

СИММЕТРИЯ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1972

Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.
Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. Монография. Издательство «Наука»,
Главная редакция физико-математической литературы, М., 1972 г.

В книге подробно изложены разделы теории групп, которые находят применение в физике твердого тела, и методы расчета спектров электронов и фононов вблизи особых точек, основанные на использовании теории групп, а также рассмотрены деформационные эффекты в полупроводниках, т. е. эффекты, возникающие при деформациях, нарушающих симметрию кристалла.

Подробно изложен ряд новых вопросов, касающихся применения теории групп в физике твердого тела, а также ряд разделов теории групп, детально не рассмотренных ни в одной из аналогичных монографий, изданных в СССР или за рубежом. Сюда относятся, например, теория проективных представлений и использование проективных представлений для построения пространственных групп, правила отбора для пространственных групп с учетом инвариантности к инверсии времени, использование метода инвариантов для построения спектров электронов, в том числе в деформированных кристаллах. Из широкого круга деформационных эффектов наиболее подробно изложены резонансные и оптические эффекты, которые непосредственно связаны со структурой спектра носителей тока. Подробно рассмотрена зонная структура и ее изменение при деформации для полупроводников с решетками алмаза, цинковой обманки, каменной соли и вюрцита, в которых кристаллизуются наиболее употребительные полупроводники Ge, Si, соединения A_3B_5 и A_2B_6 .

Книга предназначена для физиков — экспериментаторов и теоретиков, специализирующихся в области физики твердого тела и физики полупроводников. Рисунков 72, таблиц 44, библиография 367 названий.

Бир Геннадий Левикович, Пикус Григорий Езекиелевич

СИММЕТРИЯ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М., 1972 г., 584 стр. с илл.

Редактор В. А. Григорова.

Техн. редактор С. Я. Шкляр.

Корректор Л. Н. Боровина

Сдано в набор 14/XI 1971 г. Подписано к печати 18/V 1972 г. Бумага 60×90¹/₁₆. Тип. № 1.
Физ. печ. л. 36,5. Усл. печ. л. 36,5. Уч.-изд. л. 38,46. Тираж 6600 экз. Т-07253.
Цена 2 р. 66 к. Заказ № 1316.

Издательство «Наука», Главная редакция физико-математической литературы,
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

Ордена Трудового Красного Знамени
Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой Главполиграфпрома
Комитета по печати при Совете Министров СССР, Измайловский проспект, 29.

Предисловие	5
ГЛАВА I. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ	9
§ 1. Элементы абстрактной теории групп	9
§ 2. Преобразования симметрии	17
§ 3. Точечные группы	27
§ 4. Группа вращений	35
§ 5. Решетки Браве	40
§ 6. Пространственные группы	58
ГЛАВА II. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП СИММЕТРИИ	63
§ 7. Теория представлений	63
§ 8. Неприводимые представления. Характеры	68
§ 9. Построение базисных функций неприводимых представлений. Произведение представлений	77
§ 10. Представления группы вращений	86
§ 11. Представления точечных групп	93
§ 12. Представления пространственных групп. Зона Бриллюэна. Группа волнового вектора	104
§ 13. Проективные представления	119
§ 14. Проективные представления точечных групп	131
ГЛАВА III. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ	162
§ 15. Неприводимые представления и классификация термов. Нормальные колебания. Теория возмущений	162
§ 16. Спинорные представления	181
§ 17. Электрон в периодическом поле	194
§ 18. Инверсия времени	204
§ 19. Правила отбора	218
§ 20. Определение линейно независимых компонент материальных тензоров	232
ГЛАВА IV. МЕТОД ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ	239
§ 21. Теория возмущений. <i>kp</i> -метод	239
§ 22. Движение электрона в кристалле во внешнем поле	258
§ 23. Представления пространственных групп в кубических и гексагональных кристаллах. Распределение нормальных колебаний по неприводимым представлениям	269
§ 24. Спектр электронов в кубических кристаллах с пространственной группой O_h^1, O_h^5, O_h^7	289
§ 25. Метод инвариантов	304
§ 26. Методы построения базисных матриц. Применение метода инвариантов для определения спектра электронов в кубических кристаллах	315
§ 27. Мелкие примесные центры и экситоны в полупроводниках	340

ГЛАВА V. СПЕКТР В ДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ . . .	374
§ 28. Изменение симметрии кристаллов при деформации . . .	374
§ 29. Изменение спектра при деформации	381
§ 30. Влияние деформации на вырожденные зоны в кубических кристаллах	393
§ 31. Спектр в кристаллах с решеткой типа вюрцита и его изменение при деформации	407
§ 32. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки и деформационный потенциал	426
ГЛАВА VI. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА СВОБОДНЫЕ НОСИТЕЛИ	449
§ 33. Циклотронный и комбинированные резонансы в деформированных германии и кремнии	449
§ 34. Влияние деформации на кинетические эффекты	463
§ 35. Поглощение и отражение света свободными носителями в деформированных кристаллах	488
§ 36. Поглощение и отражение света при междузонных переходах в деформированных кристаллах	504
ГЛАВА VII. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ И ЭКСИТОНЫ	513
§ 37. Спектр примесного центра в деформированном кристалле	513
§ 38. Влияние деформации на оптические свойства примесных центров	524
§ 39. Парамагнитный резонанс на мелких примесных центрах	534
§ 40. Влияние деформаций на оптические свойства экситонов в полупроводниках	545
ЛИТЕРАТУРА	574

За последние годы теоретико-групповые методы получили широкое распространение в физике твердого тела и использование этих методов стало необходимым не только для теоретиков, но и для экспериментаторов.

В то же время в большинстве книг по теории групп по традиции основное внимание уделяется вопросам, связанным с теорией атомов и молекул. Многие работы, содержащие важные результаты, касающиеся применения теории групп в физике твердого тела, не нашли отражения ни в одной из этих книг.

Целью авторов этой монографии было написать книгу, специально посвященную применению теории групп в физике твердого тела, и в ней, с одной стороны, подробно изложить те разделы теории групп, которые находят применение в теории твердого тела, а с другой, — довести изложение до рассмотрения конкретных физических эффектов. При этом основное внимание уделено деформационным эффектам, точнее — эффектам, возникающим при деформациях, нарушающих симметрию кристалла, так как теория этих эффектов может быть основана практически целиком на теории симметрии.

Первая часть книги, включающая главы I—III, посвящена изложению необходимых вопросов теории групп. В отличие от других монографий, здесь последовательно использован метод проективных представлений для построения представлений пространственных групп. В связи с этим подробно изложен классический метод Шура для построения проективных представлений и подробно описаны их свойства.

Используя этот метод, мы построили проективные представления всех точечных групп, с помощью которых можно легко получить матрицы представлений всех пространственных групп.

Далее в этой части подробно рассмотрен вопрос о роли инверсии времени и о правилах отбора для пространственных групп с учетом инверсии времени. Все эти вопросы ранее излагались только в оригинальных статьях.

Вторая часть книги — главы IV, V — посвящена описанию теоретико-групповых методов построения спектров электронов или фононов вблизи особых точек, в том числе спектра в деформированных кристаллах. В этой части наряду с изложением так называемого *kp*-метода, который является по сути модификацией обычного метода теории возмущений для вырожденного спектра, широко используется и метод инвариантов. Последний метод не только имеет во многих случаях методические преимущества при конкретных расчетах. В отличие от *kp*-метода, основанного на приближении самосогласованного поля, метод инвариантов фактически использует, помимо общих основ теории симметрии, лишь представление о существовании квазичастиц, которое не вызывает сомнений, во всяком случае при достаточно малом числе частиц, когда их взаимодействие не существенно. Поэтому сопоставление результатов обоих методов дает возможность установить, какие из выводов *kp*-метода действительно основаны на допущении о существовании самосогласованного поля, а какие фактически не связаны с этим допущением. Например, использование двухзонной модели в *kp*-методе основано на предположении о том, что самосогласованный потенциал для электронов у дна зоны проводимости и у вершины валентной зоны одинаков. Результаты, полученные методом инвариантов, показывают, что практически все выводы, полученные на основе *kp*-метода, сохраняются независимо от указанного предположения.

Последняя часть книги — главы VI, VII — посвящена рассмотрению ряда деформационных эффектов

в полупроводниках. Из весьма большого круга таких эффектов мы основное внимание уделили оптическим и резонансным явлениям, которые наиболее непосредственно связаны со структурой спектра носителей тока и ее изменением при деформации и позволяют наиболее надежно определить этот спектр. Исключение составляет § 34, где рассмотрено влияние деформации на электропроводность полупроводников. Этот эффект, изучению которого посвящено наибольшее число работ, лежит в основе многих более сложных эффектов, широко применяемых для исследования полупроводников, и используется в различных полупроводниковых приборах. Эффект пьезосопротивления и вызываемые им различные «вторичные» эффекты, например, концентрационные эффекты в собственных полупроводниках, широко используются для создания тензометров различных типов.

В отличие от первых двух частей книги, содержащих общий материал, последняя часть посвящена более частным вопросам. Тем не менее мы считали полезным включить эти разделы, так как они являются хорошими примерами использования общих методов для решения конкретных задач, непосредственно связанных с экспериментом, а кроме того, представляют и самостоятельный интерес, поскольку деформационные методы исследования полупроводников получили широкое распространение. Основное внимание в этом разделе книги уделено теоретическим вопросам. Экспериментальный материал, приведенный в виде таблиц и графиков, носит в основном иллюстративный характер и далеко не полон.

При описании методов построения спектров и рассмотрении конкретных эффектов мы, естественно, не могли рассмотреть все группы полупроводников. Поэтому мы считали последовательным во всех этих разделах ограничиться рассмотрением наиболее изученных и наиболее используемых в технике полупроводников: с кубическими решетками типа алмаза (Ge, Si) и типа цинковой обманки и с гексагональной решеткой типа вюрцита. В последних структурах

кристаллизуется большинство полупроводниковых соединений A_3B_5 и A_2B_6 . Кратко рассмотрены и кристаллы с кубической решеткой типа каменной соли. Такую структуру имеют полупроводники $PbSe$, $PbTe$, PbS и другие.

