star\boldsymbol{k}) \otimes (l_{m'}{}^\star\boldsymbol{k}') = \sum_{{}^\star\boldsymbol{k}''} \oplus (l_m l_{m'}) ({}^\star\boldsymbol{k}{}^\star\boldsymbol{k}' \mid {}^\star\boldsymbol{k}'')\, {}^\star\boldsymbol{k}'' \tag{56.10}$$

или, используя размерности представлений,

$$(l_m s) \cdot (l_{m'} s') = \sum (l_m l_{m'}) ({}^\star\boldsymbol{k}{}^\star\boldsymbol{k}' \mid \boldsymbol{k}'')\, s''. \tag{56.11}$$

Возможно, полезно заметить также, что случай совпадающих звезд ${}^\star\boldsymbol{k}$ и ${}^\star\boldsymbol{k}'$ не вносит ничего нового. В этом случае мы должны рассматривать обычное прямое произведение представления само на себя. Соответствующие коэффициенты приведения для волнового вектора можно получить аналогично (56.10):

$$(l_m{}^\star\boldsymbol{k})(l_m{}^\star\boldsymbol{k}) = \sum_{{}^\star\boldsymbol{k}''} \oplus\, l_m^2 ([{}^\star\boldsymbol{k}]_2 \mid {}^\star\boldsymbol{k}'')\, {}^\star\boldsymbol{k}'' \tag{56.12}$$

или, иначе, можно записать

$$(l_m{}^\star\boldsymbol{k}) \otimes (l_m\boldsymbol{k}) = [l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_2. \tag{56.13}$$

Тогда, как видно из (56.12), мы получаем одинаковые коэффициенты, которые теперь можно обозначить через $([l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_2 \mid {}^\star\boldsymbol{k}'')$.

В таком случае можно записать

$$[l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_2=\sum_{{}^\star\boldsymbol{k}''}\oplus([l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_2\,|\,{}^\star\boldsymbol{k}'')\,{}^\star\boldsymbol{k}''. \qquad (56.14)$$

б. Коэффициенты приведения для звезды в случае симметризованного произведения представлений. Обратимся теперь к рассмотрению коэффициентов приведения для волнового вектора при нахождении симметризованного произведения представлений. В этом случае необходимо заранее включить в аргумент размерность l_m; т. е., если векторное пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(m)}$ имеет размерность $l_m>1$, то при перечислении каждый волновой вектор звезды должен возникать l_m раз, или, другими словами, каждая звезда должна возникать l_m раз. Рассмотрим сначала случай $l_m=1$. Тогда набор волновых векторов, образующих пространство симметризованного квадрата представления, можно записать в виде

$$\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau,\quad \sigma\leqslant\tau=1,\ \ldots,\ s. \qquad (56.15)$$

Перепишем (56.15) в виде, соответствующем таблице, которая обсуждалась при выводе (56.7)—(56.9). Тогда получим

$$\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau\equiv\varphi_\sigma(\boldsymbol{k}+\varphi_\sigma^{-1}\varphi_\tau\boldsymbol{k}),\quad \sigma\leqslant\tau=1,\ \ldots,\ s. \qquad (56.16)$$

Ясно, что если в (56.16) $\sigma=\tau$, то получаются элементы звезды ${}^\star(2\boldsymbol{k})$, где $2\boldsymbol{k}\equiv\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}$. Таким образом, запишем

$${}^\star\boldsymbol{k}\otimes{}^\star\boldsymbol{k}={}^\star(2\boldsymbol{k})\oplus\{\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau\},\quad \sigma\neq\tau. \qquad (56.17)$$

Однако в наборе векторов $\{\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau\}$, возникающих в (56.17), ввиду отсутствия ограничений на неравенство в (56.17) данная комбинация $\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau$ встречается дважды. Напротив, в (56.15) выполняется неравенство $\sigma<\tau$. Поэтому

$$\begin{aligned}&\{\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau\}\quad \text{при}\quad \sigma\neq\tau,\\ &=2(\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}_\tau)\quad \text{при}\quad \sigma<\tau.\end{aligned} \qquad (56.18)$$

Обозначая через

$$[{}^\star\boldsymbol{k}]_{(2)} \qquad (56.19)$$

симметризованный квадрат звезды ${}^\star\boldsymbol{k}$, представляющий собой набор векторов (56.15), очевидным образом имеем

$$2\,[{}^\star\boldsymbol{k}]_{(2)}={}^\star\boldsymbol{k}\otimes{}^\star\boldsymbol{k}\oplus{}^\star(2\boldsymbol{k}), \qquad (56.20)$$

или

$$[{}^\star\boldsymbol{k}]_{(2)}=\frac{1}{2}\,[{}^\star\boldsymbol{k}\otimes{}^\star\boldsymbol{k}\oplus{}^\star(2\boldsymbol{k})]. \qquad (56.21)$$

Повторяя теперь эти рассуждения для общего случая $l_m > 1$, мы просто сгруппируем в таблице соответствующие волновые векторы и получим следующий результат:

$$[l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_{(2)} = \frac{1}{2}\left[l_m^2{}^\star\boldsymbol{k} \oplus {}^\star\boldsymbol{k} \oplus l_m{}^\star(2\boldsymbol{k})\right], \tag{56.22}$$

частным случаем которого при $l_m = 1$, очевидно, является (56.21). Коэффициенты приведения, соответствующие соотношению (56.22), можно записать в виде

$$([l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_{(2)} \mid {}^\star\boldsymbol{k}''). \tag{56.23}$$

Аналогичным образом можно получить симметризованную третью степень звезды в виде

$$[l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_{(3)} = \frac{1}{6}\left\{l_m^3{}^\star\boldsymbol{k} \otimes {}^\star\boldsymbol{k} \otimes {}^\star\boldsymbol{k} \oplus 3l_m^2{}^\star\boldsymbol{k} \otimes {}^\star 2\boldsymbol{k} \oplus 2l_m{}^\star(3\boldsymbol{k})\right\}. \tag{56.24}$$

Соответствующие коэффициенты приведения обозначим

$$([l_m{}^\star\boldsymbol{k}]_{(3)} \mid \boldsymbol{k}''). \tag{56.25}$$

Роль коэффициентов приведения для волновых векторов и правил отбора для волновых векторов состоит в том, что они выделяют только те звезды, которые возникают при нахождении прямого произведения представлений. Другими словами, при разложении произведения $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{({}^\star\boldsymbol{k}'m')}$ следует лишь найти члены $D^{(\boldsymbol{k}'')(m'')}$, для которых выполняется соответствующее правило отбора. Необходимым, но не достаточным условием присутствия представления $D^{({}^\star\boldsymbol{k}'')(m'')}$ в произведении является неравенство

$$({}^\star\boldsymbol{k}{}^\star\boldsymbol{k}' \mid {}^\star\boldsymbol{k}'') \neq 0. \tag{56.26}$$

Аналогичные условия можно выписать для обычных и симметризованных степеней данного представления. Разумеется, присутствие данной звезды ${}^\star\boldsymbol{k}''$ является необходимым, но не достаточным условием появления в разложении определенного m''.

Коэффициенты приведения для волнового вектора, или коэффициенты приведения для звезд, аналогичны коэффициентам приведения для рядов Клебша — Гордана. Действительно, ряд (56.3) представляет собой аналог ряда Клебша — Гордана для непрерывной группы поворотов применительно к дискретным конечным группам.

§ 57. Определение коэффициентов приведения. Метод линейных алгебраических уравнений

Полные коэффициенты приведения для произведений неприводимых представлений пространственных групп определены в (55.1), и теперь можно обратиться к этому уравнению, чтобы завершить их определение. Ясно, что соотношения (55.7) и (55.9) имеют одинаковую структуру, и поэтому при их рассмотрении можно использовать одинаковые методы.

Будем считать, что сомножители $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k')(m')}$ в (55.1) заданы. Предполагается, что определены соответствующие коэффициенты приведения для звезд из (56.3). Тогда для каждой звезды $^\star k''$, такой, что

$$(^\star k ^\star k' \mid ^\star k'') \neq 0, \tag{57.1}$$

действительно возникают представления $D^{(\star k'')(m'')}$.

Предположим, что для этой звезды имеется $r_{k''}$ допустимых неприводимых представлений, каждое с размерностью $l_{k''m''}$. Тогда, если, как и прежде, число лучей в звезде $^\star k''$ равно s'', то полная размерность возникающего неприводимого представления со звездой $^\star k''$ равна

$$(^\star k ^\star k' \mid ^\star k'')\, s''. \tag{57.2}$$

Кроме того, из условия сохранения размерности следует, что коэффициенты $(^\star km\, ^\star k'm' \mid ^\star k''m'')$ должны удовлетворять соотношению

$$\sum_{m''=1}^{r_{k''}} (^\star km ^\star k'm' \mid ^\star k''m'')\, l_{k''m''} = s''\, (^\star k ^\star k' \mid ^\star k''). \tag{57.3}$$

Далее, если число различных (т. е. неэквивалентных) звезд $^\star k''$, входящих в коэффициенты $(^\star k ^\star k' \mid ^\star k'')$, равно ξ'', то число различных коэффициентов, которые следует определить, равно

$$\sum_{k''=1}^{\xi''} r_{k''}. \tag{57.4}$$

Поэтому уравнения (55.4) принимают вид

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_p \mid t(\varphi_p)\})\, \chi^{(\star k')(m')}(\{\varphi_p \mid t(\varphi_p)\}) =$$
$$= \sum_{\star k''m''} (^\star km ^\star k'm' \mid ^\star k''m'')\, \chi^{(\star k'')(m'')}(\{\varphi_p \mid t(\varphi_p)\}). \tag{57.5}$$

Уравнения (57.5) представляют собой линейные алгебраические уравнения, в которых неизвестны только коэффициенты приведения. Иначе говоря, для каждого элемента пространственной группы $\mathfrak{G}$ известны все характеры, входящие в (57.5). Хотя в пространственной группе имеется $g_p N$ элементов, число неизвестных коэффициентов приведения (57.4) намного меньше.

Для решения (57.5) следует теперь выбрать столько различных элементов пространственной группы, по одному из каждого класса группы $\mathfrak{G}$, сколько имеется неизвестных коэффициентов приведения в соответствии с (57.4). Элементы пространственной группы могут включать в себя как представителей смежных классов $\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p\}$, так и элементы общего вида $\{\varphi_p|\boldsymbol{\tau}_p+\boldsymbol{R}_L\}$, входящие в пространственную группу. Легко видеть, что если для ограничения числа возможных коэффициентов приведения для заданного допустимого значения $\boldsymbol{k}''$ используется соотношение (57.3), то задача решения линейных алгебраических уравнений (57.5) существенно упрощается. Наконец, чтобы исключить возможность появления решений уравнений (57.5), не имеющих смысла, следует использовать тот факт, что коэффициенты приведения равны положительным числам, включая нуль.

Этот метод нахождения коэффициентов приведения, основанный на исходном определении коэффициентов приведения (55.1) или (55.3), обладает полной общностью, и его можно применять для любой пространственной группы, как симморфной, так и несимморфной. Этот метод можно назвать методом линейных алгебраических уравнений, и его можно с таким же успехом использовать в случае, когда одна из звезд или все звезды в разложении имеют высокую симметрию (т. е. когда группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ высокого порядка) либо когда они имеют низкую симметрию. Согласно общей теореме единственности разложения представления на неприводимые составляющие, решение уравнений (57.5) и (57.3) является единственным и точным. Для проверки результата численного расчета можно использовать уравнение (57.5), подставляя в него элементы пространственной группы, отличные от элементов, использованных в исходном разложении.

Мы применим этот метод в § 129, 130 для получения коэффициентов приведения для пространственной группы кристалла с симметрией каменной соли. Чтобы продемонстрировать практическое удобство этого метода, будет рассмотрен конкретный пример.

§ 58. Определение коэффициентов приведения. Метод группы приведения

Метод линейных алгебраических уравнений, изложенный в предыдущем параграфе, является, можно сказать, прямым методом определения коэффициентов приведения. Обратный метод основан на суммировании по всей группе, подобном суммированию в (17.8), которое теперь выполняется по всей пространственной группе, как в (55.5). Суммирование по всей группе можно выполнить только в том случае, когда рассматриваются некоторые представления достаточно простой структуры, так что можно использовать эту структуру для перехода к рассмотрению некоторых факторгрупп.

В частности, для звезд высокой симметрии матричная группа $D^{(^\star k)(m)}$ является гомоморфным отображением абстрактной группы $\mathfrak{G}$, таким, что ядро гомоморфизма[1]) $\mathfrak{K}$ представляет собой группу высокого порядка (т. е. порядка N), а индекс подгруппы $\mathfrak{K}$ в группе $D^{(^\star k)(m)}$ является малым числом (т. е. порядка g_p). Подобное обсуждение должно разъяснить это утверждение.

Рассмотрим совокупность всех матриц $D^{(^\star k)(m)}$, входящих в ядро гомоморфизма:

$$\mathfrak{K}^{(^\star k)(m)}\left\{D^{(^\star k)(m)}(Y)\right\}, \quad \text{где} \quad D^{(^\star k)(m)}(Y)=D^{(^\star k)(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\}). \tag{58.1}$$

Набор элементов $\{Y\}$, очевидно, образует нормальную подгруппу группы $\mathfrak{G}$. Поэтому можно построить факторгруппу группы $\mathfrak{G}$ по этой подгруппе. Рассмотрим подгруппу

$$\mathfrak{N}_{\{Y\}}\equiv\{Y\}, \tag{58.2}$$

образуемую совокупностью абстрактных элементов группы $\mathfrak{G}$, таких, что каждому элементу Y в данном неприводимом представлении (в матричной группе) $D^{(^\star k)(m)}$ соответствует матрица

$$D^{(^\star k)(m)}(Y)=D^{(^\star k)(m)}(\{\varepsilon\,|\,0\}). \tag{58.3}$$

Обычно оказывается, что элементы группы $\mathfrak{N}_{\{Y\}}$ представляют собой чистые трансляции, хотя $\mathfrak{N}_{\{Y\}}=\mathfrak{T}$ только в том случае, когда звезда $^\star\boldsymbol{k}=\Gamma$. Поэтому можно рассматривать разложение группы трансляций $\mathfrak{T}$ по подгруппе $\mathfrak{N}_{\{Y\}}$, которое дает набор представителей смежных классов в виде

$$\mathfrak{T}/\mathfrak{N}_{\{Y\}}=\{\varepsilon\,|\,0\},\ \{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{t}_2\},\ \ldots,\ \left\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{t}_{n_j}\right\}. \tag{58.4}$$

Отметим, что рассуждение полностью соответствует более простому рассуждению, приведенному в § 39 при изложении метода малой группы. В том случае в (39.9) рассматривалась группа $\Pi(\boldsymbol{k})$, равная факторгруппе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, где группа $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ определялась как набор таких абстрактных элементов группы $\mathfrak{T}$, что в данном представлении матрицы элементов группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$ были равны матрице, соответствующей тождественному элементу $\{\varepsilon|0\}$. Поэтому матрицы, соответствующие элементам группы $\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, входят в центр матричной группы, образующей допустимое неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, т. е. входят в центр группы $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$. В рассматриваемом здесь случае именно

---

[1]) При всяком гомоморфном отображении группы G на группу H единица группы G переходит в единицу группы H. Совокупность всех элементов группы G, переходящих в единицу группы H, называется ядром данного гомоморфизма (см. [117], стр. 253).— *Прим. ред.*

полная группа $\mathfrak{G}$ определяет через неприводимые представления $D^{(\star k)(m)}$ подгруппу $\mathfrak{N}_{\{Y\}}$ и, таким образом, ряд в (58.4).

Исходя из этого, образуем факторгруппу

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y\}}. \tag{58.5}$$

Она разбивается на ряд смежных классов. Каждый независимый смежный класс группы из (58.5) представляется матрицей группы $D^{(\star k)(m)}$. Набор этих матриц замкнут, т. е. он образует матричную группу. Рассмотрим теперь представителей смежных классов

$$\{\varepsilon\,|\,0\}, \;\ldots,\; \{\varepsilon\,|\,t_{n_j}\},\; \{\varphi_2\,|\,0\},\; \ldots,\; \{\varphi_{g_p}\,|\,t_{n_j}\}. \tag{58.6}$$

Если рассматривать неприводимое представление $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$, то набор из $g_p n_j$ представителей смежных классов образует совокупность «независимых» элементов группы $\mathfrak{G}$.

Совокупность элементов (58.6) мы обозначим через $\mathfrak{R}(k)$ и назовем «группой приведения для вектора k». Очевидно, представление $D^{(\star k)(m)}$ является лишь гомоморфным отображением группы $\mathfrak{G}$, но часто представляет собой изоморфное отображение группы $\mathfrak{R}(k)$. Так, набор матриц $D^{(\star k)(m)}(Z)$, где Z — элемент группы $\mathfrak{R}(k)$, образует матричную группу, замкнутую относительно матричного умножения. Далее, набор $D^{(\star k)(m)}(Z)$ задает матричное представление для совокупности абстрактных элементов $\mathfrak{R}(k)$, определенной в (58.6). Поэтому соотношение

$$\sum_{Z\in\mathfrak{G}} \left|\chi^{(\star k)(m)}(Z)\right|^2 = g_p N, \tag{58.7}$$

в котором суммирование производится по всем элементам группы $\mathfrak{G}$, можно привести к более простому виду

$$\sum_{Z\in\mathfrak{R}(k)} \left|\chi^{(\star k)(m)}(Z)\right|^2 = g_p n_j. \tag{58.8}$$

Соотношение (58.8) представляет собой соотношение полноты, следующее из свойства матриц $D^{(\star k)(m)}$, рассматриваемых в качестве неприводимого представления группы $\mathfrak{G}$.

Точно таким же образом можно теперь определить ядро представления $D^{(\star k')(m')}$; обозначим его через $\mathfrak{K}'^{(\star k')(m')}$. Можно так же рассмотреть и группу $\mathfrak{R}(k')$. Трансляции, входящие в группу $\mathfrak{R}(k')$, могут либо совпадать, либо не совпадать с трансляциями из группы $\mathfrak{R}(k)$. Можно, наконец, построить группу $\mathfrak{R}(k'')$, соответствующую неприводимому представлению $D^{(\star k'')(m'')}$. В таком случае мы получим три отдельные группы матриц, каждая из которых задает представление совокупности абстрактных элементов $\mathfrak{R}(k)$, $\mathfrak{R}(k')$ или $\mathfrak{R}(k'')$. Эти матричные группы несут существенную (не избыточную) информацию о полных матричных группах $D^{(\star k)(m)}$, $D^{(\star k')(m')}$ и $D^{(\star k'')(m'')}$. Первые две группы $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k')(m')}$ входят сомножителями в произведение, которое следует разложить, а третья представляет собой представление, наличие которого (т. е. m'') в произведении требуется установить, если мы знаем, что звезда $^\star k''$ действительно входит в произведение (это определяется соответствующим коэффицинтом приведения для волнового вектора).

Образуем теперь из трех групп $\mathfrak{R}(k)$, $\mathfrak{R}(k')$ и $\mathfrak{R}(k'')$ одну группу $\mathfrak{R}$ следующим образом. Расширим каждую из этих трех совокупностей абстрактных элементов, добавляя элементы из их собственного центра. Таким способом мы найдем общую группу $\mathfrak{R}$ наименьшего порядка. Если, например, ядром представления $D^{(\star k'')(m'')}$ является $\mathfrak{K}''^{(\star k'')(m'')}$, а элементами группы $\mathfrak{K}''^{(\star k'')(m'')}$ являются элементы Y'' (так что $\mathfrak{T}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ содержит n''_j представителей смежных классов) и $n_{j''} > n_{j'}$, $n_{j''} > n_j$, то в ряде случаев можно определить общую группу $\mathfrak{R}$, как совокупность абстрактных элементов из

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y'\}} = (\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y\}})\,(\mathfrak{N}_{\{Y\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}), \tag{58.9}$$

а также из

$$\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}} = (\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y'\}})\,(\mathfrak{N}_{\{Y'\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}). \tag{58.10}$$

Может оказаться, что элементы группы $\mathfrak{N}_{\{Y\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ входят в центр группы $D^{(\star k)(m)}$, а элементы группы $\mathfrak{N}_{\{Y'\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ — в центр группы $D^{(\star k')(m')}$. В таком случае можно немедленно выполнить приведение.

Определив группу $\mathfrak{R}$, мы получим общую группу приведения. Точнее говоря, это группа абстрактных элементов, каждому из которых соответствует матричное представление из представлений-сомножителей $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k')(m')}$ или из представления-произведения $D^{(\star k'')(m'')}$. Вследствие их неприводимости имеем для каждого представления соотношение для характеров

$$\sum_{Z \in \mathfrak{R}} \left|\chi^{(\star k)(m)}(Z)\right|^2 = g_p n_{j''} = \text{порядок группы } \mathfrak{R}, \tag{58.11}$$

а также

$$\sum_{Z \in \mathfrak{R}} \chi^{(\star k)(m)}(Z)\,\chi^{(\star k')(m')}(Z)^* = \delta_{kk'}\delta_{mm'} g_p n_{j''}. \tag{58.12}$$

При этом соотношение ортогональности и нормировки (58.12) применимо в рассматриваемом случае к любой паре из трех звезд $^\star k$, $^\star k'$ и $^\star k''$ с соответствующими индексами m, m', m''; Z — произвольный элемент группы $\mathfrak{R}$. Теперь, используя соотношение ортонормированности (58.12), можно завершить процесс приведения, рассматривая соотношение, эквивалентное (55.5).

Таким образом, имеем

$$(^\star\boldsymbol{k}m^\star\boldsymbol{k}'m' \mid {}^\star\boldsymbol{k}''m'') =$$

$$= \frac{1}{g_p n_{j''}} \sum_{Z \in \mathfrak{R}} \chi^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}(Z) \cdot \chi^{(^\star\boldsymbol{k}')(m')}(Z) \cdot \chi^{(^\star\boldsymbol{k}'')(m'')}(Z)^*. \quad (58.13)$$

Соотношение (58.13) заканчивает приведение. Определив группу приведения $\mathfrak{R}$, общую для трех рассматриваемых матричных групп, мы приводим суммирование в (55.5) к такой форме, чтобы его можно было выполнить точно.

Достоинство этого метода, использующего группу приведения, состоит в прямом вычислении интересующих нас коэффициентов приведения без использования метода проб и ошибок.

Если элементы групп $\mathfrak{N}_{\{Y\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ и $\mathfrak{N}_{\{Y'\}}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ не входят в центры соответствующих представлений, то необходимая при этом модификация метода в принципе проста. Каждая из трех исходных групп $\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y\}}$, $\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y'\}}$ и $\mathfrak{G}/\mathfrak{N}_{\{Y''\}}$ дополняется элементами до тех пор, пока не образуется общая группа приведения $\mathfrak{R}$. Далее можно использовать и в этом случае соотношение (58.13) и тем самым выполнить приведение.

Подводя итог, можно сказать, что метод приведения представляет собой строгую процедуру, в которой для выполнения суммирования в (55.6) используется гомоморфизм группы $D^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}$ по отношению к полной пространственной группе $\mathfrak{G}$, а также гомоморфизм остальных представлений, входящих в соотношение приведения Достоинство этого метода (в случаях, когда возможно его применение) состоит в том, что он допускает проверку коэффициентов с помощью соотношения ортонормированности. Как и в случае более простого метода малой группы, состоящего в определении неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ по неприводимым представлениям группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, оказывается, что метод группы приведения полезен в случае звезд высокой симметрии, т. е. канонических волновых векторов высокой симметрии.

Метод группы приведения иллюстрируется в § 132, где получаются коэффициенты приведения для произведений представлений высокой симметрии пространственной группы алмаза.

§ 59. Определение коэффициентов приведения. Использование базисных функций

Применяя метод полной группы и используя полный набор базисных функций для *одной* звезды, можно частично определить коэффициенты приведения для представлений, соответствующих этой звезде. Иначе говоря, предположим теперь, что мы определим для рассматриваемого произведения, которое следует разложить, все коэффициенты приведения для волновых векторов (или для звезд). Имея эти коэффициенты, можно рассмотреть разложение соответствующих пространств. Ясно, что разложение пространства произведения записывается через коэффициенты приведения $({}^\star\boldsymbol{k}m{}^\star\boldsymbol{k}'m' \mid {}^\star\boldsymbol{k}''m'')$ для полной группы в виде

$$\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)} \otimes \Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}')(m')} = \sum_{{}^\star\boldsymbol{k}''m''} \oplus ({}^\star\boldsymbol{k}m{}^\star\boldsymbol{k}'m' \mid {}^\star\boldsymbol{k}''m'')\,\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')(m'')}. \qquad (59.1)$$

Используя теперь соотношение для размерности представлений, выражаемые в (57.3) правилами отбора для волновых векторов, можно считать известной полную размерность всех представлений, соответствующих звезде ${}^\star\boldsymbol{k}''$; они возникают при разложении произведения вида

$$D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{({}^\star\boldsymbol{k}')(m')}.$$

Предположим, что у нас имеется полный набор функций из (59.1). Выберем из этого набора все парные произведения, для которых

$$\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'} = \boldsymbol{k}''_{\sigma''}, \qquad (59.2)$$

где $\boldsymbol{k}''_{\sigma''}$ — любой из векторов звезды ${}^\star\boldsymbol{k}''$. Таким способом мы формально соберем весь возникающий набор функций, образующий все пространства $\{\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')\{m''\}}\}$, соответствующие звезде ${}^\star\boldsymbol{k}''$ и всем m''.

Если применить к этому набору собственных функций все операции поворотной симметрии (представители смежных классов группы $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$), то мы получим полное приводимое представление *для этой звезды*. Другими словами, рассмотрим пространство, образуемое набором функций, выбранных из $\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')}$ следующим образом:

$$\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')} \equiv \left\{\psi_\alpha^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)}\psi_{\alpha'}^{(\boldsymbol{k}'_{\sigma'})(m')}\right\}, \qquad (59.3)$$

$$\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'} = \boldsymbol{k}''_{\sigma''}, \quad \alpha = 1, \ldots, l_m, \quad \alpha' = 1, \ldots, l_{m'}.$$

Тогда

$$P_{\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}}\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')} = D(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\})\,\Sigma^{({}^\star\boldsymbol{k}'')}. \qquad (59.4)$$

Но в общем случае (если в сумму в (59.4) входит больше одного значения m'') матрица $D(\{\varphi|\boldsymbol{t}(\varphi)\})$ приводима. Чтобы выполнить приведение, следует вычислить след матрицы

$$\mathrm{Sp}\, D(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) = \chi(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}). \qquad (59.5)$$

Тогда, имея систему приводимых характеров (59.5), а также систему характеров $\chi^{({}^\star\boldsymbol{k}'')(m'')}$ для допустимых неприводимых представлений звезды ${}^{\star}\boldsymbol{k}''$, можно выполнить разложение приводимой системы характеров (59.5) и определить коэффициенты $({}^{\star}\boldsymbol{k}m\,{}^{\star}\boldsymbol{k}'m' \mid {}^{\star}\boldsymbol{k}''m'')$. В этом случае можно также использовать метод линейных алгебраических уравнений (§ 57) и метод группы приведения (§ 58).

Полностью эквивалентный метод определения возникающих значений m'' можно сформулировать с помощью идемпотентных операторов проектирования, связанных с неприводимыми представлениями $D^{({}^{\star}\boldsymbol{k}'')(m'')}$. Если характеры $\chi^{({}^{\star}\boldsymbol{k}'')(m'')}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}_p\})$ известны, то операторы проектирования для характеров [т. е. слабые операторы проектирования $P^{(l)}$, определенные в (16.5)] можно найти по формулам

$$P^{({}^{\star}\boldsymbol{k}'')(m'')} = \frac{1}{Ng_p} \sum_{\mathfrak{G}} \chi^{({}^{\star}\boldsymbol{k}'')(m'')}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}_p\})^* P_{\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}_p\}}. \qquad (59.6)$$

При применении этого оператора с заданным m'' к функции (59.3) получается либо нуль, если m'' не содержится в (59.3), либо правильная функция. Следует отметить, что полученный таким способом набор функций относится ко всему неприводимому представлению $D^{({}^{\star}\boldsymbol{k})(m)}$ пространственной группы, а не к отдельной строке.

Очевидно, базисные функции и операторы проектирования желательно использовать в случаях, когда требуются точные выражения для функций, образующих пространство $\Sigma^{({}^{\star}\boldsymbol{k}'')(m'')}$. Как правило, частичный (неполный) характер приведения, получаемый этим методом, делает его полезным либо для специальных случаев, либо для проверки результатов, полученных другими методами. Этот метод весьма трудоемок, так как приходится определять отдельно системы характеров последовательно для всех допустимых компонентов звезды ${}^{\star}\boldsymbol{k}''$, которые могут возникнуть при приведении. Затем для каждой компоненты отдельно выполняется приведение. В противоположность этому остальные методы дают все коэффициенты приведения сразу, а не поочередно. Далее мы отметим, что такое же замечание следует сделать в отношении методов подгруппы.

§ 60. Теория коэффициентов Клебша — Гордана для пространственных групп [1])

Как было отмечено в § 18, нахождение коэффициентов приведения составляет только часть задачи о разложении прямого произведения двух неприводимых представлений. Заключитель-

---

[1]) Значительная часть этого параграфа написана Р. Беренсон; см. § 18 и 134.

ный этап состоит в нахождении коэффициентов Клебша — Гордана.

Несмотря на то что кристаллические пространственные группы известны уже в течение более 80 лет [13—15], задача о нахождении коэффициентов приведения и коэффициентов Клебша — Гордана была поставлена сравнительно недавно. В этом параграфе мы изложим некоторые из последних результатов в этой области. Поскольку следует ожидать, что работа в области теории, расчетов и приложений коэффициентов Клебша — Гордана для пространственных групп будет в ближайшем будущем быстро развиваться, читателю рекомендуется ознакомиться с современной научной литературой по этому вопросу. Рассмотрение в § 134 посвящено вычислению некоторых из этих коэффициентов для структуры алмаза.

В этом параграфе мы будем следовать работам Ицткана [51] и Беренсон [52, 53]. Аналогичное обсуждение содержится в работах Литвина и Зака [54], Саулевича, Свиридова и Смирнова [55, 56], Сакаты [57] и Корнвела [58].

а. Определение коэффициентов Клебша — Гордана для пространственной группы. Коэффициенты Клебша — Гордана для пространственной группы определяются по аналогии с их определением в (18.4) и (18.5) для произвольной конечной группы. Нам потребуется конкретный вид матриц представлений, которые мы выпишем, следуя (36.18). В частности, для элемента $D_{\sigma a\tau b}{}^{(\star k)(l)}$ имеем

$$D^{(\star \boldsymbol{k})(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\sigma a\tau b} = \dot{D}^{(\boldsymbol{k})(l)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\}\{\varphi_\tau \mid \boldsymbol{\tau}_\tau\}\right)_{ab}, \qquad (60.1)$$

где $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$ — неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, а $\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}$ и $\{\varphi_\tau \mid \boldsymbol{\tau}_\tau\}$ — представители смежных классов в разложении группы $\mathfrak{G}$ по подгруппе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$; напомним, что определение матрицы с точкой дано в (36.4). Прямое произведение представлений можно записать в виде

$$D^{(\star \boldsymbol{k})(l)} \otimes D^{(\star \boldsymbol{k}')(l')} = \sum_{\boldsymbol{k}''l''} \oplus \left({}^\star \boldsymbol{k} l\, {}^\star \boldsymbol{k}' l' \mid {}^\star \boldsymbol{k}'' l''\right) D^{(\star \boldsymbol{k}'')(l'')}. \qquad (60.2)$$

Коэффициенты Клебша — Гордана определяются соотношением

$$\psi_{a''}^{(\boldsymbol{k}''_{\sigma''})(l'')} = \sum_{\sigma a} \sum_{\sigma' a'} \left(\begin{matrix} \boldsymbol{k} & l & \boldsymbol{k}' & l' \\ \sigma & a & \sigma' & a' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} k'' & l'' & \gamma \\ \sigma'' & a'' & \end{matrix}\right) \psi_a^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(l)} \psi_{a'}^{(\boldsymbol{k}'_{\sigma'})\, l'}. \qquad (60.3)$$

Удобно ввести обозначение

$$U^{\gamma}_{\sigma a\sigma' a',\, \sigma'' a''} \equiv U^{(\boldsymbol{k} l \otimes \boldsymbol{k}' l')}_{\sigma a \sigma' a',\, \boldsymbol{k}'' l'' \sigma'' a''} \equiv \left(\begin{matrix} \boldsymbol{k} & l & \boldsymbol{k}' & l' \\ \sigma & a & \sigma' & a' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k}'' & l'' & \gamma \\ \sigma'' & a'' & \end{matrix}\right).$$

Воспроизводя вывод коэффициентов Клебша — Гордана для конечных групп в § 18, получим следующее уравнение, аналогичное (18.23):

$$\sum_{\gamma} U^{\gamma}_{\sigma a\sigma' a',\, \sigma'' a''} U^{\gamma *}_{\bar{\sigma}\bar{a}\bar{\sigma}'\bar{a}',\, \bar{\sigma}''\bar{a}''} =$$

$$= \frac{l''}{g} \sum_{x} D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid t_x\})_{\sigma a\bar{a}\bar{\sigma}} D^{(\star k')(l')}(\{\varphi_x \mid t_x\})_{\sigma' a'\bar{\sigma}'\bar{a}'} \times$$

$$\times D^{(\star k'')(l'')}(\{\varphi_x \mid t_x\})^{*}_{\sigma'' a''\bar{\sigma}''\bar{a}''}, \qquad (60.4)$$

где l'' — размерность представления $D^{(\star k'')(l')}$, а g — порядок пространственной группы.

Согласно (6.33), пространственную группу можно разбить на смежные классы по инвариантной подгруппе трансляций $\mathfrak{T}$:

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{T} + \{\varphi_2 \mid \tau_2\}\mathfrak{T} + \ldots + \{\varphi_h \mid \tau_h\}\mathfrak{T}. \qquad (60.5)$$

Поэтому произвольный элемент $\{\varphi \mid t\}$ можно записать в виде произведения представителя смежного класса $\{\varphi \mid \tau\}$ на чистую трансляцию $\{\varepsilon \mid R_L\}$, так что

$$D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid t_x\})_{\sigma a\bar{\sigma}\, a'} = \sum_{\beta b} D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid \tau_x\})_{\sigma a\beta b} D^{(\star k)(l)}(\{\varepsilon\, R_L\})_{\beta b\bar{\sigma}\bar{a}} =$$

$$= D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid \tau_x\})_{\sigma a\beta b}\, \delta_{\beta\bar{\sigma}}\delta_{b\bar{a}} \exp - i k_{\bar{\sigma}} \cdot R_L =$$

$$= \exp - i k_{\bar{\sigma}} \cdot R_L D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid \tau_x\})_{\sigma a\bar{\sigma}\bar{a}}. \qquad (60.6)$$

Следовательно, соотношение (60.4) можно переписать в виде

$$\sum_{\gamma} U^{\gamma}_{\sigma a\sigma' a',\, \sigma'' a''} U^{\gamma *}_{\bar{\sigma}\bar{a}\bar{\sigma}'\bar{a}',\, \bar{\sigma}''\bar{a}''} =$$

$$= \frac{l}{g} \sum_{R_L} e^{-i\left(k_{\bar{\sigma}} + k'_{\bar{\sigma}'} - k''_{\bar{\sigma}''}\right) R_L} \sum_{X} D^{(\star k)(l)}(\{\varphi_x \mid \tau_x\})_{\sigma a\bar{\sigma}\bar{a}} \times$$

$$\times D^{(\star k')(l')}(\{\varphi_X \mid \tau_X\})_{\sigma' a'\bar{\sigma}'\bar{a}'} D^{(\star k'')(a'')}(\{\varphi_X \mid \tau_X\})_{\sigma'' a''\bar{\sigma}''\bar{a}''}. \qquad (60.7)$$

Используем теперь соотношения (49.12), (49.13), согласно которым

$$\sum_{R_L} \exp - i k \cdot R_L = N\Delta(k), \qquad (60.8\text{а})$$

где

$$\Delta(k) = \begin{cases} 1 & \text{при } k = 2\pi B_H, \\ 0 & \text{в других случаях}, \end{cases} \qquad (60.8\text{б})$$

а N — порядок группы $\mathfrak{T}$.

Следовательно, коэффициенты Клебша — Гордана равны нулю, за исключением случая, когда

$$\boldsymbol{k}_{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{k}'_{\bar{\sigma}'} - \boldsymbol{k}''_{\bar{\sigma}''} = 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{60.8в}$$

Если соотношение (60.8в) выполнено, то

$$\sum_{\gamma} U^{\gamma}_{\sigma a \sigma' a',\, \sigma'' a''} U^{\gamma *}_{\bar{\sigma}\bar{a}\bar{\sigma}'\bar{a}',\, \bar{\sigma}''\bar{a}''} =$$

$$= \frac{l''}{h} \sum_{x} D^{(\star \boldsymbol{k})(l)}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma a \bar{\sigma}\bar{a}} D^{(\star \boldsymbol{k}')(l')}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma' a' \bar{\sigma}' \bar{a}'} \times$$

$$\times D^{(\star \boldsymbol{k}'')(l'')}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})^{*}_{\sigma'' a'' \bar{\sigma}'' \bar{a}''}. \tag{60.9}$$

б. Вычисление блока коэффициентов с индексами (111). Так как выбор канонических векторов $\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'_1 = \boldsymbol{k}'$, $\boldsymbol{k}''_1 = \boldsymbol{k}''$ каждой звезды произволен, удобно считать, что $\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}'_1 - \boldsymbol{k}''_1 = 2\pi \boldsymbol{B}_H$. Тогда имеем $\sigma = \bar{\sigma} = \sigma' = \bar{\sigma}' = \sigma'' = \bar{\sigma}'' = 1$. Соотношение (60.9) принимает вид

$$U_{1a1a',\, 1a''} U^{*}_{1\bar{a}1\bar{a}',\, 1\bar{a}''} = \frac{l''}{h} \sum_{x} D^{(\star \boldsymbol{k})(l)}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{1a1\bar{a}} \times$$

$$\times D^{(\star \boldsymbol{k}')(l')}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{1a'1\bar{a}'} D^{(\star \boldsymbol{k}'')(l'')*}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{1a''1\bar{a}''} =$$

$$= \frac{l''}{h} \sum_{x} \dot{D}^{(\boldsymbol{k})(l)}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{a\bar{a}} \dot{D}^{(\boldsymbol{k}')(l')}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{a'\bar{a}'} \times$$

$$\times \dot{D}^{(\boldsymbol{k}'')(l'')*}(\{\varphi_x | \boldsymbol{\tau}_x\})_{a''\bar{a}''}, \tag{60.10}$$

где суммирование по x ведется по элементам, входящим одновременно в группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$. Точки над матрицами обеспечивают это ограничение.

Для простоты обозначений соотношение (60.10) записано для случая кратности, равной единице. Аналогично можно также проанализировать случай большей кратности [51, 52], однако этого анализа мы здесь не приводим. Назовем коэффициенты Клебша — Гордана, определенные соотношением (60.10), блоком коэффициентов с индексами (111). Их можно получить тем же методом, что и в § 18 [см. (18.15) и далее]. При этом следует выбрать некоторые $a = \bar{a} = a_0$, $a' = \bar{a}' = a'_0$ и $a'' = \bar{a}'' = a''_0$, такие, чтобы правая часть соотношения (60.10) была отлична от нуля. Затем следует фиксировать фазу величин $U_{1a_0,\, 1a'_0,\, 1a''_0}$, считая их действительными, положить $\bar{a} = a_0$, $\bar{a}' = a'_0$ и $\bar{a}'' = a''_0$ и рассмотреть все возможные значения величин a, a' a''. Если

$$(\boldsymbol{k}l\boldsymbol{k}'l' | \boldsymbol{k}''l'') > 1,$$

то следует повторять эту процедуру до тех пор, пока не будет найден блок коэффициентов с индексами (111).

в. Вычисление блока коэффициентов с индексами (σ, σ', σ''). Чтобы вычислить коэффициенты Клебша — Гордана блока с индексами (σ, σ', σ''), поступим следующим образом. Выберем некоторый отличный от нуля элемент $U_{\sigma\bar{a}\sigma'\bar{a}',\,\sigma''\bar{a}''}$ и обозначим его через U'. Тогда имеем

$$U'^{*}U_{\sigma a,\,\sigma'a',\,\sigma''a''}=\frac{l''}{L}\sum_{X}D^{(\star k)\,(l)}(\{\varphi_x\,|\,\boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma a\sigma\bar{a}}\times$$

$$\times D^{(\star k')\,(l')}(\{\varphi_x\,|\,\boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma'a'\sigma'\bar{a}'}D^{(\star k'')\,(l'')*}(\{\varphi_x\,|\,\boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma''a''\sigma''\bar{a}''},\qquad(60.11)$$

где суммирование по X выполняется по элементам, входящим одновременно в группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\sigma)$, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'_{\sigma'})$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}''_{\sigma''})$, т. е.

$$\varphi_x\boldsymbol{k}_\sigma\doteq\boldsymbol{k}_\sigma,\quad \varphi_x\boldsymbol{k}'_{\sigma'}\doteq\boldsymbol{k}'_{\sigma'},\quad \varphi_x\boldsymbol{k}''_{\sigma''}\doteq\boldsymbol{k}''_{\sigma''},\qquad(60.12)$$

где знаком $\doteq$ обозначается равенство с точностью до слагаемого, равного $2\pi\boldsymbol{B}_H$.

Рассмотрим теперь элемент φ_Σ, переводящий блок с индексами (111) в блок с индексами ($\sigma\sigma'\sigma''$), т. е.

$$\varphi_\Sigma\boldsymbol{k}\doteq\boldsymbol{k}_\sigma,\quad \varphi_\Sigma\boldsymbol{k}'\doteq\boldsymbol{k}'_{\sigma'},\quad \varphi_\Sigma\boldsymbol{k}''\doteq\boldsymbol{k}''_{\sigma''}.\qquad(60.13)$$

Тогда

$$\varphi_\Sigma^{-1}\varphi_x\varphi_\Sigma\boldsymbol{k}\doteq\boldsymbol{k},\quad \varphi_\Sigma^{-1}\varphi_x\varphi_\Sigma\boldsymbol{k}'\doteq\boldsymbol{k}',\quad \varphi_\Sigma^{-1}\varphi_x\varphi_\Sigma\boldsymbol{k}''\doteq\boldsymbol{k}''.\qquad(60.14)$$

Следовательно, элемент $\varphi_\Sigma^{-1}\varphi_x\varphi_\Sigma$ принадлежит одновременно группам $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$. Пусть $\varphi_y=\varphi_\Sigma^{-1}\varphi_x\varphi_\Sigma$ или $\varphi_x=\varphi_\Sigma\varphi_y\varphi_\Sigma^{-1}$. Тогда

$$D^{(\star k)\,(l)}(\{\varphi_x\,|\,\boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma a\sigma\bar{a}}=D^{(\star k)\,(l)}\left(\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}\{\varphi_y\,|\,\boldsymbol{\tau}_y\}\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}^{-1}\right)_{\sigma a\sigma\bar{a}}=$$

$$=\dot{D}^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}\{\varphi_y\,|\,\boldsymbol{\tau}_y\}\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}^{-1}\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\}\right)_{a\bar{a}}.\qquad(60.15)$$

Но так как $\varphi_\Sigma\boldsymbol{k}\doteq\boldsymbol{k}_\sigma$, элемент $\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}$ должен принадлежать смежному классу, определяемому элементом σ в разбиении группы $\mathfrak{G}$ по подгруппе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, так что можно записать $\{\varphi_\Sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\Sigma\}=\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\}\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\}$, где $\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\}\in\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда соотношение (60.15) принимает вид

$$D^{(\star k)\,(l)}(\{\varphi_x\,|\,\boldsymbol{\tau}_x\})_{\sigma a\sigma\bar{a}}=D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\}\{\varphi_y\,|\,\boldsymbol{\tau}_y\}\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\}^{-1}\right)_{a\bar{a}}=$$

$$=\left[D^{(k)\,(l)}(\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\})\,D^{(k)\,(l)}(\{\varphi_y\,|\,\boldsymbol{\tau}_y\})\,D^{(k)\,(l)}(\{\varphi_k\,|\,\boldsymbol{t}_k\})^{-1}\right]_{a\bar{a}}.\qquad(60.16)$$

Но для представлений пространственной группы выполняется соотношение

$$D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,t_k\}^{-1}\right)=\omega_{kk^{-1}}\left(D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,t_k\}\right)\right)^{-1}=D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,t_k\}\right)^{-1}. \tag{60.17}$$

Поэтому, так как соответствующий множитель из системы факторов $\omega_{kk^{-1}}=1$, для пространственных групп можно написать

$$D^{(\star k)\,(l)}\left(\{\varphi_x\,|\,\tau_x\}\right)_{\sigma a\sigma\bar{a}}=\bar{D}^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_y\,|\,\tau_y\}\right)_{a\bar{a}}, \tag{60.18}$$

где $\bar{D}^{(k)\,(l)}$ — трансформированное представление $D^{(k)\,(l)}$.

Используя эту же процедуру для представлений $D^{(\star k')\,(l')}(\{\varphi_x\,|\,\tau_x\})$ и $D^{(\star k'')\,(l'')}(\{\varphi_x\,|\,\tau_x\})$, перепишем соотношение (60.11) в виде

$$U'^{*}U_{\sigma a\sigma' a',\,\sigma'' a''}=\frac{l''}{g}\sum_{Y}\bar{D}^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_y\,|\,\tau_y\}\right)_{a\bar{a}}\times$$
$$\times\bar{D}^{(k')\,(l')}\left(\{\varphi_y\,|\,\tau_y\}\right)_{a'\bar{a}'}\bar{D}^{(k'')\,(l'')*}\left(\{\varphi_y\,|\,\tau_y\}\right)_{a''\bar{a}''}. \tag{60.19}$$

Таким образом, мы получили уравнение для блока коэффициентов с индексами (111) для трансформированных представлений $\bar{D}^{(k)\,(l)}$, $\bar{D}^{(k')\,(l')}$ и $\bar{D}^{(k'')\,(l'')}$. Эти коэффициенты связаны с блоком коэффициентов для $D^{(k)\,(l)}$, $D^{(k')\,(l')}$ и $D^{(k'')\,(l'')}$ соотношением (18.29) из гл. 18:

$$U_{\sigma a\sigma' a'\sigma'' a''}=\sum_{bb'b''}\left[D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,t_k\}\right)\otimes D^{(k')\,(l')}\left(\{\varphi_{k'}\,|\,t_{k'}\}\right)\right]_{aa',\,bb'}\times$$
$$\times U_{1b1b',\,1b''}D^{(k'')\,(l'')}\left(\{\varphi_{k''}\,|\,t_{k''}\}\right)^{-1}_{b'',\,a''}, \tag{60.20}$$

или

$$U^{\sigma\sigma'\sigma''}=D^{(k)\,(l)}\left(\{\varphi_k\,|\,t_k\}\right)\otimes D^{(k')\,(l)}\left(\{\varphi_{k'}\,|\,t_{k'}\}\right)U'''D^{(k'')\,(l'')}\left(\{\varphi_{k''}\,|\,t_{k''}\}\right)^{-1}, \tag{60.21}$$

причем элементы $\{\varphi_k\,|\,t_k\}$, $\{\varphi_{k'}\,|\,t_{k'}\}$ и $\{\varphi_{k''}\,|\,t_{k''}\}$ должны удовлетворять соотношениям

$$\begin{aligned}\{\varphi_\Sigma\,|\,\tau_\Sigma\}&=\{\varphi_\sigma\,|\,\tau_\sigma\}\{\varphi_k\,|\,t_k\},\\ \{\varphi_\Sigma\,|\,\tau_\Sigma\}&=\{\varphi_{\sigma'}\,|\,\tau_{\sigma'}\}\{\varphi_{k'}\,|\,t_{k'}\},\\ \{\varphi_\Sigma\,|\,\tau_\Sigma\}&=\{\varphi_{\sigma''}\,|\,\tau_{\sigma''}\}\{\varphi_{k''}\,|\,t_{k''}\}.\end{aligned} \tag{60.22}$$

Подводя итоги, мы видим, что полный набор коэффициентов Клебша — Гордана для пространственной группы определяется с помощью соотношения (60.10) для блока с индексами (111) и с помощью соотношения (60.21) для остальных блоков, причем элементы $\{\varphi_k | \boldsymbol{t}_k\}$, $\{\varphi_{k'} | \boldsymbol{t}_{k'}\}$ и $\{\varphi_{k''} | \boldsymbol{t}_{k''}\}$ определяются соотношениями (60.13) и (60.22). Отметим, что в этом методе не требуется знания представлений $D^{(^\star k)(l)}$ всей пространственной группы. Достаточно знать представления групп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$. Следовательно, эта процедура получения коэффициентов Клебша — Гордана близка к методам подгруппы, описанным ниже в § 61—65. Можно рекомендовать читателю вновь обратиться к материалу этого параграфа после прочтения § 65.

ГЛАВА 7

Коэффициенты приведения для пространственных групп. Метод подгруппы

§ 61. Введение

Теперь мы рассмотрим другой возможный, более традиционный метод получения коэффициентов приведения для пространственных групп. Этот метод называется методом подгруппы.

Основное различие между методом полной группы и методом подгруппы касается той наиболее существенной части преобразований, которая необходима для нахождения коэффициентов приведения. В методе полной группы, обсуждаемом в § 52—60, рассматривается полная пространственная группа $\mathfrak{G}$ и ее неприводимые представления $D^{(\star k)(m)}$. Эти представления и используются для нахождения соответствующих коэффициентов приведения. Метод подгруппы сводится, насколько это возможно, к изучению только одной подгруппы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и ее допустимых неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$. Поскольку представления $D^{(\star \boldsymbol{k})(m)}$ можно найти методом индукции из представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$, оба метода должны приводить, если они используются правильно, к эквивалентным результатам.

В последующих параграфах мы детально исследуем метод подгруппы и сравниваем его затем с методом полной группы.

§ 62. Полная система характеров подгруппы

Метод подгруппы основан на рассмотрении *определенной* звезды $^\star\boldsymbol{k}''$, возникающей в результате разложения, и, более того, на рассмотрении отдельного волнового вектора звезды $^\star\boldsymbol{k}''$. Пусть звезда $^\star\boldsymbol{k}''$ задана каноническим вектором $\boldsymbol{k}''$. Спрашивается: какое значение m'' возникает при выполнении приведения для данного $\boldsymbol{k}''$, если заданы соответствующие части двух представлений $D^{(\star \boldsymbol{k})(m)}$ и $D^{(\star \boldsymbol{k}')(m')}$, являющихся сомножителями? Чтобы проанализировать этот вопрос, требуется привести все рассмотрение предыдущих параграфов к форме, в которой основную роль будут играть отдельные подгруппы группы $\mathfrak{G}$ и отдельные блочные матрицы, а также характеры и отдельные векторные подпространства.

Итак, рассмотрим представление $D^{(\star \boldsymbol{k})(m)}$. Поскольку при получении правил отбора мы ограничимся рассмотрением характеров, нам требуется рассмотреть для этого представления только диагональные блочные матрицы. Заметим, что для данного произвольного элемента $\{\varphi_p|t_p\}$ группы $\mathfrak{G}$ диагональные блочные матрицы совпадают с матрицами с точкой:

$$D^{(^\star k)(m)}(\{\varphi_p|t_p\})_{\sigma\sigma}=\dot{D}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma|t_\sigma\}^{-1}\{\varphi_p|t_p\}\{\varphi_\sigma|t_\sigma\}\right). \quad (62.1)$$

Таким образом, матрица $\dot{D}^{(k)(m)}(\{\varphi_p|t_p\})$ «принадлежит» тем строкам и столбцам, которым соответствует блоховская функция с волновым вектором k, тогда как матрица $\dot{D}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma|t_\sigma\}^{-1}\{\varphi_p|t_p\}\{\varphi_\sigma|t_\sigma\}\right)$ «принадлежит» строкам и столбцам, которым соответствует блоховская функция с волновым вектором k_σ. Это утверждение относится к полным представлениям $D^{(^\star k')(m')}$ и $D^{(^\star k'')(m'')}$. Аналогично можно считать, что любой член (характер) в (37.3) относится к определенному волновому вектору. Таким способом можно рассматривать различные формы заданного неприводимого представления $D^{(^\star k)(m)}$ и то, как оно «проектируется» на подпространства разных волновых векторов, принадлежащих звезде $^\star k$.

Рассмотрим далее группы $\mathfrak{G}(k')$ и $\mathfrak{G}(k'')$, соответствующие волновым векторам k' и k'' соответственно из звезд $^\star k'$ и $^\star k''$. Запишем

$$\mathfrak{G}(k')=\mathfrak{T}+\ldots+\left\{\varphi_{l_{\lambda'}}\middle|\tau_{l_{\lambda'}}\right\}\mathfrak{T}+\ldots+\left\{\varphi_{l_{k'}}\middle|\tau_{l_{k'}}\right\}\mathfrak{T}. \quad (62.2)$$

Разобьем группу $\mathfrak{G}$ на смежные классы по подгруппе $\mathfrak{G}(k')$:

$$\mathfrak{G}=\mathfrak{G}(k')+\ldots+\{\varphi_{\sigma'}|\tau_{\sigma'}\}\mathfrak{G}(k')+\ldots+\{\varphi_{s'}|\tau_{s'}\}\mathfrak{G}(k'). \quad (62.3)$$

Аналогичным образом

$$\mathfrak{G}(k'')=\mathfrak{T}+\ldots+\left\{\varphi_{l_{\lambda''}}\middle|\tau_{l_{\lambda''}}\right\}\mathfrak{T}+\ldots+\left\{\varphi_{l_{k''}}\middle|\tau_{l_{k''}}\right\}\mathfrak{T} \quad (62.4)$$

и

$$\mathfrak{G}=\mathfrak{G}(k'')+\ldots+\{\varphi_{\sigma''}|\tau_{\sigma''}\}\mathfrak{G}(k'')+\ldots+\{\varphi_{s''}|\tau_{s''}\}\mathfrak{G}(k''). \quad (62.5)$$

Обратим внимание на принятые в (62.2)—(62.5) обозначения, а также сравним эти соотношения с (36.1) и (36.2). Пусть k_σ и k'_σ — любые два волновых вектора, принадлежащие соответственно звездам $^\star k$ и $^\star k'$, причем

$$k_\sigma+k'_\sigma=k'' \quad (\text{с точностью до } 2\pi B_H). \quad (62.6)$$

(Вообще говоря, векторы k_σ и $k'_{\sigma'}$ не являются каноническими волновыми векторами своих звезд в случае, когда вектор k'' является таким вектором.) Рассмотрим далее всю совокупность независимых векторов k_σ и $k'_{\sigma'}$, сумма которых приводит к заданному k''. Эти векторы можно получить, действуя на данный вектор k_σ из (62.1) всеми поворотами из группы $\mathfrak{G}(k'')$. Тогда получим совокупность векторов

$$\varphi_{l_{\lambda''}} \cdot \boldsymbol{k}_\sigma, \quad \lambda'' = 1, \ \dots \ k''. \tag{62.7}$$

Однако для каждого элемента $\{\varphi_{l_{\lambda''}} | \boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}$, общего для групп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\sigma)$, имеем

$$\varphi_{l_{\lambda''}} \cdot \boldsymbol{k}_\sigma = \boldsymbol{k}_\sigma \quad (\text{с точностью до } 2\pi \boldsymbol{B}_H), \tag{62.8}$$

так что выделенного вектора $\boldsymbol{k}_\sigma$ не получается.

Очевидно, поскольку λ'', согласно (62.7), принимает значения $1, \dots, k''$, мы получим $l_{k''}/n_{k''k_\sigma}$ различных векторов. Из (62.8) следует, что каждому такому волновому вектору звезды $^\star\boldsymbol{k}$ должен соответствовать волновой вектор звезды $^\star\boldsymbol{k}'$; тогда имеем

$$\varphi_{l_{\lambda''}} \cdot \boldsymbol{k}'_{\sigma'} = \boldsymbol{k}'_{\sigma'} \quad (\text{с точностью до } 2\pi \boldsymbol{B}_H), \tag{62.9}$$

причем элемент $\{\varphi_{l_{\lambda''}} | \boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}$ входит также в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'_{\sigma'})$. Число $n_{k''k_\sigma}$ равно порядку группы, образованной пересечением факторгрупп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')/\mathfrak{T}$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\sigma)/\mathfrak{T}$. Иначе говоря, оно равно числу поворотных элементов, общих для обеих факторгрупп.

Рассмотрим снова выражение (53.8) для характера представления прямого произведения, вычисленного для элемента $\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}$ группы $\mathfrak{G}$:

$$\chi^{(^\star\boldsymbol{k} \otimes {}^\star\boldsymbol{k}')(m \otimes m')}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}) = \chi^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}) \cdot \chi^{(^\star\boldsymbol{k}')(m')}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}). \tag{62.10}$$

Входящая в (62.10) трансляция $\boldsymbol{t}_p$ может быть трансляцией общего вида, состоящей из трансляции на вектор решетки и нетривиальной трансляции. Соотношение (62.10) можно переписать через характеры с точкой:

$$\begin{aligned} &\chi^{(^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\})\, \chi^{(^\star\boldsymbol{k}')(m')}(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}) = \\ &= \sum_{\sigma=1}^{s} \sum_{\sigma'=1}^{s'} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}\right) \times \\ &\qquad \times \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m')}\left(\{\varphi_{\sigma'} | \boldsymbol{t}_{\sigma'}\}^{-1} \cdot \{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\} \cdot \{\varphi_{\sigma'} | \boldsymbol{t}_{\sigma'}\}\right). \end{aligned} \tag{62.11}$$

Рассмотрим теперь только те произведения в (62.11), для которых сумма волновых векторов удовлетворяет соотношению (62. 6). Эту совокупность произведений можно записать, например, в виде

$$\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_p^\sigma\})\, \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m')}(\{\varphi_p^{\sigma'}\})\, \delta(\boldsymbol{k}'' - \boldsymbol{k}_\sigma - \boldsymbol{k}'_{\sigma'}), \tag{62.12}$$

где

$$\{\varphi_p^\sigma\} \equiv \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}. \qquad (62.13)$$

Аналогичное соотношение можно выписать и для σ'. В (62.12)

$$\delta(\boldsymbol{k}'' - \boldsymbol{k}_\sigma - \boldsymbol{k}'_{\sigma'}) = \\ = \begin{cases} 1 & \text{для } \boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'} = \boldsymbol{k}'' \text{ (с точностью до } 2\pi \boldsymbol{B}_H), \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \qquad (62.14)$$

Запишем (62.12) в более удобной для нас форме

$$\left(\frac{1}{n_{k''k_\sigma}}\right) \sum_{\lambda''=1}^{k''} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma}\}\right) \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m')}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma'}\}\right), \qquad (62.15)$$

где $\left(n_{k''k_\sigma}\right)$ — определенный ранее множитель, учитывающий наличие лишних членов, а величина

$$\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma}\} \equiv \left(\{\varphi_{l_{\lambda''}} | \boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\} \cdot \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\} \cdot \{\varphi_{l_{\lambda''}} | \boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\} \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{t}_\sigma\}\right) \qquad (62.16)$$

представляет собой, как видно из (62.16), сопряженный элемент. Сумма в (62.15) вычисляется по всем поворотным элементам группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')/\mathfrak{T}$.

Сумма в (62.15) относится к системе характеров, которая является «полной» по отношению к подгруппе. В выражении (62.15) содержатся все вклады в характер всех представлений m'' с заданным волновым вектором $\boldsymbol{k}''$, которые возникают при вычислении прямого произведения соответствующих частей представлений $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ и $D^{(\star\boldsymbol{k}')(m)}$.

§ 63. Коэффициенты приведения для подгруппы

Так как выражение (62.15) дает полную систему характеров для прямой суммы допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$, то, согласно теореме Машке, эта система характеров приводима. Чтобы подчеркнуть отличие этого случая от рассматривавшихся ранее случаев разложения прямого произведения полных представлений, мы введем специальное обозначение $\left(\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\} mm' | \boldsymbol{k}''m''\right)$ для коэффициентов приведения для подгрупп. Их определение следует из (62.15):

$$\frac{1}{n_{k''k_\sigma}} \sum_{\lambda''=1}^{k''} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma}\}\right) \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m')}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma'}\}\right) = \\ = \sum_{m''} \left(\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\} mm' | \boldsymbol{k}''m''\right) \chi^{(\boldsymbol{k}'')(m'')}\left(\{\varphi_p | \boldsymbol{t}_p\}\right). \qquad (63.1)$$

Обозначение $(\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\} mm' \mid \boldsymbol{k}''m'')$ должно отражать то обстоятельство, что для получения заданного вектора $\boldsymbol{k}''$ мы составляем комбинации всех векторов $\boldsymbol{k}_\sigma$ и $\boldsymbol{k}_{\sigma'}$. Как и в методе полной группы, можно непосредственно решить уравнение (63.1), рассматривая соответствующую систему линейных неоднородных уравнений (по одному уравнению для каждого элемента) и находя ее решение. С другой стороны, мы можем использовать условия ортонормированности и полноты системы характеров для группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$ или $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}'')$. Тогда получим

$$(\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\} mm' \mid \boldsymbol{k}''m'') =$$
$$= \frac{1}{g(\boldsymbol{k}'')} \frac{1}{n_{k''k_\sigma}} \sum_p \sum_{\lambda''=1}^{k''} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma}\}\right) \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')(m')}\left(\{\varphi_p^{l_{\lambda''}\sigma'}\}\right) \times$$
$$\times \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}'')(m'')}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}_p\})^*. \qquad (63.2)$$

В соотношении (63.2) суммирование по p можно выполнить по всем элементам группы $\mathfrak{G}$; тогда характеры с точкой обеспечивают выполнение всех необходимых ограничений; $g(\boldsymbol{k}'')$ — порядок группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$ или группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k}'')$ в зависимости от того, включены ли в суммирование трансляции.

Отметим необычный вид аргументов (элементов симметрии), входящих в характеры в (63.2). Важно отметить, что соотношение (63.2) выводится из соотношения для матриц, каждая из которых соответствует одному и тому же абстрактному элементу симметрии $\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}_p\}$. Эти матрицы относятся к полной группе, а их характеры удовлетворяют соотношениям типа (37.3).

Зададим теперь следующий вопрос. Пусть выбран некоторый другой волновой вектор звезды $^*\boldsymbol{k}''$, отличный от того, с которого начиналось наше рассмотрение. Какая связь существует между получаемыми при этом коэффициентами приведения для подгруппы и коэффициентами из (63.2)? Рассмотрим выбранный волновой вектор $\boldsymbol{k}''_{\sigma''} \equiv \varphi_{\sigma''} \cdot \boldsymbol{k}''$, входящий, очевидно, в звезду $^*\boldsymbol{k}''$. Тогда, если $\boldsymbol{k}_\sigma$ и $\boldsymbol{k}'_{\sigma'}$ представляют собой пару волновых векторов, удовлетворяющих (62.6), то

$$\varphi_{\sigma''} \cdot (\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}) = \varphi_{\sigma''} \cdot \boldsymbol{k}'' \qquad (63.3)$$

или

$$\boldsymbol{k}_{\sigma''\sigma} + \boldsymbol{k}'_{\sigma''\sigma'} = \boldsymbol{k}''_{\sigma''}. \qquad (63.4)$$

Далее, если элемент $\{\varphi_{l_{\lambda''}} \mid \boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}$ входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$, то из соотношения

$$\varphi_{l_{\lambda''}} \cdot \boldsymbol{k}'' = \boldsymbol{k}'' \quad (\text{с точностью до } 2\pi\boldsymbol{B}_H) \qquad (63.5)$$

следует

$$\varphi_{\sigma''}\cdot\varphi_{l_{\lambda''}}\cdot\varphi_{\sigma''}^{-1}\cdot\varphi_{\sigma''}\cdot\boldsymbol{k}''=\varphi_{\sigma''}\cdot\boldsymbol{k}''\quad(\text{с точностью до } 2\pi\boldsymbol{B}_H). \tag{63.6}$$

Иначе говоря, элемент

$$\{\varphi_{\sigma''}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma''}\}\cdot\{\varphi_{l_{\lambda''}}\,|\,\boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}\cdot\{\varphi_{\sigma''}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma''}\}^{-1}\equiv\{\varphi_{l_{\lambda''}}^{\bar{\sigma}''}\} \tag{63.7}$$

входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}''_{\sigma''})$.

Следовательно, можно преобразовать (63.1) таким образом, чтобы оно соответствовало новой постановке задачи. Имеем

$$\frac{1}{\left(n_{k''_{\sigma''}k_{\sigma''\sigma}}\right)}\sum_{l''_{\lambda}}\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})\,(m)}\left(Z^{-1}\{\varphi_p\,|\,\boldsymbol{t}_p\}\,Z\right)\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')\,(m')}\left(Y^{-1}\{\varphi_p\,|\,\boldsymbol{t}_p\}\,Y\right)=$$

$$=\sum_{m''}\left(\{\boldsymbol{k}_{\sigma''\sigma}+\boldsymbol{k}'_{\sigma''\sigma'}\}\,mm'\,|\,\boldsymbol{k}''_{\sigma''}m''\right)\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}'')\,(m'')}\left(\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}\right), \tag{63.8}$$

где

$$Z\equiv\{\varphi_{l_{\lambda''}}^{\bar{\sigma}''}\}\cdot\{\varphi_{\sigma''}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma''}\}\cdot\{\varphi_{\sigma}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma}\},$$

$$Y\equiv\{\varphi_{l_{\lambda''}}^{\bar{\sigma}''}\}\cdot\{\varphi_{\sigma''}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma''}\}\cdot\{\varphi_{\sigma'}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma'}\},$$

а величины $\{\varphi_{l_{\lambda''}}^{\bar{\sigma}''}\}$ определяются согласно (63.7).

Чтобы доказать независимость коэффициентов приведения для подгруппы от того, для какого из векторов звезды $^*\boldsymbol{k}''$ проводится рассмотрение, необходимо показать, что для любой величины σ'' выполняется соотношение

$$\left(\{\boldsymbol{k}_{\sigma}+\boldsymbol{k}'_{\sigma'}\}\,mm'\,|\,\boldsymbol{k}''m''\right)=\left(\{\boldsymbol{k}_{\sigma''\sigma}+\boldsymbol{k}'_{\sigma''\sigma'}\}\,mm'\,|\,\boldsymbol{k}''_{\sigma''}m''\right) \tag{63.9}$$

Сравнивая (63.1) и (63.8), видим, что

$$n_{k''k_{\sigma}}=n_{k''_{\sigma''}k_{\sigma''\sigma}}, \tag{63.10}$$

так как порядок пересечения групп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')/\mathfrak{T}$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_{\sigma})/\mathfrak{T}$ совпадает с порядком пересечения групп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}''_{\sigma''})/\mathfrak{T}$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_{\sigma''\sigma})/\mathfrak{T}$. (Эти подгруппы являются попарно-сопряженными.) Вычисляя затем произведение элементов в (63.8), получаем

$$\frac{1}{\left(n_{k''k_{\sigma}}\right)}\sum_{l_{\lambda''}}\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}^{l_{\lambda''}\sigma}\}\right)\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}')\,(m')}\left(\{\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}^{l_{\lambda''}\sigma'}\}\right)=$$

$$=\sum_{m''}\left(\{\boldsymbol{k}_{\sigma''\sigma}+\boldsymbol{k}'_{\sigma''\sigma'}\}\,mm'\,|\,\boldsymbol{k}''_{\sigma''}m''\right)\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k}'')\,(m'')}\left(\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}\right), \tag{63.11}$$

где

$$\{\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}^{l_{\lambda''}\sigma}\}\equiv\left[\{\varphi_{l_{\lambda''}}\,|\,\boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}\cdot\{\varphi_{\sigma}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma}\}\right]^{-1}\{\varphi_p^{\bar{\sigma}''}\}\left[\{\varphi_{l_{\lambda''}}\,|\,\boldsymbol{t}_{l_{\lambda''}}\}\cdot\{\varphi_{\sigma}\,|\,\boldsymbol{t}_{\sigma}\}\right].$$

Однако при сравнении (63.11) и (63.1) следует помнить, что в качестве произвольного элемента в (63.1) выбран элемент $\{\varphi_p|t_p\}$. Вместо него точно так же можно было бы взять элемент $\{\varphi_p^{\sigma''}\}$, поэтому соотношения (63.1) и (63.11) тождественны.

Следовательно, мы установили, что возникают одинаковые коэффициенты приведения для подгрупп независимо от того, какой из лучей входящей в результат звезды был выбран. Для такого рассмотрения очень важно знать, какой вид имеет неприводимое представление $D^{(\star k)(m)}$ в различных подгруппах $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \ldots, \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\sigma), \ldots, \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_s)$.

Мы закончим этот параграф следующим замечанием. Наше доказательство соотношения (63.8) основано на прямом сравнении уравнений (63.1) и (63.11), определяющих коэффициенты приведения для подгрупп. Мы не делали никаких предположений о равенстве отдельных характеров (например, $\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}_{l_\lambda}\}\right)$ и $\dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{t}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_\sigma|\boldsymbol{t}_\sigma\}\right)$, поскольку, как показано сразу после соотношения (37.5), отдельные характеры могут быть и не равны друг другу.

§ 64. Сравнение метода полной группы и метода подгруппы

При определении коэффициентов приведения $({}^\star\boldsymbol{k}m{}^\star\boldsymbol{k}'m'|{}^\star\boldsymbol{k}''m'')$ методом полной группы следует предварительно построить таблицы характеров полной группы. Таким образом, мы будем располагать характерами $\chi^{(\star k)(m)}$ $(\{\varphi_p|t_p\})$ каждого элемента пространственной группы $\mathfrak{G}$ для любого неприводимого представления. Тогда разложение прямого произведения двух неприводимых представлений полной пространственной группы на неприводимые составляющие можно выполнить так же, как для любой конечной группы. Коэффициенты приведения для полной группы можно получить прямо из соотношений (55.4) или (55.5). В первом случае неизвестными являются коэффициенты (55.2). Во втором случае для суммирования по всем элементам группы используется «группа приведения». Метод группы приведения представляет собой некоторый строгий прием, использующий матричные группы $D^{(\star k)(m)}$, $D^{(\star k')(m')}$ и $D^{(\star k'')(m'')}$, гомоморфные группе $\mathfrak{G}$. Этим методом проводится суммирование по всем элементам группы $\mathfrak{G}$. Вычисление приведения по формулам (55.4) и (55.5) не может дать неоднозначный результат, так как все суммы, так же как и остальные величины (характеры, элементы групп) в этих суммах, определены однозначно по отношению к полной группе $\mathfrak{G}$.

В методе полной группы все состояния физической системы классифицируются по неприводимым представлениям полной пространственной группы, которые они осуществляют, т. е. все возможные состояния рассматриваются в неприводимом линейном векторном пространстве $\Sigma^{(\star k)(m)}$.

Применение коэффициентов приведения для полной группы означает, что мы используем полные неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$. В частности, это значит, что при выполнении разложения может возникать и обычно возникает больше чем одна звезда $\star k''$.

Выполнение расчета методом полной группы включает построение по формулам (37.3) или (49.3) набора таблиц характеров полной группы. Это предполагает, что выполнено приведение в каждой группе $\mathfrak{G}(k)$ канонического вектора k каждой звезды. После того как построены таблицы и выполнено разложение, мы получим все неприводимые представления, содержащиеся в прямом произведении $D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k')(m')}$. В общем случае конечный результат содержит полные представления, относящиеся к нескольким разным звездам.

Недостаток метода состоит в том, что приходится строить заранее полные таблицы характеров, а также в том, что для получения коэффициентов приведения необходимо произвести полное разложение. К достоинствам метода можно отнести возможность проверки результата (т. е. полного набора коэффициентов), используя стандартные соотношения ортонормированности, полученные в § 48 и 49.

В противоположность этому при расчетах методом подгруппы следует построить величины, входящие в выражение (62.15). Это те же характеры с точкой, которые возникают в таблице для полной группы, однако в принципе не все они входят в (62.15). Только сопряженные элементы $\left\{\varphi_p^{l\lambda''\sigma}\right\}$ [см. (62.16)] группы $\mathfrak{G}(k)$ имеют характеры, отличные от нуля, и входят в (62.15). Их, разумеется, меньше, чем элементов в группе $\mathfrak{G}$. Поэтому в (63.2) суммирование ведется по меньшему числу элементов.

В методе подгруппы основное внимание сосредоточено на выбранном векторе k'' и рассматриваются только соответствующие ему множители и коэффициенты. Следовательно, в сумму (63.2) входит меньшее число элементов, чем в (55.2). В этом смысле метод подгруппы оказывается более экономичным, чем метод полной группы. Естественно, если метод подгруппы используется для получения всех неприводимых представлений $D^{(\star k'')(m'')}$, возникающих при вычислении прямого произведения всех пар $D^{(k_\sigma)(m)}$ и $D^{\left(k'_{\sigma'}\right)(m')}$, то объем вычислений и конечные результаты оказываются теми же, что и для метода полной группы.

При сравнении структуры выражений (63.2) и (55.5) немедленно выявляется более серьезное затруднение, возникающее только в методе подгруппы. Для метода подгруппы совершенно необходимо, чтобы, например, в слагаемых суммы (63.2) были использованы правильные части полных представлений. Однако вследствие сложности структуры представлений выделение правильных частей, которые будут затем использованы для получения «полной» системы характеров, показанной в (63.2), совсем не тривиально. Иначе говоря, неприводимое представление $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$, согласно (33.1), содержит блок с индексами $\sigma = 1$, $\tau = 1$, равный $\left(D^{(\star k)(m)}\right)_{11} = D^{(k)(m)}$, и соответствующий допустимым неприводимым представлениям группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, где $\boldsymbol{k}$ — канонический волновой вектор звезды $^\star\boldsymbol{k}$. Если рассматривать то же представление по отношению к вектору $\boldsymbol{k}_\sigma$ (другому лучу той же звезды), то структура этого представления становится сложной ввиду необходимости преобразования элементов симметрии, входящих в матрицы вида (36.14) в качестве аргументов. В принципе выполнение таких вычислений в методе подгруппы не вызывает затруднений, но на практике важно использовать правильные элементы и правильную форму матриц.

