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.

удовлетворяет этому требованию, то оно должно быть объединено с комплексно-сопряженным ему представлением в одно физически неприводимое представление вдвое большей размерности. Рассмотрим с этой точки зрения случаи, которые могут иметь место для представлений пространственных групп (*C. Herring*, 1937).

Наиболее прост в этом смысле случай, когда звезды волновых векторов $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ не совпадают друг с другом. В таком случае неприводимые представления, построенные на каждой из этих звезд, заведомо комплексны. Так, для звезды $\mathbf{k}$ функции базиса представлений умножаются при трансляциях $(E\,|\,\mathbf{a})$ на множители $e^{i\mathbf{ka}}$, среди которых нет взаимно комплексно-сопряженных; ясно поэтому, что никаким выбором линейных комбинаций этих функций нельзя привести матрицы преобразований к вещественному виду. С другой стороны, произведя комплексное сопряжение этих функций, мы получим комплексно-сопряженное представление, относящееся к звезде вектора $-\mathbf{k}$. Объединением этих двух представлений мы и получим вещественное представление. Таким образом, для получения физически неприводимого представления в звезду волнового вектора надо включить наряду с каждым $\mathbf{k}$ также и вектор $-\mathbf{k}$. Другими словами, для получения всей нужной звезды надо применить к некоторому исходному $\mathbf{k}$ все элементы группы направлений, дополненной центром симметрии.

Если же звезда волнового вектора уже с самого начала содержит все нужные значения $\mathbf{k}$, то этим еще отнюдь не гарантируется вещественность построенных на них неприводимых представлений. Продемонстрируем это на простом примере.

Рассмотрим симморфную пространственную группу S_4^1, относящуюся к кристаллическому классу S_4 и имеющую простую тетрагональную решетку Бравэ. Рассмотрим в этой группе представления, отвечающие звезде двух векторов

$$\mathbf{k}=(0,\ 0,\ \varkappa),\ (0,\ 0,\ -\varkappa), \tag{135,1}$$

где ось z направлена вдоль оси симметрии S_4, а $\varkappa$ — произвольное (отличное от 1/2) число между 0 и 1. Собственная симметрия этих векторов: C_2; эта точечная группа имеет два одномерных представления с характерами:

	E	C_2
A	1	1
B	1	−1

Взяв первое из них в качестве малого представления, получим двумерное представление всей пространственной группы, базис которого может быть выбран в виде комплексно-сопряженных функций $\exp(\pm 2\pi i\varkappa z)$; это представление, следовательно, вещественно. Малому же представлению B отвечает двумерное представление всей группы, осуществляемое базисными функциями

$$\exp 2\pi i\varkappa z \cos 2\pi x, \quad \exp(-2\pi i\varkappa z)\sin 2\pi x.$$

Характеры поворотных элементов группы в этом представлении:

$$\begin{array}{cccc} (E\,|\,0) & (S_4\,|\,0) & (C_2\,|\,0) & (S_4^3\,|\,0) \\ 2 & 0 & -2 & 0 \end{array},$$

а характеры трансляций:

$$\begin{array}{ccc} (E\,|\,\mathbf{a}_1) & (E\,|\,\mathbf{a}_2) & (E\,|\,\mathbf{a}_3) \\ 2 & 2 & 2\cos 2\pi\varkappa \end{array}.$$

Все эти характеры вещественны, но представление тем не менее комплексно: функции его базиса не могут быть преобразованы к вещественному виду. Физически неприводимое представление получается присоединением к этим функциям также и их комплексно-сопряженных. Таким образом, физически неприводимое представление получается в данном случае объединением двух комплексно-сопряженных, но эквивалентных (с одинаковыми характерами) представлений[1]).

В рассмотренном примере симметрия относительно обращения времени приводит к удвоению размерности физически неприводимого представления для значений волнового вектора, заполняющих прямую линию (ось симметрии) в $\mathbf{k}$-пространстве. Существуют также и случаи, когда такое удвоение происходит для значений $\mathbf{k}$, заполняющих целую плоскость в $\mathbf{k}$-пространстве. Именно, речь идет о плоскости, перпендикулярной к винтовой оси второго порядка.