Литература, использованная при написании книги, а также отдельные работы, существенно дополняющие и расширяющие изложенный материал, приведены в библиографии. Эта библиография, естественно, не претендует на полноту. В библиографии указано, к какому из разделов книги относится цитированная литература. Поэтому в самом тексте ссылки на оригинальные работы, как правило, не приводятся.

Как мы уже сказали, сейчас владение методами теории групп становится необходимым не только для теоретиков, но и для физиков-экспериментаторов. Поэтому авторы старались изложить материал в наиболее систематизированной и доступной форме. В какой мере это нам удалось — судить читателю.

В заключение считаем своим приятным долгом поблагодарить Д. К. Фаддеева, Э. И. Рашба и Е. Л. Ивченко, прочитавших рукопись полностью или частично и сделавших ряд полезных замечаний.

Авторы

§ 1. ЭЛЕМЕНТЫ АБСТРАКТНОЙ ТЕОРИИ ГРУПП

Симметрия тела характеризуется преобразованиями, которые совмещают его с самим собой.

Множество элементов симметрии обладает рядом свойств, которые очевидным образом следуют из их определения. Так, среди множества элементов симметрии всегда существует тождественное (или единичное) преобразование. Отсутствие других элементов говорит об отсутствии какой-либо симметрии тела.

Если применить к телу последовательно одно за другим два преобразования симметрии, то в результате оно снова совмещается само с собой, т. е. последовательное применение двух преобразований симметрии есть также элемент симметрии тела.

Производя над телом одно из преобразований симметрии, мы совмещаем его с самим собой. Совершая обратное преобразование, мы снова совмещаем его с самим собой. Таким образом, наряду с каждым преобразованием симметрии существует и обратное преобразование, входящее в число элементов симметрии, при этом последовательное применение прямого и обратного преобразований эквивалентно тождественному преобразованию.

Совокупность элементов, удовлетворяющих перечисленным выше свойствам, образует группу.

Дадим *определение группы*. Группа \mathcal{G} есть множество элементов g (конечное или бесконечное), которое обладает следующими свойствами:

1. Для всех элементов $g \in \mathcal{G}$ *) определена операция умножения таким образом, что для любых g_1 и g_2 , принадлежащих \mathcal{G} , существует $g_3 \in \mathcal{G}$ такое, что $g_1 g_2 = g_3$. Таким образом, операция умножения есть способ сопоставления двум элементам группы \mathcal{G} , взятым в определенной последовательности, третьего элемента группы.

Так, для операций симметрии умножение означает последовательное применение преобразований симметрии, при этом первой выполняется операция, стоящая справа. При этом в общем

*) Символ $g \in \mathcal{G}$ означает: g принадлежит \mathcal{G} ; символ $g \notin \mathcal{G}$ означает: g не принадлежит \mathcal{G} .

случае $g_1g_2 \neq g_2g_1$. Группы, в которых для всех элементов имеет место равенство $g_1g_2 = g_2g_1$, называются коммутативными или абелевыми.

2. Для произведения имеет место сочетательный закон умножения, т. е. $(g_1g_2)g_3 = g_1(g_2g_3)$ *).

3. Среди элементов группы есть один и только один элемент, который называется тождественным или единичным элементом e и который обладает тем свойством, что $ge = eg = g$ для всех $g \in \mathcal{G}$.

4. Каждый элемент группы g имеет обратный элемент g^{-1} такой, что $gg^{-1} = e$. Тогда, используя пп. 2 и 3, легко показать, что и $g^{-1}g = e$.

Из определения обратных элементов следует, что

$$(g_1g_2 \dots g_n)^{-1} = g_n^{-1} \dots g_2^{-1}g_1^{-1}. \quad (1.1)$$

Действительно, имеем по определению $(g_1g_2 \dots g_n)(g_1g_2 \dots g_n)^{-1} = e$. Умножая это равенство слева последовательно на $g_1^{-1}, g_2^{-1}, \dots, g_n^{-1}$, получим формулу (1.1).

Перечисленные выше групповые постулаты как раз соответствуют тем свойствам множества элементов симметрии, которые были получены на основании наглядных представлений. Именно то обстоятельство, что совокупность операций симметрии образует группу, и определяет выдающуюся роль теории групп в физике.

Примером группы, которая является основой в физических приложениях теории групп, является группа квадратных матриц \mathbf{A} n -го порядка с отличным от нуля определителем $\text{Det } \mathbf{A} \neq 0$. Если в качестве операции группового умножения матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} принять обычное правило умножения квадратных матриц

$$(\mathbf{AB})_{ij} = \sum_s A_{is}B_{sj},$$

а в качестве единичного элемента выбрать единичную матрицу \mathbf{I} с элементами $I_{ij} = \delta_{ij}$, где δ_{ij} — символ Кронекера:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j, \end{cases}$$

то легко убедиться, что все групповые постулаты будут выполнены.

Условие $\text{Det } \mathbf{A} \neq 0$ является, как известно, необходимым и достаточным для того, чтобы матрица \mathbf{A} имела обратную.

Число элементов, составляющих группу, может быть конечным или бесконечным. В соответствии с этим группа называется конечной или бесконечной. Для конечных групп число элементов группы называется ее порядком h .

*) Это свойство является очевидным для преобразований симметрии.

Рассмотрим некоторые свойства конечных групп.

Возьмем какой-нибудь элемент g_i из группы \mathcal{G} и составим всевозможные произведения gg_i , где $g \in \mathcal{G}$. Все эти элементы, очевидно, принадлежат \mathcal{G} , число их равно порядку h группы \mathcal{G} . Легко видеть, что множество gg_i снова дает группу \mathcal{G} , но в другом порядке. Для этого достаточно показать, что среди элементов gg_i нет равных между собой. Действительно, из равенства $g_1g_i = g_2g_i$ следовало бы, что $g_1 = g_2$.

Аналогично, совокупность элементов $g_i^{-1}gg_i$ также дает всю группу \mathcal{G} , если g пробегает все элементы группы \mathcal{G} , а g_i — любой элемент группы.

Эти свойства группы оказываются весьма полезными, когда нужно суммировать по группе некоторую функцию на группе, т. е. функцию $\varphi(g)$, зависящую от элементов группы $g \in \mathcal{G}$, так как на основании предыдущих свойств

$$\sum_{g \in \mathcal{G}} \varphi(g) = \sum_{g \in \mathcal{G}} \varphi(g_i g) = \sum_{g \in \mathcal{G}} \varphi(g g_i) = \sum_{g \in \mathcal{G}} \varphi(g_i^{-1} g g_i) \quad (1.2)$$

при любом фиксированном $g_i \in \mathcal{G}$. Равенства (1.2) очевидны, так как суммы в левой и правой частях каждого равенства содержат одни и те же слагаемые, но взятые в разном порядке.

Возьмем некоторый элемент g группы \mathcal{G} и образуем последовательность элементов

$$e, g, g^2, g^3, \dots, g^k, \dots \quad (1.3)$$

В силу конечности числа элементов в группе один из членов этой последовательности должен появиться второй раз после определенного числа степеней. Пусть первый повторяющийся элемент есть $g^m = g^p$ (при этом $m > p$). Очевидно, что $p = 0$ и $g^m = e$, так как при $p > 0$ мы имели бы $g^{m-1} = g^{p-1}$, т. е. элемент g^{m-1} , равный g^{p-1} , еще раньше появился бы в последовательности (1.3) и g^m не был бы первым повторяющимся элементом, что противоречит допущению.

Таким образом, первым повторяющимся элементом последовательности (1.3) будет единичный элемент e .

Наименьшее число m , при котором $g^m = e$, называется *порядком элемента g* , а последовательность

$$e, g, g^2, \dots, g^{m-1} \quad (1.4)$$

— его *периодом*. Легко видеть, что $g^{m-1} = g^{-1}$, $g^{m-2} = g^{-2}$ и т. д. Если продолжить последовательность (1.3) и для $k > m$, то она будет периодически повторять период (1.4). Период любого элемента g (1.4) образует циклическую группу *).

*) Группа, состоящая из элементов $e, a, a^2, \dots, a^{n-1}$ ($a^n = e$), называется циклической. Как видно из определения, циклическая группа является коммутативной.

Совокупность элементов группы \mathcal{G} , сама по себе составляющая группу, называется *подгруппой*. Таким образом, период каждого элемента g из группы \mathcal{G} составляет циклическую подгруппу \mathcal{G} . Для определения подгрупп группы \mathcal{G} достаточно убедиться в том, что некоторая совокупность элементов группы содержит все произведения своих элементов. Действительно, сочетательный закон умножения имеет место для всех элементов группы, в том числе, конечно, и для элементов рассматриваемой совокупности. Далее, поскольку рассматриваемая совокупность вместе с элементом g содержит и все произведения из этой совокупности, то она содержит и все степени элемента g , в частности и $g^m = e$, где m — порядок элемента g . Таким образом, эта совокупность содержит единичный элемент. Она содержит и g^{-1} , так как $g^{-1} = g^{m-1}$.

Покажем, что порядок подгруппы \mathcal{F} есть делитель порядка группы (теорема Лагранжа).

Для доказательства этой теоремы рассмотрим некоторый элемент g_1 , принадлежащий группе \mathcal{G} , но не принадлежащий подгруппе \mathcal{F} группы \mathcal{G} , и образуем всевозможные произведения справа fg_1 , $f \in \mathcal{F}$ или слева g_1f соответственно. Эти совокупности $\mathcal{F}g_1$ (или $g_1\mathcal{F}$) называются правым (левым) классом смежности элемента g_1 по подгруппе \mathcal{F} . Элементы fg_1 принадлежат \mathcal{G} , но не принадлежат \mathcal{F} . Действительно, если бы fg_1 принадлежали \mathcal{F} , то и g_1 принадлежало бы \mathcal{F} , что противоречит предположению. Возьмем теперь g_2 , не принадлежащий ни \mathcal{F} , ни совокупности $\mathcal{F}g_1$, и составим всевозможные произведения $\mathcal{F}g_2$. Нетрудно видеть, что ни один из элементов fg_2 не содержится ни в \mathcal{F} , ни в $\mathcal{F}g_1$. Пусть, например, $f_1g_2 = f_2g_1$, $f_1, f_2 \in \mathcal{F}$; тогда $g_2 = f_1^{-1}f_2g_1$, т. е. g_2 принадлежит совокупности $\mathcal{F}g_1$, что противоречит предположению.

