(133,7) до начала координат есть $2\pi m/b$, где b есть длина данного вектора обратной решетки. Для следующей плоскости это расстояние есть $2\pi(m+1)/b$. Расстояние же d между этими двумя плоскостями есть

$$d=\frac{2\pi}{b}. \tag{133,8}$$

Отметим полезную в применениях формулу

$$\sum_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{br}} = v\sum_{\mathbf{a}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{a}), \tag{133,9}$$

где суммирования справа и слева производятся соответственно по всем векторам прямой и обратной решеток. Сумма в правой стороне равенства — функция $\mathbf{r}$, периодическая в прямой решетке; выражение слева — ее разложение в ряд Фурье[1]). Аналогичная формула

$$\sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{ka}} = v'\sum_{\mathbf{b}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{b}) \tag{133,10}$$

прямо следует из (133,9) ввиду взаимного характера связи между прямой и обратной решетками.

§ 134. Неприводимые представления пространственных групп

Физические применения теории симметрии обычно связаны с использованием математического аппарата так называемых представлений групп. В этом параграфе мы остановимся на вопросе о классификации и методе построения неприводимых представлений пространственных групп[2]).

Предварительно снова подытожим, в более математических терминах, изложенные в предыдущих параграфах сведения о структуре пространственных групп.

Каждая пространственная группа содержит подгруппу трансляций, заключающую в себе бесконечное множество всех возможных параллельных переносов, совмещающих решетку саму с собой; эта подгруппа и представляет собой с математической точки зрения то, что называется решеткой Бравэ кристалла. Полная пространственная группа получается из этой подгруппы добавлением n элементов симметрии, содержащих вращения и

[1]) Расходимость суммы при $\mathbf{r}=\mathbf{a}$ связана с бесконечностью решетки. При рассмотрении решетки большого, но конечного объема значение суммы при $\mathbf{r}=\mathbf{a}$ надо полагать равным числу N ячеек в решетке.

[2]) Предполагается знание читателем теории групп в объеме, содержащемся, например, в III, глава XII.

отражения, где n—число преобразований симметрии соответствующего кристаллического класса; эти элементы будем называть *поворотными*. Всякий элемент пространственной группы можно представить как произведение одной из трансляций на один из поворотных элементов[1]).

Если пространственная группа не содержит винтовых осей и плоскостей скольжения (симморфная группа), то в качестве поворотных элементов можно выбрать просто n преобразований симметрии—вращений и отражений—кристаллического класса. В несимморфных же группах поворотные элементы представляют собой вращения и отражения с одновременным переносом на определенную долю одного из основных периодов решетки.

Для ясной характеристики элементов пространственной группы удобно обозначать их символами $(P|\mathbf{t})$, где P—какое-либо вращение или отражение, а $\mathbf{t}$—вектор одновременной трансляции; при воздействии на радиус-вектор $\mathbf{r}$ какой-либо точки: $(P|\mathbf{t})\,\mathbf{r}=P\mathbf{r}+\mathbf{t}$. Перемножение элементов происходит по очевидному правилу

$$(P'|\mathbf{t}')\,(P|\mathbf{t})=(P'P|P'\mathbf{t}+\mathbf{t}'). \qquad (134,1)$$

Элемент, обратный элементу $(P|\mathbf{t})$, есть

$$(P|\mathbf{t})^{-1}=(P^{-1}|-P^{-1}\mathbf{t}); \qquad (134,2)$$

при умножении на $(P|\mathbf{t})$ он дает единичный элемент группы $(E|0)$ (где E—символ тождественного поворотного преобразования).

