§ 2. ГРУППА ТРАНСЛЯЦИЙ $\mathscr{T}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$

Закон умножения для трансляций нетрудно вывести из определяющего уравнения (14.2), а именно:

$$\mathsf{P}(\mathbf{m})\mathsf{P}(\mathbf{n})\mathbf{r} = \mathsf{P}(\mathbf{m})(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = \mathbf{r}+\mathbf{n}+\mathbf{m} = \\ = \mathbf{r}+(\mathbf{n}+\mathbf{m}) = \mathsf{P}(\mathbf{n}+\mathbf{m})\mathbf{r}. \qquad (14.3)$$

Отсюда ясно, что группа трансляций является абелевой и, в частности, трансляции в направлениях всех трех основных векторов $\mathbf{a}_i$ коммутируют друг с другом. Таким образом, группу трансляций можно рассматривать как прямое произведение трех подгрупп трансляций вдоль основных направлений. Рассмотрим одну из таких подгрупп $\mathscr{T}(\mathbf{a}_1, 0, 0)$. Она абелева, и потому ее неприводимые представления одномерны. Из выражения (14.3) следует, что матричные элементы $\mathsf{T}(n_1\,0\,0)$, соответствующие элементам группы $\mathsf{P}(n_1\,0\,0)$, удовлетворяют равенству

$$\mathsf{T}(n_1\,0\,0)\,\mathsf{T}(m_1\,0\,0) = \mathsf{T}(n_1+m_1\,0\,0). \qquad (14.4)$$

Мы говорим здесь «матричный элемент», хотя все эти матрицы одномерны и у них имеется лишь по одному матричному элементу. Для представления группы трансляций мы примем обозначение $\mathsf{T}(\mathbf{n}) \equiv \mathsf{T}(n_1\,n_2\,n_3)$ вместо более громоздкого $\mathsf{T}(\mathsf{P}(\mathbf{n}))$. Приняв, что единичному элементу $\mathsf{P}(0\,0\,0)$ соответствует единичный матричный элемент, т. е. $\mathsf{T}(0\,0\,0) = 1$, и определив постоянную α равенством $\alpha = \mathsf{T}(1\,0\,0)$, мы сразу получаем из равенства (14.4), что $\mathsf{T}(n_1\,0\,0) = \alpha^{n_1}$. Для того чтобы представление T было унитарным, величина α должна быть комплексным числом с модулем, равным единице. Поэтому принято записывать $\alpha = \exp(-2\pi i k_1)$, где k_1 — действительное число, используемое в качестве индекса представления:

$$\mathsf{T}^{(k_1\,0\,0)}(n_1\,0\,0) = \exp(-2\pi i k_1 n_1). \qquad (14.5)$$

Поскольку n_1 — всегда целое число, из (14.5) следует, что два представления с индексами k_1 и $k_1' = k_1 + p$ тождественны, если p — целое число. Поэтому для описания всех унитарных неприводимых представлений необходимо, чтобы индекс k_1 принимал любые значения в пределах интервала единичной длины. Как будет видно из дальнейшего, очевидный интервал $0 \leqslant k_1 < 1$ не всегда наиболее удобен в трехмерных задачах.

Неприводимые представления полной группы трансляций $\mathscr{T}(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3)$ получаются как прямые произведения представлений вида (14.5) и потому являются одномерными; они индицируются тремя параметрами k_1, k_2, k_3 и имеют вид

$$\mathsf{T}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) = \mathsf{T}^{(k_1\,0\,0)}(n_1\,0\,0) \otimes \mathsf{T}^{(0\,k_2\,0)}(0\,n_2\,0) \otimes \mathsf{T}^{(0\,0\,k_3)}(0\,0\,n_3) = \\ = \exp[-2\pi i\,(k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3)]. \qquad (14.6)$$

Показатель экспоненты в формуле (14.6) имеет вид скалярного произведения, но, поскольку векторы $\mathbf{a}_i$ основных трансляций не являются ни взаимно ортогональными, ни нормированными, необходимо ввести базис в пространстве так называемой обратной решетки. Векторы этого базиса определяются равенством

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi\,[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]} \qquad (14.7)$$

и обладают свойством

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \qquad (14.8)$$

которое можно было бы также принять в качестве их определения. Только после этого можно будет записать показатель экспоненты в формуле (14.6) в виде скалярного произведения. Для этого введем вектор $\mathbf{k}$, имеющий компоненты k_i в базисе $\mathbf{b}_i$:

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3. \qquad (14.9)$$

Тогда

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} = \sum_{ij} k_i n_j \mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \sum_i k_i n_i, \qquad (14.10)$$

и матричный элемент неприводимого представления можно записать в виде

$$\mathsf{T}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}), \qquad (14.11)$$

где $\mathbf{n}$ обозначает элемент группы, а $\mathbf{k}$ — индекс неприводимого представления.

Как было отмечено выше, в одномерном случае все представления с индексом $k_1 + p$, где p — любое целое число, тождественны представлению с индексом k_1; в трехмерном случае то же будет справедливо для представлений, полученных добавлением целых чисел к любому из k_i. Этот

результат удобнее сформулировать, если ввести обратную решетку как совокупность точек, определяемых векторами

$$\mathbf{K}_{\mathbf{m}} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3, \tag{14.12}$$

где m_i — целые числа. Отсюда видно, что представления, соответствующие индексам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mathbf{m}}$, эквивалентны:

$$\mathsf{T}^{(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mathbf{m}})}(\mathbf{n}) = \exp[-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mathbf{m}})\cdot\mathbf{n}] = \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}) = \mathsf{T}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}). \tag{14.13}$$

В заключение выведем простое правило для построения произведения представлений групп трансляций. Поскольку неприводимые представления группы $\mathscr{T}$ одномерны, это правило тривиально. Прямое произведение представлений с индексами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ — это представление с индексом $\mathbf{k}+\mathbf{k}'$, так как

$$\begin{aligned}\mathsf{T}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) \otimes \mathsf{T}^{(\mathbf{k}')}(\mathbf{n}) &= \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n})\exp(-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{n}) = \\ &= \exp[-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{n}] = \mathsf{T}^{(\mathbf{k}+\mathbf{k}')}(\mathbf{n}).\end{aligned} \tag{14.14}$$

Однако ввиду отмеченной выше эквивалентности к индексу получающегося представления можно, не изменяя результата, добавить вектор обратной решетки:

$$\mathsf{T}^{(\mathbf{k})} \otimes \mathsf{T}^{(\mathbf{k}')} = \mathsf{T}^{(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{K}_{\mathbf{m}})}. \tag{14.15}$$

§ 3. ЗОНА БРИЛЛЮЭНА И НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ

Как было показано, различные представления можно строить, заставляя параметры k_1, k_2 и k_3 пробегать интервал единичной длины. Этим условием определяется область пространства, в которой должен находиться вектор $\mathbf{k}$; данную область можно наглядно себе представить, используя базис в пространстве обратной решетки и равенство (14.9). Если выбрать интервалы $0 \leqslant k_i < 1$, то областью вектора $\mathbf{k}$ будет параллелепипед, построенный на базисных векторах $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ и $\mathbf{b}_3$. Но обычно удобнее выбирать область, максимально симметричную относительно начала координат, допуская тем самым отрицательные значения величин k_i. Полученная таким способом область изменения вектора $\mathbf{k}$ называется зоной Бриллюэна; ее границы можно определить с помощью векторов обратной