Таким образом, совокупности $\mathcal{F}g_1$ и $\mathcal{F}g_2$ не пересекаются. Продолжая этот процесс дальше, пока не исчерпаем всю группу, мы получим, что вся группа \mathcal{G} может быть разбита на комплексы, не содержащие общих элементов:

$$\mathcal{F}, \mathcal{F}g_1, \mathcal{F}g_2, \dots, \mathcal{F}g_{l-1}, \quad (1.5)$$

где l — некоторое целое число. Так как каждый класс смежности $\mathcal{F}g_i$ содержит число элементов, равное порядку s подгруппы \mathcal{F} , то из (1.5) следует, что

$$h = ls. \quad (1.6)$$

Число l , равное h/s , называется индексом подгруппы \mathcal{F} относительно \mathcal{G} .

Поскольку период каждого элемента есть подгруппа с числом элементов, равным его порядку, то отсюда следует, что порядок каждого элемента есть делитель порядка группы. Из (1.6)

следует, в частности, что

$$g^h = e \quad (1.7)$$

для любого $g \in \mathcal{G}$.

Если порядок группы есть простое число, то из сказанного выше следует, что у такой группы нет подгрупп кроме тривиальных: e и самой себя. В этом случае группа \mathcal{G} является циклической группой.

Введем понятие о сопряженных элементах.

Элементы g_1 и g_2 называются сопряженными, если существует такой элемент $x \in \mathcal{G}$, что $xg_1x^{-1} = g_2$. Как видно из определения, свойство сопряженности является а) взаимным и б) транзитивным, т. е.: а) если g_1 сопряжено с g_2 , то и g_2 сопряжено с g_1 ; б) если g_1 сопряжено с g_2 , а g_2 сопряжено с g_3 , то и g_1 сопряжено с g_3 .

Действительно: а) Из определения сопряженности g_1 с g_2 следует, что существует элемент $x \in \mathcal{G}$ такой, что $xg_1x^{-1} = g_2$, откуда получим $g_1 = x^{-1}g_2x = (x^{-1})g_2(x^{-1})^{-1}$, а так как $x^{-1} \in \mathcal{G}$, то свойство взаимности доказано. б) Пусть $xg_1x^{-1} = g_2$, $yg_2y^{-1} = g_3$, где $x, y \in \mathcal{G}$. Из второго равенства получим $g_2 = y^{-1}g_3y$. Подставляя g_2 в первое равенство, имеем $xg_1x^{-1} = y^{-1}g_3y$ или $yxg_1(yx)^{-1} = g_3$. Поскольку $x, y \in \mathcal{G}$, то и $yx \in \mathcal{G}$; таким образом, сопряженность g_1 и g_3 доказана.

Из этих свойств следует, что сопряженные элементы в группе образуют совокупности, называемые классами, при этом каждый элемент встречается в одном и только одном классе.

Составив h произведений gg_1g^{-1} , мы получим все элементы, входящие в тот же класс ρ_{g_1} , что и элемент g_1 . Число элементов класса ρ обозначим через h_ρ . Среди произведений gg_1g^{-1} не все будут различны. Покажем, что каждый элемент из класса ρ_{g_1} встретится в совокупности gg_1g^{-1} одинаковое количество раз, равное h/h_ρ .

Пусть элемент g' встречается в этой совокупности p раз. Это означает, что существует p элементов x_1, x_2, \dots, x_p , образующих множество X , таких, что $xg_1x^{-1} = g'$. Пусть элемент g'' встречается q раз в совокупности gg_1g^{-1} и $y_1, y_2, y_3, \dots, y_q$ — элементы, образующие множество Y , для которых выполняется равенство $yg_1y^{-1} = g''$. Так как g' и g'' относятся к одному и тому же классу ρ , то существует $g_0 \in \mathcal{G}$ такое, что $g' = g_0g''g_0^{-1}$, или $g'' = g_0^{-1}g'g_0$. Отсюда получим равенство $(g_0y)g_1(g_0y)^{-1} = g$, которое означает, что в множестве X во всяком случае есть q элементов вида g_0y_i ($i = 1, \dots, q$), т. е. $p \geq q$. С другой стороны, совершенно аналогично можно получить, что в множестве Y содержится p элементов $g_0^{-1}x_i$ ($i = 1, 2, \dots, p$), т. е. $q \geq p$. Отсюда следует, что $p = q$, т. е. каждый элемент из класса ρ встречается в совокупности gg_1g^{-1} одинаковое

количество раз, равное h/h_p . Поэтому

$$\sum_{g \in \mathcal{F}} \varphi(gg_1g^{-1}) = \frac{h}{h_p} \sum_{g \in \rho_{g_1}} \varphi(g), \quad (1.8)$$

где φ — любая однозначная функция на группе.

Все элементы одного класса имеют один и тот же порядок. Действительно, если порядок элемента g есть m , т. е. $g^m = e$, то и $(xgx^{-1})^m = xg^mx^{-1} = e$.

Тождественный элемент e образует класс сам по себе, так как он не сопряжен ни с каким другим элементом.

В абелевых группах каждый класс состоит из одного элемента, так как $xgx^{-1} = g$ при всех x .

Выше мы провели разбиение группы \mathcal{G} на подгруппы и классы. Существенно отметить, однако, что классы (кроме единичного элемента) не являются подгруппами, так как не содержат единичного элемента. С другой стороны, в общем случае и любая подгруппа группы \mathcal{G} содержит элементы разных классов, но не обязательно полные классы. Особый случай представляют инвариантные подгруппы группы \mathcal{G} .

Инвариантной подгруппой или нормальным делителем называется подгруппа \mathcal{R} группы \mathcal{G} , состоящая из полных классов группы \mathcal{G} , т. е. для нормального делителя \mathcal{R} , если $r \in \mathcal{R}$, то $grg^{-1} \in \mathcal{R}$ при всех $g \in \mathcal{G}$. Выше были определены правый и левый смежные классы по подгруппе \mathcal{F} . Если $\mathcal{F} = \mathcal{R}$ есть инвариантная подгруппа, то правый и левый смежные классы по этой подгруппе совпадают. Действительно, правый смежный класс элемента $g \in \mathcal{R}$ состоит из элементов $eg = g, r_2g, \dots, r_lg$ ($r_i \in \mathcal{R}, i = 1, 2, \dots, l; r_1 = e$). Но поскольку $r_i g = gg^{-1}r_i g$, а $g^{-1}r_i g = r_k \in \mathcal{R}$ по определению инвариантной подгруппы, то $r_i g = gr_k$. Поэтому когда r_i пробегает все элементы группы \mathcal{R} , то и r_k пробегает те же элементы, но в другом порядке, т. е. совокупности $r_i g$ и gr_k совпадают и, таким образом, правые и левые классы смежности совпадают.

Рассмотрим два класса смежности $\mathcal{R}g_1$ и $\mathcal{R}g_2$ и выберем по любому представителю $\tilde{g}_1 \in \mathcal{R}g_1$ и $\tilde{g}_2 \in \mathcal{R}g_2$ из этих классов. Легко убедиться, что произведение $\tilde{g}_1\tilde{g}_2$ при любых $\tilde{g}_1 \in \mathcal{R}g_1$ и $\tilde{g}_2 \in \mathcal{R}g_2$ принадлежит классу смежности $\mathcal{R}g_1g_2$.

Действительно, \tilde{g}_1 и \tilde{g}_2 могут быть записаны в виде $\tilde{g}_1 = r_i g_1$ и $\tilde{g}_2 = r_k g_2$, где r_i и r_k — какие-то элементы, принадлежащие \mathcal{R} . Тогда

$$\tilde{g}_1\tilde{g}_2 = r_i g_1 r_k g_2 = r_i g_1 r_k g_1^{-1} g_1 g_2 = r_i r'_k g_1 g_2 = r''_k g_1 g_2 \in \mathcal{R}g_1 g_2,$$

так как $r'_k = g_1 r_k g_1^{-1} \in \mathcal{R}$ по определению инвариантной подгруппы и $r_i r'_k = r''_k \in \mathcal{R}$. И наоборот, каждый представитель \tilde{g} класса смежности $\mathcal{R}g_1g_2$ может быть записан в виде произведения представителей $\tilde{g}_1 \in \mathcal{R}g_1$ и $\tilde{g}_2 \in \mathcal{R}g_2$, при этом

в качестве \tilde{g}_1 можно выбрать rg_1 и g_2 в качестве \tilde{g}_2 . Таким образом, всевозможные произведения $\tilde{g}_1\tilde{g}_2$, $\tilde{g}_1 \in \mathcal{R}g_1$, $\tilde{g}_2 \in \mathcal{R}g_2$ относятся к классу смежности $\mathcal{R}g_1g_2$ и полностью исчерпывают его.

Это свойство классов смежности по инвариантной подгруппе \mathcal{R} позволяет рассматривать каждый класс смежности $\mathcal{R}g$ как элемент новой группы, называемой фактор-группой по подгруппе \mathcal{R} , с законом умножения элементов $\mathcal{R}g_1 \cdot \mathcal{R}g_2 = \mathcal{R}g_1g_2$. Ассоциативность определенного таким образом группового умножения классов смежности следует из ассоциативности группового умножения для элементов группы \mathcal{G} .

Далее, каждый элемент фактор-группы $\mathcal{R}g$ имеет обратный элемент — смежный класс $\mathcal{R}g^{-1}$. Так как произведение $r_1gr_2g^{-1} = r_1(gr_2g^{-1}) \in \mathcal{R}$, то произведение $\mathcal{R}g$ на $\mathcal{R}g^{-1}$ дает инвариантную подгруппу \mathcal{R} , которая в фактор-группе играет роль единичного элемента. Порядок фактор-группы равен числу смежных классов по \mathcal{R} , т. е. индексу нормального делителя \mathcal{R} .