В частности, чистые трансляции изображаются символом $(E|\mathbf{a})$, где $\mathbf{a}$—какой-либо из периодов решетки. Поворотные элементы в симморфных группах, выбранные указанным выше образом, являются элементами вида $(P|0)$. В несимморфных же группах поворотные элементы имеют вид $(P|\boldsymbol{\tau})$, где $\boldsymbol{\tau}$—та доля периода решетки, на которую происходит перенос в винтовой оси или плоскости скольжения. В первом случае совокупность поворотных преобразований $(P|0)$ сама образует подгруппу пространственной группы. Во втором же случае элементы $(P|\boldsymbol{\tau})$ сами по себе не образуют подгруппы, поскольку повторное их применение приводит не к тождественному преобразованию, а к трансляции на один из основных периодов решетки. Вращения же и отражения P как таковые (т. е. если не различать простые и винтовые оси, простые плоскости симметрии и плоскости скольжения) всегда составляют группу—точечную группу симметрии,

[1]) Отметим, что подгруппа трансляций—абелева (все ее элементы коммутативны между собой), и что она представляет собой нормальный делитель всей пространственной группы: все элементы группы, сопряженные с трансляциями, тоже являются трансляциями (напомним, что два элемента A и B называются сопряженными, если $A=C^{-1}BC$, где C—тоже элемент группы.

определяющую кристаллический класс; эту точечную группу удобно называть в данном аспекте *группой направлений* решетки [1]).

Обратимся к построению неприводимых представлений пространственных групп [2]).

Всякое такое представление может быть осуществлено набором функций вида

$$\varphi_{\mathbf{k}\alpha} = u_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{kr}}, \qquad (134,3)$$

где $\mathbf{k}$ — постоянные волновые векторы, $u_{\mathbf{k}\alpha}$ — функции, инвариантные относительно трансляций; индекс $\alpha = 1, 2, \ldots$ нумерует функции с одинаковыми $\mathbf{k}$. В результате параллельного переноса $\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \mathbf{a}$ (где $\mathbf{a}$ — какой-либо период решетки), функции (134,3) умножаются на постоянные $e^{i\mathbf{ka}}$. Другими словами, в осуществляемом функциями (134,3) представлении матрицы трансляций диагональны. Очевидно, что два вектора $\mathbf{k}$, отличающиеся на какой-либо период обратной решетки $\mathbf{b}$, приводят к одинаковому закону преобразования функций $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}$ при трансляциях: поскольку $\mathbf{ab}$ — целое кратное от 2π, то $\exp(i\mathbf{ab}) = 1$. Такие векторы $\mathbf{k}$ мы будем называть *эквивалентными*. Если представлять себе векторы $\mathbf{k}$ проведенными из вершины ячейки обратной решетки в различные ее точки, то все неэквивалентные векторы исчерпываются одной элементарной ячейкой.

При воздействии же поворотного элемента симметрии $(P|\boldsymbol{\tau})$ функция $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}$ преобразуется в линейную комбинацию функций $\varphi_{\mathbf{k}'\alpha}$ с различными α и вектором $\mathbf{k}'$, получающимся из $\mathbf{k}$ посредством данного вращения или отражения, произведенного в обратной решетке: $\mathbf{k}' = P\mathbf{k}$ [3]). Совокупность всех (неэквивалентных) векторов $\mathbf{k}$, получающихся друг из друга при воздействии всех n поворотных элементов группы, называют *звездой* волнового вектора $\mathbf{k}$. В общем случае произвольного $\mathbf{k}$ его звезда содержит n векторов (*лучей*). В число функций $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}$ базиса неприводимого представления должны во всяком случае войти функции со всеми лучами звезды: поскольку функции с неэквивалентными $\mathbf{k}$ умножаются при трансляциях на различные множители, то никаким

---

[1]) Во всех случаях связь между пространственной группой и группой направлений можно сформулировать с групповой точки зрения следующим образом. Распределим все элементы пространственной группы по n смежным классам, каждый из которых содержит бесконечное множество произведений одного из поворотных элементов на все возможные трансляции, т. е. все элементы вида $(P|\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a})$ с заданными P и $\boldsymbol{\tau}$. Если теперь рассматривать каждый из смежных классов целиком как элемент новой группы, то мы получим так называемую *фактор-группу* исходной пространственной группы. Эта фактор-группа изоморфна группе направлений.