Методы полной группы и подгруппы можно сопоставить другим способом, сравнивая соответствующие векторные пространства. Метод полной группы использует полные неэквивалентные неприводимые векторные пространства и их произведения, например

$$\Sigma^{(\star k)(m)} \otimes \Sigma^{(\star k')(m')}. \tag{64.1}$$

Полное пространство произведения (64.1) разлагается на прямую сумму полных неприводимых векторных пространств, т. е.

$$\Sigma^{(\star k)(m)} \otimes \Sigma^{(\star k')(m')} = \sum_{\star k'' m''} \otimes \left(^\star \boldsymbol{k} m\, ^\star \boldsymbol{k}' m' \mid {}^\star \boldsymbol{k}'' m''\right) \Sigma^{(\star k'')(m'')}. \tag{64.2}$$

В методе подгруппы рассматриваются только те подпространства, произведение которых дает требуемое подпространство. Иначе, используя прежние обозначения,

$$\frac{1}{\left(n_{k'' k_\sigma}\right)} \sum_{\lambda''=1}^{k''} \left(\Sigma^{\left(\varphi_{\lambda''} \cdot k_\sigma\right)(m)} \otimes \Sigma^{\left(\varphi_{\lambda''} \cdot k'_{\sigma'}\right)(m')}\right) =$$

$$= \sum_{m''} \left(\left\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\right\} m m' \mid \boldsymbol{k}'' m''\right) \Sigma^{(k'')(m'')}. \tag{64.3}$$

Предположим теперь, что при конкретном применении метода малой группы ошибочно пропущены некоторые из произведений [в левой части (64.3)], которые приводили бы к полному представлению (подпространству) $\Sigma^{(k'')(\mu'')}$. Эта ошибка может остаться незамеченной, так как единственный имеющийся для этого метода способ проверки полноты заключается в том, что представления произведений, входящие в левую часть равенства (64.3), должны также возникать и в правой части (64.3). Разумеется, если бы все вычисления выполнялись безошибочно, об этом не стоило бы и упоминать. В методе полной группы сделать такую ошибку, т. е. пропустить часть векторных пространств, абсолютно невозможно. На каждой стадии вычислений соотношения полноты и ортонормированности для полных неприводимых представлений одной и той же группы $\mathfrak{G}$ обеспечивают проверку правильности построения таблицы характеров и правильности разложения. Дело обстоит таким же образом, как и для широко известных конечных групп.

Наконец, можно сравнить методы полной группы и подгруппы, демонстрируя очевидную связь между совокупностью коэффициентов приведения для подгруппы и коэффициентами приведения для полной группы. Ясно, что при фиксированных $^\star\boldsymbol{k}''m''$ коэффициенты $(^\star\boldsymbol{k}m\,^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'')$ показывают, сколько раз представление $D^{(^\star\boldsymbol{k}'')\,(m'')}$ входит в разложение. Однако если в разложении содержится полное представление, то столько же раз входит и представление $D^{(\boldsymbol{k}'')\,(m'')}$ подгруппы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$. Поэтому коэффициент для подгруппы, связывающий все возможные представления $D^{(\boldsymbol{k}_\sigma)\,(m)}$ и $D^{(\boldsymbol{k}'_{\sigma'})\,(m')}$, которые могут дать для выбранного $\boldsymbol{k}''$ все результирующие представления $D^{(\boldsymbol{k}'')\,(m)}$, должен быть равен соответствующему коэффициенту для полной группы. Таким образом, истолковывая каждый из коэффициентов соответствующим образом (как коэффициент приведения для подгруппы или для полной группы), можно записать

$$(^\star\boldsymbol{k}m\,^\star\boldsymbol{k}'m'\,|\,^\star\boldsymbol{k}''m'') = (\{\boldsymbol{k}_\sigma + \boldsymbol{k}'_{\sigma'}\}\,mm'\,|\,\boldsymbol{k}''m'').$$

§ 65. Коэффициенты приведения. Метод малой группы

В § 40 отмечалось, что запрещенные неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})\,(\mu)}$ малой группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ представляют собой представления, соответствующие набору волновых векторов (40.7)

$$\boldsymbol{k},\ 2\boldsymbol{k},\ \ldots,\ t\boldsymbol{k}. \tag{65.1}$$

Это обстоятельство было впервые отмечено в связи с вопросом о коэффициентах приведения для произведения пространственных групп Элиотом и Лаудоном [34]. В настоящем параграфе мы вслед за этими авторами отмечаем важность указанного выше обстоятельства для разложения прямого произведения неприводимых представлений, соответствующих волновым векторам из набора (65.1). Элиот и Лаудон предложили использовать метод малой группы также и для анализа прямого произведения представлений с волновыми векторами из разных наборов. Теперь ясно, что эту задачу следует рассматривать более общим методом подгруппы, изложенным в предшествующих параграфах, или методом полной группы.

Так же как и в § 40, будем считать, что полный набор неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ и $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ известен. Пусть нам требуется определить представления, входящие в произведение представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m')}$. Ясно, что это представление будет содержать представления с волновым вектором $2\boldsymbol{k}$. Иначе говоря, векторные пространства

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} \equiv \left\{\psi_1^{(\boldsymbol{k})}, \ldots, \psi_{l_m}^{(\boldsymbol{k})}\right\} \tag{65.2}$$

и

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m')} \equiv \left\{\psi_1'^{(\boldsymbol{k})}, \ldots, \psi_{l_{m'}}'^{(\boldsymbol{k})}\right\} \tag{65.3}$$

при перемножении дают векторное пространство

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k})(m\otimes m)} \equiv \left\{\psi_1^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi_1'^{(\boldsymbol{k})}, \ldots, \psi_{l_m}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\psi_{l_{m'}}'^{(\boldsymbol{k})}\right\}, \tag{65.4}$$

очевидно содержащее функции из пространства $\Sigma^{(2\boldsymbol{k})}$. Поэтому представление

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes D^{(\boldsymbol{k})(m')} \tag{65.5}$$

и соответствующая система характеров

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes \chi^{(\boldsymbol{k})(m')} \tag{65.6}$$

приводимы.

Найденные представления малой группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ составляют полный набор неэквивалентных неприводимых представлений этой группы, некоторые из которых соответствуют волновым векторам $2\boldsymbol{k}, \ldots$. Представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, относящиеся к вектору $2\boldsymbol{k}$, легко выделить из полной системы характеров, так как, если выполняется соотношение

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L(\overline{\boldsymbol{k}})\}) = \exp - i(2\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_L(\overline{\boldsymbol{k}}), \tag{65.7}$$

то следует считать, что все представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ соответствует вектору $2\boldsymbol{k}$. Проверяя аналогичным образом другие характеры для данной трансляции, можно выделить представления, относящиеся к другим векторам из набора (65.1). Следовательно, для каждого индекса μ характера $\chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ можно провести сопоставление вида

$$\mu_1 \approx 2\boldsymbol{k}, \ \ldots, \ \mu_\rho \approx t\boldsymbol{k}. \tag{65.8}$$

Тогда разложение произведения (65.6) можно выполнить следующим образом. Определим коэффициенты приведения для (65.6) соотношением

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)} \otimes \chi^{(\boldsymbol{k})(m')} = \sum_{\mu \approx 2\boldsymbol{k}} (mm' \mid \mu)\, \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}, \tag{65.9}$$

где суммирование выполняется по тем индексам μ, которые соответствуют вектору $2\boldsymbol{k}$, т. е. именно по запрещенным значениям μ при волновом векторе $\boldsymbol{k}$. Тогда эти коэффициенты можно записать в виде

$$(mm' \mid \mu) = \frac{1}{g_{\Pi}} \sum_{\Pi(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) \, \chi^{(\boldsymbol{k})(m')}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\}) \times \\ \times \chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}(\varphi)\})^{*}. \quad (65.10)$$

Суммирование в (65.10) выполняется по всем элементам группы $\Pi(\boldsymbol{k})$, а индекс μ соответствует вектору $2\boldsymbol{k}$. Порядок группы $\Pi(\boldsymbol{k})$ обозначен через g_{Π}. Поскольку в этом методе принимается, что мы располагаем полной таблицей характеров, вычисления по формуле (65.10) просты.

После того как коэффициенты $(mm' \mid \mu)$ найдены, остается связать их с допустимыми неприводимыми представлениями малой группы $\Pi(2\boldsymbol{k})$. Постараемся быть точными в этом вопросе. Поскольку представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ и $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ относятся к одной и той же группе $\Pi(\boldsymbol{k})$, можно построить системы характеров $\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}$ и $\chi^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ и непосредственно использовать их для разложения прямого произведения. Поэтому по отношению к группе $\Pi(\boldsymbol{k})$ коэффициенты $(mm' \mid \mu)$ определены вполне точно. Однако установление связи представления $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ и, следовательно, коэффициентов $(mm' \mid \mu)$ с допустимым неприводимым представлением $D^{(p\boldsymbol{k})(m)}$ с волновым вектором $p\boldsymbol{k}$ возможно только тогда, когда представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ является неприводимым представлением $D^{(p\boldsymbol{k})(m'')}$ группы $\Pi(p\boldsymbol{k})$. В этом случае коэффициенты (65.10) представляют собой коэффициенты приведения для подгруппы и, очевидно, показывают, сколько раз допустимое неприводимое представление $D^{(2\boldsymbol{k})(m'')}$ содержится в произведении (65.5).

Если представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$, рассматриваемое как представление группы $\Pi(p\boldsymbol{k})$, не является неприводимым или если требуется получить методом подгруппы коэффициенты приведения для произведения представлений, соответствующих векторов из различных наборов, то необходимо использовать более общие методы, изложенные в предыдущих параграфах.

Приведенная выше иллюстрация метода для случая, когда произведение представлений соответствует вектору $2\boldsymbol{k}$, относится также к разложению представлений вида $[D^{(\boldsymbol{k})(m)}]_3$ и т. п. И снова, за исключением случая, когда представление $D^{(\boldsymbol{k})(\mu)}$ неприводимо, следует применять более общие методы подгруппы, рассмотренные в предыдущих параграфах.

ГЛАВА 8

Пространственные группы и классическая теория колебаний кристаллической решетки

§ 66. Введение

Эта глава содержит применения теории пространственных групп к классической теории колебаний кристаллической решетки [4—6, 59—64]. Основной эффект от использования полной пространственной группы симметрии состоит в упрощении решения секулярного уравнения для определения частот нормальных колебаний и соответствующих собственных векторов в гармоническом приближении. Секулярное уравнение оказывается факторизованным согласно неприводимым представлениям рассматриваемой пространственной группы $\mathfrak{G}$. Факторизация по пространственной симметрии приводит к появлению пространственных координат, зависящих от волнового вектора $\boldsymbol{k}$ неприводимого представления. Учет полной симметрии обеспечивает дальнейшее уточнение свойств отдельных собственных векторов, преобразующих согласно допустимым представлениям $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, т. е. по определенной строке неприводимого представления $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$.

Если свойства собственных векторов классифицированы согласно неприводимым представлениям группы $\mathfrak{G}$, то эти результаты можно сразу применить для вычисления любых функций этих собственных векторов. Такими функциями могут быть решеточные инварианты и коварианты, построенные из этих векторов, например ангармоническая потенциальная энергия кристалла или электрический дипольный момент кристалла более высокого порядка. Используя результаты теории групп, эти функции можно заметно упростить. Для функций, имеющих вид разложения по степеням этих собственных векторов, можно установить существенное минимальное число отличных от нуля независимых коэффициентов. Таково максимальное упрощение, которое можно получить с помощью теории групп.

Еще одна важная классическая функция собственных векторов, которую можно в известной мере определить с помощью теории групп, — это функция Грина, используемая при анализе свойств как идеальных, так и неидеальных решеток [8, 9, 66, 67].

При анализе свойств симметрии в задаче на собственные значения классической динамики решетки мы встретимся с оператором преобразования обращения времени. Для учета этого оператора необходимо расширить группу симметрии физической системы по отношению к исходной группе операторов преобразований, которая изоморфна исходной пространственной группе $\mathfrak{G}$. Соответственно изменится и весь предшествующий анализ. Может возникнуть удвоение существенного вырождения, обусловленное дополнительной симметрией; могут также измениться коэффициенты приведения и, следовательно, правила отбора. Необходимая здесь теория копредставлений изложена в гл. 9.

Наконец, нужно подчеркнуть, что значительная часть результатов гл. 8 применима и в отсутствие ограничивающего предположения о применимости гармонического приближения. Такое обобщение до некоторой возможной в настоящее время степени будет обсуждаться при изложении общей динамики решетки и теории многих тел.

§ 67. Уравнения движения в гармоническом приближении

Рассмотрим кристалл, в котором покоящиеся атомы расположены в точках с координатами

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa}^{l}=\boldsymbol{R}_{L}+\boldsymbol{r}_{\varkappa}, \tag{67.1}$$

где, как и прежде (см. § 4), вектор решетки равен

$$\boldsymbol{R}_{L}=l_1\boldsymbol{a}_1+l_2\boldsymbol{a}_2+l_3\boldsymbol{a}_3, \quad l_i \text{ — целые числа}, \tag{67.2}$$

и базисные векторы имеют вид

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa}=\varkappa_1\boldsymbol{a}_1+\varkappa_2\boldsymbol{a}_2+\varkappa_3\boldsymbol{a}_3, \quad 0\leqslant\varkappa_i<1. \tag{67.3}$$

Можно считать, что вектор $\boldsymbol{R}_L$ определяет положение элементарной ячейки, в которой расположен данный атом, а $\boldsymbol{r}_\varkappa$ дает положение этого атома внутри элементарной ячейки. Еще одно употребляемое обозначение для (67.1)

$$r_{\alpha}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \tag{67.4}$$

где индексы l, $\varkappa$ имеют то же значение, что и в (67.1), а $\alpha=1, 2, 3$ обозначает декартовы координаты; индексы (1, 2, 3) можно также заменить на (x, y, z).

Обозначим смещения атомов, первоначально покоившихся в точках $\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, из их положений равновесия через $\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Тогда мгновенное положение каждого атома можно записать так:

$$\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}+\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{\rho}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{67.5}$$

Смещения $\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ в (67.5) следует считать меняющимися во времени независимыми величинами, являющимися основными динамическими переменными в нашей задаче.

Потенциальная энергия кристалла является функцией общего вида от мгновенных положений атомов $\boldsymbol{\rho}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Назовем ее Ф. Обычное классическое рассмотрение основано на предположении о том, что величина смещения $\left|\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right|$ мала, а исходные положения равновесия соответствуют устойчивому равновесию. Тогда первые два отличных от нуля члена в разложении Ф по отклонениям от положений равновесия имеют вид

$$\Phi = \Phi\left(\left\{\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_{l\varkappa\alpha}\sum_{l'\varkappa'\beta} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}, \tag{67.6}$$

где

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \left.\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\partial u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}}\right)\right|_{\substack{u_\alpha\binom{l}{\varkappa}=0 \\ u_\beta\binom{l'}{\varkappa'}=0}} . \tag{67.7}$$

Первый член в (67.6) определяет начало отсчета потенциальной энергии решетки и соответствует значению Ф, взятому при условии равенства мгновенных координат частиц $\left\{\boldsymbol{\rho}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}$ координатам положений равновесия $\left\{\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}$. Таким образом, эта величина является константой. Обобщенные силовые постоянные динамики кристаллической решетки в гармоническом приближении определяются выражениями (67.7). Очевидно, в ряде (67.6) можно учесть следующие члены разложения и получить ангармонический вклад в потенциальную энергию кристалла. Ниже мы приведем некоторые результаты, основанные на учете ангармонических членов, но сейчас мы ими пренебрежем. Так как конфигурация атомов, соответствующая началу отсчета энергии, является устойчивой равновесной конфигурацией, величина

$$V \equiv \Phi - \Phi\left(\left\{\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) = \frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha \\ l'\varkappa'\beta}} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} \tag{67.8}$$

должна быть положительной, если имеется хотя бы одно отличное от нуля значение $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, и равна нулю, если все $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ тождественно равны нулю. Таким образом, (67.8) является неотрицательной квадратичной формой:

$$V \geqslant 0. \tag{67.9}$$

Так как порядок дифференцирования в (67.7), очевидно, несуществен, силовые постоянные удовлетворяют соотношению

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \Phi_{\beta\alpha}\begin{pmatrix} l' & l \\ \varkappa' & \varkappa \end{pmatrix}. \tag{67.10}$$

Определим матрицу-столбец, имеющую $3rN$ строк, элементами которой являются независимые векторы смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Здесь N — число элементарных ячеек в кристалле, удовлетворяющем граничным условиям Борна — Кармана, r — число ионов (атомов) в элементарной ячейке, так что $3rN$ — полное число механических степеней свободы колеблющегося кристалла. Обозначим такую матрицу-столбец через $[\boldsymbol{u}]$:

$$[\boldsymbol{u}] = \begin{bmatrix} u_1\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \vdots \\ u_3\begin{pmatrix} N \\ r \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \tag{67.11}$$

Транспонированной по отношению к ней будет матрица-строка $\widetilde{[\boldsymbol{u}]}$:

$$\widetilde{[\boldsymbol{u}]} = \left(u_1\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \ldots, u_3\begin{pmatrix} N \\ r \end{pmatrix}\right). \tag{67.12}$$

Если мы обозначим матрицу с размерами $(3rN) \times (3rN)$, элементами которой являются $\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ из (67.10), через $[\boldsymbol{\Phi}]$, то (67.8) можно записать в виде

$$V = \frac{1}{2}\widetilde{[\boldsymbol{u}]}\,[\boldsymbol{\Phi}]\,[\boldsymbol{u}]. \tag{67.13}$$

Такие сокращенные обозначения иногда оказываются полезными.

Декартовы компоненты смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ независимы, так что кинетическая энергия колеблющейся решетки равна

$$T = \frac{1}{2}\sum_{l\varkappa\alpha} M_\varkappa \left(\dot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right)^2, \tag{67.14}$$

где $M_\varkappa$ — масса $\varkappa$-го атома в элементарной ячейке. Тогда лагранжиан равен

$$\mathscr{L} = T - V = \frac{1}{2}\sum_{l\varkappa\alpha} M_\varkappa \left(\dot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right)^2 - \\ - \frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha \\ l'\varkappa'\beta}} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} \tag{67.15}$$

или в обозначениях (67.13)

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\widetilde{[\dot{u}]}\,[M]\,[\dot{u}] - \frac{1}{2}\widetilde{[u]}\,[\Phi]\,[u], \tag{67.16}$$

где $[\dot{u}]$ — матрица типа (67.11), элементы которой равны $\dot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ и $[M]$ — диагональная матрица, составленная из масс атомов:

$$[M]_{\substack{l\,l' \\ \varkappa\varkappa' \\ \alpha\beta}} = M_\varkappa \delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'}\delta_{\alpha\beta}. \tag{67.17}$$

В (67.14)—(67.16) точка, как всегда, обозначает полную производную по времени. Выбирая $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ в качестве обобщенной координаты, а $\dot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ в качестве обобщенной скорости, найдем уравнения движения из соотношения

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}} = 0. \tag{67.18}$$

Уравнения движения для динамических переменных $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ будут иметь вид

$$M_\varkappa \ddot{u}_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} + \sum_{l'\varkappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} = 0. \tag{67.19}$$

Уравнение (67.5) показывает, что меняющиеся во времени независимые переменные $u\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, которые являются основными динамическими переменными в задаче о колебаниях решетки, можно рассматривать как векторное поле $u(r)$, значение которого определено только в узлах решетки $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, т. е. в положениях равновесия атомов. С другой стороны, согласно уравнению (67.5), каждому вектору смещения соответствует свое несмещенное положение узла кристаллической решетки $r\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ и уравнения движения записываются тогда через этот основной набор переменных в форме (67.19).

§ 68. Трансляционная симметрия и смещения атомов

Мы рассмотрим отдельно влияние трансляционной и вращательной симметрии на смещение $u\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ и на матрицу (67.7). В этом параграфе мы изучим только следствия существования трансляционной симметрии $\{\varepsilon|R_L\}$ в решетке.

Оператор преобразования, соответствующий элементу $\{\varepsilon|R_{\bar{L}}\}$, обозначим $P_{\{\varepsilon|R_{\bar{L}}\}}$. Применим сначала этот оператор к векторному полю $u(r)$. Очевидно,

$$\left(P_{\{\varepsilon|R_{\bar{L}}\}}u\right)(r) = u(r - R_{\bar{L}}). \tag{68.1}$$

Отсюда видно, что действие операции трансляции кристалла как целого, характеризуемой вектором $R_{\bar{L}}$, на вектор смещения u дает смещение в точке, координата которой сдвинута на $R_{\bar{L}}$. При такой «активной» интерпретации операций симметрии мы сдвигаем поле смещений и держим фиксированными узлы кристаллической решетки. Эти «новые», или сдвинутые, смещения связаны со «старыми», или несдвинутыми, узлами решетки. Если взять (68.1) при $r\,{}^{l}_{\varkappa} = R_L + r_\varkappa$, то получим

$$\left(P_{\{\varepsilon|R_{\bar{L}}\}}u\right)\left(r\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\right) = u\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{68.2}$$

Индекс r в (68.2), очевидно, является лишним, поэтому вместо (68.2) мы будем обычно писать

$$\left(P_{\{\varepsilon|R_{\bar{L}}\}}u\right)\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = u\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{68.3}$$

§ 69. Трансляционная симметрия и матрица силовых постоянных

Используя преобразование смещений (68.3), получаем из (67.8) выражение для потенциальной энергии

$$V = \Phi - \Phi\left(\left\{r\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha \\ l'\varkappa'\beta}} u_\alpha\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}u_\beta\begin{pmatrix} l'-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix}, \quad (69.1)$$

где из (67.7)

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} \equiv \left[\frac{\partial^2\Phi}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix}\partial u_\beta\begin{pmatrix} l'-\bar{l} \\ \varkappa' \end{pmatrix}}\right]. \quad (69.2)$$

Так как при трансляции все атомы сдвигаются в эквивалентные положения, мы имеем для силовых постоянных

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & -l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}. \quad (69.3)$$

Тензор силовых постоянных, являющийся инвариантным полем тензора второго ранга, должен оставаться неизменным при операциях симметрии решетки. Следовательно, полагая $\bar{l} = l'$, получим

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l-l' & 0 \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}. \quad (69.4)$$

Таким образом, силовые постоянные $\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ зависят только от разности векторов решетки $\boldsymbol{R}_L$ и $\boldsymbol{R}_{L'}$ и не зависят от индексов *отдельных* ячеек.

Аналогичный вывод мы можем получить при «пассивной» интерпретации действия преобразований симметрии. Будем считать поле смещений $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ фиксированным, а узлы решетки будем смещать на вектор решетки $\boldsymbol{R}_{\bar{L}}$. Тогда узел решетки $\boldsymbol{R}_L$ после смещения будет находиться в узле $\boldsymbol{R}_L - \boldsymbol{R}_{\bar{L}}$, а узел $\boldsymbol{R}_{L'}$ перейдет в $\boldsymbol{R}_{L'} - \boldsymbol{R}_{\bar{L}}$.

Так как изменение потенциальной энергии кристалла должно зависеть только от смещений отдельных атомов, мы снова приходим к выводу, что добавление одного и того же вектора решетки ко всем индексам узлов в каждой силовой постоянной оставляет ее инвариантной в смысле (69.4). Ниже в некоторых случаях мы будем пользоваться тем, что $\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ зависит только от разности $l - l'$. Тогда имеем

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \lambda \\ \varkappa\ \varkappa' \end{pmatrix}, \tag{69.5}$$

где $\boldsymbol{R}_\lambda = \boldsymbol{R}_L - \boldsymbol{R}_{L'}$. Несимметричное обозначение в (69.5) должно подчеркивать, что силовые постоянные зависят только от одного индекса ячейки, а именно от относительного индекса. В других случаях, когда оказывается удобным формальное включение всех совокупностей индексов, они будут сохранены все.

§ 70. Общая симметрия и смещения атомов

Рассмотрим действие оператора преобразования общей пространственной симметрии $P_{\{\varphi|t\}}$ на поле смещений $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$. Под действием этого преобразования общей симметрии векторное поле смещений $\boldsymbol{u}$ преобразуется в векторное поле смещений $\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}$, где

$$\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}} \equiv P_{\{\varphi|t\}}\boldsymbol{u}. \tag{70.1}$$

Из того, что $\boldsymbol{u}$ является вектором, с неизбежностью следует

$$\{P_{\{\varphi|t\}}\boldsymbol{u}\}_\alpha = \{\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}\}_\alpha = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}\boldsymbol{u}_\beta. \tag{70.2}$$

В (70.2)

$$\varphi_{\alpha\beta} \equiv (\varphi)_{\alpha\beta} \tag{70.3}$$

есть $(\alpha\beta)$-компонента поворотной матрицы φ, описывающей поворот в операции общей пространственной симметрии $\{\varphi|t\}$. В последующем изложении удобно использовать следующее обозначение:

$$\varphi_{\alpha\beta} \equiv D^{(r)}(\varphi)_{\alpha\beta}. \tag{70.4}$$

В (70.4) мы обозначили через $D^{(r)}$ матрицу преобразования, по которому преобразуется обычный полярный вектор. Таким образом, аналогично § 5 мы можем написать

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}_{\{\varphi\}} = \varphi\cdot\boldsymbol{r} = D^{(r)}(\varphi)\,\boldsymbol{r}, \tag{70.5}$$

и (70.5) следует теперь сравнить с (5.9). Возвращаясь назад к (70.2), видим, что компоненты $\boldsymbol{u}$ при поворотах преобразуются друг через друга аналогично компонентам произвольного полярного вектора, например радиус-вектора. Уравнение (70.2) тогда устанавливает линейное однородное соотношение между компонентами векторной функции $\boldsymbol{u}$ и компонентами векторной функции $\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}$. Но, кроме того, можно сказать, что преобразование $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ производит также одно-однозначное отображение. Следовательно, помимо поворота компонент векторного поля $\boldsymbol{u}$ оно показывает, что повернутые компоненты следует брать в преобразованных точках поля. Окончательное полное правило, описывающее действие оператора преобразования на $\boldsymbol{u}$, имеет следующий вид:

$$(P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{u})_\alpha(\boldsymbol{r}) = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta} u_\beta\left(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1}\boldsymbol{r}\right). \tag{70.6}$$

В кристаллической решетке $\boldsymbol{u}$ определено только в узлах решетки, так что (70.6) следует записать для $\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ в виде

$$(\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta} u_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}. \tag{70.7}$$

В (70.7) мы использовали условное обозначение

$$\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1} \cdot \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \equiv \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} - \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{t} \tag{70.8}$$

или

$$\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1} \begin{Bmatrix} l \\ \varkappa \end{Bmatrix} \equiv \begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}. \tag{70.9}$$

С другой стороны, если определить

$$\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} \equiv \{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\} \cdot \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \tag{70.10}$$

то можно записать преобразование, обратное (70.7):

$$(u_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta} u_\beta \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{70.11}$$

Из ортогональности преобразования φ следует

$$\sum_\lambda \varphi_{\lambda\mu}\varphi_{\lambda\nu} = \sum_\sigma \varphi_{\mu\sigma}\varphi_{\nu\sigma} = \delta_{\mu\nu}. \tag{70.12}$$

Используя (70.12), мы можем записать преобразования, обратные (70.7) и (70.11). Из (70.11) имеем

$$\sum_\alpha \varphi_{\alpha\gamma} \sum \varphi_{\alpha\beta} u_\beta \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\alpha \varphi_{\alpha\gamma} (\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} \tag{70.13}$$

или, используя (70.12),

$$u_\gamma\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\alpha \varphi_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}, \tag{70.14}$$

$$u_\gamma\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\alpha (\varphi^{-1})_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}. \tag{70.15}$$

Из уравнения (70.7) имеем

$$u_\delta\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} = \sum_\alpha \varphi_{\alpha\delta}(\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{70.16}$$

Используя (70.4), выражения (70.14)—(70.16) можно записать через $D^{(r)}$.

Не боясь быть многословными, подытожим теперь результаты. Преобразование координат $\{\varphi|\boldsymbol{t}\}$ можно записать в виде

$$\{\varphi|\boldsymbol{t}\} \equiv \{\varphi|\boldsymbol{\tau}(\varphi) + \boldsymbol{R}_M\}, \tag{70.17}$$

где $\boldsymbol{R}_M$ — вектор решетки и $\boldsymbol{\tau}(\varphi)$ — нетривиальная трансляция. Под действием такого преобразования радиус-вектор точки $\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{r}_\varkappa$ преобразуется следующим образом:

$$\{\varphi|\boldsymbol{t}\}\cdot\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \varphi\cdot\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} + \boldsymbol{t}, \tag{70.18}$$

или

$$\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}, \tag{70.19}$$

где

$$\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \varphi\cdot\boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M \\ \varphi\cdot\boldsymbol{r}_\varkappa + \boldsymbol{\tau}(\varphi) \end{pmatrix}. \tag{70.20}$$

Важно хорошо представлять себе, что сокращенное обозначение в левой стороне равенства (70.20) эквивалентно полному выражению, выписанному справа. Другими словами, справа просто явно выписано все то, что подразумевается слева. В частности, выписаны по отдельности чисто решеточное преобразование $\varphi\cdot\boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M$ и нетривиальная трансляция $\varphi\cdot\boldsymbol{r}_\varkappa + \boldsymbol{\tau}(\varphi)$ координаты точки, что удобно для последующих ссылок.

Аналогично для соотношения, обратного (70.17), имеем

$$\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{-1} = \{\varphi^{-1}|-\varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{\tau}(\varphi) - \varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_M\} = \{\varphi^{-1}|-\varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{t}\}. \tag{70.21}$$

Тогда

$$\{\varphi|\mathrm{t}\}^{-1}\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} - \varphi^{-1}\boldsymbol{t} \tag{70.22}$$

или

$$\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} \end{pmatrix}. \tag{70.23}$$

Здесь

$$\begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L - \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_M \\ \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{r}_\varkappa - \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau}(\varphi) \end{pmatrix}, \tag{70.24}$$

где снова выписаны явно вклады трансляции на вектор решетки и нетривиальной трансляции.

Как в (70.20), так и в (70.24) решеточные трансляции и нетривиальные трансляции выписаны явно. Следует, однако, отметить, что во вкладах, соответствующих нетривиальной трансляции в (70.20) и (70.24), может содержаться еще неявно вектор трансляции

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa_\varphi} \equiv \varphi \cdot \boldsymbol{r}_\varkappa + \boldsymbol{\tau}(\varphi), \tag{70.25}$$

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa_{\bar{\varphi}}} \equiv \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{r}_\varkappa - \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau}(\varphi). \tag{70.26}$$

Любое из этих преобразований даже при $\boldsymbol{\tau} = 0$ может преобразовать атом $\varkappa$-го сорта в тождественный атом $\varkappa$-го сорта в другой элементарной ячейке. При этом первоначальное положение атома при добавлении вектора решетки фактически сдвигается, что явно не показано ни в (70.20), ни в (70.24). Несомненно, что векторы

$$\varphi \cdot \boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{R}_M \tag{70.27}$$

и

$$\varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L + \varphi^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_M \tag{70.28}$$

являются векторами решетки. Однако обозначения (70.20) и (70.24), вообще говоря, очень удобные, имеют тот недостаток, что в них не видна явно возможность того, что, например, в уравнениях (70.25) и (70.26):

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa_\varphi} = \boldsymbol{R}_N(\varkappa_\varphi, \varkappa') + \boldsymbol{r}_{\varkappa'}, \tag{70.29}$$

$$\boldsymbol{r}_{\varkappa_{\bar{\varphi}}} = \boldsymbol{R}_N(\varkappa_{\bar{\varphi}}, \varkappa'') + \boldsymbol{r}_{\varkappa''}, \tag{70.30}$$

где $\boldsymbol{R}_N(\varkappa_\varphi, \varkappa')$ и $\boldsymbol{R}_N(\varkappa_{\bar{\varphi}}, \varkappa'')$ — векторы решетки. Нам придется вернуться к обсуждению этой возможности в § 80 и последующих параграфах.

Из того, что $\{\varphi | t\}$ является операцией симметрии, следует, что физические свойства в точке $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ тождественны свойствам в точке $\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}$. Другими словами, в этих двух точках находятся одинаковые атомы или ионы и, следовательно, физические свойства в них тоже одинаковы.

Наконец, полезно убедиться в унитарности оператора преобразования $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$. Состояние кристалла при фиксированных смещениях атомов из положений равновесия определено, если задан $3rN$-мерный вектор $[\boldsymbol{u}]$ из (67.11). Норму, или квадрат длины этого вектора, можно определить следующим образом:

$$[\boldsymbol{u}]^2 = [\tilde{\boldsymbol{u}}]\cdot[\boldsymbol{u}] \equiv (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = \sum_{\varkappa l \alpha}\left(u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right)^2. \tag{70.31}$$

Очевидно, что

$$[\boldsymbol{u}]^2 \geqslant 0, \tag{70.32}$$

где знак равенства относится только к нулевым смещениям.

Рассмотрим состояние кристалла, заданное совокупностью смещений $[P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{u}]$, компоненты которых заданы в (70.2). Норма этого вектора равна

$$(P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{u},\ P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u}_\varphi,\ \boldsymbol{u}_\varphi) = \sum_{\varkappa l \alpha}\left((P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{u})_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right)^2 =$$

$$= \sum_{\varkappa l \alpha}\left(\sum_{\beta}\varphi_{\alpha\beta}u_\beta\begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}\right)\cdot\left(\sum_{\bar\beta}\varphi_{\alpha\bar\beta}u_{\bar\beta}\begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}\right) = \sum_{\varkappa l \beta}\left(u_\beta\begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}\right)^2. \tag{70.33}$$

При выводе этого соотношения мы использовали (70.12). Для заданного $\{\varphi|t\}$ мы можем изменить в (70.33) индексы суммирования:

$$\sum_{\varkappa l} \to \sum_{\varkappa_{\bar\varphi} l_{\bar\varphi}}, \tag{70.34}$$

так как суммирование идет по всем атомам кристалла один и только один раз. Отсюда, используя обозначения (70.2), получаем

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u}_\varphi, \boldsymbol{u}_\varphi). \tag{70.35}$$

Очевидно, что это верно для всех $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ в группе операторов преобразований $\mathfrak{G}_P$, изоморфной пространственной группе $\mathfrak{G}$. Поэтому оператор $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$, определенный соотношением (70.7), унитарен.

После смещений $[\boldsymbol{u}]$ вещественно. Рассмотрим теперь оператор K, соответствующий комплексному сопряжению:

$$Ku_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \equiv u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}^*. \tag{70.36}$$

Из вещественности физических смещений следует

$$Ku_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{70.37}$$

Согласно (70.7) и (70.37), имеем

$$KP_{\{\varphi \mid t(\varphi)\}}u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = P_{\{\varphi \mid t\}}Ku_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = P_{\{\varphi \mid t\}}u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{70.38}$$

Последнее равенство следует из (70.37). Окончательно из вещественности смещений следует

$$(K\boldsymbol{u},\ K\boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{u}). \tag{70.39}$$

§ 71. Общая симметрия и матрица силовых постоянных

Физический смысл соотношений (70.7) и (70.11) состоит в том, что в результате преобразования $P_{\{\varphi \mid t\}}$ в узле решетки $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ возникает преобразованное смещение $\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{u}$, которое первоначально относилось к эквивалентному узлу решетки $\begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix}$.

Выберем $\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}$ из (70.11) в качестве основных динамических переменных в задаче о колебаниях решетки. В этих переменных выражение (67.8) для V имеет вид

$$V = \frac{1}{2}\sum_{\substack{l_\varphi \varkappa_\varphi \alpha' \\ l'_\varphi \varkappa'_\varphi \beta'}} \left(u_{\{\varphi\}}\right)_{\alpha'}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}\left(u_{\{\varphi\}}\right)_{\beta'}\begin{pmatrix} l'_\varphi \\ \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}, \tag{71.1}$$

где в новых переменных

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} \equiv \left[\frac{\partial^2\Phi}{\partial\left(u_{\{\varphi\}}\right)_{\alpha'}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}\partial\left(u_{\{\varphi\}}\right)_{\beta'}\begin{pmatrix} l'_\varphi \\ \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}}\right]_{(0)}. \tag{71.2}$$

Для фиксированного значения $\{\varphi\}$ суммирование по $l_\varphi\varkappa_\varphi$ и $l'_\varphi\varkappa'_\varphi$ в (71.1) можно заменить на суммирование по $l\varkappa$ и $l'\varkappa'$. Для сравнения с (67.8) преобразуем (71.1) следующим образом. По правилу дифференцирования сложной функции имеем

$$\frac{\partial}{\partial\left(u_{\{\varphi\}}\right)_{\alpha'}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}} = \sum_{l\varkappa\alpha}\frac{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}}{\partial\left(u_{\{\varphi\}}\right)_\alpha\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}}\cdot\frac{\partial}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}} = \sum_{\alpha=1}^{3}\varphi_{\alpha\alpha'}\frac{\partial}{\partial u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}}. \tag{71.3}$$

В (71.3) каждая компонента преобразованного вектора смещения считается зависящей от всех $3rN$ компонент первоначальных смещений. Затем, подставляя (71.3) в (71.2) и используя (71.7), найдем

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} = \sum_\alpha \sum_\beta \varphi_{\alpha\alpha'}\varphi_{\beta\beta'}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} \tag{71.4}$$

или

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta} (\varphi^{-1})_{\alpha'\alpha}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'}. \tag{71.5}$$

Подставим теперь (70.11) в (71.1) и запишем сумму по $l\varkappa$ и $l'\varkappa'$; тогда получим

$$V = \frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha' \\ l'\varkappa'\beta}} \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha\alpha'}u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'}u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \tag{71.6}$$

Затем, перегруппировав члены, найдем

$$V = \frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha \\ l'\varkappa'\beta}} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\left\{\sum_{\alpha'\beta'} \varphi_{\alpha\alpha'}\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'}\right\}u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \tag{71.7}$$

Сравнивая (71.7) и (67.8), видим, что так как V является инвариантной величиной, то

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \sum_{\alpha'\beta'} \varphi_{\alpha\alpha'}\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'}. \tag{71.8}$$

Или если мы возьмем преобразование, обратное (71.8), то с помощью (70.12) получим

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha\alpha'}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'} = \tag{71.9}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} (\varphi^{-1})_{\alpha'\alpha}\,\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'}. \tag{71.10}$$

Из (71.1)—(71.10) видно, что матрица силовых постоянных со штрихом соответствует полю преобразованных смещений. Таким образом, мы можем считать, что штрихованная матрица силовых постоянных получена преобразованием нештрихованной матрицы. Наиболее просто это можно увидеть с помощью матричной записи (67.13). Итак, обозначим через $[\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}]$ матрицу-столбец из элементов $(u_{\{\varphi\}\alpha}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}$. Тогда, взяв

$$V=\frac{1}{2}[\widetilde{\boldsymbol{u}}][\Phi][\boldsymbol{u}], \tag{71.11}$$

$$V=\frac{1}{2}[\widetilde{\boldsymbol{u}}]P^{-1}_{\{\varphi\mid t\}}P_{\{\varphi\mid t\}}[\Phi]P^{-1}_{\{\varphi\mid t\}}P_{\{\varphi\mid t\}}[\boldsymbol{u}] \tag{71.12}$$

и учитывая, что

$$P_{\{\varphi\mid t\}}[\boldsymbol{u}]=[\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}], \tag{71.13}$$

получаем

$$[\widetilde{\boldsymbol{u}}]P^{-1}_{\{\varphi\mid t\}}=\widetilde{P_{\{\varphi\mid t\}}[\boldsymbol{u}[}= \tag{71.14}$$

$$=[\widetilde{\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}}]. \tag{71.15}$$

Тогда

$$V=\frac{1}{2}[\widetilde{\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}}][\Phi'][\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}], \tag{71.16}$$

где

$$[\Phi']\equiv P_{\{\varphi\mid t\}}[\Phi]P^{-1}_{\{\varphi\mid t\}}. \tag{71.17}$$

Если обозначить компоненты $[\Phi']$, как и раньше, через $\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}$, то (71.16) и (71.1) оказываются одинаковыми. Но (71.17) означает также, что матрица $[\Phi]$ под действием операций симметрии кристалла преобразуется как тензор второго ранга. Те же соображения, которые привели нас к (69.4) и (69.5), пригодны и для $[\Phi']$:

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}=\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} \lambda_\varphi & 0 \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}, \tag{71.18}$$

где

$$\boldsymbol{R}_{\lambda_\varphi}\equiv\boldsymbol{R}_{L_\varphi}-\boldsymbol{R}_{L'_\varphi}. \tag{71.19}$$

Воспользуемся теперь явно свойствами преобразований симметрии кристалла, переводящих кристалл сам в себя. Это означает, что преобразование точечной симметрии $P_{\{\varphi\mid t\}}$ связывает две точки $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}_{\{\varphi\}}$, в которых кристалл обладает одинаковыми физическими свойствами. Если мы будем считать, что тензоры $[\Phi]$ и $[\Phi']$ описывают физические свойства в данной точке, то требование симметрии означает, что

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa_\varphi \end{pmatrix}=\Phi_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa_\varphi \end{pmatrix}, \tag{71.20}$$

или

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}=\Phi_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}. \tag{71.21}$$

Важно понимать, что из (71.20) и (71.21) следует, что преобразованием симметрии является такое преобразование, которое сохраняет функциональную форму тензорного (матричного) поля $[\Phi]$. В этих соотношениях мы приравниваем одинаковые компоненты (индексы $\alpha\beta$) штрихованной и нештрихованной (преобразованной и исходной) матриц, взятые в одной и той же точке поля. Совокупность двух точек поля может равным образом описываться как $\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ и как преобразованное выражение $\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}$. Наоборот, соотношения (71.4) и (71.5) устанавливают соотношение между матрицами силовых постоянных в двух *различных* совокупностях точек, связанных преобразованием симметрии $\{\varphi|t\}$. Соотношения (71.20) и (71.21) демонстрируют инвариантность физического тензорного поля $[\Phi]$. Опуская координатные индексы, можно переписать (71.20) и (71.21) в виде

$$\Phi'_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta} \tag{71.22}$$

или

$$P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}}[\Phi]\,P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} \equiv [\Phi'] = [\Phi]. \tag{71.23}$$

Подставляя (71.9) в (71.20), имеем

$$\Phi'_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} = \sum_\alpha \sum_\beta \varphi_{\alpha\alpha'}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\varphi_{\beta\beta'} = \\ = \Phi_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}. \tag{71.24}$$

Из (71.8) и (71.24) можно получить соотношение, обратное (71.24). Физическая интерпретация (71.24) состоит в том, что это соотношение устанавливает связь значений одного и того же тензора, а именно физического тензора силовых постоянных $[\Phi]$, в двух совокупностях эквивалентных точек, связанных операциями пространственной симметрии. Используя (71.24), можно определить минимальный набор ненулевых элементов матрицы силовых постоянных (параметров связи) для любой заданной пространственной группы, придавая операции симметрии $\{\varphi|\tau(\varphi)\}$ значения либо всех элементов группы $\mathfrak{G}$, либо по меньшей мере тех элементов, которые дают независимые результаты. Этот вопрос обсуждался Либфридом [5, 6] и Лэксом [68].

Из определения потенциальной энергии (67.6) следует, что матрица силовых постоянных $[\Phi]$ вещественна. Это свойство можно записать для наших целей с помощью действующего на $[\Phi]$ оператора K (аналогично (70.36) и последующим уравнениям):

$$K[\Phi]K^{-1} = \Phi^* = \Phi. \tag{71.25}$$

§ 72. Решение уравнений движения. Собственные векторы $[e_j]$

В нескольких следующих параграфах будет показано, что благодаря пространственной симметрии в конфигурационном пространстве решения уравнений движения (67.19) строятся в неприводимых векторных пространствах. Каждое такое неприводимое векторное пространство является базисом $(s\cdot l_m)$-мерного неприводимого представления $\mathfrak{G}$ и связано с определенной собственной частотой уравнения (67.19).

Чтобы решить (67.19), мы поступим обычным способом [4]. Определим новые координаты w следующим образом:

$$w_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sqrt{M_\varkappa}\, u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{72.1}$$

Зависимость от времени можно взять в виде

$$w_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \xi_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} e^{-i\omega t},$$

где $\xi_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ — не зависящие от времени амплитуды. Если мы определим

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa M_{\varkappa'}}}\,\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}, \tag{72.3}$$

то уравнения движения (67.19) примут вид

$$-\omega^2\xi_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} + \sum_{l'\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\xi_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} = 0. \tag{72.4}$$

Чтобы записать эти уравнения в сжатой форме, воспользуемся формой записи (67.11)—(67.18). Для этого определим матрицу-столбец $[\xi]$, элементами которой являются $\xi_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, и матрицу $[D]$ с компонентами $D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$. Тогда (72.4) можно переписать в форме

$$[D][\xi] = [\omega^2 I][\xi], \tag{72.5}$$

где $[I]$ — единичная матрица, ω^2 — собственные значения в задаче динамики решетки, которые подлежат определению.

Система (72.5) разрешима, если соответствующий вековой определитель равен нулю:

$$\left\| D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} - \omega^2\delta_{\alpha\beta}\delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'} \right\| = 0. \tag{72.6}$$

Записанное в такой форме уравнение (72.6) имеет $3rN$ корней ω_j^2, $j=1, \ldots, 3rN$.

Рассмотрим некоторый собственный вектор, являющийся матрицей-столбцом из $3rN$ элементов и относящийся к собственному значению ω_j^2 уравнения (72.5). Обозначим этот собственный вектор через $[\boldsymbol{e}_j]$, и тогда (72.5) примет вид

$$[\boldsymbol{D}][\boldsymbol{e}_j] = \omega_j^2[\boldsymbol{e}_j]. \tag{72.7}$$

Компоненты $[\boldsymbol{e}_j]$ удобно обозначать как $e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right)$. Тогда для этого собственного значения (фиксированного j) уравнение (72.7) принимает вид

$$-\omega_j^2 e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right) + \sum_{l'\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} e_\beta\left(\begin{matrix} l' \\ \varkappa' \end{matrix}\middle| j\right). \tag{72.8}$$

Очевидно, компонента $e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right)$ матрицы $[\boldsymbol{e}_j]$ является умноженной на $\sqrt{M_\varkappa}$ α-компонентой не зависящей от времени амплитуды смещения атома, который первоначально был расположен в $\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, когда в решетке возбуждено j-е нормальное колебание с частотой ω_j.

Из (67.8)—(67.10), (71.25) и (72.3) следует, что матрица $[\boldsymbol{D}]$ неотрицательна, вещественна и симметрична:

$$[\boldsymbol{D}] \geqslant 0, \tag{72.9}$$

$$[\boldsymbol{D}] = [\boldsymbol{D}]^*, \tag{72.10}$$

$$[\widetilde{\boldsymbol{D}}] = [\boldsymbol{D}]. \tag{72.11}$$

Для такой матрицы собственные значения вещественны и неотрицательны:

$$\omega_j^2 \geqslant 0. \tag{72.12}$$

Собственные векторы такой матрицы $[\boldsymbol{D}]$ образуют полный набор; независимо от вырождения их можно взять вещественными и удовлетворяющими условиям ортогональности и нормировки в обычном смысле:

$$\sum_{\varkappa l \alpha} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right) e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j'\right) = \delta_{jj'}, \tag{72.13}$$

$$\sum_{j} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j\right) e_\beta\left(\begin{matrix} l' \\ \varkappa' \end{matrix}\middle| j\right) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{72.14}$$

Чтобы учесть возможное вырождение, нам придется ввести еще один индекс. Если линейно-независимые собственные векторы

$$\left[\boldsymbol{e}_{j_1}\right], \ldots, \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right], \ldots, \left[\boldsymbol{e}_{j_{l_j}}\right] \tag{72.15}$$

удовлетворяют уравнению (72.7):

$$[\boldsymbol{D}]\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] = \omega_j^2\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right], \tag{72.16}$$

то условия ортогональности и нормировки (72.13) и (72.14) можно взять в виде

$$\sum_{\varkappa l \alpha} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right) e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j'_{\rho'}\right) = \delta_{jj'}\delta_{\rho\rho'}, \tag{72.17}$$

$$\sum_{j}\sum_{\sigma} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right) e_\beta\left(\begin{matrix} l' \\ \varkappa' \end{matrix}\middle| j_\rho\right) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{72.18}$$

Чтобы получить условия ортогональности и нормировки (72.17) и (72.18) при наличии вырождения, мы должны выбрать произвольную линейную комбинацию вырожденных собственных векторов. Это всегда можно сделать, используя процедуру ортогонализации Шмидта — Грама.

Равным образом, мы можем рассматривать некоторый вектор $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ как матрицу-столбец с $3Nr$ строками, каждая компонента которого имеет три индекса $\varkappa l \alpha$. Тогда (72.17) можно интерпретировать как условие ортогональности в смысле скалярного произведения [1])

$$\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]\cdot\left[\boldsymbol{e}_{j'_{\rho'}}\right] = \left(\boldsymbol{e}_{j_\rho}, \boldsymbol{e}_{j'_{\rho'}}\right) = \delta_{jj'}\delta_{\rho\rho'}. \tag{72.19}$$

Аналогично можно определить матрицу-строку $[\boldsymbol{e}_{\alpha l\varkappa}]$ из $3Nr$ столбцов, где каждый из столбцов характеризуется индексом j_ρ. Тогда (72.18) определяет еще одно скалярное произведение [2])

$$\left[\boldsymbol{e}_{\alpha l\varkappa}\right] : \left[\boldsymbol{e}_{\beta l'\varkappa'}\right] \equiv \left(\boldsymbol{e}_{\alpha l\varkappa}, \boldsymbol{e}_{\beta l'\varkappa'}\right) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{72.20}$$

---

[1]) Скалярное произведение с одной точкой является суммой по $\varkappa l \alpha$.
[2]) Скалярное произведение с двумя точками является суммой по j_ρ.

Полный набор собственных векторов-столбцов

$$[e_{j\rho}], \quad j=1, \ldots; \quad \rho=1, \ldots, l_j \tag{72.21}$$

можно расположить в виде матрицы с размерами $(3Nr)\times(3Nr)$. Аналогично полный набор собственных векторов-строк тоже можно расположить в виде матрицы с размерами $(3Nr)\times(3Nr)$:

$$[e_{\alpha l \varkappa}], \quad \alpha=1, \ldots, 3; \quad l=1, \ldots, N; \quad \varkappa=1, \ldots, r. \tag{72.22}$$

Эти матрицы (построенные либо из таких строк, либо из таких столбцов) одинаковы. Назовем эту матрицу $\boldsymbol{E}$. Тогда строки матрицы $\boldsymbol{E}$ нумеруются тремя индексами $\varkappa l\alpha$, а столбцы — индексом j_ρ. Записанная по такому правилу, матрица $\boldsymbol{E}$ с размерами $(3Nr)\times(3Nr)$ имеет вид

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix} e_1\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|1\right) & e_1\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|2\right) & \ldots\; e_1\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|3Nr\right) \\ e_2\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|1\right) & e_2\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|2\right) & \ldots\; e_2\left(\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\middle|3Nr\right) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ e_3\left(\begin{matrix}N-1\\r\end{matrix}\middle|1\right) & e_3\left(\begin{matrix}N-1\\r\end{matrix}\middle|2\right) & \ldots\; e_3\left(\begin{matrix}N-1\\r\end{matrix}\middle|3Nr\right) \end{bmatrix}. \tag{72.23}$$

Выписывая (72.23), мы приняли, что l меняется от 0 до $N-1$ только из соображений удобства. Условия ортогональности и нормировки (72.19) и (72.10) показывают, что столбцы и строки матрицы $\boldsymbol{E}$ являются ортогональными векторами. Следовательно, $\boldsymbol{E}$ — вещественная, унитарная или ортогональная матрица:

$$\boldsymbol{E}^{-1}=\widetilde{\boldsymbol{E}}. \tag{72.24}$$

Используя (72.24) и (72.16), мы получаем

$$\boldsymbol{E}^{-1}[\boldsymbol{D}]\boldsymbol{E}=\Delta, \tag{72.25}$$

где Δ — диагональная матрица, составленная из собственных значений:

$$\Delta=\begin{bmatrix} \omega_1^2 & 0 & 0 & \ldots & & \\ 0 & \omega_1^2 & & & & \\ 0 & & \omega_1^2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ 0 & & & & \omega_2^2 & \\ \vdots & & & & & \omega_2^2 \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}. \tag{72.26}$$

Каждое собственное значение матрицы $[\boldsymbol{D}]$ появляется в (72.26) столько раз, какова его степень вырождения. Заметим, что конкретный вид (72.26) следует из условий ортогональности и нормировки (72.17), (72.18).

Из свойства полноты набора (72.15) следует, что если $[\varepsilon_{j_v}]$ — произвольный собственный вектор матрицы $[\boldsymbol{D}]$, соответствующий значению ω_j^2, то необходимым образом

$$[\boldsymbol{D}]\left[\varepsilon_{j_v}\right] = \omega_j^2 \left[\varepsilon_{j_v}\right]. \tag{72.27}$$

Тогда $[\varepsilon_{j_v}]$ можно выразить в виде линейной комбинации элементов совокупности (72.15):

$$[\varepsilon_{j_v}] = \sum_{\rho=1}^{l_j} (\rho \mid v) \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]. \tag{72.28}$$

В компонентах (72.28) записывается в виде

$$\varepsilon_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_v \right) = \sum_\rho (\rho \mid v)\, e_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right). \tag{72.29}$$

Коэффициенты $(\rho | v)$ определяют число раз, которое собственный вектор $[\boldsymbol{e}_{j_\rho}]$ возникает в $[\varepsilon_{j_v}]$. Используя (72.17), $(\rho | v)$ можно определить следующим образом:

$$(\rho \mid v) = \sum_{\varkappa l \alpha} e_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right) \varepsilon_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_v \right) = \left(\boldsymbol{e}_{j_\rho}, \varepsilon_{j_v}\right). \tag{72.30}$$

Отметим, что совокупность (72.15) образует некоторое неприводимое линейное векторное пространство $\Sigma^{(\star \boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$ (это утверждение будет доказано ниже). Индексы j, ρ настоящего параграфа мы должны будем связать с индексами $\boldsymbol{k}$, m, характеризующими это неприводимое представление, способом, который будет установлен ниже.

§ 73. Вещественные нормальные координаты q_j

Чтобы ввести совокупность нормальных координат, следует записать смещение (72.1) через полный набор собственных векторов. Другими словами, мы должны взять

$$w_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \right) = \sum_j \sum_\rho e_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right) q_{j_\rho}. \tag{73.1}$$

Здесь q_{j_ρ} — вещественная, зависящая от времени переменная, которую, согласно (73.1), можно понимать как коэффициент разложения вектора $\boldsymbol{w}$ по собственным векторам $[\boldsymbol{e}_{j_\rho}]$. Используя (72.19), обратим соотношение (73.1):

$$q_{j_\rho} = \sum_{\varkappa l \alpha} e_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \Big| j_\rho \Big) w_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \tag{73.2}$$

$$q_{j_\rho} = [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] \cdot \boldsymbol{w}. \tag{73.3}$$

Таким образом, q_{j_ρ} является проекцией $\boldsymbol{w}$ на $[\boldsymbol{e}_{j_\rho}]$. Мы можем также переписать (73.1) в форме

$$\boldsymbol{w} = \sum_j \sum_\rho [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] q_{j_\rho}. \tag{73.4}$$

Беря временную производную от (73.4), имеем

$$\dot{\boldsymbol{w}} = \sum_j \sum_\rho [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] \cdot \dot{q}_{j_\rho}. \tag{73.5}$$

Кинетическая энергия (67.14) записывается через скалярное произведение (72.17) в виде

$$T = \frac{1}{2} [\dot{\boldsymbol{w}}] \cdot [\dot{\boldsymbol{w}}] = \frac{1}{2} \sum_{j\rho} \sum_{j'\rho'} [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] \cdot [\boldsymbol{e}_{j'_{\rho'}}] \dot{q}_{j\rho} \dot{q}_{j'_{\rho'}} = \frac{1}{2} \sum_{j\rho} \dot{q}^2_{j_\rho}, \tag{73.6}$$

где мы использовали (72.19). Для потенциальной энергии (67.8) или (67.13) тогда имеем

$$V = \frac{1}{2} [\boldsymbol{u}] [\boldsymbol{\Phi}] [\boldsymbol{u}] = \frac{1}{2} [\boldsymbol{w}] \cdot [\boldsymbol{D}] \cdot [\boldsymbol{w}], \tag{73.7}$$

где $[\boldsymbol{D}]$ определено в (72.3). Подставляя (73.4) в (72.16), получаем

$$[\boldsymbol{D}] [\boldsymbol{w}] = \sum_j \sum_\rho \omega_j^2 [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] q_{j_\rho}. \tag{73.8}$$

Следовательно,

$$V = \frac{1}{2} \sum_{j\rho} \sum_{j'\rho'} \omega_j^2 [\boldsymbol{e}_{j'_{\rho'}}] \cdot [\boldsymbol{e}_{j_\rho}] q_{j'_{\rho'}} q_{j_\rho} = \tag{73.9}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j\rho} \omega_j^2 q^2_{j_\rho}. \tag{73.10}$$

Соответственно классический гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} (q_{j_\rho}, \dot{q}_{j_\rho}) = \frac{1}{2} \sum_{j\rho} \{\dot{q}^2_{j_\rho} + \omega_j^2 q^2_{j_\rho}\}. \tag{73.11}$$

Соответствующие уравнения движения:

$$\dot{p}_{j_\rho} = \ddot{q}_{j_\rho} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{j_\rho}} = - \omega_j^2 q_{j_\rho}. \tag{73.12}$$

Следовательно,

$$\ddot{q}_{j_\rho} + \omega_j^2 q_{j_\rho} = 0, \quad j = 1, \ldots; \quad \rho = 1, \ldots, l_j. \tag{73.13}$$

Возможность получить независимые уравнения (73.13), очевидно, оправдывает название нормальных координат для q_{j_ρ}. При нормальном колебании возбуждается координата q_{j_ρ}. Временная зависимость координаты имеет вид

$$q_{j_\rho}(t) = q_{j_\rho}^{s,\,c}(0) \begin{cases} \sin \omega_j t, \\ \cos \omega_j t. \end{cases} \tag{73.14}$$

Для классического кристалла, в котором возбуждено одно нормальное колебание, смещение (73.1) равно

$$u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}}\right) e_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right) q_{j_\rho}^{s,\,c}(0) \begin{cases} \sin \omega_j t, \\ \cos \omega_j t. \end{cases} \tag{73.15}$$

В этом случае все атомы осциллируют с частотой ω_j; относительные амплитуды смещений атомов определяются компонентами собственных векторов $[\boldsymbol{e}_{j_\rho}]$. Обычно бывает невозможно возбудить отдельное нормальное колебание, можно только специально рассмотреть произвольное смещение на частоте ω_j. Наиболее общую ситуацию тогда можно описать как суперпозицию вырожденных нормальных колебаний с частотой ω_j:

$$u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}}\right) \sum_\rho e_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right) q_{j_\rho}^{s,\,c}(0) \begin{cases} \sin \omega_j t, \\ \cos \omega_j t. \end{cases} \tag{73.16}$$

Величины $q_{j_\rho}^{s,\,c}(0)$ являются константами, которые можно найти из начальных условий.

Выбрав собственные векторы вещественными, мы получим вещественные $u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, если $q_{j_\rho}^{s,\,c}(0)$ выбраны тоже вещественными. В последующем изложении мы будем считать, что это уже сделано. Для общности было бы необходимо взять в (73.14)—(73.16) фазу в виде $(\omega_j t + \delta_j)$, но обычно мы будем принимать $\delta_j = 0$.

§ 74. Кристаллическая симметрия и собственные векторы $[\boldsymbol{e}_j]$ матрицы $[\boldsymbol{D}]$

Основное свойство полноты собственных векторов $[\boldsymbol{e}_{j_\rho}]$ динамической матрицы для заданной частоты ω_j, как и в (72.28), допускает применение теоретико-группового анализа. Возвращаясь к уравнениям движения (72.7) или (72.16), мы преобразуем их с помощью оператора преобразования $P_{\{\varphi|t\}}$:

$$P_{\{\varphi|t\}}[\boldsymbol{D}]P^{-1}_{\{\varphi|t\}}\cdot P_{\{\varphi|t\}}\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]=\omega_j^2 P_{\{\varphi|t\}}\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]. \tag{74.1}$$

Однако из (71.17) и (71.23) следует

$$P_{\{\varphi|t\}}[\boldsymbol{D}]P^{-1}_{\{\varphi|t\}}=[\boldsymbol{D}']=[\boldsymbol{D}]. \tag{74.2}$$

Поэтому

$$[\boldsymbol{D}]P_{\{\varphi|t\}}\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]=\omega_j^2 P_{\{\varphi|t\}}\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]. \tag{74.3}$$

Это эквивалентно выражению

$$[\boldsymbol{D}]\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]=\omega_j^2\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right], \tag{74.4}$$

где

$$\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]\equiv P_{\{\varphi|t\}}\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]. \tag{74.5}$$

Далее возможны два разных подхода. Во-первых, заметим, что благодаря полноте совокупности $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ из (72.15) преобразованный собственный вектор $\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]$, являющийся собственным вектором для частоты ω_j^2, можно записать как линейную комбинацию векторов базиса:

$$\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]=\sum_{\rho'=1}^{l_j} D^{(j)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\})_{\rho'\rho}\left[\boldsymbol{e}_{j_{\rho'}}\right]. \tag{74.6}$$

Индекс j в (74.6) сохранен, чтобы указать, что собственные состояния относятся к ω_j^2. Следовательно, l_j собственных векторов из (72.15) являются базисом для представления $D^{(j)}$ группы операторов $\mathfrak{G}_P$. Доказательство можно проследить в § 14, 15.

С другой стороны, величины $e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa\end{matrix}\middle| j_\rho\right)$ являются компонентами вектора $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ и имеют физический смысл декартовой α-компоненты смещения атома в узле $\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa\end{matrix}\right)$ на частоте ω_j. Величина $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ тогда является физическим вектором (тензором первого ранга) и подчиняется соответствующим правилам преобразования. Таким образом,

$$(\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}})_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa\end{matrix}\middle| j_\rho\right)=\sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{matrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi\end{matrix}\middle| j_\rho\right). \tag{74.7}$$

Заметим, что (74.6) устанавливает связь между самими собственными векторами — преобразованными и исходными, — тогда как (74.7) дает соотношение между компонентами этих векторов. Если взять компоненту уравнения (74.6) и подставить (74.7), то получим

$$(e_{\{\varphi\}})_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)=\sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{matrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{matrix}\middle| j_\rho\right)=$$
$$=\sum_{\rho'=1}^{l_j} D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol t\})_{\rho'\rho}\, e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_{\rho'}\right). \qquad (74.8)$$

Отметим, что в (74.8) входят значения собственных векторов в разных точках поля.

Элементы $D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol t\})_{\rho'\rho}$ можно получить из (74.6) с помощью соотношений ортогональности (72.19) следующим образом:

$$\sum_{l\varkappa\alpha}(e_{\{\varphi\}})_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_{\rho'}\right)=\sum_{l\varkappa\alpha\beta} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_{\rho'}\right)\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{matrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{matrix}\middle| j_\rho\right)\equiv$$
$$\equiv D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol t\})_{\rho'\rho} \qquad (74.9)$$

или

$$D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol t\})_{\rho'\rho}=\left(\boldsymbol e_{\{\varphi\}\,j_\rho},\ \boldsymbol e_{j_{\rho'}}\right). \qquad (74.10)$$

Собственный вектор $\left[e_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]$ можно интерпретировать как повернутый или преобразованный собственный вектор $\left[\boldsymbol e_{j_\rho}\right]$. Так как совокупность повернутых собственных векторов для фиксированного $\{\varphi\,|\,\boldsymbol t\}$

$$\left[e_{\{\varphi\}\,j_1},\ \ldots,\ e_{\{\varphi\}\,j_\rho},\ \ldots,\ e_{\{\varphi\}\,j_{l_j}}\right] \qquad (74.11)$$

является полной, то условия ортогональности и нормировки (72.19) и (72.20) применимы также и для совокупности (74.11), т. е. можно записать оба типа скалярных произведений:

$$\left[\boldsymbol e_{\{\varphi\}\,j_\rho}\right]\cdot\left[\boldsymbol e_{\{\varphi\}\,j'_{\rho'}}\right]=\delta_{jj'}\delta_{\rho\rho'}, \qquad (74.12)$$

$$\left[\boldsymbol e_{\{\varphi\}\,\alpha l\varkappa}\right]:\left[\boldsymbol e_{\{\varphi\}\,\beta l'\varkappa'}\right]=\delta_{\alpha\beta}\delta_{ll'}\delta_{\varkappa\varkappa'} \qquad (74.13)$$

Напомним определение скалярных произведений двух типов: с одной точкой в (72.17) и (72.19) и с двумя точками в (72.18) и (72.20).

§ 75. Существенное вырождение собственных векторов $[e_j]$

Представление $D^{(j)}$ группы $\mathfrak{G}$ определено формулой (74.6) или эквивалентным образом формулой (74.10). Это физическое представление, соответствующее вырожденному собственному значению ω_j^2 матрицы $[\boldsymbol D]$. Оно построено на совокупности собственных векторов (72.15), которые можно взять в качестве базиса линейного векторного пространства $\Sigma^{(j)}$. Согласно теореме Машке, $D^{(j)}$ может быть либо приводимым, либо неприводимым (§ 15).

Далее из физических соображений мы предположим наличие существенного вырождения. Из (70.36) и (72.10) мы видим, что благодаря вещественности собственных векторов

$$[e_{j_\rho}]^* = [e_{j_\rho}] \tag{75.1}$$

пространство

$$\Sigma^{(j)} = \left\{[e_{j_1}], \ldots, [e_{j_\rho}], \ldots, [e_{j_{l_j}}]\right\} \tag{75.2}$$

тождественно пространству

$$K\Sigma^{(j)} = \Sigma^{(j)*} = \left\{[e_{j_1}]^*, \ldots, [e_{j_{l_j}}]^*\right\} = \Sigma^{(j)}. \tag{75.3}$$

Поэтому вещественным является и представление $D^{(j)}$, заданное в пространстве $\Sigma^{(j)}$:

$$D^{(j)} = D^{(j)*}. \tag{75.4}$$

Сделаем следующее утверждение: если $D^{(j)}$ — представление, согласно которому преобразуются линейно-независимые собственные векторы $[e_{j_\rho}]$ при фиксированном значении частоты ω_j^2, то

$D^{(j)}$ является вещественным неприводимым представлением группы $\mathfrak{G}$. (75.5)

Вещественное неприводимое представление можно также называть «физическим» неприводимым представлением. Тогда утверждение (75.5) является утверждением о наличии существенного вырождения. При случайном вырождении $D^{(j)}$ приводимо, и мы рассмотрим этот случай позже.

Если неприводимое представление $D^{(j)}$ группы $\mathfrak{G}$ не вещественно, то оно не соответствует физическому собственному значению. В этом случае физическим неприводимым представлением является

$$D^{(j)} = D^{(j')} \oplus D^{(j')*}. \tag{75.6}$$

Этот случай также будет специально рассмотрен ниже.

Следует специально отметить, что (75.5) и (75.6) показывают, что совокупность всех вырожденных физических собственных состояний, являющихся вырожденными собственными векторами динамической матрицы, образует базис для вещественного неприводимого представления группы $\mathfrak{G}$. Обратное утверждение, очевидно, не верно. Иначе говоря, не каждое неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$ соответствует физическому собственному состоянию. Одна из причин ошибочности обратного утверждения состоит в том, что не каждое неприводимое представление $D^{(^\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$ вещественно. Эта проблема вещественности $D^{(^\star k)(m)}$ более подробно будет обсуждаться в § 92. Вторая причина тоже будет объяснена ниже, когда в § 82 будет показано, что физическими неприводимыми представлениями $D^{(k)(m)}$, отражающими свойства симметрии нормальных колебаний, являются те представления, которые возникают (в специальном, объясненном ниже смысле) из векторного представления, т. е. из представления, по которому преобразуются декартовы компоненты векторов.

Предположение о существенном вырождении позволяет установить связь между чисто математическим анализом в главах 2—7 неприводимых представлений пространственной группы $\mathfrak{G}$ и физическим смыслом свойств симметрии собственных векторов и динамической матрицы $[\boldsymbol{D}]$. Тогда индексы j_ρ, характеризующие собственные векторы в (75.1), можно сопоставить с индексами $(^\star\boldsymbol{k})(m)$ представлений $D^{(^\star k)(m)}$:

$$\Sigma^{(j)} \longleftrightarrow \Sigma^{(^\star k)(m)} \tag{75.7}$$

или для каждого базисного вектора

$$\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] \longleftrightarrow \left[\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}_\sigma;\, m;\, \lambda}\right] \equiv \psi_\lambda^{(k_\sigma)(m)}. \tag{75.8}$$

Следовательно, можно установить связь собственных векторов $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ и блоховских векторов

$$\psi_\lambda^{(k_\sigma)(m)}, \quad \sigma = 1, \ldots, s; \quad \lambda = 1, \ldots, l_m. \tag{75.9}$$

Очевидно, $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ можно выбрать так, чтобы для правильных линейных комбинаций имели место соотношения (75.8), (75.9). Эта программа будет реализована далее, начиная с § 80, где вводятся комплексные нормальные координаты.

§ 76. Кристаллическая симметрия и преобразование нормальных координат q_j

Возвратимся к обсуждению § 73. Нормальная координата q_{j_ρ} является проекцией $\boldsymbol{w}$ на собственный вектор $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ аналогично (73.1) и (73.4):

$$w_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_j \sum_\rho e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right) q_{j_\rho}. \tag{76.1}$$

Рассмотрим поле повернутых смещений $\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}}$. Его можно выразить через поле исходных собственных векторов $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$:

$$w_{\{\varphi\}} = \sum_{j} \sum_{\rho} \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] q_{\{\varphi\}\, j_\rho}. \tag{76.2}$$

В (76.2) новые, повернутые компоненты $q_{\{\varphi\}\, j_\rho}$, или $\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}}$, определяются как проекции поля повернутых смещений на $\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\, j_\rho}\right]$.

Равным образом мы можем выразить повернутые смещения $\left[\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}}\right]$ через повернутые собственные векторы $\left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\, j_\rho}\right]$. Легко видеть, что в этом случае

$$\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}} = \sum_{j} \sum_{\rho} \left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\, j_\rho}\right] q_{j_\rho}, \tag{76.3}$$

где q_{j_ρ} те же, что и в (76.1). Сравнивая (70.7), (74.7) и (76.1) имеем

$$(\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}})_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_{\beta} \varphi_{\alpha\beta} w_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{pmatrix} = \sum_{\beta} \sum_{j} \sum_{\rho} \varphi_{\alpha\beta} e_\beta \left(\begin{matrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{matrix} \middle| j_\rho \right) q_{j_\rho} =$$
$$= \sum_{j} \sum_{\rho} (\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}})_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \middle| j_\rho \right) q_{j_\rho}. \tag{76.4}$$

Уравнение (76.3) выражает тот хорошо знакомый из векторного анализа результат, что компоненты повернутого вектора в повернутых осях те же, что и компоненты неповернутого вектора в исходных осях. В нашем случае компонентами повернутого вектора являются величины q_{j_ρ}.

Чтобы определить $q_{\{\varphi\}\, j_\rho}$ из (76.2), мы воспользуемся (74.6). Из (76.2) и (72.19) следует

$$\begin{aligned}
q_{\{\varphi\}\, j_\rho} &= \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] \cdot \left[\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}}\right] = \\
&= \sum_{j'\rho'} \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] \cdot \left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\, j'_{\rho'}}\right] q_{j'_{\rho'}} = \\
&= \sum_{j'\rho'} \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] \cdot \sum_{\rho''} D^{(j')} (\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\rho''\rho'} \left[\boldsymbol{e}_{j'_{\rho''}}\right] q_{j'_{\rho'}} = \\
&= \sum_{j'\rho'\rho''} D^{(j')} (\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\rho''\rho'}\, \delta_{jj'} \delta_{\rho\rho''} q_{j'_{\rho'}} = \\
&= \sum_{\rho'} D^{(j)} (\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\rho\rho'}\, q_{j_{\rho'}}.
\end{aligned} \tag{76.5}$$

Отметим то существенное обстоятельство, что для получения (76.5) при переходе от второй строки к третьей мы воспользовались соотношением (74.6).

Важно понимать, что из (76.5) можно вывести правило, по которому «преобразуются» координаты q_{j_ρ}. Так как q_{j_ρ} являются абстрактными динамическими переменными, не имеющими простой связи с обычными физическими смещениями, необходимо установить специальные правила их преобразования при действии оператора $P_{\{\varphi \mid t\}}$. Эти правила можно найти, используя трансформационные свойства функций (скалярных, векторных и тензорных) координат в конфигурационном пространстве. Вообще говоря, эти q_{j_ρ} сами по себе не являются функциями координат конфигурационного пространства. Это обстоятельство может быть причиной недоразумений, и важно различать правила преобразований физических величин (например, смещений) от правил преобразования, установленных математическим способом. Мы можем тогда написать

$$P_{\{\varphi \mid t\}}\boldsymbol{w} \equiv \boldsymbol{w}_{\{\varphi\}} = \sum_j \sum_\rho \left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right] q_{\{\varphi\}\, j_\rho} = \sum_j \sum_\rho \left[\boldsymbol{e}_{\{\varphi\}\, j_\rho}\right] q_{j_\rho} \qquad (76.6)$$

и

$$P_{\{\varphi \mid t\}} q_{j_\rho} \equiv q_{\{\varphi\}\, j_\rho} = \sum D^{(j)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\rho\rho'}\, q_{j_{\rho'}}. \qquad (76.7)$$

Снова отметим, что $D^{(j)}$ является вещественным неприводимым представлением $\mathfrak{G}$, определенным в (75.5).

Следует подчеркнуть, что использование (74.6) эквивалентно предположению в нашем анализе о существенном вырождении. Это проявляется при использовании условия полноты набора собственных векторов $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ при фиксированном значении ω_j^2. С другой стороны, общее разложение повернутых нормальных координат в ряд по полной совокупности $\left[\boldsymbol{e}_{j_\rho}\right]$ для всех частот имело бы вид

$$\begin{aligned} q_{\{\varphi\}\, j_\rho} &= \sum_{\varkappa l \alpha} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)(\boldsymbol{w}_{\{\varphi\}})_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\right) = \\ &= \sum_{\varkappa l \alpha\beta} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)\varphi_{\alpha\beta} w_\beta\left(\begin{matrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{matrix}\right) = \\ &= \sum_{\varkappa l \alpha\beta} \sum_{j'\rho'} e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)\varphi_{\alpha\beta} e_\beta\left(\begin{matrix} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi} \end{matrix}\middle| j'_{\rho'}\right) q_{j'_{\rho'}}. \end{aligned} \qquad (76.8)$$

Это выражение должно быть тождественным (76.5), что не очевидно. Действительно, сравнивая (76.8) с (76.5), имеем

$$\sum_{\varkappa l\alpha\beta}\sum_{j'\rho'} e_\alpha\left(\begin{array}{c} l \\ \varkappa \end{array}\middle| j_\rho\right)\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{array}{c} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi}\end{array}\middle| j'_{\rho'}\right)q_{j'_{\rho'}} =$$

$$=\sum_{j'\rho'}\left\{\sum_{\varkappa l\alpha\beta} e_\alpha\left(\begin{array}{c} l \\ \varkappa \end{array}\middle| j_\rho\right)\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{array}{c} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi}\end{array}\middle| j'_{\rho'}\right)\right\}q_{j'_{\rho'}} =$$

$$=\sum_{j'\rho'}\left\{D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{\rho\rho'}\,\delta_{jj'}\right\}q_{j'_{\rho'}} \qquad (76.9)$$

и, производя сопоставление с (74.9), получаем

$$\sum_{\varkappa l\alpha\beta} e_\alpha\left(\begin{array}{c} l \\ \varkappa \end{array}\middle| j_\rho\right)\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{array}{c} l_{\bar\varphi} \\ \varkappa_{\bar\varphi}\end{array}\middle| j'_{\rho'}\right)= D^{(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{\rho\rho'}\,\delta_{jj'}. \qquad (76.10)$$

Видно, что (76.10) выражает ортогональность собственных векторов, относящихся к различным множествам (различным значениям ω_j^2), аналогично определению (74.9) для коэффициентов преобразования из одного множества. Используя определение обратного поворота, можно, по-видимому, установить, что (76.10) полностью эквивалентно (74.9). Этот вывод получен теперь двумя различными, но связанными способами. Короче говоря, (74.9) и (76.10) дают просто матричные элементы матрицы $D^{(j)}$, с помощью которой собственные векторы, или нормальные координаты, преобразуются через линейные комбинации компонент преобразованных и исходных собственных векторов.