Введем понятие изоморфизма и гомоморфизма групп.

Две группы одинакового порядка \mathcal{G} и $\tilde{\mathcal{G}}$ называются *изоморфными*, если между их элементами $g \in \mathcal{G}$ и $\tilde{g} \in \tilde{\mathcal{G}}$ можно установить такое взаимно однозначное соответствие $g_i \leftrightarrow \tilde{g}_i$, что если $g_1 \leftrightarrow \tilde{g}_1$ и $g_2 \leftrightarrow \tilde{g}_2$, то и $g_1g_2 \leftrightarrow \tilde{g}_1\tilde{g}_2$. Отсюда легко показать, что единичному элементу e из \mathcal{G} соответствует единичный элемент \tilde{e} из $\tilde{\mathcal{G}}$ и что обратному элементу g^{-1} соответствует \tilde{g}^{-1} .

Изоморфные группы, очевидно, полностью совпадают по структуре и с точки зрения теории групп вообще не отличаются одна от другой, хотя в действительности такие группы могут отличаться по физическому или геометрическому смыслу их элементов.

Более общим случаем соответствия между двумя группами является гомоморфизм, при котором, в отличие от изоморфизма, не требуется взаимно однозначного соответствия. Группа \mathcal{G} *гомоморфна* группе \mathcal{F} , если каждому элементу из группы \mathcal{G} соответствует один элемент из группы \mathcal{F} , а каждому элементу из группы \mathcal{F} может соответствовать несколько (по крайней мере один) элементов из группы \mathcal{G} . При этом соответствие таково, что если $g_1 \rightarrow f_1$, $g_2 \rightarrow f_2$, $g_1, g_2 \in \mathcal{G}$, $f_1, f_2 \in \mathcal{F}$, то и $g_1g_2 \rightarrow f_1f_2$.

Гомоморфизм поэтому не является взаимным свойством.

Число элементов группы \mathcal{G} , очевидно, больше числа элементов группы \mathcal{F} . В случае равенства числа элементов гомоморфизм превращается в изоморфизм.

Рассмотрим структуру группы \mathcal{G} . Возьмем множество элементов $e_1, e_2, \dots, e_n \in \mathcal{G}$, которые соответствуют единичному элементу e группы \mathcal{F} . Это множество \mathcal{E} называется ядром гомоморфизма. Покажем, что ядро гомоморфизма является инвариантной подгруппой группы \mathcal{G} .

Прежде всего, произведение $e_1 e_2$, также содержится в \mathcal{E} , так что \mathcal{E} является подгруппой \mathcal{G} . Действительно, произведению $e_1 e_2$ из \mathcal{G} в группе \mathcal{F} соответствует $e \cdot e = e$ — единичный элемент, а все элементы из \mathcal{G} , которым соответствует e в \mathcal{F} , содержатся в \mathcal{E} . Чтобы показать, что \mathcal{E} является инвариантной подгруппой \mathcal{G} , рассмотрим элемент $g e_1 g^{-1}$, где $e_1 \in \mathcal{E}$, а g — произвольный элемент группы \mathcal{G} , которому в группе \mathcal{F} соответствует элемент f . Элементу $g e_1 g^{-1}$ в группе \mathcal{F} соответствует элемент $f_1 e f_1^{-1} = e$. Следовательно, элемент $g e_1 g^{-1}$ принадлежит \mathcal{E} , т. е. \mathcal{E} есть нормальный делитель \mathcal{G} .

Найдем теперь множество элементов из \mathcal{G} , которые соответствуют какому-либо элементу f из \mathcal{F} (по определению гомоморфизма существует по крайней мере один такой элемент). Пусть g — какой-нибудь элемент из \mathcal{G} , соответствующий элементу f из группы \mathcal{F} . Видно, что и весь класс смежности по \mathcal{E} , т. е. класс $g\mathcal{E}$, также соответствует f , так как каждому элементу $g e_1$ соответствует в \mathcal{F} элемент $f e = f$. Покажем теперь, что любой элемент из группы \mathcal{G} , который соответствует $f \in \mathcal{F}$, принадлежит классу смежности $g\mathcal{E}$. Действительно, пусть g_1 есть отличный от g элемент группы, который соответствует элементу f из группы \mathcal{F} . Рассмотрим элемент $g_1 g^{-1}$. В группе \mathcal{F} ему соответствует единичный элемент $f f^{-1} = e$. Таким образом $g_1 g^{-1} \in \mathcal{E}$, т. е. $g_1 \in \mathcal{E} g$. Поэтому число элементов в \mathcal{G} , которые соответствуют элементу $f \in \mathcal{F}$, равно n — порядку подгруппы \mathcal{E} , и все они образуют сопряженный по \mathcal{E} смежный класс $g\mathcal{E}$ группы \mathcal{G} . Такие сопряженные классы целиком исчерпывают группу \mathcal{G} .

В отличие от изоморфизма, где имеется взаимно однозначное соответствие между элементами двух групп \mathcal{F} и \mathcal{G} , при гомоморфизме имеется однозначное соответствие между элементами групп \mathcal{G} и \mathcal{F} и n -значное соответствие между элементами групп \mathcal{F} и \mathcal{G} : каждому элементу $f \in \mathcal{F}$ соответствует n элементов из \mathcal{G} , образующих смежный по \mathcal{E} класс. При этом соответствие между элементами группы \mathcal{F} и сопряженными классами является уже взаимно однозначным. Так как сопряженные по \mathcal{E} классы являются элементами фактор-группы, то отсюда следует, что группа \mathcal{F} изоморфна фактор-группе группы \mathcal{G} по подгруппе \mathcal{E} .

Если в группе \mathcal{G} имеется подгруппа \mathcal{F} такая, что каждый элемент $f \in \mathcal{F}$ коммутирует с любым элементом $g \in \mathcal{G}$, то говорят, что \mathcal{F} является центром группы \mathcal{G} . Подгруппа \mathcal{F} является при этом и абелевым нормальным делителем группы \mathcal{G} .

Рассмотрим две группы \mathcal{F} и \mathcal{H} с элементами $f \in \mathcal{F}$ и $h \in \mathcal{H}$. Пары элементов (f, h) образуют новую группу \mathcal{G} относительно закона умножения $(f_1, h_1)(f_2, h_2) = (f_1 f_2, h_1 h_2)$. Эта группа \mathcal{G} называется *прямым произведением* групп \mathcal{F} и \mathcal{H} :

$$\mathcal{G} = \mathcal{F} \times \mathcal{H},$$

Число ее элементов равно произведению числа элементов группы \mathcal{F} на число элементов группы \mathcal{H} . Поскольку

$$(f, h)(f_1, h_1)(f, h)^{-1} = (ff_1f^{-1}, hh_1h^{-1}),$$

то число классов группы \mathcal{G} равно произведению числа классов группы \mathcal{F} и группы \mathcal{H} .

Если группы \mathcal{F} и \mathcal{H} имеют общим только один единичный элемент e и все элементы группы \mathcal{F} коммутируют со всеми элементами группы \mathcal{H} , то группу $\mathcal{G} = \mathcal{F} \times \mathcal{H}$ можно рассматривать как состоящую из элементов $g = fh$ с законом умножения

$$g_1g_2 = f_1h_1f_2h_2 = (f_1f_2)(h_1h_2).$$

В дальнейшем мы будем иметь дело только с таким случаем прямого произведения групп.

Для задания группы нужно перечислить все ее элементы и указать закон их умножения. Для конечных групп это можно делать в виде таблицы умножения. Однако в некоторых случаях удобнее определять группу путем указания образующих элементов и определяющих соотношений между ними.

Действительно, каждый элемент конечной группы может быть представлен в виде степени или произведения степеней некоторого конечного числа ее элементов a, b, c, \dots , называемых *образующими элементами* группы. Эти образующие элементы связаны соотношениями вида

$$a^p b^q c^r \dots = e, \tag{1.9}$$

где p, q, r — некоторые целые положительные числа или нуль, e — единичный элемент группы. Эти соотношения называются *определяющими соотношениями*. Для групп симметрии они определяются взаимным расположением элементов симметрии.

Задание образующих элементов и определяющих соотношений полностью определяет группу. Так, например, циклическая группа порядка n определяется одним образующим элементом a и одним соотношением $a^n = e$.

Для одной и той же группы образующие элементы можно, вообще говоря, выбрать различными способами. Соответственно будут отличаться и определяющие соотношения.

Очевидно, что если две группы можно сопоставить так, чтобы они имели одинаковое количество образующих элементов и одинаковые определяющие соотношения, то эти группы изоморфны.

§ 2. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ

Рассмотрим теперь более подробно преобразования симметрии. При преобразованиях, совмещающих тело с самим собой, не меняется расстояние между двумя любыми точками тела, поэтому такие преобразования могут быть составлены из элементарных преобразований: 1) поворота вокруг некоторой

оси, 2) отражения в плоскости и 3) трансляции t_a (параллельного переноса) на некоторый вектор a .

Поворот $c_l(\alpha)$ определяется заданием направления оси вращения l и угла поворота α . Отражение σ относительно некоторой плоскости определяется заданием плоскости отражения. При преобразованиях трансляции на вектор a каждая точка смещается на вектор a .

Эти три элементарных преобразования имеют различные многообразия неподвижных точек. Так, при вращении вокруг оси неподвижными остаются все точки на оси, при отражении в плоскости — точки на плоскости отражения, а преобразование трансляции вообще не имеет неподвижных точек.

Отметим, что хотя отражения в плоскости и повороты вокруг оси сами по себе имеют неподвижные точки, их произведения в общем случае могут не иметь неподвижных точек. Например,

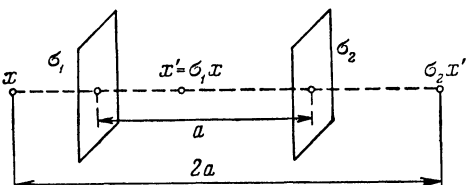


Рис. 1. Последовательное отражение в параллельных плоскостях.