Рассмотрим, например, несимморфную пространственную группу C_2^2, относящуюся к кристаллическому классу C_2 и имеющую простую моноклинную решетку Бравэ. Ось второго порядка (примем ее за ось z) в ней является винтовой, с переносом на половину периода: $(C_2\,|\,\mathbf{a}_3/2)$. Рассмотрим в этой группе звезду двух волновых векторов:

$$\mathbf{k} = (\varkappa,\ \lambda,\ 1/2), \quad (-\varkappa,\ -\lambda,\ 1/2), \tag{135,2}$$

где $\varkappa$ и λ — произвольные числа между 0 и 1/2 (оси x, y — косоугольные, в плоскости, перпендикулярной к оси симметрии); звезда включает в себя $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$, поскольку векторы $(-\varkappa, -\lambda, -1/2)$ и $(-\varkappa, -\lambda, 1/2)$ эквивалентны. Этой звезде отвечают два эквивалентных (с одинаковыми вещественными характерами) двумерных

---

[1]) Напомним, что в точечных группах такой ситуации не возникало: для этих групп все неприводимые представления с вещественными характерами вещественны.

неприводимых представления группы, осуществляющихся соответственно базисными функциями

$$e^{\pm 2\pi i(\varkappa x+\lambda y)}e^{i\pi z}$$

и их комплексно-сопряженными. Физически неприводимое представление получается объединением этих двух комплексно-сопряженных представлений. Четыре функции его базиса разбиваются на две пары, каждая из которых отвечает одному из двух волновых векторов звезды:

$$e^{2\pi i(\varkappa x+\lambda y)}e^{\pm i\pi z}$$

и

$$e^{-2\pi i(\varkappa x+\lambda y)}e^{\pm i\pi z}.$$

Если неприводимое представление найдено вместе с функциями его базиса, ответ на вопрос о его вещественности или комплексности становится очевидным. Тем не менее в более сложных случаях (и для исследования некоторых общих вопросов) полезно иметь критерий, позволяющий дать ответ на этот вопрос уже непосредственно по характерам малого представления. Такой критерий можно получить, исходя из следующей общей теоремы теории представлений групп[1]).

Для каждого из неприводимых представлений группы следующая сумма может иметь одно из трех значений:

$$\frac{1}{g}\sum_G \chi(G^2)=\begin{cases} +1 & (\text{а}),\\ 0 & (\text{б}),\\ -1 & (\text{в})\end{cases} \tag{135,3}$$

(суммирование производится по всем элементам группы, g — ее порядок). В зависимости от этих значений: а) представление вещественно; б) представление комплексно, причем комплексно-сопряженные представления не эквивалентны (имеют комплексно-сопряженные характеры); в) представление комплексно, причем комплексно-сопряженные представления эквивалентны (имеют одинаковые вещественные характеры).

Наметим путь, по которому этот критерий преобразуется в применении к пространственным группам, не вникая в его детали. Согласно описанному в предыдущем параграфе способу построения неприводимых представлений пространственных групп, их характеры могут быть представлены в виде

$$\chi[(P\,|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a})]=\sum_i \chi_{\mathbf{k}_i}[(P\,|\,\boldsymbol{\tau})]\exp(i\mathbf{k}_i\mathbf{a}), \tag{135,4}$$

[1]) Ее доказательство можно найти, например, в книгах, указанных в примечаниях на стр. 449 и 458.

где $\chi_{\mathbf{k}}[(P|\mathbf{k})]$ — характеры поворотных элементов группы в малом представлении, а суммирование производится по тем из лучей $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, ... звезды волнового вектора, для которых P является одним из элементов его группы симметрии. Применив эту формулу к элементу

$$(P\,|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a})^2=(P^2\,|\,\boldsymbol{\tau}+P\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a}+P\mathbf{a})=(P\,|\,\boldsymbol{\tau})^2\,(E\,|\,\mathbf{a}+P\mathbf{a}),$$

имеем

$$\chi\,[(P\,|\,\boldsymbol{\tau}+\mathbf{a})^2]=\sum_i\chi_{\mathbf{k}_i}\,[(P\,|\,\boldsymbol{\tau})^2]\,e^{i\mathbf{a}\,(\mathbf{k}_i+P^{-1}\mathbf{k}_i)}$$

(в показателе заменено $\mathbf{k}_iP\mathbf{a}=\mathbf{a}P^{-1}\mathbf{k}_i$). Эти характеры надо просуммировать по всем трансляциям и всем поворотным элементам $(P\,|\,\boldsymbol{\tau})$. Сумма

$$\sum_{\mathbf{a}}\exp\{i\mathbf{a}\,(\mathbf{k}_i+P^{-1}\mathbf{k}_i)\}$$

отлична от нуля только при $\mathbf{k}_i+P^{-1}\mathbf{k}_i=0$, $\mathbf{b}$. Наконец, замечаем, что ввиду равноценности всех лучей в звезде в сумме по i (которая должна вычисляться в последнюю очередь) все члены одинаковы.