§ 77. Преобразование Фурье

Рассмотрение в § 68—76 показало, что совокупность всех нормальных координат q_{j_ρ} является сама по себе базисом полных неприводимых представлений $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$. Предположение о существенном вырождении было весьма важным в этом анализе. Следующий шаг в нашем рассмотрении состоит в определении правильных линейных комбинаций q_{j_ρ}, которые являются базисом неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. В нескольких следующих параграфах мы построим базисные блоховские векторы, которые осуществляют приведение $\mathfrak{T}$. Мы установим их связь с фурье-компонентами смещений, динамической матрицей и собственными векторами динамической матрицы. Будут определены возникающие в таком рассмотрении комплексные нормальные координаты, для которых будут установлены правила преобразования под действием операторов из $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Напомним выражения (24.7) и (24.10), которые мы теперь перепишем в таком виде:

$$\sum_{R_L}\left(\frac{\exp i\boldsymbol{R}_L\cdot\boldsymbol{k}}{\sqrt{N}}\right)\left(\frac{\exp i\boldsymbol{R}_L\cdot\boldsymbol{k}'}{\sqrt{N}}\right)^*=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{77.1}$$

и

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{\exp i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L}{\sqrt{N}}\right)\left(\frac{\exp i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L'}}{\sqrt{N}}\right)^*=\delta_{LL'}. \tag{77.2}$$

Ранее эти соотношения были получены из соотношений ортогональности и нормировки для строк и столбцов неприводимых представлений трансляционной группы $\mathfrak{T}$. Они также могут рассматриваться как набор соотношений полноты для совокупности функций

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\exp i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L, \tag{77.3}$$

которые определены для всех $\boldsymbol{k}$ в зоне (при фиксированных $\boldsymbol{R}_L$) или для всех векторов решетки $\boldsymbol{R}_L$ (при фиксированных $\boldsymbol{k}$). Как и раньше, $N=8N_1N_2N_3$ есть порядок группы $\mathfrak{T}$.

Плоские волны (77.3) являются базисными функциями для теории преобразований Фурье интересующих нас физических величин.

§ 78. Преобразование Фурье для смещений и матрица силовых постоянных: динамическая матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$

Выполним теперь следующее разложение декартовых компонент элементарных смещений:

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}} w_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L}, \tag{78.1}$$

где $\varkappa$ характеризует сорт атомов в ячейке, а $\boldsymbol{k}$ — разрешенный волновой вектор. Очевидно, $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ — комплексные переменные, и мы можем положить

$$w_\alpha^*(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})=w_\alpha(\varkappa\,|-\boldsymbol{k}), \tag{78.2}$$

так чтобы $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa\end{pmatrix}$ были вещественными. Рассмотрим $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ как новые независимые переменные.

Чтобы получить уравнения движения для этих переменных, запишем сначала через переменные $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ кинетическую и потенциальную энергии. Подставляя (78.1) в (67.8), найдем

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\substack{l\varkappa\alpha\\ l'\varkappa'\beta}}\sum_{kk'}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}\frac{1}{N\sqrt{M_\varkappa M_{\varkappa'}}}\,w_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})\,w_\beta(\varkappa'\,|\,\boldsymbol{k}')\times$$

$$\times\exp\left[i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_{L'}\right)\right]. \qquad (78.3)$$

Теперь, используя (77.1) и (77.2) и свойство матрицы силовых постоянных (69.7), получаем

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\varkappa\alpha\\ \varkappa'\beta}}\sum_{\boldsymbol{k}} w_\alpha(\varkappa\,|\,-\boldsymbol{k})\,D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} w_\beta(\varkappa'\,|\,\boldsymbol{k}), \qquad (78.4)$$

где

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}\equiv\sum_{\lambda}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \lambda \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}\frac{\exp\left(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\lambda\right)}{\sqrt{M_\varkappa M_{\varkappa'}}}. \qquad (78.5)$$

Матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$, матричные элементы которой даны в (78.5), является динамической матрицей кристалла; $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ — это фурье-компонента матрицы силовых постоянных $[\Phi]$. Динамическая матрица, которую следует считать комплексной, эрмитова:

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}=D_{\beta\alpha}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa'\varkappa \end{pmatrix}^*$$

или

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]=[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^+=[\widetilde{\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})}]^*. \qquad (78.6)$$

Это следует из симметричности матрицы силовых постоянных:

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}=\Phi_{\beta\alpha}\begin{pmatrix} l' & l \\ \varkappa' & \varkappa \end{pmatrix} \qquad (78.7)$$

или

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l-l' & 0 \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}=\Phi_{\beta\alpha}\begin{pmatrix} l'-l & 0 \\ \varkappa' & \varkappa \end{pmatrix} \qquad (78.8)$$

см. (69.4)]. Тогда (78.4) преобразуется к виду

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\varkappa\alpha\\ \varkappa'\beta}}\sum_{\boldsymbol{k}} w_\alpha^*(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})\,D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} w_\beta(\varkappa'\,|\,\boldsymbol{k}). \qquad (78.9)$$

Аналогично для кинетической энергии, подставляя (78.1) в (67.14), найдем

$$T=\frac{1}{2}\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\boldsymbol{k}}\dot{w}_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k})^*\,\dot{w}_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k}). \qquad (78.10)$$

Через эти комплексные переменные лагранжиан запишется в виде

$$\mathscr{L} = T - V =$$
$$= \frac{1}{2} \sum \dot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k})^* \dot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) - \frac{1}{2} \sum \sum w_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k})^* D_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} w_\beta (\varkappa' \mid \boldsymbol{k}). \tag{78.11}$$

Если мы называем $w_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k})^*$ координатой, то соответствующий сопряженный импульс равен

$$\pi_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k})^*} = \dot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}). \tag{78.12}$$

Из уравнений Гамильтона мы тогда имеем [7]

$$\dot{\pi}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) = \ddot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) = - \sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} w_\beta (\varkappa' \mid \boldsymbol{k}) \tag{78.13}$$

или

$$\ddot{w}_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) + \sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} w_\beta (\varkappa' \mid \boldsymbol{k}) = 0. \tag{78.14}$$

Отметим, что мы использовали (78.2), чтобы исключить множитель 1/2; отметим также, что координата $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})^*$ и импульс $\dot{w}_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ являются сопряженными переменными. Из-за комплексной экспоненты в (78.1) возникает сложность в вычислениях, связанная с комплексным полем смещений $\boldsymbol{w}(\,|\boldsymbol{k})$. Удобно рассматривать переменные $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ как $\alpha\varkappa$-компоненты векторного поля $\boldsymbol{w}(\,|\boldsymbol{k})$. Очевидно, имеется всего $3r$ таких компонент:

$$w_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}); \quad \alpha = 1, \ldots, 3; \quad \varkappa = 1, \ldots, r, \tag{78.15}$$

так что

$$\boldsymbol{w} (\,\mid \boldsymbol{k}) \tag{78.16}$$

для фиксированного $\boldsymbol{k}$ является вектором в $3r$-мерном пространстве. Мы предположим далее гармоническую зависимость смещений от времени:

$$w_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) = \xi_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) \exp i\omega (\boldsymbol{k} \mid j)\, t. \tag{78.17}$$

Подставляя это выражение в (78.14), получаем задачу на собственные значения:

$$- \omega^2 (\boldsymbol{k} \mid j)\, \xi_\alpha (\varkappa \mid \boldsymbol{k}) + \sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} \xi_\beta (\varkappa' \mid \boldsymbol{k}) = 0. \tag{78.18}$$

В следующем параграфе мы решим (78.18) и найдем собственные значения и собственные векторы.

§ 79. Собственные векторы динамической матрицы $[D(k)]$

$3r$ собственных векторов динамической матрицы (78.18) обозначим через

$$e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right), \quad j = 1, \ldots, 3r. \tag{79.1}$$

Каждый такой вектор (79.1) имеет $3r$ компонент для фиксированного j:

$$e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right), \quad \alpha = 1, \ldots, 3, \quad \varkappa = 1, \ldots, r. \tag{79.2}$$

Соответствующие собственные значения матрицы $[D(k)]$ обозначим через

$$\omega^2(k \mid j), \quad j = 1, \ldots, 3r. \tag{79.3}$$

Тогда для фиксированных k и j эти векторы удовлетворяют уравнению

$$\sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} k \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} e_\beta\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) = \omega^2(k \mid j)\, e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right). \tag{79.4}$$

Если вырождения нет, тогда собственные векторы (79.2) можно выбрать удовлетворяющими комплексным (эрмитовым) условиям ортогональности и нормировки [4]:

$$\sum_{\varkappa\alpha} e_\alpha^*\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j' \end{matrix}\right) = \delta_{jj'}, \tag{79.5}$$

$$\sum_{j} e_\beta^*\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{79.6}$$

Они следуют из эрмитовости динамической матрицы $[D(k)]$.

При наличии вырождения собственным векторам матрицы $[D(k)]$ следует приписать дополнительный индекс, нумерующий вырожденные собственные векторы. Напишем для всех l_m-кратно вырожденных собственных значений

$$[D(k)] \cdot e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j_\lambda \end{matrix}\right) = \omega^2(k \mid j)\, e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j_\lambda \end{matrix}\right); \quad \lambda = 1, \ldots, l_m. \tag{79.7}$$

Как и раньше, в (72.17) и (72.18), для вырожденных собственных значений можно составить совокупность собственных векторов, которые ортономированы в смысле эрмитового скалярного произведения. Два скалярных произведения (79.5) и (79.6) можно тогда переписать, используя скалярные произведения с одной и двумя точками (72.17) и (72.20):

$$\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)^* \cdot \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\lambda'}\end{matrix}\right.\right) = \delta_{jj'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{79.8}$$

и

$$\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa\left|\boldsymbol{k}\right.\right) : \boldsymbol{e}_\beta\left(\varkappa'\left|\boldsymbol{k}\right.\right)^* = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\varkappa\varkappa'} \tag{79.9}$$

или в компонентах

$$\sum_{\varkappa\alpha} e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right) e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\lambda'}\end{matrix}\right.\right) = \delta_{jj'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{79.10}$$

$$\sum_j \sum_\lambda e_\beta^*\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right) e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\lambda'}\end{matrix}\right.\right) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{79.11}$$

Из-за эрмитовости $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$, подобно (78.6), собственные значения (79.3) удовлетворяют условию

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) \quad \text{вещественны}. \tag{79.12}$$

Благодаря тому что матрица силовых постоянных $[\Phi]$ неотрицательна, динамическая матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ является тоже неотрицательной и мы имеем [4]

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) > 0 \quad \text{условие устойчивости}. \tag{79.13}$$

Как и в предыдущих случаях (72.23)—(72.26), из собственных векторов можно построить матрицу $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})$. В этом случае это матрица с размерами $(3r \times 3r)$ в отличие от матрицы $\boldsymbol{E}$ из (72.23), которая имеет размеры $(3N' \times 3Nr)$. Тогда

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}) = \left|\begin{matrix} e_1\left(1\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ 1\end{matrix}\right.\right) & \ldots & e_1\left(1\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ 3r\end{matrix}\right.\right) \\ \vdots & & \vdots \\ e_3\left(r\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ 1\end{matrix}\right.\right) & \ldots & e_3\left(r\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ 3r\end{matrix}\right.\right) \end{matrix}\right|. \tag{79.14}$$

Из (79.8) и (79.9) следует, что матрица $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})$ унитарна:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^{-1} = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^+ = \widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}^*. \tag{79.15}$$

Тогда из (79.7) и (79.15) получаем

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^{-1}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}) = \Delta(\boldsymbol{k}), \tag{79.16}$$

где $\Delta(\boldsymbol{k})$ — диагональная матрица с вещественными собственными значениями, зависящими от $\boldsymbol{k}$:

$$\Delta(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,1) & & \\ 0 & & & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j_m) \end{pmatrix}. \tag{79.17}$$

В (79.17) каждое собственное значение встречается столько раз, какова степень его вырождения. При наличии *случайного вырождения* некоторое собственное значение может появиться целое кратное число раз c_j его степени вырождения l_m.

Сопоставляя (79.4) и (72.8), видим, что с помощью преобразования Фурье мы свели задачу к секулярным уравнениям с размерами $(3Nr \times 3Nr)$ к N различным секулярным уравнениям с размерами $(3r \times 3r)$ каждое. Каждое из этих уравнений (79.4) записано при фиксированном значении квазиволнового вектора $\boldsymbol{k}$, принимающего различные значения в зоне Бриллюэна. Таким образом, мы построили из матрицы $[\boldsymbol{D}]$ (72.8) N эрмитовых матриц $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ с размерами $(3r \times 3r)$.

Комплексные собственные векторы $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ из (79.4) связаны с вещественными $[\boldsymbol{e}_j]$ из (72.8) соотношением

$$e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_L e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha\left(\begin{matrix} l\\ \varkappa\end{matrix}\left| j\right.\right). \tag{79.18}$$

Соотношение, обратное (79.18), имеет вид

$$e_\alpha\left(\begin{matrix} l\\ \varkappa\end{matrix}\left| j\right.\right) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-\cdot\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right). \tag{79.19}$$

Очевидно, (79.18) можно переписать с помощью оператора проектирования, действующего на смещения. Определяя

$$P_{\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_L\}} e_\alpha\left(\begin{matrix} 0\\ \varkappa\end{matrix}\left| j\right.\right) = e_\alpha\left(\begin{matrix} l\\ \varkappa\end{matrix}\left| j\right.\right), \tag{79.20}$$

мы можем переписать (79.18) в виде

$$e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right) = P^{(\boldsymbol{k})} e_\alpha\left(\begin{matrix} 0\\ \varkappa\end{matrix}\left| j\right.\right), \tag{79.21}$$

где $P^{(\boldsymbol{k})}$ — идемпотентный оператор проектирования (25.4), дающий блоховские функции с волновым вектором $\boldsymbol{k}$. Отметим, что при выписывании индексов вырождения j в обеих частях соотношения (79.18) нужно соблюдать некоторую осторожность.

§ 80. Комплексные нормальные координаты

Введем теперь совокупность комплексных нормальных координат $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$, записав амплитуды $w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})$ из (78.1) в виде

$$w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})=\sum_{j=1}^{3r} e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right) Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}. \tag{80.1}$$

Используя (79.8), мы можем найти обратное соотношение

$$Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}=\sum_{\varkappa\alpha} e_\alpha^*\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right) w_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k}). \tag{80.2}$$

Подставляя (80.1) в (78.9) и используя (79.4), мы получим для потенциальной энергии в гармоническом приближении

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{j}\omega^2(\boldsymbol{k}|j)\, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}^{*} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}. \tag{80.3}$$

Производная по времени от (80.1) равна

$$\dot{w}_\alpha(\varkappa|\boldsymbol{k})=\sum_{j=1}^{3r} e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right) \dot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}. \tag{80.4}$$

Подставляя (80.4) в (78.10), найдем для кинетической энергии

$$T=\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{j}\dot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}^{*}\dot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}. \tag{80.5}$$

Повторяя процедуру (78.9) — (78.14), можно получить следующий гамильтониан:

$$\mathscr{H}=T+V=$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{j}\left\{\dot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}^{*}\dot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}+\omega^2(\boldsymbol{k}|j)\, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}^{*} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}\right\} \tag{80.6}$$

и вытекающие из него уравнения движения для комплексных нормальных координат

$$\ddot{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}+\omega^2(\boldsymbol{k}|j)\, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}=0, \tag{80.7}$$

оправдывающие название „нормальные координаты“ для $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$. Решение уравнения (80.7) имеет вид

$$Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix} = Q_0\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix} \exp\left[\pm i\omega(\boldsymbol{k} \mid j)\, t\right], \tag{80.8}$$

где $Q_0\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ не зависит от времени.

Отметим снова, что из-за комплексного вида $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ энергия (80.6) не представляется в виде суммы квадратов. В (80.3), (80.5) и (80.6) суммирование идет по всем векторам $\boldsymbol{k}$ в зоне Бриллюэна и по всем j для каждого $\boldsymbol{k}$.

Физические смещения $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ тогда можно записать в форме

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \sum_j \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha\left(\varkappa \,\middle|\, \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}. \tag{80.9}$$

Соотношение, обратное (80.9), имеет вид

$$Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L \sum_{\varkappa\alpha} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha^*\left(\varkappa \,\middle|\, \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right) u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \sqrt{M_\varkappa}. \tag{80.10}$$

Из соотношений (80.9) и (80.10) можно видеть, что комплексные нормальные координаты $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ являются декартовыми компонентами смещений, умноженными на $\sqrt{M_\varkappa}$ и спроектированными на вектор $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha^*\left(\varkappa \,\middle|\, \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$. Этот вектор является произведением собственного вектора на плоскую волну. Таким образом, общий характер рассмотрения в этих параграфах находится в соответствии с рассмотрением нормальных координат в § 73.

§ 81. Кристаллическая симметрия, динамическая матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ и ее собственные векторы

Покажем сначала, что $3r$ собственных векторов

$$\boldsymbol{e}\left(\,\middle|\, \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right), \quad j = 1, \ldots, 3r,$$

являются блоховскими векторами, соответствующими волновому вектору $\boldsymbol{k}$. Из (79.18) получаем

$$e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{R_L} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} e_\alpha\left(\begin{matrix}l\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\{\varepsilon\,|-R_L\}} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_L\})^* P_{\{\varepsilon\,|-R_L\}} e_\alpha\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right)=$$

$$=P^{(\boldsymbol{k})} e_\alpha\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right). \tag{81.1}$$

Сравнивая стоящие под знаком суммы выражения в (81.1) и (25.4) и идентифицируя, согласно (23.2), величину $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L}$ с $D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_L\})^*$, мы можем отождествить $P^{(\boldsymbol{k})}$ из (81.1) с соответствующим оператором из (25.4). Перепишем (81.1) в векторных обозначениях

$$\boldsymbol{e}\left(\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right)=P^{(\boldsymbol{k})}\boldsymbol{e}\left(\begin{matrix}0\\ \ \end{matrix}\middle| j\right), \tag{81.2}$$

где $\boldsymbol{e}\left(\begin{matrix}0\\ \ \end{matrix}\middle| j\right)$ — вектор, $\alpha\varkappa$-компонента которого равна $e_\alpha\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right)$. Этот вектор является амплитудой смещения атома, находящегося в ячейке $l=0$ и j-м колебании. Действие оператора $P_{\{\varepsilon\,|-R_L\}}$ на смещение следует понимать в обычном смысле:

$$P_{\{\varepsilon\,|-R_L\}} e_\alpha\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right)=e_\alpha\left(\begin{matrix}l\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right). \tag{81.3}$$

Таким способом смещение атома в нулевой ячейке ($l=0$) можно разложить на компоненты, являющиеся различными блоховскими векторами. Тогда, используя свойства оператора $P^{(\boldsymbol{k})}$, получим аналогично (25.6)

$$P_{\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\}} P^{(\boldsymbol{k})}=D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_{L'}\})\, P^{(\boldsymbol{k})}, \tag{81.4}$$

так что

$$P_{\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\}} e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right)=D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_{L'}\})\, e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right). \tag{81.5}$$

Для проверки убедимся, что прямое применение оператора (79.18) дает тот же результат:

$$P_{\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\}} e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L e^{-ik\cdot R_L} e_{\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\}\,\alpha}\left(\begin{matrix}l\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L e^{-ik\cdot R_L} e_\alpha\left(\begin{matrix}l-l'\\ \varkappa\end{matrix}\right) =$$

$$= e^{-ik\cdot R_{L'}} \sum_L e^{ik\cdot(R_L - R_{L'})} e_\alpha\left(\begin{matrix}l-l'\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right) =$$

$$= D^{(k)}(\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\})\, e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right). \tag{81.6}$$

Чтобы получить (81.5), мы заменили сумму по L эквивалентной суммой по $L-L'$, что возможно благодаря граничным условиям Борна — Кармана.

Так как величины $e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right)$ являются блоховскими векторами, соответствующими заданному волновому вектору k, можно воспользоваться результатами § 34—44 с некоторыми дополнениями. Рассмотрим базисный вектор (81.1). Тогда для фиксированных значений k и j его компоненты нумеруются индексами $\alpha\varkappa$. Возьмем теперь преобразование координат $\{\varphi|t\} \equiv \{\varphi|\tau(\varphi)\}$ из (70.24) при $R_M = 0$, которому соответствует оператор преобразования $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$, и рассмотрим

$$(P_{\{\varphi\,|\,t\}} e)\left(\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right) \equiv e_{\{\varphi\}}\left(\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right). \tag{81.7}$$

Согласно § 30, эта величина является блоховским вектором, соответствующим волновому вектору $\varphi\cdot k$. В операторной форме это можно записать так:

$$P_{\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\}} P_{\{\varphi\,|\,t\}} = P_{\{\varphi\,|\,t\}} P_{\{\varepsilon\,|\,\varphi^{-1}\cdot R_{L'}\}}. \tag{81.8}$$

Применяя правую и левую части соотношения (81.8) к (81.1), получаем

$$P_{\{\varepsilon\,|\,R_L\}} e_{\{\varphi\}}\left(\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right) = D^{(k)}(\{\varepsilon\,|\,\varphi^{-1}\cdot R_{L'}\})\, e_{\{\varphi\}}\left(\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right) =$$

$$= D^{(\varphi\cdot k)}(\{\varepsilon\,|\,R_{L'}\})\, e_{\{\varphi\}}\left(\middle|\begin{matrix}k\\ j\end{matrix}\right). \tag{81.9}$$

Вывод (81.9) прямо в компонентах потребовал бы довольно трудоемких вычислений. Соотношение (81.9) показывает, что (81.7) является блоховским вектором, соответствующим волновому вектору $\varphi\cdot\boldsymbol{k}$. Рассмотрим сначала величину

$$P_{\{\varphi\mid t\}}P^{(\boldsymbol{k})}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_L\}}D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_L\})^*\,P_{\{\varphi\mid t\}}P_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_L\}}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_L\}}D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon-\boldsymbol{R}_L\})^*\,P_{\{\varepsilon\mid-\varphi\cdot\boldsymbol{R}_L\}}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}. \qquad (81.10)$$

Пусть

$$\varphi\cdot\boldsymbol{R}_L\equiv\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\quad\text{и}\quad\boldsymbol{R}_L=\varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_{L_\varphi}; \qquad (81.11)$$

тогда

$$D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_L\})^*=D^{(\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon\mid-\varphi^{-1}\cdot\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\}\right)^*=$$

$$=D^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\}\right)^*. \qquad (81.12)$$

Заменяя суммирование по $-\boldsymbol{R}_L$ суммированием по $-\boldsymbol{R}_{L_\varphi}$, получаем

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\}}D^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}\left(\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\}\right)^*P_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_{L_\varphi}\}}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}. \qquad (81.13)$$

Однако в (81.13) индекс $\boldsymbol{R}_{L_\varphi}$ является немым индексом суммирования, который можно переобозначить, например, как $\boldsymbol{R}_N$; кроме того, стоящий справа оператор не зависит от индекса суммирования. Учитывая это, имеем

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_N\}}D^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_N\})^*\,P_{\{\varepsilon\mid-\boldsymbol{R}_N\}}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}=$$

$$=P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}} \qquad (81.14)$$

или

$$P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}P^{(\boldsymbol{k})}=P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}. \qquad (81.15)$$

Чтобы получить явное выражение, которое можно сравнить с (79.12), мы применим оператор (81.15) к $[\boldsymbol{e}_f]$:

$$P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}P_{\{\varphi\mid\tau(\varphi)\}}e_\alpha\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa\end{matrix}\middle| j\right)=P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}\sum_\beta\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{matrix}0\\ \varkappa_{\bar\varphi}\end{matrix}\middle| j\right)=$$

$$=P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}\sum_\beta\varphi_{\alpha\beta}e_\beta\left(\begin{matrix}0\\ \varphi^{-1}\boldsymbol{r}_\varkappa-\varphi^{-1}\boldsymbol{\tau}(\varphi)\end{matrix}\middle| j\right). \qquad (81.16)$$

Чтобы получить (81.16), мы воспользовались соотношением (70.24). Подставляя оператор $P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}$ и возвращаясь для удобства к обозначениям, в которых вектор решетки обозначается индексом l, получим для (81.16)

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_L} e^{-i(\varphi\cdot k)\cdot R_L} \sum_{\beta} \varphi_{\alpha\beta} e_{\beta} \left(\begin{matrix} l \\ \varphi^{-1}\cdot r_{\varkappa} - \varphi^{-1}\tau(\varphi) \end{matrix} \middle| j \right). \tag{81.17}$$

Выполняя суммирование, мы получим результат действия оператора (вращение плюс нетривиальная трансляция) на собственный вектор:

$$P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} e_{\alpha} \left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix} \right) = \sum_{\beta} \varphi_{\alpha\beta} e_{\beta} \left(\varphi^{-1} r_{\varkappa} - \varphi^{-1}\tau(\varphi) \middle| \begin{matrix} \varphi\cdot k \\ j \end{matrix} \right). \tag{81.18}$$

Из этого соотношения видно, что собственные векторы $e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix} \right)$ или $e\left(\middle| \begin{matrix} \varphi\cdot k \\ j \end{matrix} \right)$ являются тензорами первого ранга (векторами), а также что они являются блоховскими векторами при заданных значениях волнового вектора (соответственно k или $\varphi\cdot k$).

Как было отмечено Вигнером ([1], стр. 106), в похожем, но несколько отличающемся случае существенно использовать свойства $P_{\{\varphi\,|\,t_i}$ как оператора, действующего на функции. Забывая об этом, мы можем совершить серьезную ошибку, применяя операторы прямо к числам, т. е. к определенным значениям собственных векторов $e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix} \right)$ в «узлах» или координатах $l\varkappa\alpha$ и т. д. Это, как правило, приводит к неверному результату.

Исследовав трансформационные свойства собственных векторов, перейдем теперь к изучению свойств преобразований самих уравнений движения (79.7). Для этого мы применим оператор $P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}}$ к этим уравнениям:

$$P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} [D(k)]\, P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j_{\lambda} \end{matrix} \right) =$$

$$= \omega^2(k\,|\,j)\, P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}}\, e\left(\middle| \begin{matrix} k \\ j_{\lambda} \end{matrix} \right). \tag{81.19}$$

Рассмотрим преобразованную динамическую матрицу

$$[D'(k)] \equiv P_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}} [D(k)]\, P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\tau(\varphi)\}}. \tag{81.20}$$

Наиболее просто это можно сделать, применяя операторы проектирования (78.5), аналогично тому как мы это делали при преобразовании векторов смещений. Заметим, что (78.5) можно записать по типу (81.2) через оператор проектирования $P^{(\boldsymbol{k})}$:

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} = \sum_{\lambda} \frac{\exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{\lambda}}{\sqrt{M_{\varkappa}M_{\varkappa'}}} \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \lambda \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{M_{\varkappa}M_{\varkappa'}}} \sum_{\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_{\lambda}\}} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_{\lambda}\})^* P_{\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_{\lambda}\}}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} 0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}, \quad (81.21)$$

где аналогично (81.3)

$$P_{\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_{\lambda}\}}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} 0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \lambda \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}. \quad (81.22)$$

Тогда

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_{\varkappa}M_{\varkappa'}}} P^{(\boldsymbol{k})}\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} 0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}, \quad (81.23)$$

или, в операторной форме,

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})] = P^{(\boldsymbol{k})}M^{-1/2}[\boldsymbol{\Phi}(0)]\,M^{-1/2}, \quad (81.24)$$

где $[\boldsymbol{M}]^{-1/2}$ — корень квадратный из диагональной матрицы, определенной в уравнении (67.17). Тогда (81.23) следует понимать как $\alpha\beta$; $\varkappa\varkappa'$-компоненту (81.24). Теперь с помощью (81.24) мы можем вычислить (81.20). Очевидно, из (81.15) и (81.24) следует

$$P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}[D(\boldsymbol{k})]\,P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}} = P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}\left(P^{(\boldsymbol{k})}M^{-1/2}[\boldsymbol{\Phi}(0)]\,M^{-1/2}\right)P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}} =$$

$$= P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}M^{-1/2}[\boldsymbol{\Phi}(0)]\,M^{-1/2}P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}. \quad (81.25)$$

Но $\{\varphi|\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}$ — это операция симметрии динамической матрицы, так что мы можем использовать (71.23) и получить из (81.25)

$$P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,P^{-1}_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}} = P^{(\varphi\cdot\boldsymbol{k})}[\boldsymbol{M}]^{-1/2}[\boldsymbol{\Phi}(0)]\,[\boldsymbol{M}]^{-1/2} = [\boldsymbol{D}(\varphi\cdot\boldsymbol{k})]. \quad (81.26)$$

Матричный элемент $[\boldsymbol{D}(\varphi\cdot\boldsymbol{k})]$ из (81.24) и (81.23) равен

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \varphi\cdot\boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} = \sum_{\lambda} \frac{\exp i(\varphi\cdot\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_{\lambda}}{\sqrt{M_{\varkappa}M_{\varkappa'}}} \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \lambda \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}. \quad (81.27)$$

Используя (81.26) и (81.19). имеем

$$[\boldsymbol{D}(\varphi\cdot\boldsymbol{k})]\,P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_{\lambda} \end{matrix}\right.\right) = \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,P_{\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}(\varphi)\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_{\lambda} \end{matrix}\right.\right). \quad (81.28)$$

Динамические уравнения для собственных векторов и собственных значений при фиксированном значении волнового вектора $\varphi\cdot\boldsymbol{k}$ имеют вид

$$[\boldsymbol{D}(\varphi\cdot\boldsymbol{k})]\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \varphi\cdot\boldsymbol{k} \\ j_{\lambda} \end{matrix}\right.\right) = \omega^2(\varphi\cdot\boldsymbol{k}\,|\,j_{\lambda})\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \varphi\cdot\boldsymbol{k} \\ j_{\lambda} \end{matrix}\right.\right). \quad (81.29)$$

Сравнивая это уравнение с (81.28), видим, что

$$P_{\{\varphi|\tau(\varphi)\}}\boldsymbol{e}\left(\begin{array}{|c}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{array}\right)\ \text{есть собственный вектор для волнового вектора}\ \varphi\cdot\boldsymbol{k} \tag{81.30}$$

и

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)=\omega^2(\varphi\cdot\boldsymbol{k}\,|\,j_\lambda). \tag{81.31}$$

Таким образом, оказывается, что для каждого оператора в группе $\mathfrak{G}$ и в частности для представителей смежного класса $\{\varphi|\tau(\varphi)\}$

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j_\lambda)=\omega^2(\varphi_2\cdot\boldsymbol{k}\,|\,j_\lambda)=\ \dots\ =\omega^2\left(\varphi_{g_p}\cdot\boldsymbol{k}\,|\,j_\lambda\right),\quad \lambda=1,\ \dots,\ l_j. \tag{81.32}$$

Тогда действие операции поворота состоит в преобразовании уравнений движения к эквивалентным уравнениям, собственные значения которых связаны с исходными собственными значениями соотношением (81.32).

Мы рассмотрели одно из проявлений существенного вырождения в задаче динамики решетки, связанное с группой пространственной симметрии $\mathfrak{G}$.

Наконец, отметим, что для каждого оператора $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}$ в группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ мы можем получить из (81.26) соотношение

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}[\boldsymbol{D}\ (\boldsymbol{k})]\,P^{-1}_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}=[\boldsymbol{D}\,(\boldsymbol{k})]. \tag{81.33}$$

Таким образом, величины $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ инвариантны относительно преобразований $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Так как это инвариантный оператор, из его собственных векторов можно построить базис неприводимых представлений $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

§ 82. Собственные векторы матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ как базис для представлений $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$

Так как величины $\boldsymbol{e}\left(\begin{array}{|c}\boldsymbol{k}\\ j\end{array}\right)$ из (81.1) являются блоховскими векторами, они могут быть использованы в качестве базиса неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$. Мы сейчас покажем, какие представления при этом возникают. Ограничимся $3r$ собственными векторами (81.1), заданными при фиксированном $\boldsymbol{k}$. Они преобразуются как физическое векторное поле.

Рассмотрим совокупность операторов $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}P_{\mathfrak{T}}$, которая включает $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ аналогично (36.1). Для каждого оператора этой совокупности имеет место соотношение (34.4); таким образом,

$$\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{82.1}$$

Соответственно из (81.17)

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e_\alpha \left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix} \right) = \sum_\beta (\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta} e_\beta \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix} \right) =$$

$$= \sum_\beta (\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta} e_\beta \left(\varphi_{l_\lambda}^{-1} \boldsymbol{\varkappa} - \varphi_{l_\lambda}^{-1} \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda} \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix} \right). \tag{82.2}$$

Заметим, что добавление $2\pi\boldsymbol{B}_H$ к вектору $\boldsymbol{k}$ не изменяет оператора $P^{(\boldsymbol{k})}$.

Прежде чем обсуждать (82.2), отметим, что для всех $\boldsymbol{e}\left(\middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix} \right)$ сделан раз и навсегда выбор конкретных канонических или фиксированных значений $\alpha\varkappa$. Следовательно, фиксированы декартовы оси координат, соответствующие $\alpha = 1, 2, 3$. Также фиксирован набор атомов в элементарной ячейке $\varkappa = 1, \ldots, r$, по одному атому в каждой подрешетке Бравэ. Все они, например, могут быть взяты в элементарной ячейке с $l = 0$. Напомним также обозначения (70.29) и (70.30). При преобразовании $\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ в выражении (82.2) координата атома в ячейке преобразуется, согласно (70.30), как

$$\boldsymbol{r}_\varkappa \to \boldsymbol{r}_{\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}} = \boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l'_\lambda}} \varkappa'' \right) + \boldsymbol{r}_{\varkappa''}, \tag{82.3}$$

где снова $\boldsymbol{r}_{\varkappa''}$ — координата атома в элементарной ячейке. Она переводится преобразованием симметрии $\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ в эквивалентную координату $\boldsymbol{r}_\varkappa$, которая может и не относиться к той же подрешетке. Это означает, что независимо от того, равно $\boldsymbol{R}_N$ нулю или нет, координата $\boldsymbol{r}_{\varkappa''}$ может совпадать с $\boldsymbol{r}_\varkappa$, а может и не совпадать с ней. Очевидно, здесь имеются четыре случая:

$$\boldsymbol{r}_\varkappa = \boldsymbol{r}_{\varkappa''}; \quad \boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa'' \right) = 0, \tag{82.4}$$

$$\boldsymbol{r}_\varkappa = \boldsymbol{r}_{\varkappa''}; \quad \boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa'' \right) \neq 0, \tag{82.5}$$

$$\boldsymbol{r}_\varkappa \neq \boldsymbol{r}_{\varkappa''}; \quad \boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa'' \right) = 0, \tag{82.6}$$

$$\boldsymbol{r}_\varkappa \neq \boldsymbol{r}_{\varkappa''}; \quad \boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\varphi_{l_\lambda}}, \varkappa'' \right) \neq 0. \tag{82.7}$$

Здесь

$$\boldsymbol{R}_N \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa'' \right) \equiv \varphi_{l_\lambda}^{-1} \cdot \boldsymbol{r}_\varkappa - \varphi_{l_\lambda}^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda} - \boldsymbol{r}''_{\varkappa''}, \tag{82.8}$$

где снова $\boldsymbol{r}_{\varkappa''}$ — радиус-вектор атома в элементарной ячейке, а $\boldsymbol{R}_N$ — вектор решетки.

Таким образом, условие замкнутости системы собственных векторов

$$e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right), \quad j=1, \ldots, 3r, \tag{82.9}$$

с компонентами

$$e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right), \quad \alpha=1, \ldots, 3; \quad \varkappa=1, \ldots, r, \tag{82.10}$$

требует, чтобы в правой стороне равенства (82.2) компоненты

$$e_\beta\left(\varkappa_{\bar{\varphi}}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right) \tag{82.11}$$

также выражались через канонические переменные $\boldsymbol{r}_\varkappa$. Отсюда, используя (82.3), (82.8) и (82.11), имеем

$$e_\beta\left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=e_\beta\left(\boldsymbol{R}_N+\boldsymbol{r}_{\varkappa''}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=P_{\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_N\}}e_\beta\left(\boldsymbol{r}_{\varkappa''}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=$$

$$=D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_N\})\,e_\beta\left(\boldsymbol{r}_{\varkappa''}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right), \tag{82.12}$$

где $\boldsymbol{R}_N$ определено в (82.3). Таким образом, для (82.2) имеем

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\tau_{l_\lambda}\}}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=\sum_\beta(\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta}D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_N\})\,e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right). \tag{82.13}$$

Теперь в (82.3) оба значка $\varkappa$ и $\varkappa''$ принадлежат каноническому набору (82.10). Отсюда видно, что (82.13) является общим соотношением между каноническими компонентами одного и того же вектора $e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ при фиксированном j. Затем, если для фиксированного j мы рассмотрим $3r$ компонент (79.2), то каждую такую компоненту можно пометить двумя индексами α и $\varkappa$:

$$e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right), \quad \alpha=1, \ldots, 3; \quad \varkappa=1, \ldots, r. \tag{82.14}$$

Тогда соотношение (82.13) можно записать в матричной форме:

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\tau_{l_\lambda}\}}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=\sum_\beta\sum_{\varkappa''}D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\tau_{l_\lambda}\})_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa''}e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right),$$

$$\alpha=1, \ldots, 3; \quad \varkappa=1, \ldots, r. \tag{82.15}$$

Для фиксированных значений $\boldsymbol{k}$ и j матрица $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ является $3r$-мерной, имеющей $3r$ строк и столбцов. Мы можем легко вычислить компоненты $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$. Из (82.13) имеем

$$D^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}\right)_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa''} = \left(\varphi_{l_\lambda}\right)_{\alpha\beta} D^{(\boldsymbol{k})}\left(\left\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\varphi_{l_\lambda}}, \varkappa''\right)\right\}\right) \delta_{\varkappa_{\varphi_{l_\lambda}},\,\varkappa''}, \tag{82.16}$$

где

$$\delta_{\varkappa_{\varphi_{l_\lambda}},\,\varkappa''} = \begin{cases} 1 & \text{для пар атомов, связанных соотношением (82.3),} \\ 0 & \text{для всех прочих пар атомов.} \end{cases}$$

Теперь важно установить, что матрица $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}$ не зависит от j. Следовательно, определение $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}$, данное в (82.15), можно записать через собственные векторы $\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right)$:

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} \boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right) = \sum_\beta \sum_{\varkappa''} \boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}\right)_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa''} \boldsymbol{e}_\beta(\varkappa'' \mid \boldsymbol{k}). \tag{82.17}$$

Напомним здесь рассуждение из § 79, в частности (79.9) и (79.14). Обозначая $3r$ векторов, образующих строку, через

$$\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right); \quad \alpha = 1, \ldots, 3; \quad \varkappa = 1, \ldots, r, \tag{82.18}$$

расположим их по образцу (79.14). Тогда (82.17) можно понимать как соотношение между целыми строками векторов, выполняющиееся при фиксированном j.

Естественно, что для строки, как и для столбца, нужна именно пара индексов. В записи (82.13) матрица $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ является прямым произведением представления $\boldsymbol{D}^{(r)}$, по которому преобразуется полярный вектор, на перестановочное представление с точностью до совокупности фазовых множителей типа $D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_N\})$. Таким образом, $D^{(\text{перест})}$ осуществляет перестановки в пределах канонического базисного набора с $\varkappa = 1, \ldots, r$ с учетом дополнительных фазовых множителей, которые, если нужно, добавляются в матричные элементы и в зависимости от которых реализуются различные варианты (82.4)—(82.7). Поэтому

$$D^{(\boldsymbol{k})(e)} = D^{(r)} \otimes D^{(\text{перест})}. \tag{82.19}$$

Матричные элементы представления $D^{(r)}$ имеют индексы $\alpha\beta$, например $D^{(r)}_{\alpha\beta}$, а матричные элементы $D^{(\text{перест})}$ имеют индексы $\varkappa\varkappa'$, например $D^{(\text{перест})}_{\varkappa\varkappa'}$. Ясно, что каждый из этих матричных элементов можно в явном виде получить из (82.16). Мы не будем пользоваться таким явным выражением и хотим только пояснить, что такое построение возможно в принципе. Тогда можно написать

$$\left(D^{(\boldsymbol{k})(e)}\right)_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa'} = D^{(r)}_{\alpha\beta} D^{(\text{перест})}_{\varkappa\varkappa'}. \tag{82.20}$$

Важную роль играет след матрицы $D^{(k)(e)}$. Это ясно видно из (82.13). Вычислим этот след:

$$\operatorname{Sp} D^{(k)(e)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\right\}\right) \equiv \chi^{(k)(e)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\right\}\right) =$$
$$= \sum_{\varkappa''} \left(\pm\left(1+2\cos\varphi_{l_\lambda}\right)\right) D^{(k)}\left(\left\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''\right)\right\}\right) \delta_{\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''}. \quad (82.21)$$

В (82.21) $\delta_{\varkappa\varkappa''}=1$ при $\varkappa=\varkappa''$. Это соответствует случаям (82.4) и (82.5). При $\varkappa \neq \varkappa''$ $\delta_{\varkappa\varkappa''}=0$, что соответствует (82.6) и (82.7). Кроме того, величина

$$\pm\left(1+2\cos\varphi_{l_\lambda}\right) \equiv \sum_{\alpha} \left(\varphi_{l_\lambda}\right)_{\alpha\alpha} \quad (82.22)$$

является следом матрицы φ собственных и несобственных вращений и сумма справа берется по всем атомам $\varkappa''$ в элементарной ячейке. Так как $D^{(k)(e)}$ является представлением группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то его можно представить в виде прямой суммы допустимых физически неприводимых представлений. Мы возвратимся к этому вопросу ниже в § 103.

Наконец, надо отметить, что представление $D^{(k)(e)}$ является унитарным. Это следует из уравнения

$$e_\alpha\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right) : e_\beta\left(\varkappa' \middle| \boldsymbol{k}\right) = P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e_\alpha\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right) : P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e_\beta\left(\varkappa' \middle| \boldsymbol{k}\right), \quad (82.23)$$

которое выражает унитарность оператора P по отношению к скалярному произведению (:), определенному в (79.9) и (79.11). Тогда

$$D^{(k)(e)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\right\}\right)^{-1} = D^{(k)(e)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\right\}\right)^{+}, \quad (82.24)$$

т. е. обратная матрица эквивалентна эрмитово-сопряженной.

§ 83. Собственные векторы $D(\boldsymbol{k})$ как базис представления $D^{(k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$

Возвратимся теперь к (82.17) и (81.28). Для любого элемента $\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, оставляющей инвариантной динамическую матрицу, имеем

$$\left[\boldsymbol{D}\left(\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k}\right)\right] = \left[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})\right]. \quad (83.1)$$

Тогда соотношение (81.28) преобразуется к виду

$$\left[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})\right] \cdot P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\middle| \begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right) = \omega^2(\boldsymbol{k} \mid j)\, P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\middle| \begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right). \quad (83.2)$$

Отсюда следует, что величина

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right) \tag{83.3}$$

является собственным вектором, относящимся к фиксированному значению волнового вектора $\boldsymbol{k}$. Но совокупность вырожденных собственых векторов

$$e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix} \right.\right), \ \ldots, \ e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right), \ \ldots, \ e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_{l_j} \end{matrix} \right.\right), \tag{83.4}$$

соответствующих одному и тому же собственному значению, является полной по отношению к пространственной симметрии. Поэтому собственный вектор (83.3) можно представить в виде линейной комбинации векторов (83.4):

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right) \sum_{\nu=1}^{l_j} D^{(\boldsymbol{k})(j)} \left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\nu\mu} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right), \tag{83.5}$$

$$\mu = 1, \ \ldots, \ l_j.$$

Отметим, что это чисто векторное соотношение. Как обычно, полнота совокупности или пространства (83.4) позволяет определить матрицу $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$, осуществляющую представление в пространстве (83.4) (§ 102). Затем, используя (83.5), можно определить матрицу с размером l_j, осуществляющую представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Чтобы получить матричный элемент $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$, мы возьмем $\alpha\varkappa$-компоненту уравнения (83.5); тогда получим

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}} e_\alpha\left(\varkappa \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right) = \sum_{\nu=1}^{l_j} D^{(\boldsymbol{k})(j)} \left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\nu\mu} e_\alpha\left(\varkappa \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right). \tag{83.6}$$

Подставляя (82.15) и (82.13) в левую сторону (83.6), получаем

$$\sum_\beta \sum_{\varkappa''} D^{(\boldsymbol{k})(e)} \left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\alpha\varkappa, \beta\varkappa''} e_\beta\left(\varkappa'' \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right) =$$

$$= \sum_\beta (\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta} D^{(\boldsymbol{k})} \left(\left\{\boldsymbol{\varepsilon} \mid -\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa''\right)\right\}\right) e_\beta\left(\varkappa'' \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix} \right.\right) =$$

$$= \sum_{\nu=1}^{l_j} D^{(\boldsymbol{k})(j)} \left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\nu\mu} e_\alpha\left(\varkappa \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right). \tag{83.7}$$

Затем, используя условие ортогональности (79.8), найдем

$$D^{(\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\nu\mu} =$$
$$= \sum_{\alpha\varkappa}\sum_{\beta\varkappa''} e^*_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right) D^{(\boldsymbol{k})(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa''}\, e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) =$$
$$= \sum_{\alpha\varkappa}\sum_{\beta\varkappa''} e^*_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)(\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta}\, D^{(\boldsymbol{k})} \times$$
$$\times \left(\left\{\boldsymbol{\varepsilon}\left| -\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}, \varkappa''\right)\right.\right\}\right) \delta_{\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}},\,\varkappa''}\, e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \qquad (83.8)$$

Мы получили явное выражение для элементов матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$ через элементы $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$. Мы возвратимся к обсуждению (83.8) в § 85, где мы рассмотрим соответствующую $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ группу симметрии $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и вытекающее из нее существенное вырождение.

§ 84. Собственные значения матриц $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}$ и $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(j)}$

Заметим, что мы работаем с величинами, которые можно рассматривать как $3r$ компонент $3r$-мерного вектора $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ или равным образом как $3r$ компонент $3r$-мерного вектора $\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa\left|\boldsymbol{k}\right.\right)$. В нашем рассмотрении это обстоятельство проявляется двумя разными, но связанными способами. Компоненту $e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ можно рассматривать как $(\alpha\varkappa)$-компоненту вектора $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ либо как j-компоненту вектора $\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa\left|\boldsymbol{k}\right.\right)$. Между совокупностью $3r$ векторов

$$\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right), \quad j = 1, \ldots, 3r, \qquad (84.1)$$

и совокупностью $3r$ векторов

$$\boldsymbol{e}_\alpha\left(\varkappa\left|\boldsymbol{k}\right.\right), \quad \alpha = 1, \ldots, 3; \quad \varkappa = 1, \ldots, r, \qquad (84.2)$$

при этом должна существовать линейная зависимость. Так как обе совокупности (84.1) и (84.2) удовлетворяют соотношениям ортогональности и нормировки (79.8) — (79.11), между ними можно установить связь с помощью унитарного преобразования

$$e_{\alpha}\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right) = [U]\, e\left(\middle| \begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right). \tag{84.3}$$

При этом в соответствии с (84.3) элементы матрицы $[U]$ должны иметь асимметричные индексы, соответствующие (84.3):

$$[U]_{\alpha\varkappa,\, j}. \tag{84.4}$$

Свойство унитарности тогда записывается так:

$$[U]^{-1} = [U]^{+}. \tag{84.5}$$

Благодаря унитарности $[U]$ соотношение, обратное (84.3), можно записать в виде

$$e\left(\middle| \begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right) = [U]^{+}\, e_{\alpha}\left(\varkappa \middle| \boldsymbol{k}\right). \tag{84.6}$$

Очевидно, $[U]$ — матрица перестановок с единственным отличным от нуля матричным элементом, равным 1 в каждой строке и в каждом столбце. Так как базисы соответствующих представлений связаны унитарным преобразованием $[U]$, то из формул (82.17), (83.5), (84.3), (84.6) следует, что $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ и $D^{(\boldsymbol{k})\,(j)}$ должны быть эквивалентны. Таким образом,

$$D^{(\boldsymbol{k})\,(j)} = [U]^{-1}\, D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}\, [U]. \tag{84.7}$$

Для следов этих матриц имеем

$$\operatorname{Sp} D^{(\boldsymbol{k})\,(j)} = \operatorname{Sp} D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}. \tag{84.8}$$

Мы можем получить (84.8) прямо из (82.21), и мы воспользуемся этим ниже.

Согласно теореме Машке, доказанной в § 15, представление $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ или $D^{(\boldsymbol{k})\,(j)}$ либо неприводимы, либо приводимы. Подчеркнем еще раз, что $D^{(\boldsymbol{k})\,(j)}$ — это представление, по которому преобразуется *полное множество* всех вещественных собственных векторов для всех $3r$ ветвей. Аналогично $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ есть $(3r)$-мерное представление, по которому преобразуется множество всех $3r$ собственных векторов. Однако в этом последнем случае основное правило преобразования основано просто на свойствах векторного поля смещений. А с физическим собственным значением $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ связан именно вектор $e\left(\middle| \begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right)$. Мы возвратимся к этому в следующем параграфе, в котором мы найдем матрицу $[U]$.

§ 85. Существенное вырождение как следствие $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и собственные векторы матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$

В этом параграфе мы суммируем полученные в предыдущих параграфах результаты и установим соотношения между собственными векторами динамической матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ и существенным вырождением, обусловленным группой симметрии $\mathfrak{G}$.

Динамические уравнения (79.7) можно записать в виде

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right),\qquad \mu=1,\ \ldots,\ l_j. \tag{85.1}$$

Преобразуем теперь эти уравнения с помощью оператора преобразования $P_{\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\tau_{l_\lambda}\}}$ из $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$:

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,P^{-1}_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \tag{85.2}$$

Согласно (81.33), эту формулу можно переписать в виде

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \tag{85.3}$$

Возьмем матричный элемент (85.3)

$$\sum_{\beta\varkappa'}D\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)_{\alpha\beta}\left(P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)\right)=$$
$$=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) \tag{85.4}$$

и, подставляя (82.17), получаем

$$\sum_{\beta\varkappa'}\sum_{\gamma\varkappa''}D\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)_{\alpha\beta}D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\beta\varkappa',\,\gamma\varkappa''}e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=\sum_{\bar\beta\bar\varkappa'}D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)_{\alpha\varkappa,\,\bar\beta\bar\varkappa'}e_{\bar\beta}\left(\bar\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j). \tag{85.5}$$

Из (79.4) и (85.1) имеем

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,e_{\bar\beta}\left(\bar\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\sum_{\bar\gamma\bar\varkappa''}D\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ \bar\varkappa',\ \bar\varkappa''\end{matrix}\right)_{\bar\beta\bar\gamma}e_{\bar\gamma}\left(\bar\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \tag{85.6}$$

Подставляя затем (85.6) в (85.5), получаем

$$\sum_{\beta\varkappa'}\sum_{\gamma\varkappa''} D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}_{\alpha\beta} D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\beta\varkappa',\,\gamma\varkappa''}\, e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) = \\ = \sum_{\bar\beta\bar\varkappa'}\sum_{\bar\gamma\bar\varkappa''} D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\alpha\varkappa,\,\bar\beta\bar\varkappa'}\, D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \bar\varkappa'\bar\varkappa'' \end{pmatrix}_{\bar\beta\bar\gamma} e_{\bar\gamma}\left(\bar\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \quad (85.7)$$

Чтобы продвинуться дальше, нам нужно воспользоваться свойством эрмитовости динамической матрицы: $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})] = [\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^{+}$ или в компонентах

$$D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa'\varkappa \end{pmatrix}^{*}_{\beta\alpha}. \quad (85.8)$$

Тогда для (85.7) имеем

$$\sum_{\beta\varkappa'}\sum_{\gamma\varkappa''} D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\beta\varkappa',\,\gamma\varkappa''}\, D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa'\varkappa \end{pmatrix}^{*}_{\beta\alpha} e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) = \\ = \sum_{\bar\beta\bar\varkappa'}\sum_{\bar\gamma\bar\varkappa''} D\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \bar\varkappa''\bar\varkappa' \end{pmatrix}^{*}_{\bar\gamma\bar\beta} D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})_{\alpha\varkappa,\,\bar\beta\bar\varkappa'}\, e_{\bar\gamma}\left(\bar\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) \quad (85.9)$$

или

$$\sum_{\gamma\varkappa''}\left(\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})\cdot D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})\right)_{\gamma\varkappa'',\,\alpha\varkappa} e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right) = \\ = \sum_{\bar\gamma\bar\varkappa''}\left(D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})\right)\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})_{\bar\gamma\varkappa'',\,\alpha\varkappa}\, e_\gamma\left(\bar\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \quad (85.10)$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых компонентах $e_\gamma\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ в обеих частях уравнения (85.10), видим, что (85.10) является следствием матричного уравнения

$$D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\})\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})\, D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}). \quad (85.11)$$

Таким образом, мы показали, что динамическая матрица коммутирует с каждой из матриц представления $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Форма матрицы $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})$ задана соотношением (78.5). Эта величина не является скаляром, точнее, не является единичной матрицей, умноженной на скаляр. Так как не сводящаяся к константе матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ коммутирует со всеми матрицами представления $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, из леммы Шура следует, что $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ приводимо. Чтобы представить $D^{(\boldsymbol{k})\,(e)}$ в виде прямой суммы неприводимых представлений, мы в первую очередь должны привести $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ к диагональному виду.

Поскольку $[\Delta(\boldsymbol{k})]$ вещественно, из (79.14) — (79.17) следует, что унитарная матрица из собственных векторов $[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]$ преобразует $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ к диагональному виду:

$$[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]^{-1}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})][\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})] = [\Delta(\boldsymbol{k})]. \tag{85.12}$$

Фиксируем аргумент (оператор) матрицы $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ и преобразуем (85.11) с помощью $[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]$; тогда получим

$$[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]^{-1}[\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}][\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]\,\Delta(\boldsymbol{k}) = \Delta(\boldsymbol{k})\,[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]^{-1}[\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})(e)}][\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]. \tag{85.13}$$

Преобразованную матрицу $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ обозначим

$$\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}} \equiv [\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]^{-1} D^{(\boldsymbol{k})(e)}[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})] = [\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}]^{*} D^{(\boldsymbol{k})(e)}[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]. \tag{85.14}$$

Таким образом, из (85.13) имеем

$$\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}}\Delta(\boldsymbol{k}) = \Delta(\boldsymbol{k})\,\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}}. \tag{85.15}$$

Перепишем $\Delta(\boldsymbol{k})$ из (79.17), собирая вместе вырожденные собственные значения:

$$\Delta(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,1)\,\mathbf{1}_1 & 0\ \ldots & 0\ \ldots & 0 \\ 0 & \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,2)\,\mathbf{1}_2 & & \vdots \\ \vdots & & \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,\mathbf{1}_j & \\ 0\ \ldots & & & \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,n)\,\mathbf{1}_{l_n} \end{pmatrix}. \tag{85.16}$$

Здесь $\mathbf{1}_j$ — l_j-мерная единичная матрица. Теперь из (85.14) и (85.16) можно заключить, что, так как каждая матрица $\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}}$ коммутирует с одним и тем же блоком диагональной матрицы (85.16), любая $\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}}$ для каждого значения $\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}$ приводится к блочному виду в соответствии с (85.16):

$$\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}} = \begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k})(1)} & 0 & 0 & \ldots & \\ 0 & D^{(\boldsymbol{k})(2)} & 0 & & \\ & & \ddots & & \\ 0 & 0 & D^{(\boldsymbol{k})(l)} & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ & & & & D^{(\boldsymbol{k})(n)} \end{pmatrix}. \tag{85.17}$$

Каждый из блоков в (85.17) является отличной от нуля матрицей: $D^{(\boldsymbol{k})(1)}$ с размерами $(l_1 \times l_1)$, ..., $D^{(\boldsymbol{k})(n)}$ с размерами $(l_n \times l_n)$, причем каждая из них сопоставляется своему собственному значению $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,1), \ldots, \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,n)$.

Записав (85.14) в компонентах, мы можем установить связь с (83.8). Напомним, что строки матрицы $[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]$, как указано в (79.14), нумеруются индексами $\alpha\varkappa = 1, \ldots, 3r$, а столбцы — индексом $j_\nu = 1, \ldots, 3r$. Соответственно $[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})]^*$ имеет обратную нумерацию строк и столбцов. Взяв матричный элемент $\overline{D^{(\boldsymbol{k})(e)}}$ с индексами $(j_\mu j'_\nu)$, получим для (85.14)

$$(D^{(\boldsymbol{k})(e)})_{j_\mu j'_\nu} = \sum_{\beta\varkappa'} \sum_{\alpha\varkappa} e^*_\alpha\left(\varkappa \left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_\nu\end{matrix}\right.\right)(D^{(\boldsymbol{k})(e)})_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa'}\, e_\beta\left(\varkappa' \left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \tag{85.18}$$

Сравнивая (85.18), (85.17) и (83.8), мы можем написать

$$(D^{(\boldsymbol{k})(e)})_{j_\mu j'_\nu} = (D^{(\boldsymbol{k})(j)})_{\mu\nu}\,\delta_{jj'}. \tag{85.19}$$

Следовательно, преобразование $[\boldsymbol{U}]$, представляющее $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ в виде прямой суммы, равно $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}) = [\boldsymbol{U}]$.

Сделаем теперь предположение о наличии существенного вырождения, обусловленного группой операторов пространственной симметрии $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Будем считать, что каждое представление $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$, записанное в блочной форме и соответствующее различным значениям $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$, является физическим допустимым неприводимым представлением группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Следует отметить, что каждое допустимое представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ может появляться в (85.17) несколько раз. Ниже обсуждается способ определения того, какие именно допустимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ возникают в действительности.

Заметим, что в нашей теории не предполагалось до сих пор, что данное представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ возникает в (85.17) только один раз. Однако, чтобы воспользоваться соотношением (85.18), нужно сначала решить задачу на собственные значения и найти собственные векторы $e_\alpha\left(\varkappa \left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$. Затем для вычисления (85.18) следует взять l_j собственных векторов для данной ветви $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ и использовать в (85.19) δ-символ. Для другой ветви с той же симметрией для получения (85.18) могут быть использованы эти же собственные векторы.

Чтобы выявить все следствия существенного вырождения, обусловленного пространственными операторами из полной пространственной группы $\mathfrak{G}$, нужно по найденному при решении динамической задачи представлению $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ получить совокупность представлений $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ полной группы.

Полное существенное вырождение в этой задаче связано с полной пространственно-временной группой $\mathscr{G}$, которая будет анализироваться ниже.

§ 86. Комплексные нормальные координаты $Q\begin{pmatrix} k \\ j_\mu \end{pmatrix}$ как базис для представления $D^{(k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}(k)$

Так же как в § 76, сейчас желательно получить правила преобразования комплексных нормальных координат $Q\begin{pmatrix} k \\ j_\mu \end{pmatrix}$. Важным обстоятельством оказывается то, что величины $Q\begin{pmatrix} k \\ j_\mu \end{pmatrix}$ являются динамическими переменными в задаче динамики решетки [см. (80.7) и (80.8)]. Мы можем рассуждать так же, как в § 76, и вывести правила преобразования $Q\begin{pmatrix} k \\ j_\mu \end{pmatrix}$ из правил преобразования физических смещений.

Чтобы учесть вырождение, перепишем (80.9) в виде

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \sum_j \sum_\nu \sum_k \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\, e_\alpha\left(\varkappa \left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{86.1}$$

Обратное соотношение следует из условий ортогональности и нормировки

$$Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L \sum_{\varkappa\alpha} \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\, e_\alpha^*\left(\varkappa \left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \sqrt{M_\varkappa}. \tag{86.2}$$

Полезно определить вектор $\boldsymbol{v}\left(\left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right)$, $\alpha l\varkappa$-компонента которого равна

$$v_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) \equiv \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\, e_\alpha\left(\varkappa \left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right). \tag{86.3}$$

Тогда из (86.1)

$$\boldsymbol{u}(\ ) = \sum_{j\nu k} \boldsymbol{v}\left(\left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix} \tag{86.4}$$

и из (86.2)

$$Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix} = \sum_{l\varkappa\alpha} v_\alpha^*\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} M_\varkappa = \tag{86.5}$$

$$= \boldsymbol{v}^*\left(\left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right) \boldsymbol{u} M_\varkappa = \left(v\left(\left| \begin{matrix} k \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right), \boldsymbol{u} M_\varkappa\right), \tag{86.6}$$

где в последней строке мы использовали скалярное произведение (79.8).

Покажем, во-первых, что величина $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ является блоховским вектором, относящимся к волновому вектору $\boldsymbol{k}$. Это наиболее просто увидеть из (86.2), рассмотрев влияние трансляции на поле физических смещений

$$P_{\{\varepsilon \mid R_M\}}\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{u}_{\{R_M\}}. \tag{86.7}$$

Это соотношение можно переписать в виде

$$\boldsymbol{u}_{\{R_M\}} = \sum_{j\nu k} v_{\{R_M\}}\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} \tag{86.8}$$

или

$$\boldsymbol{u}_{\{R_M\}} = \sum_{j\nu k} \boldsymbol{v}\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) Q_{\{R_M\}}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}, \tag{86.9}$$

где (86.9) определяет преобразование $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$. Но

$$(\boldsymbol{v}_{\{R_M\}})_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) = v_\alpha \left(\begin{matrix} l-m \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) = \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_M)\, v_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) =$$
$$= D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\})\, v_\alpha \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right). \tag{86.10}$$

Отсюда

$$\boldsymbol{u}_{\{R_M\}} = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\}) \sum_{j\nu k} \boldsymbol{v}\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}, \tag{86.11}$$

если

$$P_{\{\varepsilon \mid R_M\}} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} \equiv Q_{\{R_M\}}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_M\})\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{86.12}$$

Тогда $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ можно взять в качестве блоховского вектора, соответствующего волновому вектору $\boldsymbol{k}$.

Рассмотрим действие оператора преобразования $P_{\{\varphi \mid t\}}$, не относящегося к $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Из соображений, приведенных в § 30, следует, что

$$P_{\{\varphi \mid t\}} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} \tag{86.13}$$

является блоховским вектором, соответствующим волновому вектору $\varphi \cdot \boldsymbol{k}$:

$$P_{\{\varphi \mid t\}} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = Q\begin{pmatrix} \varphi\cdot\boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{86.14}$$

Мы можем считать этот вектор относящимся к той же строке, что и $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$.

Чтобы рассмотреть действие оператора $P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}}$, входящего в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, необходимо возвратиться к определениям (86.1) — (86.6). Тогда поле повернутых физических смещений имеет вид

$$\boldsymbol{u}_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \equiv P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} \boldsymbol{u}. \tag{86.15}$$

Мы можем записать (86.15) в виде

$$\boldsymbol{u}_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \equiv \sum_{j\nu\boldsymbol{k}} \boldsymbol{v}_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}, \tag{86.16}$$

или

$$\boldsymbol{u}_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} = \sum_{j\nu\boldsymbol{k}} \boldsymbol{v} \left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) Q_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{86.17}$$

Обращая (86.17). получим из (86.6)

$$Q_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = \boldsymbol{v}^* \left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) \cdot \boldsymbol{u}_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} M_\varkappa = \tag{86.18}$$

$$= \sum_{l\varkappa\alpha} v_\alpha^* \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) \left(u_{\{\varphi_{l_\lambda}\}} \right)_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} M_\varkappa =$$

$$= \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_\beta v_\alpha^* \left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) (\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta} \, u_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \end{pmatrix} M_\varkappa \tag{86.19}$$

Чтобы вычислить $u_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \end{pmatrix}$, воспользуемся соотношением (86.1)

$$u_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} N}} \sum_{j'\nu'\boldsymbol{k}'} \exp\left(i\boldsymbol{k}' \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}}\right) e_\beta \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right. \right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_\nu \end{pmatrix}. \tag{86.20}$$

Но

$$\exp i\boldsymbol{k}' \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}} = \exp i \left(\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k}' \right) \cdot \boldsymbol{R}_L. \tag{86.21}$$

Подставляя (86.20), (86.21) в (86.19) и используя (86.3), получим

$$\sum_{l\varkappa\alpha} \sum_\beta \sum_{j'\nu'\boldsymbol{k}'} \frac{M_\varkappa}{\sqrt{M_{\varkappa'} M_{\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}}}}} \exp\left(i\boldsymbol{R}_L \cdot (\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) \right) \times$$

$$\times (\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta} \, e_\alpha^* \left(\varkappa \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right. \right) e_\beta \left(\varkappa_{\bar{\varphi}_{l_\lambda}} \left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right. \right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{pmatrix}. \tag{86.22}$$

Кроме того, имеем

$$\sum_l \frac{1}{N}\exp\left(i\boldsymbol{R}_L\cdot(\varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\right)=\delta\left(\varphi_{l_\lambda}\cdot\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}\right). \qquad (86.23)$$

Так как φ_{l_λ} является поворотом, входящим в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, из (86.23) следует, что $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$. Отсюда сумма по $\boldsymbol{k}'$ сводится к единственному члену, и если мы еще возьмем $M_\varkappa=M_{\varkappa_{\bar\varphi_{l_\lambda}}}$, то (86.22) упрощается и приводится к виду

$$\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\beta}\sum_{j'\nu'}(\varphi_{l_\lambda})_{\alpha\beta}\,e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)e_\beta\left(\varkappa_{\bar\varphi_{l_\lambda}}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{pmatrix}. \qquad (86.24)$$

Тогда, используя (82.12), имеем

$$e_\beta\left(\varkappa_{\bar\varphi_{l_\lambda}}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)=D^{(\boldsymbol{k})}\left(\left\{\varepsilon\,|-\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar\varphi_{l_\lambda}},\varkappa''\right)\right\}\right)e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\delta_{\varkappa_{\bar\varphi_{l_\lambda}},\varkappa''}. \qquad (86.25)$$

Из уравнений (86.25) и (82.16) находим для (86.24)

$$\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\varkappa''\beta}\sum_{j'\nu'}D^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\right\}\right)_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa''}e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)e_\beta\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{pmatrix}. \qquad (86.26)$$

Затем из (85.18), (85.19) получаем для (86.26)

$$\sum_{j'\nu'}\left(D^{(\boldsymbol{k})(j)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\right\}\right)\right)_{\nu'\nu}\delta_{jj'}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{pmatrix}. \qquad (86.27)$$

Наконец, из (86.18) и (86.27) получаем

$$Q_{\{\varphi_{l_\lambda}\}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}=\sum_{\nu'}D^{(\boldsymbol{k})(j)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}\,|\,\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\right\}\right)_{\nu'\nu}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu'}\end{pmatrix}. \qquad (86.28)$$

Это предпоследний результат. Если теперь положить

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}\equiv Q_{\{\varphi_{l_\lambda}\}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}, \qquad (86.29)$$

то мы получаем в (86.28) желаемое правило преобразования нормальных координат $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}$ под действием некоторого элемента группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Как и следовало ожидать из (86.1) и (86.17), это то же самое правило, по которому преобразуются собственные векторы $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)$. Чтобы описать влияние симметрии на решетку, осуществляя «поворот» (преобразование) координат и считая «оси» $v\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)$ фиксированными, наиболее удобно использовать (86.17) и (86.29). Напомним, что, согласно (85.20) и (85.21), $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$ есть физическое неприводимое допустимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Мы установили, что $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}$ имеет трансформационные свойства блоховских векторов. Таким образом, мы можем свести (86.14), (86.28), (86.29) в единое правило. Пусть $P_{\{\varphi_p | t(\varphi_p)\}}$ — одна из операций группы $\mathfrak{G}$; тогда из (36.17) и (36.18), делая несущественные изменения в обозначениях, имеем

$$P_{\{\varphi_p | t(\varphi_p)\}} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\tau\\ j_\nu\end{pmatrix} \equiv P_{\{\varphi_p\}} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\tau\\ j_\nu\end{pmatrix} \equiv Q_{\{\varphi_p\}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\tau\\ j_\nu\end{pmatrix} =$$

$$= \sum_{\sigma=1}^{s} \sum_{\mu=1}^{l_m} D^{(^\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{t}(\varphi_p)\})_{(\sigma\mu)(\tau\nu)}\, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}. \qquad (86.30)$$

Напомним, что индексы $(\sigma\tau)$ нумеруют блочные матрицы, соответствующие блоку с волновыми векторами $\boldsymbol{k}_\sigma$ и $\boldsymbol{k}_\tau$, тогда как индексы $(\mu\nu)$ нумеруют строки и столбцы каждой блочной матрицы.

ГЛАВА 9

Пространственно-временная симметрия и классическая динамика решетки

§ 87. Введение

В этой главе наряду с пространственной, или геометрической, симметрией мы рассмотрим влияние симметрии обращения времени на классическую динамику решетки. Задача состоит в том, чтобы изложить теорию, известную под названием теории копредставлений Вигнера [1] в применении к проблеме динамики решетки [1]).

В отличие от пространственной симметрии, которая входит в теорию «статически», обращение времени как элемент симметрии входит в теорию «динамически» в смысле «обращения движения» во времени. Существенно то, что операция обращения времени является антиунитарным элементом симметрии, сохраняющим абсолютное значение модуля скалярного произведения, но не сохраняющим само скалярное произведение.

Глава начинается с традиционного рассмотрения симметрии обращения времени в § 88—94, основанного на отождествлении оператора обращения времени с комплексным сопряжением. При этом оператор обращения времени действует на иные переменные, чем пространственные преобразования. Комплексное сопряжение состоит в преобразовании (отображении) комплексного поля (в котором заданы собственные векторы) на само себя, тогда как пространственные преобразования отображают точки конфигурационного пространства на само себя. Так как основными переменными динамики решетки являются вещественные смещения, «физические неприводимые» представления также должны быть вещественными. Критерий Херринга вещественности неприводимых представлений пространственных групп обсуждается в § 93 [69]. В § 94 дано обобщение более полезного критерия вещественности, данное Фреи [70]. Используя этот последний критерий, можно определить не только, является ли данное представление вещественным, комплексным или псевдовещественным, но в случае комплексного представления установить симметрию комплексно сопряженного представления.

В § 95—100 развивается теория копредставлений, дающая общее рассмотрение, применимое в физике твердого тела. В част-

---

[1]) Симметрия обращения времени применительно к задачам электронных спектров твердых тел подробно рассмотрена в книге Бира и Пикуса [115].— *Прим. ред.*

ности, для последующих приложений должна оказаться полезной тесная связь с разными типами козвезд.

После общей теории в § 101—104 даются конкретные приложения к задаче определения симметрии собственных векторов и факторизации динамической матрицы для любого заданного кристалла.

Отметим в заключение, что содержание этой главы представляет, с одной стороны, общий интерес (критерий вещественности и классификация неприводимых представлений пространственных групп), а с другой стороны, касается рассмотрения конкретного физического гамильтониана для динамики кристаллической решетки. В этом смысле пространственно-временная группа симметрии является группой динамической симметрии.

§ 88. Антилинейный антиунитарный оператор преобразования K и симметрия обращения времени [71]

В нашем рассмотрении очень важно классифицировать представления, базисом для которых являются вещественные нормальные координаты $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$. Это можно сделать с помощью оператора преобразования K, который преобразует функцию в комплексно сопряженную и играет существенную роль как один из операторов симметрии динамической матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$. Этот вопрос рассматривается подробно ниже. В этом параграфе мы обсудим свойства преобразования K.

Определим оператор K следующим образом:

$$K\boldsymbol{e} = \boldsymbol{e}^*, \tag{88.1}$$

где $\boldsymbol{e}$ — любой интересующий нас собственный вектор. Для вещественного собственного вектора имеем

$$K\boldsymbol{e}^{(R)} = \boldsymbol{e}^{(R)}, \tag{88.2}$$

а для мнимого собственного вектора

$$K\boldsymbol{e}^{(I)} = -\boldsymbol{e}^{(I)}. \tag{88.3}$$

Пусть a и b — константы; тогда

$$K(a\boldsymbol{e} + b\boldsymbol{e}') = a^*K\boldsymbol{e} + b^*K\boldsymbol{e}'. \tag{88.4}$$

Если $\boldsymbol{e}$ — комплексный собственный вектор, например $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_\lambda \end{matrix}\right.\right)$, удовлетворяющий условию скалярного произведения (79.8), то

$$\left(K\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\lambda \end{matrix}\right.\right)\right)^* \cdot \left(K\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\lambda'} \end{matrix}\right.\right)\right) = \left(\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\lambda \end{matrix}\right.\right)^* \cdot \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\lambda'} \end{matrix}\right.\right)\right)^*. \tag{88.5}$$

Тогда по отношению к эрмитову скалярному произведению (79.8) K является оператором антиунитарного преобразования; K является оператором антиунитарного преобразования также по отношению к эрмитову скалярному произведению (79.9) и (79.11). Таким образом,

$$\left(Ke_{\alpha}\left(_{\varkappa}\middle|^{\boldsymbol{k}}\right)^{*} : Ke_{\beta}\left(_{\varkappa'}\middle|^{\boldsymbol{k}}\right)\right)^{*} = e_{\alpha}\left(_{\varkappa}\middle|^{\boldsymbol{k}}\right)^{*} : e_{\beta}\left(_{\varkappa'}\middle|^{\boldsymbol{k}}\right). \qquad (88.6)$$

Следует подчеркнуть, что свойства антиунитарности и антилинейности, выраженные соотношениями (88.4) — (88.6), делают оператор K качественно отличным от операторов преобразований $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$, с которыми мы имели дело ранее. В этом мы убедимся сразу же при любых вычислениях и алгебраических выкладках, связанных с этими операторами, и при построении теории копредставлений (теории матричного гомоморфизма).

Рассматриваемый как абстрактный оператор, K действует на иные переменные, чем оператор преобразования координат $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$. Поэтому абстрактные операторы K и $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ коммутируют:

$$KP_{\{\varphi\,|\,t\}} = P_{\{\varphi\,|\,t\}}K. \qquad (88.7)$$

Совокупность операторов, состоящая только из операторов преобразования координат, образует пространственную группу симметрии кристалла $\mathfrak{G}$. По причинам, которые будут выяснены ниже, абстрактную группу $\mathcal{G}$, определенную как

$$G = \mathfrak{G} + K\mathfrak{G}, \qquad (88.8)$$

мы будем называть пространственно-временной группой симметрии $\mathcal{G}$.