легко видеть, что два отражения в двух параллельных плоскостях σ_1 и σ_2 , расстояние между которыми равно a , эквивалентны трансляции на вектор $2a$, т. е. $\sigma_2\sigma_1 = t_{2a}$ (рис. 1).

Группа симметрии тел конечных размеров (например, атомов, молекул) не может содержать среди своих элементов трансляцию, так как для тел конечных размеров существует неподвижная точка, которой является центр тяжести тела.

Группы симметрии, у которых при всех преобразованиях группы сохраняется неподвижная точка, называются *точечными группами*.

В точечной группе все оси вращения и плоскости отражения пересекаются в неподвижной точке. Таким образом, группой симметрии тела конечных размеров может быть только точечная группа.

Группа симметрии таких неограниченных тел, как кристаллическая решетка, может содержать и трансляции, так как очевидно, что решетка может быть совмещена сама с собой при параллельных переносах, так же как и при вращениях и отражениях.

Прежде чем переходить к рассмотрению различных групп симметрии, рассмотрим основные свойства поворотов, отражений и трансляций.

Последовательное произведение m поворотов вокруг одной оси l на угол α есть поворот на угол $m\alpha$:

$$c_l^m(\alpha) = c_l(m\alpha).$$

Если α составляет рациональную часть от 2π , например, если $\alpha = 2\pi/n$, где n — целое число, то n поворотов эквивалентно тождественному преобразованию $c_l^n(\alpha) = c_l(n\alpha) = c_l(2\pi)$. Поэтому совокупность поворотов на такие углы содержит конечное число n элементов и образует циклическую группу, называемую C_n .

Если же α несоизмеримо с 2π , то среди поворотов $c^p(\alpha)$ нет равных между собой и они плотно заполняют все множество поворотов вокруг заданной оси от 0 до 2π . Поэтому иррациональные от 2π углы поворота означают наличие аксиальной (или осевой) симметрии. Такие группы содержат бесконечное количество элементов и допускают повороты на сколь угодно малые углы.

В кристаллической решетке, ввиду дискретности ее структуры, повороты на бесконечно малые углы невозможны, поэтому в число элементов симметрии кристаллической решетки входят только элементы конечных точечных групп.

Произведение любого числа поворотов вокруг различных осей, пересекающихся в одной точке, есть также поворот вокруг некоторой оси, проходящей через ту же точку.

Повороты вокруг различных осей в общем случае некоммутативны. Они коммутативны лишь в частном случае поворотов на π вокруг двух взаимно перпендикулярных осей, так как их произведение есть также поворот на π вокруг третьей оси, перпендикулярной им.

Пусть $c_l(\alpha)$ есть поворот вокруг оси l на угол α , а f — любое вращение. Покажем, что операция $f c_l(\alpha) f^{-1}$ есть вращение на угол α вокруг новой оси fl , в которую переходит ось l при преобразовании f :

$$f c_l(\alpha) f^{-1} = c_{fl}(\alpha). \quad (2.1)$$

Действительно, ось fl остается неподвижной при преобразовании $f c_l(\alpha) f^{-1}$, так как $f c_l(\alpha) f^{-1}(fl) = f c_l(\alpha) l = fl$. Следовательно, $f c_l(\alpha) f^{-1}$ есть вращение вокруг оси fl . Покажем теперь, что $f c_l(\alpha) f^{-1}$ есть вращение на угол α . Пусть x — произвольный вектор, проходящий через ось l и перпендикулярный ей: $x \perp l$. Тогда $\alpha = \widehat{(x, c_l(\alpha) x)}$. Так как вращение f не меняет углов между векторами, то $fx \perp fl$ и угол поворота $c_{fl}(\alpha)$, т. е. угол между векторами fx и $c_{fl}(\alpha) x = f c_l(\alpha) f^{-1} fx = f c_l(\alpha) x$, равен $\widehat{(fx, f c_l(\alpha) x)} = \alpha$.

Покажем теперь, что произведение двух поворотов на π вокруг осей l и l' , угол между которыми равен φ , есть поворот вокруг третьей оси l'' , перпендикулярной осям l и l' , на угол 2φ ,

т. е.

$$c_{l'}(\pi) c_l(\pi) = f^2, \quad (2.2)$$

где $f = c_{l''}(\varphi)$, $l' = c_{l''}(\varphi) l = fl$.

Действительно, согласно (2.1) $c_{l'}(\pi) c_l(\pi) = fc_l(\pi) f^{-1}c_l(\pi)$, а $c_l(\pi) f^{-1}c_l(\pi) = f$, поскольку вращение оси l'' на π вокруг перпендикулярной оси меняет ее направление на обратное.

Рассмотрим теперь основные свойства отражений. Двукратное применение отражения в одной плоскости равно тождественному преобразованию:

$$\sigma^2 = e. \quad (2.3)$$

Последовательное применение поворотов и отражений приводит к появлению новых элементов симметрии: зеркально-поворотных преобразований s_n .

Зеркальным поворотом s_n называется преобразование, состоящее из поворота c_n и отражения σ_h *) в плоскости, перпендикулярной оси вращения:

$$s_n = \sigma_h c_n = c_n \sigma_h, \quad (2.4)$$

так как легко убедиться, что повороты и отражения в плоскости, перпендикулярной оси поворота, коммутируют.

Из (2.4) следует, что

$$s_n^2 = c_n^2, \quad \sigma_h s_n = c_n. \quad (2.5)$$

При зеркальном повороте имеется только одна неподвижная точка: это точка пересечения оси вращения и плоскости отражения.

Особым случаем зеркально-поворотного преобразования является зеркальный поворот второго порядка; это преобразование называется инверсией i .

$$s_2 = c_2 \sigma_h = i, \quad i^2 = e, \quad i \sigma_h = c_2, \quad i c_2 = \sigma_h. \quad (2.6)$$

Преобразование инверсии заключается в отражении каждой точки пространства относительно некоторой точки, являющейся точкой пересечения оси симметрии и плоскости отражения и называемой центром инверсии.

При инверсии каждый вектор a меняет свое направление на противоположное, $ia = -a$. Поэтому правовинтовая система координат при инверсии переходит в левовинтовую систему координат.

Из геометрического рассмотрения видно, что инверсия коммутирует со всеми поворотами и отражениями. Элементы точеч-

*) Плоскость отражения, перпендикулярная оси вращения, обозначается обычно σ_h ; если же плоскость отражения содержит ось вращения, она называется σ_v .

ных групп, не содержащие отражений, т. е. вращения, называются элементами первого рода. Остальные элементы, содержащие отражения, называются элементами второго рода. Каждый элемент второго рода h может быть представлен в виде произведения некоторого вращения f на инверсию i :

$$h = if = fi.$$

Например,

$$s_l(\beta) = \sigma_h c_l(\beta) = i c_l(\pi) c_l(\beta) = i c_l(\pi + \beta). \quad (2.7)$$

Поскольку произведение двух вращений есть также вращение, то и произведение любого числа элементов первого рода есть также элемент первого рода. Следовательно, вращения сами по себе могут образовывать группу.

Произведение двух элементов второго рода есть элемент первого рода, поэтому произведение четного числа элементов второго рода есть вращение, а произведение нечетного числа элементов второго рода есть также элемент второго рода.

Точечные группы, состоящие только из элементов первого рода, называются группами первого рода, а группы, содержащие элементы и первого, и второго рода, — группами второго рода.

Для сопряженных элементов второго рода справедливы соотношения, аналогичные (2.1).

Если $c_l(\alpha)$ — вращение на угол α вокруг оси l , а $h = if$ — любой элемент второго рода (f — некоторое вращение), то

$$h c_l(\alpha) h^{-1} = c_{-hl}(\alpha) = c_{hl}(-\alpha). \quad (2.8)$$

Действительно,

$$h c_l(\alpha) h^{-1} = if c_l(\alpha) if^{-1} = c_{fl}(\alpha) = c_{-hl}(\alpha) = c_{hl}(-\alpha).$$

Аналогичным образом можно доказать и следующие равенства:

$$f s_l(\alpha) f^{-1} = s_{fl}(\alpha), \quad (2.9)$$

$$h s_l(\alpha) h^{-1} = s_{-hl}(\alpha). \quad (2.10)$$

В частности, если учесть, что при $\alpha = 0$ $s_l(\alpha)$ есть отражение σ в плоскости, перпендикулярной оси l , то из (2.9) следует, что

$$f \sigma f^{-1} = \sigma', \quad (2.11)$$

где σ' — отражение в плоскости, в которую переходит плоскость σ при вращении f .

Из (2.11) следует, что произведение двух отражений в пересекающихся плоскостях σ и σ' , угол между которыми равен φ , есть поворот на угол 2φ вокруг линии пересечения этих плоскостей. Действительно,

$$\sigma' \sigma = f \sigma f^{-1} \sigma = f^2, \quad (2.12)$$

так как согласно (2.8)

$$\sigma_v c_l(\alpha) \sigma_v = c_{-l}(\alpha) = c_l^{-1}(\alpha). \quad (2.13)$$

Оси вращения (или зеркального поворота) и плоскости отражения, которые переводятся друг в друга при помощи одного из элементов группы, называются эквивалентными. При этом надо учесть, что зеркальный поворот и отражения в плоскости, согласно (2.8), (2.10) и (2.13), дополнительно меняют направление оси вращения на противоположное.

Из равенств (2.1), (2.8) и (2.9) следует, что в один класс сопряженных элементов входят повороты на одинаковые углы вокруг эквивалентных осей или отражения в эквивалентных плоскостях.

Ось симметрии называется двусторонней, если повороты вокруг этой оси на равные углы в противоположные стороны сопряжены между собой. Как следует из (2.1), (2.8), (2.9) и (2.13), для этого нужно, чтобы в точечной группе существовало такое вращение, которое меняло бы направление оси вращения на противоположное, или зеркально-поворотное преобразование, в частности, плоскость отражения, не меняющая направления оси вращения. Такими элементами могут быть вращения на угол π вокруг перпендикулярной оси или отражения σ_v в плоскости, содержащей данную ось.