[2]) Излагаемые ниже соображения принадлежат *Зейтцу* (*F. Seitz*, 1936).

[3]) Для преобразования вектора $\mathbf{k}$ в обратной решетке, разумеется, все оси и плоскости симметрии следует рассматривать как простые, т. е. надо рассматривать лишь группу направлений.

выбором их линейных комбинаций нельзя добиться уменьшения числа преобразующихся друг через друга функций.

При определенных значениях $\mathbf{k}$ число лучей в его звезде может оказаться меньшим чем n, так как может оказаться, что некоторые из поворотных элементов симметрии не меняют $\mathbf{k}$ или превращают его в эквивалентный. Так, если вектор $\mathbf{k}$ направлен вдоль оси симметрии, то он не меняется при поворотах вокруг этой оси; вектор $\mathbf{k}$, проведенный из вершины в центр элементарной ячейки ($\mathbf{k}=\mathbf{b}_i/2$, где $\mathbf{b}$—один из основных периодов обратной решетки), при инверсии превращается в эквивалентный ему вектор $-\mathbf{k}=-\mathbf{b}_i/2=\mathbf{k}-\mathbf{b}_i$.

Совокупность поворотных элементов симметрии (рассматриваемых все как простые вращения или отражения P), входящих в данную пространственную группу и не меняющих вектора $\mathbf{k}$ (или превращающих его в эквивалентный), называют *группой собственной симметрии* вектора $\mathbf{k}$ или просто группой волнового вектора; она представляет собой одну из обычных точечных групп симметрии.

Рассмотрим сначала простейший случай симморфных пространственных групп. Функции базиса неприводимого представления такой группы могут быть представлены в виде произведений

$$\varphi_{\mathbf{k}\alpha}=u_\alpha\psi_{\mathbf{k}}, \tag{134,4}$$

где функции u_α инвариантны относительно трансляций, а $\psi_{\mathbf{k}}$— линейные комбинации выражений $e^{i\mathbf{kr}}$ (с эквивалентными $\mathbf{k}$), инвариантные относительно преобразований группы собственной симметрии вектора $\mathbf{k}$; вектор $\mathbf{k}$ в (134,4) пробегает все значения своей звезды. При трансляциях функции u_α не меняются, а функции $\psi_{\mathbf{k}}$ (а с ними и $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}$) умножаются на $\exp i\mathbf{ka}$. При вращениях и отражениях, входящих в группу $\mathbf{k}$, не меняются функции $\psi_{\mathbf{k}}$, а функции u_α преобразуются друг через друга. Другими словами, функции u_α осуществляют какое-либо из неприводимых представлений точечной группы (о которых говорят в этой связи как о *малых представлениях*). Наконец, поворотные элементы, не входящие в группу $\mathbf{k}$, преобразуют друг через друга наборы функций (134,4) с неэквивалентными $\mathbf{k}$. Размерность построенного таким образом представления пространственной группы равна произведению числа лучей в звезде $\mathbf{k}$ на размерность малого представления.

Таким образом, задача о нахождении всех неприводимых представлений симморфных пространственных групп полностью сводится к классификации векторов $\mathbf{k}$ по их собственной симметрии и к известной задаче об отыскании неприводимых представлений конечных точечных групп.

Обратимся теперь к пространственным группам с винтовыми осями или плоскостями скольжения. Наличие таких элементов симметрии все еще остается несущественным, если волновой вектор $\mathbf{k}$ при всех преобразованиях из его группы вообще не меняется (т. е. не переходит в эквивалентный)[1]. В таких случаях соответствующие неприводимые представления по-прежнему осуществляются функциями вида (134,4), в которых u_α образуют базис представления точечной группы вектора $\mathbf{k}$. Единственное отличие от случая симморфных групп будет состоять в том, что при поворотных преобразованиях функции $\psi_\mathbf{k} = \exp i\mathbf{kr}$ в (134,4) не остаются неизменными, а умножаются на $\exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau})$.