Полное, зависящее от времени решение динамического уравнения (79.4) или (85.1) получится, если мы учтем полную временную зависимость смещений, устраненную в (72.2). Тогда оказывается, что зависящий от времени собственный вектор $\boldsymbol{\varepsilon}$, соответствующий волновому вектору $\boldsymbol{k}$, равен

$$\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right| t\right) \equiv \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right.\right) \exp - i\omega(\boldsymbol{k}\,|\,j_{\mu})\,t \qquad (88.9)$$

и удовлетворяет уравнению

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right| t\right) + \frac{\partial^2\boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t^2}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right| t\right) = 0. \qquad (88.10)$$

Применим теперь оператор K к уравнению (88.10):

$$K[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]K^{-1}\cdot K\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right| t\right) + K\frac{\partial^2}{\partial t^2}K^{-1}\cdot K\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\mu}\end{matrix}\right| t\right) = 0. \qquad (88.11)$$

Но оператор $\partial^2/\partial t^2$ веществен, так что

$$K\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)K^{-1}=\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right). \qquad (88.12)$$

Взяв затем

$$K\,[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,K^{-1}=[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^*, \qquad (88.13)$$

мы получим, используя определение (78.5) и вещественность силовых постоянных $[\boldsymbol{\Phi}]$,

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^*=[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]. \qquad (88.14)$$

Сравним (88.14) с условием эрмитовости (78.6) для $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$. Из (78.6) вытекает, что динамическая матрица $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ при фиксированном $\boldsymbol{k}$ является эрмитовой матрицей. Из (88.14) получается соотношение между динамической матрицей $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ при двух различных значениях $\boldsymbol{k}$. Тогда из (88.12), (88.14) и (88.11) имеем

$$\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})\cdot K\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right|t\right)=\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\cdot K\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right|t\right). \qquad (88.15)$$

Рассмотрим теперь полный набор зависящих от времени собственных векторов при заданном значении $-\boldsymbol{k}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right|t\right)=\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)\exp\left(-i\omega(-\boldsymbol{k}\mid j_\lambda)\,t\right). \qquad (88.16)$$

Они удовлетворяют уравнению

$$[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right|t\right)+\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right|t\right)=0. \qquad (88.17)$$

Сравнивая (88.15) и (88.17), видим, что вектор $K\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right|t\right)$ связан непосредственно с $\boldsymbol{\varepsilon}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right|t\right)$. Чтобы установить соотношение, мы возвратимся к не зависящим от времени уравнениям движения. При заданном значении $\boldsymbol{k}$ эти уравнения имеют вид

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(\boldsymbol{k}\mid j)\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right),\quad \mu=1,\ \ldots,\ l_j, \qquad (88.18)$$

а уравнения для волнового вектора $-\boldsymbol{k}$ записываются так:

$$[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_\lambda\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(-\boldsymbol{k}\mid\bar{j})\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_\lambda\end{matrix}\right.\right),\quad \lambda=1,\ \ldots,\ \bar{l}_j. \qquad (88.19)$$

Применяя оператор K к обеим сторонам уравнения (88.18), имеем с учетом (88.14)

$$[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]\cdot K\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,K\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right),\quad \mu=1,\,\ldots,\,l_j. \tag{88.20}$$

Отсюда следует, что не зависящие от времени волновые векторы $K\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ удовлетворяют таким же уравнениям для собственных значений, что и $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)$, с динамической матрицей $[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]$.

Далее, из (78.6) получается, что $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ и $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^* = [\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]$ имеют одинаковый набор собственных значений. Действительно, $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ и $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^*$ — эквивалентны и их можно взять вещественными. Это означает, что существует унитарное преобразование, с помощью которого можно преобразовать $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ в вещественную матрицу. Исследуем это утверждение подробнее. Из (79.16) имеем

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^{-1}\cdot[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}). \tag{88.21}$$

Трансформируя с помощью K преобразование подобия (88.21) или, что то же самое, взяв комплексно сопряженное выражение от (88.21), получаем

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^{*-1}\cdot[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^*\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^*=\boldsymbol{\Delta}^*(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}), \tag{88.22}$$

где последнее равенство следует из вещественности $\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k})$. Затем из (79.15), (88.13) и (88.14) имеем

$$\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}\cdot[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]\cdot\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}^{-1}=\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}). \tag{88.23}$$

Приравнивая (88.21) и (88.23), получаем

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^{-1}\cdot[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})=\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]\cdot\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}^{-1}. \tag{88.24}$$

Тогда

$$(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})\cdot\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})})^{-1}\cdot[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})\cdot\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})})=[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]. \tag{88.25}$$

Отсюда видно, что симметричная матрица

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})\equiv\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})\cdot\widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})} \tag{88.26}$$

осуществляет преобразование подобия от $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ к $[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]$:

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})^{-1}\cdot[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})=[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]. \tag{88.27}$$

Из (88.26) и (79.14) можно найти элементы $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$. Они равны

$$(\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}))_{\beta\varkappa',\,\bar\beta\bar\varkappa'}=\sum_j e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)e_{\bar\beta}\left(\bar\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right). \tag{88.28}$$

Отметим различие между (88.28) и условиями ортогональности и нормировки (79.6) или (79.9), (79.11). Если отдельный собственный вектор веществен, то (88.28) тождественно (79.9) или (79.11), так что

$$\text{если } \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right) \text{ вещественно, то } \boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = \mathbf{П}_{3r}, \tag{88.29}$$

где $\mathbf{П}_{3r}$ — $(3r)$-мерная единичная матрица. Тогда ясно, что в случае вещественных векторов (88.27) и (88.14) показывают, что $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ вещественно и, таким образом, равно $[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]$. Но в общем случае это не так.

Используя (88.22) и (88.14), находим

$$[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})] = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})^* \boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}) \widetilde{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})}. \tag{88.30}$$

Возьмем $\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k})$ в канонической форме (79.17) и получим (88.30) в компонентах

$$\sum_j \sum_\lambda e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\, e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right) = D\begin{pmatrix}-\boldsymbol{k}\\ \varkappa\varkappa'\end{pmatrix}_{\alpha\beta}. \tag{88.31}$$

Для вычисления скалярного произведения воспользуемся еще выражением для собственных векторов матрицы $\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})$ и получим из (88.19) и (88.31)

$$\sum_j \sum_\lambda \sum_{\beta\varkappa'} e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\, e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right) e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\mu}\end{matrix}\right.\right) =$$

$$= \sum_{\beta\varkappa'} D\begin{pmatrix}-\boldsymbol{k}\\ \varkappa\varkappa'\end{pmatrix}_{\alpha\beta} e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar\mu}\end{matrix}\right.\right) = \omega^2(-\boldsymbol{k}\,|\,\bar{j})\, e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar\mu}\end{matrix}\right.\right). \tag{88.32}$$

Предвидя результат и используя скалярное произведение (79.10), возьмем в качестве условия ортогональности для блоховских собственных векторов при заданном $\boldsymbol{k}$ следующее соотношение:

$$\sum_{\beta\varkappa'} e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right) e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar\mu}\end{matrix}\right.\right) = \delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\,\delta_{j\bar{j}'}\delta_{\lambda\bar\mu}. \tag{88.33}$$

Мы также воспользовались здесь приведенным ниже выражением (88.37). При этом левая сторона уравнения (88.32) принимает вид

$$e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) = \omega^2(-\boldsymbol{k}\,|\,\bar{j})\, e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar\mu}\end{matrix}\right.\right). \tag{88.34}$$

Так как вещественные собственные значения $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$ и $[\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})] = [\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^*$ одинаковы, то независимо от порядка сомножителей мы можем положить

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) = \omega^2(-\boldsymbol{k}\,|\,\bar{j}) \tag{88.35}$$

и затем

$$e_\alpha^*\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)=e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar{\mu}}\end{matrix}\right.\right) \tag{88.36}$$

или

$$Ke\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)=e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)=e\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar{\mu}}\end{matrix}\right.\right). \tag{88.37}$$

Следует указать, что в книге [5] [стр. 174, уравнение (49.4)] Либфрид уже использовал соотношения типа (88.37) в отсутствие вырождения ($l_j = 1$ или $l_{\bar{j}} = 1$) и брал

$$e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)=-e\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right). \qquad \text{(Либфрид)}$$

Формула Либфрида согласуется с нашей благодаря выбранной нами форме соотношений ортогональности (88.33). При этом (88.37) оказывается справедливым и в отсутствие вырождения. Отметим, что, вообще говоря, $\bar{j}_{\bar{\mu}}$ и j_λ в (88.36) различны; их связь будет установлена в уравнении (94.22) и в последующем рассмотрении, а также в § 95—100.

Возвращаясь к зависящим от времени собственным векторам (88.16), имеем

$$K\varepsilon\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right|t\right)=\varepsilon\left(\left|\begin{matrix}-\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar{\mu}}\end{matrix}\right|-t\right). \tag{88.38}$$

Следовательно, оператор преобразования K преобразует собственный вектор, соответствующий смещению с волновым вектором $\boldsymbol{k}$ в момент времени t, в собственный вектор, соответствующий смещению с волновым вектором $-\boldsymbol{k}$ в момент времени $-t$. Поэтому можно назвать собственный вектор $K\varepsilon\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right|t\right)$ обращенным во времени или обращенным по движению. Из (88.37), (88.35), (88.20) находим, что не зависящие от времени собственные векторы $e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ и $e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_{\bar{\mu}}\end{matrix}\right.\right)$ относятся к вырожденному собственному состоянию. Поэтому даже для не зависящих от времени собственных векторов $e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ \bar{j}_\mu\end{matrix}\right.\right)$ можно употреблять термин «обращенные во времени».

Аналогично тому как мы поступали с оператором пространственных преобразований $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$, можно определить действие

K на комплексную нормальную координату $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ [см. (88.37)]:

$$KQ\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}^* = Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ \bar{j}_{\bar{\nu}} \end{pmatrix}. \qquad (88.39)$$

Заметим также, что (88.39) можно получить прямым применением K к выражению (86.2) с использованием (88.37). Снова отметим, что точное соотношение между индексами j_ν и $\bar{j}_{\bar{\nu}}$ нуждается в определении и будет обсуждаться ниже.

§ 89. Полная пространственно-временная группа $\mathcal{G}$

Вернемся к рассмотрению матрицы силовых постоянных $[\Phi]$ из § 71. Напомним свойство инвариантности $[\Phi]$ по отношению к преобразованиям общей пространственной симметрии:

$$P_{\{\varphi \mid t\}}[\Phi] P_{\{\varphi \mid t\}}^{-1} = [\Phi]. \qquad (89.1)$$

В предыдущем параграфе мы сформулировали также правило инвариантности по отношению к обращению времени:

$$K[\Phi]K^{-1} = [\Phi]. \qquad (89.2)$$

Следовательно, полная группа симметрии потенциальной энергии V и кинетической энергии T, гамильтониана H и, следовательно, кристалла, состоит из суммы кристаллической пространственной группы $\mathfrak{G}$ и смежного класса $K\mathfrak{G}$:

$$\mathcal{G} = \mathfrak{G} + K\mathfrak{G}. \qquad (89.3)$$

Мы будем называть $\mathcal{G}$ полной пространственно-временной группой симметрии кристалла.

Обратимся теперь к рассмотрению динамической матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$. Из (81.26) мы имеем для оператора преобразования, соответствующего пространственной симметрии,

$$P_{\{\varphi \mid \tau(\varphi)\}}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})] P_{\{\varphi \mid \tau(\varphi)\}}^{-1} = [\boldsymbol{D}(\varphi \cdot \boldsymbol{k})]. \qquad (89.4)$$

Чтобы вывести (88.13), (88.14), можно использовать (81.23), определение K в (88.1) — (88.4) и свойство (88.7). Тогда

$$K[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]K^{-1} = KP^{(\boldsymbol{k})}[\boldsymbol{M}]^{-1/2}[\Phi(0)][\boldsymbol{M}]^{-1/2}K^{-1}. \qquad (89.5)$$

Но

$$KP^{(\boldsymbol{k})} = K\sum_{\lambda} \exp i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_\lambda P_{\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_\lambda\}} =$$
$$= \sum_{\lambda} \exp - i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_\lambda \cdot P_{\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_\lambda\}} K = P^{(-\boldsymbol{k})}K. \qquad (89.6)$$

Так как $[\Phi(0)]$ и $[M]^{-1/2}$ вещественны, окончательно имеем

$$K[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]K^{-1} = [\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]. \tag{89.7}$$

Вследствие антилинейности и антиунитарности оператора K его обычно рассматривают отдельно от операторов пространственной симметрии. Эта возможность видна в (89.7) и (88.37), так как K обращает волновой вектор $\boldsymbol{k}$. Однако если $\boldsymbol{k}$ — волновой вектор в зоне Бриллюэна, то и $-\boldsymbol{k}$ относится к этой же зоне. Таким образом, в указанном смысле K устанавливает соотношение между волновыми векторами, которые могут быть либо связаны, либо не связаны оператором $P_{\{\varphi\mid t\}}$. При таком подходе K имеет смысл дополнительной операции симметрии, не включенной в группу пространственной симметрии $\mathfrak{G}$. Поэтому можно развить единый подход, при котором все операторы рассматриваются на равных основаниях. Такой подход сформулирован ниже в § 95—102.

§ 90. Собственные векторы $e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{matrix}\right.\right)$ и нормальные координаты $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{pmatrix}$ как базис представлений группы $\mathcal{G}$

Чтобы рассмотреть достаточно полно действие оператора K, нужно работать с набором неприводимых представлений $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ полной пространственной группы. В § 77—86 мы ограничились рассмотрением только допустимых неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и полный набор $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ был получен индукцией из $D^{(\boldsymbol{k})m}$. Но оператор K не является линейным оператором типа $P_{\{\varphi\mid t\}}$. Поэтому нужно проявлять некоторую осторожность при анализе результатов, полученных из-за наличия оператора K среди операторов симметрии задачи.

Полный набор собственных векторов, определяющих линейное векторное пространство и являющихся базисом для $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, можно взять в виде

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(j)} \equiv \left\{ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{matrix}\right.\right), \ldots, e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{l_j}\end{matrix}\right.\right), \ldots, e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_s\\ j_{l_j}\end{matrix}\right.\right) \right\}. \tag{90.1}$$

Согласно (86.28), (86.29), совокупность $(s \cdot l_j)$ комплексных нормальных координат

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})(j)} \equiv \left\{ Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_{l_j}\end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_s\\ j_{l_j}\end{pmatrix} \right\} \tag{90.2}$$

также можно взять в качестве базиса непереводимого представления $D^{(\star k)(j)}$, так как для (90.1) и (90.2) имеем

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}\Sigma^{(\star k)(j)} = \Sigma^{(\star k)(j)}D^{(\star k)(j)}(\{\varphi\,|\,t\}). \tag{90.3}$$

Теперь рассмотрим линейное векторное пространство

$$K\Sigma^{(\star k)(j)} = \Sigma^{(\star k)(j)*} = \left\{ e^*\left(\left|\begin{matrix} k \\ j_1 \end{matrix}\right.\right), \ldots, e^*\left(\left|\begin{matrix} k_s \\ j_{l_j} \end{matrix}\right.\right) \right\}. \tag{90.4}$$

Из (88.37) имеем

$$K\Sigma^{(\star k)(j)} = \Sigma^{(\star -k)(\bar{\mu})}. \tag{90.5}$$

Записывая это выражение через нормальные координаты, мы получаем

$$K\Sigma^{(\star k)(j)} = \left\{ Q\begin{pmatrix} k \\ j_1 \end{pmatrix}^*, \ldots, Q\begin{pmatrix} k_s \\ j_{l_j} \end{pmatrix}^* \right\} = \Sigma^{(\star -k)(\bar{\mu})}. \tag{90.6}$$

Используя пространство (90.6) в качестве базиса для представлений, получим

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}K\Sigma^{(\star k)(j)} = P_{\{\varphi\,|\,t\}}\Sigma^{(\star -k)(\bar{\mu})} = \Sigma^{(\star -k)(\bar{\mu})}D^{(\star -k)(\bar{\mu})}(\{\varphi\,|\,t\}). \tag{90.7}$$

Из (90.7) мы видим, что пространство $K\Sigma^{(\star k)(j)}$ является базисом представления $D^{(\star -k)(\bar{\mu})}$ группы $\mathfrak{G}$, где связь $\bar{\mu}$ с j еще не установлена.

Применим теперь оператор K к обеим сторонам (90.3) и воспользуемся (88.7); тогда получим

$$KP_{\{\varphi\,|\,t\}}\Sigma^{(\star k)(j)} = P_{\{\varphi\,|\,t\}}K\Sigma^{(\star k)(j)} = K\Sigma^{(\star k)(j)}D^{(\star k)(j)}(\{\varphi\,|\,t\})^*. \tag{90.8}$$

Отсюда

$$D^{(\star k)(j)*} = D^{(\star -k)(\bar{\mu})}. \tag{90.9}$$

Получается, что полный набор собственных векторов (90.1) или комплексных нормальных координат (90.2), являющихся базисом неприводимого представления $D^{(\star k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}$, может служить также базисом неприводимого представления $D^{(\star k)(j)*}$ группы $\mathfrak{G}$, если этот базис преобразовать с помощью оператора обращения времени K. Отсюда сразу следует, что если $D^{(\star k)(j)}$ является неприводимым представлением группы $\mathfrak{G}$, то $D^{(\star k)(j)*}$ тоже является таковым.

§ 91. Существенное вырождение как следствие полной пространственно-временной группы симметрии кристалла $\mathcal{G}$

Полной группой симметрии в задаче динамики кристаллической решетки является группа $\mathcal{G}$ — полная пространственно-временная группа (88.8). Под существенным вырождением мы будем понимать вырождение, связанное с существованием набора векторов, образующих неприводимое по отношению к $\mathcal{G}$ линейное векторное пространство. Все эти векторы могут быть либо собственными векторами типа (90.1), (90.4), либо комплексными нормальными координатами (90.2), (90.6).

Так как оператор K является оператором симметрии, то набор собственных значений матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$

$$\left\{\omega^2(\boldsymbol{k}\mid j_1), \ldots, \omega^2\left(\boldsymbol{k}\mid j_{l_j}\right), \ldots, \omega^2(\boldsymbol{k}\mid j_1'), \ldots, \omega^2\left(\boldsymbol{k}\mid j'_{l_{j'}}\right)\right\} \tag{91.1}$$

тождественно равен совокупности собственных значений матрицы $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]^* = [\boldsymbol{D}(-\boldsymbol{k})]$

$$\left\{\omega^2(-\boldsymbol{k}\mid j_1), \ldots, \omega^2\left(-\boldsymbol{k}\mid j_{l_j}\right), \ldots, \omega^2(-\boldsymbol{k}\mid j_1') \ldots \omega^2\left(-\boldsymbol{k}\mid j'_{l_{j'}}\right)\right\}. \tag{91.2}$$

Напомним в связи с этим соотношение (88.35). Отсюда следует, что пространство, образованное совокупностью всех собственных векторов или нормальных координат при заданном $\boldsymbol{k}$:

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})} \equiv \left\{\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{matrix}\right.\right), \ldots, \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{l_j}\end{matrix}\right.\right), \ldots, \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{l_{j'}}\end{matrix}\right.\right)\right\},$$

или (91.3)

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})} = \left\{Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_{l_j}\end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{l_{j'}}\end{pmatrix}\right\},$$

вырождено с пространством, образованным соответствующими наборами при заданном $-\boldsymbol{k}$, т. е.

$$\Sigma^{(-\boldsymbol{k})\,(\{\mu\})} = \Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})*} = K\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})}, \tag{91.4}$$

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})*} \equiv \left\{e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{matrix}\right.\right), \ldots, e^*\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{l_j}\end{matrix}\right.\right)\right\},$$

или (91.5)

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(\{j\})*} = \left\{Q^*\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}, \ldots, Q^*\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{l_{j'}}\end{pmatrix}\right\}.$$

Предположение о существенном вырождении требует, чтобы «физическое неприводимое представление» группы $\mathcal{G}$, возникающее в задаче динамики решетки, было вещественным представлением. Тогда, если пространство $\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)}$ вещественно:

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)} \equiv K\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)}, \tag{91.6}$$

то оно может служить базисом для физического неприводимого представления в задаче динамики кристалла, обладающего пространственной группой $\mathfrak{G}$. Если $\Sigma^{(\star k)(j)}$ не является вещественным, тогда существующие нефизические неприводимые вещественные представления имеют своим базисом прямую сумму обоих пространств

$$\Sigma^{(\star k)(j)} \oplus K\Sigma^{(\star k)(j)}. \tag{91.7}$$

Таким образом, возможны только такие физические неприводимые представления, базисом которых является вещественное пространство Σ. Напомним, что основанием для этого требования является вещественность поля физических смещений $\boldsymbol{u}$, описывающих отклонение атомов кристалла от положений равновесия. Рассматриваемое физическое поле должно быть вещественным, т. е.

$$K\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}. \tag{91.8}$$

Чтобы $\boldsymbol{u}$ оставалось вещественным всегда, должны существовать условия, налагаемые на представления, по которым преобразуются собственные векторы и комплексные нормальные координаты. Убедимся в этом на примере (86.1):

$$Ku_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = u_\alpha^*\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \sum_j \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} \exp i(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\, e_\alpha^*\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right) Q^*\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{91.9}$$

Соотношения (88.37) и (88.39) позволяют записать (91.9) следующим образом:

$$u_\alpha^*\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \sum_j \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} \exp i(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\, e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} -\boldsymbol{k} \\ \bar{j}_{\bar{\nu}} \end{matrix}\right) Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ \bar{j}_{\bar{\nu}} \end{pmatrix}. \tag{91.10}$$

Выполняя в (91.10) суммирование по $\bar{j}$, $\bar{\nu}$, $-\boldsymbol{k}$ и сравнивая результат с (86.1), видим, что (91.8) верно. Необходимая для доказательства замена индексов суммирования допустима, так как эти индексы немые.

Далее мы полагаем, что любое нормальное колебание, возникающее в динамике решетки, будет преобразовываться как базис для вещественного неприводимого представления полной пространственно-временной группы $\mathcal{G}$. Очевидно, если

$$D^{(\star k)(j)} \equiv D^{(\star k)(j)*}, \tag{91.11}$$

то неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$ вещественно и, таким образом, приемлемо в качестве «физического» неприводимого представления группы $\mathcal{G}$. Если

$$D^{(\star k)(j)} \not\equiv D^{(\star k)(j)*}, \tag{91.12}$$

то «физическое» неприводимое представление группы $\mathscr{G}$ является прямой суммой

$$D^{(\star k)(j)} \oplus D^{(\star k)(j)*}, \tag{91.13}$$

которая и представляет собой в этом случае вещественное неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$.

Если имеет место соотношение (9.12), то учет симметрии обращения времени не меняет результатов анализа, основанного на учете чисто пространственной группы симметрии $\mathfrak{G}$. В случае когда имеет место (91.13), из-за учета оператора обращения времени K происходит удвоение вырождения.

Следовательно, чтобы узнать, увеличивается ли кратность вырождения при учете полной группы симметрии $\mathfrak{G}$, очень важно исследовать вещественность неприводимых представлений группы $\mathscr{G}$. К этому вопросу мы еще вернемся.

Следует сделать еще одно, последнее замечание. Очевидно, весь предшествующий анализ просто устанавливает *необходимые* условия вещественности представлений, по которым преобразуется либо пространство собственных векторов, либо пространство нормальных координат. Таким образом, *если* существует представление группы $\mathscr{G}$, по которому преобразуется пространство собственных векторов или нормальных координат колебаний, то оно должно иметь физический смысл. Обратное утверждение неверно: при заданной пространственно-временной группе $\mathscr{G}$ не все неприводимые представления группы, имеющие физический смысл, встречаются в динамике решетки. Определение таких физических неприводимых представлений для конкретных кристаллов рассматривается в § 103.

§ 92. Критерий вещественности представлений $D^{(\star k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}$

Как было отмечено в предыдущем параграфе, вопрос о существенном вырождении при наличии группы $\mathscr{G}$ непосредственно связан с вещественностью представлений $D^{(\star k)(j)}$ группы пространственной симметрии $\mathfrak{G}$ кристалла. В этом параграфе мы построим теорию, которая позволяет установить критерий вещественности $D^{(\star k)(j)}$. Предположим, что все неприводимые представления $D^{(\star k)(j)}$ пространственной группы $\mathfrak{G}$ известны. Тогда ясно, что если допустимое малое неприводимое представление $D^{(k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(k)$ вещественно, то и индуцированное представление $D^{(\star k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}$ тоже вещественно. Это достаточное условие вещественности, которое в действительности является слишком сильным. Из него следует, что

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}\}\right)=\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}\}\right)^* \tag{92.1}$$

для всех элементов $\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}\}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Однако, как будет показано ниже, даже при

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}\}\right)\neq\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}\}\right)^* \tag{92.2}$$

представление $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ может быть вещественным.

Чтобы исследовать этот вопрос достаточно полно, необходимо вообще говоря, изучить неприводимые представления полной группы. Тогда после соответствующего анализа оказывается, что вопрос сводится к изучению неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

В задаче динамики решетки мы имеем дело только с представлениями простой группы $\mathfrak{G}$, так что все сложности, связанные с учетом спина, можно опустить. Из этого, в частности, следует, что

$$\begin{aligned}&\text{если}\quad D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\equiv D^{(\star\boldsymbol{k})(m)*},\\&\text{то}\quad\ \ D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\ \text{можно сделать вещественным.}\end{aligned} \tag{92.3}$$

Обсудим теперь подробно критерий вещественности, который можно применить к неприводимым представлениям $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$.

В этом рассмотрении существенную роль играет матрица

$$M^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\equiv\sum_{\mathfrak{G}}D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^2\right). \tag{92.4}$$

Матрица $M^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ из (92.4) является суммой по всем элементам $\{\varphi|\boldsymbol{t}\}$ группы $\mathfrak{G}$ матриц, представляющих элементы

$$\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^2=\{\varphi^2|\varphi\cdot\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\} \tag{92.5}$$

в неприводимом представлении $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$. Во-первых, легко видеть, что $M^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ коммутирует со всеми матрицами $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ неприводимого представления. Пусть $\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}$ — произвольный элемент группы $\mathfrak{G}$; тогда сопряженный элемент можно определить как

$$\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}\cdot\{\varphi|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}^{-1}\equiv\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{\overline{0}}. \tag{92.6}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned}D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}\right)\cdot M^{(\star\boldsymbol{k})(m)}&=\sum_{\mathfrak{G}}D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{\overline{0}}\cdot\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{\overline{0}}\cdot\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}\right)=\\&=\left(\sum_{\mathfrak{G}}D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{\overline{0}}\cdot\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{\overline{0}}\right)\right)\cdot D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}\right)=\\&=M^{(\star\boldsymbol{k})(m)}D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_0|\boldsymbol{t}_0\}\right).\end{aligned} \tag{92.7}$$

Заметим, что сумма в больших скобках равна $M^{(\star k)(m)}$; из свойства инвариантности суммы, взятой по всей группе [1, 50], имеем

$$\sum_{\mathfrak{G}} = \sum_{\{\varphi_0 \mid t_0\}\cdot\mathfrak{G}\cdot\{\varphi_0 \mid t_0\}^{-1}}. \tag{92.8}$$

Уравнения (92.8) выражают инвариантность суммы по группе по отношению к внутренним автоморфизмам, т. е. сумма берется по всем элементам группы независимо от того, называются ли они $\{\varphi_0 | t_0\}$ или $\{\varphi | t\}^{\overline{0}}$.

Так как (92.7) имеет место для всех элементов $\{\varphi_0 | t_0\}$ в $\mathfrak{G}$, мы можем применить лемму Шура и заключить, что

$$M^{(\star k)(m)} = \mu^{(\star k)(m)} \Pi_{m\cdot s}, \tag{92.9}$$

где Π_m — единичная матрица с размерами $(s \cdot l_m)$, а $\mu^{(\star k)(m)}$ — константа. Взяв (α, β)-матричный элемент (92.9), имеем

$$\left(M^{(\star k)(m)}\right)_{\alpha\beta} = \mu^{(\star k)(m)} \delta_{\alpha\beta}. \tag{92.10}$$

Полагая $\alpha = \beta$ и суммируя, получим

$$\mathrm{Sp}\, M^{(\star k)(m)} = \sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi | t\}^2) = \mu^{(\star k)(m)} (s \cdot l_m). \tag{92.11}$$

Следующей задачей является определение возможных значений $\mu^{(\star k)(m)}$, которые возникают в каждом конкретном случае для вещественного представления $D^{(\star k)(m)}$.

Рассмотрим сначала случай, когда $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k)(m)*}$ неэквивалентны. Соотношение ортогональности для неэквивалентных неприводимых представлений имеет тогда вид

$$\sum_{\mathfrak{G}} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi | t\})_{\mu\tau} \left(D^{(\star k)(m)}(\{\varphi | t\})^*\right)^*_{\tau\mu} = 0, \tag{92.12}$$

или

$$\sum_{\mathfrak{G}} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi | t\})_{\mu\tau} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi | t\})_{\tau\mu} = 0. \tag{92.13}$$

Суммируя (92.13) по τ и μ, получим

$$\sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(\star k(m)}(\{\varphi | t\})^2 = 0, \quad \text{если} \quad D^{(\star k)(m)} \not\equiv D^{(\star k)(m)*}. \tag{92.14}$$

Отсюда видно, что в (92.11) для неэквивалентных представлений

$$\mu^{(\star k)(m)} = 0. \tag{92.15}$$

Теперь рассмотрим случай (92.3) эквивалентных представлений. Если $D^{(\star k)(m)}$ эквивалентно $D^{(\star k)(m)*}$, то существует унитарная матрица U, удовлетворяющая соотношению

$$U^{-1}D^{(\star k)(m)}U = D^{(\star k)(m)*}, \tag{92.16}$$

или

$$D^{(\star k)(m)}U = UD^{(\star k)(m)*}. \tag{92.17}$$

Возьмем выражение, комплексно сопряженное (92.17), и умножим на

$$UD^{(\star k)(m)*}U^* = UU^*D^{(\star k)(m)}. \tag{92.18а}$$

Используя (92.17), получим отсюда

$$D^{(\star k)(m)}UU^* = UU^*D^{(\star k)(m)}. \tag{92.18б}$$

Следовательно, UU^* коммутирует со всеми матрицами $D^{(\star k)(m)}$ неприводимого представления. Отсюда, согласно лемме Шура,

$$UU^* = y\Pi_{(s\cdot l_m)}, \tag{92.19}$$

где y — константа, а $\Pi_{(s\cdot l_m)}$ — единичная матрица с размерами $(s \cdot l_m)$. Из (92.19) имеем

$$U = yU^{-1*}. \tag{92.20}$$

Так как матрица U унитарна, то

$$U^{-1} = \tilde{U}^* = U^+, \tag{92.21}$$

или

$$U^{-1*} = \tilde{U}. \tag{92.22}$$

Наконец, из (92.20) имеем

$$U = y\tilde{U}. \tag{92.23}$$

Беря выражение, траспонированное от (92.23), получим

$$\tilde{U} = yU. \tag{92.24}$$

Подставляя (92.23) в (92.24), имеем

$$U = y^2U. \tag{92.25}$$

Следовательно,

$$y^2 = 1, \tag{92.26}$$

$$y = \pm 1. \tag{92.27}$$

Тогда из (92.23) получим

$$U = \tilde{U}. \tag{92.28}$$

Это условие симметричности матрицы U. Либо

$$U = -\tilde{U}. \tag{92.29}$$

Это условие антисимметричности матрицы U. Два соотношения (92.28) и (92.29) характеризуют два различных случая, причем оба соответствуют эквивалентности $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k)(m)*}$. Рассмотрим сначала случай (92.28).

Рассмотрим ситуацию, когда $D^{(\star k)(m)}$ можно взять вещественным. Это означает, что для заданной матрицы $D^{(\star k)(m)*}$ существует такая унитарная матрица S, что

$$S^{-1}D^{(\star k)(m)}S = \bar{D}^{(\star k)(m)}, \tag{92.30}$$

где $\bar{D}^{(\star k)(m)}$ вещественно:

$$\bar{D}^{(\star k)(m)*} = \bar{D}^{(\star k)(m)}. \tag{92.31}$$

Беря выражение, комплексно сопряженное (92.30), получим

$$S^{-1*}D^{(\star k)(m)*}S^* = \bar{D}^{(\star k)(m)*} = \bar{D}^{(\star k)(m)} = S^{-1}D^{(\star k)(m)}S. \tag{92.32}$$

Следовательно,

$$S^*S^{-1}D^{(\star k)(m)}SS^{*-1} = D^{(\star k)(m)*}. \tag{92.33}$$

Так как S унитарно, мы можем здесь тоже воспользоваться (92.22):

$$(S\tilde{S})^{-1}\,D^{(\star k)(m)}\,(S\tilde{S}) = D^{(\star k)(m)*}. \tag{92.34}$$

Матрица $(S\tilde{S})$, очевидно, преобразует $D^{(\star k)(m)}$ в комплексно сопряженное выражение и, таким образом, должна быть отождествлена с U из (19.16). Следовательно,

$$\widetilde{(S\tilde{S})} = S\tilde{S} \tag{92.35}$$

и аналогично (92.28) $(S\tilde{S})$ является симметричной матрицей.

Ясно, что существование отличной от нуля унитарной матрицы S, удовлетворяющей (92.30), соответствует (92.28). Таким образом, если $D^{(\star k)(m)}$ эквивалентно $D^{(\star k)(m)*}$ и может быть взято вещественным, то тогда можно воспользоваться (92.28) и считать U симметричной матрицей. Наоборот, если существует симметричная матрица U, то $D^{(\star k)(m)}$ можно выбрать вещественным.

Возвратимся к выражению (92.17), которое мы преобразуем так, чтобы была видна связь с (92.14). Умножая (92.17) на $D^{(\star k)(m)}$ и выписывая явно все аргументы (элементы пространственной группы), получим

$$D^{(\star k)(m)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\})\,D^{(\star k)(m)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\})\,U = \\ = D^{(\star k)(m)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\})\,UD^{(\star k)(m)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\})^*. \tag{92.36}$$

Выполняя матричное умножение в левой стороне (92.36) и беря матричный элемент с индексами (α, β) от результирующей матрицы, получим

$$\sum_{\gamma} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\}^2)_{\alpha\gamma} U_{\gamma\beta} = \sum_{\delta\varepsilon} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\})_{\alpha\delta} U_{\delta\varepsilon} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\})^*_{\varepsilon\beta}. \tag{92.37}$$

Теперь просуммируем (92.37) по $\mathfrak{G}$. Тогда с помощью (92.10) левую часть (92.37) можно преобразовать к виду

$$\sum_{\gamma}\sum_{\mathfrak{G}} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\}^2)_{\alpha\gamma} U_{\gamma\beta} = \sum_{\gamma}\left(M^{(\star k)(m)}\right)_{\alpha\gamma} U_{\gamma\beta} =$$
$$= \sum_{\gamma} \mu^{(\star k)(m)} \delta_{\alpha\gamma} U_{\gamma\beta} = \mu^{(\star k)(m)} U_{\alpha\beta}. \tag{92.38}$$

Рассмотрим теперь просуммированную по $\mathfrak{G}$ правую часть (92.37):

$$\sum_{\delta\varepsilon} U_{\delta\varepsilon} \sum_{\mathfrak{G}} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\})_{\alpha\delta} D^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\})^*_{\varepsilon\beta} =$$
$$= \sum_{\delta\varepsilon} U_{\delta\varepsilon} \frac{g_p N}{s \cdot l_m} \delta_{\alpha\varepsilon}\delta_{\delta\beta} = U_{\beta\alpha}\left(\frac{g_p N}{s \cdot l_m}\right). \tag{92.39}$$

Чтобы получить (92.39), мы воспользовались соотношением ортогональности для эквивалентных неприводимых представлений $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k)(m)*}$. Тогда из (92.38) и (92.39) имеем

$$\mu^{(\star k)(m)} = \left(\frac{U_{\beta\alpha}}{U_{\alpha\beta}}\right)\left(\frac{g_p N}{s \cdot l_m}\right). \tag{92.40}$$

Но отношение $U_{\beta\alpha}/U_{\alpha\beta}$, согласно (92.28) и (92.29), может иметь только два значения ± 1. Далее, в интресующем нас случае, когда $D^{(\star k)(m)}$ и $D^{(\star k)(m)*}$ эквивалентны и могут быть взяты вещественными, (92.28) снова применимо и, следовательно,

$$\mu^{(\star k)(m)} = -\frac{g_p N}{s \cdot l_m}. \tag{92.41}$$

Для полноты изложения мы выпишем соотношение, соответствующее случаю (92.29):

$$\mu^{(\star k)(m)} = -\frac{g_p N}{s \cdot l_m}. \tag{92.42}$$

Теперь можно использовать результаты всех трех рассмотренных случаев, соответствующих (92.15), (92.41) и (92.42), и подставить эти соотношения в (92.11). Чтобы различить указанные три случая, воспользуемся принятой терминологией [1]). Если

---

[1]) Определение использованной терминологии дано, например, в книге Вигнера [1], стр. 340. — *Прим. ред.*

$D^{(\star k)(m)}$ можно взять вещественным в смысле (92.30) и (92.31), то мы будем называть его потенциально вещественным. Тогда

$$\sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\}^2) = g_p N$$

для потенциально вещественного $D^{(\star k)(m)}$. (92.43)

Если $D^{(\star k)(m)}$ комплексно, как в (92.14), то

$$\sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\}^2) = 0 \quad \text{для комплексного} \quad D^{(\star k)(m)}. \qquad (92.44)$$

Если $D^{(\star k)(m)}$ эквивалентно $D^{(\star k)(m)*}$ в смысле (92.17) и не может быть взято вещественным, то матрица U должна быть антисимметричной и применимо соотношение (92.42). Этот случай называется псевдовещественным. Тогда

$$\sum_{\mathfrak{G}} \chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi \mid t\}^2) = -g_p N \quad \text{для псевдовещественного} \quad D^{(\star k)(m)}. \qquad (92.45)$$

В динамике решетки возникают только случаи (92.43) и (92.44). Критерии (92.43) — (92.45) являются общими, и, используя соотношение (49.3), мы можем установить, к какому случаю относится любое представление. В нашем распоряжении имеется вся необходимая информация, и остается только выполнить суммирование по полной группе в (92.43) — (92.45). Ясно, что такая процедура не слишком удобна. Поэтому в следующем параграфе мы получим упрощенный критерий, предложенный Херрингом [69]. Этот критерий позволяет при исследовании свойств $D^{(\star k)(m)}$ работать только с группой $\mathfrak{G}(k)$. Следует отметить, что такое упрощение возможно потому, что по структуре $D^{(\star k)(m)}$ является индуцированным представлением, построенным на представлении $D^{(k)(m)}$ группы $\mathfrak{G}(k)$. Однако, как уже отмечалось ранее, в этом параграфе мы не могли заранее ограничиться только группой $\mathfrak{G}(k)$. Подробное исследование критериев (92.43) — (92.45) показывает, что можно дать более жесткий и более удобный критерий вещественности представлений. Этот вопрос обсуждается в § 93, 94.

§ 93. Упрощенный критерий вещественности для $D^{(\star k)(m)}$

Некоторое упрощение критериев вещественности (92.43) — (92.45), предложенное Херрингом [69], может быть получено с помощью выражения (37.3) для характеров, входящих в эти критерии. При этом характеры выражаются через характеры «с точками», относящиеся к группе $\mathfrak{G}(k)$. Для элемента симметрии, являющегося аргументом в (92.43) — (92.45), можно написать

$$\{\varphi \mid t\} = \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{R}_L\} = \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}. \tag{93.1}$$

Тогда

$$\begin{aligned}\{\varphi \mid t\}^2 &= \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} = \\ &= \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^2 = \\ &= \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L + \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^2. \end{aligned} \tag{93.2}$$

Из (37.3) мы видим, что требуется еще выражение для сопряженного элемента

$$\begin{aligned}&\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L + \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^2 \cdot \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} = \\ &= \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L + \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\} \cdot \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^2 \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} = \\ &= \left\{\varepsilon \mid \varphi_\sigma^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L + \varphi_\sigma^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\right\} \cdot \left\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}^{-1} \cdot \left\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\right\}^2 \cdot \left\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}. \end{aligned} \tag{93.3}$$

Тогда (37.3) принимает вид

$$\begin{aligned}&\chi^{({}^\star k)\,(m)}(\{\varphi \mid t\}^2) = \\ &= \sum_{\sigma=1}^{s} \dot{\chi}^{(k)\,(m)}\left(\left\{\varepsilon \mid \varphi_\sigma^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L + \varphi_\sigma^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\right\} \cdot \left\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}^{-1} \left\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\right\}^2 \cdot \left\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}\right). \end{aligned} \tag{93.4}$$

Мы видим, что структура аргумента в (93.4) представляет собой произведение чисто трансляционного элемента на поворот. Но характер с точкой в (93.4) будет отличен от нуля только в том случае, если выполнено условие (37.2). Это условие наложено на поворот, т. е. на второй множитель в (93.4). Условие состоит в том, что

$$\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}^2 \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \quad \text{относится к} \quad \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{93.5}$$

или, иначе,

$$\varphi_\sigma^{-1} \cdot \varphi_p^2 \cdot \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{93.6}$$

Из (93.6) следует

$$\varphi_p^2 \cdot \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} = \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}'_H, \tag{93.7}$$

или

$$\varphi_p^2 \cdot \boldsymbol{k}_\sigma = \boldsymbol{k}_\sigma + 2\pi \boldsymbol{B}'_H. \tag{93.8}$$

Тогда, если (93.5) выполняется для фиксированного p и заданного σ, мы можем выписать в характере с точкой сомножитель, соответствующий чистой трансляции в виде

$$\begin{aligned}&\exp - i\boldsymbol{k}\left(\varphi_\sigma^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L + \varphi_\sigma^{-1} \cdot \varphi_p \cdot \boldsymbol{R}_L\right) = \\ &\qquad = \exp - i\left(\varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L + \varphi_p^{-1} \cdot \varphi_\sigma \cdot \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_L\right) = \\ &\qquad\qquad = \exp - i\left(\boldsymbol{k}_\sigma + \varphi_p^{-1} \cdot \boldsymbol{k}_\sigma\right) \cdot \boldsymbol{R}_L. \end{aligned} \tag{93.9}$$

Отсюда для (93.4) имеем

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi\mid\tau\}^2)=\sum_\sigma \exp-i\left(k_\sigma+\varphi_p^{-1}\cdot k_\sigma\right)\cdot R_L\times$$
$$\times\dot\chi^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma\mid\tau_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p\mid\tau_p\}^2\cdot\{\varphi_\sigma\mid\tau_\sigma\}\right). \quad (93.10)$$

Теперь возвратимся к (92.43) — (92.45). Сумму по всем элементам группы $\mathfrak{G}$ запишем в виде

$$\sum_{\mathfrak{G}}=\sum_p^{g_p}\sum_L^N. \quad (93.11)$$

Здесь сумма по p берется по всем наборам элементов смежных классов в группе $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$, а суммирование по L идет по всем трансляциям в $\mathfrak{T}$. Сначала вычислим сумму по $\mathfrak{T}$ при фиксированном p:

$$\sum_L\left(\exp-i\left(k_\sigma+\varphi_p^{-1}\cdot k_\sigma\right)R_L\right)=\begin{cases}0 & \text{при } k_\sigma+\varphi_p^{-1}\cdot k_\sigma\neq 2\pi B_H,\\ N & \text{при } k_\sigma+\varphi_p^{-1}k_\sigma=2\pi B_H.\end{cases} \quad (93.12)$$

Следовательно, сумма (93.12) отлична от нуля, если

$$\varphi_p\cdot k=-k_\sigma+2\pi B_H. \quad (93.13)$$

Очевидно, если выполнено условие (93.13), то будут удовлетворены и (93.7) и (93.8). Следовательно, (93.13) более сильное условие.

Резюмируя, видим, что мы исследуем представление $D^{(\star k)(m)}$, для которого, как обычно, некоторый волновой вектор k выбран в качестве канонического вектора. Индекс σ представителя смежного класса фиксирован, как это указано в (36.2). Индекс p произволен и пробегает значения, соответствующие любым представителям смежных классов в группе $\mathfrak{G}$. Тогда для фиксированного k и соответствующего набора σ вклад в сумму в (93.11) дают только те представители смежных классов с индексом p, для которых применимо (93.13). Тогда из (93.11) получим в зависимости от рассматриваемого случая

$$\sum_{\mathfrak{G}}\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi\mid\tau\}^2)=$$
$$=N\sum_{\sigma=1}^{s}\sum_{p=1}^{g_p}\dot\chi^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma\mid\tau_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p\mid\tau_p\}^2\cdot\{\varphi_\sigma\mid\tau_\sigma\}\right)\Delta_{p\sigma}=(\pm Ng_p,\,0). \quad (93.14)$$

В (93.14)

$$\Delta_{p\sigma}=\begin{cases}1, & \text{если } \varphi_p\cdot k_\sigma=-k_\sigma+2\pi B_H,\\ 0 & \text{во всех прочих случаях.}\end{cases} \quad (93.15)$$

Отсюда в зависимости от рассматриваемого случая имеем

$$\sum_{\sigma=1}^{s}\sum_{p=1}^{g_p}\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p\,|\,\boldsymbol{\tau}_p\}^2\cdot\{\varphi_\sigma\,|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\}\right)\Delta_{p\sigma}=(\pm\,g_p,\,0). \tag{93.16}$$

Теперь покажем, что каждое слагаемое в сумме по σ в (93.16) дает одинаковый вклад в результат. Это значит, что каждое σ соответствует лучу звезды $^*\boldsymbol{k}$ и все лучи звезды дают одинаковый вклад в сумму. Рассмотрим $\sigma=1$ и выпишем тех представителей смежных классов $\{\varphi_p|\tau_p\}$, для которых $\Delta_{p_1}=1$:

$$\left\{\varphi_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_{\bar{l}_\lambda}\right\},\quad \text{где}\quad \varphi_{\bar{l}_\lambda}\cdot\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+2\pi\boldsymbol{B}_H. \tag{93.17}$$

Тогда

$$\left\{\varphi_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_{\bar{l}_\lambda}\right\}^2\quad \text{принадлежит}\quad \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \tag{93.18}$$

Вообще говоря, любое выбранное значение

$$\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\left\{\varphi_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_{\bar{l}_\lambda}\right\}^2\right) \tag{93.19}$$

может быть либо равно, либо не равно нулю. Однако если имеется по крайней мере один характер типа (93.19), отличный от нуля, то

$$\varphi_{\bar{l}_\lambda}\cdot\varphi_\sigma^{-1}\cdot\varphi_\sigma\cdot\boldsymbol{k}=-\varphi_\sigma^{-1}\cdot\varphi_\sigma\cdot\boldsymbol{k}+2\pi\boldsymbol{B}_H \tag{93.20}$$

и

$$\left(\varphi_\sigma\cdot\varphi_{\bar{l}_\lambda}\cdot\varphi_\sigma^{-1}\right)\cdot\boldsymbol{k}_\sigma=-\boldsymbol{k}_\sigma+2\pi\boldsymbol{B}_H. \tag{93.21}$$

Назовем

$$\varphi'_{\bar{l}_\lambda}\equiv\varphi_\sigma\cdot\varphi_{\bar{l}_\lambda}\cdot\varphi_\sigma^{-1}; \tag{93.22}$$

тогда

$$\left(\varphi'_{\bar{l}_\lambda}\right)^2=\varphi_\sigma\cdot\varphi^2_{\bar{l}_\lambda}\cdot\varphi_\sigma^{-1}. \tag{93.23}$$

Элемент, соответствующий (92.23):

$$\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}\cdot\left\{\varphi_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_{\bar{l}_\lambda}\right\}^2\cdot\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}^{-1}\equiv\left\{\varphi'_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}'_{\bar{l}_\lambda}\right\}^2 \tag{93.24}$$

принадлежит $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_\sigma)$, а элемент

$$\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}^{-1}\cdot\left\{\varphi'_{\bar{l}_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}'_{\bar{l}_\lambda}\right\}\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\} \tag{93.25}$$

принадлежит $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Возвращаясь к (93.16), мы видим, что величина

$$\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}^{-1}\cdot\left\{\varphi_{l_\lambda}\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}'_{l_\lambda}\right\}^2\cdot\left\{\varphi_\sigma\,\middle|\,\boldsymbol{\tau}_\sigma\right\}\right) \tag{93.26}$$

тождественно равна соответствующему характеру с $\sigma = 1$:

$$\dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_{\bar{l}_\lambda} \mid \tau_{\bar{l}_\lambda}\}^2\right). \tag{93.27}$$

Следовательно, каждый ненулевой элемент в выражении (93.6) с $\sigma = 1$ будет соответствовать отличному от нуля элементу в выражении (93.16) для каждого $\sigma = 2, \ldots, s$. Таким образом, для фиксированного σ все суммы равны и

$$\sum_{p=1}^{g_p} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \tau_\sigma\}^{-1} \cdot \{\varphi_p \mid \tau_p\}^2 \cdot \{\varphi_\sigma \mid \tau_\sigma\}\right) \Delta_{p\sigma} = (\pm\, g_p/s,\ 0). \tag{93.28}$$

Поэтому мы можем для удобства рассмотреть случай $\sigma = 1$. Тогда полученный первоначально Херрингом критерий вещественности для трех возможных случаев имеет вид, аналогичный (92.43) — (92.45):

$$\sum_{p=1}^{g_p} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p \mid \tau_p\}^2\right) \Delta_{p1} = g_p/s \tag{93.29}$$

для потенциально вещественных $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$,

$$\sum_{p=1}^{g_p} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p \mid \tau_p\}^2\right) \Delta_{p1} = 0 \tag{93.30}$$

для комплексных $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ и

$$\sum_{p=1}^{g_p} \dot{\chi}^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_p \mid \tau_p\}^2\right) \Delta_{p1} = -\, g_p/s \tag{93.31}$$

для псевдовещественных $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, где

$$\Delta_{p1} = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad \varphi_p \cdot \boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H, \\ 0 & \text{во всех прочих случаях.} \end{cases} \tag{93.32}$$

Удобство формул (92.29) — (93.31) состоит в том, что все характеры с точками относятся к единственной группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Однако наличие множителя Δ_{p1} дает в (93.32) ограничение, приводящее к затруднению. В любом случае необходимая процедура состоит в применении формул (93.29) — (93.31), так как нам известны таблицы характеров допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Однако, хотя формулы (93.29) — (93.31) позволяют установить тип представления $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$, они не дают возможности определить, в какое неприводимое представление $(\bar{m})$ при $-\boldsymbol{k}$ преобразуется данное допустимое представление $D^{(\star\boldsymbol{k})(m)}$ при действии операции обращения времени или оператора комплексного сопряжения K. Эта задача решается в § 94.

§ 94. Классификация $D^{(\star k)(m)}$ с помощью нового критерия вещественности

Критерии (93.29)—(93.31) могут быть прямо использованы в динамике кристаллической решетки для анализа вещественности определенных представлений $D^{(\star k)(m)}$ и проверки того, являются ли они представлениями, по которым преобразуются фононы. Очевидно, если представление удовлетворяет условию (93.29), то оно вещественно и может оказаться среди представлений, по которым преобразуются фононы в данном кристалле с симметрией $\mathfrak{G}$. Случай представлений, удовлетворяющих критерию (93.30), нуждается в специальном рассмотрении. Если имеет место (93.30), то представление $D^{(\star k)(m)}$ является комплексным и, согласно анализу § 87—93, в качестве физического неприводимого представления следует взять $D^{(\star k)(m)} \oplus D^{(\star k)(m)*}$. В этом случае в конкретной задаче динамики решетки происходит удвоение существенного вырождения: от вырождения, обусловленного пространственной группой $\mathfrak{G}$ и характеризуемого представлением $D^{(\star k)(m)}$, к вырождению, связанному с пространственно-временной группой симметрии $\mathcal{G}$ и характеризуемому прямой суммой представлений $D^{(\star k)(m)} \otimes D^{(\star k)(m)*}$.

Если представление $D^{(\star k)(m)}$ неприводимо, то $D^{(\star k)(m)*}$ тоже неприводимое представление. Согласно (90.9),

$$D^{(\star k)(m)*} = D^{(\star -k)(\bar{m})}, \tag{94.1}$$

где $D^{(\star -k)(m)}$ — неприводимое представление, соответствующее звезде $(\star - k)$. Однако в предыдущих параграфах мы уже определили все неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$. Поэтому теперь можно классифицировать $D^{(\star -k)(\bar{m})}$, т. е. отождествить это представление с одним из ранее найденных.

Следуя работе Фреи [70], будем различать три класса волновых векторов $\boldsymbol{k}$ и звезд $\star\boldsymbol{k}$:

$$\text{Класс I:} \quad \boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H; \quad \star\boldsymbol{k} = \star - \boldsymbol{k}. \tag{94.2}$$

$$\text{Класс II:} \quad \boldsymbol{k} \neq -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H; \quad \star\boldsymbol{k} = \star - \boldsymbol{k}. \tag{94.3}$$

$$\text{Класс III:} \quad \boldsymbol{k} \neq -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H; \quad \star\boldsymbol{k} \neq \star - \boldsymbol{k}. \tag{94.4}$$

Каждый из этих трех классов I, II, III требует специального рассмотрения на предмет исследования вещественности. Наш последующий анализ отличается от предложенного Фреи.

Для волновых векторов класса I, согласно (94.1), имеем

$$D^{(\star k)(m)*} = D^{(\star k)(\bar{m})}. \tag{94.5}$$

Так как для этого класса $-\boldsymbol{k}$ эквивалентно $\boldsymbol{k}$, мы можем считать, что представление $D^{(^{\star}k)(\bar{m})}$ индуцировано некоторым неприводимым представлением $D^{(k)(\bar{m})}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда, согласно (90.5), в качестве базиса для $D^{(k)(\bar{m})}$ можно взять

$$\Sigma^{(k)(\bar{m})} = K\Sigma^{(k)(m)}. \tag{94.6}$$

Пусть теперь $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|t(\varphi)\}}$ — оператор относящийся к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|t(\varphi)\}}\Sigma^{(k)(\bar{m})} = \Sigma^{(k)(\bar{m})}D^{(k)(\bar{m})}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}(\varphi)\}). \tag{94.7}$$

Из (94.6) имеем отношение

$$\chi^{(k)(m)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}(\varphi)\}) = \chi^{(k)(m)}(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{t}(\varphi)\})^*, \tag{94.8}$$

в котором все входящие величины можно взять из таблиц характеров допустимых неприводимых представлений $D^{(k)(m)}$. Соответственно для любого волнового вектора класса I прямое сопоставление с таблицами характеров для группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ позволяет найти представление $D^{(k)(m)}$. Важно понимать, что в принципе следует проверить каждый оператор $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|t(\varphi)\}}$ и также соответствующие характеры. Рассмотрим чистую трансляцию $\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}$ из $\mathfrak{T}$. Согласно (94.2),

$$\text{Класс I:}\quad \boldsymbol{k} = \pi\boldsymbol{B}_H. \tag{94.9}$$

Следовательно,

$$\chi^{(k)(m)}(\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}) = \exp - i\pi\boldsymbol{B}_H\cdot\boldsymbol{R}_L = \pm 1. \tag{94.10}$$

Соответственно выбор из трех случаев (93.29)—(93.31) можно сделать, используя таблицы характеров только элементов групп $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ или $\Pi(\boldsymbol{k})$. Заключение о дополнительном вырождении, обусловленном обращением времени, для векторов класса I получается тогда очевидным образом. Если

$$D^{(k)(m)}\ \text{вещественно, то}\quad m = m \tag{94.11}$$

и нет никакого дополнительного вырождения.

Если

$$D^{(k)(m)}\ \text{комплексно, то}\quad m \neq \bar{m} \tag{94.12}$$

и $D^{(k)(m)}$ и $D^{(k)(\bar{m})}$ объединяются. В случае (94.12) допустимыми физическими неприводимыми представлениями для фононов являются представления $D^{(k)(m)}\otimes D^{(k)(\bar{m})}$, очевидно имеющие удвоенную размерность по отношению к $D^{(k)(m)}$. Это практически важный случай, так как он соответствует локальному удвоению степени вырождения по отношению к вырождению, обусловленному чисто пространственной группой $\mathfrak{G}$.

Рассмотрим теперь волновые векторы класса II. В этом случае $-\boldsymbol{k}$ относится к звезде $^*\boldsymbol{k}$, но не эквивалентно $\boldsymbol{k}$. Поэтому в отличие от предыдущего случая не очевидно, что для определения типа представлений достаточно прямо использовать таблицы характеров малой группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ или $\Pi(\boldsymbol{k})$. Однако мы можем показать, что и в этом случае с помощью только этих таблиц можно сделать определенное заключение. Но сначала мы напомним общие принципы, по которым устанавливается соотношение между группой и представлениями в точках $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$. Рассмотрим представитель смежного класса $\{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}$, для которого

$$\varphi_{\bar{\sigma}} \cdot \boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{94.13}$$

Тогда можно разложить полную пространственную группу $\mathfrak{G}$ на смежные классы по $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, где представитель смежных классов имеет значок с чертой либо без черты:

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_{\sigma} \mid \tau_{\sigma}\}\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots . \tag{94.14}$$

Элементы со значком без черты переводят $\boldsymbol{k}$ не в $-\boldsymbol{k}$, а в некоторый другой вектор в $^*\boldsymbol{k}$. Группа $\mathfrak{G}(-\boldsymbol{k})$ равна

$$\mathfrak{G}(-\boldsymbol{k}) = \{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}^{-1} \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) \{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}. \tag{94.15}$$

Аргументация § 91—93 с очевидностью показывает, что можно установить связь между разными характерами. Таким образом, характер

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l \mid \boldsymbol{\tau}_l\}) \tag{94.16}$$

неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ для оператора $P_{\{\varphi \mid \tau\}}$ вычисляется в пространстве $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$. Преобразуем теперь это пространство, используя представителей смежных классов, имеющих значок с чертой:

$$\{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = \Sigma^{(-\boldsymbol{k})(m)}. \tag{94.17}$$

Выражение в правой части равенства (94.17) записано в соответствии с содержащимся в (35.3) утверждением, что чисто пространственное преобразование сохраняет индекс m. Но элемент

$$P_{\{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \tau_{\bar{\sigma}}\}\{\varphi_l \mid \tau_l\}\{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \tau_{\bar{\sigma}}\}^{-1}} \equiv P_{\{\varphi_l \mid \tau_l\}^{\bar{\sigma}}} \tag{94.18}$$

имеет характер, вычисленный в пространстве (94.17):

$$\chi^{(-\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_l \mid \tau_l\}^{\bar{\sigma}}\right). \tag{94.19}$$

Тогда с учетом (94.18) и (94.17) имеем

$$\chi^{(-\boldsymbol{k})(m)}\left(\{\varphi_l \mid \boldsymbol{\tau}_l\}^{\bar{\sigma}}\right) = \chi^{(\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi_l \mid \boldsymbol{\tau}_l\}). \tag{94.20}$$

Следует иметь в виду, что характеры (94.16) и (94.19) возникают как отдельные компоненты выражения (49.3), в котором для получения полного характера пространственной группы для элемента $\{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\}$ нужно выполнить в соответствии с (94.14) суммирование по σ и $\bar{\sigma}$:

$$\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\}) = \frac{1}{l_k} \sum_{\sigma, \bar{\sigma}} \dot{\chi}^{(k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1} \{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\} \{\varphi_\sigma | \boldsymbol{\tau}_\sigma\}\right). \quad (94.21)$$

Следовательно, (94.16) и (94.19) являются «частями» $\chi^{(\star k)(m)}$ для одного и того же неприводимого представления пространственной группы $D^{(\star k)(m)}$.

Рассмотрим теперь пространство, получаемое обращением во времени пространства $\Sigma^{(k)(m)}$:

$$K\Sigma^{(k)(m)} = \Sigma^{(k)(m)*} = \Sigma^{(-k)(\bar{m})}, \quad (94.22)$$

и пространство, полученное в результате пространственного преобразования (94.22):

$$\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} K\Sigma^{(k)(m)} = \{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \Sigma^{(-k)(\bar{m})} = \Sigma^{(k)(m)}. \quad (94.23)$$

Правая сторона (94.23) снова получается на основании содержащегося в (35.3) условия сохранения индекса $\bar{m}$. Следует опять отметить, что всегда можно взять аналогично (35.3)

$$P_{\{\varphi_\rho | \tau_\rho\}} \Sigma^{(k)(m)} = \Sigma^{(k_\rho)(m)}, \quad (94.24)$$

где индекс m в обеих сторонах равенства (94.24) одинаков; но для антилинейного оператора K, действующего в векторном пространстве, мы должны пользоваться соотношением

$$K\Sigma^{(k)(m)} = \Sigma^{(-k)(\bar{m})}, \quad (94.25)$$

где правило определения $\bar{m}$ будет получено ниже.

Характер элемента $P_{\{\varphi_l | \tau_l\}^{\bar{\sigma}}}$, действующего на базисные функции (линейного векторного пространства) (94.20), равен

$$\chi^{(k)(m)}\left(\{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\}^{\bar{\sigma}}\right)^* \equiv \chi^{(k)(m)}(\{\varphi_l | \boldsymbol{\tau}_l\}). \quad (94.26)$$

Соотношение (94.26) позволяет полностью определить индекс $\bar{m}$ комплексно сопряженного представления и пространства по таблицам представлений $D^{(k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}(k)$, что полностью решает задачу в этом случае. Соотношение (96.26) оказывается более сильным, чем формула Херринга (93.29), (93.30), так как оно не только классифицирует представления, но и устанавливает связь индексов $\bar{m}$ и m для комплексно сопряженных представлений. Сопоставление (94.26) и (94.13) для выяснения того, реализуется ли равенство $m = \bar{m}$, в этом случае служит проверкой для (93.29) и (93.30). Для волновых векторов, относящихся к классу II, мы можем снова получить несколько следствий:

$$\bar{m}=m \text{ дополнительного вырождения нет,} \tag{94.27}$$

$$\bar{m}\neq m \; D^{(k)(m)} \text{ и } D^{(k)(\bar{m})} \text{ объединяются.} \tag{94.28}$$

В случае (94.28) мы снова имеем локальное удвоение по сравнению с результатом для одной группы $\mathfrak{G}$. Заметим, что (94.26) особенно удобно потому, что все входящие в него величины определяются для одной группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Наконец, для волновых векторов класса III с очевидностью следует

$$D^{(^{*}k)(m)} \mathrel{\substack{\cdot \\ \neq \\ \cdot}} D^{(^{*}k)(\bar{m})}. \tag{94.29}$$

Следовательно, полные представления $D^{(^{*}k)(m)}$ и $D^{(^{*}-k)(\bar{m})}$ должны рассматриваться вместе как одно представление. Такое удвоение является «глобальным»; оно отличается от «локального» объединения представлений при заданном волновом векторе $\boldsymbol{k}$. Существенное вырождение в этом случае связано с удвоением числа представлений полной пространственной группы за счет учета пространственно-временной группы $\mathcal{G}$.

Этим заканчивается наш обзор различных типов неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$ как возможных физических неприводимых представлений группы $\mathcal{G}$ для фононов.

§ 95. Физические неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$ как копредставления группы $\mathcal{G}$

В нескольких следующих параграфах мы покажем, как перестроить предшествующий анализ так, чтобы оператор обращения времени K рассматривался на равных правах с пространственным оператором P_R группы $\mathfrak{G}$. Это можно сделать методом так называемых копредставлений пространственно-временной группы $\mathcal{G}$. Излагаемая ниже теория копредставлений существенно отличается от ранее рассмотренного подхода, где пространственные операторы P_R учитывались иначе, чем оператор обращения времени K. Хотя основы теории копредставлений изложены в работе [1] (глава 26), нам кажется, что в этой монографии целесообразно подробно рассмотреть этот вопрос, имея в виду применения к динамике решетки. Наше изложение несколько перекрывается с работой [1], но мы старались свести перекрытие к минимуму, необходимому для того, чтобы книга была полной.

Возвращаясь к рассмотрению полной пространственно-временной группы $\mathcal{G}$ из § 89, мы видим, что $\mathcal{G}$ определена в (89.3) как $\mathcal{G}=\mathfrak{G}+K\mathfrak{G}$ через пространственные унитарные операторы преобразований $P_{\{\varphi|t\}}$ группы $\mathfrak{G}$ и антиунитарные операторы

$KP_{\{\varphi|t\}}$ смежного класса $K\mathfrak{G}$. Чтобы получить существенно вырождение в системе, для которой $\mathcal{G}$ является группой симметрии, нужно исследовать инвариантное и неприводимое векторное пространство, точнее, минимальное инвариантное линейное векторное пространство, образованное собственными векторами, или нормальными координатами физической задачи динамики решетки. Пусть $\boldsymbol{S}^{(j)}$ — инвариантное неприводимое физическое пространство. Тогда операторы группы $\mathcal{G}$ будут преобразовывать базисные векторы $\boldsymbol{S}^{(j)}$ друг через друга. Пусть

$$\boldsymbol{S}^{(j)} \equiv \{\psi_1^{(j)}, \ldots, \psi_\alpha^{(j)}, \ldots\}. \tag{95.1}$$

Преобразование $\boldsymbol{S}^{(j)}$ в само себя определяется матрицей $D^{(j)}$ в обычном смысле. Следует помнить, однако, об антиунитарной природе операторов в $K\mathfrak{G}$. Назовем $D^{\mathrm{co}(j)}$ систему неприводимых матриц, с помощью которых преобразуется неприводимое инвариантное пространство $\boldsymbol{S}^{(j)}$. Тогда имеем

$$P_{\{\varphi|t\}}\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi|\boldsymbol{t}\}), \tag{95.2}$$

$$KP_{\{\varphi|t\}}\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi|\boldsymbol{t}\}). \tag{95.3}$$

Последовательное применение двух таких операторов к пространству $\boldsymbol{S}^{(j)}$ дает

$$P_{\{\varphi_2|t_2\}}P_{\{\varphi_1|t_1\}}\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\}\,D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\}) = \\ = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\}\cdot\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\}) \tag{95.4}$$

и

$$P_{\{\varphi_2|t_2\}}\cdot KP_{\{\varphi_1|t_1\}}\cdot\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\})\,D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\}) = \\ = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\}\,K\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\}). \tag{95.5}$$

Подставляя (88.4), получаем

$$(KP_{\{\varphi_2|t_2\}})\,P_{\{\varphi_1|t_1\}}\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\})\cdot D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\})^* = \\ = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\}\cdot\{\varphi_1\,\boldsymbol{t}_1\}) \tag{95.6}$$

и

$$(KP_{\{\varphi_2|t_2\}})\,(KP_{\{\varphi_1|t_1\}})\,\boldsymbol{S}^{(j)} = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\})\cdot D^{(\mathrm{co})(j)}(\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\})^* = \\ = \boldsymbol{S}^{(j)}D^{(\mathrm{co})(j)}(K\{\varphi_2|\boldsymbol{t}_2\}\cdot\{\varphi_1|\boldsymbol{t}_1\}). \tag{95.7}$$

Чтобы подчеркнуть важную роль соотношений (95.4) — (95.7), мы введем сокращенное обозначение для унитарных элементов группы $\mathfrak{G}$

$$P_{\{\varphi_\mu|t_\mu\}} \equiv u_\mu \tag{95.8}$$

и для антиунитарных элементов группы $K\mathfrak{G}$

$$KP_{\{\varphi_\mu|t_\mu\}} \equiv a_\mu. \tag{95.9}$$

Тогда матричное умножение в (95.4)—(95.7) можно записать так:

$$D(u_2)\,D(u_1) = D(u_2u_1), \tag{95.10}$$

$$D(u_2)\,D(a_1) = D(u_2a_1), \tag{95.11}$$

$$D(a_2)\,D(u_1)^* = D(a_2u_1), \tag{95.12}$$

$$D(a_2)\,D(a_1)^* = D(a_2a_1), \tag{95.13}$$

где D обозначает матрицу копредставления.

Суть теории копредставлений состоит в том, что определение неэквивалентных неприводимых представлений пространственно-временной группы $\mathcal{G}$ дает полное решение задачи о существенном вырождении в динамике решетки. Из (95.13) следует, что обратные элементы в этом случае обладают некоторой особенностью, которая видна, если взять $a_1 = a_2^{-1}$; тогда получим

$$D(a_2)\,D(a_2^{-1})^* = D(a_2a_2^{-1}) = D(\varepsilon). \tag{95.14}$$

Из (95.14) следует

$$D(a_2)^{-1} = D(a_2^{-1})^*. \tag{95.15}$$

Следует напомнить, однако, что матрицы копредставлений, удовлетворяющие (95.10)—(95.15), унитарны из-за конечности пространственно-временной группы $\mathcal{G}$. Отсюда

$$D(a_2)^{-1} = D(a_2)^\dagger = \tilde{D}(a_2)^* \tag{95.16}$$

или с учетом (95.15)

$$D(a_2^{-1}) = \tilde{D}(a_2). \tag{95.17}$$

Совокупность матриц $D(u_\mu)$, $D(a_\mu)$ соответствует набору элементов в $\mathcal{G}$, но это соответствие не означает, что группа матриц $D^{(co)}$ гомоморфна группе операторов $\mathcal{G}$. Пусть $\mathcal{G}$ состоит из совокупности унитарных и антиунитарных операторов:

$$\{u\} = \{P_R\}, \quad \{a\} = \{KP_R\}; \tag{95.18}$$

тогда существует совокупность матриц $D^{(co)}$, по одной для каждого оператора, находящаяся в следующем соответствии с $\mathcal{G}$:

$$D^{(co)}(u_\mu) \Rightarrow u_\mu, \tag{95.19}$$

$$D^{(co)}(a_\mu) \Rightarrow a_\mu \tag{95.20}$$

и удовлетворяющая правилам умножения (95.10)—(95.13). Эта совокупность матриц определяет *полулинейное представление* группы $\mathcal{G}$. Термин «полулинейное» существует в математической литературе [72], но Вигнер предпочел ему термин *копредставление* [1], который и укоренился в физической литературе для обозначения матриц со свойствами (95.10)—(95.13). Таким образом, эти соотношения определяют копредставления группы $\mathcal{G}$.

Теперь полезно привести модифицированную лемму Шура, пригодную для копредставлений. Пусть $S^{(j)}$ — неприводимое пространство (95.1). Пусть $S'^{(j)}$ — неприводимое пространство, эквивалентное $S^{(j)}$. Другими словами, пусть $S'^{(j)}$ линейно связано с $S^{(j)}$ с помощью матрицы унитарного преобразования V. Для векторов в $S'^{(j)}$ имеем

$$\psi_\alpha'^{(j)} = \sum_\beta V_{\beta\alpha}\psi_\beta^{(j)}, \tag{95.21}$$

или

$$S'^{(j)} = VS^{(j)}. \tag{95.22}$$

Тогда из (95.2), (95.3), (95.8), (95.9) и (95.21) следует

$$u_\mu\psi_\alpha'^{(j)} = \sum_\beta V_{\beta\alpha}u_\mu\psi_\beta^j = \sum_\beta V_{\beta\alpha}\sum_\gamma D_{\gamma\beta}(u_\mu)\,\psi_\gamma^j =$$
$$= \sum_\beta V_{\beta\alpha}\sum_\gamma D_{\gamma\beta}(u_\mu)\sum_\delta V_{\delta\gamma}^{-1}\psi_\delta'^{(j)} = \sum_\delta\Big(\sum_\beta\sum_\gamma V_{\delta\gamma}^{-1}D_{\gamma\beta}(u_\mu)\,V_{\beta\alpha}\Big)\,\psi_\delta'^{(j)} \tag{95.23}$$

и

$$a_\mu\psi_\alpha'^{(j)} = a_\mu\sum_\beta V_{\beta\alpha}\psi_\beta^{(j)} = \sum_\beta V_{\beta\alpha}^* a_\mu\psi_\beta^{(j)} =$$
$$= \sum_\beta V_{\beta\alpha}^*\sum_\gamma D(a_\mu)_{\gamma\beta}\sum_\delta V_{\delta\gamma}^{-1}\psi_\delta'^{(j)} = \sum_\delta\Big(\sum_\beta\sum_\gamma V_{\delta\gamma}^{-1}D_{\gamma\beta}(a_\mu)\,V_{\beta\alpha}^*\Big)\,\psi_\delta'^{(j)}, \tag{95.24}$$

или

$$u_\mu\psi_\alpha'^{(j)} = \sum_\delta D'(u_\mu)_{\delta\alpha}\,\psi_\delta'^{(j)}, \tag{95.25}$$

$$a_\mu\psi_\alpha'^{(j)} = \sum_\delta D'(a_\mu)_{\delta\alpha}\,\psi_\delta'^{(j)}. \tag{95.26}$$

Очевидно, D и D' являются эквивалентными представлениями. Они связаны соотношениями

$$D'(u_\mu) = V^{-1}D(u_\mu)\,V, \tag{95.27}$$

$$D'(a_\mu) = V^{-1}D(a_\mu)\,V^*. \tag{95.28}$$

Будем считать (95.27) и (95.28) определением эквивалентных копредставлений. Отметим, что в (95.28) входит комплексное сопряжение.

Обобщенная лемма Шура учитывает наличие этого комплексного сопряжения в (95.28). Таким образом, пусть $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$— два неприводимых копредставления группы. Пусть M — эрмитова матрица, удовлетворяющая соотношениям

$$MD^{(i)}(u_\mu) = D^{(i)}(u_\mu)\,M, \tag{95.29}$$

$$MD^{(i)}(a_\mu) = D^{(j)}(a_\mu)\,M^*. \tag{95.30}$$

Тогда либо

$$M = 0 \text{ (нулевая матрица) и } D^{(i)} \text{ не эквивалентно } D^{(j)}, \tag{95.31}$$

либо

$$M^{-1} \text{ существует и } D^{(i)} \text{ эквивалентно } D^{(j)}. \tag{95.32}$$

Кроме того, если $D^{(i)}$ — неприводимое представление и существует такая эрмитова матрица M, что

$$MD^{(i)}(u) = D^{(i)}(u)\, M, \tag{95.33}$$

$$MD^{(i)}(a) = D^{(i)}(a)\, M^*, \tag{95.34}$$

то

$$M \text{ — постоянная матрица.} \tag{95.35}$$

Как показал Диммок [73], существенно выбирать M в виде эрмитовой матрицы. Другие авторы [1] не отмечали этого обстоятельства.

В следующем параграфе мы продолжим исследование структуры матриц копредставлений группы $\mathcal{G}$. Будут выявлены некоторые существенные отличия от матриц обычных представлений. Мы будем различать случай, когда обращение времени приводит к «глобальному» вырождению, и случай, когда возникает «локальное» дополнительное вырождение. Последнее происходит в точках достаточно высокой симметрии, например когда $-\boldsymbol{k}$ относится к звезде $\boldsymbol{k}$ или когда $-\boldsymbol{k}$ просто эквивалентно $\boldsymbol{k}$.

Мы введем понятие козвезды co$^*\boldsymbol{k}$; тогда снова можно разделить волновые векторы на три класса аналогично § 94. Как и в § 36, мы установим структуру матриц индуцированных представлений, приводя их к блочному виду. Исследование этого вопроса показывает, что в наиболее интересном случае мы должны рассматривать неприводимые проективные представления некоторой точечной группы, изоморфной факторгруппе $\mathcal{G}/\mathfrak{T}$. В этом и состоит самое главное отличие от предыдущего рассмотрения, где возникала факторгруппа $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$. Затем мы определим систему факторов и установим отличие от случая обычных проективных представлений.