Рассмотрим теперь свойства трансляций.

Из определения трансляции следует, что последовательная трансляция на векторы \mathbf{a} и \mathbf{b} есть трансляция на вектор $\mathbf{a} + \mathbf{b}$:

$$t_a t_b = t_{a+b}. \quad (2.14)$$

Из (2.14) следует также, что операции трансляции перестановочны:

$$t_a t_b = t_b t_a = t_{a+b}. \quad (2.15)$$

Преобразование, обратное трансляции t_a , есть трансляция $t_{-\mathbf{a}}$:

$$(t_a)^{-1} = t_{-\mathbf{a}}, \quad (2.16)$$

так как $t_a t_{-\mathbf{a}} = e$, где e — тождественное преобразование.

Из перечисленных свойств операций параллельного переноса следует, что трансляции сами по себе образуют абелеву группу.

Группа трансляций изоморфна векторной группе \mathcal{F} , элементами которой являются сами векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} , а групповой операцией является сложение векторов. Роль единицы в группе \mathcal{F} играет нулевой вектор; элементом, обратным \mathbf{a} , является вектор $-\mathbf{a}$. Если все векторы из \mathcal{F} лежат на одной прямой, то группа называется одномерной, если все векторы лежат в одной плоскости — двумерной, и если в группе \mathcal{F} имеются три некопланарных вектора, то она называется трехмерной.

Группа симметрии неограниченного тела — пространственная группа — может содержать повороты, отражения и трансляции,

поэтому элемент симметрии для неограниченного тела может быть записан в виде

$$g = t_a r \quad (2.17)$$

или же

$$g = (r | a), \quad (2.17a)$$

где t_a — трансляция на вектор a , а r — «поворотный» элемент: вращение, отражение или зеркально-поворотное преобразование.

В пространственной группе возникают новые элементы симметрии: винтовые оси и плоскости скольжения. Винтовые оси возникают в результате сложения вращений и трансляций.

Пусть r есть вращение $c_l(\alpha)$.

Разложим вектор a на составляющие a_{\parallel} и a_{\perp} :

$$a = a_{\parallel} + a_{\perp},$$

где $a_{\parallel} \parallel l$, а $a_{\perp} \perp l$. Тогда

$$g = t_{a_{\parallel}} t_{a_{\perp}} c_l(\alpha).$$

Преобразование $t_{a_{\perp}} c_l(\alpha)$ есть плоское преобразование, так как оно оставляет в той же самой плоскости все точки, лежащие в плоскости, перпендикулярной оси l .

Согласно теореме Шаля всякое плоское преобразование есть либо чистый поворот вокруг некоторой оси l' , перпендикулярной плоскости, при $\alpha \neq 0$ (точка пересечения этой оси с плоскостью, являющаяся неподвижной точкой преобразования $t_{a_{\perp}} c_l(\alpha)$, называется центром Шаля), либо чистая трансляция при $\alpha = 0$.

Определим положение центра Шаля и угол поворота вокруг оси l' . На рис. 2 точки l и l' показывают точки пересечения осей l и l' с перпендикулярной им плоскостью. При преобразовании $t_{a_{\perp}} c_l(\alpha)$ точка l' остается на месте, а l сдвигается на вектор a_{\perp} . Как видно из рис. 2, угол поворота вокруг оси l' $\alpha' = \alpha$. Для определения положения центра Шаля нужно из точки l провести вектор a_{\perp} и затем из конца вектора a_{\perp} и точки l провести прямые под углом $\beta = (\pi - \alpha)/2$ к вектору a_{\perp} . Точка их пересечения и даст центр Шаля l' .

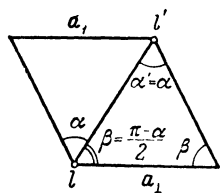


Рис. 2. Плоское преобразование $t_{a_{\perp}} c_l(\alpha)$.

Таким образом, $t_{a_{\perp}} c_l(\alpha) = c_{l'}(\alpha)$, и преобразование $g = t_a c_l(\alpha)$ можно записать в виде

$$g = t_{a_{\parallel}} c_{l'}(\alpha). \quad (2.18)$$

Преобразование, заключающееся в повороте вокруг оси l' на угол α и последующей трансляции на вектор a_{\parallel} , параллельный оси поворота (рис. 3, а), называется винтовым, а ось l' называется винтовой осью. Винтовые преобразования, очевидно, не имеют неподвижных точек.

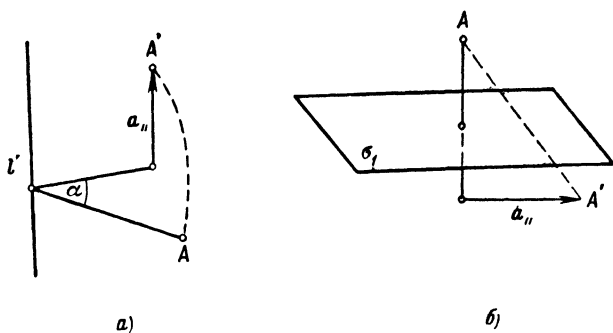


Рис. 3. а) Винтовое вращение. б) Скользящее отражение.

Плоскости скольжения есть результат действия отражений и трансляций вдоль плоскости. Пусть r есть отражение в некоторой плоскости σ . Разложим опять a на две составляющие — параллельную a_{\parallel} и перпендикулярную a_{\perp} по отношению к плоскости σ :

$$a = a_{\parallel} + a_{\perp}, \quad t_a = t_{a_{\parallel}} t_{a_{\perp}}.$$

Как было показано выше (см. рис. 1), $t_{a_{\perp}} \sigma = \sigma_1$, где σ_1 — отражение в плоскости, параллельной σ и отстоящей от нее на расстоянии $a_{\perp}/2$. Поэтому

$$g = t_{a_{\parallel}} \sigma_1. \quad (2.19)$$

В этом случае преобразование g заключается в отражении в плоскости σ_1 и последующей трансляции на вектор a_{\parallel} , параллельный плоскости отражения (рис. 3, б). Это преобразование называется скользящим отражением, а плоскость σ_1 — плоскостью скольжения.

Таким образом, в общем случае каждый элемент пространственной группы является либо винтовым движением, либо скользящим отражением, частным случаем которых являются либо чистые трансляции, либо чистые вращения или отражения в плоскости.

В один класс сопряженных с t_a элементов входят трансляции на векторы, которые могут быть получены из вектора a путем применения всех «поворотных» операций r точечной группы, так

как элемент $rt_a r^{-1}$ есть трансляция на вектор ra :

$$rt_a r^{-1} = t_{ra}. \quad (2.20)$$

Действительно, последовательное применение преобразований $rt_a r^{-1}$ к точке с радиусом-вектором x дает

$$rt_a r^{-1} x = r(r^{-1} x + a) = x + ra,$$

т. е. результирующее преобразование есть перенос на вектор ra .

Из (2.20) следует, что

$$rt_a = t_{ra} r. \quad (2.21)$$

Из (2.21) получается правило умножения элементов $g_1 = t_{a_1} r_1$ и $g_2 = t_{a_2} r_2$:

$$t_{a_1} r_1 t_{a_2} r_2 = t_{a_1} (r_1 t_{a_2}) r_2 = t_{a_1} t_{r_1 a_2} r_1 r_2,$$

т. е.

$$t_{a_1} r_1 t_{a_2} r_2 = t_{a_1 + r_1 a_2} r_1 r_2, \quad (2.22)$$

или в обозначениях (2.17а)

$$(r_1 | a_1) (r_2 | a_2) = (r_1 r_2 | a_1 + r_1 a_2). \quad (2.22a)$$

До сих пор мы рассматривали элементы симметрии геометрически, указывая перемещения точек при преобразованиях. Но эти преобразования можно описывать и методами аналитической геометрии. Положение каждой точки можно описывать заданием ее декартовых координат $x_i = x, y, z$ в некоторой выбранной координатной системе. При преобразовании симметрии точка перемещается в новое положение, координаты которого в той же координатной системе будут $x'_i = x', y', z'$. Задание закона преобразования координат точки при ее перемещении, т. е. зависимости x'_i от x, y, z , дает аналитическое выражение для элемента симметрии.

Для преобразований точечной группы начало координат удобно выбирать в неподвижной точке. Тогда всякое преобразование точечной группы r описывается линейным однородным преобразованием координат:

$$x' = r x = \mathcal{R}(r) x \quad \text{или} \quad x'_i = \sum_s \mathcal{R}_{is}(r) x_s, \quad (2.23)$$

где $\mathcal{R}(r)$ — вещественная матрица 3×3 .

Поскольку повороты и отражения не изменяют длин векторов и углы между ними, то матрица \mathcal{R} удовлетворяет условиям ортогональности:

$$\sum_s \mathcal{R}_{si}(r) \mathcal{R}_{sk}(r) = \delta_{ik}. \quad (2.24)$$

Уравнения (2.24) означают, что сумма квадратов элементов каждого столбца матрицы \mathcal{R} равна 1, а произведение каждого

столбца на другой равно нулю. Такие матрицы называются ортогональными.