В результате получаем следующий окончательный *критерий Херринга*:

$$\frac{1}{n_{\mathbf{k}}}\sum\chi_{\mathbf{k}}\,[(P\,|\,\boldsymbol{\tau})^2]=\begin{cases}+1 & \text{(а)},\\ \ \ 0 & \text{(б)},\\ -1 & \text{(в)},\end{cases}\qquad(135{,}5)$$

где $\chi_{\mathbf{k}}$ — характеры малого представления, а суммирование производится по тем из поворотных элементов $(P\,|\,\boldsymbol{\tau})$ пространственной группы, которые переводят $\mathbf{k}$ в вектор, эквивалентный $-\mathbf{k}$: $P\mathbf{k}=-\mathbf{k}+\mathbf{b}$ [1]); $n_{\mathbf{k}}$ — число поворотных элементов собственной симметрии волнового вектора.

В частности, если пространственная группа вообще не содержит поворотных элементов, обладающих указанным свойством, то в сумме (135,5) не остается ни одного члена, так что имеет место случай (б) — в согласии со сказанным выше о случае, когда звезды $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ не совпадают.

В рассмотренном выше примере из группы S_4^1, требуемым свойством обладают элементы $(S_4\,|\,0)$ и $(S_4^3\,|\,0)$; их квадраты представляют собой элемент $(C_2\,|\,0)$. Поэтому сумма (135,3):

$$\frac{1}{2}\,\{\chi_{\mathbf{k}}\,[(S_4\,|\,0)^2]+\chi_{\mathbf{k}}\,[(S_4^3\,|\,0)^2]\}=\chi_{\mathbf{k}}\,[(C_2\,|\,0)]$$

[1]) При этом $(P\,|\,\boldsymbol{\tau})^2$ не меняет вектора $\mathbf{k}$ (или превращает его в эквивалентный), т. е. заведомо входит в группу собственной симметрии вектора $\mathbf{k}$.

и равна $+1$ для малого представления A и -1 для малого представления B, для которых, следовательно, имеют место случаи (а) и (в) — снова в соответствии с уже найденными результатами.

§ 136. Свойства симметрии нормальных колебаний кристаллической решетки

Одно из физических применений математического аппарата представлений пространственных групп состоит в классификации нормальных колебаний решетки по их свойствам симметрии [1]).

Напомним, что в решетке с ν атомами в элементарной ячейке для каждого заданного волнового вектора $\mathbf{k}$ существует 3ν нормальных колебаний, каждое со своим значением частоты $\omega(\mathbf{k})$. Во всей области изменения $\mathbf{k}$ закон дисперсии колебаний $\omega = \omega(\mathbf{k})$ имеет, другими словами, 3ν ветвей $\omega_\alpha(\mathbf{k})$; каждая из $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ пробегает значения в некотором конечном интервале — *энергетической зоне* фононов. Все существенно различные значения волнового вектора заключены в одной элементарной ячейке обратной решетки; если же рассматривать всю бесконечную обратную решетку, то в ней функции $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ периодичны:

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}+\mathbf{b}) = \omega_\alpha(\mathbf{k}). \tag{136,1}$$

Физические основания для классификации колебаний решетки по неприводимым представлениям ее группы симметрии — те же, что и для аналогичной классификации в случае конечных симметричных систем — многоатомных молекул (см. III, § 100). Нормальные координаты колебаний, осуществляющие собой (в качестве базиса) некоторое неприводимое представление группы симметрии решетки, относятся к одной и той же частоте.

Каждое неприводимое представление пространственной группы задается, прежде всего, своей звездой волновых векторов. Отсюда сразу следует, что частота одинакова для всех нормальных колебаний, отличающихся лишь значениями $\mathbf{k}$ из одной и той же звезды. Другими словами, каждая из функций $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ обладает полной симметрией направлений данного кристаллического класса. При этом, как было указано в предыдущем параграфе, в силу симметрии по отношению к обращению времени звезда $\mathbf{k}$ должна быть дополнена всеми векторами $-\mathbf{k}$ (если

---

[1]) Представления пространственных групп впервые были применены к изучению физических свойств кристаллических решеток Хундом (*F. Hund*, 1936) и Баукартом, Вигнером и Смолуховским (*L. P. Bouckaert*, *R. Smoluchowski*. *E. P. Wigner*, 1936).