§ 96. Структура копредставлений группы $\mathcal{G}$: козвезда co$^*\boldsymbol{k}$

Пространственно-временную группу $\mathcal{G}$ можно записать, согласно (89.3), в виде

$$\mathcal{G} = \mathfrak{G} + K\mathfrak{G}. \tag{96.1}$$

Так как $\mathfrak{G}$ имеет нормальный делитель $\mathfrak{T}$, очевидно, $\mathfrak{T}$ является и нормальной подгруппой группы $\mathcal{G}$. Отсюда следует, что пространственно-временную точечную группу пространственно-временной группы $\mathscr{G}$ можно представить в виде

$$\mathscr{P} = \mathscr{G}/\mathfrak{T}, \tag{96.2}$$

где для $\mathscr{P}$ имеем

$$\mathscr{P} = \mathfrak{P} + K\mathfrak{P}. \tag{96.3}$$

Очевидно, что группа $\mathscr{P}$ содержит унитарные и антиунитарные элементы. Чтобы продвинуться дальше, построим нормальную подгруппу

$$\mathscr{T} \equiv \mathfrak{T} + K\mathfrak{T}, \tag{96.4}$$

состоящую из унитарных и антиунитарных трансляций. Так как K коммутирует с элементами $\mathfrak{T}$, то обе группы $\mathfrak{T}$ и $\mathscr{T}$ являются нормальными подгруппами $\mathscr{G}$.

Мы начнем исследование неприводимых представлений группы $\mathscr{G}$ с приведения $\mathscr{T}$. Ясно, что приведение (аналогично § 29) могут осуществлять блоховские векторы. Тогда

$$P_{\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})} = D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})\,\psi^{(\boldsymbol{k})} = (\exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L)\,\psi^{(\boldsymbol{k})}. \tag{96.5}$$

Блоховские векторы определяют также неприводимое пространство для группы $\mathscr{T}$. Поскольку $K\psi^{(\boldsymbol{k})} = \psi^{(\boldsymbol{k})*}$, то

$$\begin{aligned} K\cdot P_{\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}}\psi^{(\boldsymbol{k})} = KP_{\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\}}\cdot K\cdot K\psi^{(\boldsymbol{k})} &= D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})^*\,K\psi^{(\boldsymbol{k})} = \\ &= D^{(-\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_L\})\,K\psi^{(\boldsymbol{k})}, \end{aligned} \tag{96.6}$$

где мы воспользовались соотношением

$$D^{(\boldsymbol{k})*} = D^{(-\boldsymbol{k})}. \tag{96.7}$$

Соответственно $\psi^{(\boldsymbol{k})*} = \psi^{(-\boldsymbol{k})}$. Разумеется, это соотношение выполняется только для индекса, являющегося волновым вектором $\boldsymbol{k}$. Как было показано в § 87—94, в общем случае следует положить

$$K\psi_{\alpha}^{(\boldsymbol{k})\,(m)} = \psi_{\bar{\alpha}}^{(-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}, \tag{96.8}$$

где индексы $(\bar{m}, \bar{\alpha})$ подлежат определению. Таким образом, антиунитарный оператор K переводит $\boldsymbol{k}$ в $-\boldsymbol{k}$, но его действие на другие индексы, характеризующие поведение базиса при применении операторов группы $\mathscr{G}$, должно быть исследовано дополнительно.

Представляется полезным в качестве простого введения в теорию копредставлений обсудить неприводимые копредставления группы $\mathscr{T}$, используя метод индукции из группы $\mathfrak{T}$. Пусть вектор $\psi^{(\boldsymbol{k})}$ образует неприводимое пространство для $\mathfrak{T}$. Чтобы получить неприводимое пространство для $\mathscr{T}$, мы должны включить еще пространство $K\psi^{(\boldsymbol{k})} \equiv \psi^{(\boldsymbol{k})*}$. Рассмотрим теперь пространство представления, образованное двумя функциями:

$\psi^{(k)}$ и полученной из нее обращением времени $K\psi^{(k)}$,

$$\Sigma^{(\mathrm{co}\ k)} \equiv \{\psi^{(k)}, K\psi^{(k)}\}. \tag{96.9}$$

В этом пространстве унитарные операторы записываются в виде

$$D(\{\varepsilon \mid R_L\}) = \begin{pmatrix} D^{(k)} & 0 \\ 0 & D^{(-k)} \end{pmatrix}, \tag{96.10}$$

где мы воспользовались (96.7). Антиунитарные операторы можно представить следующим образом:

$$D(K\{\varepsilon \mid R_L\}) = \begin{pmatrix} 0 & D^{(k)} \\ D^{(-k)} & 0 \end{pmatrix}. \tag{96.11}$$

В (96.10) и (96.11) мы не выписываем (очевидных) аргументов матриц. Легко проверить, что (96.10) и (96.11) удовлетворяют (95.10)—(95.13). Следовательно, (96.10), (96.11) определяют копредставления пространственно-временной группы $\mathcal{T}$.

Мы проверим свойство неприводимости (96.10) и (96.11) с помощью леммы Шура аналогично рассмотрению (95.33)—(95.35). Пусть

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \tag{96.12}$$

является эрмитовой матрицей, так что

$$m_{11} = m_{11}^*, \quad m_{22} = m_{22}^*, \quad m_{12} = m_{21}^*. \tag{96.13}$$

Из

$$MD(\{\varepsilon \mid \mathbf{R}_L\}) = D\{\varepsilon \mid R_L\}) M \tag{96.14}$$

мы находим

$$m_{12}D^{(-k)} = m_{12}D^{(k)}. \tag{96.15}$$

Следовательно, либо

$$D^{(k)} \doteqdot D^{(-k)} \quad \text{и} \quad m_{12} \neq 0, \tag{96.16}$$

либо

$$D^{(k)} \not\doteqdot D^{(-k)} \quad \text{и} \quad m_{12} = 0. \tag{96.17}$$

Если имеет место (96.16), то

$$\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H \quad \text{и} \quad m_{12} \neq 0. \tag{96.18}$$

Если имеет место (96.17), то

$$\boldsymbol{k} \neq -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H \quad \text{и} \quad m_{12} = 0. \tag{96.19}$$

Из соотношения

$$MD(K\{\varepsilon \mid R_L\}) = D(K\{\varepsilon \mid R_L\}) M^* \tag{96.20}$$

имеем

$$m_{11}D^{(\boldsymbol{k})}=m_{22}D^{(\boldsymbol{k})}, \tag{96.21}$$

$$m_{12}D^{(-\boldsymbol{k})}=m_{12}D^{(\boldsymbol{k})}. \tag{96.22}$$

Очевидно, (96.22) выполняется тривиально как для (96.18), так и для (96.19). Из (96.21) и (96.13) следует

$$m_{11}=m_{22}=m, \tag{96.23}$$

где m — вещественная константа.

Когда применимо (96.19), имеем

$$M=m\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{96.24}$$

В этом случае D неприводимо. В случае когда применимо (96.18), имеем

$$M=\begin{pmatrix}m & m_{12}\\ m_{12}^{*} & m\end{pmatrix}. \tag{96.25}$$

Так как эта матрица не является константой, то D приводимо.

Итак, если $\boldsymbol{k}$ не эквивалентно $-\boldsymbol{k}$, то неприводимое копредставление группы $\mathcal{T}$ равно

$$D(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})=\begin{pmatrix}D^{(\boldsymbol{k})} & 0\\ 0 & D^{(-\boldsymbol{k})}\end{pmatrix} \tag{96.26}$$

и

$$D(K\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})=\begin{pmatrix}0 & D^{(\boldsymbol{k})}\\ D^{(-\boldsymbol{k})} & 0\end{pmatrix}. \tag{96.27}$$

Если $\boldsymbol{k}$ эквивалентно $-\boldsymbol{k}$, то (96.26) и (96.27) дают соответственно

$$D^{(\boldsymbol{k})}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \quad \text{и} \quad D^{(\boldsymbol{k})}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{96.28}$$

Но (96.28) — вещественные симметричные матрицы. Их можно диагонализовать, производя преобразование подобия с помощью вещественной и ортогональной матрицы.

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{pmatrix}. \tag{96.29}$$

В приведенной форме копредставления для матриц, соответствующих унитарному элементу, равны

$$D(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})=\begin{pmatrix}D^{(\boldsymbol{k})} & 0\\ 0 & D^{(\boldsymbol{k})}\end{pmatrix}, \tag{96.30}$$

а для матриц, соответствующих антиунитарному элементу,

$$D(K\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})=\begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k})} & 0 \\ 0 & -D^{(\boldsymbol{k})} \end{pmatrix}. \tag{96.31}$$

Полное приведение (96.30) и (96.31) можно выполнить с помощью определения эквивалентного копредставления (95.27) и (95.28). Тогда мы увидим, что (96.30) и (96.31) распадаются на прямую сумму двух *эквивалентных* копредставлений.

Чтобы убедиться в этом, возьмем матрицу V из (95.27) и (95.28) в виде

$$V=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$V^{-1}D(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})\,V=\begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\}) & 0 \\ 0 & D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\}) \end{pmatrix} \tag{96.32}$$

и

$$V^{-1}D(K\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\})\,V^{*}=\begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k})}(K\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\} & 0 \\ 0 & D^{(\boldsymbol{k})}(K\{\varepsilon\mid \boldsymbol{R}_L\} \end{pmatrix}. \tag{96.33}$$

В этом случае неприводимые представления являются одномерными и выделяют представления $D^{(\boldsymbol{k})}$ группы $\mathfrak{T}$ дважды. Этот довольно тривиальный пример будет полезен нам ниже как иллюстрация к (98.52) и последующим формулам.

Мы можем продвинуться дальше, аналогично тому как мы делали для унитарной группы $\mathfrak{G}$. Предположим наличие некоторого неприводимого копредставления группы $\mathcal{G}$, которое в полностью приведенной форме содержится в $\mathcal{T}$. Вспомним рассмотрение в § 30—32, применимое здесь из-за того, что K коммутирует с пространственными унитарными операторами. Тогда можно сразу сказать, что любое неприводимое представление характеризуется набором волновых векторов. Однако в этом случае в наборе помимо каждого волнового вектора $\boldsymbol{k}$ будет содержаться и вектор $-\boldsymbol{k}$. Получающуюся при этом совокупность значений $\boldsymbol{k}$ называют козвездой. Определим ее следующим образом:

$$\mathrm{co}\,{}^{*}\boldsymbol{k}\equiv\{\boldsymbol{k}_1,\ -\boldsymbol{k}_1,\ \ldots,\ \boldsymbol{k}_s,\ -\boldsymbol{k}_s\}. \tag{96.34}$$

Козвезда состоит из различных неэквивалентных волновых векторов.

Очевидно, имеется несколько классов волновых векторов, для которых аналогично § 94 имеем

$$\text{I}\quad \boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+2\pi\boldsymbol{B}_H;\qquad {}^{*}\boldsymbol{k}=\mathrm{co}\,{}^{*}\boldsymbol{k}. \tag{96.35}$$

$$\text{II}\quad \boldsymbol{k}\neq-\boldsymbol{k}+2\pi\boldsymbol{B}_H;\qquad {}^{*}\boldsymbol{k}=\mathrm{co}\,{}^{*}\boldsymbol{k}. \tag{96.36}$$

$$\text{III}\quad \boldsymbol{k}\neq-\boldsymbol{k}+2\pi\boldsymbol{B}_H;\qquad {}^{*}\boldsymbol{k}\neq\mathrm{co}\,{}^{*}\boldsymbol{k}. \tag{96.37}$$

В (96.35) векторы $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$ являются эквивалентными волновыми векторами; в (96.36) $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$ не эквивалентны, но относятся к одной и той же звезде. Так как в этих случаях звезда уже содержит $-\boldsymbol{k}$, то козвезда совпадает со звездой. В (96.37) ни один из этих случаев не реализуется и козвезда содержит удвоенное число волновых векторов по сравнению со звездой за счет того, что отрицательные волновые векторы все тоже входят в звезду.

§ 97. Копредставления группы $\mathcal{G}$: козвезда класса III

Для козвезды со$^\star\boldsymbol{k}$ класса III из (96.37) нет таких унитарных поворотов, которые переводили бы $\boldsymbol{k}_\sigma$ в $-\boldsymbol{k}_\sigma$, где $\boldsymbol{k}_\sigma$ — произвольный вектор из $^\star\boldsymbol{k}$. Обозначим рассматриваемое копредставление группы $\mathcal{G}$ через

$$D^{(\text{co}\,^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \tag{97.1}$$

и предположим, что соответствующее подгруппе $\mathfrak{G}$ ограниченное представление является диагональным. Тогда из рассмотрения § 96 следует

$$D^{(\text{co}\,^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \downarrow D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \oplus D^{(^\star-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}. \tag{97.2}$$

Символ $\downarrow$ использован здесь для обозначения ограничения с группы $\mathcal{G}$ на ее подгруппу $\mathfrak{G}$: левая сторона соотношения (97.2) относится к группе $\mathcal{G}$, а правая — к группе $\mathfrak{G}$. Другими словами, можно сказать, что базисом для представления $D^{(\text{co}\,^\star\boldsymbol{k})\,(m)}$ служит векторное пространство $\Sigma^{(\text{co}\,^\star\boldsymbol{k})\,(m)}$, которое составлено в виде прямой суммы

$$\Sigma^{(\text{co}\,^\star\boldsymbol{k})\,(m)} = \Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \oplus K\Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} = \Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} \oplus \Sigma^{(^\star-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}. \tag{97.3}$$

Для получения (97.3) мы воспользовались соотношением

$$K\Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)} = \Sigma^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)*} = \Sigma^{(^\star-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}. \tag{97.4}$$

Очевидно, любой унитарный оператор $\{\varphi_l\,|\,\boldsymbol{\tau}_l\}$ в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ содержится также и в группе $\mathfrak{G}(-\boldsymbol{k})$, так что обе группы тождественны и поэтому имеют одинаковые неприводимые представления. Возьмем

$$D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)*} \doteqdot D^{(^\star-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}, \tag{97.5}$$

где индекс $\bar{m}$ соответствует индексу $-\boldsymbol{k}$. Так как $D^{(^\star\boldsymbol{k})\,(m)*}$ является неприводимым представлением $\mathfrak{G}$, то, следовательно, $D^{(\boldsymbol{k})\,(m)*}$ должно быть неприводимым представлением $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ при заданном $\boldsymbol{k}$. Однако $D^{(\boldsymbol{k})\,(m)*}$ преобразуется как $D^{(-\boldsymbol{k})\,(\bar{m})}$, т. е. как неприводимое представление в точке $-\boldsymbol{k}$. Отсюда сразу же следует неэквивалентность $D^{(\boldsymbol{k})\,(m)*}$ и $D^{(\boldsymbol{k})\,(m)}$. Здесь нет противоречия. Неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, соответствующее базису $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)^*}$, неэквивалентно представлению с базисом $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$, но оно эквивалентно $D^{(-\boldsymbol{k})(\bar{m})}$, неприводимому представлению группы $\mathfrak{G}(-\boldsymbol{k})$. Читатель может убедиться в этом самостоятельно.

Мы построим копредставления группы $\mathcal{G}$, исходя из представлений группы $\mathfrak{G}$. Напомним, что

$$\mathcal{G}=\mathfrak{G}+K\mathfrak{G}. \tag{97.6}$$

Копредставление с базисом (97.3) для унитарных элементов группы $\mathcal{G}$ равно

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\})=\begin{pmatrix} D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\}) & 0 \\ 0 & D^{({}^\star-\boldsymbol{k})(\bar{m})}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\}) \end{pmatrix}. \tag{97.7}$$

Для антиунитарных элементов оно имеет вид

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star\boldsymbol{k})(m)}(K\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\})=\begin{pmatrix} 0 & D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\}) \\ D^{({}^\star-\boldsymbol{k})(\bar{m})}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{\tau}\}) & 0 \end{pmatrix}. \tag{97.8}$$

Из неэквивалентности $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ и $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)^*}=D^{({}^\star-\boldsymbol{k})(\bar{m})}$, согласно лемме Шура, сразу видим, что (97.7) и (97.8) являются неприводимыми представлениями. Это доказательство не сложнее, чем в § 96.

Следовательно, для волновых векторов класса III операция обращения времени приводит к удвоению кратности существенного вырождения от значения $(l_m\cdot s)$ до значения $(2l_m\cdot s)$. Матрицы копредставлений (97.7) и (97.8) отражают полную пространственно-временную симметрию и их структура важна в последующем рассмотрении при получении правил отбора для многофононных процессов. Резюмируя, видим, что процедура получения индуцированных представлений из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ не зависит от оператора обращения времени K. Группа $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ — это группа чисто унитарных операторов, и сначала мы переходим от представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ к представлениям $D^{({}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}$ и только уже затем получаем представления $D^{(\mathrm{co}\,{}^\star\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathcal{G}$.

§ 98. Копредставления группы $\mathcal{G}$: козвезда класса II и общая теория

Прежде чем перейти к анализу этого наиболее важного случая, рассмотрим сначала структуру звезды. Для волновых векторов класса II из (96.36) звезда ${}^\star\boldsymbol{k}$ уже содержит вектор $-\boldsymbol{k}$, но $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$ неэквивалентны. Тогда унитарную пространственную группу можно представить в виде разложения

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \{\varphi_{\bar\sigma} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\} \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots, \tag{98.1}$$

где $\{\varphi_{\bar\sigma} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}$ — элемент смежного класса, поворотная часть которого удовлетворяет условию

$$\varphi_{\bar\sigma} \cdot \boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \tag{98.2}$$

Очевидно, число векторов в $^*\boldsymbol{k}$ в этом случае четно и число положительных волновых векторов равно $s/2$. Таким образом, $^*\boldsymbol{k} = {}^*-\boldsymbol{k}$. Для любого пространственного элемента $\{\varphi_{\bar\sigma'} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma'}\}$, переводящего $\boldsymbol{k}$ в волновой вектор, эквивалентный $-\boldsymbol{k}$, поворотную часть можно записать в виде

$$\varphi_{\bar\sigma'} = \varphi_{\bar\sigma} \cdot \varphi_l, \tag{98.3}$$

где φ_l — поворотная часть элемента группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда оказывается, что $(\varphi_{\bar\sigma}^{-1} \cdot \varphi_{\bar\sigma'})$ оставляет $\boldsymbol{k}$ инвариантным и должно содержаться в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Для пространственно-временной группы $\mathcal{G}$ тогда имеем

$$\mathcal{G} = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + K\{\varphi_{\bar\sigma} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\} \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots. \tag{98.4}$$

Отсюда мы можем определить пространственно-временную группу волнового вектора как

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{k}) \equiv \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + K\{\varphi_{\bar\sigma} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\} \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots. \tag{98.5}$$

Соотношение (98.5) определяет группу с антиунитарными элементами. Удобно определить неприводимые представления группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ и получить из них неприводимые копредставления группы $\mathcal{G}$. При этом следует отметить, что не все пространственные группы имеют волновые векторы гласса II: для этого нужно, чтобы была операция $\{\varphi_{\bar\sigma} \,|\, \boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}$, поворотная часть которой дает волновой вектор $\boldsymbol{k}$ (98.2).

Заметим, что при разложении $\mathcal{G}$ по элементам смежных классов группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ элементами смежных классов являются только унитарные операторы:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_\sigma \,|\, \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \mathcal{G}(\boldsymbol{k}) + \ldots + \{\varphi_s \,|\, \boldsymbol{\tau}_s\} \mathcal{G}(\boldsymbol{k}). \tag{98.6}$$

Соотношение (98.6) весьма полезно для построения индуцированных представлений группы $\mathcal{G}$ по представлениям $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$. Этот последний этап построения индуцированных представлений такой же как для обсуждавшегося чисто унитарного случая.

Рассмотрим теперь группу $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$. Найдем ее неприводимые представления и используем для этого обобщенную процедуру. Рассмотрим структуру выражения (98.5) [см. формулы (95.8) —

(95.35)], которое можно сокращенно записать в виде

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + a_0\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}), \tag{98.7}$$

где

$$a_0 \equiv K\{\varphi_{\bar{\sigma}} \mid \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}, \tag{98.8}$$

и a_0^2 — тоже элемент группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Пусть у нас имеется пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$, являющееся базисом неприводимых допустимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Рассмотрим пространство $a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}$. Из обычного свойства унитарного оператора

$$u\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \tag{98.9}$$

следует

$$u \cdot a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = a_0 \cdot a_0^{-1}u \cdot a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}. \tag{98.10}$$

Но сопряженный элемент

$$a_0^{-1}ua_0 \equiv u^{a_0} \tag{98.11}$$

тоже является элементом группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, и, следовательно, он унитарен. Тогда

$$u \cdot a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} \cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(u^{a_0}\right)^*. \tag{98.12}$$

Набор матриц, имеющих своим базисом

$$\Sigma^{(\text{co}\,\boldsymbol{k})(m)} \equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} + a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}, \tag{98.13}$$

для унитарного элемента u имеет вид

$$D(u) = \begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) & 0 \\ 0 & D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u^{a_0})^* \end{pmatrix}. \tag{98.14}$$

Если a — антиунитарный элемент

$$a = u \cdot a_0, \tag{98.15}$$

то

$$a\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = a_0a_0^{-1}ua_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = a_0\left(\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(u^{a_0}\right)\right) =$$
$$= a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} \cdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}a\right)^*, \tag{98.16}$$

или

$$a \cdot a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = u \cdot a_0a_0\Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(ua_0a_0) =$$
$$= \Sigma^{(\boldsymbol{k})(m)}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(aa_0). \tag{98.17}$$

При выводе (98.16), (98.17) мы, как и следовало, подставили для a выражение (98.15). Из (98.16), (98.17) мы получаем типичную матрицу для антиунитарного элемента группы $\mathcal{G}$

$$D(a) = \begin{pmatrix} 0 & D^{(\boldsymbol{k})(m)}(aa_0) \\ D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}a\right)^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{98.18}$$

Легко убедиться в том, что (98.14) и (98.18) удовлетворяют соотношениям (95.10)—(95.13) и, таким образом, являются копредставлениями. Теперь мы займемся свойствами неприводимости представлений (98.14) и (98.18). Здесь можно указать несколько случаев:

$$\text{Случай A}' \quad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u^{a_0})^*. \tag{98.19}$$

$$\text{Случай B} \quad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \not\doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u^{a_0})^*. \tag{98.20}$$

Имея в виду (98.19) и(98.20), убедимся в неприводимости этих представлений с помощью леммы Шура. Пусть M — эрмитова матрица с размерами $(2l_m \cdot s)$:

$$M = \begin{pmatrix} m_{11}\mathbf{\Pi} & m_{12}\mathbf{\Pi} \\ m_{12}^*\mathbf{\Pi} & m_{22}\mathbf{\Pi} \end{pmatrix}, \tag{98.21}$$

где

m_{11} и m_{22} — вещественные числа, $\mathbf{\Pi}$ — единичная матрица с размерами $(l_m \cdot s) \times (l_m \cdot s)$. (98.22)

Рассмотрим соотношения

$$MD(u) = D(u)M, \tag{98.23а}$$

$$MD(a) = D(a)M^* \tag{98.23б}$$

и установим, какая матрица M совместна с этими соотношениями.

В случае когда выполняется (98.20), сразу находим, что D неприводимо. Таким образом, в случае B, когда ограниченные представления неэквивалентны, индуцированные представления фактически неприводимы.

Теперь рассмотрим случай A′: здесь $D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)$ и $D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u^{a_0})^*$ являются эквивалентными представлениями группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда существует унитарная матрица β с размерами $(l_m \times l_m)$, такая, что

$$\beta^{-1}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)\beta = D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u^{a_0})^*. \tag{98.24}$$

Подставим

$$u = a_0^{-1}u_1 a_0 \tag{98.25}$$

в выражение (98.24) и возьмем комплексно сопряженное выражение. Тогда имеем

$$\beta^{-1*}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(a_0^{-1}u_1 a_0)^*\beta^* = D^{(\boldsymbol{k})(m)}(a_0^{-2}u_1 a_0^2). \tag{98.26}$$

Подставим (98.24) в левую сторону (98.26) и разложим правую сторону этого равенства, учитывая, что a_0^2 унитарно:

$$\beta^{-1*}\beta^{-1}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u_1)\beta\beta^* = D^{(\boldsymbol{k})(m)}(a_0^{-2})\,D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u_1)\,D^{(\boldsymbol{k})(m)}(a_0^2). \tag{98.27}$$

Это выражение можно переписать с учетом равенства

$$D^{(k)(m)}\left(a_0^{-2}\right)=D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)^{-1} \tag{98.28}$$

в виде

$$D^{(k)(m)}\left(u_1\right)\beta\beta^* D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)^{-1}=\beta\beta^* D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)^{-1} D^{(k)(m)}\left(u_1\right). \tag{98.29}$$

Но $D^{(k)(m)}$ неприводимо, и, согласно лемме Шура,

$$\beta\beta^* D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)^{-1}=c\mathbf{I}, \tag{98.30}$$

где $\mathbf{I}$ — единичная матрица, а c — число. Положим $u_1=a_0^2$ и подставим в (98.26); тогда получим

$$\beta^{-1*} D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)^* \beta^*=D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right). \tag{98.31}$$

Если (98.30) подставить в (98.31), то получим

$$\beta^{-1*}\left(\frac{\beta^*\beta}{c^*}\right)\beta^*=\frac{\beta\beta^*}{c}.$$

Следовательно,

$$c=c^*. \tag{98.32}$$

Так как все матрицы унитарны, из (98.30) имеем

$$|c|=1. \tag{98.33}$$

Тогда из (98.32) и (98.33) получим

$$c=\pm 1;$$

и для случая A′ имеются две возможности:

$$\text{Случай A} \quad D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)=+\beta\beta^* \tag{98.34}$$

и

$$\text{Случай C} \quad D^{(k)(m)}\left(a_0^2\right)=-\beta\beta^*. \tag{98.35}$$

Эти два случая позволяют различить два разных типа неприводимых представлений. Чтобы убедиться в этом, преобразуем (98.14) и (98.18). Определим матрицу V с размерами $(2l_m)\times\times(2l_m)$, являющуюся прямой суммой вида

$$V=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & \beta^{-1}\end{pmatrix}, \tag{98.36}$$

и выполним преобразования

$$\bar{D}(u)=V^{-1}D(u)V, \tag{98.37}$$

$$\bar{D}(a)=V^{-1}D(a)V^*, \tag{98.38}$$

Напомним, что β — унитарно, и затем, используя (98.15) и (98.24), получим

$$\bar{D}(u)=\begin{pmatrix}1&0\\0&\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}D^{(k)(m)}(u)&0\\0&D^{(k)(m)}(u^{a_0})^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&\beta^{-1}\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}D^{(k)(m)}(u)&0\\0&D^{(k)(m)}(u)\end{pmatrix}\qquad(98.39)$$

и

$$\bar{D}(a)=\begin{pmatrix}1&0\\0&\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&D^{(k)(m)}(u)\,D^{(k)(m)}(a_0^2)\\D^{(k)(m)}(u^{a_0})^*&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&\beta^{-1*}\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}0&D^{(k)(m)}(u)\,D^{(k)(m)}(a_0^2)\,\beta^{-1*}\\D^{(k)(m)}(u)\,\beta&0\end{pmatrix}.\qquad(98.40)$$

Подставляя (98.34) и (98.35) в (98.40), получаем

$$\bar{D}(a)=\begin{pmatrix}0&\pm D^{(k)(m)}(u)\,\beta\\D^{(k)(m)}(u)\,\beta&0\end{pmatrix},\qquad(98.41)$$

где, как и раньше, $a=ua_0$. Таким образом, (98.39) и (98.41) определяют копредставления для двух возможных случаев.

Чтобы установить неприводимость, применим лемму Шура и воспользуемся эрмитовой матрицей M из (98.21) и соотношениями (98.23), (98.24) для $\bar{D}$. Нас интересует только случай

$$M\bar{D}(a)=\bar{D}(a)\,M^*,\qquad(98.42)$$

который дает

$$m_{12}D^{(k)(m)}(u)\,\beta=\pm m_{12}D^{(k)(m)}(u)\,\beta\qquad(98.43)$$

и

$$m_{22}D^{(k)(m)}(u)\,\beta=m_{11}D^{(k)(m)}(u)\,\beta.\qquad(98.44)$$

Из (98.44) следует, что в любом из случаев

$$m_{11}=m_{22}=m_1.\qquad(98.45)$$

Но из (98.43) следуют две возможности. Если взять отрицательный знак, то, так как $D^{(k)(m)}$ и β отличны от нуля, получим

$$\text{Случай C}\quad m_{12}=m_{21}=0.\qquad(98.46)$$

Если в (98.43) взять положительный знак, то получим

$$\text{Случай A}\quad m_{12}=m_{21}=m_2\neq 0,\qquad(98.47)$$

т. е. в этом случае имеем окончательно

$$\text{Случай A}\quad M=\begin{pmatrix}m_1\mathbf{I}&m_2\mathbf{I}\\m_2\mathbf{I}&m_1\mathbf{I}\end{pmatrix}\qquad(98.48)$$

и, следовательно,

$$\bar{D}(a) = D^{(k)(m)}(u)\,\beta \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{98.49}$$

$$\text{Случай C} \quad M = m\begin{pmatrix} \Pi & 0 \\ 0 & \Pi \end{pmatrix} \tag{98.50}$$

и, следовательно,

$$\bar{D}(a) = D^{(k)(m)}(u)\,\beta \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{98.51}$$

Ясно, что в случае C копредставление $\bar{D}$ является неприводимым, так как единственная матрица, которая «коммутирует» с $\bar{D}$ [в обобщенном смысле (98.23), (98.24)], — это константа.

В случае A копредставление $\bar{D}$ приводимо. Обобщая вывод (96.28)—(96.31), можно выполнить приведение с помощью вещественной ортогональной матрицы соответствующей размерности

$$\mathscr{S} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \Pi & \Pi \\ -\Pi & \Pi \end{pmatrix}, \tag{98.52}$$

где Π — единичная матрица нужной размерности. В результате приведения получим

$$\bar{\bar{D}}(a) = \mathscr{S}^{-1}\bar{D}(a)\,\mathscr{S} = \begin{pmatrix} D^{(k)(m)}(u)\,\beta & 0 \\ 0 & -D^{(k)(m)}(u)\,\beta \end{pmatrix}. \tag{98.53}$$

При выполнении процедуры приведения от (96.30), (96.31) к (96.32), (96.33) последний шаг от (98.39) к (98.53) можно выполнить преобразованием к эквивалентному представлению. Воспользуемся снова матрицей

$$\bar{V} = \begin{pmatrix} \Pi & 0 \\ 0 & i\Pi \end{pmatrix} \tag{98.54}$$

и найдем

$$\bar{V}^{-1}\bar{\bar{D}}(u)\,\bar{V}, \tag{98.55}$$

$$V^{-1}\bar{\bar{D}}(a)\,\bar{V}^{*} \tag{98.56}$$

аналогично (96.32) и (96.33). В этом случае приведение дает неприводимые (допустимые) копредставления группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$:

$$D^{(\text{co}\,k)(m)}(u) = D^{(k)(m)}(u), \tag{98.57}$$

$$D^{(\text{co}\,k)(m)}(a) = D^{(k)(m)}(aa_0^{-1}\beta). \tag{98.58}$$

Предположим теперь, что имеется допустимое копредставление D группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$. Это копредставление, согласно только что выполненному исследованию, относится к одному из трех случаев:

$$\text{Случай A} \quad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}ua_0\right)^*$$

и

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^2\right) = \beta\beta^*,$$

где

$$\beta^{-1}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)\,\beta = D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}ua\right). \tag{98.59}$$

Здесь $D(u)$ определены в (98.57), а $D(a)$ — в (98.58).

$$\text{Случай B} \quad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \not\doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}ua_0\right)^*. \tag{98.60}$$

Здесь $D(u)$ определены в (98.14), а $D(a)$ — в (98.18).

$$\text{Случай C} \quad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}ua_0\right)^*$$

и

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^2\right) = -\beta\beta^*, \tag{98.61}$$

где

$$\beta^{-1}D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)\,\beta = D^{(\boldsymbol{k})(m)}\left(a_0^{-1}ua_0\right)^*.$$

Здесь $D(u)$ определены в (98.39), а $D(a)$ — в (98.51).

Аналогично тому как мы рассматривали обычные представления группы $\mathfrak{G}$, полученные из представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, найдем копредставления группы $\mathcal{G}$ из копредставлений группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$. Разложение $\mathcal{G}$ по $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ дано в (98.6). Заметим снова, что все элементы смежных классов в (98.6) унитарны. Действительно, они были выбраны в соответствии с элементами смежных классов, которые возникли бы для того же значения $\boldsymbol{k}$ в разложении $\mathfrak{G}$ по $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Поэтому мы можем воспользоваться всей аргументацией, приведшей к (36.7) и (36.8). Основную роль в приведении играло определение (36.6):

$$P_{\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}}\psi_a^{(\boldsymbol{k})(m)} = \psi_a^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)}. \tag{98.62}$$

При наличии антиунитарного оператора также нужно выбрать некоторый базис. Рассмотрим соотношение

$$P_{\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}}a_0\psi_a^{(\boldsymbol{k})(m)} = a_0^\sigma\cdot\psi^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)}, \tag{98.63}$$

где

$$a_0^\sigma \equiv P_{\{\varphi_{\sigma^\tau}|\sigma\}}a_0P^{-1}_{\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}} \tag{98.64}$$

и $\psi_a^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)}$ определено в (98.62). Если мы возьмем в качестве базиса для заданного $\boldsymbol{k}_\sigma$

$$\Sigma^{(\text{co}\,\boldsymbol{k}_\sigma)(m)} \equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k}_\sigma)(m)} \oplus a_0^\sigma\Sigma^{(\boldsymbol{k}_{\bar\sigma})(m)}, \tag{98.65}$$

где

$$\Sigma^{(k_\sigma)(m)} = \left\{\psi_1^{(k_\sigma)(m)}, \ldots, \psi_{l_m}^{(k_\sigma)(m)}\right\}, \tag{98.66}$$

то мы можем легко продвинуться дальше. Мы представим полную матрицу копредставления $D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}$ в блочном виде, соответствующем разложению по смежным классам (98.6), обозначив эти блоки

$$D_{\sigma\tau}^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}, \tag{98.67}$$

где , как обычно, индексы $\sigma\tau$ берутся в соответствии с индексами элементов смежных классов в (98.6). Как всегда, блочная матрица показывает, как пространство $\Sigma^{(\mathrm{co}\,k_\tau)(m)}$ переводится в $\Sigma^{(\mathrm{co}\,k_\sigma)(m)}$ некоторым оператором, являющимся аргументом матрицы. Теперь будем следовать аргументации, использованной при выводе (36.7), (36.8). Отличные от нуля блочные матрицы в первой строке или в первом столбце тогда сразу записываются в виде

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\})_{\sigma 1} = E, \tag{98.68}$$

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\}^{-1}\right)_{1\sigma} = E, \tag{98.69}$$

где E — единичная матрица с размерами либо l_m, либо $2l_m$. Заметим, что выражение, комплексно сопряженное (98.68) и (98.69), тоже является единичной матрицей.

Возьмем теперь элемент (1,1) блочной матрицы в $D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}$ в виде

$$D_{11}^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)} \equiv D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}. \tag{98.70}$$

Далее определим матрицу с точкой

$$\dot{D}^{(\mathrm{co}\,k)(m)}(X) = \begin{cases} 0, & \text{если } X \text{ не принадлежит } \mathcal{G}(\boldsymbol{k}), \\ D^{(\mathrm{co}\,k)(m)}, & \text{если } X \text{ содержится в } \mathcal{G}(\boldsymbol{k}). \end{cases} \tag{98.71}$$

Пусть $\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}$ — произвольный унитарный элемент группы $\mathcal{G}$. Рассмотрим блочную матрицу копредставления с индексами (σ, τ)

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot \{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\tau \mid \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1}\right)_{\sigma\tau} = \dot{D}^{(\mathrm{co}\,k)(m)}(\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}). \tag{98.72}$$

Возьмем теперь произвольный антиунитарный элемент $K\,\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}$. Тогда блочная матрица с индексами (σ, τ) полного копредставления имеет вид

$$D^{(\mathrm{co}\,{}^\star k)(m)}\left(\{\varphi_\sigma \mid \boldsymbol{\tau}_\sigma\} \cdot K\,\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\} \cdot \{\varphi_\tau \mid \boldsymbol{\tau}_\tau\}^{-1}\right)_{\sigma\tau} = \\ = \dot{D}^{(\mathrm{co}\,k)(m)}(K\,\{\varphi_p \mid \boldsymbol{\tau}_p\}). \tag{98.73}$$

Оба соотношения (98.70) и (98.71) получаются при рассмотрении соответствующих элементов матриц с помощью (98.68) и (98.69).

Повторяя это же рассуждение в обратном порядке, получим, как и при выводе (36.10), для произвольного унитарного элемента $\{\varphi_p|\tau_p\}$ и произвольного антиунитарного элемента $K\ \{\varphi_p|\tau_p\}$

$$D^{(\mathrm{co}\ {}^*k)\,(m)}(\{\varphi_p\,|\,\tau_p\})_{\sigma\tau} = \\ = \dot{D}^{(\mathrm{co}\ k)\,(m)}\left(\{\varphi_\sigma\,|\,\tau_\sigma\}^{-1}\cdot\{\varphi_p\,|\,\tau_p\}\,\{\varphi_\tau\,|\,\tau_\tau\}\right) \qquad (98.74)$$

и

$$D^{(\mathrm{co}\ {}^*k)\,(m)}(K\,\{\varphi_p\,|\,\tau_p\})_{\sigma\tau} = \\ = \dot{D}^{(\mathrm{co}\ k)\,(m)}\left(\{\varphi_\sigma\,|\,\tau_\sigma\}^{-1}\cdot K\,\{\varphi_p\,|\,\tau_p\}\cdot\{\varphi_\tau\,|\,\tau_\tau\}\right). \qquad (98.75)$$

Выражения (98.74) и (98.75) дают решение поставленной задачи. Их простой вид является прямым следствием разложения по смежным классам (98.6). Если бы использовалось другое разложение, то мы получили бы эквивалентное индуцированное представление. В частности, вместо s смежных классов в (98.6) разложение по смежным классам $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ содержало бы $2s$ смежных классов, содержащих антиунитарные элементы смежных классов. Тогда было бы возможно прямое определение индуцированных представлений группы $\mathcal{G}$ по представлениям $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ вместо использованной нами двухступенчатой процедуры, ведущей от $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ к $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ и затем уже к $\mathcal{G}$. Ясно, что все способы рассмотрения дают один и тот же результат.

§ 99. Копредставления группы $\mathcal{G}$: козвезда класса I

Волновыми векторами класса I, согласно (96.35), являются векторы

$$\boldsymbol{k} = \pi \boldsymbol{B}_H. \qquad (99.1)$$

Для таких волновых векторов все пространственные операторы, например $\{\varphi_l|\tau_l\}$ и $\{\varphi_\sigma|\tau_\sigma\}$, содержатся в группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. В этом случае пространственно-временная группа волнового вектора имеет вид

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k}) + K\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}). \qquad (99.2)$$

Следовательно, в этом случае антиунитарный элемент смежного класса a_0 является операцией чистого обращения времени K. Следствие обращения времени для этого случая легко получить по аналогии с (94.11) и (94.12).

Возвратимся к случаю А. Если

$$D^{(\boldsymbol{k})\,(m)}(u) = D^{(\boldsymbol{k})\,(m)}(u)^*, \qquad (99.3)$$

то, очевидно, $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ является вещественным представлением. Тогда из (98.34) и равенства $a_0 = K$ имеем

$$\beta\beta^* = D^{(\boldsymbol{k})(m)}(E), \tag{99.4}$$

и неприводимое представление в этом случае является совокупностью матриц

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u), \qquad D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)\,\beta \equiv D^{(\boldsymbol{k})(m)}(a). \tag{99.5}$$

Из (99.4) и из того, что β унитарно, имеем

$$\beta = \tilde{\beta}. \tag{99.6}$$

Таким образом, в этом случае β является симметричной унитарной матрицей.

В случае В мы воспользуемся обсуждением § 98, так что матрицами копредставлений будут (98.14) и (98.18).

В случае С эквивалентность представлений

$$D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u) \doteqdot D^{(\boldsymbol{k})(m)}(u)^* \tag{99.7}$$

не означает, что $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ вещественно, а означает лишь, что оно имеет вещественный характер (след). Тогда матрицы неприводимого представления аналогичны (98.39) и (98.51). В этом случае

$$\beta\beta^* = -D^{(\boldsymbol{k})(m)}(E) \tag{99.8}$$

и

$$\beta = -\tilde{\beta}, \tag{99.9}$$

так что матрица β антисимметрична. Так как β также унитарна (т. е. имеет определитель, равный единице), результат (99.2) показывает, что β должна быть матрицей с четной размерностью. Это очень важный случай, так как звезда класса I соответствует границам зоны Бриллюэна и поэтому часто рассматривается в конкретных задачах.

Получение индуцированных копредставлений $D^{(\mathrm{co}\,{}^*\boldsymbol{k})(m)}$ по допустимым неприводимым копредставлениям $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ выполняется аналогично (98.74) и (98.75).

§ 100. Допустимые неприводимые представления группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ как проективные представления

Еще один аспект неприводимых представлений группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ можно увидеть, если рассмотреть их как проективные представления некоторой точечной группы, содержащей антиунитарный оператор [74]. Напомним, что в (41.11) мы определили кристаллическую точечную группу в точке $\boldsymbol{k}$ как факторгруппу

$$\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T} = \mathfrak{P}(\boldsymbol{k}), \tag{100.1}$$

которая изоморфна некоторой кристаллической точечной группе

$$\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}) \equiv \varepsilon, \ldots, \varphi_{l_\lambda}, \ldots, \varphi_{l_k}. \tag{100.2}$$

В случае волновых векторов, относящихся к классам I и II, для которых $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$ либо эквивалентны, либо относятся к одной и той же звезде, представляется естественным расширить $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k})$ за счет добавления некоторых антиунитарных элементов. Рассмотрим теперь расширенную группу

$$\mathscr{P}(\boldsymbol{k}) \equiv \varepsilon, \varphi_{l_2}, \ldots, \varphi_{l_k}, K\varphi_{\bar{\sigma}}, \ldots, K\varphi_{\bar{\sigma}}\varphi_{l_\lambda}, \ldots, K\varphi_{\bar{\sigma}}\varphi_{l_k}, \tag{100.3}$$

или пространственно-временную точечную группу

$$\mathscr{P}(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{P}(\boldsymbol{k}) + K\varphi_{\bar{\sigma}}\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}). \tag{100.4}$$

Таким образом, группа $\mathscr{P}(\boldsymbol{k})$ является расширенной группой, в которую включены как унитарные, так и антиунитарные элементы. Очевидно,

$$\mathscr{P}(\boldsymbol{k}) = \mathscr{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}. \tag{100.5}$$

Аналогично § 41 каждый элемент группы $\mathscr{P}(\boldsymbol{k})$ соответствует полному смежному классу в $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$:

$$\begin{gathered} \varepsilon \leftrightarrow \mathfrak{T}; \quad \varphi_{l_\nu} \leftrightarrow \{\varphi_{l_\nu} | \boldsymbol{\tau}_{l_\nu}\}\mathfrak{T}, \ldots; \\ K\varphi_{\bar{\sigma}} \leftrightarrow K\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\}\mathfrak{T}, \ldots . \end{gathered} \tag{100.6}$$

Группа $\mathscr{P}(\boldsymbol{k})$ содержит все поворотные элементы, которые оставляют $\boldsymbol{k}$ инвариантным, плюс такие произведения оператора обращения времени K на повороты, которые переводят $\boldsymbol{k}$ в $-\boldsymbol{k} + 2\pi\boldsymbol{B}_H$.

Рассмотрим теперь закон умножения для тех матриц копредставлений в $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$, которые устанавливают соответствие элементов смежных классов группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$ и элементов группы $\mathfrak{T}$. Имеется четыре типа правил для построения парного произведения унитарного и антиунитарного элементов [см. (41.2)]:

$$\{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\} \cdot \{\varphi_{l_\mu} | \boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}\} \cdot \{\varphi_{l_{\lambda,\mu}} | \boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda,\mu}}\}, \tag{100.7}$$

$$\{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\} \cdot K\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\bar{\sigma}}}\} \cdot K\{\varphi_{l_{\lambda,\bar{\sigma}}} | \boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda,\bar{\sigma}}}\}, \tag{100.8}$$

$$K\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \cdot \{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\lambda}}\} \cdot K\{\varphi_{\bar{\sigma},\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma},\lambda}\}, \tag{100.9}$$

$$K\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \cdot K\{\varphi_{\bar{\sigma}}\boldsymbol{\tau}_{\bar{\tau}}\} = \{\varepsilon | \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\bar{\tau}}}\} \cdot \{\varphi_{\bar{\sigma},\bar{\tau}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma},\bar{\tau}}\}. \tag{100.10}$$

В (100.10) мы определили второй антиунитарный элемент смежного класса как $K\{\varphi_{\bar{\tau}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\tau}}\}$, который, например, равен [см. (100.3)]

$$K\{\varphi_{\bar{\tau}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\tau}}\} \equiv K\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \boldsymbol{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \cdot \{\varphi_{l_\lambda} | \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}. \tag{100.11}$$

Сейчас нам это несущественно. Повторим теперь рассуждение, ведущее от (41.2) к (41.9) при рассмотрении каждого из случаев (100.7) — (100.11). В этом рассуждении надо учесть то, что мы рассматриваем копредставления группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$, и поэтому в тех местах, где в произведении сомножителем стоит K, нужно брать в соответствующем месте комплексное сопряжение.

Теперь в $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}$ мы имеем для (100.7) по аналогии с (41.7)

$$\begin{aligned} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}&\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}\right)=\\ &=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{l_{\lambda,\mu}}|\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda,\mu}}\}\right)=\\ &=D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)\cdot D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{l_\mu}|\boldsymbol{\tau}_{l_\mu}\}\right). \end{aligned} \tag{100.12}$$

Для (100.8) получим

$$\begin{aligned} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}&\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\cdot K\{\varphi_{l_{\bar\sigma}}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\right)=\\ &=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar\sigma,\lambda}}\cdot D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\cdot\{\varphi_{l_{\lambda,\bar\sigma}}\boldsymbol{\tau}_{l_{\lambda,\bar\sigma}}\}\right)=\\ &=D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)\cdot D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\cdot\{\varphi_{\bar\sigma}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\right). \end{aligned} \tag{100.13}$$

Далее, для (100.9)

$$\begin{aligned} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}&\left(K\{\varphi_{\bar\sigma}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)=\\ &=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar\sigma,\lambda}}D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\{\varphi_{\bar\sigma\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma\lambda}\}\right)=\\ &=D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\{\varphi_{\bar\sigma}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\right)\cdot D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{l_\lambda}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma\lambda}\}\right)^*. \end{aligned} \tag{100.14}$$

Наконец, для (100.10)

$$\begin{aligned} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}&\left(K\{\varphi_{\bar\sigma}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\cdot K\{\varphi_{\bar\tau}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\tau}\}\right)=\\ &=\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar\sigma,\bar\tau}}D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(\{\varphi_{\bar\sigma,\bar\tau}\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma,\bar\tau}\}\right)=\\ &=D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\{\varphi_{\bar\sigma}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\sigma}\}\right)\cdot D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(m)}\left(K\{\varphi_{\bar\tau}|\boldsymbol{\tau}_{\bar\tau}\}\right)^*. \end{aligned} \tag{100.15}$$

Ясно, что и здесь мы имеем дело с проективным отображением. Систему факторов для этих случаев определим так:

$$r(\lambda,\mu)\equiv\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\mu}}, \tag{100.16}$$

$$r(\lambda,\bar\sigma)\equiv\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\lambda,\bar\sigma}}, \tag{100.17}$$

$$r(\bar\sigma,\lambda)\equiv\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar\sigma,\lambda}}, \tag{100.18}$$

$$r(\bar\sigma,\bar\tau)\equiv\exp-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar\sigma,\bar\tau}}. \tag{100.19}$$

Напомним теперь свойство операторов поворота с чертой: они преобразуют $\boldsymbol{k}$ в вектор, эквивалентный $-\boldsymbol{k}$. Произведение K на поворот с чертой относится к пространственно-временной точечной группе в точке $\boldsymbol{k}$. Повторим теперь соображения ассоциативности, которые привели нас к (41.18) для чисто унитарных операторов. Тогда мы найдем те требования, которыми определяется система факторов в проективных представлениях:

$$r(\lambda,\ x_1)\,r(\lambda x_1,\ x_2) = r(\lambda,\ x_1 x_2)\,r(x_1,\ x_2) \tag{100.20}$$

и

$$r(\bar{\sigma},\ x_1)\,r(\bar{\sigma} x_1,\ x_2) = r(\bar{\sigma},\ x_1 x_2)\,r^*(x_1,\ x_2); \tag{100.21}$$

в (100.20) и в (100.21) x_1 и x_2 обозначают произвольный элемент (унитарный или антиунитарный), λ является элементом типа φ_λ, а $\bar{\sigma}$ соответствует *антиунитарному* элементу типа $K\varphi_{\bar{\sigma}}$. Мы должны убедиться, что выбор (100.16)—(100.19) не противоречит (100.20) и (100.21) аналогично рассмотрению в (41.19)—(41.23). Правильность (100.20) следует из (41.23); чтобы проиллюстрировать (100.21), рассмотрим случай, когда x_1 и x_2 являются индексами μ и ν.

По аналогии с (41.6) напишем

$$\left\{\varepsilon \mid \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma}\mu,\nu}}\right\} = \left\{\varepsilon \mid \varphi_{\bar{\sigma}} \cdot \boldsymbol{R}_{L\mu,\nu} + \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu\nu}}\right\}. \tag{100.22}$$

Тогда

$$\begin{aligned} r(\bar{\sigma},\ \mu)\,r(\bar{\sigma}\mu,\ \nu) &= \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\left(\boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu\nu}}\right) = \\ &= \exp - i\boldsymbol{k}\cdot\left(\varphi_{\bar{\sigma}}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\mu,\nu}} + \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu\nu}}\right). \end{aligned} \tag{100.23}$$

Но

$$\boldsymbol{k}\cdot\varphi_{\bar{\sigma}} = \varphi_{\bar{\sigma}}^{-1}\cdot\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + 2\pi\boldsymbol{B}_H. \tag{100.24}$$

Поэтому (100.23) принимает вид

$$\left(\exp - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar{\sigma},\mu\nu}}\right)\left(\exp i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{L\mu,\nu}\right), \tag{100.25}$$

что в обозначениях (100.16) — (100.19) дает

$$r(\bar{\sigma},\ \mu\nu)\,r^*(\mu,\ \nu), \tag{100.26}$$

что и требовалось доказать.

Перечислим результаты этого параграфа. Допустимые неприводимые представления группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ являются неприводимыми проективными представлениями расширенной пространственно-временной группы $\mathcal{P}(\boldsymbol{k})$, содержащей антиунитарные элементы. Пусть задана совокупность матриц, по одной для каждого элемента $\mathcal{P}(\boldsymbol{k})$:

$$D(\varepsilon),\ \ldots,\ D\left(\varphi_{l_\lambda}\right),\ \ldots,\ D\left(K\varphi_{\bar{\sigma}}\right),\ \ldots,\ D\left(K\varphi_{\bar{\sigma}}\varphi_{l_k}\right) \tag{100.27}$$

и система факторов

$$r(1,\ 1),\ \ldots,\ r(\lambda,\ \mu),\ \ldots,\ r(\bar{\sigma},\ \lambda),\ \ldots,\ r(\bar{\sigma},\ \tau), \tag{100.28}$$

таких, что выполняются соотношения

$$D(\varphi_\lambda) D(\varphi_\mu) = r(\lambda, \mu) D(\varphi_{\lambda\mu}), \tag{100.29}$$

$$D(K\varphi_{\bar\sigma}) D(\varphi_\mu)^* = r(\bar\sigma, \mu) D(K\varphi_{\bar\sigma\mu}), \tag{100.30}$$

$$D(\varphi_\lambda) D(K\varphi_{\bar\sigma}) = r(\lambda, \bar\sigma) D(K\varphi_{\lambda, \bar\sigma}), \tag{100.31}$$

$$D(K\varphi_{\bar\sigma}) D(K\varphi_{\bar\tau})^* = r(\bar\sigma, \bar\tau) D(\varphi_{\bar\sigma, \bar\tau}). \tag{100.32}$$

Система факторов задана в (100.6)—(100.19) и удовлетворяет соотношениям (100.20) и (100.21). Тогда эквивалентность совокупности матриц D и копредставлений $D^{(\mathrm{co}\,k)(m)}$ доказана:

$$D = D^{(\mathrm{co}\,k)(m)}. \tag{100.33}$$

Анализ допустимых неприводимых проективных копредставлений расширенных кристаллических точечных групп был выполнен несколькими авторами [74—76]. Некоторые из этих авторов пользовались несколько отличающейся системой факторов (p-эквивалентных). Можно думать, что в дальнейшем развитие исследований в этой области покажет единый характер полученных результатов.

§ 101. Комплексные нормальные координаты как базис неприводимых представлений группы $\mathcal{G}$

Анализ, выполненный в § 87—100, дает возможность завершить рассмотрение § 86. По определению физическим неприводимым представлением является неприводимое копредставление. В (86.28) и (86.30) были получены правила преобразования комплексных нормальных координат (фурье-компонент):

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix} \equiv Q_{\{\varphi_{l_\lambda}\}}\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix} = \sum_{\nu'} D^{(k)(j)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}\right)_{\nu'\nu} Q\begin{pmatrix} k \\ j_{\nu'} \end{pmatrix}. \tag{101.1}$$

Так как $D^{(k)(j)}$ неприводимо, образованное совокупностью нормальных координат пространство

$$\Sigma^{(k)(j)} \equiv \left\{Q\begin{pmatrix} k \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix} k \\ i_{l_j} \end{pmatrix}\right\} \tag{101.2}$$

является инвариантным и неприводимым по отношению к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Инвариантное пространство, в котором существуют неприводимые представления $D^{(\mathrm{co}\,k)(j)}$, оказывается разным в зависимости от того, к которому из классов относятся волновые векторы и какой случай неприводимых представлений рассматривается.

Простейшим является случай волновых векторов класса III, определенный в (94.4). В этом случае учет обращения времени удваивает «глобальное» вырождение. Поэтому сначала построим

$$\Sigma^{({}^{\star}\boldsymbol{k})\,(j)} \equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \oplus \ldots \oplus P_{\{\varphi_\sigma \mid \tau_\sigma\}}\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \oplus \ldots \oplus P_{\{\varphi_s \mid \tau_s\}}\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)}, \qquad (101.3)$$

а затем построим

$$\Sigma^{({}^{\star}\boldsymbol{k})\,(j)^*} = K\Sigma^{({}^{\star}\boldsymbol{k})\,(j)} = \Sigma^{({}^{\star}-\boldsymbol{k})\,(\bar{j})}. \qquad (101.4)$$

Объединенное пространство является базисом неприводимого представления группы $\mathcal{G}$:

$$\Sigma^{(\mathrm{co}\;{}^{\star}\boldsymbol{k})\,(j)} = \Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \oplus K\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \oplus \ldots$$
$$\ldots \oplus P_{\{\varphi_s \mid \tau_s\}}\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \oplus \ldots \oplus KP_{\{\varphi_s \mid \tau_s\}}\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)}. \qquad (101.5)$$

Короче говоря, комплексно сопряженная координата из совокупности (101.2) оказывается вырожденной с несопряженной, причем они линейно-независимы.

В случае линейной независимости $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ и $Q^*\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ часто вводят вещественные нормальные координаты первого рода [см. [18], уравнение (38.33)]. Это преобразование определяет две вещественные величины следующим образом:

$$q_1\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} + Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}\right), \qquad (101.6)$$

$$q_2\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} - Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}\right). \qquad (101.7)$$

В этом случае мы должны также разделить «положительные и отрицательные» волновые векторы обратного пространства, построив для этого плоскость в обратном пространстве [18]. Преобразование от $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$, $Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ к $q_1\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$, $q_2\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$ унитарно, и, следовательно, оно дает эквивалентное копредставление. Но это копредставление не будет иметь простой, полностью приведенной формы (94.7), соответствующей ограниченному представлению, выделенному унитарной подгруппой $\mathfrak{G}$, так как представления, соответствующие $\boldsymbol{k}$ и $-\boldsymbol{k}$, здесь перемешаны.

Для получения вещественных нормальных координат второго рода часто используется еще одна методика [см. [18], уравнение (38.38)], требующая канонического преобразования. Мы не будем обсуждать это преобразование здесь, так как, по мнению автора, некоторые тонкие вопросы, касающиеся соотношений между вещественными координатами и теорией копредставлений, не нашли еще удовлетворительного решения. Обсуждение этого вопроса можно найти в работе [77] и в § 114 нашей книги.

Суммируя результаты для случая звезды класса III, мы приходим к выводу, что простое объединение двух пространств типа (101.5) образует базис для физического неприводимого представления $D^{(\text{co}\,{}^\star\boldsymbol{k})\,(j)}$ группы $\mathcal{G}$. Вырожденные собственные значения, или квадраты частот, связанные с векторами пространства (101.5), равны

$$\begin{gathered}\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j_1),\ \ldots,\ \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j_\lambda),\ \ldots,\ \omega^2(\boldsymbol{k}_s\,|\,j_{l_j}),\\ \omega^2(-\boldsymbol{k}\,|\,\bar{j}_1),\ \ldots,\ \omega^2(-\boldsymbol{k}\,|\,\bar{j}_\lambda),\ \ldots,\ \omega^2(-\boldsymbol{k}_s\,|\,\bar{j}_{l_j}).\end{gathered} \tag{101.8}$$

Полное число этих вырожденных собственных значений равно $s(l_j+l_{\bar{j}})=2l_js$. Индекс $\bar{j}$ следует определить сопоставлением с таблицами характеров или выполняя явно преобразование нормальных координат аналогично (94.26). Требуя от собственных векторов или нормальных координат, чтобы они были вещественными в соответствии с преобразованиями (101.6) и (101.7), мы можем нарушить свойства преобразований под действием пространственных операторов группы $\mathcal{G}$.

Для волновых векторов класса II, определенных в (94.3) (см. также § 98), положение существенно отличается. Мы должны обсудить три возможности — случаи A, B, C аналогично (98.59)—(98.61). Для случая A базис

$$\Sigma^{(\text{co}\,\boldsymbol{k})\,(j)}\equiv\left\{Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix},\ \ldots,\ Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\lambda\end{pmatrix},\ \ldots,\ Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_{l_j}\end{pmatrix}\right\}=\Sigma^{(\boldsymbol{k})\,(j)} \tag{101.9}$$

тождествен (101.2). Дополнительного вырождения, обусловленного симметрией по отношению к обращению времени, нет ни в «глобальном», ни в «локальном» смысле этого слова.

В случае B имеется дополнительное локальное вырождение. Неприводимые копредставления группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ имеют своим базисом объединенное пространство аналогично (98.13). Из (101.1) и (95.62) можно получить

$$P_{\{\varphi_{\bar{\sigma}}\,|\,\tau_{\bar{\sigma}}\}}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}\equiv Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_{\bar{\sigma}}\\ j_\nu\end{pmatrix}=Q\begin{pmatrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix} \tag{101.10}$$

и

$$KP_{\{\varphi_{\bar{\sigma}}\,|\,\tau_{\bar{\sigma}}\}}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}=Q\begin{pmatrix}-\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}^{*}. \tag{101.11}$$

Следовательно, при этом для $a_0 \equiv KP_{\{\varphi_\delta \mid \tau_\delta\}}$

$$\Sigma^{(\text{co}\, \boldsymbol{k})\,(l)} = \left\{Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}\right\} + \\ + \left\{Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}^*, \ldots, Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}^*\right\} \tag{101.12}$$

и реализуется случай II B (98.60) для неприводимых копредставлений группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$.

В случае волновых векторов типа II C (98.61) мы можем снова воспользоваться векторным пространством (101.12).

Тогда в обоих случаях II B и II C получаемое при этом представление унитарной группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ будет аналогично (98.14) и (98.18), а не (98.39) и (98.51). Чтобы получить представление $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ в обычной форме (98.39), (98.51) для случая II C, нужно найти матрицу β из (98.24). Тогда с найденной из (98.24) унитарной матрицей β пространство

$$\Sigma^{(\text{co}\, \boldsymbol{k})\,(l)} = \left\{Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}\right\} + \\ + \left\{Q'\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}^*, \ldots, Q'\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}^*\right\}, \tag{101.13}$$

где

$$Q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix} = \sum_\nu \beta_{\nu\lambda} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}, \tag{101.14}$$

дает в двух рассматриваемых случаях представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ в форме (98.39).

По (101.9), (101.12), (101.13), используя процедуру индуцирования, можно построить полное векторное пространство $\Sigma^{(\text{co}\, {}^*\boldsymbol{k})\,(l)}$. Это полное пространство будет базисом для $D^{(\text{co}\, {}^*\boldsymbol{k})\,(l)}$.

В случае I A, B и C применима та же аргументация, но теперь антиунитарный элемент равен $a_0 = K$. При этом (101.12) имеет вид

$$\Sigma^{(\text{co}\, \boldsymbol{k})\,(l)} = \left\{Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}\right\} + \left\{Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}^*, \ldots, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_{l_l} \end{pmatrix}^*\right\}. \tag{101.15}$$

Здесь можно воспользоваться теми же рассуждениями, что и при выводе (101.13) и (101.14), но теперь матрица β уже известна и ее свойства определены соотношениями (99.6) и (99.8). Ее можно найти из (98.24) с учетом (99.6) и (99.8).

§ 102. Собственные векторы матрицы $D(k)$ как базис неприводимых представлений группы $\mathscr{G}$

После рассмотрения § 87—100 вернемся к § 83 и обсудим в рамках теории копредставлений свойства преобразования собственных векторов $e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ из (83.4). Чтобы получить (83.5), мы пользовались полнотой набора вырожденных собственных векторов динамической матрицы $[D(k)]$ при фиксированном k. Эта полнота определена только по отношению к пространственной симметрии, т. е. по отношению к унитарным операторам группы $\mathfrak{G}(k)$.

Рассматриваемая пространственно-временная группа $\mathscr{G}$, являющаяся полной группой симметрии для нашей задачи, имеет неприводимые копредставления. В частности, произвольный собственный вектор при фиксированном k, относящийся к собственному значению $\omega^2(k|j_\mu)$, должен входить в набор вырожденных собственных векторов матрицы $D^{(\mathrm{co}\,k)(j)}$. Поэтому (83.5) следует заменить на

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}e^{\mathrm{co}}\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\sum_{\nu}D^{(\mathrm{co}\,k)(j)}(\{\varphi_{l_\lambda}\tau_{l_\lambda}\})_{\nu\mu}\,e^{\mathrm{co}}\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar{\nu}}\end{matrix}\right.\right). \qquad (102.1)$$

В сумму по ν в (102.1) нужно включить все собственные векторы, входящие в базисное пространство $\Sigma^{(\mathrm{co}\,k)(j)}$ для неприводимых копредставлений. Эти собственные векторы в точности соответствуют различным линейным векторным пространствам, обсуждавшимся в § 101, но с заменой базиса из $e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ на базис из $Q\begin{pmatrix}k\\ j_\nu\end{pmatrix}$.

Соотношение (102.1) имеет существенные практические применения. Часто в результате численных расчетов получается собственный вектор $e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$, симметрию которого надо установить. Если аналогично (102.1) использовать для этого чисто пространственные операторы, то важно представлять себе, что полученные линейные комбинации характеризуются *не только* матрицей $D^{(k)(j)}$, но также матрицей копредставления $D^{(\mathrm{co}\,k)(j)}$. Таким образом, чтобы установить тип копредставления, надо полностью определить симметрию некоторого собственного вектора, производя преобразование этого собственного вектора с помощью всех операций полной пространственно-временной группы $\mathscr{G}(k)$.

§ 103. Определение симметрии нормальных колебаний кристаллической решетки

Теперь мы можем завершить решение задачи, которое было прервано после § 82, 83. Для данного кристалла с пространственно-временной группой $\mathcal{G}$ можно определить симметрию всех существующих нормальных колебаний кристаллической решетки.

Посмотрим, чем мы располагаем для решения этой задачи. Мы имеем полный набор неприводимых представлений группы $\mathcal{G}$. В частности, имеются неприводимые допустимые представления группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$. Если вектор $\boldsymbol{k}$ для каждого $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ относится к классам I, II, III из (94.2), (94.3) и (94.4), то мы можем установить, относится ли данное неприводимое копредставление к типу A, B, C из (98.59), (98.60) и (98.61). Тогда мы можем установить, выделяет ли неприводимое копредставление одно неприводимое представление унитарной подгруппы либо два. Во втором случае, когда имеется неприводимое копредставление типа B или C, выделяющее прямую сумму двух неприводимых представлений, установлено, какие именно два представления объединяются (например, в случае C представление $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ входит дважды, в случае B входят два неэквивалентных представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$).

Пусть теперь, как и в § 82, нам даны также представления $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Для каждого элемента в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ система характеров для $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ определена в (82.21) и (82.22) следующим образом:

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right). \tag{103.1}$$

Но так как набор собственных векторов является базисом допустимого неприводимого копредставления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, мы должны выполнить разложение

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(e)} = \sum_m \chi^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(m)} c_m, \tag{103.2}$$

где c_m — число раз, которое m-е неприводимое копредставление $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ появляется в представлении $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$, базисом которого служат собственные векторы.

Обозначим характер $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(m)}$ через $\chi^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(m)}$. Чтобы установить наиболее простым способом, сколько раз появляется j-е неприводимое представление группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, можно выполнить только разложение по унитарной подгруппе. Тогда

$$c_j = \frac{1}{g} \sum_{\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})} \chi^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right) \chi^{(\boldsymbol{k})(j)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \boldsymbol{\tau}_{l_\lambda}\}\right)^*. \tag{103.3}$$

Суммирование в (103.3) идет по унитарным элементам группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Характер $\chi^{(\boldsymbol{k})(e)}$ получен в (82.21). Выпишем этот результат здесь:

$$\chi^{(\boldsymbol{k})(e)}\left(\{\varphi_{l_\lambda} \mid \tau_{l_\lambda}\}\right) =$$

$$= \pm\left(1 + 2\cos\varphi_{l_\lambda}\right) \sum_{\varkappa''} D^{(\boldsymbol{k})}\left(\left\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''\right)\right\}\right) \delta_{\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''}, \qquad (103.4)$$

где

$$\boldsymbol{R}_N\left(\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''\right) \qquad (103.5)$$

есть некоторый вектор трансляции решетки из (82.8), зависящий от положения двух атомов решетки, связанных поворотом φ_{l_λ}. Величина

$$\delta_{\varkappa_{\bar{\Phi}_{l_\lambda}}, \varkappa''} \qquad (103.6)$$

определена в (82.16) и (82.3).

Таким образом, мы можем выполнить процедуру разложения представления $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$, базисом которого являются собственные векторы, на неприводимые представления $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Зная, к какому из типов A, B, C принадлежит индуцированное представление, мы сразу же можем выполнить разложение $D^{(\boldsymbol{k})(e)}$ на неприводимые копредставления группы $\mathcal{G}$.

Важно отметить, что помимо общих сведений о структуре пространственно-временной группы для получения (103.3) мы использовали сведения о конкретной локализации атомов, о стехиометрическом составе, о структуре кристаллических базисных векторов. Структура элементарной ячейки определяет величины $\boldsymbol{R}_N$ и δ в (103.6), следовательно, эта структура определяет и реальную симметрию колебаний решетки.

Эта программа будет реализована ниже в § 138, где будет установлена симметрия фононов в кристаллах с симметрией каменной соли и алмаза.

§ 104. Определение собственных векторов $e\left(\left|{\boldsymbol{k} \atop j}\right.\right)$ из свойств симметрии. Определение собственных значений динамической матрицы

Как показано в § 103, для конкретного кристалла (т. е. для заданного состава и заданной пространственно-временной группы $\mathcal{G}$) известно, какие неприводимые представления существуют при заданном значении $\boldsymbol{k}$. Формулы приведения (103.2), (103.3) дают нам эту информацию.

Определим теперь собственные векторы колебаний решетки $\boldsymbol{e}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ в той мере, в которой это допускает теоретико-групповое рассмотрение. Очевидно, если нам дан один из вырожденных собственных векторов, например относящийся к представлению $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$ вектор $\boldsymbol{e}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$, то применением операторов симметрии группы $\mathcal{G}$ можно получить все остальные векторы. Какой-либо из таких собственных векторов $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right.\right)$ можно определить вместе со всеми прочими вырожденными с ним векторами численным решением динамического уравнения. Применение операций симметрии позволяет при этом установить, дает ли $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right.\right)$ представление $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Более удобно, вообще говоря, использовать некоторый эквивалентный, заранее заданный базис, через который удобно определить собственные векторы, отражающие симметрию, т. е. координаты симметрии. Исходным базисом при этом является просто совокупность записанных в декартовых координатах единичных смещений, по одной компоненте на каждую механическую степень свободы кристалла (полное число степеней свободы равно $3rN$). Копредставления группы $\mathcal{G}$, полученные с помощью такого базиса, обычно называют «механическими» или «полными» представлениями [49]. Введем следующие обозначения для единичных декартовых смещений:

$$\left\{\Delta X\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \Delta Y\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \Delta Z\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\} \quad \text{или} \quad \Delta X_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \qquad \alpha = 1,\ 2,\ 3. \tag{104.1}$$

Величина $\Delta X_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ является α-компонентой амплитуды единичных декартовых смещений относительно положения равновесия $\boldsymbol{r}^0\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Полный набор $3rN$ таких смещений охватывает все возможные нормальные колебания кристалла.

Построим теперь блоховские векторы с волновым вектором $\boldsymbol{k}$, соответствующие этим элементарным смещениям. Для этого воспользуемся оператором проектирования (25.4):

$$\Delta X_\alpha(\varkappa\,|\,\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}_L} \Delta X_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \quad \alpha = 1,\ 2,\ 3, \quad \varkappa = 1,\ \ldots,\ r. \tag{104.2}$$

Ясно, что для заданного $\boldsymbol{k}$ имеется $3r$ таких блоховских векторов. Используя их в качестве базиса, мы можем построить $3r$-мерное представление малой группы $\Pi(\boldsymbol{k}) = \mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, определенной в (39.9). Следовательно, если $P_{\{\varphi_\lambda \ t_\lambda\}}$ является элементом $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, то можно найти результат применения этого оператора к сумме (104.2). Так как $3r$ сумм (104.2) образуют полное линейное векторное пространство для всех нормальных колебаний с волновым вектором $\boldsymbol{k}$, а также являются полными по отношению ко всем возможным единичным смещениям, то результатом действия $P_{\{\varphi_l \mid \tau_l\}}$ на такую сумму будет возникновение линейной комбинации всех $3r$ величин (104.2). Таким способом мы получим представление $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$, базисом которого являются единичные декартовы смещения. Это представление также называют «полным» представлением. Когда $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ преобразовано в прямую сумму допустимых неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, мы можем найти специальные представления, возникающие в задаче о нормальных колебаниях, т. е. симметрию всех имеющихся нормальных колебаний.

Полезно отметить здесь важное обстоятельство. Как пространство

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} \equiv \{\Delta X(1 \mid \boldsymbol{k}), \ldots, \Delta Z(r \mid \boldsymbol{k})\}, \tag{104.3}$$

так и пространство

$$\Sigma^{(\boldsymbol{k})(e)} \equiv \left\{ e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{matrix} \right.\right), \ldots, e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{l_j} \end{matrix} \right.\right) \right\} \tag{104.4}$$

оба являются полными линейными векторными пространствами для собственных векторов динамической матрицы при фиксированном $\boldsymbol{k}$. Во-первых, (104.3) построено из $3r$ декартовых компонент единичных смещений атомов; во-вторых, (104.4) построено из полной совокупности $3r$ собственных векторов динамической матрицы при заданном $\boldsymbol{k}$. Обе совокупности полные, поэтому они эквивалентны друг другу. Следовательно, существует унитарная матрица S, такая, что

$$S^{-1}\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}S = \Sigma^{(\boldsymbol{k})(e)}. \tag{104.5}$$

Тогда и представления унитарной подгруппы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ тоже должны быть эквивалентными:

$$S^{-1}D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}S = D^{(\boldsymbol{k})(e)}. \tag{104.6}$$

Убедимся в справедливости (104.6), используя определение характеров

$$\mathrm{Sp}\, D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} \equiv \chi^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}. \tag{104.7}$$

Как обычно, подействуем оператором $P_{\{\varphi_\lambda | t_\lambda\}}$ на единичные декартовы смещения $(\Delta X_\alpha)\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$:

$$(P_{\{\varphi_\lambda | t_\lambda\}} \Delta X)_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \equiv (\Delta X_{\{\varphi\}_\lambda})_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta} (\Delta X)_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} \end{pmatrix}. \qquad (104.8)$$

Тогда повернутый блоховский вектор будет равен

$$(\Delta X_{\{\varphi_\lambda\}})_\alpha (\varkappa | \boldsymbol{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} (\Delta X_{\{\varphi\}_\lambda})_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\beta (\varphi_\lambda)_{\alpha\beta} \sum_L e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L} (\Delta X)_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} \end{pmatrix}. \qquad (104.9)$$

Произведем такую замену индексов суммирования, чтобы суммировать по величинам

$$\boldsymbol{R}_{L_{\bar{\varphi}_\lambda}} \equiv \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_L - \varphi_\lambda^{-1} \cdot \boldsymbol{t}_\lambda, \qquad (104.10)$$

$$\boldsymbol{R}_L \equiv \varphi_\lambda \cdot \boldsymbol{R}_{L_{\bar{\varphi}_\lambda}} + \boldsymbol{t}_\lambda. \qquad (104.11)$$

Тогда

$$(\Delta X_{\{\varphi_\lambda\}})_\alpha (\varkappa | \boldsymbol{k}) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\beta (\varphi_\lambda)_{\alpha\beta} \sum_{L_{\bar{\varphi}}} e^{i\left(\boldsymbol{k}\cdot\varphi_\lambda\cdot\boldsymbol{R}_{L_{\bar{\varphi}_\lambda}} + \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_\lambda\right)} (\Delta X)_\beta \begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}_\lambda} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda} \end{pmatrix} =$$
$$= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_\lambda} \sum_\beta \{\varphi_\lambda\}_{\alpha\beta} (\Delta X)_\beta (\varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda} | \boldsymbol{k}). \qquad (104.12)$$

При получении (104.11) мы воспользовались тем, что $\{\varphi_\lambda | t_\lambda\}$ относится к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$. Так как $\{\varphi_\lambda | t_\lambda\}$ является операцией симметрии кристалла, то индекс $\varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda}$ относится к одному из r атомов в элементарной ячейке.

