и Γ_4^- — с другой, носит название соотношения совместимости. Таким же способом можно классифицировать неприводимое представление в точке X по неприводимым представлениям малой группы в X (она совпадает с D_{4h}); используя таблицу характеров, мы получаем индексы, показанные на рис. 14.12.

В. ДРУГИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Все свойства симметрии функции $\varepsilon(\mathbf{k})$, установленные в п. Б для энергетических зон электронов в кристаллах, относятся и к другим возбуждениям, о которых шла речь в § 5—7. Например, при вычислении частот колебаний решетки три взаимно-ортогональных смещения атома в узле преобразуются точно так же, как и p-функции. Поэтому все сказанное о зонах, построенных из p-функций в приближении сильной связи, можно перенести на вычисление колебательного спектра простой кубической решетки.

ЛИТЕРАТУРА

В качестве основной литературы по физическим вопросам, затронутым в данной главе, можно предложить одно из следующих руководств:

1. *Kittel C.*, Introduction to Solid State Physics, Wiley, New York, 1971.

[Имеется перевод: *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела: — М.: Наука, 1978.]

2. *Elliott R. J.*, *Gibson A. F.*, An Introduction to Solid State Physics and its Applications, Macmillan, London, 1974.

3. *Harrison W. A.*, Solid State Theory, McGraw-Hill, New York, 1970.

[Имеется перевод: *Харрисон У.* Теория твердого тела. — М.: Мир, 1972.]

Более серьезное изложение можно найти в книге:

4. *Ziman J. M.*, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972.

[Имеется перевод: *Займан Дж.* Принципы твердого тела. — М.: Мир, 1978.]

Специальный обзор по связи между симметрией и электронными состояниями в металлах:

5. *Nussbaum A.*, Solid. St. Phys., 18, 165 (1966).

Для дальнейшего изучения пространственных групп рекомендуем книгу:

6. *Birman J. L.*, Theory of space groups and infra-red and Raman lattice processes in insulating crystals. — in: Handbuch der Physik, Bd. 25 (2b), 1974; Light and matter. — in: Handbuch der Physik, Bd. 25 (1b), 1974.

ЗАДАЧИ

14.1. Покажите, что объем зоны Бриллюэна равен $(2\pi)^3/v_c$, где v_c — объем элементарной ячейки.

14.2. Покажите, что любой вектор $\mathbf{k}_m$, удовлетворяющий уравнению (14.16), является вектором обратной решетки.

14.3. Покажите, что уравнение парабол, изображенных на рис. 14.4 и соответствующих приближению свободных электронов, таково:

$$\varepsilon^0_{n_1 n_2}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2M}\left\{\left(\frac{2\pi n_1}{a_1} + k_x\right)^2 + \left(\frac{2\pi n_2}{a_2} + k_y\right)^2\right\},$$

где n_1 и n_2 — целые числа.

14.4. Изобразите зону Бриллюэна для плоской квадратной решетки в двух измерениях, имеющей группу симметрии C_{4v}. Отметьте на ней шесть видов особых точек, в которых малая группа вектора $\mathbf{k}$ нетривиальна. Какова малая группа в каждой из этих точек? Постройте таблицу соотношений совместности для неприводимых представлений вектора $\mathbf{k}$, лежащего на оси x на рис. 14.10, в предельных случаях $k \to 0$ и $k \to \pi/a$.

14.5. В § 4, п. А была использована теория возмущений для вырожденного уровня при построении волновых функций, а следовательно, и энергий на границе зоны в модели почти свободных электронов. Примером состояний, преобразующихся неприводимо под действием малой группы в этой точке, служат четные и нечетные волновые функции. Рассмотрите двумерную квадратную решетку из предыдущей задачи и проведите аналогичное вычисление, используя четыре вырожденные плоские волны, соответствующие вектору $\mathbf{k} = (\pm\pi/a, \pm\pi/a)$. Все эти функции имеют одинаковый приведенный вектор $\mathbf{k}$, соответствующий одной из особых точек зоны. Малая группа в каждой такой точке — это полная группа симметрии C_{4v}. Вычислив характер представления, порождаемого четырьмя эквивалентными плоскими волнами, покажите, что вырожденное состояние может расщепиться на дублет и два синглета. Используйте при этом проекционные операторы для построения собственных состояний. Вычислите для этих состояний энергии почти свободных электронов в первом порядке по $V(\mathbf{r})$.

14.6. Покажите, что произведение $\mathsf{P}(\mathbf{n})\,\mathsf{R}_i\,\mathsf{P}(-\mathbf{n})$ соответствует повороту на тот же угол, что и при операции R_i, но вокруг точки $\mathbf{n}$.

14.7. Покажите, что если q_l — порядок малой группы вектора $\mathbf{k}$, а g — порядок полной точечной группы, звезда вектора $\mathbf{k}$ содержит g/g_l векторов.

14.8. Покажите, что при операциях, входящих в малую группу, три блоховские функции $\varphi_q^{(\mathbf{k})}$ [формула (14.82)] преобразуются так же, как и атомные p-функции с центром в начале координат.