Функции вида (134,4) становятся, однако, непригодными, если существует несколько эквивалентных векторов $\mathbf{k}$, переходящих друг в друга при преобразованиях группы их собственной симметрии. При поворотном преобразовании, связанном с одновременным переносом $\boldsymbol{\tau}$, функции $\exp i\mathbf{kr}$ с эквивалентными, но все же различными значениями $\mathbf{k}$ умножаются на различные множители (поскольку $\mathbf{b}\boldsymbol{\tau}/2\pi$ — не целое число); поэтому их линейные комбинации $\psi_\mathbf{k}$ не будут преобразовываться через самих себя.

В таких случаях раздельное рассмотрение поворотных элементов и трансляций уже невозможно. Однако из бесконечного множества трансляций достаточно включить в рассмотрение лишь конечное их число. Эти случаи возникают для векторов $\mathbf{k}$, проведенных из вершины элементарной ячейки обратной решетки в некоторые выделенные точки внутри ячейки; координаты (все три, или некоторые из них) этих точек выражаются простыми рациональными частями основных периодов $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ [2]. Назовем *расширенной группой волнового вектора* группу, составленную из поворотных элементов (вместе со связанными с ними трансляциями на доли периодов $\boldsymbol{\tau}$) и из всех тех трансляций, для которых $\mathbf{ka}/2\pi$ — рациональная дробь (меньшая 1); остальные же трансляции рассматриваются по-прежнему как тождественные преобразования. Функции $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}$, осуществляющие неприводимые представления составленной таким образом конечной группы (малые представления), вместе с такими же функциями $\varphi_{\mathbf{k}'\alpha}$ других лучей из данной звезды $\mathbf{k}$, осуществляют неприводимое представление пространственной группы. Отметим, что размерность малых представлений в этих группах достигает шести (в группах кристаллического класса O_h) [3].

[1] К этой категории всегда относятся, в частности, вектор $\mathbf{k}=0$ и вектор, занимающий общее положение, в котором единственным элементом его группы является тождественное преобразование.

[2] Фактически эти части бывают равными лишь 1/2, 1/3, 2/3 (последние два значения — в группах ромбоэдрической и гексагональной систем).

[3] Если рассматривать представления расширенной группы волнового вектора как представления нерасширенной группы (одна из точечных групп), то соотношения между матрицами $\widehat{G}$, представляющими элементы G группы, будут

Продемонстрируем этот способ на конкретном примере.

Рассмотрим пространственную группу D_{2h}^2, относящуюся к простой ромбической решетке Бравэ и содержащую следующие поворотные элементы[1]):

$$(E\,|\,0),\quad (C_2^x\,|\,0),\quad (C_2^y\,|\,0),\quad (C_2^z\,|\,0),\quad (I\,|\,\boldsymbol{\tau}),\quad (\sigma_x\,|\,\boldsymbol{\tau}),\quad (\sigma_y\,|\,\boldsymbol{\tau}),\quad (\sigma_z\,|\,\boldsymbol{\tau}),$$

где оси x, y, z направлены вдоль трех основных периодов решетки, а $\boldsymbol{\tau}=(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2+\mathbf{a}_3)/2$ (оси симметрии C_2 простые, а перпендикулярные им плоскости σ — плоскости скольжения).

Выберем например, вектор

$$\mathbf{k}=(1/2,\ 0,\ 0), \tag{134,5}$$

где числа в скобках дают значения составляющих вектора по осям обратной решетки, измеренные в единицах длин ребер ($b_i=2\pi/a_i$) ее ячейки. Собственная симметрия этого волнового вектора содержит все оси и плоскости точечной группы D_{2h}, так что этот вектор сам по себе составляет звезду. Расширенная группа получается добавлением трансляции $(E\,|\,\mathbf{a}_1)$, для которой $\mathbf{k}\mathbf{a}/2\pi=1/2$. В результате получим группу из 16 элементов, распределенных по 10 классам, как показано в верхнем ряду табл. 2. В сопряженности (т. е. принадлежности к одному классу), например, элементов $(C_2^y\,|\,0)$ и $(C_2^y\,|\,\mathbf{a}_1)$ можно убедиться следующим образом. Имеем