Если индексы $\varkappa$ и $\varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda}$ относятся к атомам, занимающим одинаковое положение в элементарной ячейке, т. е. относятся к одной трансляционной решетке Бравэ в кристалле, построенном из нескольких эквивалентных взаимопроникающих решеток Бравэ, то $(\Delta X)_\beta (\varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda} | \boldsymbol{k}) = (\Delta X)_\beta (\varkappa | \boldsymbol{k})$. Следовательно, в (104.12) содержится отличный от нуля вклад в характер представления, базисом которого является $3r$-мерное векторное пространство (104.3). Из (104.11) ясно, что мы сразу получим характер (след) представления $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$. Для операции $\{\varphi_\lambda | \boldsymbol{t}_\lambda\}$ он равен

$$\operatorname{Sp} D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} (\{\varphi_\lambda | \boldsymbol{t}_\lambda\}) = \pm e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_\lambda} (1 + 2\cos\varphi_\lambda) \sum_{\varkappa=1}^{r} \delta_{\varkappa, \varkappa_{\bar{\varphi}_\lambda}}. \qquad (104.13)$$

Здесь

$$\delta_{\varkappa, \varkappa_{\bar{\Phi}_\lambda}} = \begin{cases} 1, & \text{если } \varkappa \text{ и } \varkappa_{\bar{\Phi}_\lambda} \text{ относятся к одному и} \\ & \text{тому же атому ячейки,} \\ 0 & \text{во всех прочих случаях.} \end{cases} \quad (104.14)$$

Сумма дает число атомов в элементарной ячейке, либо остающихся неизменными, либо преобразуемых в атомы той же решетки Бравэ. Остальные множители в (104.13) возникают из трансляционного фазового множителя в (104.12) и из следа поворотной матрицы. Применяя (104.13) для каждого элемента или представителя смежного класса в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})/\mathfrak{T}(\boldsymbol{k})$, мы получим полную систему характеров $\chi^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$. Эта система эквивалентна (103.4) и, следовательно, (82.21), что совсем неудивительно, так как обе системы получены одним и тем же способом. Однако базисное пространство $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ более удобно на этой стадии вычисления координат симметрии.

Напомним, что в (82.19) было показано, что $D^{(\boldsymbol{k})e)}$ есть прямое произведение; следовательно, $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ тоже является прямым произведением:

$$D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} = D^{(r)} \otimes D^{(\text{перест})}. \quad (104.15)$$

Следует отметить также, что $D^{(\text{перест})}$ является обобщенной матрицей перестановок с элементами $D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon \mid -\boldsymbol{R}_N\})$, расположенными в виде строки или столбца. Она устанавливает связь с волновым вектором $\boldsymbol{k}$. Чтобы получить правильно линейные комбинации основных декартовых смещений в пространстве $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$, нужно выполнить приведение $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ и определить для этого такую матрицу U, что

$$U^{-1} D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} U = \bar{D}^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}, \quad (104.16)$$

где $\bar{D}^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ имеет полностью приведенную форму:

$$\bar{D}^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} = D^{(\boldsymbol{k})(j)} \oplus \ldots \oplus D^{(\boldsymbol{k})(j')}, \quad (104.17)$$

причем (104.17) содержит все неприводимые представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Преобразованное базисное пространство, соответствующее (104.17), тогда имеет вид

$$U^{-1} \Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} U = \Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)} \oplus \ldots \oplus \Sigma^{(\boldsymbol{k})(j')}. \quad (104.18)$$

Задача сводится при этом к определению U.

Напомним, что из формул (103.2), (103.3) нам известно, какие типы неприводимых представлений $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$ могут появиться при выполнении приведения (104.17). Для каждого типа j неприводимого представления, для которого

$$c_j = 1, \quad (104.19)$$

мы можем сразу найти правильные линейные комбинации, применяя оператор проектирования для j-го допустимого представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Если мы рассматриваем элементы группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то эти операторы можно взять из (16.3) или (16.5). Назовем эти операторы $P^{(\boldsymbol{k})(j)}$. Тогда

$$P^{(\boldsymbol{k})(j)}\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)} \to \Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)}. \tag{104.20}$$

Оператор проектирования $p^{(\boldsymbol{k})(j)}$, естественно, известен из всего предшествующего теоретико-группового анализа.

Если $c_j > 1$, то применение оператора пректирования $P^{(\boldsymbol{k})(j}$ к различным базисным векторам в $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ (т. е. к различным декартовым компонентам единичных смещений атомов) дает *несколько* линейно-независимых пространств одинаковой симметрии $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)}$. Их правильные линейные комбинации

$$\alpha_1\Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)} + \alpha_2\Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)} + \ldots \tag{104.21}$$

можно найти только при решении данного динамического уравнения, за исключением некоторых простых, но важных случаев.

Примером такого особого случая может быть точка $\boldsymbol{k} = \Gamma = (000)$, если имеется более чем одно колебание акустического типа с одинаковой симметрией. Тогда акустическое колебание ($\omega^2 = 0$), очевидно, определяется тремя векторами со следующими компонентами:

$$\begin{aligned} \Sigma_X^{(\Gamma)(A)} &= \{\Delta X(1\,|\,\Gamma),\ 0,\ 0,\ \Delta X(2\,|\,\Gamma),\ \ldots\}, \\ &\ \vdots \\ \Sigma_Z^{(\Gamma)(A)} &= \{0,\ 0,\ \Delta Z(1\,|\,\Gamma),\ \ldots,\ \Delta Z(r\,|\,\Gamma)\}. \end{aligned} \tag{104.22}$$

Еще одно колебание типа Γ с такой же симметрией и $\omega^2(\Gamma\,|\,j) \neq 0$ можно полностью определить с помощью оператора проектирования и требования ортогональности различных колебаний (аналогично § 47).

Возможна еще одна полезная процедура определения U, основанная на том, что $D^{(\text{перест})}$ является матрицей с размерами $r \times r$ [78—80]. Поэтому мы сначала ищем матрицу S' и осуществляем приведение $D^{(\text{перест})}$, так что

$$S'^{-1}D^{(\text{перест})}S' = \bar{D}^{(\text{перест})}, \tag{104.23}$$

затем находим матрицу S'', такую, что

$$S''^{-1}D^{(r)}S'' = \bar{D}^{(r)}, \tag{104.24}$$

где матрица с чертой полностью приведена по отношению к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, и, наконец, находим (104.16). Такое последовательное приведение очень удобно. В частности, можно записать

$$\bar{D}^{(\text{перест})} = D^{(\boldsymbol{k})(\bar{l})} \oplus \ldots \oplus D^{(\boldsymbol{k})(\bar{l}')} \qquad (104.25)$$

через неприводимые компоненты по отношению к $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ (снова используя известные величины $c_{\bar{l}} \neq 0$) и затем прямым вычислением найти матрицу S', осуществляющую приведение. Так как векторное представление $D^{(r)}$ оказывается приведенным для $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то получение окончательного неприводимого представления $\bar{D}^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ уже является совсем простой задачей; в крайнем случае можно воспользоваться коэффициентами Клебша — Гордана, если они известны [51—54, 58]. В этой книге имеется обсуждение коэффициентов Клебша — Гордана в § 18, 60, 134.

Метод прямой проверки также является возможным способом определения U. Так как U — матрица с размерами $(3r \times 3r)$ и так как известны c_l и явная форма компонент $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$, то определение компонент U можно выполнить прямой проверкой.

При выполнении приведения, вероятно, полезно обратить внимание на явный вид $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$. А именно: выбором порядка, в котором перечислены номера атомов в элементарной ячейке, можно взять $D^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$ в частично диагонализованном виде, т. е. в форме расположенных вне диагонали блоков, что позволяет найти U.

Подведем итог. Работу по вычислению правильных линейных комбинаций для $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$ можно облегчить, либо используя операторы проектирования, либо прямым определением U. Мы проиллюстрируем это ниже, когда в т. 2, гл. 3 (в частности, в § 20) будем анализировать пространственную группу алмаза и каменной соли.

Чтобы завершить задачу определения правильных линейных комбинаций, необходимо рассмотреть операцию обращения времени. Здесь мы снова используем тот факт, что тип копредставления, которое содержит все возникающие $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$ (т. е. для которого в рассматриваемом кристалле $c_l \neq 0$), нам известен. Для копредставления типа А, когда ограниченными представлениями являются $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$, базисом неприводимого представления служит $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(l)}$. Для копредставлений типа В и С результаты § 98 показывают, что базисом неприводимого представления служит пространство

$$\Sigma^{(\text{co}\,\boldsymbol{k})(l)} \equiv \Sigma^{(\boldsymbol{k})(l)} \oplus P_{a_0} \Sigma^{(\boldsymbol{k})(l)}. \qquad (104.26)$$

Легко увеличить число собственных векторов, составляющих $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(l)}$, добавлением найденного с помощью P_{a_0} преобразованного набора. Пример будет приведен ниже.

В заключение подчеркнем, что основной задачей является определение совокупности координат симметрии для $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$. Если все $c_j = 1$, то это можно сделать до конца. Если $c_j > 1$, то собственные векторы можно определить с точностью до линейной комбинации. В каждом из этих случаев для определения численных значений частот или остальных параметров необходимо решить динамическое уравнение. Если все $c_j = 1$, то зная все собственные векторы, можно построить матрицу $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k})$ из (79.14) и затем найти все собственные значения так, как это сделано в (79.16) и (79.17). Это очень удобно при исследовании влияния изменения силовых постоянных на собственные значения, так как при этом из (79.16), (79.17), (85.12) и (85.13) можно получить явное уравнение для $\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$.

В некоторых исследованиях (например, в теории электрон-решеточного взаимодействия) нужны только «голые» собственные векторы динамической задачи для данного кристалла. Мы видим, что использование операторов проектирования позволяет сделать это при $c_j = 1$. В остальных случаях приходится решать полную динамическую задачу.

При неясности в идентификации ветвей по симметрии, когда неизвестна точная модель силовых постоянных, задача все же может быть решена с помощью анализа многофононных оптических спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света. Иначе говоря, применение теоретико-групповых методов позволяет получить несколько возможных решений задачи, а затем наблюдение разрешенных оптических процессов в фононном спектре комбинационного рассеяния дает возможность найти энергию отдельных фононов соответствующей симметрии и, следовательно, отнести фононы к определенным оптическим ветвям.

Таким образом, используя единичные декартовы смещения для получения вспомогательного векторного пространства $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(\Delta)}$, в котором легко выполняется приведение, можно полностью определить симметрию колебаний. Ясно, что такую процедуру можно рекомендовать вне зависимости от того, найдены ли численные значения собственных векторов $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ из решения динамической задачи. С другой стороны, теоретико-групповой анализ не может установить относительное расположение ветвей по величине энергии; это можно сделать только численным методом. Если для некоторых значений $\boldsymbol{k}$ окажется, что $c_j > 1$ (т. е. равно 2 или больше), то заведомо будет некоторая неоднозначность в идентификации ветвей по симметрии. В этом случае также теоретико-групповой анализ следует дополнить решением динамической задачи.

ГЛАВА 10

Применение теоретико-группового анализа к собственным векторам в классической динамике решетки

§ 105. Введение

Результаты предыдущей главы имеют много физических применений. Очевидно, что классификация собственных векторов по симметрии является полезной сама по себе. Затем свойства симметрии собственных векторов можно использовать в разного рода «тензорных» вычислениях аналогично более известному квантовомеханическому случаю, который будет обсуждаться ниже в гл. 11, где нужно вычислить матричные элементы, являющиеся интегралами от произведений функций. В классической динамике решетки реализуется похожая ситуация. В ней при определении свертки оператора с собственными векторами возникают величины, напоминающие матричные элементы. Такая свертка похожа на скалярное произведение, и получаются соотношения, напоминающие формулу Вигнера — Экарта. Такое рассмотрение допускает максимальное использование симметрии, в частности если имеются в распоряжении соответствующие коэффициенты Клебша — Гордана. Как следует из § 18, 60 и т. 2, § 16, коэффициенты Клебша — Гордана для пространственных групп стали публиковаться только в последнее время, но можно надеяться, что они будут вычислены в большом количестве в ближайшем будущем. Использование тензорного анализа упрощает расчеты такого рода и показывает, что рассматриваемые метричные элементы можно представить в виде произведений «приведенных» матричных элементов на множители, полностью определяемые симметрией.

Тензорный анализ полезен при определении критических точек функции распределения частот фононов. При этом применяется теория возмущений для вырожденного случая, приводящая, как всегда, к секулярному уравнению. Основные матричные элементы в этом уравнении можно определить с помощью теоретико-группового анализа.

Существуют многие другие применения теории симметрии в задаче классической динамики решетки; некоторые из них мы кратко обсудим (например, вычисление силовых постоянных, которое подробно выполнено в работах [4, 68]; вычисление других кристаллических инвариантов и ковариантов). В частности, электрический момент и поляризуемость понадобятся нам при рассмотрении инфракрасных спектров и спектров комбинационного рассеяния света в т. 2, § 5 и 6.

§ 106. Тензорный анализ в динамике решетки

Мы будем рассматривать величины, похожие на возникающие в квантовой механике матричные элементы операторов и волновые функции. Для этого мы найдем соотношения, аналогичные так называемой формуле Экарта — Вигнера [1, 2, 81].

В формулах (79.8) — (79.11) были определены два вида скалярных произведений рассматриваемых собственных векторов. В нескольких последних параграфах мы доказали, что эти собственные векторы являются базисом для неприводимых копредставлений группы $\mathcal{G}$. Это позволяет развить теорию несколько дальше. Рассмотрим сначала унитарные элементы симметрии, т. е. вначале мы будем считать, что собственные векторы образуют неприводимое представление группы $\mathfrak{G}$.

а. Роль унитарных элементов. Рассмотрим действие унитарных операторов симметрии на матричные элементы или скалярные произведения величин, свойства преобразования которых определены группами $\mathcal{G}$ и $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ а, следовательно, группами $\mathfrak{G}$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Наша задача — научиться определять в таких случаях отличные от нуля матричные элементы. Если они не равны нулю, то мы найдем минимальное число независимых «основных», или «приведенных», матричных элементов, через которые выражаются нужные нам матричные элементы [82].

Рассмотрим теперь произвольный вектор $\boldsymbol{X}$ в $3r$-мерном пространстве $(\alpha, \varkappa)$; такая величина имеет $3r$ компонент, нумеруемых индексами $\alpha = 1, 2, 3$ и $\varkappa = 1, \ldots, r$. Тогда, если $\boldsymbol{X}$ и $\boldsymbol{Y}$ — два таких вектора с компонентами $X_\alpha(\varkappa)$ и $Y_\alpha(\varkappa)$, то мы определим эрмитово скалярное произведение

$$(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \equiv \sum_{\varkappa, \alpha} X_\alpha(\varkappa)^* Y_\alpha(x) \equiv \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{Y}. \tag{106.1}$$

В частности, рассмотрим

$$\left(\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right),\quad \boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right), \tag{106.2}$$

где

$$\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right) \quad \text{относится к } D^{(\boldsymbol{k})(j)} \tag{106.3}$$

и является базисной функцией для ν-й строки неприводимого представления. Рассмотрим преобразование скалярного произведения (106.2) при преобразовании собственного вектора под действием унитарного оператора $P_{\{\varphi_{l_\lambda} | t_{l_\lambda}\}}$ из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Так как преобразование с помощью унитарного оператора соответствует геометрически преобразованию к эквивалентной координатной системе, то скалярное произведение, которое является числом, должно оставаться неизменным. Рассмотрим сначала чистую трансляцию

$$\left(P_{\{\varepsilon | R_L\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), \quad P_{\{\varepsilon | R_L\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right) =$$

$$= D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\})^* D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\}) \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right). \qquad (106.4)$$

Теперь просуммируем обе части (106.4) по всем элементам группы $\mathfrak{T}$. Так как порядок $\mathfrak{T}$ равен N, то, согласно (24.8), имеем

$$N \sum_L \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right) = \sum_L D^{(\boldsymbol{k})}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\})^* D^{(\boldsymbol{k}')}(\{\varepsilon | \boldsymbol{R}_L\}) \times$$

$$\times \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right) = N\Delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right). \qquad (106.5)$$

Следовательно, скалярное произведение (106.2) не равно нулю, только если

$$\boldsymbol{k} \doteqdot \boldsymbol{k}', \quad \text{т. е.} \quad \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' + 2\pi \boldsymbol{B}_H. \qquad (106.6)$$

Пусть тогда $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}'$. Рассмотрим преобразование собственных векторов поворотным элементом группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$:

$$\left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu} \end{matrix}\right.\right)\right) = \left(P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), \; P_{\{\varphi_{l_\lambda} | \tau_{l_\lambda}\}} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right).$$

$$(106.7)$$

Используя (83.6) и суммируя результат по всем элементам группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, после применения условий ортогональности и нормировки для неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ получаем

$$g(\boldsymbol{k}) \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right) = \frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j} \sum_\mu \sum_{\mu'} \delta_{jj'} \delta_{\mu\nu} \delta_{\mu'\nu'} =$$

$$= \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\mu'} \end{matrix}\right.\right)\right) = \frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j} \delta_{jj'} \sum_\mu \left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right.\right)\right) \delta_{\nu\nu'},$$

или

$$l_l\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)=\delta_{jj'}\delta_{\nu\nu'}\sum_\mu\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right). \quad (106.8)$$

Из (106.8) следует, что скалярное произведение (106.7) не равно нулю только при $j=j'$ и $\nu=\nu'$ и, кроме того, не зависит от ν.

Объединяя (106.8) и (106.5), получим в общем случае

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e'\left(\left|\begin{matrix}k'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)=\Delta(k-k')\,\delta_{jj'}\delta_{\nu\nu'}f(k, j), \quad (106.9)$$

где

$$f(k, j)\equiv\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right), e'\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)\right) \quad (106.10)$$

— приведенный матричный элемент. В соответствии с обычными условиями нормировки (79.10), (79.11) для векторов $e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$ т. е. длины вектора $e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)$, для случая, рассмотренного в (106.2)—(106.8), получаем $f(k, j)=1$. Общее рассмотрение скалярного произведения типа (106.9) приводит к формуле, напоминающей формулу Вигнера — Экарта для матричного элемента. В этом случае $f(k, j)$ играет роль приведенного матричного элемента, который следует определить.

Рассмотрим скалярное произведение

$$\sum_{\alpha\varkappa}\sum_{\beta\varkappa'}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)^* D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}k\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}k\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right), \quad (106.11)$$

которое можно записать в виде

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), D(k)\,e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right), \quad (106.12)$$

если учесть, что

$$\left(D(k)\cdot e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)_{\alpha\varkappa}=\sum_{\beta\varkappa'}D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}k\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}k\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right). \quad (106.13)$$

Если (106.12) преобразовать с помощью оператора $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}$ группы $\mathfrak{G}(k)$, то, учитывая (81.33), (106.9), (106.10), получим

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), D(k)\,e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)=\delta_{jj'}\delta_{\nu\nu'}c(k; j). \quad (106.14)$$

Согласно уравнениям движения (79.7), приведенный матричный элемент в (106.14) равен

$$c(\boldsymbol{k};\ j)=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j). \tag{106.15}$$

Если $P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}$ относится к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$, то он не зависит от ν, что соответствует (81.32).

Ясно, что характер результатов, собранных в (106.10), (106.14), зависит от вычисления скалярного произведения

$$\left(\boldsymbol{e}\left(\Bigg|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right),\ \boldsymbol{O}\boldsymbol{e}\left(\Bigg|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right)\right), \tag{106.16}$$

где $\boldsymbol{O}$ — оператор типа $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]$, инвариантный относительно операции симметрии группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$:

$$P_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}\boldsymbol{O}P^{-1}_{\{\varphi_{l_\lambda}|\tau_{l_\lambda}\}}=\boldsymbol{O}. \tag{106.17}$$

Соотношение (106.17) определяет оператор, инвариантный относительно преобразований группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Обобщая (106.16), мы можем рассмотреть ковариантный набор операторов

$$\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_\mu\end{pmatrix},\quad \mu=1,\ \ldots,\ l_m, \tag{106.18}$$

который принадлежит к μ-й стороне неприводимого представления $D^{(\boldsymbol{k}'')(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$:

$$P_{\{\varepsilon|\boldsymbol{R}_L\}}\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_\mu\end{pmatrix}=D^{(\boldsymbol{k}'')}(\{\varepsilon\,|\,\boldsymbol{R}_L\})\,\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_{\mu'}\end{pmatrix}$$

и

$$P_{\left\{\varphi_{l''_\lambda}\middle|\tau_{l''_\lambda}\right\}}\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_\mu\end{pmatrix}P^{-1}_{\left\{\varphi_{l''_\lambda}\middle|\tau_{l''_\lambda}\right\}}=\sum_{\mu'}D^{(\boldsymbol{k}'')(m)}\left(\left\{\varphi_{l_\lambda}\middle|\tau_{l_\lambda}\right\}\right)_{\mu'\mu}\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_{\mu'}\end{pmatrix}. \tag{106.19}$$

Набор операторов (106.18) определен по отношению к преобразованиям группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. При любом выборе базиса набор операторов (106.18) должен рассматриваться в принципе как часть полной совокупности операторов группы

$$\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_\mu\end{pmatrix},\ \ldots,\ \boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''_{\sigma''}\\ m_\mu\end{pmatrix},\ \ldots,\ \boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''_{s''}\\ m_\mu\end{pmatrix},\quad \mu=1,\ \ldots,\ l_m,$$

где волновые векторы принимают *все* возможные значения неэквивалентных волновых векторов в $^*\boldsymbol{k}''$. В изложенном ниже анализе мы будем работать в рамках метода подгруппы и ограничимся совокупностью (106.18). Здесь читателю можно посоветовать просмотреть определение коэффициентов приведения в § 17 и 57—59. Учитывая ограничение (106.18), можно проанализировать скалярное произведение

$$\left(e\begin{pmatrix} k \\ j_\nu \end{pmatrix},\ O\begin{pmatrix} k'' \\ m_\mu \end{pmatrix} e\begin{pmatrix} k' \\ j'_{\nu'} \end{pmatrix}\right) \tag{106.20}$$

аналогично (106.2) и (106.12). Прежде всего ясно, что матричный элемент будет отличен от нуля тогда и только тогда, когда коэффициенты приведения соответствующей малой группы будут так же отличны от нуля:

$$(kj \mid k''mk'j') \neq 0. \tag{106.21}$$

В (106.21) следует различать два случая, отличающиеся тем, что коэффициент приведения либо равен единице, либо оказывается числом, большим единицы.

Когда коэффициент приведения равен 1 и волновые векторы таковы, что $\mathfrak{G}(k'') = \mathfrak{G}(k') = \mathfrak{G}(k)$, применима простая процедура. В этом случае все поворотные элементы φ_{l_λ} одинаковы для трех волновых векторов и произведение представлений

$$D^{(k'')(m)} \otimes D^{(k')(j')} \tag{106.22}$$

содержит представление $D^{(k)(j)}$ только один раз. Тогда из l_j независимых базисных векторов можно построить единственное l_j-мерное векторное пространство $\Sigma^{(k)(j)}$:

$$\Sigma^{(k)(j)} \equiv \left\{\theta^{(k)(j)}, \ \ldots, \ \theta_{l_j}^{(k)(j)}\right\}, \tag{106.23}$$

где $\theta_\nu^{(k)(j)}$ — симметризованная величина, стоящая в ν-й строке представления $D^{(k)(j)}$:

$$\theta_\nu^{(k)(j)} \equiv \sum_{\mu}\sum_{\nu'} U_{k''m\mu;\ k'j'\nu';\ kj\nu}\, O\begin{pmatrix} k'' \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\begin{vmatrix} k' \\ j'_{\nu'} \end{vmatrix}\right). \tag{106.24}$$

Тогда l_j произведений $\theta_\nu^{(k)(j)}$ $(\nu = 1, \ldots, l_j)$ могут рассматриваться в качестве базиса. Матричные элементы $U_{k''m\mu,\ k'j'\nu',\ kj\nu}$ являются элементами матрицы Клебша — Гордана, представляющими произведение (106.22) в виде прямой суммы, в которой нас интересует только представление $D^{(k)(j)}$. В рассматриваемом случае мы предполагаем, что только один элемент преобразованной матрицы отличен от нуля. Повторяя рассуждения, которые привели нас к (106.9), получаем выражение

$$\left(e\left(\begin{vmatrix} k \\ j_\nu \end{vmatrix}\right),\ \theta_\nu^{(k)(j)}\right) = f'(k,\ j) \tag{106.25}$$

для этого единственного отличного от нуля матричного элемента. Чтобы вычислить скалярное произведение (106.25), нам нужны выражения для $\left(\theta_{\nu}^{(\boldsymbol{k})(l)}\right)_{\alpha\varkappa}$. Их можно получить, используя следующее соотношение для компонент

$$\left(\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_{\mu}\end{pmatrix}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)_{\alpha\varkappa}=\sum_{\beta\varkappa'}\boldsymbol{O}_{\alpha\varkappa,\,\beta\varkappa'}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_{\mu}\end{pmatrix}e_{\beta}\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right), \quad (106.26)$$

подставляя затем (106.26) в (106.25) и учитывая соотношение ортогональности и нормировки (79.10). Следовательно, оператор $\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{pmatrix}$ должен быть таким, чтобы его можно было разложить в $3r$-мерном пространстве компонент вектора смещения $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)$. В большинстве практически встречающихся случаев такое разложение на компоненты с индексами $\alpha\varkappa$, $\alpha=1, \ldots, 3$, $\varkappa=1, \ldots, r$, оказывается возможным. В противном случае пришлось бы воспользоваться разложением на компоненты с индексами m_{μ}, которых тоже $3r$, и записать скалярное произведение с двумя точками типа (79.9) или (79.11).

В случае когда коэффициент приведения (106.21) равен 2 или большему числу, отличными от нуля оказываются несколько матричных элементов. Мы будем понимать это следующим образом. Рассмотрим *набор* $(l_{\mu}\cdot l_{\nu'})$ произведений

$$\boldsymbol{O}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ m_{\mu}\end{pmatrix}\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right), \quad \mu=1, \ldots, l_{\mu}, \quad \nu'=1, \ldots, l_{\nu'}. \quad (106.27)$$

Предполагается, что этот набор $(l_{\mu}\cdot l_{\nu'})$ произведений содержит функции, которые могут служить базисом для нескольких линейно-независимых пространств $\Sigma^{(\boldsymbol{k})(j)}$, число которых равно численному значению коэффициента приведения (106.21). Например, предположим, что коэффициент приведения (106.21) равен 2. Тогда имеются две различные линейные комбинации функций (106.27), являющиеся базисом для *каждой* строки ν в представлении $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$.

Чтобы установить это наиболее простым способом, следует построить оператор проектирования

$$P_{\nu\nu}^{(\boldsymbol{k})(l)}, \quad (106.28)$$

который выделяет любую функцию, преобразующуюся по ν-й строке представления $D^{(\boldsymbol{k})(l)}$. Процедура построения оператора типа (106.28) уже обсуждалась в § 16, и результат приведен в формуле (16.3). Подчеркнем, что мы на самом деле располагаем всеми элементами, необходимыми для построения (106.21) обоими методами, обсуждавшимися в § 16: либо чисто алгебраическим методом, зависящим только от структуры группы, либо с использованием матриц полного представления $D^{(\boldsymbol{k})(j)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Действуя оператором (106.28) на базис (106.27), получаем

$$P_{\nu\nu}^{(\boldsymbol{k})(j)} \boldsymbol{O}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}'' \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right.\right). \qquad (106.29)$$

Придавая индексам μ и ν' допустимые значения, мы получим две различных линейно независимых функции:

$$\theta_\nu^{(\boldsymbol{k})(j)}, \quad \theta_\nu'^{(\boldsymbol{k})(j)}. \qquad (106.30)$$

Если образовать скалярные произведения этих функций с $e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right)$, то каждая из них даст линейно независимые матричные элементы коэффициентов приведения, а именно

$$\left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right), \quad \theta_\nu^{(\boldsymbol{k})(j)}\right) \equiv c\,(\boldsymbol{k};\ j) \qquad (106.31)$$

и

$$\left(e\left(\left| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right.\right), \quad \theta_\nu'^{(\boldsymbol{k})(j)}\right) \equiv c'\,(\boldsymbol{k};\ j). \qquad (106.32)$$

Здесь существенно, что конкретные линейно независимые базисные функции полностью определены в (106.30). Производя необходимые изменения, можно рассмотреть случай, когда (106.21) больше 2.

Рассмотрим теперь случай, когда все повороты φ_{l_λ} *не* входят одновременно во все три группы волновых векторов. Точнее, если данное значение $\boldsymbol{k}$ удовлетворяет условию

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}'' + \boldsymbol{k}' + 2\pi \boldsymbol{B}_H,$$

то для операций симметрии, входящих в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и не входящих в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}'')$ и $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}')$, имеем

$$\varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k} = \varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k}'' + \varphi_{l_\lambda} \cdot \boldsymbol{k}' + 2\pi \boldsymbol{B}'_H, \qquad (106.33)$$

или

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}''_{l_\lambda} + \boldsymbol{k}'_{l_\lambda} + 2\pi \boldsymbol{B}'_H. \qquad (106.34)$$

Чтобы построить теперь *полную* базисную функцию, мы должны применить оператор проектирования для определенных значений

μ и ν'

$$P_{\nu\nu}^{(k)(j)} O\begin{pmatrix} k''_{l_\lambda} \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\left| \begin{matrix} k'_{l_\lambda} \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right.\right), \quad \lambda = 1, \ldots, \tag{106.35}$$

и для *всех* значений λ, для которых поворот φ_{l_λ} содержится в $\mathfrak{P}(k)$ и не содержится в $\mathfrak{P}(k'')$ и $\mathfrak{P}(k')$. Затем, собирая вместе все функции из (106.35) с фиксированными значениями μ и ν', мы получаем тот базис, который нужно использовать при вычислении элементов «приведенной» матрицы:

$$\theta_\nu^{(k)(j)} = \left\{ P_{\nu\nu}^{(k)(j)} O\begin{pmatrix} k''_{l_\lambda} \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\left| \begin{matrix} k'_{l_\lambda} \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right.\right) \right\}, \tag{106.36}$$

$$\mu,\ \nu — \text{фиксированы},\ \lambda = 1, \ldots,$$

$$\theta_\nu'^{(k)(j)} = \left\{ P_{\nu\nu}^{(k)(j)} O\begin{pmatrix} k''_{l_\lambda} \\ m_{\bar\mu} \end{pmatrix} e\left(\left| \begin{matrix} k'_{l_\lambda} \\ j'_{\bar\nu'} \end{matrix} \right.\right) \right\}, \ldots . \tag{106.37}$$

Ясно, что проблема, с которой мы здесь сталкиваемся, связана с полнотой процедуры приведения в методе подгруппы. Можно рекомендовать читателю вспомнить сопоставление методов полной группы и подгруппы и при решении конкретной задачи убедиться в полноте любых базисных функций, полученных нашим способом. Может оказаться, что такая процедура потребует решения всей задачи методом полной группы. При этом нужно начать с построения полного набора функций, относящегося к представлениям полной пространственной группы

$$O\begin{pmatrix} k'' \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\left| \begin{matrix} k' \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right.\right), \tag{106.38}$$

$$k'' = k''_1, \ldots, k''_{s''}; \quad \mu = 1, \ldots, l_m;$$

$$k' = k'_1, \ldots, k'_{s'}; \quad \nu' = 1, \ldots, l_j.$$

Затем, применяя оператор проектирования к этой совокупности функций, можно найти набор функций, преобразующихся как $\Sigma^{(\star k)(m)}$. Как обсуждалось в § 64, важно, что мы имеем дело с полным векторным пространством. Полноту следует тщательно проверить в (106.35)—(106.37).

Возможный эквивалентный метод рассмотрения элементов «приведенной» матрицы [54] основан на определении коэффициентов преобразования векторов, т. е. матриц, которые производят разложения прямого произведения в прямую сумму. Когда писалась эта книга, казалось, что оба метода не имеют преимуществ друг перед другом. Проблема эта до сих пор изучается, и можно ожидать дальнейших результатов и разъяснений.

Подведем итоги. В этом параграфе мы рассмотрели действие чисто унитарных операторов из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ на базисные функции и, следовательно, на матричные элементы типа (106.20). Если мы хотим установить *конкретный* вид матричных элементов (106.20) с фиксированными индексами (ν, μ, ν'), когда выполнено соотношение (106.21), то в зависимости от рассматриваемого случая мы ищем точное число независимых линейных комбинаций типа (106.24), (106.30) или (106.36), (106.37).

Обращая разложение (106.24), можно получить

$$O\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}'' \\ m_\mu \end{pmatrix} e\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k}' \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right) = \theta_\nu^{(\boldsymbol{k})\,(l)}/U_{\boldsymbol{k}''m_\mu,\boldsymbol{k}'j'_{\nu'};\boldsymbol{k}\,l_\nu}. \qquad (106.39)$$

Тогда скалярное произведение (106.20) оказывается записанным через элементы исходных приведенных матриц (106.25) с правильными числовыми коэффициентами, как, например, (106.39). Такая же процедура применяется, когда для получения правильных линейных комбинаций используются операторы проектирования; при этом по существу определяются матричные элементы U.

В любом случае искомые матричные элементы выражаются через набор ненулевых элементов «приведенных» матриц, число которых определяется коэффициентом приведения (106.21).

б. Учет антиунитарных элементов. Рассмотрим теперь, как учитывается действие антиунитарного оператора симметрии на матричные элементы. Основной вопрос опять состоит в том, как выразить заданные матричные элементы через наименьшее число независимых или приведенных матричных элементов. В последующем изложении предполагается, что ограничения, следующие из наличия унитарных элементов, уже учтены. Нас интересуют дополнительные ограничения, связанные с наличием как унитарных, так и антиунитарных элементов симметрии.

Рассмотрим сначала случай, когда антиунитарные элементы входят в $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$, т. е. мы рассмотрим звезды типа I и II. Для антиунитарных элементов основное соотношение (106.7), выражающее инвариантность скалярного произведения, неприменимо. Оно заменяется соотношением, утверждающим, что скалярное произведение собственных векторов, преобразованных антиунитарным элементом, является комплексно сопряженным исходному скалярному произведению:

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right) = \left(P_a e\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right.\right), P_a e\left(\left|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{matrix}\right.\right)\right)^*. \qquad (106.40)$$

Здесь P — антиунитарный оператор из группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$. Так как собственный вектор $e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)$ относится теперь к ν-й строке копредставления $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}$, согласно § 101, 102 правую часть (106.40) можно привести к виду

$$\left(\sum_{\bar\nu} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}(a)_{\bar\nu\nu}\, e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right),\ \sum_{\bar\nu'} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j')}(a)_{\bar\nu'\nu'}\, e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\bar\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)^* =$$

$$= \sum_{\bar\nu}\sum_{\bar\nu'} D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}(a)_{\bar\nu\nu}\, D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j')}(a)^*_{\bar\nu'\nu'} \left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\bar\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)^*. \quad (106.41)$$

Дальше можно просто повторить все шаги, приводящие к полученным выше результатам для унитарных операторов. Это весьма трудоемкие вычисления, и вместо того, чтобы делать их полностью, мы получим несколько результатов для простых скалярных произведений; более сложные случаи можно найти в литературе [84].

При рассмотрении даже простого скалярного произведения (106.40) и (106.41) нужно различать несколько разных случаев для волновых векторов классов I и II. Поэтому рассмотрим случай, когда собственные векторы относятся к неприводимому представлению $D^{(\boldsymbol{k})(m)}$ группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и копредставление относится к классу A, и их матрицы удовлетворяют соотношениям (98.57) и (98.58). Тогда (106.41) можно упростить с помощью соотношений

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}(a)_{\bar\nu\nu} = \sum_{\mu} D^{(\boldsymbol{k})(j)}(u)_{\bar\nu\mu}\, \beta_{\mu\nu} \quad (106.42)$$

и

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}(a)^*_{\bar\nu'\nu'} = \sum_{\mu'} D^{(\boldsymbol{k})(j)}(u)^*_{\bar\nu'\mu'}\, \beta^*_{\mu'\nu'}. \quad (106.43)$$

Подставим (106.42) и (106.43) в (106.41), просуммируем по *унитарным* элементам группы $\mathscr{G}(\boldsymbol{k})$ и воспользуемся соотношениями ортогональности и нормировки. Тогда получим

$$g(\boldsymbol{k})\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right) =$$

$$= \frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j}\sum_{\bar\nu}\sum_{\bar\nu'}\sum_{\mu}\sum_{\mu'} \delta_{\bar\nu\bar\nu'}\delta_{\mu\mu'}\delta_{jj'}\beta_{\mu\nu}\beta^*_{\mu'\nu'}\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\bar\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)^* =$$

$$= \frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j}\sum_{\bar\nu}\sum_{\mu} \delta_{jj'}\beta_{\mu\nu}\beta^*_{\mu\nu'}\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^*. \quad (106.44)$$

Но β — унитарная матрица:

$$\beta^*_{\mu\nu'} = (\beta^{-1})_{\nu'\mu}, \tag{106.45}$$

поэтому (106.44) преобразуется к виду

$$\frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j}\sum_{\bar\nu}\delta_{jj'}\delta_{\nu'\nu}\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^* = \tag{106.46}$$

$$= \frac{g(\boldsymbol{k})}{l_j}\delta_{jj'}\delta_{\nu\nu'}\sum_{\bar\nu}\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right). \tag{106.47}$$

Следовательно, из (106.47) независимо от индекса ν получаем

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right)\right) = \left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^*. \tag{106.48}$$

Скалярное произведение в этом случае оказывается вещественным и отличным от нуля только для функций, относящихся к одной и той же строке неприводимого представления. Таким образом, в случае А наличие антиунитарного оператора симметрии делает скалярное произведение вещественным. Это еще одно дополнительное условие, накладываемое на $f(\boldsymbol{k}, j)$, кроме (106.9). Если бы мы начали вычисления с двумя собственными векторами, относящимися к одной и той же строке представления $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(j)}$, то части вычислений, приводящих к (106.48), можно было бы избежать.

Для собственных векторов класса В напомним результаты, полученные для унитарной группы. Матрицы класса В даются выражениями (98.14), (98.18). Поэтому в (106.40) и (106.41) мы будем различать два случая:

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right)\right) \tag{106.49}$$

при $\nu = 1, \ldots, l_j$ и при $\nu = l_j + 1, \ldots, 2l_j$.

Из (98.18) для $\nu = 1, \ldots, l_j$, $\bar\nu = l_j + 1, \ldots, 2l_j$ имеем

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(j)}(a)_{\bar\nu\nu} = D^{(\boldsymbol{k})\,(j)}(a_0^{-1}ua_0)^*_{\bar\nu\nu}, \tag{106.50}$$

а для $\nu = l_j + 1, \ldots, 2l_j$, $\bar\nu = 1, \ldots, l_j$ получаем

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})\,(j)}(a)_{\bar\nu\nu} = D^{(\boldsymbol{k})\,(j)}(ua_0^2)_{\bar\nu\nu}. \tag{106.51}$$

Отсюда следует, что скалярное произведение

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)$$

при $\nu \leqslant l_j$ записывается через скалярное произведение при $\bar\nu > l_j$:

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right)\Bigg|_{\nu\leqslant l_j} =$$

$$= \sum_{\bar\nu}\sum_{\bar\nu'} D^{(k)(l)}(a_0^{-1}ua_0)^*_{\bar\nu\nu} D^{(k)(l)}(a_0^{-1}ua_0)_{\bar\nu'\nu} \times$$

$$\times \left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu'}\end{matrix}\right.\right)\right)^*\Bigg|_{\bar\nu > l_j}. \qquad (106.52)$$

Суммируя по унитарным элементам $\mathfrak{G}(k)$, получаем

$$g(k)\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right)\Bigg|_{\nu\leqslant l_j} =$$

$$= \sum_{\bar\nu} \frac{g(k)}{l_j}\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^*\Bigg|_{\bar\nu > l_j} \qquad (106.53)$$

или

$$l_j\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right)\Bigg|_{\nu\leqslant l_j} = \sum_{\bar\nu}\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ i_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^*\Bigg|_{\bar\nu > l_j}.$$

Аналогично для второго возможного случая в (106.49) получаем

$$l_j\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right)\Bigg|_{\nu\geqslant l_j} = \sum_{\bar\nu}\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{\bar\nu}\end{matrix}\right.\right)\right)^*\Bigg|_{\bar\nu < l_j}. \qquad (106.54)$$

Из (106.53) и (106.54) мы получаем.

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right) = f(k, j);$$

$$\nu = 1, \ldots, l_j. \qquad (106.55)$$

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{l_j+\nu}\end{matrix}\right.\right), e\left(\left|\begin{matrix}k\\ j_{l_j+\nu}\end{matrix}\right.\right)\right) = f^*(k, j),$$

Отметим, что (106.55) не зависит от индекса ν. Таким образом, как показано в случае В, скалярные произведения должны быть комплексно сопряженными.

Перейдем к случаю С и используем (98.51), (106.40) и (106.41). Снова ограничимся диагональным базисом, следующим из рассмотрения унитарных элементов. В этом случае получим

$$D^{(\mathrm{co}\,k)(l)}(a)_{\bar\nu\nu} = (D^{(k)(l)}(u)\,\beta)_{\bar\nu\nu}, \quad \nu = 1, \ldots, l_j; \quad \bar\nu = l_j + 1, \ldots, 2l_j; \qquad (106.56)$$

и

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}(a)_{\bar{\nu}\nu} = \left(-D^{(\boldsymbol{k})(j)}(u)\,\beta\right)_{\bar{\nu}\nu}, \tag{106.57}$$
$$\nu = l_j + 1, \ldots, 2l_j; \quad \bar{\nu} = 1, \ldots, l_j.$$

Подставляя эти соотношения в (106.40) и (106.41), получим

$$\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right)\Bigg|_{\nu < l_j} =$$
$$= \sum_{\bar{\nu}\bar{\nu}'}\sum_{\mu}\sum_{\mu'} D^{(\boldsymbol{k})(j)}(u)_{\bar{\nu}\mu}\,\beta_{\mu\nu} D^{(\boldsymbol{k})(j)}(u)^{*}_{\bar{\nu}'\mu'}\beta^{*}_{\mu'\nu}\left(e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_{\bar{\nu}}\end{matrix}\right.\right),\ e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j'_{\bar{\nu}'}\end{matrix}\right.\right)\right)^{*}. \tag{106.58}$$

Беря сумму по унитарным элементам u группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ так же, как мы делали при получении (106.55), мы установим аналогично (106.55) соотношение между скалярными произведениями при $\nu < l_j$ и $\nu > l_j$.

Суммируем результаты. Наличие элементов антиунитарной симметрии в группе и тот факт, что собственные векторы относятся к неприводимым представлениям группы, приводят к условиям вещественности матричных элементов типа (106.48) и (106.55).

Чтобы продвинуться дальше, мы должны рассмотреть более общий матричный элемент типа (106.20). Затем каждый из сомножителей в (106.20) должен рассматриваться в качестве базиса соответствующего копредставления. Таким образом, произведение

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}'')(m)} \otimes D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}')(j')} \tag{106.59}$$

должно быть приведено к прямой сумме копредставлений (обобщенная теорема Машке). Когда получены правильные линейные комбинации либо с помощью коэффициентов Клебша — Гордана, либо с помощью операторов проектирования, можно найти скалярное произведение, которое и является приведенным матричным элементом. Возникает только некоторое ограниченное число приведенных матричных элементов, которые равны коэффициентам приведения:

$$(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}j \mid \mathrm{co}\,\boldsymbol{k}''m,\ \mathrm{co}\,\boldsymbol{k}'j') \neq 0. \tag{106.60}$$

Правила вычисления такие же, как в случае унитарных элементов, но мы не будем обсуждать подробно разные случаи и сошлемся на соответствующую литературу [84]. Используя свойства копредставлений, полученные в § 98, можно рассмотреть все случаи.

Снова следует подчеркнуть, что при выполнении полного анализа матричных элементов метод подгруппы может применяться только при соблюдении соответствующих предосторожностей. Это, в частности, надо иметь в виду, развивая теорию копредставлений. Безопаснее, хотя и более трудоемко, работать методом полной группы.

Некоторые примеры дополнительных правил отбора, обусловленных антиунитарными элементами симметрии, будут приведены ниже.

§ 107. Критические точки

а. Теория представлений для критических точек, обусловленных симметрией. В предшествующем рассмотрении мы интересовались собственными значениями и собственными функциями динамической матрицы при определенных значениях волнового вектора $\boldsymbol{k}$ в зоне Бриллюэна. В зависимости от более высокого или более низкого порядка групп $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$ и $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$, соответствующих данному $\boldsymbol{k}$, при рассмотрении существенного вырождения, при получении симметризованных собственных векторов и матричных элементов симметрических операторов и т. п. оказалось возможным выполнить различные упрощения и установить классификацию.

В этом параграфе рассматриваются вопросы, связанные с распределением собственных значений в зоне, т. е. с плотностью состояний. Плотность состояний при заданной энергии E равна числу различных собственных векторов динамической матрицы в интервале энергии между E и $E + dE$. Плотность состояний зависит от $\boldsymbol{k}$. Критической точкой плотности состояний называется энергия E или волновой вектор $\boldsymbol{k}$, при которых плотность состояний имеет сингулярность. В частности в критической точке производная плотности состояний по энергии обращается в бесконечность. Краткое рассмотрение критических точек дано в книге Кохрана и Каули [8]; этот вопрос обсуждается также в работах [63, 85].

В этом параграфе демонстрируется применение методов теории групп для определения критических точек. С самого начала следует подчеркнуть, что учет симметрии не дает всех критических точек функции распределения частот для данного кристалла с определенной симметрией, а только выделяет некоторую совокупность критических точек, которую принято называть «критическими точками, обусловленными симметрией» [86]. Дополнительные критические точки возникают при определенных значениях силовых постоянных для данного материала; существование их никак не связано с симметрией. Такие критические точки можно назвать «динамическими». Кроме того, существование критических точек следует из топологических соображений [87]. Применение теории Морса (анализа топологических многообразий) показывает, что существование некоторых критических точек плотности состояний, классифицированных согласно их индексам, требует существования определенного числа других критических точек с определенными индексами и что топологические свойства «пространства», в котором определена плотность состояний, требуют существования минимального набора таких критических точек [63, 85].

В этом параграфе мы получим основные соотношения, согласно которым плотность состояний записывается в форме, удобной для выполнения анализа по симметрии и получения критических точек. В этом параграфе мы ограничимся рассмотрением представлений группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

Уравнения движения в динамике кристаллической решетки имеют вид (79.7) или (85.1):

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})]\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right). \tag{107.1}$$

Из системы уравнений (107.1) в принципе можно определить полный набор $3rN$ частот. Для каждого численного значения квадрата частоты в (107.1) независимо от значений $\boldsymbol{k}$ и j_μ можно рассчитать число различных собственных векторов. Так как каждый собственный вектор соответствует определенному колебательному состоянию, число таких собственных векторов, соответствующее данному численному значению ω^2, является числом состояний с этой энергией. Хотя это вполне приемлемый и часто употребляемый способ численного расчета плотности состояний, он неудобен с точки зрения анализа по симметрии. Напомним [4], что при наличии вырождения удобно относить индекс j или j_μ к определенной ветви колебательного спектра решетки. Поэтому любой ветви (при фиксированном j) соответствует N состояний, по одному для каждого значения $\boldsymbol{k}$ в зоне Бриллюэна. В схеме приведенных зон, которой мы будем пользоваться, функция $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ многозначна: каждому $\boldsymbol{k}$ соответствует $3r$ значений индекса ветви.

Пусть частоты решетки упорядочены так, что мы можем выделить j-ю ветвь ($j=1, \ldots, 3r$). Индекс j-й ветви, вообще говоря, однозначен, за исключением точек, в которых ветви пересекаются. В точках пересечения неясно, как приписывать индексы по обе стороны от пересечения. Следуя Филипсу [86], мы будем проводить нумерацию так, чтобы в отсутствие вырождения для j-й ветви с заданным $\boldsymbol{k}$, частота которой обозначается как $\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$, было

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j') > \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j), \tag{107.2}$$

если $j' > j$. Вне точки вырождения такое правило позволяет пронумеровать все состояния единственным образом. При этом в точке пересечения ветвей может возникнуть обобщенная критическая точка, обусловленная бесконечно большим изменением производной от частоты по квазиволновому вектору. В такой сингулярной критической точке одна или несколько компонент производной от ω^2 по $\boldsymbol{k}$ изменяют знак скачком, причем остальные компоненты обращаются в нуль. Сама частота $\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$ остается конечной.

Так как $\boldsymbol{k}$ меняется непрерывно во всей первой зоне Бриллюэна, при фиксированном j $\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$ является тоже непрерывной функцией. Если N — полное число элементарных ячеек, соответствующее граничным условиям Борна — Кармана, то имеется N таких квадратов частот для каждой ветви. Относительная доля этих частот ветви j, которая лежит между $\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$ и $[\omega^2(\boldsymbol{k}|j) + \Delta\omega^2(\boldsymbol{k}|j)]$, равна

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \frac{1}{N}\left[N_j(\omega^2 + \Delta\omega^2) - N_j(\omega^2)\right], \qquad (107.3)$$

где $N_j(\omega^2)$ — полное число квадратов частот во всем интервале от 0 до заданного значения $\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$ j-й ветви.

Определим функцию распределения квадратов частот $G_j(\omega^2)\Delta\omega^2$ следующим образом:

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \delta\left(\omega^2(\boldsymbol{k}|j) - \omega^2\right), \qquad (107.4)$$

$$\omega^2(\boldsymbol{k}|j) \leqslant \omega^2 \leqslant \omega^2(\boldsymbol{k}|j) + \Delta\omega^2(\boldsymbol{k}|j). \qquad (107.5)$$

Если мы хотим рассматривать $\boldsymbol{k}$ как непрерывную переменную, мы можем переписать (107.4) в форме интеграла по объему (множитель $(2\pi)^{-3}$ здесь не выписан явно):

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \int\!\!\int\!\!\int d\boldsymbol{k}, \qquad (107.6)$$

где интегрирование идет по объему

$$\omega^2(\boldsymbol{k}|j) \leqslant \omega^2 \leqslant \omega^2(\boldsymbol{k}|j) + \Delta\omega^2(\boldsymbol{k}|j). \qquad (107.7)$$

Следует отчетливо представлять себе, что ограничение (107.7), имеющееся в (107.6), является реальным ограничением области интегрирования по $\boldsymbol{k}$: это по существу главное уравнение для $\boldsymbol{k}(\omega^2)$, написанное, конечно, только для одной j-й ветви. Очевидно, что (107.7) описывает объем, заключенный между поверхностью $\omega^2 = \omega^2(\boldsymbol{k}|j)$ и поверхностью $\omega^2 = \omega^2(\boldsymbol{k}|j) + \Delta\omega^2(\boldsymbol{k}|j)$. Теперь мы можем преобразовать (107.6) в поверхностный интеграл по одной из этих поверхностей.

Пусть dS — элемент поверхности $\omega^2(\boldsymbol{k}|j) = \omega^2$, где ω^2 — некоторое постоянное число. Тогда единичный вектор в направлении возрастания ω^2 можно записать в виде

$$\hat{\boldsymbol{n}} = \nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}|j)/|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}|j)|. \qquad (107.8)$$

Теперь можно записать (107.6) через объем в $\boldsymbol{k}$-пространстве, заключенный между двумя указанными выше поверхностями:

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \oiint\limits_{\sigma} \frac{\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2|}\,\Delta\boldsymbol{k}\,dS, \tag{107.9}$$

где $\Delta\boldsymbol{k}$ — приращение $\boldsymbol{k}$, соответствующее приращению $\Delta\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$, σ — поверхность $\omega^2 = \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$. Если разложить $\omega^2(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})$ в ряд Тейлора, то получим

$$\omega^2(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}\,|\,j) = \omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) + \nabla\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\cdot\Delta\boldsymbol{k} + \ \ldots, \tag{107.10}$$

или

$$\Delta\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) \approx \nabla\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\cdot\Delta\boldsymbol{k}. \tag{107.11}$$

Следовательно,

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \oiint\limits_{\sigma} \frac{\Delta\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2|}\,dS. \tag{107.12}$$

Так как $\Delta\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ — постоянное приращение, то

$$G_j(\omega^2)\,\Delta\omega^2 = \Delta\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)\iint\limits_{\sigma} \frac{dS}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2|}. \tag{107.13}$$

Это важный результат: функция распределения частот или плотность состояний $G_j(\omega^2)\Delta\omega^2$ пропорциональна поверхностному интегралу

$$\iint\limits_{\sigma} \frac{dS}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2|}, \tag{107.14}$$

в котором интегрирование ведется по поверхности σ, соответствующей постоянному значению ω^2. Представляется очевидным, что области в зоне Бриллюэна, в которых

$$|\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)| = 0, \tag{107.15}$$

весьма существенны, так как они дают большой вклад в подынтегральное выражение в (107.14) и, следовательно, в производную $dG_j(\omega^2)/d\omega^2$. В зависимости от того, все ли компоненты $\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ обращаются в нуль или только некоторые из них, возникают разные случаи [8, 85].

Так как в этой монографии мы в основном интересуемся теоретико-групповым анализом оптических процессов, связанных с колебаниями решетки, мы не будем подробно обсуждать аналитический вклад в плотность состояний от критических точек разного типа. Такой анализ содержится, например, в работе Кохрана и Каули [8]. Здесь мы обсудим более узкий вопрос о том, как установить те критические точки, которые связаны с требованиями симметрии.

Мы применим к уравнению (107.1) теорию возмущений и установим связь симметрии собственных векторов нормальных колебаний с возникновением критических точек. Пусть имеется решение уравнения (107.1), соответствующее волновому вектору $\boldsymbol{k}_0$. Так как обусловленное симметрией существенное вырождение играет важную роль в теории, мы выпишем уравнения динамики решетки, собственные векторы, собственные значения со всеми индексами. Напомним рассмотрение § 75, 85, 91.

Пусть в точке $\boldsymbol{k}_0$ уравнения движения имеют вид

$$\sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} e_\beta\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k}_0 \\ j_\mu \end{matrix}\right) = \omega^2(\boldsymbol{k}_0 \mid j)\, e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k}_0 \\ j_\mu \end{matrix}\right), \quad \mu = 1, \ldots, l_j, \tag{107.16}$$

где вырожденные собственные векторы с $\mu = 1, \ldots, l_j$ относятся к l_j-кратно вырожденному собственному значению $\omega^2(\boldsymbol{k} \mid j)$. Для других собственных векторов мы будем обозначать индекс ветви латинской буквой, например m:

$$\sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} e_\beta\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k}_0 \\ j_m \end{matrix}\right) = \omega^2(\boldsymbol{k} \mid m)\, e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k}_0 \\ j_m \end{matrix}\right), \quad m \neq \mu, \tag{107.17}$$

где $m \neq \mu$ относится к невырожденным ветвям. Пусть вектор $\boldsymbol{k}$ имеет значение, близкое к $\boldsymbol{k}_0$, так что

$$\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0 = \xi, \tag{107.18}$$

где ξ — малый вектор. Уравнение движения в точке $\boldsymbol{k}$ имеет вид

$$\sum_{\varkappa'\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} e_\beta\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right) = \omega^2(\boldsymbol{k} \mid \mu)\, e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{matrix}\right), \tag{107.19}$$

где греческий индекс μ относится к одной из ветвей, вырожденных в точке $\boldsymbol{k}_0$, согласно уравнениям (107.16). Для этой ветви следует применять теорию возмущений для вырожденного уровня. Разложим в ряд Тейлора динамическую матрицу и собственные значения и оставим в разложении только линейные члены. Тогда получим

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} = D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} + (\xi \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}})\, D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \varkappa\varkappa' \end{pmatrix} + \ldots \tag{107.20}$$

и

$$\omega^2(\boldsymbol{k} \mid \mu) = \omega^2(\boldsymbol{k}_0 \mid j) + (\xi \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}})\, \omega^2(\boldsymbol{k}_0 \mid \mu) + \ldots, \tag{107.21}$$

или

$$\omega^2(\boldsymbol{k} \mid \mu) = \omega^2(\boldsymbol{k}_0 \mid j)^{(0)} + \omega^2(\boldsymbol{k}_0 \mid \mu)^{(1)} + \ldots. \tag{107.22}$$

Будем искать возмущенный собственный вектор в виде линейной комбинации невозмущенных собственных векторов:

$$e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j_\mu\end{matrix}\right.\right)=\sum_{\nu=1}^{l_j} B_{\nu\mu}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right). \tag{107.23}$$

В (107.23) мы ограничились линейной комбинацией только вырожденных собственных векторов, так как мы предполагаем, что именно они дают наибольший вклад. Задача состоит в определении $B^\nu{}_\mu$ и одновременно поправки первого порядка к $\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)$. Подставляя (107.23), (107.21), (107.20) в (107.19), получаем

$$\sum_{\varkappa'\beta}\left\{D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)+(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}_0})D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)\right\}\sum_\nu B_{\nu\mu}e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=\{\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)+(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\omega^2(\boldsymbol{k}_0|\mu)\}\sum_\nu B_{\nu\mu}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right). \tag{107.24}$$

Учитывая (107.16), мы исключаем члены нулевого порядка и получаем типичное уравнение теории возмущений первого порядка для вырожденного уровня (напомним, что мы берем только множество вырожденных собственных векторов):

$$\sum_{\varkappa'\beta}\sum_\nu B_{\nu\mu}(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j_\mu)\sum_\nu B_{\nu\mu}e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right). \tag{107.25}$$

Умножим теперь скалярно (107.25) на $e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right)$, снова имея в виду, что σ относится только к вырожденным ветвям. Тогда имеем

$$\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\varkappa'\beta}\sum_\nu B_{\nu\mu}e^*_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right)(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})D_{\alpha\beta}\left(\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{matrix}\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j_\mu)\sum_\nu B_{\nu\mu}\sum_{\varkappa\alpha}e^*_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right)e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)=$$
$$=(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j_\mu)\sum_\nu B_{\nu\mu}\delta_{\nu\sigma}. \tag{107.26}$$

Следовательно, уравнения для определения коэффициентов $B_{\nu\mu}$ (правильных линейных комбинаций) имеют вид

$$\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\varkappa'\beta}\sum_{\nu} B_{\nu\mu}\left[e_{\alpha}^{*}\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right)(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{pmatrix}e_{\beta}\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)-\right.$$
$$\left.-(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,\omega^2(\boldsymbol{k}_0\,|\,j_\mu)\,\delta_{\nu\sigma}\right]=0,\quad \sigma=1,\ \ldots,\ l_j. \qquad (107.27)$$

Эта система имеет отличные от нуля решения, если ее определитель равен нулю. Достаточным условием обращения в нуль всех корней уравнения (107.27), т. е. величины $(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,\omega^2(\boldsymbol{k}_0\,|\,\mu)$, является условие равенства нулю всех матричных элементов:

$$\sum_{\varkappa\alpha}\sum_{\varkappa'\beta} e_{\alpha}^{*}\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right)(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_0\\ \varkappa\varkappa'\end{pmatrix}e_{\beta}\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)=0. \qquad (107.28)$$

Таким образом, нам нужно выяснить условия обращения в нуль величины (107.28). Имея в виду рассмотрение § 106, перепишем (107.28) в форме скалярного произведения, которое там определено:

$$\left(\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\sigma\end{matrix}\right.\right),\ \xi\cdot\nabla_{\varkappa}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})_{\boldsymbol{k}_0}\,\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}_0\\ j_\nu\end{matrix}\right.\right)\right). \qquad (107.29)$$

Сравнивая это выражение с (106.20) и последующими выражениями, находим, что оно имеет вид матричного элемента некоторого оператора

$$\boldsymbol{O}(\boldsymbol{k})\equiv(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}))_{\boldsymbol{k}_0}, \qquad (107.30)$$

взятого по вырожденным собственным векторам, относящимся к собственному значению $\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)$. В (107.29), (107.30) индекс $\boldsymbol{k}_0$ у градиента динамической матрицы означает, что эта величина должна вычисляться в точке $\boldsymbol{k}_0$.

В первую очередь мы должны установить трансформационные свойства оператора (107.30). Для этого построим величину

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}\,(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}D(\boldsymbol{k}))\,P_{\{\varphi\,|\,t\}}^{-1}, \qquad (107.31)$$

которая равна

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}\,(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,P_{\{\varphi\,|\,t\}}^{-1}\cdot P_{\{\varphi\,|\,t\}}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})\,P_{\{\varphi\,|\,t\}}^{-1}. \qquad (107.32)$$

В (12.1)—(12.5) мы определили операторы $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$, действующие на функции в конфигурационном пространстве; затем в (30.1)—(30.10) мы установили действие такого оператора на блоховские функции. Так как оператор $(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})$ не зависит от $\boldsymbol{r}$, можно написать

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}\,(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}})\,P_{\{\varphi\,|\,t\}}^{-1}=(\xi\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}). \qquad (107.33)$$

Затем из (107.33) и (81.26) получим

$$P_{\{\varphi\,|\,t\}}(\xi \cdot \nabla_k D(k))\, P^{-1}_{\{\varphi\,|\,t\}} = (\xi \cdot \nabla_k)\, D(\varphi \cdot k). \tag{107.34}$$

Прежде чем продвинуться дальше, напомним, что в ряде Тейлора (107.20) производные следует вычислять в точке k_0, как это и указано в аргументе. Кроме того, мы имеем

$$\begin{aligned}\nabla_k (\exp - i\varphi \cdot k \cdot R_L) &= \nabla_k (\exp - ik \cdot \varphi^{-1} R_L) = \\ &= (-i\varphi^{-1} \cdot R_L) \exp - ik \cdot \varphi^{-1} \cdot R_L = \\ &= (-i\varphi^{-1} \cdot R_L) \exp - i\varphi \cdot k \cdot R_L.\end{aligned} \tag{107.35}$$

Далее, так как в (81.24) — (81.26)

$$D(\varphi \cdot k) = P^{(\varphi \cdot k)} [M]^{-1/2} [\Phi(0)]\, [M]^{-1/2},$$

получаем

$$(\xi \cdot \nabla_k)\, D(\varphi \cdot k) = (\xi \cdot \nabla_k)\, P^{(\varphi \cdot k)} [M]^{-1/2} [\Phi(0)]\, [M]^{-1/2}. \tag{107.36}$$

Тогда из (107.36), (107.35) и из определения оператора $P^{(\varphi \cdot k}$ в (81.14) имеем

$$\begin{aligned}(\xi \cdot \nabla_k)\, P^{(\varphi \cdot k)} &= (k - k_0) \cdot \nabla_k P^{(\varphi \cdot k)} = \\ &= (k - k_0) \sum_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}} (-i\varphi^{-1} \cdot R_N)\, D^{(\varphi \cdot k)}(\{\varepsilon\,|\,-R_N\})^* P_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}} =\end{aligned} \tag{107.37}$$

$$= (k - k_0) \cdot \varphi^{-1} \sum_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}} (-iR_N)\, D^{(\varphi \cdot k)}(\{\varepsilon\,|\,-R_N\})^* P_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}}. \tag{107.38}$$

Но градиент в (107.36) следует вычислять в точке k_0. Следовательно, под знаком суммы в (107.38) мы можем взять $D^{(\varphi \cdot k)} \to D^{(\varphi \cdot k_0)}$.

Пусть теперь $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ — некоторый элемент группы $\mathfrak{G}(k_0)$. Тогда

$$D^{(\varphi \cdot k_0)} = D^{(k_0)}. \tag{107.39}$$

При этом (107.38) преобразуется к виду

$$(\varphi \cdot (k - k_0)) \cdot \sum_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}} (-iR_N)\, D^{(k_0)}(\{\varepsilon\,|\,-R_N\})^* P_{\{\varepsilon\,|\,-R_N\}}. \tag{107.40}$$

Но сумма в (107.40), очевидно, равна

$$(\nabla_k P^{(k)})_{k_0}. \tag{107.41}$$

Следовательно, из уравнений (107.31) — (107.41) для элемента $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ группы $\mathfrak{G}(k_0)$ получаем

$$\begin{aligned}P_{\{\varphi\,|\,t\}} \left(\xi \cdot (\nabla_k D(k))_{k_0}\right) P^{-1}_{\{\varphi\,|\,t\}} &= \\ = \left(\xi \cdot \varphi^{-1} \cdot (\nabla_k D(k))_{k_0}\right) &= \left(\varphi \cdot \xi \cdot (\nabla_k \cdot D(k))_{k_0}\right).\end{aligned} \tag{107.42}$$

Мы заключаем, что под действием операции симметрии из $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$ три компоненты скалярного произведения

$$\xi \cdot (\nabla_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}))_{\boldsymbol{k}_0} \tag{107.43}$$

преобразуются как компоненты обычного полярного вектора. В компонентах (107.42) имеет вид

$$P_{\{\varphi \mid t\}} (\xi \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}))_{\boldsymbol{k}_0} P^{-1}_{\{\varphi \mid t\}} = \sum_{\gamma\delta} \xi_\gamma (\varphi^{-1})_{\delta\gamma} \left[\left(\frac{\partial}{\partial k_\delta} \right) \boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}) \right]_{\boldsymbol{k}_0}. \tag{107.44}$$

Нужно учитывать, что теперь «поворот» φ действует на декартовы компоненты градиента $\nabla_{\boldsymbol{k}}$. В нашем рассмотрении мы смогли перенести действие оператора на функцию от $\boldsymbol{k}$. Эта процедура аналогична выполненной в (30.1)—(30.10) при рассмотрении блоховских векторов (функций). Таким образом, $(3s)^2$ компонент $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k})$ остаются неизменными, и при вычислении скалярного произведения (107.28) их после умножения на собственные векторы $\boldsymbol{e}\left(\begin{array}{c|} \boldsymbol{k}_0 \\ j_\sigma \end{array} \right)$ и $\boldsymbol{e}\left(\begin{array}{c|} \boldsymbol{k}_0 \\ j_\nu \end{array} \right)$ просто просуммировать.

Этот результат можно записать удобным способом, если обозначить преобразование оператора типа (106.18) следующим образом:

$$(\xi \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}))_{\boldsymbol{k}_0} \sim D^{(r)} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \alpha \end{pmatrix}, \tag{107.45}$$

где $D^{(r)} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_0 \\ \alpha \end{pmatrix}$ — представление, по которому преобразуются три компоненты полярного вектора $\boldsymbol{r}$ под действием поворотов из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$. Другими словами, если рассматривать повороты φ, относящиеся к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$ или $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$, то оператор, стоящий слева в (107.45), преобразуется под действием этих поворотов как обычный вектор.

Следовательно, можно применить (106.20) и (106.21), т. е. чтобы убедиться в обращении в нуль матричных элементов (107.28), достаточно получить коэффициенты приведения, соответствующие (107.28). В обозначениях рассматриваемой подгруппы они имеют вид

$$(\boldsymbol{k}_0 j_\sigma \mid \boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{k}_0 j_\nu). \tag{107.46}$$

Как всегда, при этом важно установить, что базис, соответствующий произведению, является полным.

Этому результату соответствует простое правило. Достаточным условием существования критической точки функции распределения частот при $\boldsymbol{k}_0$ является обращение в нуль коэффициента приведения (107.46) и, следовательно, отсутствие какого-либо линейного члена в ряде теории возмущений (107.21), (107.22). Другими словами, можно сказать, что мы выполняем приведение прямого произведения

$$D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)*} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_0)(r)} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}, \tag{107.47}$$

чтобы установить, содержит ли оно единичное представление. Так как производная зависит только от свойств одной ветви (т. е. от ее симметрии и топологии), одно и то же представление $D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}$ возникает в (107.47) в двух сомножителях. Если $D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}$ вещественно, то (107.47) можно записать в форме

$$[D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}]_{(2)} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_0)(r)}, \tag{107.48}$$

имеющей вид произведения симметризованного квадрата $D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}$ на $D^{(\boldsymbol{k}_0)(r)}$.

Такое же рассуждение можно использовать для проверки того, обращаются ли в нуль одна или две компоненты оператора градиента. Так, чтобы установить обращение в нуль δ-компоненты (например, k_x) $\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j)$ при $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$, нужно исследовать поведение x-компоненты оператора (107.30). В этом случае вместо (107.47) будем иметь произведение

$$D^{(\boldsymbol{k}_0)(\sigma)*} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_0)(r)} \otimes D^{(\boldsymbol{k}_0)(\nu)}, \tag{107.49}$$

являющееся произведением симметризованного квадрата $D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}$ на компоненту $(D^{(\boldsymbol{k}_0)(r)})_\delta$. Заметим, что в группах $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$ с точечной симметрией ниже кубической O_h различные компоненты полярного вектора $\boldsymbol{r}$ могут преобразовываться по разным неприводимым представлениям.

Проверка (107.47) и (107.49) для каждой конкретной интересующей нас ветви по всей зоне Бриллюэна позволяет установить значения $\boldsymbol{k}$, в которых может быть критическая точка. Для каждой такой точки можно установить, является ли она точкой минимума, максимума или седловой точкой. Это можно установить, определяя обращающиеся в этой точке в нуль компоненты градиента. Тип и индекс критической точки определяются характером сингулярности плотности состояний для фононного распределения вблизи критической точки. Эта классификация обсуждается в работах [8, 63, 85].

В заключение напомним, что наше рассмотрение позволяет установить только критические точки, обусловленные симметрией. Остальные, случайные, критические точки возникают из конкретного хода фононных дисперсионных кривых, обусловленного видом силовых постоянных для данного кристалла. Такие динамические критические точки из соображений симметрии найти нельзя. Однако одновременно с критическими точками, обусловленными симметрией, они тоже должны удовлетворять всем соотношениям Морса.

б. Определение возможных критических точек по точечной симметрии. В предыдущем пункте мы убедились в том, что достаточным условием существования нулевого наклона или критической точки при $\boldsymbol{k}_0$ для поверхности с симметрией $D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)}$ является обращение в нуль коэффициентов приведения подгруппы (107.46). Порядок вычислений для конкретного кристалла при этом ясен. Нужно исследовать коэффициенты приведения для всех точек зоны Бриллюэна и для всех возможных допустимых неприводимых представлений, соответствующих конкретной симметрии фононов данного кристалла, т. е. следует проверить весь набор коэффициентов приведения.

В принципе это довольно трудоемкая задача. Чтобы сократить работу, нужно выяснить, нельзя ли рассматривать в зоне Бриллюэна только некоторые определенные точки $\boldsymbol{k}_0$. Чтобы разобраться в этом вопросе, мы сформулируем задачу иначе [88]. Напомним, что из (107.1) следует, что физические собственные частоты $\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)$ при $\boldsymbol{k}_0$ являются собственными значениями динамической матрицы

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]. \tag{107.50}$$

Далее, из (79.16), (79.17) мы знаем, что унитарная матрица $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)$, строки и столбцы которой являются собственными векторами $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]$, приводит $[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]$ к диагональному виду. Поэтому воспользуемся соотношением (79.16):

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)^{-1}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)=\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}_0). \tag{107.51}$$

Возьмем след от обеих частей матричного уравнения (107.51). Так как след матрицы инвариантен при унитарных преобразованиях, получим

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}\,[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)] &= \mathrm{Sp}\,\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}_0)=\\ &=\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)+\ \dots\ +\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j_m)=\\ &=\sum_j c_j l_j\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)\equiv f(\boldsymbol{k}_0),\end{aligned} \tag{107.52}$$

где c_j — число собственных значений $\omega^2(\boldsymbol{k}_0|j)$ и l_j — кратность вырождения (если случайного вырождения нет, то $c_j=1$). Здесь важно, что стоящая в (107.52) сумма является скалярной функцией волнового вектора $\boldsymbol{k}_0$. Ниже мы будем считать $c_j=1$.

Вернемся к соотношению (107.51) и перепишем его в виде

$$[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)=\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}_0). \tag{107.53}$$

Рассмотрим теперь оператор преобразования $P_{\{\varphi_0\}}$ из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$. Применим его к (107.53):

$$P_{\{\varphi_0\}}[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]P_{\{\varphi_0\}}^{-1}\cdot P_{\{\varphi_0\}}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)=P_{\{\varphi_0\}}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{k}_0). \tag{107.54}$$

Из (83.5) мы видим, что каждый собственный вектор (столбец) в $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)$ может служить базисом допустимого неприводимого представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$. Следовательно, действие оператора $P_{\{\varphi_0\}}$ на $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0)$ дает $(3r \times 3r)$-мерную матрицу $D(\{\varphi_0\})$, которая получается уже в полностью приведенной форме

$$P_{\{\varphi_0\}}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0) = D(\{\varphi_0\})\,\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}_0), \tag{107.55}$$

где

$$D(\{\varphi_0\}) = \begin{pmatrix} D^{(\boldsymbol{k}_0)(1)} & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & D^{(\boldsymbol{k}_0)(j')} & & 0 \\ 0 & & 0 & & D^{(\boldsymbol{k}_0)(j)} \end{pmatrix}. \tag{107.56}$$

Но из (81.26) имеем (если пока не учитывать, что $\varphi_0 \cdot \boldsymbol{k}_0 \doteqdot \boldsymbol{k}_0$):

$$P_{\{\varphi_0\}}\,[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}_0)]\,P_{\{\varphi_0\}}^{-1} = [\boldsymbol{D}(\{\varphi_0\}\cdot \boldsymbol{k}_0)]. \tag{107.57}$$

Из (107.55) — (107.57) мы можем получить

$$\Delta(\boldsymbol{k}_0) = D^{-1}(\{\varphi_0\})\,[\boldsymbol{D}(\{\varphi_0\}\cdot \boldsymbol{k}_0)]\cdot D(\{\varphi_0\}). \tag{107.58}$$

Используя унитарность $D(\{\varphi_0\})$ (это прямая сумма унитарных матриц) и беря след от обеих сторон равенства (107.58), получим

$$\mathrm{Sp}\,\Delta(\boldsymbol{k}_0) = \mathrm{Sp}\,\boldsymbol{D}(\{\varphi_0\}\,\boldsymbol{k}_0) = \mathrm{Sp}\,\Delta(\{\varphi_0\}\cdot \boldsymbol{k}_0) \tag{107.59}$$

или, вводя обозначения из (107.52), получаем для всех $\{\varphi_0\}$

$$f(\boldsymbol{k}_0) = f(\{\varphi_0\}\cdot \boldsymbol{k}_0). \tag{107.60}$$

Так как $\{\varphi_0\}$ относится к группе $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$, то (107.60) по очевидным причинам тоже относится к $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$. Чтобы установить, является ли $\boldsymbol{k}_0$ вероятной критической точкой, можно воспользоваться выражением (107.60), представляющим собой скалярную функцию $\boldsymbol{k}_0$.

Если бы $\boldsymbol{k}_0$ не оказалось критической точкой, то какой-либо из квадратов частот (независимо от того, какой конкретно) имел бы в разложении вблизи $\boldsymbol{k}_0$ линейные члены

$$\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j) = \omega^2(\boldsymbol{k}_0\,|\,j) + (\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega^2(\boldsymbol{k}\,|\,j))|_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0). \tag{107.61}$$

Соответственно в окрестности такой точки скалярную функцию $f(\boldsymbol{k})$ можно было бы представить в виде

$$f(\boldsymbol{k}) = f(\boldsymbol{k}_0) + (\nabla f)(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0). \tag{107.62}$$

Однако в точке $\boldsymbol{k}_0$ (107.60) должно выполняться для всех $\{\varphi_0\}$ из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$.

