

определения зависимости энергии отдельного электронного состояния от волнового числа и соответственно для получения явных выражений частот колебаний как функций волнового числа необходимы конкретные расчеты.

ЗАДАЧИ

1. Рассмотрим объемноцентрированную кубическую решетку, состоящую из одинаковых атомов. Каковы примитивные трансляции этой решетки?

Добавим теперь по одному такому же атому в центр каждой грани кубической ячейки. Каковы примитивные трансляции полученной решетки? Какова теперь примитивная ячейка и сколько в ней атомов?

2. Рассмотрим кристалл, обладающий осью симметрии, которую обозначим буквой c . Группа симметрии этого кристалла содержит вращения и отражения группы симметрии равностороннего треугольника, расположенного в плоскости, перпендикулярной оси c . Пусть она, кроме того, содержит отражение кристалла в этой плоскости (и произведения этого отражения на остальные элементы). Найдите общий вид тензора электропроводности, учитывая все требования симметрии.

3. Рассмотрим гамильтониан $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$, описывающий динамику двух взаимодействующих частиц. Если частицы тождественны, то гамильтониан не изменяется при перестановке двух частиц:

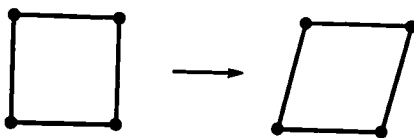
$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) = H(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1).$$

Что можно точно утверждать о собственных функциях $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ этого гамильтониана?

4. Найдите группу симметрии квадрата. Постройте таблицу умножения этой группы и разбейте ее на классы.

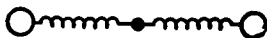
5. а. Постройте для группы квадрата таблицу характеров. Для этого проще всего сначала построить представление.

б. Снимается ли двукратное вырождение, если подвергнуть квадрат деформации сдвига (при которой длина его сторон не изменяется)?



6. Постройте таблицу характеров для группы симметрии задачи 2. Найдите расщепление атомного d -уровня в окружении, обладающем этой симметрией.

7. Рассмотрим симметричную молекулу CO_2 , атомы которой можно представлять себе связанными пружинками. Будем считать, что атомы могут двигаться только вдоль одной прямой, а в остальном свободны.

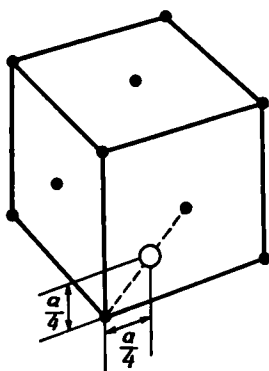


а. Что можно сказать о нормальных модах, пользуясь только соображениями симметрии?

б. Нарисуйте диаграммы нормальных мод для движения вдоль прямой.

8. Найдите вид нормальных колебаний молекулы, обладающей симметрией квадрата.

9. Рассмотрим состояния электронов примесного атома, расположенного в точке $[110] a/4$ ячейки гранецентрированной кубической решетки.



а. Найдите подгруппу операций симметрии, оставляющих на месте примесный атом [например, отражение в плоскости (001)].

б. Постройте таблицу характеров неприводимых представлений этой подгруппы.

в. Как расщеплены при наличии этой симметрии состояния s , p , d ? (Необязательно находить симметрию состояний, достаточно найти лишь расщепление.)

10. Рассмотрим молекулу, обладающую симметрией правильного пятиугольника.

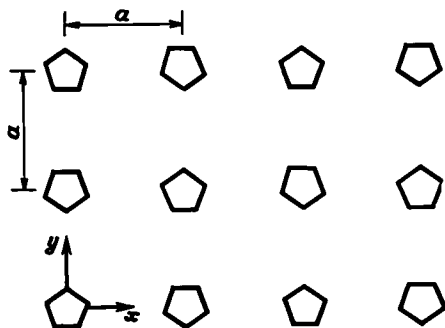
а. Найдите группу преобразований плоскости, не изменяющих гамльтониан.

б. Разбейте ее на классы.

в. Постройте часть таблицы характеров. Для всех представлений, кроме одномерных, достаточно найти характеры матриц, соответствующих единичному элементу E . Для одномерных представлений нужны все характеры.

г. Найдите все нормальные моды, преобразующиеся по одномерному представлению.

д. Рассмотрим кристалл, построенный из таких молекул, которые расположены в кубической решетке таким образом, что одна из плоскостей решетки имеет вид



Плоскость, расположенная над этой плоскостью (и под ней), имеет такой же вид, но сдвинута по отношению к ней на расстояние a в направлении x

- и на расстояние a в направлении z . Какова группа трансляций кристалла?
 е. Какова точечная группа кристалла?
 ж. Может ли кристалл с такой симметрией быть пьезоэлектриком?

ЛИТЕРАТУРА¹⁾

1. *Harrison W. A.*, Pseudopotentials in the Theory of Metals, Benjamin, New York, 1963. (Имеется перевод: У. Харрисон, Псевдопотенциалы в теории металлов, изд-во «Мир», 1968.)
2. *Nye J. F.*, Physical Properties of Crystals, Their Representation by Tensors and Matrices, Clarendon, Oxford, 1957. (Имеется перевод: Дж. Най, Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц, изд-во «Мир», 1970.)
3. *Tinkham M.*, Group Theory and Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1964.
4. *Boeckaert L. P.*, *Smoluchowski R.*, *Wigner E. P.*, Phys. Rev., 50, 58 (1936). (Имеется перевод в книге: Р. Нокс и А. Голд, Симметрия в твердом теле, изд-во «Наука», М., 1970.)
5. *Bloch F.*, Zs. Phys., 52, 555 (1928).
- 6*. *Ландау Л. Д.*, *Лифшиц Е. М.*, Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.
- 7.* *Хейне В.*, Теория групп в квантовой механике, ИЛ, М., 1963.

¹⁾ Литература, отмеченная звездочкой, здесь и в других главах добавлена переводчиком и редактором перевода.— *Прим. ред.*