$$(I\,|\,\boldsymbol{\tau})^{-1}(C_2^y\,|\,0)(I\,|\,\boldsymbol{\tau})=(I\,|-\boldsymbol{\tau})(C^y\,|\,0)(I\,|\,\boldsymbol{\tau})=$$
$$=(I\,|-\boldsymbol{\tau})(C_2^yI\,|\,C_2^y\boldsymbol{\tau})=(C_2^y\,|-\boldsymbol{\tau}+C_2^y\boldsymbol{\tau}).$$

Но

$$C_2^y\boldsymbol{\tau}=\frac{1}{2}(-\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_3),\qquad C_2^y\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}=-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_3=\mathbf{a}_1-(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_3),$$

отличаться от соотношений между самими этими элементами: если $G_1G_2=G_3$, то соответствующие матрицы представления будут, вообще говоря, связаны между собой не таким же равенством $\hat{G}_1\hat{G}_2=\hat{G}_3$ (как в обычных представлениях), а равенством вида $\hat{G}_1\hat{G}_2=\omega_{12}\hat{G}_3$, где ω_{12} — некоторый фазовый множитель, равный единице лишь по модулю: $|\omega_{12}|=1$. Такие представления называют *проективными*. Все существенно различные проективные представления могут быть раз и навсегда перечислены для каждой из точечных групп, и затем использованы в качестве малых представлений при построении неприводимых представлений пространственных групп.

Изложение теории проективных представлений и таблицы проективных представлений кристаллографических точечных групп можно найти в книге: *Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус*, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, «Наука», 1972.

Существуют также полные таблицы неприводимых представлений пространственных групп, которые можно найти в книгах: *О. В. Ковалев*, Неприводимые представления пространственных групп, Изд. АН УССР, Киев, 1961; *C. J. Bradley, A. P. Cracknell*, The mathematical theory of symmetry in solids, Clarendon Press, Oxford, 1972.

[1]) Пространственные группы принято обозначать символом кристаллического класса, дополненным верхним индексом — условным номером группы в данном классе.

а поскольку трансляции на $\mathbf{a}_3$ и на $2\mathbf{a}_1$ должны рассматриваться как тождественное преобразование, то

$$(I\,|\,\boldsymbol{\tau})^{-1}(C_2^y\,|\,0)(I\,|\,\boldsymbol{\tau}) = (C_2^y\,|\,\mathbf{a}_1).$$

По числу элементов и числу классов в группе находим, что она имеет 8 одномерных и 2 двумерных неприводимых представлений ($8\cdot 1^2 + 2\cdot 2^2 = 16$). Все одномерные представления получаются из представлений точечной группы $\boldsymbol{D}_{2h}$, причем трансляции

Таблица 2

	$(E\,\|\,0)$	$(E\,\|\,\mathbf{a}_1)$	$(C_2^x\,\|\,0)$	$(C_2^x\,\|\,\mathbf{a}_1)$	$(C_2^y\,\|\,0)$ $(C_2^y\,\|\,\mathbf{a}_1)$	$(C_2^z\,\|\,0)$ $(C_2^z\,\|\,\mathbf{a}_1)$	$(I\,\|\,\boldsymbol{\tau})$ $(I\,\|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a}_1)$	$(\sigma_x\,\|\,\boldsymbol{\tau})$ $(\sigma_x\,\|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a}_1)$	$(\sigma_y\,\|\,\boldsymbol{\tau})$ $(\sigma_y\,\|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a}_1)$	$(\sigma_z\,\|\,\boldsymbol{\tau})$ $(\sigma_z\,\|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a}_1)$
Γ_1	2	—2	2	—2	0	0	0	0	0	0
Γ_2	2	—2	—2	2	0	0	0	0	0	0