Изменим теперь порядок рассуждений. Возьмем $\boldsymbol{k}_0$ за начало координат. Тогда, чтобы элемент симметрии $\{\varphi_0\}$ из группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)$ был совместим с наличием линейного члена в разложении функции $f(\boldsymbol{k})$, этот элемент должен оставлять инвариантным

(107.62). Но волновой вектор $\boldsymbol{k}$ преобразуется при поворотах как обычный полярный вектор (x, y, z). Следовательно, совместными с (107.62) оказываются только те повороты $\{\varphi_0\}$, которые оставляют инвариантным $\boldsymbol{k}$.

Отсюда мы получаем правило: только те точечные группы являются разрешенными в $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k}_0)/\mathfrak{T}$, для которых содержащиеся в них вращения *не* оставляют $\boldsymbol{k}_0$ инвариантным:

$$\{\varphi_0\} \cdot \boldsymbol{k}_0 = \varphi_0 \cdot \boldsymbol{k}_0 \neq \boldsymbol{k}_0. \tag{107.63}$$

Это соотношение накладывает ограничение одновременно и на волновой вектор $\boldsymbol{k}_0$, и на возможные повороты $\{\varphi_0\}$, т. е. на возможные критические точки.

Например, пусть φ_0 есть $\boldsymbol{i}$ (инверсия). Но наличие инверсии в группе $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$ несовместимо с линейным членом в (107.62). Для точечных групп, не содержащих инверсии $\boldsymbol{i}$, необходимо проверить преобразование компонент (x, y, z) под действием поворота из $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$. Если либо x, либо y, либо z остается инвариантным при всех операциях φ_0 из $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$ (с осями, выбранными любым удобным способом), то $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$ совместно с наличием линейного члена в (107.62) и $\boldsymbol{k}_0$ не может быть критической точкой. Естественно, это только вопрос проверки: легче всего выяснить с помощью существующих таблиц неприводимых представлений кристаллографических точечных групп в трех измерениях, преобразуется ли хоть одна из компонент вектора по единичному представлению рассматриваемой группы $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$.

Тогда видно, что точечными группами $\mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0)$, допускающими существование критических точек, являются

$$\text{любые группы } \mathfrak{P}(\boldsymbol{k}_0), \text{ содержащие } \boldsymbol{i}, \tag{107.64}$$

и, кроме того,

$$\begin{gathered}\text{группы } T_d,\ O,\ T,\ D_{2d},\ D_{3h},\ D_n,\ S_4,\ C_{3h} \\ \text{и их подгруппы } D_3,\ D_2,\ S_4,\ C_{3h}.\end{gathered} \tag{107.65}$$

Все группы, перечисленные в (107.64) и (107.65), несовместны с линейным членом в (107.62) и, таким образом, могут быть группами точечной симметрии в критической точке.

Легко видеть, что можно ограничиться рассмотрением только унитарных операций: учет антиунитарных операций (т. е. учет полной пространственно-временной группы) не изменяет результатов (107.64) и (107.65).

При любых применениях этих рассуждений, чтобы установить, на какой ветви при заданном $\boldsymbol{k}_0$ лежит критическая точка, необходимо возвратиться к рассмотрению предыдущего пункта. Легко убедиться, что данное рассмотрение находится в полном соответствии с рассмотрением предыдущего пункта. Используя только скалярный инвариант $f(\boldsymbol{k}_0)$, определенный в (107.62), можно предварительно установить возможную критическую точку: для кристаллов с пространственной группой высокой симметрии этим можно заметно сократить работу, необходимую для установления полного набора критических точек, обусловленных симметрией.

§ 108. Теория совместности представлений

Одновременно с симметрией и расположением критических точек должен рассматриваться вопрос о совместности представлений. Мы имеем в виду анализ того, как следует классифицировать представления, когда мы непрерывным образом переходим от точки, линии или плоскости более высокой симметрии к точке, линии или плоскости более низкой симметрии.

Рассмотрим точку $\boldsymbol{k}$ более высокой симметрии: она характеризуется пространственно-временной группой $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$. Неприводимые представления $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}$ и $D^{(\mathrm{co}\,^{\star}\boldsymbol{k})(j)}$ описывают возможные преобразования физических собственных векторов $e\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$.

Пусть $\boldsymbol{k}'$ — точка, близкая к $\boldsymbol{k}$. При переходе от $\boldsymbol{k}$ к $\boldsymbol{k}'$ пространственно-временная группа $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ может понизиться по симметрии до $\mathcal{G}(\boldsymbol{k}')$. Очевидно, если это имеет место, то

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{k}') \text{ является подгруппой } \mathcal{G}(\boldsymbol{k}). \tag{108.1}$$

Тогда для копредставлений мы получаем, что представление $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(l)}$ группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$, ограниченное на группу $\mathcal{G}(\boldsymbol{k}')$, оказывается приводимым. Другими словами, представление $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}$, рассматриваемое как копредставление группы $\mathcal{G}(\boldsymbol{k}')$, является приводимым:

$$D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(l)} \text{ из } \mathcal{G}(\boldsymbol{k})\downarrow = D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}')(l'_1)} + \ldots + D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}')(l'_\nu)} \text{ из } \mathcal{G}(\boldsymbol{k}'). \tag{108.2}$$

Представления $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}')(l'_1)}, \ldots, D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k}')(l'_\nu)}$ называются совместными с представлением $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(l)}$ или связанными с ним. Таким образом, если мы движемся от точки $\boldsymbol{k}$ к $\boldsymbol{k}'$ и симметрия при этом понижается, то копредставления могут расщепляться на сумму представлений меньшей размерности.

Наоборот, при переходе от более низкой симметрии $\mathcal{G}(\boldsymbol{k}')$ к более высокой симметрии $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$ представления в правой части (108.2) объединяются и дают $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(l)}$. Этот случай относится к теореме взаимности Фробениуса, так как представление $D^{(\mathrm{co}\,^{\star}\boldsymbol{k})(l)}$ можно рассматривать как индуцированное из любого из представлений справа в (108.2), если нам дано разложение по представителям смежных классов:

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{k}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{k}') + \{\varphi|\tau\}\mathcal{G}(\boldsymbol{k}') + \ldots . \tag{108.3}$$

Подведем итог. Совместность представлений является полностью разрешимой проблемой, требующей знания групп $\mathcal{G}(\boldsymbol{k})$, $\mathcal{G}(\boldsymbol{k}')$ во всех точках (в частности, в соседних точках) зоны Бриллюэна. При каждом значении $\boldsymbol{k}$ все физические собственные векторы $\boldsymbol{e}\left(\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)$ известны и полный набор всех копредставлений $D^{(\mathrm{co}\,\boldsymbol{k})(j)}$ известен тоже. Тогда, используя процедуру ограничения (108.2), мы можем установить совместность представлений группы более низкой симметрии с представлениями группы более высокой симметрии. Эта процедура используется в т. 2, § 18.

На практике при идентификации ветвей на основе теоретико-групповых соображений могут возникнуть трудности, так как некоторые ограниченные представления могут встретиться в (108.2) несколько раз. Однако, используя наряду с теоретико-групповым анализом симметрии собственных векторов также результаты решения динамической задачи, позволяющие получить относительное упорядочение собственных векторов, можно полностью решить проблему идентификации ветвей.

§ 109. Построение кристаллических инвариантов

В квантовой теории кристаллической решетки, в частности при рассмотрении оптических свойств, существенную роль играют различные физические величины, которые зависят от смещений ионов из их положений равновесия. Мы рассмотрим здесь три характерные величины: V — потенциальную энергию кристалла; $\boldsymbol{M}$ — электрический момент кристалла; $\boldsymbol{P}$ — поляризуемость кристалла. Это типичные инвариантные и ковариантные величины, свойства преобразования которых мы изучим. В динамической теории эти величины или связанные с ними квантовомеханические величины используются непосредственно при получении количественных выражений для коэффициента инфракрасного поглощения или сечения комбинационного рассеяния света. Обсуждение использования этих величин в такой теории приведено ниже в § 120, а также в работах [8, 67]. Здесь мы изучим возможность получения максимальной информации об этих инвариантных и ковариантных кристаллических величинах с помощью группы пространственной симметрии $\mathfrak{G}$. В этом параграфе кристаллические инварианты обсуждаются только на основании теории представлений, т. е. рассматривается действие только унитарной группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$.

В качестве типичного инварианта рассмотрим потенциальную энергию кристаллической решетки Φ. Для удобства повторим некоторые из результатов, изложенных в § 71. Величина Φ, очевидно, является функцией совокупности мгновенных положений ионов в решетке

$$\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} + \boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим элемент $P_{\{\varphi\}}$ группы $\mathfrak{G}$. По определению элементами группы $\mathfrak{G}$ являются те преобразования конфигурационного пространства, которые переводят кристалл в его реплику в предположении, что все ионы в кристалле покоятся. Говоря математическим языком, преобразование определяет внутренний автоморфизм множества атомов, составляющих кристалл. Запишем теперь кристаллическую потенциальную энергию Φ для случая, когда все атомы находятся в своих мгновенных положениях $\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$:

$$\Phi\left(\left\{\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right). \tag{109.1}$$

Под действием преобразования симметрии $P_{\{\varphi\mid t\}}$ группы $\mathfrak{G}$ каждый вектор $\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ преобразуется следующим образом:

$$P_{\{\varphi\mid t\}}\rho_\alpha\begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} + t \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} + t \end{pmatrix} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}\rho_\beta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{109.2}$$

Так, атом, первоначально находившийся в положении $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, переходит в положение $\begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} + t \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} + t \end{pmatrix}$, повернутое и транслированное под действием оператора симметрии. Кроме того, смещение в этой преобразованной точке является повернутым смещением $\varphi\cdot\boldsymbol{u}$. Таким образом, совокупность мгновенных положений атомов $\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ преобразуется в совокупность мгновенных положений $P_{\{\varphi\}}\rho \equiv \rho_{\{\varphi\}}$. Как обычно,

$$\rho_{\{\varphi\}_\alpha}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}\rho_\beta\begin{pmatrix} l_{\bar{\varphi}} \\ \varkappa_{\bar{\varphi}} \end{pmatrix}, \tag{109.3}$$

так что мгновенное положение атома в узле $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ после преобразования содержит повернутое смещение, которое раньше было в узле $\begin{pmatrix} l_\Phi \\ \varkappa_\Phi \end{pmatrix}$. С другой стороны, это преобразование можно рассматривать как преобразование к повернутой системе координат, связанной с исходной системой координат операцией $\{\varphi|\boldsymbol{t}\}^{-1}$. В этой повернутой системе координат рассматривается весь кристалл, в котором все атомы занимают свои мгновенные положения. Очевидно, потенциальная энергия не зависит от способа описания. Определим преобразованную потенциальную энергию, т. е. потенциальную энергию после преобразования мгновенных положений, как $\Phi' = P_{\{\varphi\}}\Phi$. Тогда по определению имеем

$$P_{\{\varphi\}}\Phi\left(\{\rho_{\{\varphi\}}\}\right) = \Phi\left(\{\rho\}\right). \qquad (109.4)$$

Но если $P_{\{\varphi\}}$ — оператор симметрии, то по предположению наборы мгновенных значений $\{\rho\}$ и $\{\rho_{\{\varphi\}}\}$ эквивалентны, так что значения потенциальной энергии до и после преобразования одинаковы:

$$\Phi\left(\{\rho\}\right) = \Phi\left(\{\rho_{\{\varphi\}}\}\right). \qquad (109.5\text{а})$$

Сравнивая (109.5а) и (109.4), получаем, что потенциальная энергия инвариантна:

$$P_{\{\varphi\}}\Phi = \Phi. \qquad (109.5\text{б})$$

Очевидно, (109.5а) и (109.5б) применимы для любой операции из группы $\mathfrak{G}$. Таким образом, рассматриваемая как обобщенная функция пространственных переменных, на которые действует в конфигурационном пространстве оператор $P_{\{\varphi\}}$, потенциальная энергия Φ преобразуется по единичному представлению, т. е. по представлению, для которого все элементы группы $\mathfrak{G}$ представлены числом $+1$. Для удобства обозначим единичное представление как $(\boldsymbol{\Gamma})\,(1+)$. При рассмотрении кубических групп ниже мы увидим, что для единичного представления употребляется символ $(\boldsymbol{\Gamma})\,(+1)$. Как правило, $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{\Gamma} = (0,\ 0,\ 0)$ обозначает нулевой вектор в зоне Бриллюэна, а $m = 1+$ удобный символ для единичного представления группы $\mathfrak{G}(\boldsymbol{\Gamma})$. Таким образом, (109.5а) и (109.5б) можно переписать в виде

$$P_{\{\varphi\}}\Phi = D^{(\boldsymbol{\Gamma})\,(1+)}\left(\{\varphi\}\right)\Phi \qquad (109.6\text{а})$$

или

$$\Phi \sim D^{(\boldsymbol{\Gamma})\,(1+)}. \qquad (109.6\text{б})$$

Выделим теперь в аргументе Φ положение равновесия атомов $\left\{\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}$ и попытаемся представить Φ в виде степенного ряда по смещениям $\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Мы уже делали такое разложение в

(67.8) вплоть до квадратичных членов по $\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Рассмотрим теперь более полное разложение

$$\Phi\left(\left\{\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) = \Phi^{(0)} + \Phi^{(2)} + \Phi^{(3)} + \Phi^{(4)} + \ldots + \Phi^{(s)} + \ldots, \tag{109.7}$$

где для равновесного кристалла, в котором атомы находятся в положениях равновесия, так что $\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}_0 = \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, $\Phi^{(1)} = 0$. Снова образуем разность

$$V = \Phi\left(\left\{\rho\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) - \Phi^{(0)}, \tag{109.8}$$

которая будет суммой однородных функций разных степеней относительно компонент смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Например, величина

$$\Phi^{(3)} = \frac{1}{6}\sum_{l\varkappa\alpha}\sum_{l'\varkappa'\beta}\sum_{l''\varkappa''\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} u_\gamma\begin{pmatrix} l'' \\ \varkappa'' \end{pmatrix} \tag{109.9}$$

является однородной функцией третьей степени относительно компонент. Мы только что установили, что Φ является инвариантом в смысле (109.6). Так как ни одно из преобразований не может смешивать различные степени в (109.7), каждое слагаемое в разложении должно быть инвариантом. Применим теперь преобразование $P_{\{\varphi\}}$ группы $\mathfrak{G}$. Если выразим член третьей степени в потенциальной энергии $\Phi^{(3)}$ через компоненты преобразованных смещений $\boldsymbol{u}_{\{\varphi\}}$, мы можем написать для $\Phi^{(3)}$

$$\Phi^{(3)} = \frac{1}{6}\sum_{l_\varphi\varkappa_\varphi\bar{\alpha}}\sum_{l'_\varphi\varkappa'_\varphi\bar{\beta}}\sum_{l''_\varphi\varkappa''_\varphi\bar{\gamma}}\Phi'_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix}\times$$

$$\times (u_{\{\varphi\}})_{\bar{\alpha}}\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix}(u_{\{\varphi\}})_{\bar{\beta}}\begin{pmatrix} l'_\varphi \\ \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}(u_{\{\varphi\}})_{\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l''_\varphi \\ \varkappa''_\varphi \end{pmatrix}. \tag{109.10}$$

Мы ввели здесь новое обозначение Φ', чтобы учесть возможную новую функциональную форму коэффициента разложения $\Phi^{(3)}$, возникающую при преобразовании к повернутым переменным $u_{\{\varphi\}}$. Повторяя рассуждения (71.1)—(71.10), получаем

$$\Phi'_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta\gamma}\varphi_{\bar{\alpha}\alpha}\varphi_{\bar{\beta}\beta}\varphi_{\bar{\gamma}\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}, \tag{109.11}$$

так что компоненты $\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}$ преобразуются при поворотах как компоненты поля тензора третьего ранга. По предположению $P_{\{\varphi\}}$ — преобразование симметрии, поэтому форма функции не должна меняться при этом преобразовании:

$$\Phi'_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}$$

или, меняя обозначения аргументов,

$$\Phi'_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix}. \qquad (109.12)$$

Соотношение (109.12) кратко выражает свойство инвариантности этого тензорного поля [ср. (109.6)]. Из (109.11), (109.12) получим соотношение, дающее правило преобразования силовых постоянных в члене третьего порядка при преобразованиях поворота:

$$\Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta\gamma} \varphi_{\bar{\alpha}\alpha}\varphi_{\bar{\beta}\beta}\varphi_{\bar{\gamma}\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix}. \qquad (109.13)$$

Запишем матрицу, осуществляющую поворот вектора $\boldsymbol{r}$ согласно группе $\mathfrak{G}$:

$$D^{(r)}(\{\varphi\})_{\bar{\alpha}\alpha} \equiv \varphi_{\bar{\alpha}\alpha}. \qquad (109.14)$$

Очевидно, (109.13) тогда можно записать в виде

$$\Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta\gamma} D(\{\varphi\})_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma};\ \alpha\beta\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}, \qquad (109.15)$$

где

$$D(\{\varphi\})_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma};\ \alpha\beta\gamma} \equiv \varphi_{\bar{\alpha}\alpha}\varphi_{\bar{\beta}\beta}\varphi_{\bar{\gamma}\gamma} \qquad (109.16)$$

есть матричный элемент прямого произведения матриц общего типа, являющегося кубом представления, по которому преобразуется полярный вектор:

$$D(\{\varphi\}) \equiv D^{(r)} \otimes D^{(r)} \otimes D^{(r)} = [D^{(r)}]_3. \qquad (109.17)$$

Следовательно, отсюда имеем

$$\Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}}\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi & l''_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi & \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta\gamma} ([D^{(r)}]_3)_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma};\ \alpha\beta\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}. \qquad (109.18)$$

Если элемент симметрии $P_{(\varphi|t)}$ не меняет $\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} l'' \\ \varkappa'' \end{pmatrix}$, так что $\begin{pmatrix} l_\varphi \\ \varkappa_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} l'_\varphi \\ \varkappa'_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} l''_\varphi \\ \varkappa''_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l'' \\ \varkappa'' \end{pmatrix}$, то (109.18) ограничивает число независимых отличных от нуля силовых постоянных третьего порядка. Из (109.18) мы сразу видим, что силовые постоянные третьего порядка, определенные в (109.9), преобразуются при поворотах как элементы тензора третьего ранга в декартовых координатах, который вследствие симметрии является инвариантом.

а. Гамильтониан кристалла в гармоническом и ангармоническом приближении. Чтобы выполнить квантование в динамике колебаний решетки, необходимо записать гамильтониан системы. Возвращаясь к § 67, мы можем выполнить это.

Динамическими переменными в задаче динамики решетки являются $3rN$ декартовых компонент смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, $\alpha = 1, 2, 3$; $l = 1, \ldots, N$; $\varkappa = 1, \ldots, r$. Кинетическая энергия решетки равна

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\varkappa\alpha} M_\varkappa \left(\dot{u}_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \right)^2. \qquad (109.19)$$

С точностью до константы в гармоническом приближении потенциальная энергия решетки равна

$$V = \frac{1}{2} \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_{l'\varkappa'\beta} u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} u_\beta \begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \qquad (109.20)$$

Пользуясь известным правилом преобразования от смещений в декартовых координатах к комплексным нормальным координатам $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$, уравнением динамики и соотношениями ортогональности для собственных векторов $\boldsymbol{e}\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right)$, получим следующее выражение для кинетической энергии:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{j} \dot{Q} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}^* \dot{Q} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}. \qquad (109.21)$$

Для потенциальной энергии аналогично (80.3) имеем

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{j} \omega^2 (\boldsymbol{k} \mid j)\, Q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}^* Q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}. \qquad (109.22)$$

Из (109.20) и (109.21) видно, что, так как $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$ — комплексные координаты, энергия не является просто суммой квадратов.

Гамильтониан кристаллической решетки равен

$$\mathscr{H} = T + V \tag{109.23}$$

и, очевидно, является билинейной эрмитовой формой комплексных динамических переменных $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$. Записывая (109.23) с помощью (109.21) и (109.22) и добавляя, как всегда, для учета вырождения индекс ветви, получим

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\sigma=1}^{s} \sum_{\mu=1}^{l_m} \sum_{j} \left\{ \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^* \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} + \omega^2 (\boldsymbol{k}_\sigma \,|\, j)\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^* Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} \right\}. \tag{109.24}$$

Здесь сумма по j_μ фактически сводится к сумме по представлениям, которые соответствуют симметрии колебаний решетки.

Полезно удостовериться в том, что (109.24) инвариантно при преобразованиях симметрии пространственно-временно́й группы кристалла $\mathscr{G}$. Очевидно, $\mathscr{H}$ инвариантно по отношению к операции обращения времени, эквивалентной комплексному сопряжению:

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^* = K \mathscr{H} K^{-1}, \tag{109.25}$$

где в последнем равенстве видно, что $\mathscr{H}$ — оператор. Мы можем затем исследовать, как преобразуется $\mathscr{H}$ под действием пространственных унитарных преобразований группы $\mathfrak{G}$.

Согласно § 86, нормальные координаты $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\alpha \end{pmatrix}$ преобразуются неприводимым образом при действии операций из группы $\mathfrak{G}$. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением одного неприводимого представления. Таким образом, возьмем

$$\mathscr{H}_j = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mu=1}^{l_j} \left\{ \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^* + \omega^2 (\boldsymbol{k}_\sigma \,|\, j)\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^* \right\}. \tag{109.26}$$

Так как мы рассматриваем единственное неприводимое представление, суммирование по всем волновым векторам отсутствует. Преобразуем нормальную координату с помощью оператора симметрии; тогда, производя незначительные изменения согласно (86.30), имеем

$$P_{\{\varphi \,|\, t\}} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} = \sum_{\nu\sigma'} D^{(^*\boldsymbol{k})(j)} (\{\varphi \,|\, \boldsymbol{t}\})_{\nu\sigma',\, \mu\sigma}\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}'_{\sigma'} \\ j_\nu \end{pmatrix} \equiv Q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}. \tag{109.27}$$

Если (109.27) подставить в (109.26), то мы получим гамильтониан в штрихованных переменных

$$\mathscr{H}_j(\{\dot{Q}'\}, \{Q'\}) = \mathscr{H}_j(\{P_{\{\varphi\,|\,t\}}\dot{Q}\}, \{P_{\{\varphi\,|\,t\}}Q\}). \qquad (109.28)$$

Написав $\boldsymbol{k}_\sigma$ справа в (109.27), мы учитываем возможность того, что $P_{\{\varphi\,|\,t\}}$ не входит в группу $\mathfrak{G}(\boldsymbol{k})$. Тогда квадратичная форма (109.26) преобразуется к виду

$$\mathscr{H}_j = \frac{1}{2}\sum_{\sigma}\sum_{\mu}\sum_{\nu'}\sum_{\sigma'}\sum_{\nu''}\sum_{\sigma''} D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{\sigma''\nu''\sigma\mu}\, D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})^*_{\sigma'\nu'\sigma\mu} \times$$
$$\times \left\{ \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_{\sigma'} \\ j_{\nu'} \end{pmatrix}^* \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_{\sigma''} \\ j_{\nu''} \end{pmatrix} + \omega^2(\boldsymbol{k}_\sigma\,|\,j)\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_{\sigma'} \\ j_{\nu'} \end{pmatrix}^* Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_{\sigma''} \\ j_{\nu''} \end{pmatrix} \right\}. \qquad (109.29)$$

По предположению представление $D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}$ является унитарным. Отсюда

$$\left(D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\right)^+ = \left(D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\right)^{-1} \qquad (109.30)$$

или

$$\left(D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\right)^* = \left(\widetilde{D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}}\right)^{-1}. \qquad (109.31)$$

В матричных элементах это соотношение имеет вид

$$\left(D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\right)^*_{\mu\nu} = \left(D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\right)^{-1}_{\nu\mu} \qquad (109.32)$$

или

$$D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{\sigma'\nu'\sigma\mu} = D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\left(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1}\right)_{\sigma\mu\sigma'\nu'}. \qquad (109.33)$$

Отсюда сумму по μ и σ в (109.29) можно записать в виде

$$\sum_{\sigma}\sum_{\mu} D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{\sigma''\nu''\sigma\mu}\, D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\left(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1}\right)_{\sigma\mu\sigma'\nu'} =$$
$$= D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}\left(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}\,\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}^{-1}\right)_{\sigma''\nu''\sigma'\nu'} =$$
$$= D^{(\star\boldsymbol{k})(j)}(\{\varepsilon\,|\,0\})_{\sigma''\nu''\sigma'\nu'} = \delta_{\nu''\nu'}\Delta(\boldsymbol{k}_{\sigma'} - \boldsymbol{k}_{\sigma''}). \qquad (109.34)$$

Тогда для (109.29) получим

$$\mathscr{H}_j = \frac{1}{2}\sum_{j\mu\tau}\left\{ \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\mu \end{pmatrix}^* \dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\mu \end{pmatrix} + \omega^2(\boldsymbol{k}_\tau\,|\,j)\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\mu \end{pmatrix}^* Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\mu \end{pmatrix} \right\}. \qquad (109.35)$$

В качестве следующего шага мы можем просуммировать по всем колебательным ветвям j, которые входят в (109.24). Таким образом, мы убедились в том, что гамильтониан при действии операций симметрии ведет себя как скалярный инвариант.

Наше доказательство инвариантности $\mathscr{H}$ хотя и полезное, не является полным. Оно должно следовать из явного вида $\mathscr{H}$ и иметь физические причины. Напомним теорему, согласно которой для конечных групп можно построить эрмитов квадратичный инвариант по заданным неприводимым представлениям единственным образом, а именно в форме билинейного произведения базисных векторов самих на себя (эрмитова квадратичная форма), откуда следует, что (109.24) должно быть скаляром. Этим свойством мы воспользуемся в § 116, так что важно доказать его здесь.

Чтобы выйти за рамки гармонического приближения, нужно включить ангармонический потенциал (109.9) в $\mathscr{H}$. Таким образом, полный классический гамильтониан решетки равен

$$\mathscr{H}_{\text{полн}} = \mathscr{H} + V_A, \tag{109.36}$$

где

$$V_A = \Phi^{(3)} + \ldots + \Phi^{(s)} + \ldots. \tag{109.37}$$

Ряд (109.37) состоит из суммы членов, имеющих вид соответствующим образом симметризованных степеней нормальных координат. Он должен удовлетворять всем требованиям симметрии в проблеме динамики решетки. После небольшого отступления мы вернемся к его обсуждению.

б. Силовые постоянные. При конкретных вычислениях частот фононов в динамике решетки часто интересуются получением выражения для потенциальной энергии кристалла V через минимальный набор неизвестных силовых постоянных в выражениях для $\Phi^{(2)}$, как это видно, например, из (67.8). При этом потенциальную энергию V нужно выразить в виде обрезанного разложения, содержащего конечное число членов в сумме (67.8). Обсудим теперь кратко применение симметрии для определения этих силовых постоянных (см., например, [6], стр. 286—288).

Рассмотрим использование преобразований симметрии для анализа члена второго порядка (гармонического члена):

$$\Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l_{\tau} & l'_{\varphi} \\ \varkappa_{\varphi} & \varkappa'_{\varphi} \end{pmatrix} = \sum_{\alpha'\beta'} \varphi_{\alpha\alpha'}\varphi_{\beta\beta'}\Phi_{\alpha'\beta'}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}, \tag{109.38}$$

где в качестве $P_{\{\varphi\}}$ взят оператор кристаллической симметрии, поворотная часть которого равна φ. Рассмотрим теперь совокупность операций в группе $\mathfrak{G}$, которые оставляют инвариантным

$$\boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} - \boldsymbol{r}\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \tag{109.39}$$

Эта совокупность образует подгруппу группы $\mathfrak{G}$. В симморфных группах эта подгруппа является подгруппой группы $\mathfrak{P}$, т. е. точечной группы кристалла. Пусть эта подгруппа $\mathfrak{G}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ определена так, что для любого элемента φ_λ этой группы имеем

$$\varphi_\lambda \cdot \left(r\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} - r\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} \right) = r\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} - r\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \qquad (109.40)$$

Тогда для любого элемента φ_λ этой группы:

$$\Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}\begin{pmatrix} l_{\varphi_\lambda} & l'_{\varphi_\lambda} \\ \varkappa_{\varphi_\lambda} & \varkappa'_{\varphi_\lambda} \end{pmatrix} = \Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} \qquad (109.41)$$

или

$$\Phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta} (\varphi_\lambda)_{\bar{\alpha}\alpha} (\varphi_\lambda)_{\bar{\beta}\beta}\, \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}, \qquad (109.42)$$

где φ_λ принимает значения всех элементов группы $\mathfrak{G}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$, можно получить разнообразные соотношения между силовыми постоянными, относящимися к фиксированной паре индексов $\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$. Таким способом можно получить полный набор независимых силовых постоянных, связанных с выбранной парой индексов.

Группу $\mathfrak{G}$ можно разложить по смежным классам относительно $\mathfrak{G}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$. Пусть теперь $\{\varphi|t\}$ — элемент симметрии, не принадлежащий к $\mathfrak{G}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$. Тогда для этого элемента (109.38) будет соотношением между силовыми постоянными одной «оболочки». Таким образом, если $\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix}$ соответствует определенной паре вторых соседей, то $\begin{pmatrix} l_\varphi & l'_\varphi \\ \varkappa_\varphi & \varkappa'_\varphi \end{pmatrix}$ будет соответствовать другой эквивалентной паре и силовые постоянные будут связаны соответствующим образом через (109.42).

Правила определения совокупности независимых силовых постоянных, соответствующих некоторой «оболочке» соседей в $\Phi^{(2)}$, ясны. Производя незначительные изменения в рассуждениях, можно определить минимальный набор силовых постоянных для произвольной «оболочки» в члене любого порядка в разложении (109.7). Однако это не является нашей главной задачей, и читателя можно отослать к рассмотрению, данному Либфридом [5], Либфридом и Людвигом [6] и также Лэксом [68], который обсуждал группу химической связи.

в. Ангармонические члены в потенциальной энергии. Чтобы установить ограничения, которые симметрия накладывает на коэффициенты разложения V, мы преобразуем (109.9) от выражения, зависящего от декартовых координат смещений к комплексным нормальным координатам $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$. Из (80.9) получим

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{j} e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{matrix}\right) Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L}. \qquad (109.43)$$

Подставим (109.43) в (109.7) и упростим полученное выражение. Рассмотрим типичный кубический ангармонический член (109.9), в который подставлено преобразование (109.43). Мы можем продолжить обсуждение двумя способами. Выполним сначала прямую подстановку. Напомним свойства преобразованных силовых постоянных при простой трансляции на вектор решетки $P_{\{\varepsilon | R_L\}}$. При таком преобразовании смещение u оказывается преобразованным в u_T:

$$(u_T)_\alpha\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix} = u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \qquad (109.44)$$

Потенциальная энергия $\Phi^{(3)}$ тогда имеет вид

$$\Phi^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{\substack{l-\bar{l} \\ \varkappa,\alpha}} \sum_{\substack{l'-\bar{l} \\ \varkappa',\beta}} \sum_{\substack{l''-\bar{l} \\ \varkappa'',\gamma}} (\Phi_T)_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} & l''-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} \times$$

$$\times (u_T)_\alpha\begin{pmatrix} l-\bar{l} \\ \varkappa \end{pmatrix} (u_T)_\beta\begin{pmatrix} l'-\bar{l} \\ \varkappa' \end{pmatrix} (u_T)_\gamma\begin{pmatrix} l''-\bar{l} \\ \varkappa'' \end{pmatrix}, \qquad (109.45)$$

где, как обычно,

$$(\Phi_T)_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} & l''-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}. \qquad (109.46)$$

Но благодаря трансляционной инвариантности решетки при трансляции на произвольный вектор решетки $\boldsymbol{R}_L$

$$\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l-\bar{l} & l'-\bar{l} & l''-\bar{l} \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}. \qquad (109.47)$$

Во-первых, мы требуем, чтобы кубический ангармонический член $\Phi^{(3)}$ был, как обычно, инвариантен при трансляциях решетки. Важно, что из (109.47) мы получаем при $\bar{l}=l$ (т. е. $\boldsymbol{R}_{\bar{L}}=\boldsymbol{R}_L$)

$$\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} 0 & l'-l & l''-l \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}. \qquad (109.48)$$

Равным образом мы могли бы положить произвольную величину $\bar{l}$ равной l' или l'', так что

$$\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} 0 & l'-l & l''-l \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l-l' & 0 & l''-l' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} =$$
$$= \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l-l'' & l'-l'' & 0 \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}. \qquad (109.49)$$

Чтобы установить дальнейшие ограничения на силовые постоянные некоторого кристалла с пространственной группой $\mathfrak{G}$, мы можем применить операции симметрии из $\mathfrak{G}$ с помощью (109.17) и (109.49) и таким способом установить соотношения между силовыми постоянными. Независимые силовые постоянные, как правило, оказываются собранными в группы, относящиеся к определенным «оболочкам». Поскольку рассмотрение этого вопроса не является нашей целью, мы снова отсылаем читателя к книге Либфрида и Людвига [6].

Возвратимся к обсуждению выражения (109.9) и подставим в него (109.43), (109.47) и (109.49); тогда получим

$$\Phi^{(3)} = \frac{1}{6}\frac{1}{N^{3/2}}\sum_{\boldsymbol{k}j}\sum_{\boldsymbol{k}'j'}\sum_{\boldsymbol{k}''j''} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{pmatrix} Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ j''\end{pmatrix}\times$$
$$\times\sum_{l\varkappa\alpha}\sum_{l'\varkappa'\beta}\sum_{l''\varkappa''\gamma}\frac{1}{(M_\varkappa M_{\varkappa'} M_{\varkappa''})^{1/2}}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} 0 & l'-l & l''-l \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix}\times$$
$$\times e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right) e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{matrix}\right.\right) e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}''\\ j''\end{matrix}\right.\right)\times$$
$$\times\exp\{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_{L'}+\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{R}_{L''})\}. \qquad (109.50)$$

В (109.50) мы умножим правую сторону (под знаком суммы) на единицу, записанную в форме

$$\exp\{i(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{R}_L-\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{R}_L)\}. \qquad (109.51)$$

Затем, производя замену решеточных индексов суммирования, получим в девятикратной сумме справа в (109.50)

$$\left\{\sum_{l}\exp i\,(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{R}_L)\right\}\times$$

$$\times\sum_{\varkappa\alpha l'-l}\ \sum_{\varkappa'\beta l''-l}\ \sum_{\varkappa''\gamma}\frac{1}{(M_\varkappa M_{\varkappa'}M_{\varkappa''})^{1/2}}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix}0 & l'-l & l''-l\\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa''\end{pmatrix}\times$$

$$\times e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{matrix}\right.\right)\cdot e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}''\\ j''\end{matrix}\right.\right)\times$$

$$\times\exp i\,\{\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{R}_{L'}-\boldsymbol{R}_L)+\boldsymbol{k}''\cdot(\boldsymbol{R}_{L''}-\boldsymbol{R}_L)\}.\qquad(109.52)$$

Суммирование по l дает решеточную Δ-функцию $\Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}'')$, где

$$\Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}'')=\begin{cases}1, & \text{если } \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}''=2\pi\boldsymbol{B}_H,\\ 0 & \text{во всех прочих случаях.}\end{cases}\qquad(109.53)$$

Так как векторы $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$, $\boldsymbol{k}''$ определены в первой зоне Бриллюэна, ограничение (109.53) требует, чтобы их сумма равнялась нулю или $2\pi\boldsymbol{B}_H$. Тогда можно определить фурье-компоненту силовых постоянных следующим образом:

$$\Phi\begin{pmatrix}\boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' & \boldsymbol{k}''\\ j & j' & j''\end{pmatrix}=\sum_{\varkappa\alpha}\ \sum_{\lambda'\beta'\varkappa'}\ \sum_{\lambda''\varkappa''\gamma}\Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix}0 & \lambda' & \lambda''\\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa''\end{pmatrix}\frac{1}{(M_\varkappa M_{\varkappa'}M_{\varkappa''})^{1/2}}\times$$

$$\times e_\alpha\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)e_\beta\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{matrix}\right.\right)e_\gamma\left(\varkappa''\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}''\\ j''\end{matrix}\right.\right)\exp i\,\{\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_{\lambda'}+\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{R}_{\lambda''}\}.$$

$$(109.54)$$

Следовательно, мы теперь можем записать $\Phi^{(3)}$ в виде

$$\Phi^{(3)}=\frac{1}{6N^{1/2}}\sum_{\boldsymbol{k}j}\sum_{\boldsymbol{k}'j'}\sum_{\boldsymbol{k}''j''}\Phi\begin{pmatrix}\boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' & \boldsymbol{k}''\\ j & j' & j''\end{pmatrix}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{pmatrix}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}''\\ j''\end{pmatrix}\times$$

$$\times\Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}'').\qquad(109.55)$$

Это стандартная форма силовых постоянных, и (109.55) тождественно совпадает с известными результатами [см. [4], уравнение (39.2)]. При получении (109.55) мы использовали трансляционную симметрию кристалла, и ограничение, связанное с применением Δ-функции, сделало запись более сжатой. Однако запись (109.55) неудобна для исследования полной симметрии кристалла (трансляции и повороты).

Мы определим силовые постоянные, преобразовав (109.11) с помощью (109.10):

$$\Phi^{(3)} = \frac{1}{6N^{3/2}} \sum_{kj} \sum_{k'j'} \sum_{k''j''} V\begin{pmatrix} k & k' & k'' \\ j & j' & j'' \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} k \\ j \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} k' \\ j' \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} k'' \\ j'' \end{pmatrix}, \tag{109.56}$$

где

$$V\begin{pmatrix} k & k' & k'' \\ j & j' & j'' \end{pmatrix} \equiv \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_{l'\varkappa'\beta} \sum_{l''\varkappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} \frac{1}{(M_\varkappa M_{\varkappa'} M_{\varkappa''})^{1/2}} \times$$
$$\times e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) e_\beta\left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} k' \\ j' \end{matrix}\right) e_\gamma\left(\varkappa'' \middle| \begin{matrix} k'' \\ j'' \end{matrix}\right) \times$$
$$\times \exp\{i(k \cdot R_L + k' \cdot R_{L'} + k'' \cdot R_{L''})\}. \tag{109.57}$$

Рассмотрим выражение для ангармонического члена $\Phi^{(3)}$, когда в качестве динамических переменных в нем использованы декартовы компоненты смещений ионов, преобразованные с помощью преобразования $P_{\{\varphi_p\}}$ из группы $\mathfrak{G}$. Другими словами, мы напишем вместо (109.11) выражение для $\Phi^{(3)}$ через переменные $(u_{\varphi_p})_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ и т. д.:

$$\Phi'^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_{l'\varkappa'\beta} \sum_{l''\varkappa''\gamma} \Phi'_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} (u_{\varphi_p})_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \times$$
$$\times (u_{\varphi_p})_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} (u_{\varphi_p})_\gamma\begin{pmatrix} l'' \\ \varkappa'' \end{pmatrix}. \tag{109.58}$$

Штрихованные компоненты силовых постоянных, согласно условию инвариантности (109.5б), равны нештрихованным компонентам, то есть

$$\Phi'^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_{l'\varkappa'\beta} \sum_{l''\varkappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' & l'' \\ \varkappa & \varkappa' & \varkappa'' \end{pmatrix} (u_{\varphi_p})_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \times$$
$$\times (u_{\varphi_p})_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix} (u_{\varphi_p})_\gamma\begin{pmatrix} l'' \\ \varkappa'' \end{pmatrix}. \tag{109.59}$$

Воспользуемся соотношением, связывающим повернутые смещения ионов через исходные плоские волны и неповернутые собственные векторы:

$$(u_{\varphi_p})_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} \sum_{k\tau} \sum_{j_\nu} e^{ikR_L} e_\alpha\left(\varkappa \middle| \begin{matrix} k \\ j \end{matrix}\right) Q_{\{\varphi_p\}}\begin{pmatrix} k_\tau \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{109.60}$$

Тогда, используя (86.30), получаем

$$Q_{\{\varphi_p\}}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\nu \end{pmatrix} = \sum_{\sigma=1}^{s} \sum_{\mu=1}^{l_m} D^{(\star\boldsymbol{k})\,(l)}(\{\varphi_p\})_{(\sigma\mu)\,(\tau\nu)}\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}. \tag{109.61}$$

Подставляя (109.60) и (109.61) в (109.59), имеем

$$\Phi'^{(3)} = \frac{1}{3!\,N^{3/2}} \sum_{\boldsymbol{k}_\tau j_\nu} \sum_{\boldsymbol{k}'_{\tau'} j'_{\nu'}} \sum_{\boldsymbol{k}''_{\tau''} j''_{\nu''}} V\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau & \boldsymbol{k}'_{\tau'} & \boldsymbol{k}''_{\tau''} \\ j_\nu & j'_{\nu'} & j''_{\nu''} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \sum_{\sigma\mu} \sum_{\sigma'\mu'} \sum_{\sigma''\mu''} D^{(\star\boldsymbol{k})\,(l)}(\{\varphi_p\})_{\sigma\mu\tau\nu}\, D^{(\star\boldsymbol{k}')\,(l')}(\{\varphi_p\})_{\sigma'\mu'\tau'\nu'} \times$$

$$\times D^{(\star\boldsymbol{k}'')\,(l'')}(\{\varphi_p\})_{\sigma''\mu''\tau''\nu''}\, Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}'_{\sigma'} \\ j'_{\mu'} \end{pmatrix} Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}''_{\sigma''} \\ j''_{\mu''} \end{pmatrix}, \tag{109.62}$$

где V определено в (109.57). В результате выполненного преобразования первоначально входившие в $\Phi^{(3)}$ члены перепутываются и образуют линейные комбинации (109.62). Таким образом, это преобразование приводит к смешиванию друг с другом $(s \cdot l_l)\,(s' \cdot l_{l'})\,(s'' \cdot l_{l''})$-членов, относящихся к полному пространству произведения

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})\,(l)} \otimes \Sigma^{(\star\boldsymbol{k}')\,(l')} \otimes \Sigma^{(\star\boldsymbol{k}'')\,(l'')}. \tag{109.63}$$

Примеси состояний, связанных с другими пространствами, не возникает. Ясно, что в пространстве произведения (109.63) имеются представления

$$D^{(\star\boldsymbol{k})\,(l)} \otimes D^{(\star\boldsymbol{k}')\,(l')} \otimes D^{(\star\boldsymbol{k}'')\,(l'')}. \tag{109.64}$$

Но из приведенных ранее соображений инвариантности следует

$$\Phi'^{(3)} = \Phi^{(3)}. \tag{109.65}$$

Напомним, что для обозначения единичного представления мы выбрали символ $(\Gamma)\,(1+)$; тогда

$$\Phi^{(3)} \sim D^{(\Gamma)\,(1+)}. \tag{109.66}$$

Следовательно, члены, соответствующие пространству произведения (109.63), будут возникать, только если при выполнении процедуры приведения прямого произведения возникает единичное представление $D^{(\Gamma)\,(1+)}$. Таким образом, в (109.56) будут появляться только такие произведения нормальных координат, для которых коэффициенты приведения отличны от нуля, т. е.

$$({}^\star\boldsymbol{k}m\,{}^\star\boldsymbol{k}'m'\,{}^\star\boldsymbol{k}''m'' \mid \boldsymbol{\Gamma}\,(1+)) \neq 0. \tag{109.67}$$

Легко заметить, что этот результат содержит в себе наряду с трансляционной и поворотную симметрию. Так, например, правило отбора для волнового вектора

$$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}''=\begin{cases}2\pi\boldsymbol{B}_H\\ 0 \quad \text{с точностью до } 2\pi\boldsymbol{B}_H,\end{cases} \tag{109.68}$$

следующее из трансляционной симметрии, очевидно, является следствием того требования, что $\boldsymbol{\Gamma}(1+)$ должно содержаться в (109.67). Конечно, ограничение (109.67) еще более жесткое, так как оно учитывает также преобразование при поворотах.

Мы можем обобщить эти результаты на любой член ряда (109.7). Рассмотрим для примера член s-го порядка в разложении, который можно записать в виде

$$\Phi^{(s)}=\frac{1}{s!}\,\frac{1}{N^{s/2}}\sum_{\boldsymbol{k}j}\sum_{\boldsymbol{k}'j'}\cdots\sum_{\boldsymbol{k}^{(s)}j^{(s)}}V\begin{pmatrix}\boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' & \dots & \boldsymbol{k}^{(s)}\\ j & j' & \dots & j^{(s)}\end{pmatrix}\times$$

$$\times Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{pmatrix}\cdots Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}^{(s)}\\ j^{(s)}\end{pmatrix}. \tag{109.69}$$

Здесь по аналогии с (109.57) имеем

$$V\begin{pmatrix}\boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' & \dots & \boldsymbol{k}^{(s)}\\ j & j' & \dots & j^{(s)}\end{pmatrix}=\sum_{l\varkappa\alpha}\sum_{l'\varkappa'\beta}\cdots\sum_{l^{(s)}\varkappa^{(s)}\gamma}\Phi_{\alpha\beta\dots\gamma}\begin{pmatrix}l & l' & \dots & l^{(s)}\\ \varkappa & \varkappa' & \dots & \varkappa^{(s)}\end{pmatrix}\times$$

$$\times\frac{1}{(M_{\varkappa}M_{\varkappa'}\dots M_{\varkappa^s})^{1/2}}\,e_{\alpha}\left(\varkappa\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{matrix}\right.\right)e_{\beta}\left(\varkappa'\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{matrix}\right.\right)\dots e_{\gamma}\left(\varkappa^{(s)}\left|\begin{matrix}\boldsymbol{k}^{(s)}\\ j^{(s)}\end{matrix}\right.\right)\times$$

$$\times\exp\left\{i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_{L'}+\dots+\boldsymbol{k}^{(s)}\cdot\boldsymbol{R}_{L^{(s)}}\right)\right\}. \tag{109.70}$$

Произведение (109.69) преобразуется в соответствии с представлениями прямого произведения

$$D^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)}\otimes D^{(\star\boldsymbol{k}')\,(j')}\otimes\dots\otimes D^{(\star\boldsymbol{k}^{(s)})\,(j^{(s)})}. \tag{109.71}$$

Очевидно, произведение (109.69) можно представить в виде суммы по пространствам, и утверждение (109.71) эквивалентно утверждению, что произведение

$$Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}'\\ j'\end{pmatrix}\cdots Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}^{(s)}\\ j^{(s)}\end{pmatrix} \tag{109.72}$$

является базисом векторного пространства для произведения

$$\Sigma^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)}\otimes\Sigma^{(\star\boldsymbol{k}')\,(j')}\otimes\dots\otimes\Sigma^{(\star\boldsymbol{k}^{(s)})\,(j^{(s)})}. \tag{109.73}$$

Необходимым и достаточным условием того, что конкретный набор произведений нормальных координат возникнет в $\Phi^{(s)}$, состоит в том, что соответствующие коэффициенты приведения характеров не равны нулю, т. е.

$$({}^{\star}\boldsymbol{k}j\,{}^{\star}\boldsymbol{k}'j'\ \ldots\ {}^{\star}\boldsymbol{k}^{(s)}j^{(s)}\,|\,\Gamma(1+))\neq 0. \qquad (109.74)$$

В тех случаях, когда это нужно, обычные произведения следует заменить симметризованными.

Тривиальное следствие (109.67) или (109.74) получается из соответствующих правил отбора для волнового вектора. Для случая (109.67) оно имеет вид

$$({}^{\star}\boldsymbol{k}\,{}^{\star}\boldsymbol{k}'\,{}^{\star}\boldsymbol{k}''\,|\,\Gamma)\neq 0, \qquad (109.75)$$

или для некоторого набора волновых векторов (по одному из каждой звезды)

$$\boldsymbol{k}_{\sigma}+\boldsymbol{k}'_{\sigma'}+\boldsymbol{k}''_{\sigma''}=0 \quad (\text{с точностью до } 2\pi\boldsymbol{B}_H). \qquad (109.76)$$

Во всех наиболее важных приложениях существенно разложение (109.7), записанное через нормальные координаты $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}$ и содержащее в каждом члене определенную степень нормальных координат, как в (109.69). Поэтому чаще всего просто выписывают заранее разложение типа (109.7) для гамильтониана (например, для потенциальной энергии) или для какого-либо другого кристаллического инварианта. Задача, которую следует решить, является теперь обратной задачей по отношению к задаче определения совокупности независимых силовых постоянных в координатном пространстве, решенной в (109.41) и (109.42) (силовые постоянные второго порядка) или в (109.56), (109.59) и т. д. (силовые постоянные третьего и более высоких порядков). В разложении типа (109.69) можно установить, какие комбинации или произведения нормальных координат $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_\nu\end{pmatrix}$ будут иметь отличные от нуля коэффициенты $V\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\ \ldots\\ j\ \ldots\end{pmatrix}$. Ответ дается формулой (109.74). Если мы исследуем член в (109.69), в котором данное нормальное колебание $Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j\end{pmatrix}$ встречается p раз, то соответствующее произведение в (109.74) оказывается *симметризованным* произведением матриц, например $[D^{({}^{\star}\boldsymbol{k})(j)}]_{(p)}$ и т. д. Однако если имеются два различных (независимых) нормальных колебания с одинаковой симметрией, то в (109.74) входит *обычное* произведение $[D^{({}^{\star}\boldsymbol{k})(j)}]_{p}$.

Обсуждение свойств кристаллических инвариантов до сих пор проводилось в рамках теории представлений унитарной пространственной подгруппы $\mathfrak{G}$. Как известно, следует учитывать

также симметрию обращения времени. Это можно сделать двумя способами аналогично рассмотрению § 88—94 (или § 95—102). Так, мы можем рассмотреть операцию K комплексного сопряжения, определенную в § 88 [уравнение (88.1)]. Тогда требование инвариантности относительно обращения времени дает вещественность потенциальной энергии:

$$K^{-1}\Phi K = \Phi^* = \Phi. \tag{109.77}$$

Условие (109.77) можно применить к каждому члену (109.7), так как члены с различными степенями не смешиваются под действием операции комплексного сопряжения. Можно убедиться в том, что конкретное применение (109.77) приводит к равенству некоторых коэффициентов в (109.69), обеспечивающему вещественность (109.77). Каждый случай должен рассматриваться отдельно.

Второй возможный подход основан на рассмотрении нормальных колебаний как базиса для неприводимых представлений. Имея это в виду, можно построить решеточные инварианты вида (109.7) и (109.69). Такой подход требует знания коэффициентов приведения для копредставлений, аналогичных коэффициентам (109.74) для пространственных групп. Но они до сих пор еще не получены. В принципе, однако, такое рассмотрение возможно — оно совпадает с рассмотрением настоящего параграфа с той разницей, что всюду теорию представлений следует заменить на теорию копредставлений. В результате получится, что если для пространственно-временной группы $\mathcal{G}$ коэффициент

$$(\mathrm{co}\,{}^*\boldsymbol{k}j\,\mathrm{co}\,{}^*\boldsymbol{k}'j' \ldots \mid \Gamma 1+) \neq 0, \tag{109.78}$$

то соответствующий член будет входить в (109.74).

Здесь следует отметить, что в дополнение к требованиям инвариантности по отношению к пространственно-временной группе кристалла обобщенные силовые постоянные также должны быть инвариантны относительно общих однородных преобразований пространства (поворота и трансляции кристалла как целого). Этот вопрос подробно обсуждается в работе [4].

§ 110. Построение кристаллических ковариантов: электрический момент и поляризуемость

Мы рассмотрим теперь конкретно два кристаллических коварианта, играющих существенную роль в кристаллической оптике. Это электрический дипольный момент кристалла и электрическая поляризуемость[1]). Любая из этих величин может

---

[1]) Обсуждение ограничений, налагаемых одной трансляционной симметрией, см. в работе [4], формулы (39.11)—(39.18).

считаться заданной, если установлен полный набор смещений ионов $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Введем следующие обозначения:

$$\boldsymbol{M}\left(\left\{u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) \text{— электрический дипольный момент,} \tag{110.1}$$

$$\boldsymbol{P}\left(\left\{u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}\right\}\right) \text{— электронная поляризуемость.} \tag{110.2}$$

Электрический дипольный момент $\boldsymbol{M}$ является полярным вектором, а поляризуемость $\boldsymbol{P}$ — симметричным тензором второго ранга [1]). В декартовых координатах $\boldsymbol{M}$ имеет три компоненты

$$M_\alpha,\ M_\beta,\ M_\gamma, \tag{110.3}$$

которые при обычных поворотах (φ) преобразуются как

$$M'_{\bar\alpha} = \sum_\alpha \varphi_{\bar\alpha\alpha} M_\alpha, \tag{110.4}$$

где, как и раньше, $\varphi_{\bar\alpha\alpha}$ — компоненты матрицы поворота. Преобразование (110.4) соответствует преобразованию полярного вектора. В обычной сокращенной записи оно имеет вид

$$P_{\{\varphi\}}\boldsymbol{M} = D^{(r)}(\{\varphi\})\,\boldsymbol{M}, \tag{110.5}$$

где $D^{(r)}$ — матрица с размерами (3×3), по которой преобразуется полярный вектор. Для определенной группы $\mathfrak{G}$ представление $D^{(r)}$ может оказаться либо приводимым, либо неприводимым. Характер, или след, этого представления равен

$$\operatorname{Sp} D^{(r)}(\{\varphi\}) = \pm(1 + 2\cos\varphi), \tag{110.6}$$

где φ — угол поворота, соответствующий операции $\{\varphi\}$. Для кубических пространственных групп, таких, как O_h^7 (алмаз) или O_h^5 (поваренная соль),

$$D^{(r)} = \Gamma^{(15-)}, \tag{110.7}$$

т. е. оказывается неприводимым.

Для тензора поляризуемости $\boldsymbol{P}$ правило, соответствующее (110.4), получается при рассмотрении преобразования компонент $P_{\alpha\beta}$. Оно имеет вид

$$P'_{\bar\alpha\bar\beta} = \sum_\alpha \sum_\beta \varphi_{\bar\alpha\alpha}\varphi_{\bar\beta\beta} P_{\alpha\beta} \tag{110.8}$$

---

[1]) Вблизи резонанса в рассеянии становятся существенными антисимметричные компоненты $\boldsymbol{P}$ (т. 2, § 6). Эти же компоненты возникают при рассмотрении явлений во внешних полях.

и показывает, что $\boldsymbol{P}$ — тензор второго ранга. Тензор поляризуемости обычно берут симметричным [4] (см. примечание выше):

$$P_{\alpha\beta} = P_{\beta\alpha}. \tag{110.9}$$

Тогда (110.8) можно записать в виде

$$P_{\{\varphi\}}\boldsymbol{P} = D^{(rr)}(\{\varphi\})\,\boldsymbol{P} = [D^{(r)}(\{\varphi\})]_{(2)}\,\boldsymbol{P}, \tag{110.10}$$

где $D^{(rr)}$ — представление, по которому преобразуется симметричный тензор второго ранга. В зависимости от конкретной группы $\mathfrak{G}$ представление $D^{(rr)}$ может быть либо приводимым либо неприводимым.

Для пространственных групп O_h^7 и O_h^5 представление $[D^{(r)}]_{(2)}$ приводимо по правилу

$$[D^{(r)}]_{(2)} = \Gamma^{(1+)} \oplus \Gamma^{(12+)} \oplus \Gamma^{(25+)}. \tag{110.11}$$

Полезно подчеркнуть, что выражения (110.3), (110.10) или (110.11), (110.8) дают преобразование вектора $\boldsymbol{M}$ и тензора второго ранга $\boldsymbol{P}$ как целого. Каждая из этих величин является многокомпонентной, и компоненты преобразуются друг через друга при преобразованиях координат. В частности, если любую из величин $\boldsymbol{M}$ или $\boldsymbol{P}$ разложить в ряд Тейлора по компонентам смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$, то каждый член, являющийся однородной функцией некоторой степени смещения, должен преобразовываться при поворотах, так же как полная величина (110.1) или (110.2).

Рассмотрим теперь электрический дипольный момент $\boldsymbol{M}$ кристалла. Запишем для $\boldsymbol{M}$ разложение в ряд Тейлора по $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Тогда для каждой компоненты получим

$$M_\alpha = M_\alpha^{(1)} + M_\alpha^{(2)} + \ldots + M_\alpha^{(s)} + \ldots, \tag{110.12}$$

где

$$M_\alpha^{(1)} = \sum_{l\varkappa\beta} M_{\alpha,\,\beta}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{110.13}$$

Здесь

$$M_{\alpha,\,\beta}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} = \left[\frac{\partial M_\alpha}{\partial u_\beta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}}\right]_0. \tag{110.14}$$

Для второго члена в (110.12) имеем

$$M_\alpha^{(2)} = \sum_{l\varkappa\beta}\sum_{l'\varkappa'\gamma} M_{\alpha,\,\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} u_\gamma\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}, \tag{110.15}$$

где

$$M_{\alpha,\beta\gamma}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} = \left[\frac{\partial^2 M_\alpha}{\partial u_\beta \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \partial u_\gamma \begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}} \right]_0. \qquad (110.16)$$

Аналогичные выражения можно написать для членов более высокого порядка. Поскольку величина $\boldsymbol{M}$ как целое преобразуется как $D^{(r)}$, то так же должны себя вести и другие члены разложения (110.13), (110.15). Члены ряда (110.12) можно, как и раньше, записать в виде ряда по нормальным координатам. Следовательно, можно написать

$$M_\alpha^{(1)} = \sum_{kj\nu} M_\alpha \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}, \qquad (110.17)$$

где

$$M_\alpha \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} \equiv \sum_{l\varkappa\beta} M_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}} e_\beta \left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right) \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L). \qquad (110.18)$$

Далее,

$$M_\alpha^{(2)} = \sum_{kj\nu} \sum_{k'j'\nu'} M_\alpha \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' \\ j_\nu & j'_{\nu'} \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{pmatrix}, \qquad (110.19)$$

где

$$M_\alpha \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} & \boldsymbol{k}' \\ j_\nu & j'_{\nu'} \end{pmatrix} \equiv \sum_{l\varkappa\beta} \sum_{l'\varkappa'\gamma} M_{\alpha,\beta\gamma} \begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} \frac{e_\beta \left(\varkappa \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix} \right) e_\gamma \left(\varkappa' \middle| \begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j'_{\nu'} \end{matrix} \right)}{N\sqrt{M_\varkappa M_{\varkappa'}}} \times$$

$$\times \exp i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L + \boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}_{L'}) \quad \text{и т. д.} \qquad (110.20)$$

Требования симметрии полной пространственной группы ограничивают набор допустимых $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$, которые могут возникать в разложениях (110.17), (110.18) и т. д.

Рассмотрим теперь выражение для члена первого порядка в $\boldsymbol{M}$, когда в качестве основного набора динамических переменных выбраны повернутые декартовы компоненты смещений. Из рассмотрения, аналогичного (109.71)—(109.74), имеем

$$M_{\bar\alpha}^{(1)} = \sum_\alpha \varphi_{\bar\alpha\alpha} M_\alpha^{(1)}, \qquad (110.21)$$

но одновременно

$$M_{\bar\alpha}^{\prime(1)} = \sum_{l\varkappa\beta} M_{\bar\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} (u_\varphi)_\beta \begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \qquad (110.22)$$

Преобразование коэффициентов в (110.13) и (110.22) имеет вид

$$M'_{\bar{\alpha},\,\beta}\binom{l}{\varkappa}=\sum_{\bar{\beta}}\varphi_{\beta\bar{\beta}}M_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}\binom{l_{\bar{\varphi}}}{\varkappa_{\bar{\varphi}}}, \tag{110.23}$$

так что преобразование этих величин является преобразованием полярного вектора. Аналогично тому, что было для соответствующих коэффициентов в разложении кристаллической потенциальной энергии, требование инвариантности «физического тензора» $M_{\alpha,\,\beta}\binom{l}{\varkappa}$ дает условие инвариантности этих величин при преобразованиях симметрии кристалла:

$$M'_{\alpha,\,\beta}\binom{l}{\varkappa}=M_{\alpha\beta}\binom{l}{\varkappa}. \tag{110.24}$$

Выразим теперь повернутые смещения $(\boldsymbol{u}_{\varphi_p})_\alpha\binom{l}{\varkappa}$ через нормальные координаты и воспользуемся условием инвариантности (110.24); тогда из (110.22) получим

$$M'^{(1)}_{\bar{\alpha}}=\sum_{l\varkappa\beta}M'_{\bar{\alpha}\beta}\binom{l}{\varkappa}\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa N}}\sum_{\boldsymbol{k}_\tau}\sum_{j_\nu}e^{i\boldsymbol{k}_\tau\cdot\boldsymbol{R}_L}e_\beta\left(\varkappa\,\middle|\,\begin{matrix}\boldsymbol{k}_\tau\\ j_\nu\end{matrix}\right)Q_{\{\varphi_p\}}\binom{\boldsymbol{k}_\tau}{j_\nu} \tag{110.25}$$

или

$$M'^{(1)}_{\bar{\alpha}}=\sum_{\boldsymbol{k}_\tau}\sum_{j}\sum_{\nu}M_{\bar{\alpha}}\binom{\boldsymbol{k}_\tau}{j_\nu}Q_{\{\varphi_p\}}\binom{\boldsymbol{k}_\tau}{j_\nu}. \tag{110.26}$$

При этом, используя (86.30), имеем

$$M'^{(1)}_{\bar{\alpha}}=\sum_{\boldsymbol{k}_\tau}\sum_{j}\sum_{\nu}M_{\bar{\alpha}}\binom{\boldsymbol{k}_\tau}{j_\nu}\sum_{\sigma}\sum_{\mu}D^{(\star\boldsymbol{k})\,(j)}(\{\varphi_p\})_{\sigma\mu\tau\nu}\,Q\binom{\boldsymbol{k}_\sigma}{j_\mu}. \tag{110.27}$$

Это выражение для преобразованных $\bar{\alpha}$-компонент $M^{(1)}$. Но основное правило преобразования (110.21) и выражение (110.17) дают

$$M'^{(1)}_{\bar{\alpha}}=\sum_{\alpha}\varphi_{\bar{\alpha}\alpha}M^{(1)}_{\alpha}=\sum_{\alpha}\varphi_{\bar{\alpha}\alpha}\sum_{\boldsymbol{k}_\sigma}\sum_{j_\nu}M_{\alpha}\binom{\boldsymbol{k}_\sigma}{j_\nu}Q\binom{\boldsymbol{k}_\sigma}{j_\nu}. \tag{110.28}$$

Так как преобразования (110.27) и (110.28) должны давать одинаковые результаты, то мы можем приравнять их. Учтем, кроме того, что

$$\varphi_{\bar{\alpha}\alpha} = D^{(r)} (\{\varphi_p\})_{\bar{\alpha}\alpha}. \tag{110.29}$$

Тогда

$$\sum_{k_\sigma} \sum_{j} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} D^{(r)} (\{\varphi_p\})_{\bar{\alpha}\alpha} M_\alpha \begin{pmatrix} k_\sigma \\ j_\nu \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} k_\sigma \\ j_\nu \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_{k_\tau} \sum_{j} \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \sum_{\mu} D^{(\star k)(j)} (\{\varphi_p\})_{\sigma\mu\tau\nu} M_{\bar{\alpha}} \begin{pmatrix} k_\tau \\ j_\nu \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} k_\sigma \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{110.30}$$

Легко видеть, что это равенство выполняется, если представление $D^{(\star k)(j)}$, по которому преобразуется фонон $Q\begin{pmatrix} k_\tau \\ j_\nu \end{pmatrix}$, тождественно равно $D^{(r)}$. Но это возможно только в том случае, если, например, в кубическом кристалле

$$Q \begin{pmatrix} k_\tau \\ j_\nu \end{pmatrix} \sim D^{(\Gamma)(15-)}. \tag{110.31}$$

Следовательно, единственными нормальными колебаниями, для которых существует линейный член в разложении (110.17), являются три колебания, преобразующиеся как полярный вектор $Q\begin{pmatrix} \Gamma \\ 15- \end{pmatrix}$. В кубическом кристалле, очевидно, имеются три компоненты трехмерного векторного представления.

Для членов второго порядка доказательство проводится аналогично. Тогда необходимое и достаточное условие существования отличного от нуля члена второго порядка (110.19) имеет вид

$$D^{(\star k)(j)} \otimes D^{(\star k')(j')} \quad \text{содержит} \quad D^{(r)}. \tag{110.32}$$

Необходимым условием появления пары определенных колебаний в ряде по степеням $u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}$ для $\boldsymbol{M}^{(2)}$ является, очевидно, ненулевое значение коэффициента приведения:

$$({}^\star\boldsymbol{k}j\,{}^\star\boldsymbol{k}j' \mid \boldsymbol{\Gamma r}) \neq 0. \tag{110.33}$$

В (110.33) символ векторного представления записан в виде $\boldsymbol{\Gamma r}$. В кубическом кристалле он равен $\boldsymbol{\Gamma}^{(15-)}$. Анализ можно выполнить как методом малой группы, так и методом полной группы. Ясно, что для кристаллов, группа симметрии которых содержит инверсию, нормальные колебания одной и той же четности не могут появляться вместе в произведении, входящем в $\boldsymbol{M}^{(2)}$. Другие такие же полезные и простые правила можно получить по известным коэффициентам приведения каждой пространственной группы. Ниже будут приведены примеры такого анализа для групп симметрии алмаза и каменной соли.

Члены более высокого порядка можно рассмотреть таким же способом. Так, член s-й степени $\boldsymbol{M}^{(s)}$ будет содержать произведение s множителей, являющихся нормальными координатами $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j \end{pmatrix}$. Необходимое и достаточное условие существования рассматриваемого произведения состоит в том, что прямое произведение

$$D^{(\star \boldsymbol{k})\,(j)} \otimes D^{(\star \boldsymbol{k}')\,(j')} \otimes \ldots \otimes D^{(\star \boldsymbol{k}^{(s)})\,(j^{(s)})} \qquad (110.34)$$

содержит представление $D^{(r)}$. Если это представление содержится, то с помощью операторов проектирования можно определить линейную комбинацию произведений, образующую линейное векторное пространство $\Sigma^{(r)}$. Это эквивалентно тому условию, что силовая постоянная s-й степени, соответствующая (110.15), не равна нулю. Полное доказательство для членов более высокого порядка такое же, как для членов низкого порядка.

Требование, чтобы (110.34) содержало $D^{(r)}$, эквивалентно требованию отличия от нуля соответствующего коэффициента приведения. В рассматриваемом случае для кубических кристаллов он имеет вид

$$({}^{\star}\boldsymbol{k}j\,{}^{\star}\boldsymbol{k}'j' \ldots {}^{\star}\boldsymbol{k}^{(s)}j^{(s)} \,|\, \Gamma 15\, -). \qquad (110.35)$$

Для определения правильных линейных комбинаций нужно использовать операторы проектирования или, если они известны, коэффициенты Клебша — Гордана для возникающих в теории тензоров.

Аналогичное рассмотрение с соответствующими изменениями можно применить для построения отдельных членов разложения поляризуемости $\boldsymbol{P}$ по степеням смещений или нормальных координат:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{(1)} + \boldsymbol{P}^{(2)} + \ldots + \boldsymbol{P}^{(s)} + \ldots. \qquad (110.36)$$

Чтобы соответствующее произведение сомножителей, являющихся нормальными координатами, входило в разложение (110.36), каждый член произвольной степени в отдельности должен быть тензором второго ранга.

Переходя к обозначениям (110.10), мы видим, что необходимым и достаточным условием появления члена определенной заданной степени в разложении поляризуемости является неравенство нулю коэффициента приведения:

$$({}^{\star}\boldsymbol{k}j\,{}^{\star}\boldsymbol{k}'j' \ldots |\, [D^{(r)}]_{(2)}) \neq 0. \qquad (110.37)$$

В случае кубического кристалла это означает, что по крайней мере для одной компоненты (110.11) коэффициенты не равны нулю. Детали доказательства такие же, как в соответствующем случае для оператора дипольного момента.

В заключение укажем общую схему. Для любой физической величины, которая преобразуется ковариантно при общих поворотах, нужно сначала найти представления группы $\mathfrak{G}$, т. е. пространственной группы, по которой преобразуются компоненты ковариантной физической величины. Чтобы в разложении этой физической величины по нормальным координатам возникло некоторое конкретное произведение, необходимо, чтобы это конкретное произведение содержало линейное векторное пространство, соответствующее тем же представлениям группы $\mathfrak{G}$, что и при преобразованиях коварианта как целого. Так как нормальные координаты, согласно (86.30), являются базисом для неприводимого линейного векторного пространства, во всех случаях, чтобы выбрать конкретное произведение, нужно использовать правила приведения обычного и симметризованного произведений матриц и степеней неприводимых представлений пространственных групп.

В этом параграфе мы ограничились использованием теории представлений унитарной подгруппы, но в принципе следовало бы рассмотреть полную группу пространственно-временной симметрии $\mathcal{G}$. Как указано в конце § 108, симметрию обращения времени можно учесть, используя оператор K для записи условия вещественности физических величин, например

$$K^{-1}MK = M^* = M.$$

Интересно было бы выполнить все рассмотрение с нормальными координатами, являющимися базисом для копредставлений, и соответствующими коэффициентами приведения. Такой подход, однако, еще не реализован.

ГЛАВА 11

Пространственно-временная симметрия и квантовая динамика решетки

§ 111. Введение

Эта глава книги (§ 111—118) посвящена основам квантовомеханического рассмотрения кристаллической системы. Нас интересует, в частности, получение полного квантовомеханического описания соответствующих электронных и ионных (или ядерных) степеней свободы изолятора, чтобы в конце концов построить квантовомеханическую теорию инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света кристаллом. Эта теория будет развита во втором томе этой книги (§ 1—8).

Отметим прежде всего, что некоторые степени свободы, или квантовые переменные, до сих пор отсутствовали в нашем рассмотрении, так как они несущественны при исследовании оптических свойств колебаний кристаллической решетки. Например, нас не интересуют электронные и ядерные спины или детали электронной зонной структуры твердых тел. Однако мы пользуемся наличием запрещенной зоны в электронном распределении как важной характеристикой изолятора сначала в § 113, 114, а затем в т. 2 (§ 2—6).

Даже при таких целях любое рассмотрение интересующих нас электронных и решеточных степеней свободы должно быть по необходимости приближенным, так как электронно-ядерная система является системой многих тел, для которой в настоящее время нет теоретического описания. Наиболее важным приближением, которое положено в основу и нашего рассмотрения, является адиабатическое приближение Борна — Оппенгеймера [89]. Самым важным в этом приближении является способ, которым разделяются электронные и ядерные переменные, так что их можно рассматривать порознь. Разделение переменных не является полным, так как именно деформация электронных состояний, создаваемая движением ядер, обусловливает гармонический и ангармонический потенциал, в котором движутся ядра. Показано, что потенциальная энергия ядер, которая в классическом рассмотрении предполагалась гармонической (§ 67 и 109), возникает вследствие зависимости полной энергии многоэлектронной системы от смещений ядер. Она равна электронной энергии, определенной при фиксированном положении ядер. Волновые функции всей системы являются произведениями решеточной волновой функции на многоэлектронную волновую функцию. Именно такая запись волновой функции в виде произведения позволяет установить симметрию собственных состояний решетки, так как наше рассмотрение пространственно-временной группы симметрии $\mathcal{G}$ и ее неприводимых представлений и копредставлений можно перенести и на квантовый случай (см. § 116—118). Если мы знаем симметрию собственных состояний решетки, то с помощью теоремы Вигнера — Экарта и нашего рассмотрения коэффициентов приведения для пространственных групп и коэффициентов Клебша — Гордана мы можем проанализировать матричные элементы, ответственные за инфракрасное поглощение и комбинационное рассеяние света.

Как будет показано ниже, любые колебательные собственные состояния в гармоническом приближении могут быть описаны точно. Возбужденные состояния, вообще говоря, являются сложными состояниями, содержащими обертоны одного фонона и комбинации всех прочих фононов, присутствующих одновременно. Для получения симметрии состояния нужно выполнить приведение прямого произведения соответствующих симметризованных и прямых произведений матриц. Такой анализ обертонов и комбинированных частот оказался очень продуктивным при применении теории групп для анализа и предсказания спектров многих кристаллов; примеры рассматриваются в т. 2, гл. 3.

Запись волновой функции в виде произведения в адиабатическом приближении имеет и другое важное следствие для рассмотрения в т. 2, гл. 1. Поскольку эта функция имеет вид произведения многоэлектронной функции на волновые функции колебательных состояний, оказывается возможным в рамках адиабатического приближения определить оператор электрического момента $\mathcal{M}$, используемый в теории инфракрасного поглощения (т. 2, § 2), и оператор поляризуемости $\mathcal{P}$, который применяется в теории комбинационного рассеяния света (т. 2, § 3). Таким образом, оба аспекта адиабатического рассмотрения существенны для нашего описания. В т. 2, гл. 3 будет показано, что большое число предсказаний, основанных на адиабатическом приближении, оправдывается при сравнении с экспериментом.

Однако адиабатическое приближение не охватывает многих очень существенных эффектов электрон-фононного взаимодействия, и, кроме того, оно оставляет недоказанным предположение о том, что лежащее в его основе разложение в ряд теории возмущений сходится. Поэтому среди прочих исследований недавно появилось большое число работ по микроскопической теории кристаллической решетки с точки зрения современной теории многих тел. Эти более современные теории кратко рассматриваются в § 113. Такая современная динамика решетки подробно изложена в работе [9]. Теория инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света кристаллами может быть тоже построена без адиабатического приближения. Для этого применяют современные методы теории многих тел, основанных на вычислении диэлектрической проницаемости. Некоторые из этих работ кратко обсуждаются в т. 2, § 6; более подробно данный вопрос рассматривается в работе [9].

В § 112, 113 изложена традиционная теория Борна — Оппенгеймера. Несмотря на то что она обычно излагается в учебниках [4], она необходима нам здесь, чтобы ввести единые обозначения, а также для ссылок в дальнейшем на эти параграфы. В § 114 мы обсуждаем переход от классических к квантовым нормальным координатам. В § 115—118 рассматривается симметрия собственных состояний решетки в гармоническом приближении. В этих параграфах при выполнении процедуры приведения симметризованных степеней неприводимых представлений пространственных групп получены характеристики обертонов и комбинированных частот по симметрии.

Нарушение адиабатичности в случае изоляторов можно связать с взаимодействием ян-теллеровского типа решетки с электронами, которое может проявляться либо при некоторых фазовых переходах [90], либо в таких изоляторах, где ширина запрещенной зоны того же порядка величины, что и энергия фонона. Но этот интересный и важный вопрос выходит за рамки данной книги и больше обсуждаться не будет.

§ 112. Гамильтониан системы многих частиц, состоящей из ионов и электронов

Обозначим кинетическую энергию системы электронов и ионов через T, где

$$T = T_N + T_E. \tag{112.1}$$

Здесь

$$T_N = \frac{1}{2} \sum M\dot{\boldsymbol{X}}^2 = \sum \frac{1}{2M} \boldsymbol{P}^2 \tag{112.2}$$

— кинетическая энергия ядер, а

$$T_E = \frac{1}{2} \sum m\dot{\boldsymbol{x}}^2 = \sum \left(\frac{1}{2m}\right) \boldsymbol{p}^2 \tag{112.3}$$

— кинетическая энергия электронов.

