

вил отбора, так как произведение $T_1 \otimes A_2$ не содержит A_2 . Сдвиг энергии, обусловленный магнитным полем, дается просто формулой (9.8):

$$\Delta E_M = 2\mu_B \langle \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \rangle = 2\mu_B BM_S$$

с g -фактором, равным 2. Такую ситуацию (магнитные свойства основного состояния обусловлены исключительно спином) часто называют «замораживанием» орбитального движения сильным кристаллическим полем.

Заметим, что, хотя основное состояние имеет одинаковую симметрию \bar{U} относительно группы O во всех трех случаях, g -фактор равен 0,4 в случае 1 и 2,0 — в двух других. Эксперимент дает значение 1,96, согласующееся со случаями сильного и промежуточного поля.

ЛИТЕРАТУРА¹⁾

Впервые точечные группы для описания расщепления в кристаллическом поле были использованы в работе

Bethe H. A., Ann. der Phys., 1929, B. 3, S. 3, 133.

Очень подробные таблицы, относящиеся к кристаллографическим точечным группам, даны в книге

Koster G. F., Dimmock J. O., Wheeler R. G., Statz H., Properties of the Thirty-two Point Groups, Technology Press, M. I. T., Cambridge, Mass., 1963.

Группа икосаэдра описана в книге

Murnaghan F. D., Theory of Group Representations, Johns Hopkins Press, Baltimore, 1938. [Имеется перевод: Мурнаган Ф. Д. Теория представлений групп.— М.: ИЛ, 1955.]

Подробное обсуждение двузначных представлений можно найти в работах

Opechowski W., Physica, 1940, v. 7, p. 552.

Bradley C. J., Cracknell A. P., The Mathematical Theory of Symmetry in Solids, Oxford University Press, 1972.

Штрайтвольф Г. Теория групп в физике твердого тела.— М.: Мир, 1971*.

Желудев И. С. Симметрия и ее приложения.— М.: Атомиздат, 1976*.

Shubnikov A. V., Belov N. V., Coloured Symmetry.— London: Pergamon Press, 1964*.

Для дальнейшего чтения по теории кристаллических полей рекомендуем книгу Джадда (см. литературу к гл. 8), а также монографию

¹⁾ Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе.— Прим. ред.

Abragam A., Bleaney B., Electron Paramagnetic Resonance of Transition Elements, Oxford University Press, 1970. [Имеется перевод: Абрагам А., Блани Б. Электронный парамагнитный резонанс.—М.: Мир, 1972.]

ЗАДАЧИ

- 9.1. Пользуясь стереопроекцией, получите все элементы группы O из четырех поворотов на угол $2\pi/3$.
- 9.2. Кубический кристалл обладает группой симметрии O . а) Если деформировать его, растянув вдоль направления (111) (оси третьего порядка), то какова будет после этого его группа симметрии? б) Если, напротив, растянуть его вдоль оси четвертого порядка, то какова будет группа его симметрии в этом случае?
- 9.3. Кубический кристалл с группой симметрии O обладает набором собственных состояний, индицируемых по неприводимым представлениям O . Симметрия кристалла понижается так, как в задаче 9.2. Определите, какие состояния в каждом случае расщепляются, и снабдите их индексами, соответствующими неприводимым представлениям новых групп симметрии.
- 9.4. Покажите, что функция $f(\theta, \phi) = Y_m^{(l)}(\theta, \phi) + Y_{-m}^{(l)}(\theta, \phi)$, где m и l — четные целые числа, инвариантна относительно группы симметрии D_{2h} .
- 9.5. Взяв в качестве базиса функции x, y, z , постройте матрицы для одного элемента в каждом из классов группы O . Сравните характеры этих матриц с их значениями в таблице характеров (см. приложение) и покажите, что функции x, y, z принадлежат представлению T_1 . Отсюда следует, что атомное p -состояние не расщепляется возмущением, имеющим кубическую симметрию.
- 9.6. Покажите, что пространство полиномов второго порядка по x, y, z разлагается на сумму $A \oplus E \oplus T_2$ представлений группы O . Возьмите симметризованное произведение (§ 9, п. Б) представления T_1 на самого себя. Путем проектирования или другим способом постройте полиномы, преобразующиеся по каждому из этих представлений.
- 9.7. По формуле (7.42) вычислите характер представления группы O , порожденного набором семи сферических гармоник $Y_m^{(3)}$. Разложите это представление по неприводимым представлениям группы O . Выведите отсюда характер расщепления атомного f -состояния в присутствии возмущающего поля кубической симметрии.
- 9.8. Электрон движется в потенциальном поле, описываемом группой симметрии C_{4v} , а его волновая функция имеет симметрию A_1 . (Таблицу характеров см. в приложении 1.) Меняется ли энергия состояния (в первом порядке теории возмущений при наложении слабого электрического поля: а) вдоль оси четвертого порядка, б) в плоскости, перпендикулярной оси четвертого порядка. (В случае поля, направленного вдоль оси z , соответствующий оператор пропорционален z .)

- 9.9.** Электрон движется в потенциальном поле с группой симметрии D_{2h} , так что его собственные состояния индицируются по его неприводимым представлениям $A_1^+, B_1^+, B_2^+, B_3^+, A_1^-, B_1^-, B_2^-, B_3^-$ (приложение 1). Выведите правила отбора для электрических и магнитных дипольных переходов между этими состояниями.
- 9.10.** Исходя из таблицы характеров для D_3 , выведите таблицу характеров двойной группы \bar{D}_3 . (Проверьте результаты по таблице A_2 приложения 1.)
- 9.11.** Для каждой из следующих молекул определите группу симметрии и дайте классификацию колебательных мод, используя методы, изложенные в гл. 6: а) молекула фосфора P_4 с атомами в вершинах правильного тетраэдра; б) молекула метана CH_4 , у которой четыре атома Н расположены в вершинах правильного тетраэдра, атом С — в его центре; в) молекула этилена C_2H_4 , компланарная с двумя атомами Н, связанными с каждым из атомов С, причем связи CH составляют угол 120° со связью CC. (Считайте, что молекула лежит в плоскости xz и ее ось z направлена вдоль связи CC.)
- 9.12.** Атом имеет один валентный электрон в d -состоянии и находится в кристаллическом окружении, имеющем симметрию точечной группы O_h . Считая кристаллическое поле слабым и пренебрегая влиянием спина, найдите число уровней, на которые должно расщепляться d -состояние.
- 9.13.** Если в условиях предыдущей задачи учесть влияние спина и считать спин-орбитальное взаимодействие большим по сравнению с кристаллическим полем, каков будет характер состояния?
- 9.14.** Выведите правила отбора для дипольных переходов между состояниями, найденными в задаче 9.3.