$(E\,|\,\mathbf{a}_1)$ приписывается характер 1. Эти представления, однако, возникают здесь как «паразитные» и должны быть отброшены. Они не соответствуют поставленному вопросу: функции их базиса инвариантны по отношению ко всем трансляциям, между тем как функция $\exp i\mathbf{kr}$ с данным $\mathbf{k}$ заведомо не инвариантна по отношению к трансляции $(E\,|\,\mathbf{a}_1)$. Таким образом, остаются всего два неприводимых представления, характеры которых указаны в табл. 2. Функции базиса этих представлений могут быть выбраны в виде

$$\Gamma_1\colon\ \cos\pi x,\ \ \sin\pi x;\qquad \Gamma_2\colon\ \cos\pi x\sin 2\pi y,\ \ \sin\pi x\sin 2\pi y$$

(координаты x, y, z измеряются в единицах длин соответствующих периодов $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$).

Рассмотрим еще представления, отвечающие звезде двух векторов

$$\mathbf{k} = (1/2,\ 0,\ \varkappa),\qquad (1/2,\ 0,\ -\varkappa) \tag{134,6}$$

с собственной симметрией $\boldsymbol{C}_{2v}$ (ось C_2 — вдоль оси z); здесь $\varkappa$ — произвольное число между 0 и 1 (кроме 1/2). Расширенная группа $\mathbf{k}$ содержит восемь элементов, распределенных по пяти классам (табл. 3). (Зависимость от z функций базиса представлений этой группы сводится к общему множителю $\exp(2\pi i\varkappa z)$ или $\exp(-2\pi i\varkappa z)$, инвариантному относительно всех преобразований группы; поэтому расширять группу трансляциями вдоль оси z не надо). Имеется четыре одномерных и одно двумерное неприводимые представления этой группы. Одномерные представления должны быть отброшены по той же причине, что и в предыдущем случае, так что остается всего одно представление, характеры которого даны в табл. 3. Функции его базиса могут быть выбраны в виде

$$e^{\pm 2\pi i \varkappa z} \cos \pi x, \qquad e^{\pm 2\pi i \varkappa z} \sin \pi x$$

со знаком плюс или минус в показателе, соответственно для первого и второго из векторов (134,6); полное неприводимое представление всей пространственной группы четырехмерно и осуществляется набором всех этих четырех функций.

Таблица 3

$(E \mid 0)$	$(E \mid \mathbf{a}_1)$	$(C_2^z \mid 0)$ $(C_2^z \mid \mathbf{a}_1)$	$(\sigma_x \mid \tau)$ $(\sigma_x \mid \tau+\mathbf{a}_1)$	$(\sigma_y \mid \tau)$ $(\sigma_y \mid \tau+\mathbf{a}_1)$
2	—2	0	0	0

§ 135. Симметрия относительно обращения времени

В физических применениях теории групп симметрии на их представления обычно накладывается дополнительное требование: функции базиса представления должны быть вещественными (точнее—допускать приведение к вещественному виду). Это требование возникает как следствие симметрии по отношению к обращению времени. В квантовой механике в силу этой симметрии комплексно-сопряженные волновые функции должны отвечать одному и тому же уровню энергии квантовой системы и потому должны входить в число функций базиса одного и того же *физически неприводимого* представления (ср. III, § 96). В классической же теории эта симметрия выражается инвариантностью уравнений движения по отношению к замене $t \to -t$ (уравнения содержат производные по времени четного—второго—порядка). Именно в результате этого уравнения для смещений $\mathbf{u}_s$ атомов в решетке остаются вещественными, когда их решение ищется в комплексном ($\sim e^{-i\omega t}$) виде (69,6); амплитуды этих выражений могут, следовательно, быть выбраны вещественными[1]).

Вещественные функции базиса остаются, конечно, вещественными и в результате воздействия всех элементов симметрии; другими словами, вещественны и все матрицы представления группы. Если же некоторое неприводимое представление не

[1]) Но это уже будет не так при наличии магнитного поля или в кристаллах с магнитной структурой.