Из (2.24) следует, что

$$\sum_s \tilde{\mathcal{R}}_{is}(r) \mathcal{R}_{sk}(r) = (\tilde{\mathcal{R}}\mathcal{R})_{ik} = \delta_{ik}, \quad (2.25)$$

где $\tilde{\mathcal{R}}$ — матрица, транспонированная по отношению к \mathcal{R} , т. е. матрица, у которой строки переставлены со столбцами,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij} = \mathcal{R}_{ji}. \quad (2.26)$$

Уравнение (2.25) означает, что

$$\tilde{\mathcal{R}}(r) = \mathcal{R}^{-1}(r), \quad (2.27)$$

т. е. для ортогональных матриц транспонированная матрица равна обратной. Из (2.27) следует, что и $(\mathcal{R}\tilde{\mathcal{R}})_{ik} = \delta_{ik}$, откуда для ортогональных матриц получаются соотношения ортогональности не только по столбцам (2.24), но и по строкам:

$$\sum_s \mathcal{R}_{is}(r) \mathcal{R}_{ks}(r) = \delta_{ik}. \quad (2.28)$$

Выше рассматривалось преобразование координат точки в неподвижной системе координат при преобразованиях симметрии. Рассмотрим теперь, как изменяются координаты неподвижной точки A при применении операции симметрии к самой системе координат. Пусть в системе координат xyz координаты точки A есть (x, y, z) . Перейдем к новой системе координат $x'y'z'$, получаемой из системы координат xyz преобразованием r . Очевидно, что координаты точки $A(x', y', z')$ в новой системе координат $x'y'z'$ будут равны координатам вектора $r^{-1}A$ в старой системе координат, так как при одинаковом вращении и системы координат, и самого вектора A его координаты в этой системе не меняются. Следовательно, согласно (2.23) и (2.27) координаты точки A в новой системе координат $x'y'z'$ будут равны

$$x'_i = (r^{-1}x)_i = \sum_s \mathcal{R}(r^{-1})_{is} x_s = \sum_s \mathcal{R}(r)_{si} x_s. \quad (2.29)$$

Видно, что матрица преобразования координат неподвижной точки при вращении координатной системы является транспонированной по отношению к матрице $\mathcal{R}(r)$ (2.23), описывающей изменение координат при движении точки в неподвижной системе координат.

Так как определитель транспонированной матрицы $\text{Det } \tilde{\mathcal{R}} = \text{Det } \mathcal{R}$, то из (2.25) следует, что $(\text{Det } \mathcal{R})^2 = 1$, т. е. $\text{Det } \mathcal{R} = \pm 1$.

Легко показать, что для вращений определитель матрицы \mathcal{R} равен 1. Единичному преобразованию соответствует единичная матрица I с элементами $I_{ik} = \delta_{ik}$. Преобразованию инверсии, изменяющему знаки у координат точки на противоположные, соот-

ветствует матрица $-I$. Определитель этой матрицы, очевидно, равен -1 . Поскольку произведению преобразований, как будет показано ниже, соответствует произведение матриц, а определитель произведения матриц равен произведению определителей, то определитель матрицы любого элемента второго рода равен -1 .

Рассматривая точечную группу преобразований методом аналитической геометрии, мы получаем группу ортогональных матриц \mathcal{R} .

Если определить групповую операцию как обычное умножение матриц, то видно, что группа матриц $\mathcal{R}(r)$ изоморфна точечной группе преобразований \mathcal{S} , так как матрица преобразования $\mathcal{R}(r_2 r_1)$ равна произведению матриц $\mathcal{R}(r_2) \mathcal{R}(r_1)$. Действительно, при $\mathbf{x}'' = r_2 r_1 \mathbf{x} = r_2 \mathbf{x}'$ имеем

$$x''_k = \sum_s \mathcal{R}(r_2)_{ks} x'_s = \sum_{st} \mathcal{R}(r_2)_{ks} \mathcal{R}(r_1)_{st} x_t = \sum_s \mathcal{R}(r_2 r_1)_{ks} x_s.$$

Следовательно,

$$\mathcal{R}(r_2 r_1) = \mathcal{R}(r_2) \mathcal{R}(r_1). \quad (2.30)$$

Операции трансляции можно также задавать преобразованием координат. При этом операции трансляции t_a соответствует прибавление к радиусу-вектору точки \mathbf{x} вектора \mathbf{a} :

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}, \quad x'_i = x_i + a_i. \quad (2.31)$$

Всякое преобразование (2.17) $t_a r$, состоящее из поворотного элемента r и трансляции на вектор \mathbf{a} , можно записать в виде неоднородного линейного преобразования координат:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{a} + \mathcal{R}(r) \mathbf{x}, \quad (2.32)$$

где \mathcal{R} — ортогональная матрица, соответствующая поворотному преобразованию r .

§ 3. ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ

Рассмотрим теперь возможные типы точечных групп.

Все точечные группы могут быть построены из простейших групп C_n путем присоединения новых элементов симметрии: поворотов вокруг других осей и отражений в плоскостях. При этом добавление одного из новых элементов влечет за собой появление других элементов симметрии.

Следует подчеркнуть, что для получения конечной точечной группы присоединение новых элементов симметрии не может быть произвольным; например, новые оси симметрии могут пересекаться со старыми не под произвольными углами.

Действительно, произведение двух вращений на углы, соизмеримые с 2π , вокруг осей, пересекающихся под произвольным

углом, есть вращение вокруг третьей оси на угол, который в общем случае несоизмерим с 2π , что, как обсуждалось в § 2, приводит к бесконечной группе.

Именно это обстоятельство и является причиной существования конечного числа типов точечных групп.

Существует всего 14 типов конечных точечных групп; это группы C_n , S_{2n} , C_{nh} , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd} , T , T_d , T_h , O , O_h , Y , Y_h .

Группа C_n . Это группа поворотов вокруг оси на углы $\frac{2\pi}{n}k$ ($k = 0, 1, 2, \dots, n-1$). Группа циклическая, число классов равно числу элементов n . Группа C_n определяется одним образующим элементом $a = c_n$ и одним определяющим соотношением

$$a^n = e. \quad (3.1)$$

Группа C_{nh} . Группы C_{nh} имеют ось n -го порядка и перпендикулярную ей плоскость отражения σ_h (рис. 4, а). Группа C_{nh} имеет $2n$ элементов: n элементов группы C_n

$$c_n^k \quad (k = 0, 1, \dots, n-1)$$

и n зеркально-поворотных преобразований

$$s_n^k = c_n^k \sigma_h \quad (k = 0, 1, \dots, n-1).$$

При четных n в группе имеется инверсия $i = \sigma_h c_n^{n/2}$. Все эти группы абелевы, так как повороты вокруг оси коммутируют с отражениями в перпендикулярной плоскости. Число классов равно числу элементов. Группа $C_{0h} \equiv C_s$ состоит из двух элементов: e и σ_h .

Группа C_{nh} является прямым произведением групп C_n и C_s :

$$C_{nh} = C_n \times C_s, \quad (3.2)$$

а для четных $n = 2p$

$$C_{2p, h} = C_n \times C_i,$$

где C_i — группа, состоящая из двух элементов e и i .

Группы C_{nh} определяются двумя образующими $a = c_n$ и $b = \sigma_h$ и соотношениями

$$a^n = e, \quad b^2 = e, \quad ab = ba. \quad (3.3)$$

Для четных n в качестве образующего элемента b может быть выбрана инверсия i .

Группа S_n образована степенями зеркального поворота: e , s_n , $s_n^2 = c_n^2$, $s_n^3 = \sigma_h c_n^3$ и т. д. Если n нечетно, то группа S_n имеет порядок $2n$, так как $s_n^{2n} = c_n^{2n} = e$, а $s_n^n = \sigma^n = \sigma_h$. Таким образом, если n нечетно, то группа S_n содержит в качестве независимых элементов c_n и σ_h , т. е. является группой C_{nh} . Поэтому при нечетных n группы C_{nh} фактически являются циклическими группами S_{2n} .

В случае четного n группа S_n имеет порядок n , так как $s_n^n = c_n^n = e$, поэтому в эту группу не входят отдельно поворот c_n и отражение σ_h и s_n выступает в качестве независимого элемента, а группа S_n состоит из степеней s_n^k ($k = 0, 1, \dots, n - 1$). При этом $s_n^{2k} = c_n^{2k}$. Группа S_2 есть введенная выше группа C_i .

Группа S_{2p} изоморфна группе C_{2p} и определяется одним образующим элементом $a = s_{2p}$ и условием $a^{2p} = e$.

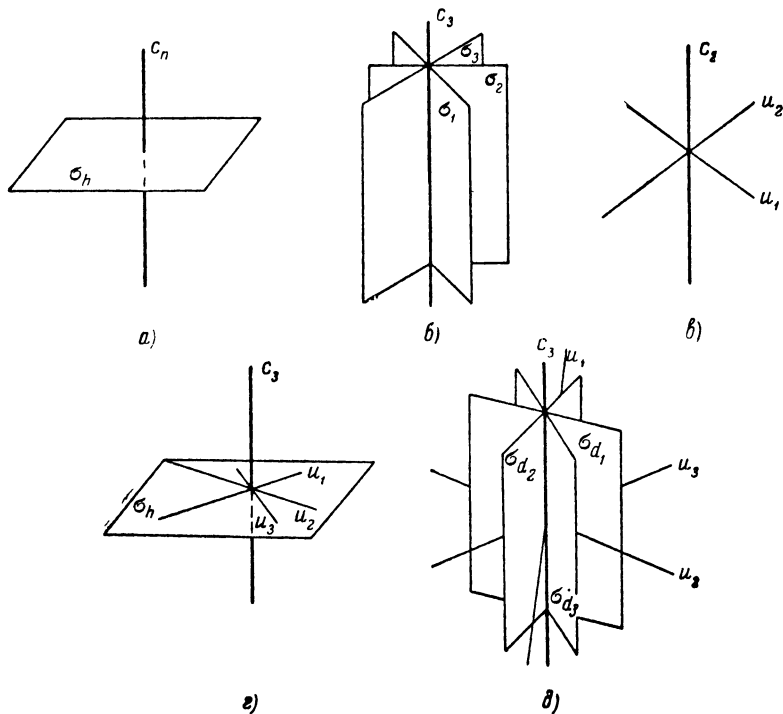


Рис. 4. Элементы симметрии точечных групп. а) C_{nh} ; б) C_{3v} ; в) D_2 ; г) D_{3h} ; д) D_{3d} .

Группа C_{nv} . Группы C_{nv} имеют ось n -го порядка и n плоскостей отражения, проходящих через эту ось (см. рис. 4, б, где изображено расположение элементов симметрии для группы C_{3v}). Эти группы содержат $2n$ элементов, n из них есть элементы группы C_n , а остальные являются отражениями в n вертикальных плоскостях. Ввиду наличия плоскости отражения, проходящей через ось c_n , эта ось является двусторонней, т. е. повороты c_n^k и c_n^{n-k} сопряжены.

