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

решетки (14.12). Зона Бриллюэна определяется как область, ограниченная плоскостями, которые делят пополам векторы, соединяющие начало координат со всеми ближайшими узлами обратной решетки, и при этом ортогональны этим векторам.

На рис. 14.2 приведены некоторые примеры двумерных решеток совместно с их обратными решетками и зонами Бриллюэна. В этих двумерных примерах проще получить

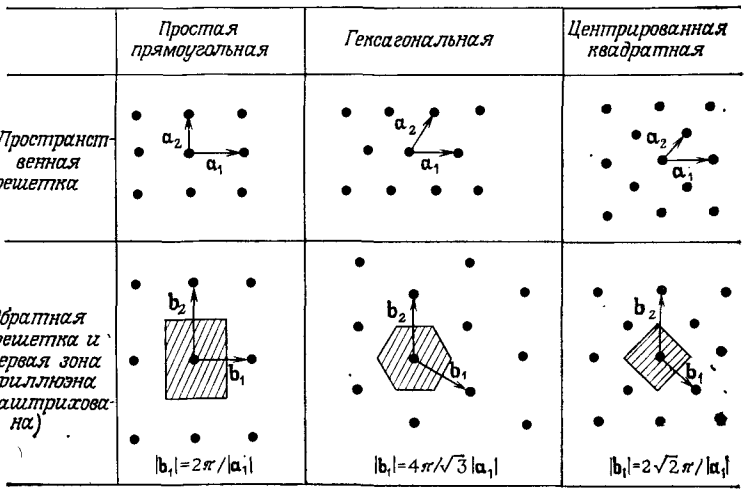

Рис. 14.2.

векторы $\mathbf{b}_i$, пользуясь соотношением (14.8), а не исходным определением (14.7).

Одна из причин выбора именно зон Бриллюэна среди других возможных элементарных ячеек состоит в том, что с их помощью проще всего иллюстрируется точечная симметрия обратной решетки. Эта симметрия совпадает с симметрией исходной пространственной решетки (которая, однако, может и не совпадать с обратной решеткой). В самом деле, векторы $\mathbf{K}_m$ обратной решетки, определенные равенством (14.12), удовлетворяют условию

$$\exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{n}) = 1 \qquad (14.16)$$

для всех узлов решетки $\mathbf{n}_j$, и нетрудно показать, что, наоборот, любой вектор, удовлетворяющий условию (14.16)

для всех $\mathbf{n}$, должен быть вектором обратной решетки. Если теперь выбрать вращение R_i, принадлежащее точечной группе, которая оставляет неизменной пространственную решетку, то точка $\mathsf{R}_i^{-1}\mathbf{n}$ тоже будет узлом решетки, так что $\exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathsf{R}_i^{-1}\mathbf{n}) = 1$. Поскольку же показатель экспоненты есть скалярное произведение, отсюда следует, что $\exp(i\mathsf{R}_i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{n}) = 1$ и, значит, точка $\mathsf{R}_i\mathbf{K}_m$ также является узлом обратной решетки. Таким образом, любой элемент R_i данной группы переводит все векторы обратной решетки в такие же векторы; следовательно, обратная решетка обладает той же симметрией точечной группы, что и пространственная решетка.

4. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Простейшая модель для описания электронов, движущихся в кристалле, — это модель независимых электронов. В ней принимается, что каждый электрон движется независимо от других в фиксированном потенциале $V(\mathbf{r})$, который отражает его взаимодействие с ядрами, а также (в среднем) и взаимодействие с другими электронами твердого тела. Предполагается, что потенциал $V(\mathbf{r})$ обладает трансляционной симметрией кристалла, т. е. $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{n})$. Этот периодический потенциал следует рассматривать так же, как и центральное поле в случае электронов в атоме (гл. 8, § 6, п. А).

Теперь можно использовать полученные выше результаты, чтобы найти характеристические свойства электронов, движущихся в таком потенциале. Прежде всего установим действие трансляций на волновую функцию электрона, основываясь на общем определении (4.8):

$$\mathsf{T}(\mathbf{n})\,\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathsf{P}^{-1}(\mathbf{n})\,\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{n}). \qquad (14.17)$$

Для этого преобразования $\mathsf{T}(\mathbf{n})$ выполняется групповой закон умножения

$$\mathsf{T}(\mathbf{m})\,\mathsf{T}(\mathbf{n})\,\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{m}-\mathbf{n}) = \mathsf{T}(\mathbf{m}+\mathbf{n})\,\varphi(\mathbf{r}), \qquad (14.18)$$

что и требуется в общем случае от любого представления группы.

На основе общих результатов относительно индицирования представлений и вырождения (гл. 5, § 3) можно