В этом параграфе мы сначала не будем выписывать индексы, так как мы не будем рассматривать конкретные одночастичные свойства систем. Пусть X и x обозначают соответственно координаты ядер и электронов. Суммы (112.2) и (112.3) следует вычислять по всем степеням свободы электронов и ядер. Так как эти частицы заряжены, потенциальная энергия системы $U(X, x)$ имеет вид полной кулоновской энергии взаимодействия между электронами и ядрами:

$$U(X, x)=\sum \frac{ZZ'e^2}{|X-X'|}+\sum \frac{e^2}{|x-x'|}-\sum \frac{Ze^2}{|X-x|}, \quad (112.4)$$

где Ze — заряд ядра, а $-e$ — заряд электрона.

Квантовомеханический гамильтониан в шредингеровском представлении получается заменой в (112.2) и (112.3) динамических переменных на соответствующие операторы:

$$\boldsymbol{P} \to \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}\right), \qquad \boldsymbol{p} \to \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\right). \quad (112.5)$$

Будем считать, что в T_N и T_E такая замена уже выполнена. Тогда мы должны решить квантовомеханическое многочастичное уравнение Шредингера

$$\mathscr{H}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{X};\ \boldsymbol{p},\ \boldsymbol{x})\,\Psi(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})=E\Psi(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x}), \quad (112.6)$$

где $\mathscr{H}$ — квантовомеханический оператор

$$\mathscr{H}=T_N+T_E+U, \quad (112.7)$$

а Ψ — многочастичная собственная функция. Следует отметить, что пока не сделано никаких предположений о существовании равновесной решетки или кристалла. Можно, конечно, постулировать существование пространственной решетки $\mathfrak{G}$, такой, что если все совокупности координат одновременно подвергнуть линейному преобразованию из $\mathfrak{G}$, то $\mathscr{H}$ при этом останется инвариантным. Существование такой группы $\mathfrak{G}$ до сих пор еще не установлено из чисто квантовомеханического рассмотрения.

§ 113. Адиабатическое приближение Борна — Оппенгеймера [4]

Полный гамильтониан системы запишем в виде

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+T_N, \quad (113.1)$$

где, аналогично (112.2), T_N — кинетическая энергия ядер. Тогда $\mathscr{H}_0$ есть гамильтониан всех электронов, движущихся в поле ядер, мгновенные положения которых обозначены через $\{X_i\}$. Тогда

$$\mathscr{H}_0=T_E+U. \quad (113.2)$$

а. Теория возмущений Борна — Оппенгеймера. Пусть нам известен полный набор решений для электронной задачи

$$\mathscr{H}_0\varphi_\nu(X,\ x)=(T_E+U)\,\varphi_\nu(X,\ x)=W_\nu(X)\,\varphi_\nu(X,\ x). \quad (113.3)$$

В (113.3) $\varphi_\nu(X, x)$ — собственная функция электронов. Она является функцией электронных координат $\{x\}$ и зависит от положения ядер $\{X\}$ как от параметров. Собственная энергия электронов $W_\nu(X)$ также зависит от $\{X\}$ как от параметров. Квантовые числа $\{\nu\}$ нумеруют электронные состояния. Будем считать полный набор φ_ν удовлетворяющим условиям ортонормированности для любого заданного набора $\{X_i\}$:

$$(\varphi_\nu, \varphi_{\nu'})_x \equiv \int d^3x \varphi_\nu^* (X, x) \varphi_{\nu'} (X, x) = \delta_{\nu\nu'}. \tag{113.4}$$

Определим величину

$$\varkappa \equiv \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4}, \tag{113.5}$$

являющуюся параметром теории. Здесь m и M — массы электрона и иона. Предположим, что для каждого иона существуют положения равновесия X_i^0, и рассмотрим малые отклонения от этих положений равновесия. Тогда мы можем записать

$$X_i = X_i^0 + \varkappa u_i, \tag{113.6}$$

где $\varkappa$ определено в (113.5), а u — динамическая переменная, соответствующая в классической теории отклонению атомов от положений равновесия.

Теперь мы можем записать (113.2) в виде

$$\mathscr{H}_0 (X^0 + \varkappa u) \varphi_\nu (X^0 + \varkappa u, x) = W_\nu (X^0 + \varkappa u) \varphi_\nu (X^0 + \varkappa u, x). \tag{113.7}$$

Разлагая все члены в (113.7) в ряд по $\varkappa u$, получаем

$$\mathscr{H}_0 (X^0 + \varkappa u, x) = \sum_\lambda \varkappa^\lambda \mathscr{H}_0^\lambda (x), \tag{113.8}$$

$$\varphi_\nu (X^0 + \varkappa u, x) = \sum_\mu \varkappa^\mu \varphi_\nu^\mu (X^0, x), \tag{113.9}$$

$$W_\nu (X^0 + \varkappa u) = \sum_\sigma \varkappa^\sigma W_\nu^\sigma (X^0). \tag{113.10}$$

Подставляя (113.8)—(113.10) в (113.7), получаем член s-й степени по $\varkappa$ в виде

$$\varkappa^s \left(\mathscr{H}_0^0 - W_\nu^0\right) \varphi_\nu^s = - \sum_{\lambda=0}^{s-1} \left(\mathscr{H}_0^{(s-\lambda)} - W_\nu^{(s-\lambda)}\right) \varphi_\nu^\lambda \varkappa^s. \tag{113.11}$$

Отметим, что каждое из этих уравнений является однородным уравнением s-й степени по переменной u. Будем считать, что все решения (113.11) известны в любом нужном порядке.

Вернемся к обсуждению T_N. Из определения (112.2) и (113.6) видно, что

$$T_N (X) = \varkappa^2 \sum \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u_j^2}\right) \equiv \varkappa^2 H_1 (u). \tag{113.12}$$

Таким образом, кинетическая энергия ядер как функция новой динамической переменной u оказывается величиной второго порядка. Вернемся теперь к исходной задаче многих тел (112.6)

$$\mathscr{H}(X, x)\,\Psi(X, x) = E\Psi(X, x), \tag{113.13}$$

или

$$(\mathscr{H}_0 + T_N)\,\Psi(X, x) = E\Psi(X, x). \tag{113.14}$$

Разложим здесь тоже все величины в ряд по малому параметру $\varkappa$. Тогда получим

$$\Psi(X, x) = \Psi(X^0 + \varkappa u, x) = \sum_\tau \varkappa^\tau \Psi^{(\tau)}(u, \varkappa), \tag{113.15}$$

$$E = \sum_\rho \varkappa^\rho E^\rho. \tag{113.16}$$

Тогда общее уравнение для члена s-го порядка по $\varkappa$ имеет вид

$$\varkappa^s\left(\mathscr{H}_0^0 - E^0\right)\Psi^{(s)} = -\varkappa^s \sum_\lambda \left(\mathscr{H}_0^{(s-\lambda)} + H_1\delta_{s-\lambda, 2} - E^{(s-\lambda)}\right)\Psi^{(\lambda)}. \tag{113.17}$$

В (113.17) член, содержащий H_1, следует учитывать наряду с другими членами второго порядка по $\varkappa$. Следует отметить, что $E^{(\rho)}$ — константа, а $W_\nu^{(\rho)}$ содержит u^ρ. Сравнивая (113.7) и (113.11) почленно, получим хорошо известное условие разрешимости общего многочастичного уравнения (113.13) при условии, что известны решения уравнения (113.11):

$$E^{(0)} = W_\nu^0, \tag{113.18а}$$

$$E^{(1)} = W_\nu^{(1)} = \sum \left(\frac{\partial W_\nu}{\partial X}\right)\left(\frac{X - X^0}{\varkappa}\right) = 0. \tag{113.18б}$$

Таким образом, (113.18б) определяет равновесные положения ионов, так как условие

$$\left(\frac{\partial W_\nu}{\partial X}\right)_{X^0} = 0 \tag{113.19}$$

определяет положение равновесия $\{X^0\}$. С такой точностью полная волновая собственная функция Ψ имеет вид

$$\Psi(x, u) = \left(\varphi_\nu^{(0)}(X^0, x) + \varphi_\nu^{(1)}(X^0, x)\right)\chi_\nu^{(0)}(u). \tag{113.20}$$

Чтобы определить неизвестные функции $\chi_\nu^{(0)}(u)$, нам понадобятся члены второго порядка по u^2. Сравнивая (113.11) и (113.17) с такой точностью, мы получаем уравнение для определения $\chi_\nu^0(u)$:

$$\left[H_1 + W_\nu^{(2)}(u) - E^{(2)}\right]\chi_\nu^0(u) = 0 \tag{113.21}$$

или

$$\varkappa^2\left(T_N + \sum\left(\frac{\partial^2 W_\nu}{\partial X_l\,\partial X_j}\right)_{\{X^0\}} u_l u_j - E^{(2)}\right)\chi_\nu^0(u) = 0. \tag{113.22}$$

Очевидно, что (113.22) — обычное уравнение Шредингера для системы связанных гармонических осцилляторов. Здесь хорошо видно, что (113.22) можно привести к диагональной квадратичной форме, записанной в переменных

$$\left\{\frac{\partial}{\partial u_l}\right\}, \quad \{u_l\}. \tag{113.23}$$

Тогда решение уравнения (113.22) будет произведением функций простых гармонических осцилляторов. Мы этим воспользуемся позже.

Пользуясь теорией возмущений, можно дальше легко показать, что с точностью до $\varkappa^4$ мы можем записать полные волновые функции в виде

$$\Phi(X, x) = \varphi(X^0, x)\chi(u). \tag{113.24}$$

Здесь $\chi(u)$ является решением уравнения

$$\left(T_N\left(\frac{\partial}{\partial u}\right) + W_\nu(u) - E\right)\chi(u) = 0, \tag{113.25}$$

где

$$W_\nu = W_\nu^{(0)} + \sum_{uu'} \Phi^{(2)}(u, u')/2! + \sum_u \sum_{u'} \sum_{u''} \Phi^{(3)}(u, u', u'')/3! + \\ + \sum_u \sum_{u'} \sum_{u''} \sum_{u'''} \Phi^{(4)}(u, u', u'', u''')/4!. \tag{113.26}$$

Члены третьего и четвертого порядка в (113.26) являются ангармоническими членами. Ход рассуждений здесь ясен: получается уже известное адиабатическое разделение многочастичной системы на электронную и ионную части, связанные в уравнении (113.26) через потенциальную энергию движения ядер.

Если теперь предположить, что положения равновесия X^0 являются такими равновесными положениями, в которых ионы находятся в узлах кристаллической решетки:

$$X^0 = r^{(0)}\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}, \tag{113.27}$$

то переменным u можно приписать индексы уже известных декартовых компонент смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Тогда (111.26) принимает вид

$$W_\nu(u) = W_\nu^{(0)} + \sum_{l\varkappa\alpha} \sum_{l'\varkappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \varkappa & \varkappa' \end{pmatrix} u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix} u_\beta\begin{pmatrix} l' \\ \varkappa' \end{pmatrix}. \tag{113.28}$$

Это выражение полностью поясняет физический смысл $W_\nu(u)$ как потенциальной энергии движения ядер. Отсюда, с другой стороны, видна тесная связь этой потенциальной энергии с электронным состоянием системы. Самым существенным в адиабатическом приближении является то, что электронные состояния не меняются при движении ядер, так что характеризующий электронное состояние индекс ν остается фиксированным. Приведенное рассмотрение оправдывает выделение из движения всей многочастичной системы независимых колебаний ядер кристаллической решетки. Однако при этом подчеркивается тесная связь электронных состояний с этими колебаниями.

б. Метод Борна. Как видно из предшествующего рассмотрения, использование теории возмущений здесь оправдано только до четвертой степени по $\varkappa$ [4, 89]. Это означает, что в таком рассмотрении нельзя учитывать в потенциальной энергии члены пятого и более высоких порядков.

Возможен несколько иной подход ([4], приложение VIII), в котором электронное уравнение (113.3) считается уже решенным и собственные значения $W_\nu(X)$ и собственные функции этого уравнения $\varphi_\nu(X, x)$ рассматриваются как известные. Разложим теперь точную собственную функцию в ряд по $\varphi_\nu(X, x)$:

$$\Psi(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x}) = \sum_{\nu} \varphi_\nu(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,\chi_\nu(\boldsymbol{X}). \tag{113.29}$$

Набор волновых функций $\varphi_\nu(X, x)$ является полным; нами выписано общее разложение, и вся процедура сводится теперь к определению коэффициентов $\chi_\nu(X)$. Подставляя (113.29) в точное уравнение (113.1) и используя условие ортогональности и нормировки решений уравнения (113.1), получим

$$\int \varphi_\nu^*(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,\varphi_\mu(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x} = \delta_{\nu\mu}, \tag{113.30}$$

где (113.30) не зависит от ядерных координат X. После подстановки получим уравнение для $\chi_\nu(X)$:

$$(T_N(\boldsymbol{X}) + W_\nu(\boldsymbol{X}) - E)\,\chi_\nu(\boldsymbol{X}) + \sum_{\nu\nu'} C_{\nu\nu'}(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{P})\,\chi_{\nu'}(\boldsymbol{X}) = 0, \tag{113.31}$$

где

$$C_{\nu\nu'} \equiv \sum_{\varkappa} \left(\frac{1}{M_\varkappa}\right)\left(A_{\nu\nu'}^{(\varkappa)} P_\varkappa + B_{\nu\nu'}^{(\varkappa)}\right); \tag{113.32}$$

здесь $\boldsymbol{P}_\varkappa$ — оператор импульса ядер:

$$\boldsymbol{P}_\varkappa = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}, \tag{113.33}$$

$$A_{\nu\nu'}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{X}) = \int \varphi_\nu^*(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,P_\varkappa \varphi_{\nu'}(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,d^3\boldsymbol{x}, \tag{113.34}$$

$$B_{\nu\nu'}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\int \varphi_\nu^*(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,P_\varkappa^2 \varphi_{\nu'}(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{x})\,d^3\boldsymbol{x}. \tag{113.35}$$

Отметим, что в (113.34) и (113.35) оператор градиента по ядерным координатам действует на собственные функции электронной задачи, которые содержат координаты ядер как параметры. Если предположить, что различные электронные состояния не связаны при $\nu \neq \nu'$, тогда $C_{\nu\nu'} = 0$ при $\nu \neq \nu'$. При $\nu = \nu'$ для стационарных состояний вещественного гамильтониана $A_{\nu\nu}^{(\varkappa)} = 0$. Следовательно, (113.21) можно записать в виде

$$(T_N(X) + U_\nu(X) - E)\chi_\nu(X) = 0, \tag{113.36}$$

где полная потенциальная энергия имеет вид

$$U_\nu(X) = W_\nu(X) + \sum_\varkappa \frac{1}{M_\varkappa} B_{\nu\nu}^{(\varkappa)}. \tag{113.37}$$

Уравнения (113.36) и (113.37) являются полными уравнениями движения ядер в предположении, что членами с $\nu \neq \nu'$, описывающими межэлектронные переходы, можно пренебречь либо они точно равны нулю. В этом уравнении имеются ангармонические члены всех степеней, так что потенциальную энергию $U_\nu(X)$ этого параграфа можно отождествить с полной ангармонической потенциальной энергией Ф из § 108.

Предполагая, что существуют некоторые положения устойчивого равновесия, для которых можно найти набор величин X^0, мы можем рассматривать $T_N(\partial/\partial u)$ и $U_\nu(u)$ как функции декартовых компонент смещений $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$ и записать

$$U_\nu(u) \equiv \Phi_\nu(u) = \Phi_\nu^{(0)} + \Phi_\nu^{(2)} + \ldots + \Phi_\nu^{(s)}. \tag{113.38}$$

В нашем рассмотрении индекс ν, характеризующий электронные состояния, не играет никакой роли и его можно не писать. Это предположение, применимость которого для изоляторов кажется в настоящее время оправданной.

Неадиабатические члены, описывающие электрон-фононное взаимодействие, возникают в теории одним из двух эквивалентных способов. В разложении теории возмущений (113.8) и в последующих уравнениях это взаимодействие возникает в пятом порядке. В методе (113.29) и в последующих уравнениях, где использовано прямое разложение, неадиабатические члены возникают из недиагональных членов $C_{\nu\nu'}$ с $\nu \neq \nu'$ [4].

Ниже мы используем адиабатическое приближение для нашей системы (электроны плюс ионы) и будем считать при этом, что полная собственная функция системы содержит всего один член разложения (113.29):

$$\Psi_\nu(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{x}) = \Phi_\nu(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{x})\chi_{\nu\{n\}}(\boldsymbol{X}), \tag{113.39а}$$

или

$$|\Psi_{\text{адиабат}}\rangle = |\Psi_{\text{электрон}}\rangle|\Psi_{\text{решетка}}\rangle. \tag{113.39б}$$

Важно учитывать, что это электронное состояние представляет собой в действительности многоэлектронное состояние, зависящее от положений всех ядер. В качестве рабочего варианта такое электронное состояние можно иногда записать в форме слэтеровского определителя, составленного из одноэлектронных функций, или суммы слэтеровских определителей. Соответственно собственные функции решетки относятся ко всем ионам. Если теперь рассмотреть собственные функции решетки в гармоническом приближении, то энергия кристалла, соответствующая состоянию (113.29), будет иметь вид

$$E_\nu = \Phi_\nu^{(0)} + \varkappa^2 E_{\nu\{n\}}^{(2)}. \tag{113.40}$$

Здесь первый член является полной электронной энергией при фиксированном расположении ионов, а второй член равен сумме энергий всех ядер. В гармоническом приближении

$$\varkappa^2 E_{\nu\{n\}}^{(2)} = \sum_{\{n\}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \tag{113.41}$$

Следовательно, энергия решетки является просто суммой энергий гармонических осцилляторов. Сумма по всем $\{n\}$ означает суммирование по всем наборам колебательных квантовых чисел решетки.

В дальнейшем [т. 2, уравнение (3.37)] нам понадобится выражение для разности энергий двух адиабатических собственных состояний рассматриваемой системы. Обозначим эти два состояния следующим образом [см. (113.39a)]: $\Psi_\nu = \Phi_\nu \chi_{\nu\{n\}}$ и $\Psi_\mu = \Phi_\mu \chi_{\mu\{m\}}$. Тогда разность энергий равна

$$E_\mu - E_\nu = \left(\Phi_\mu^{(0)} - \Phi_\nu^{(0)}\right) - \varkappa^2 \left(E_{\mu\{m\}}^{(2)} - E_{\nu\{n\}}^{(2)}\right). \tag{113.42}$$

Имея в виду наше дальнейшее рассмотрение в т. 2, § 3, заметим, что разность энергий $\left(E_{\mu\{m\}}^{(2)} - E_{\nu\{m\}}^{(2)}\right)$ является разностью энергий двух различных собственных состояний решетки — одного, связанного с электронным состоянием μ и с набором квантовых чисел $\{m\}$, и другого, относящегося к электронному состоянию ν с набором $\{n\}$. Обычно при малой разности чисел фононов в состояниях $\{m\}$ и $\{n\}$ эта разность энергий много меньше разности энергий $\left(\Phi_\mu^0 - \Phi_\nu^{(0)}\right)$ между электронными состояниями. Следовательно, разумно в рамках адиабатического приближения принять

$$E_\mu - E_\nu \sim \left(\Phi_\mu^0 - \Phi_\nu^0\right) \tag{113.43}$$

для случая малой энергии фононных возбуждений. Как станет ясно ниже, важная роль такого адиабатического приближения определяется тем, что правая часть (113.43) не зависит от колебательных квантовых чисел.

в. Гармоническое адиабатическое приближение. Гармоническое адиабатическое приближение получается по аналогии с классическим гармоническим приближением, когда в ряде (113.20) оставляют только члены второго порядка $\Phi^{(2)}$. В этом случае уравнение Шредингера для ядерного движения имеет вид

$$\left(T_N(\partial/\partial u) + \Phi_\nu^{(0)} + \Phi_\nu^{(2)}(u) - E\right)\chi_\nu(u) = 0. \qquad (113.44)$$

Здесь введен индекс ν, чтобы подчеркнуть, что само существование и специфическая форма потенциальной энергии ядер зависит от электронного состояния системы, определяемого индексом ν. В приведенной здесь форме уравнение (113.44) описывает движение ядер как движение $3rN$ связанных гармонических осцилляторов. Чтобы расцепить осцилляторы, нужно провести преобразование к комплексным нормальным координатам аналогично (80.9), (80.10). Это унитарное преобразование приводит потенциальную энергию к диагональной форме (80.3) и оставляет кинетическую энергию $\Phi_\nu^{(2)}$ в ее диагональной форме (80.5). В классической теории [4] после преобразования к комплексным нормальным координатам можно перейти любым из двух способов к вещественным нормальным координатам. Этот вопрос обсуждается ниже в § 114.

г. Новые теоретические результаты. Недавно было предпринято несколько попыток еще раз рассмотреть адиабатическое приближение, используя аппарат функций Грина и другие методы, отличающиеся от использованных нами. Мы просто упомянем здесь некоторые из этих работ, чтобы заинтересовавшийся читатель мог ознакомиться с литературой, включая дискуссию в работе [9]. Диаграммные методы вычисления энергии и других физических величин, связанных с корреляционными функциями для смещений (см. в связи с этим краткое обсуждение в т. 2, § 6), были применены несколькими авторами [91—93] на основе формализма, предложенного Беймом [94]. Формализм обобщенной многочастичной диэлектрической постоянной, учитывающий отклик системы электронов на движение ионов (согласно адиабатической теории, именно это является причиной возникновения силовых постоянных), представлен в работах Пика, Мартина и Коэна [95—97]. Эта теория была применена Мартином [96, 97] к нескольким случаям. Формализм матрицы плотности был развит Джонсоном [98]; по-видимому, он ближе всего соответствует теории возмущений метода Борна — Оппенгеймера. Билц и Глисс [99] выполнили расчеты, в которых пытались установить связь с расчетами динамики решетки в модели оболочек. Другие попытки выйти за рамки адиабатического приближения были предприняты с помощью ряда канонических преобразований полного гамильтониана[1]) и на основе нового многочастичного вариационного метода [100]. Краткий обзор полученных результатов дали Раджагопал и Коэн [101]. Эти работы обсуждаются также в нескольких статьях Трудов конференции по фононам[2]) и в статье [102].

Для целей нашей книги адиабатическая теория представляется вполне адекватной и допускающей сопоставление с экспериментом. Поэтому мы положили ее в основу рассмотрения, за исключением специально оговоренных случаев.

§ 114. Нормальные координаты и квантование

Проследим теперь путь перехода от уравнения Шредингера (113.44) к более удобному и знакомому уравнению [4]. Заметим, что, как видно из (113.12), кинетическая энергия в (113.44) имеет диагональный вид относительно производных по декартовым смещениям, т. е. она представляет собой сумму квадратов. Но потенциальная энергия в (113.28) имеет вид общего квадратичного выражения относительно динамических переменных $\{u_l\}$. Набор $\{u_l\}$ содержит все декартовы компоненты, так что мы можем теперь восстановить все индексы, опущенные в (113.6), если сделаем подстановку

$$u_l \to u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}. \tag{114.1}$$

Тогда потенциальная энергия в уравнении Шредингера (113.44) соответствует классическому выражению (67.8). Следовательно, определенные в (67.7) микроскопические силовые постоянные получили обоснование: силовые постоянные являются вторыми производными полной электронной энергии (в адиабатическом приближении) по смещениям ядер $u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}$. Однако даже в гармоническом адиабатическом приближении уравнение (113.22) не является разрешимым, так как из-за наличия перекрестных членов в (113.28) мы имеем дело со связанной динамической системой.

Первый этап решения требует, чтобы (113.28) было приведено к диагональной форме (допускающей разделение). Для этого нужно ввести нормальные координаты. Эта процедура в точности совпадает с уже выполненной нами в гл. 8 и 9. Возможно, полезно повторить эту процедуру, начиная, например, с уравнения (73.1) и т. д., где вводятся вещественные нормальные

[1]) Х. Билц, Е. Зибелл, неопубликованная работа.
[2]) Proceedings of the International Conference on Phonons, Rennes, 1971.

координаты q_{j_ρ}:

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}}\sum_l\sum_\rho e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \varkappa \end{matrix}\middle| j_\rho\right)q_{j_\rho}, \tag{114.2}$$

или (80.9), (86.1), где вводятся комплексные нормальные координаты $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$:

$$u_\alpha\begin{pmatrix} l \\ \varkappa \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}\,N}\sum_j\sum_\nu\sum_{\boldsymbol{k}}\exp i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_L e_\alpha\left(\varkappa\middle|\begin{matrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{matrix}\right)Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}. \tag{114.3}$$

Оба эти преобразования приводят классическую потенциальную энергию к диагональному виду и, следовательно, расцепляют члены в (113.22).

В § 101 было установлено, что удобный способ учета полной группы пространственно-временной симметрии $\mathcal{G}$ состоит во введении в качестве динамических переменных комплексных нормальных координат $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix}$, так как именно они являются базисом неприводимых представлений группы $\mathcal{G}$. Таким образом, для учета симметрии кристалла комплексные нормальные координаты являются более удобными.

С другой стороны, в квантовой механике более удобными являются вещественные основные переменные, так как комплексные классические координаты и импульсы при выполнении процедуры квантования дают локальные степени свободы, обусловленные калибровкой ([103], стр. 12). При обычном рассмотрении [4] вводят либо вещественные нормальные координаты первого рода

$$q_{1,2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}=\begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}+Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}\right), \\ \dfrac{1}{i\sqrt{2}}\left(Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}-Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}\right), \end{cases} \tag{114.4}$$

либо вещественные нормальные координаты второго рода

$$q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\left[Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}+Q\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}\right]+ \\ +\left(\frac{i}{2\omega(\boldsymbol{k}\mid j)}\right)\left[\dot{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}-\dot{Q}\begin{pmatrix} -\boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}\right]. \tag{114.5}$$

Большое преимущество нормальных координат (114.5) состоит в том, что они описывают бегущие волны [4], а после квантования описывают фононы.

Сопоставление трех наборов вещественных нормальных координат показывает следующее. Набор $\{q_{j_\rho}\}$ с $j_\rho = 1, \ldots, s \cdot l_j$, определенный в (114.2), не является базисом неприводимых представлений группы $\mathfrak{G}$ или копредставлений группы $\mathcal{G}$; набор вещественных нормальных координат первого рода $\left\{ q_\lambda \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\nu \end{pmatrix} \right\}$ с $\lambda = 1, 2$ и $j_\mu = 1, \ldots, l_j$ тоже не является базисом неприводимых представлений во всех случаях, кроме вещественных $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$; набор вещественных координат второго рода $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$ с $\mu = 1, \ldots, l_j$, определенный в (114.5), тоже не является базисом неприводимых представлений во всех случаях, кроме вещественных $Q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$. Так как условие вещественности, вообще говоря, не выполняется, можно сделать вывод, что обычная процедура квантования [4, 63], применимая к вещественным нормальным координатам, не совместима с выполнением свойств симметрии нормальных координат.

В последующем рассмотрении мы воспользуемся обычной процедурой и просто предположим, что можно выбрать совокупность нормальных координат $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$, которая, с одной стороны, является базисом неприводимого представления унитарной группы $\mathfrak{G}$ и может быть использована в качестве базиса копредставлений группы $\mathcal{G}$, а с другой стороны, может квантоваться обычным способом без появления ложных степеней свободы. Далее, мы предположим, что при преобразовании P_u, где u — унитарный оператор $\{\varphi | \boldsymbol{t}\}$ из группы $\mathfrak{G}$, имеем

$$P_u q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\alpha \end{pmatrix} = \sum_{\tau\beta} D^{({}^*\boldsymbol{k})(j)}(u)_{\tau\beta,\,\sigma\alpha}\, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\tau \\ j_\beta \end{pmatrix}. \tag{114.6}$$

Тогда, используя обычное правило

$$p\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}}, \tag{114.7}$$

уравнение (113.22), содержащее квантовомеханический гамильтониан, можно привести к следующему виду:

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\sigma} \sum_{j} \sum_{\mu} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2} + \omega^2(\boldsymbol{k}_\sigma | j)\, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2 + \Phi_\nu^{(0)} - E \right\} \times$$

$$\times \chi_\nu\left(\left\{ q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} \right\} \right) = 0. \tag{114.8}$$

Уравнение (114.8) является уравнением Шредингера для движения ядер в гармоническом адиабатическом приближении.

§ 115. Собственные функции колебаний решетки в гармоническом адиабатическом приближении

Уравнение (114.8) содержит сумму членов, и поэтому переменные в нем разделяются. Откажемся на время от предположения о вырождении колебаний $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}$, которое явно содержится в (114.8), так как $\omega^2(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j)$ не зависит от μ. Тогда каждую из $3rN$ координат можно рассматривать как независимую. При этом решение уравнения (114.8) записывается в виде произведения

$$\chi_\nu(\{q\}) = \prod_{a=1}^{3rN} \chi_a\left(q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}\right), \tag{115.1}$$

где каждая функция зависит только от одной координаты $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}$. Тогда каждая функция удовлетворяет отдельному уравнению для гармонического осциллятора

$$\frac{1}{2}\left\{-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2} + \omega^2(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j)\, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2 - \mathscr{E}_a(n_{\sigma,j})\right\} \times$$
$$\times \chi_a\left(q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}\right) = 0. \tag{115.2}$$

Здесь

$$\mathscr{E}_a(n_{\sigma j \mu}) = \left[n_{\sigma j \mu} + \frac{1}{2}\right]\hbar\omega(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j). \tag{115.3}$$

Так как l_j нормальных колебаний для заданных σ, j вырождены, то $\omega^2(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j)$ не зависит от индекса μ. Тогда у волновых функций отдельных осцилляторов можно опустить индекс a и записать их в виде

$$\chi\left(n(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j_\mu),\ q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}\right) =$$
$$= C \exp -\left[\frac{1}{2}\gamma_{\sigma,j}\left(q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2\right)\right] H_{n_{\sigma,j}}\left(\gamma_{\sigma,j}\, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}\right), \tag{115.4}$$

где

$$\gamma_{\sigma,j} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\omega(\boldsymbol{k}_\sigma \mid j), \tag{115.5}$$

а $H_n(\gamma q)$ — полином Эрмита порядка n; C — нормировочная постоянная:

$$C = \left[\left(\frac{\gamma_{\sigma, j}}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{2^{n_{\sigma, j, \mu}} (n_{\sigma, j, \mu})!} \right]^{1/2}. \qquad (115.6)$$

Полная колебательная энергия в гармоническом адиабатическом приближении получается суммированием по всем осцилляторам

$$\mathscr{E} = \sum_{\boldsymbol{k}, \sigma, j, \mu} \left(n_{\sigma, j, \mu} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega (\boldsymbol{k}_\sigma \mid j). \qquad (115.7)$$

Полная энергия системы, включающая колебательную и электронную части, равна

$$E = \Phi_\nu^{(0)} + \sum_{\boldsymbol{k}, \sigma, j, \mu} \left(n_{\sigma, j, \mu} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega (\boldsymbol{k}_\sigma \mid j), \qquad (115.8)$$

где Φ_ν^0 — электронная энергия, а индекс ν для частот отброшен.

Полные колебательные собственные функции системы строятся из функций (115.4) в гармоническом приближении в виде произведения:

$$\chi_\nu(q) = \text{const} \times \exp - \left[\frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}, \sigma, j} \gamma_{\sigma, j} \sum_{\alpha} q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}^2 \right] \times$$
$$\times \prod_{\boldsymbol{k}, \sigma, j} \prod_{\mu} H_{n_{\sigma, j, \mu}} \left(\gamma_{\sigma j} q \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} \right). \qquad (115.9)$$

Эти гармонические волновые функции будут использованы нами ниже в конкретном анализе. По-видимому, следует отметить, что гармоническое представление (115.9) является следствием гармонического гамильтониана. Собственные функции (115.9) не составляют полного набора, так как нужно учесть еще общую симметрию, связанную с неразличимостью осцилляторов, соответствующих одному и тому же неприводимому представлению. Такая естественная симметризация, обусловленная статистикой, будет обсуждаться ниже в § 116.

Более общим уравнением адиабатической теории, описывающим движение ядер, является уравнение (113.25). Хотя наш общий теоретико-групповой анализ правил отбора и симметрии собственных состояний не зависит от применимости гармонического адиабатического приближения, конкретное обсуждение различных процессов поглощения и рассеяния будет выполнено ниже с помощью волновых функций в виде произведения (115.9).

§ 116. Симметрия волновых функций колебаний решетки в гармоническом приближении. Введение

В соотношении (114.6) мы считали, что нормальные координаты $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_\mu \end{pmatrix}$ преобразуются друг через друга в некотором неприводимом линейном векторном пространстве. Матрица преобразования при этом является характеристикой неприводимого представления унитарной кристаллической пространственной группы $\mathfrak{G}$. Рассмотрим сначала преобразование волновых функций колебаний решетки, имеющих вид произведения (115.9), под действием операций $\{\varphi|t\}$ пространственной группы. Оказывается весьма существенным, что преобразование (114.6) является линейным и однородным. Применим лемму о существенном вырождении, из которой следует, что классификация состояний всегда такова, что состояния с разной симметрией можно рассматривать порознь. Далее, мы установим связь предыдущего рассмотрения с теорией симметрии n-мерного изотропного гармонического осциллятора [104]. Три параграфа, § 116—118, заканчиваются обсуждением симметрии общей адиабатической решеточной волновой функции, являющейся решением уравнения (113.18) и полной волновой функции кристалла (113.11) в адиабатическом приближении.

Еще один возможный способ записи волновых функций (115.9) состоит в задании упорядоченного по величине набора целых чисел, соответствующего упорядоченному расположению различных множителей в (115.9). Такая запись гармонических собственных функций особенно удобна, конечно, когда обсуждение свойств решетки ведется в представлении чисел заполнения или в N-представлении вторичного квантования. Волновая функция в этом представлении имеет вид

$$|n({}^*\boldsymbol{k}j), \ldots, n({}^*\boldsymbol{k}'j'), \ldots, n({}^*\boldsymbol{k}''j''), \ldots\rangle. \qquad (116.1)$$

Когда волновая функция (115.9) записана таким способом, следует обратить внимание на то, что в многоосцилляторной волновой функции существенна не занятость любого конкретного участвующего в представлении $D^{({}^*\boldsymbol{k})(j)}$ состояния, а полное число квантов $n({}^*\boldsymbol{k}j)$, которое должно учитывать все участвующие состояния.

Согласно общим принципам квантовой механики [105], собственная функция любого ансамбля одинаковых фононов (бозонов) должна быть симметричной по отношению к перестановке одинаковых частиц вырожденной совокупности. Поэтому (115.9) нужно симметризовать по отношению к перестановке частиц. Пусть $\mathcal{S}$ обозначает симметризацию. Очевидно, что для каждого представления $\mathscr{S}$ можно представить в виде

$$\mathscr{S}=\prod_{kj}\mathscr{S}(^{\star}kj). \qquad (116.2)$$

Тогда симметризованную волновую функцию можно записать в виде

$$\chi_{\nu}^{(\text{симм})}(q)=\mathscr{S}\chi_{\nu}(q), \qquad (116.3)$$

где $\chi_{\nu}(q)$ определено в (115.9).

Рассмотрим теперь общую операцию симметрии $\{\varphi|t\}$ унитарной группы $\mathfrak{G}$, которой, согласно (114.6), соответствует представление $D^{(^{\star}k)(j)}$. Из анализа инвариантности классического гармонического гамильтониана в § 110 следует, что экспоненциальный множитель в (115.9) зависит только от суммы квадратов нормальных координат:

$$-\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\,j,\,\mu}\gamma_{\sigma,\,j}\sum\left[q\begin{pmatrix}k_{\sigma}\\ j_{\mu}\end{pmatrix}\right]^{2}. \qquad (116.4)$$

Из (110.10)—(110.15) непосредственно видно, что квадратичная форма (116.4) является квадратичным инвариантом при преобразованиях q с помощью унитарных преобразований из группы $\mathfrak{G}$. Следовательно, чтобы установить, как преобразуется полная собственная функция колебаний решетки под действием унитарных пространственных преобразований, нужно исследовать только преобразование второго множителя в (115.9).

§ 117. Преобразование произведения полиномов Эрмита: симметризованное произведение представлений

Чтобы установить правила преобразования симметризованной волновой функции (116.3) при преобразованиях пространственной симметрии, мы проведем рассмотрение в несколько этапов. Во-первых, возвращаясь к (115.9), мы изучим преобразование всех членов некоторой цепочки сомножителей, относящихся к заданному неприводимому представлению $D^{(^{\star}k)(j)}$. При этом из произведения (115.9) оказываются отобранными $s\cdot l_m$ множителей с фиксированным k, всеми k_{σ} $(\sigma=1, \ldots, s)$ из $^{\star}k$ и всеми связанными с ними l_{μ} $(\mu=1, \ldots, l_j)$. Сначала мы рассмотрим преобразование такой цепочки сомножителей, а затем выполним симметризацию.

Цепочка сомножителей, относящаяся к $D^{(^{\star}k)(j)}$, состоит из двух множителей: экспоненты с показателем типа (116.4), не зависящей от чисел заполнения $h_{\sigma,\,j,\,\mu}$, и произведения полиномов Эрмита. Как указано в тексте после формулы (116.4), экспонента ведет себя тривиальным образом. Наша задача состоит в выяснении поведения «нетривиального» множителя в (115.9). Интересующее нас произведение имеет вид

$$\prod_{\sigma}\prod_{l}\prod_{\mu} H_{n_{\sigma, l, \mu}}\left(\gamma_{\sigma l} q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}\right), \qquad (117.1)$$

где $n_{\sigma, l, \mu}$ — квантовое число осциллятора $q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}$ (число возбужденных фононов). Чтобы несколько упростить обозначения, в последующем изложении мы опустим индекс j, который считается фиксированным, и запишем

$$n_{\sigma, l, \mu} \to n(\sigma, \mu).$$

Напомним, что полиномы Эрмита $H_n(\xi)$ являются полиномами степени n относительно ξ [106]. В произведении (117.1) такие полиномы перемножаются и член старшей степени в произведении имеет вид (мы снова упростили обозначения)

$$\xi_1^{n_1},\ \xi_2^{n_2},\ \ldots,\ \xi_{sl_l}^{n_{sl_l}},$$

где

$$n_1 + n_2 + \ldots + n_{sl_l} = \sum_{\sigma\mu} n(\sigma, \mu) \equiv n(^{*}\boldsymbol{k}j)$$

есть полное число квантов, которое распределено по всему множеству состояний, относящихся к $D^{(^{*}\boldsymbol{k})(l)}$. Последующие члены произведения (117.1) при этом линейном преобразовании преобразуются в члены той же степени. Тогда оказывается, что мы можем ограничиться только одночленами наивысшей степени, выписанными выше в качестве типичного примера. Это первый шаг нашей программы, разработанной Тисца [107] [1]). Такой же результат получится, если записать полином Эрмита через производящую функцию

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \partial^n e^{-\xi^2}/\partial\xi^n.$$

Тогда H_n преобразуется по отношению к ξ^n ковариантно. Это верно для каждого H_n, входящего в рассматриваемую цепочку сомножителей. Поэтому и можно рассматривать только одночлены наивысшей степени [2]).

Во-вторых, мы запишем унитарное пространственное преобразование в той преобразованной координатной системе, в которой оно диагонально. При таком преобразовании одночлены только умножаются на некоторые степени диагональных матричных элементов. Следующий шаг состоит в симметризации по

---

[1]) Мы следуем работе [107] с некоторыми изменениями.

[2]) Это рассуждение было предложено доктором И. К. Чо.

всем состояниям, относящимся к одной матрице $D^{(\star k)(l)}$. Этот шаг, хотя и нетривиальный, можно выполнить в явном виде. Мы продемонстрируем его на примере так называемых «простейших» симметричных полиномов.

Наконец, будет вычислено преобразование полной собственной функции (116.3): она является произведением отдельных сомножителей, каждый из которых относится к определенному $D^{(\star k)(l)}$ и каждый из которых симметризован независимым образом.

Чтобы выполнить первый пункт намеченной программы, мы рассмотрим только представление $D^{(\star k)(l)}$, базис которого равен

$$\left\{q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}, \ldots, q\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_s \\ j_{l_l} \end{pmatrix}\right\}. \tag{117.2}$$

Рассмотрим элемент $\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\}$ группы $\mathfrak{G}$, представленный матрицей $D^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})$ аналогично (86.40). Пусть эта матрица приведена к диагональному виду с помощью некоторого унитарного преобразования V:

$$V^{-1}D^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})\,V = D_d^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\}), \tag{117.3}$$

где

$$D_d^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\})_{\sigma\mu,\,\tau\nu} = d_\mu^{(\sigma)(l)}\delta_{\sigma\tau}\delta_{\mu\nu}. \tag{117.4}$$

Тогда V дает эквивалентный базис

$$\left\{q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ j_1 \end{pmatrix}, \ldots, q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}, \ldots, q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_s \\ j_{l_l} \end{pmatrix}\right\}, \tag{117.5}$$

в котором для выбранного нами элемента симметрии каждая штрихованная нормальная координата умножается при преобразовании на константу:

$$P_{\{\varphi \mid t\}}q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix} = d_\mu^{(\sigma)(l)}q'\begin{pmatrix} \boldsymbol{k}_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}. \tag{117.6}$$

Вследствие свойства инвариантности следа из (117.3) имеем

$$\chi^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\}) = \sum_{\sigma,\mu} d_\mu^{(\sigma)(l)}. \tag{117.7}$$

Для p-й степени, вообще говоря, согласно (117.6), имеем

$$\chi^{(\star k)(l)}(\{\varphi \mid \boldsymbol{t}\}^p) = \sum_{\sigma,\mu} \left(d_\mu^{(\sigma)(l)}\right)^p. \tag{117.8}$$

Полезно отметить для дальнейшего, что (117.7) и (117.8) можно рассматривать как запись стоящих справа сумм (отдельные значения $d_{\mu}^{(\sigma)(j)}$ до сих пор не определены) через стоящие слева и вычисленные по общему правилу (37.3) характеры.

Возвратимся к обсуждению (117.1). Рассмотрим те множители в (117.1), которые относятся к координатам (117.2). Они имеют, например, такой вид:

$$H_{n(1,1)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}\right)\times\ldots\times H_{n(\sigma,\mu)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}\right)\times\ldots$$
$$\ldots\times H_{n(s\cdot l_j)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_s\\ j_{l_j}\end{pmatrix}\right). \qquad (117.9)$$

(Опустим на некоторое время значок j и не будем выполнять симметризации.) Цепочка сомножителей (117.9) описывает состояние, в котором имеется $n(1, 1)$ фононов [$n(1, 1)$-е состояние гармонического квантового осциллятора] осциллятора с координатой $q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}$, плюс ..., плюс $n(\sigma, \mu)$ фононов осциллятора $q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}$, плюс $n(s, j_{l_j})$ фононов осциллятора $q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_s\\ j_{l_j}\end{pmatrix}$. Полное число фононов во всех состояниях в пространстве (117.2) равно

$$n(^*\boldsymbol{k}j)=\sum_{\sigma\mu} n(\sigma, \mu). \qquad (117.10)$$

Очевидно, симметризация, подобная сделанной в (116,2), и означает с физической точки зрения, что полное заданное число фононов (117.10) должно быть распределено всеми возможными способами по состояниям пространства (117.2). Рассмотрим для примера произведение (117.9). Исследуем поведение сомножителя

$$H_{n(\sigma,\mu)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}\right). \qquad (117.11)$$

Член наивысшей степени в (117.11) является одночленом степени $n(\sigma, \mu)$ от нормальной координаты $q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}$. Предположим теперь, что мы рассматриваем эквивалентное пространство штрихованных функций (117.5). Тогда применение преобразования $\{\varphi|\boldsymbol{\tau}\}$ только умножает упомянутый одночлен наивысшей степени на множитель

$$\left(d_{\mu}^{(\sigma)(j)}\right)^{n(\sigma,\mu)}, \qquad (117.12)$$

который является $n(\sigma, \mu)$-й степенью диагонального элемента. Тогда рассматриваемое произведение (117.9) умножается на произведение

$$\prod_{\sigma,\,\mu}\left(d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}\right)^{n\,(\sigma,\,\mu)}, \tag{117.13}$$

так как от каждого соответствующего сомножителя в (117.9) появляется по одному множителю.

Тогда, если бы заданное произведение (117.9) было единственным членом в колебательной собственной функции, то произведение (117.13) было бы характером для $\{\varphi|\tau\}$. Нам необходимо симметризовать произведение (117.9) с учетом того, что всего имеется $n(^{*}\boldsymbol{k}j)$ фононов. Эти фононы мы должны распределить симметричным образом по всем состояниям. Например, все фононы могут относиться к одному осциллятору, который будет находиться при этом в $n(^{*}\boldsymbol{k}j)$-м состоянии. Но из эквивалентности всех осцилляторов следует, что в таком состоянии может оказаться любой из них. В этом случае след полученного представления вычисляется в пространстве функций

$$H_{n\,(^{*}\boldsymbol{k}j)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}\\ j_1\end{pmatrix}\right), \ldots, H_{n\,(^{*}\boldsymbol{k}j)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_{\sigma}\\ j_{\mu}\end{pmatrix}\right), \ldots$$
$$\ldots, H_{n\,(^{*}\boldsymbol{k}j)}\left(q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_{s}\\ j_{l_j}\end{pmatrix}\right) \tag{117.14}$$

и равен

$$\sum_{(\text{перест})}{}'\left(d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}\right)^{n\,(^{*}\boldsymbol{k}j)}. \tag{117.15}$$

Здесь сумма по перестановкам означает суммирование по всем значениям (перестановкам) (σ, μ) при условии, что сохраняется форма одночлена, возведенного в степень, равную числу фононов. В общем случае нам нужно распределить определенное число фононов $n(^{*}\boldsymbol{k}j)$ некоторым заданным способом $\{n(\sigma, \mu)\}$. Тогда собственной функцией оказывается произведение (117.9) и соответствующий симметризованный след для этого конкретного произведения имеет вид

$$\sum_{(\text{перест})}{}'\prod_{\sigma,\,\mu}\left(d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}\right)^{n\,(\sigma,\,\mu)}, \tag{117.16}$$

где $\sum\limits_{(\text{перест})}{}'$ означает суммирование по всем членам, в которых сохраняется форма произведения, но индексы переставляются всеми возможными способами.

Но так как могут иметь место *все* возможные распределения, след должен быть суммой всех выражений типа (117.15) при условии, что каждое конкретное разбиение соответствует полному числу фононов: $n(^{*}\boldsymbol{k}j)$.

Возьмем некоторое конкретное разбиение. Для простоты возьмем разбиение, для которого соответствующий член имеет вид (117.15). Тогда сумму (117.15) можно рассматривать как полностью симметризованную сумму $n(^{\star}\boldsymbol{k}j)$-х степеней каждого из членов $d_{\mu}^{(\sigma)(j)}$. Можно выполнить другое разбиение с $[n(^{\star}\boldsymbol{k}j)-1]$ квантами для одного осциллятора и одним квантом для другого осциллятора. Это приводит к симметрическим полиномам первой степени от $d_{\mu}^{(\sigma)(j)}$ для одного осциллятора и полиному степени $[n(^{\star}\boldsymbol{k}j)-1]$ от $d_{\mu'}^{(\sigma')(j')}$ для второго осциллятора. При этом полная степень полинома, естественно, фиксирована и равна $n(^{\star}\boldsymbol{k}j)$. Аналогичные результаты получаются для других возможных разбиений.

Тогда представление симметризованного произведения с базисом

$$\mathscr{S}(^{\star}\boldsymbol{k}j)\prod_{\sigma/\mu}H_n(\sigma,\mu)\left(\gamma_{\sigma j}q\begin{pmatrix}\boldsymbol{k}_{\sigma}\\ j_{\mu}\end{pmatrix}\right) \tag{117.17}$$

является симметризованной $n(^{\star}\boldsymbol{k}j)$-й степенью представления $D^{(^{\star}\boldsymbol{k})(j)}$, по которому преобразуется совокупность (117.2). Следовательно, соответствующим симметризованным характером является величина

$$\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\})_{(n(^{\star}\boldsymbol{k}j))}=\mathbf{S}\sum_{(\text{перест})}{}'\prod_{\sigma,\,\mu}\left(d_{\mu}^{(\sigma)(j)}\right)^{n(\sigma,\,\mu)}, \tag{117.18}$$

где $\mathbf{S}$ обозначает сумму по всем разбиениям.

Теперь мы должны выразить функцию, стоящую справа в (117.18), через известные величины (117.7), (117.8), которые зависят от известных характеров степени преобразования $\{\varphi\,|\,\tau\}$. Чтобы сделать это, мы должны обратиться к теории симметрических функций [108, 109]. Нам нужно выразить (117.18) через полную совокупность таких элементарных симметричных функций заданного числа переменных. Это можно, вообще говоря, сделать непосредственно [108, 109], но мы приведем здесь только результат и один пример.

Рассмотрим случай $n(^{\star}\boldsymbol{k}j)=3$. Тогда мы имеем дело со вторым обертоном (симметризованный куб представлений). Имеется три элементарных симметричных полинома третьей степени. Из (117.7) и (117.8) имеем

$$\chi^{(^{\star}\boldsymbol{k})(j)}(\{\varphi\,|\,\boldsymbol{t}\}=\sum_{(\sigma,\,\mu)}d_{\mu}^{(\sigma)(j)}. \tag{117.19}$$

Обозначим

$$\left(\sum_{\sigma,\,\mu}d_{\mu}^{(\sigma)(j)}\right)^{3}=P_1. \tag{117.20}$$

Это, очевидно, симметризованный полином третьей степени. Еще одним линейно-независимым полиномом является произведение

$$\Big(\sum_{\sigma,\,\mu} d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}\Big)\Big(\sum_{\sigma,\,\mu} d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}\Big)^2 \equiv P_2. \tag{117.21}$$

Наконец, последний полином

$$\sum_{\sigma\mu} (d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)})^3 \equiv P_3. \tag{117.22}$$

Согласно (117.18), характер симметризованного куба имеет вид

$$\chi^{(^\star k)\,(l)}(\{\varphi\,|\,t\})_{(3)} = \sum_{(\text{перест})}' (d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)})^3 +$$

$$+ \sum_{(\text{перест})}' (d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)})^2 (d_{\mu'}^{(\sigma')\,(l)}) + \sum_{(\text{перест})}' (d_{\mu}^{(\sigma)\,(l)}) (d_{\mu'}^{(\sigma')\,(l')}) (d_{\mu''}^{(\sigma'')\,(l'')}). \tag{117.23}$$

Задача, которую надо решить, состоит в определении такой линейной комбинации (117.21), (117.22), которая равна полиному (117.23), т. е. в нахождении таких констант C_1, C_2, C_3, что

$$C_1 P_1 + C_2 P_2 + C_3 P_3 = [\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\})]_3. \tag{117.24}$$

Из первого члена (117.23) получаем

$$C_1 + C_2 + C_3 = 1. \tag{117.25}$$

Сравнивая члены в разложениях (117.20) — (117.22), находим

$$C_1 = \frac{1}{6}, \quad C_2 = \frac{1}{2}, \quad C_3 = \frac{1}{3}. \tag{117.26}$$

Тогда

$$[\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\})]_{(3)} = \frac{1}{6}\{[\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\})]^3 +$$

$$+ 3\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\})\,\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\}^2) + 2\chi^{(^\star k)\,(m)}(\{\varphi\,|\,t\}^3)\}. \tag{117.27}$$

Процедуру, приводящую к (117.27), можно продолжить и преобразовать общее выражение (117.18) к сумме произведений характеров, относящихся к отдельным элементам, точнее, произведений характеров либо данного элемента $\{\varphi\,|\,t\}$, либо его степеней. Основная теорема, которая может быть при этом использована, состоит в том, что симметризованный полином можно записать как суперпозицию основных «элементарных» полиномов [106] одним и только одним способом. Этими основными элементарными полиномами являются полиномы P_j, перечисленные выше как P_1, P_2, P_3. Обобщение (117.27) на симметризованную n-ю степень можно получить таким же способом; по сведениям автора, это еще никем не было сделано. Связанный с таким рассмотрением другой метод использовал Тисца [107]. Он привел к рекуррентным соотношениям для симметризованных степеней представлений.

Еще один метод основан на свойствах симметрической группы [49]. Так как мы не изучаем здесь симметричную группу, не будем приводить детали доказательства и просто выпишем результат. Характер $\{\varphi|t\}$ для симметризованной n-й степени произведения матриц равен

$$[\chi^{(\star k)(m)}(\{\varphi|t\})]_{(n)}=\sum\frac{\left(\chi^{(\star k)(m)}\left(\{\varphi\mid t\}^{q_1}\right)\right)^{r_1}\ldots\left(\chi^{(\star k)(m)}\left(\{\varphi\mid t\}^{q_\nu}\right)\right)^{r_\nu}}{r_1!\,(q_1)^{r_1}\ldots r_\nu!\,(q_\nu)^{r_\nu}}. \tag{117.28}$$

Сумма в (117.28) берется по всем возможным распределениям числа n, таким, что

$$n=r_1q_1+\ \ldots\ +r_\nu q_\nu, \tag{117.29}$$

где r_j и q_j — целые числа.

Это и есть решение задачи, поставленной в начале этого параграфа. Ясно, что (117.28) и (117.29) применимы к каждому конкретному распределению для симметризованной цепочки сомножителей (117.1), связанной с некоторым неприводимым представлением $D^{(\star k)(j)}$. Прямое разложение (117.28) при $n=3$ совпадает с результатом (117.27), полученным прямым вычислением.

Вычисление симметризованного квадрата и других степеней неприводимых представлений пространственных групп методом малой группы исследовали Брэдли и Дэвис [110]. Вследствие эквивалентности методов подгруппы и полной группы для получения и приведения произведения представлений (§ 64) метод малой группы можно применить для приведения любой обычной или симметризованной степени представлений. Чисто практические соображения могут заставить отдать предпочтение тому или иному методу. Однако на сегодняшний день, по-видимому, лишь метод полной группы уже применялся для приведения симметризованного куба представлений.

§ 118. Преобразование собственных функций колебаний решетки: результаты и некоторые обобщения

Подведем итоги. Результаты последнего параграфа показывают, что симметризованное произведение собственных функций

$$\mathcal{P}(\star kj)\exp-\left[\frac{1}{2}\sum_{\sigma\mu}{}'\gamma_{\sigma j}q\begin{pmatrix}k_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}^2\right]\prod_{\sigma,\,\mu}H_{n_{\sigma j\mu}}\left(\gamma_{\sigma j}q\begin{pmatrix}k_\sigma\\ j_\mu\end{pmatrix}\right) \tag{118.1}$$

преобразуется при преобразованиях операторов пространственных групп как симметризованная $n(\star kj)$ степень $D^{(\star k)(j)}$.

В (118.1) все координаты относятся к пространству, в котором задано $D^{(\star k)(j)}$; $n(\star kj)$ — полное число квантов во всех состояниях этого представления. Это представление можно обозначить

$$[D^{(\star k)(j)}]_{(n(\star kj))}. \tag{118.2}$$

Полная волновая функция (116.3) преобразуется по представлению

$$[D^{(\star k)(j)}]_{(n)} \otimes [D^{(\star k')(j')}]_{(n')} \otimes \ldots \otimes [D^{(\star k'')(j'')}]_{(n'')}, \tag{118.3}$$

где

$$n \equiv n(\star k, j), \quad n' \equiv n(\star k, j') \quad \text{и т. д.}$$

являются полными числами квантов для определенных групп вырожденных осцилляторов. Представление (118.3) является, вообще говоря, приводимым к сумме неприводимых представлений. Процедуру приведения можно записать так:

$$[D^{(\star k)(j)}]_{(n)} \otimes [D^{(\star k')(j')}]_{(n')} \otimes \ldots \otimes [D^{(\star k'')(j'')}]_{(n'')} =$$
$$= \sum_{k'''m'''} \left([\star kj]_{(n)} \ldots [\star k''j'']_{(n'')} \middle| \star k'''j''' \right) D^{(\star k''')(j''')}, \tag{118.4}$$

где $\left([\star kj]_{(n)} \ldots [\star k''j'']_{(n'')} \middle| \star k'''j''' \right)$ — соответствующие коэффициенты приведения, которые можно получить методом, изложенным в § 52—60.

Согласно лемме о существенном вырождении, каждое состояние в неприводимом представлении справа в (118.4) должно рассматриваться отдельно; тогда соотношение (118.4) дает правила отбора для физических процессов инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света.

При обсуждении многофононных процессов в т. 2, гл. 3 мы рассмотрим это соотношение.

Можно сделать замечание о дополнительной симметрии, возникающей из-за того, что гармонический гамильтониан (114.8) разбивается на подгруппы гармонических гамильтонианов, относящихся к вещественным нормальным координатам $(s \cdot l_j)$-мерного неприводимого векторного пространства $\Sigma^{(\star k)(j)}$. При этом мы должны рассматривать $(s \cdot l_j)$-мерный изотропный гармонический осциллятор для каждого такого векторного пространства. Группа симметрии $(s \cdot l_j)$-мерного изотропного осциллятора независимо от рассматриваемой физической пространственной симметрии, является группой $SU_{(s \cdot l_j)}$, т. е. специальной унитарной группой для $(s \cdot l_j)$ величин $q\begin{pmatrix} k_\sigma \\ j_\mu \end{pmatrix}$, являющихся в данном случае координатами вырожденного осциллятора. Очевидно, что *любое*

$(s\cdot l_j)$-мерное унитарное преобразование

$$q\begin{pmatrix}k_\sigma\\ l_\alpha\end{pmatrix}=\sum_{\sigma'\beta}U_{\sigma'\beta\sigma\alpha}q\begin{pmatrix}k_{\sigma'}\\ l_\beta\end{pmatrix},$$

где

$$U^{-1}_{\sigma'\beta,\,\sigma\alpha}=U^{*}_{\sigma\alpha,\,\sigma'\beta}, \tag{118.5}$$

является операцией симметрии гамильтониана $(s\cdot l_j)$-мерного изотропного гармонического осциллятора. Тогда для каждой такой совокупности координат, относящейся к одному и тому же неприводимому представлению $D^{(^*k)(j)}$, должна существовать дополнительная симметрия унитарной группы. Каждая волновая функция должна одновременно преобразовываться неприводимым образом и при преобразованиях унитарной группы, и по симметризованным степеням представлений группы пространственной симметрии $\mathfrak{G}$. Элементы унитарной группы (118.5), по-видимому, не имеют простой физической аналогии, хотя сейчас ведутся интенсивные исследования вопросов, связанных со свойствами n-мерного изотропного гармонического осциллятора [111—113] [1]. Можно отметить, что неприводимое векторное пространство группы $SU_{(s\cdot l_j)}$ имеет своим базисом [108] симметричные тензоры, которые дают неприводимые представления размерности

$$\begin{pmatrix}n(^*kj)+s\cdot l_j-1\\ s\cdot l_j-1\end{pmatrix}. \tag{118.6}$$

Это и есть как раз размерность представления симметризованной степени $n(^*kj)$, характер которого дается в (117.28).

В заключение отметим, что гармоническое приближение дает волновую функцию (116.3), которая с точки зрения многочастичной теории верна в нулевом приближении. Поправки более высокого порядка должны содержать линейные комбинации базисного набора (116.3). Но если порядок приближения уже установлен, то в рамках применимости леммы о существенном вырождении любое многочастичное состояние должно принадлежать некоторому определенному неприводимому представлению $D^{(^*k)(j)}$ группы $\mathfrak{G}$ или копредставлению группы $\mathcal{G}$. Как было уже отмечено выше в нескольких местах, синтез теории групп и теории многих тел — это пока вопрос будущего.

В т. 2 мы часто будем вести рассмотрение в рамках гармонического приближения, так как оно позволяет в явной форме исследовать и вычислить симметрию собственных состояний, а следовательно, и процессы перехода между ними. Эти предсказания

---

[1]) См. также [114] и цитируемую там литературу.

допускают сравнение с экспериментом. Предсказания гармонической теории оказываются очень часто справедливыми: в качестве примера ниже дан анализ критических точек двухфононных спектров комбинационного рассеяния для кремния и германия, имеющих структуру алмаза (т. 2, § 24) и для NaCl и NaF, имеющих структуру каменной соли (т. 2, § 27), а также приведены различные предсказания свойств поляризации при комбинационном рассеянии света. Когда гармоническое приближение оказывается неприменимым, это обычно означает, что возникают новые интересные явления, например обсуждаемое в т. 2, § 6, п. 4 и § 28, п. 2 двухфононное связанное состояние в алмазе, которое обусловлено ангармоническими эффектами. В целом, кроме возможных случаев, когда необходим учет ангармонических членов, гармоническое приближение оказывается хорошим методом анализа оптических свойств решетки.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Wigner E. P.*, Group Theory and Application to Quantum Mechanics of Atomic Spectra, Academic Press, New York, 1959. (Имеется перевод: *Е. Вигнер*, Теория групп и ее приложение к квантовомеханической теории атомных спектров, «Мир», М., 1961.)
2. *Hamermesh M.*, Group Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1962. (Имеется перевод: *М. Хамермеш*, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, «Мир», М., 1966.)
3. *Birman J. L.*, Group Theory Methods and Techniques with Applications to Physics, Wiley, New York, 1977.
4. *Born M.*, *Huang K.*, Dinamical Theory of Crystal Lattices, University Press, Oxford, 1954. (Имеется перевод: *М. Борн*, *Хуан Кунь*, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, М., 1958.)
5. *Leibfried G.*, Handbuch der Physik, Bd. VII/1, S. 104, Springer, Berlin, 1955. (Имеется перевод: *Г. Лейбфрид*, Микроскопическая теория механических свойств кристаллов, Физматгиз, М. — Л., 1963.)
6. *Leibfried G.*, *Ludwig W.*, Solid State Physics, **12**, 275—444 (1961). (Имеется перевод: *Г. Лейбфрид*, *В. Людвиг*, Ангармонические эффекты в кристаллах, ИЛ, М., 1963.)
7. *Jagodzinski H.*, Handbuch der Physik, Bd. VII/1, S. 1—103, Springer, Berlin, 1955.
8. *Cochran W.*, *Cowley R. A.*, Phonons in Perfect Crystals, Handbuch der Physik, Bd. XXV/2a, S. 59, Springer, Berlin, 1967.
9. *Bilz H.*, *Strauch D.*, *Wehner R. K.*, Infrared Absorption and Raman Scattering in Pure and Perturbed Crystals, Handbuch der Physik, vol. XXV 2d.
10. *LeCompte J.*, Spectroscopie dans l'infrarouge, Handbuch der Physik, vol. XXVI, p. 244, Springer, 1958.
11. *Mizushima S.*, Raman Effect, Handbuch der Physik, Bd. XXVI, S. 171, Springer, Berlin, 1959.
12. *Zachariasen W. H.*, Theory of X-Ray Diffraction in Crystals, Wiley, New York, 1945.
13. *Schönfliss A.*, Kristallsystems und Kristallstructur, Leipzig, 1891.
14. *Schönfliss A.*, Theorie der Kristallstructuren, Berlin, 1923.
15. *Федоров Е. С.*, Симметрия и структура кристаллов, АН СССР, М., 1949. [E. Fedorov, Verh. Kgl, Mineral. Ges., Peterburg, 27, 448 (1891).]
16. International Tables for X-Ray Crystallography, vol. 1. Symmetry Groups, Kynoch Press, Birmingham, 1965.
17. *Bradley C. S.*, *Cracknell A. P.*, The Mathematical Theory of Symmetry in Solids, Clarendon Press, Oxford, 1972.
18. *Born M.*, *Mayer M. G.*, Handbuch der Physik Bd. XXIV/2, S. 623—790, Springer, Berlin, 1933. (Имеется перевод: *М. Борн*, *М. Гепперт-Майер*, Динамическая теория кристаллической решетки, Гостехиздат, Л. — М., 1938.)
19. *Born M.*, *Karman T.*, Phys. Zs., **14**, 15 (1913).
20. *Hall M.*, Theory of Groups, Macmillan, 1950. (Имеется перевод: *М. Холл*, Теория групп, «Мир», М., 1963.)

21. *Bloch F.*, Zs. Phys., **52**, 555 (1928).
22. *Burrow M.*, Representation Theory of Finite Groups, Academic Press, New York, 1965.
23. *Lomont J. S.*, Applications of Finite Groups, Academic Press, New York, 1959.
24. *Koster G. F.*, Phys. Rev., **109**, 227 (1958).
25. *Evald P. P.*, Zs. Phys., **2**, 232 (1920).
26. *Koster G. F.*, Solid State Physics (ed. F. Seitz and D. Turnbull), vol. 5, Academic Press, New York, 1957.
27. *Wigner E.*, *Seitz F.*, Phys. Rev., **43**, 804 (1933).
28. *Bouckaert L.*, *Smoluchowski R.*, *Wigner E.*, Phys. Rev., **50**, 58 (1936). (Имеется перевод: *Л. П. Баукарт*, *Р. Смолуховский*, *Е. Вигнер*, Теория зон Бриллюэна и свойства симметрии волновых функций в кристалле, в сборнике [83].)
29. *Clifford A. H.*, Ann. of Math., **38**, 533 (1937).
30. *Seitz F.*, Ann. of Math., **37**, 17 (1936). (Имеется перевод: *Ф. Зейтц*, О приведении пространственных групп, в сборнике [83].)
31. *Herring C.*, J. Franclin Inst., **233**, 525 (1942). (Имеется перевод: *К. Херринг*, Таблицы характеров для двух представлений групп, в сборнике [83].)
32. *Elliott R. J.*, Phys. Rev., **96**, 130 (1954).
33. *Curtis C. W.*, *Reiner I.*, Representation Theory of Finite Groups and Associative Algebras, Interscience, New York, 1962.
34. *Elliott R. J.*, *Loudon R.*, J. Phys. Chem. Solids, **15**, 146 (1960).
35. *Weyl H.*, Theory of Groups and Quantum Mechanics, Dover Publ., New York.
36. *Döring W.*, Zs. Naturfor., **14a**, 343 (1959).
37. *Kitz A.*, Phys. Stat. Solidi, **8**, 813 (1965).
38. *Hurley A. C.*, Phil. Trans. Roy. Soc. London, **A26**, 1 (1966).
39. *Döring W.*, *Zehler V.*, Ann. Phys., **13**, 214 (1953).
40. *Zak J.*, J. Math. Phys. **1**, 165 (1960).
41. *Klauder L. J.*, *Jr.*, *Gay J. G.*, J. Math. Phys., **9**, 1488 (1968).
42. *Birman J. L.*, Phys. Rev., **127**, 1093 (1962).
43. *Birman J. L.*, Phys. Rev., **131**, 1489 (1963).
44. *Zak J.*, J. Math. Phys., **3**, 1278 (1962).
45. *Lax M.*, *Hopfield J. J.*, Phys. Rev. **124**, 115 (1961). (Имеется перевод: *М. Лэкс*, *Дж. Дж. Хопфилд*, Правила отбора для матричных элементов, связывающих различные точки в зоне Бриллюэна, в сборнике [83].)
46. *Zak J.*, Phys. Rev., **151**, 464 (1966).
47. *Poulet H.*, J. de Physique, **26**, 684 (1965).
48. *Murnaghan F. D.*, The Theory of Group Representations, Dover New York, 1963.
49. *Любарский Г. Я.*, Теория групп и ее применение в физике, Физматгиз, М., 1957.
50. *Boerner H.*, Representations of Groups, North Holland, Amsterdam, 1972.
51. *Itzkan I.*, The Clebsch — Gordan Coefficients for the Crystallographic Space Groups, Ph. D. Thesis, N. Y. Univ., 1969.
52. *Berenson R.*, Theory of Crystal Clebsch — Gordan Coefficients Ph. D. Thesis, N. Y. Univ., 1974.
53. *Berenson R.*, *Itzkan I.*, *Birman J. L.*, J. Math. Phys., **16**, 227, 236 (1975).
54. *Litvin D. V.*, *Zak J.*, J. Math. Phys., **9**, 212 (1969).
55. *Новосадов Б. К.*, *Саулевич Л. К.*, *Свиридов Д. Т.*, *Смирнов Ю. Ф.*, ДАН СССР, **184**, XI, 82 (1969).
56. *Саулевич Л. К.*, *Свиридов Д. Т.*, *Смирнов Ю. Ф.*, Кристаллография, **15**, 410, 415 (1970).
57. *Sakata J.*, J. Math. Phys., **15**, 1702 (1974).
58. *Cornwell J. F.*, Phys. Stat. Solidi, **37**, 225 (1970).

59. *Wigner E. P.*, Nachr. Acad. Wiss., Göttingen, Math. Physik, KI, 113 (1930). (Имеется перевод: *Е. П. Вигнер*, Об упругих нормальных колебаниях симметрических систем, в сборнике [83].)
60. *Yanagava S.*, Progr. Theor. Phys., **10**, 83 (1953).
61. *Raghavacharyulu I. V. V.*, Can. J. Phys., **39**, 1704 (1961).
62. *Streitwolf H. W.*, Phys. Stat. Solidi., **5**, 383 (1964).
63. *Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. H., Ipatova I. P.*, Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation, 2nd ed., Academic Press, New York, 1971.
64. *Chen S. H.*, Ph. D. Thesis, 1964.
65. *Maradudin A. A., Vosko S. H.*, Rev. Mod. Phys., **40**, 1 (1968).
66. Phonons in Perfect Lattices and in Lattices with Point Imperfections, ed. R. W. H. Stewenson, Plenum, New York, 1966.
67. *Kwok P. W.*, Green Function Method in Lattice Dynamics, Solid State Physics, vol. 20, Academic Press, New York, 1967.
68. *Lax M.*, Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics, Wiley, New York, 1974.
69. *Herring C.*, Phys. Rev., **52**, 361 (1937). (Имеется перевод: Влияние симметрии относительно инверсии времени на энергетические зоны в кристалле, в сборнике [83], стр. 243.)
70. *Frei V.*, Czech. J. Phys., **16**, 207 (1966).
71. *Wigner E. P.*, Nachr. Acad. Wiss. Göttingen, Math. Physik KI, 546 (1932).
72. *Clifford A. W.*, Ann. Math., **38**, 533 (1937).
73. *Dimmock J.*, J. Math. Phys., 4, 1307 (1963).
74. *Кудрявцева Н. В.*, ФТТ, 7, 998 (1965).
75. *Кудрявцева Н. В., Караваев Г. Ф., Чалдышев В. А.*, ФТТ, **5**, 3471 (1962).
76. *Ковалев О. В.*, ФТТ, **2**, 2557 (1960).
77. *Birman J. L.*, A Quick Trip through Group Theory and Lattice Dynamics в книге Lattice Dynamics, ed. A. A. Maradudin and G. K. Horton, North Holland, Amsterdam, 1974.
78. *Huang K.*, Zs. Phys., **171**, 213 (1963).
79. *Klein B.*, Phonons, Ph. D. Thesis, New York Univ., 1969.
80. *Klein B.*, Phonons, Flammarion, Paris, 1971.
81. *Fano U., Racah G.*, Irreducible Tensorial Sets, Academic Press, New York, 1959.
82. *Shalit A., Talmi I.*, Nuclear Shell Theory, Academic Press, New York, 1963.
83*. *Нокс Р., Голд А.*, Симметрия в твердом теле, «Наука», М., 1970.
84. *Aviran A., Zak J.*, J. Math. Phys., **9**, 2138 (1968).
85. *Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. H.*, Theory of Lattice Dynamics in the Harminic Approximation, Suppl. 3 in Solid State Physics, Academic Press, New York, 1963. (Имеется перевод: *А. Марадудин, Е. Монтролл, Дж. Вейсс*, Динамика кристаллической решетки в гармоническом приближении, «Мир», М., 1965.)
86. *Phillips J. C.*, Phys. Rev., **104**, 1263 (1956).
87. *van Hove L.*, Phys. Rev., **89**, 1189 (1953).
88. *Кудрявцева Н. Д.*, ФТТ, **9**, 1850 (1968).
89. *Born M., Oppenheimer J. R.*, Ann. d. Phys., **84**, 457 (1927).
90. *Elliott R. J., Harley R. T., Hayes W., Smith S. R. P.*, Proc. Roy. Soc., **A328**, 217 (1972).
91. *Garland J. W.*, Phys. Rev., **153**, 460 (1967).
92. *Keating P. N.*, Phys. Rev., **175**, 1169 (1968).
93. *Keating P. N.*, Phys. Rev., **187**, 1190 (1969).
94. *Baym G.*, Ann. Phys., **14**, 1 (1961).
95. *Pick R. M., Cohen M. H., Martin R. M.*, Phys. Rev., **1B**, 910 (1970).
96. *Martin R. M.*, Phys. Rev., **21**, 536 (1968).
97. *Martin R. M.*, Phys. Rev., **186**, 871 (1969).

98. *Johnson F. A.*, Proc. Roy. Soc. (London), **A310**, 79, 89, 101, 111 (1969).
99. *Gliss G.*, *Bilz H.*, Phys. Rev. Lett., **21**, 884 (1968).
100. *Prince J.*, Ph. D. Thesis, New York Univ., New York, 1967.
101. *Rajagopal A. K.*, *Cohen M. H.*, Collective Phenomena, **1**, 9 (1972).
102. *Bilz H.*, *Weber W.*, *Johnson F. A.*, Proc. XII Intern. Confer. on Semicond., Stuttgart, 1974.
103. *Wentzel G.*, Einführung in die Quantentheories der Wellenfelder, F. Deuticke, Wien, 1943.
104. *Baker G.*, Phys. Rev., **103**, 1119 (1956).
105. *Dirac P. A. M.*, Principles of Quantum Mechanics, Oxford, 3rd ed., Oxford University Press, 1947. (Имеется перевод: *П. А. М. Дирак*, Принципы квантовой механики, Физматгиз, М., 1960.)
106. *Courant R.*, *Hilbert D.*, Methods of Mathematical Physics, Interscience, New York, 1953. (Имеется перевод: *Р. Курант и Д. Гильберт*, Методы математической физики, Гостехиздат, М., 1900.)
107. *Tisza L.*, Zs. Phys., **82**, 48 (1933).
108. *Weil H.*, Classical Groups, Princeton Univ. Press, New Jersey, 1947, p. 30, 37.
109. *Van-der-Varden B. H.*, Algebra, vol. 1, New York, 1952, p. 78.
110. *Bradley C. J.*, *Davies B. L.*, J. Math. Phys. **11**, 1536 (1970).
111. *Biedenharn L.*, J. Math. Phys., **4**, 436 (1963).
112. *Weber L.*, Zs. Phys., **190**, 25 (1966).
113. *Jauch J. M.*, *Hill R.*, Phys. Rev., **57**, 641 (1940).
114. *Gilmor R.*, Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications, Wiley, New York, 1974.
115*. *Бир Г. Л.*, *Пикус Г. Е.*, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, «Наука», М., 1972.
116*. *Петрашень М. И.*, *Трифонов Е. Д.* Применение теории групп в квантовой механике, «Наука», М., 1967.
117*. *Мишина А. П.*, *Проскуряков И. В.*, Высшая алгебра, «Наука», М., 1965.
118*. *Курош А. Г.*, Теория групп, ГИТЛ, М., 1953.
119*. *Ковалев О. В.*, Неприводимые представления пространственных групп, АН УССР, 1961.
120*. *Штрайтвольф Г.*, Теория групп в физике твердого тела, «Мир», М., 1971.
121*. *Пуле А.*, *Матье Ж.-П.*, Колебательные спектры и симметрия кристаллов, «Мир», М., 1973.

ОГЛАВЛЕНИЕ