Если n нечетно, то при поворотах c_n^k ($k = 0, 1, \dots, n - 1$) все плоскости σ_v совмещаются друг с другом, поэтому все отражения

в плоскостях σ_v входят в один класс. Если n четно, то при поворотах c_n^k плоскости σ_v совмещаются друг с другом через одну, поэтому отражения в плоскостях при четных $n = 2p$ разбиваются на два класса по p отражений в каждом.

Если n четно, то группа $C_{2p, v}$ имеет $p + 3$ класса: $p - 1$ классов (c_{2p}^k, c_{2p}^{-k}) ($k = 1, \dots, p - 1$), класс c_{2p}^p , единичный элемент e и два класса по p отражений в плоскостях $c_{2p}^k \sigma_v c_{2p}^{-k}$, $c_{2p}^k \sigma'_v c_{2p}^{-k}$, где $k = 0, 1, \dots, p - 1$, а $\sigma'_v = c_n \sigma_v$.

Если $n = 2p + 1$ нечетно, то все плоскости эквивалентны и отражения в них входят в один класс; кроме того, имеется еще p классов поворотов $(c_{2p+1}^k, c_{2p+1}^{-k})$ ($k = 1, \dots, p$) и класс, состоящий из единичного элемента, т. е. всего имеется $p + 2$ класса.

Группы C_{nv} также определяются двумя образующими: $a = c_n$ и $b = \sigma_v$. Из (2.13) следует, что $\sigma_v c_n \sigma_v = c_n^{-1} = c_n^{n-1}$, поэтому образующие элементы в группах C_{nv} связаны соотношениями

$$a^n = e, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{n-1}b. \quad (3.4)$$

Группа D_n . Группы D_n имеют в качестве элементов симметрии ось n -го порядка и n перпендикулярных ей осей второго порядка (мы будем обозначать их через u_2). Система осей для группы D_2 показана на рис. 4, в. Группы D_n содержат $2n$ элементов: n элементов группы C_n и n поворотов вокруг осей второго порядка. Ось n -го порядка является двусторонней из-за наличия перпендикулярных осей второго порядка. Группы D_n изоморфны группам C_{nv} , изоморфизм осуществляется соответствием $c_n \leftrightarrow c_n$, $u_2 \leftrightarrow \sigma_v$. Аналогично группам C_{nv} в группах D_n при нечетном n все оси второго порядка эквивалентны. В случае четного n оси второго порядка совмещаются друг с другом через одну и имеются два набора по $n/2$ эквивалентных осей второго порядка. Распределение элементов по классам аналогично группе C_{nv} . Группы D_n определяются двумя образующими $a = c_n$ и $b = u_2$, которые удовлетворяют соотношениям (3.4).

Группы D_{nh} . Группы D_{nh} получаются из группы D_n добавлением плоскости отражения σ_h , перпендикулярной оси n -го порядка. В группе D_{nh} имеется $4n$ элементов: $2n$ элементов группы D_n и $2n$ произведений типа $u_2 \sigma_h$, которые согласно (2.12) есть отражения σ_v в плоскостях, проходящих через ось c_n и оси второго порядка u_2 . Таким образом, присоединение горизонтальной плоскости отражения приводит к появлению n вертикальных плоскостей отражения, проходящих через ось n -го порядка. Поэтому к группе D_{nh} можно прийти и из групп C_{nv} или C_{nh} , добавляя плоскость отражения σ_h или ось второго порядка соответственно. Расположение элементов группы D_{3h} показано на рис. 4, г. $4n$ элементов группы D_{nh} включают n поворотов c_n^k ($k = 0, 1, \dots, n - 1$), n поворотов на π вокруг осей второго порядка $u_2 c_n^k$ (все эти элементы входят в группу D_n), n зеркаль-

но-поворотных преобразований $s_n^k = \sigma_h c_n^k$ и n отражений в вертикальных плоскостях $\sigma_v c_n^k$.

Поскольку σ_h коммутирует со всеми элементами группы D_n , то D_{nh} может быть представлена в виде прямого произведения D_n на группу C_s :

$$D_{nh} = D_n \times C_s.$$

Поэтому число классов в группе D_{nh} равно удвоенному числу классов в группе D_n , а сами классы D_{nh} получаются умножением элементов классов группы D_n на e и σ_h .

При четном n группа D_{nh} содержит инверсию $c_n^{n/2} \sigma_h = c_2 \sigma_h = i$, поэтому при $n = 2p$ группа $D_{2p, h}$ может быть записана в виде прямого произведения:

$$D_{2p, h} = D_{2p} \times C_i.$$

Группы D_{nh} определяются тремя образующими: $a = c_n$, $b = u_2$ и $c = \sigma_h$ или i при четных n ; они удовлетворяют соотношениям

$$a^n = e, \quad b^2 = e, \quad c^2 = e, \quad ba = a^{n-1}b, \quad ac = ca, \quad cb = bc. \quad (3.5)$$

При нечетном n группа D_{nh} изоморфна группе D_{2n} и ее можно определить двумя образующими: $a = s_n$, $b = u_2$. Определяющие соотношения подобны (3.4):

$$a^{2n} = e, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{2n-1}b.$$

Группы D_{nd} . Группы D_{nd} получаются из групп D_n путем добавления n «диагональных» плоскостей отражения, проходящих через ось n -го порядка посередине между двумя осями второго порядка (см. рис. 4, δ , где показаны оси и плоскости симметрии группы D_{3d}).

Группа D_{nd} содержит $4n$ элементов: кроме $2n$ элементов группы D_n появляются еще $2n$ новых элементов, получаемых из элементов группы D_n умножением на отражение σ_d в диагональных плоскостях. Эти $2n$ элементов состоят из n отражений σ_d в различных плоскостях $c_n^k \sigma_d$ и из n произведений вида $\sigma_d u_2$.

Произведение $\sigma_d u_2$ согласно (2.12) можно переписать в виде $\sigma_d u_2 = \sigma_d \sigma_v \sigma_h = \sigma_h c_{2n} = s_{2n}$, так как $u_2 = \sigma_v \sigma_h$, а $\sigma_d \sigma_v$ есть поворот вокруг оси c_n , являющейся линией пересечения плоскостей σ_v и σ_d , на угол, равный удвоенному углу между соседними плоскостями σ_v и σ_d , т. е. на угол $2\pi/2n = \pi/n$. Все остальные произведения типа $\sigma_d u_2 c_n^k$ ($k = 0, 1, \dots, n-1$) являются зеркально-поворотными преобразованиями s_{2n}^{2k+1} . Следовательно, ось c_n в группе D_{nd} становится зеркально-поворотной осью порядка $2n$.

Поскольку отражения в диагональных плоскостях переводят оси второго порядка друг в друга, то все оси второго порядка эквивалентны, так же как и все плоскости отражения. Зеркально-поворотные преобразования s_{2n}^{2k+1} и s_{2n}^{-2k-1} сопряжены

друг с другом. Поэтому при четном $n = 2p$ группы $D_{2p, d}$ содержат $2p + 3$ классов: e , s_{2p}^p , $p - 1$ классов по два поворота вокруг оси n -го порядка, класс из $2p = n$ поворотов вокруг осей второго порядка, p классов по два зеркально-поворотных преобразования вида s_{2n}^{2k+1} и s_{2n}^{-2k-1} ($k = 0, 1, 2, \dots, p - 1$) и класс из $n = 2p$ отражений σ_d в диагональных плоскостях.

В случае нечетного $n = 2p + 1$ в группе $D_{2p+1, d}$ имеется инверсия, так как в этом случае для каждой оси второго порядка u_2 есть одна плоскость σ_d , перпендикулярная этой оси. В случае нечетного n группа $D_{2p+1, d}$ поэтому может быть записана в виде прямого произведения:

$$D_{2p+1, d} = D_{2p+1} \times C_i.$$

Поэтому в группе $D_{2p+1, d}$ имеется $2(p + 2) = 2p + 4$ классов, получаемых из $p + 2$ классов группы D_{2p+1} умножением на e и инверсию i .

Группа D_{nd} может быть получена добавлением оси второго порядка u_2 или плоскости отражения σ_v к группе S_{2n} . Поэтому группы D_{nd} имеют два образующих элемента: $a = s_{2n}$ — зеркально-поворотную ось порядка $2n$ и $b = u_2$ — ось второго порядка, которые связаны соотношениями

$$a^{2n} = e, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{2n-1}b. \quad (3.6)$$

Таким образом, группа D_{nd} изоморфна группе D_{2n} .

Группа T . Группа T есть группа вращений, совмещающих тетраэдр сам с собой (рис. 5, а). Эта группа имеет три взаимно

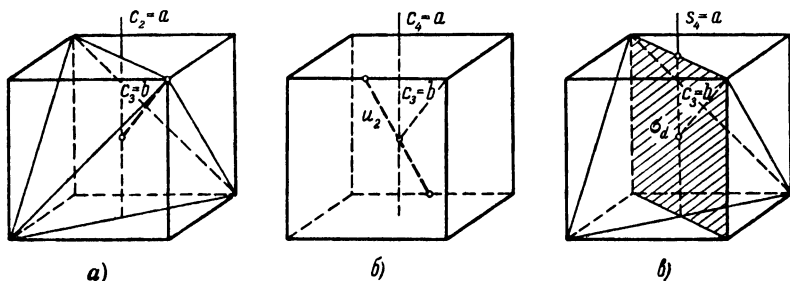


Рис. 5. Элементы симметрии кубических групп. а) T ; б) O ; в) T_d .

перпендикулярные оси второго порядка, соединяющие середины противоположных ребер тетраэдра, и четыре оси третьего порядка, проходящие из каждой вершины тетраэдра на центры противоположных граней. Группу T можно получить из группы D_2 присоединением оси третьего порядка. Группа тетраэдра имеет 12 элементов: e , $3c_2$, $4c_3$ и $4c_3^2$. Три оси второго порядка эквивалентны, так как переходят одна в другую при вращениях

вокруг оси третьего порядка; оси третьего порядка также эквивалентны, так как переходят одна в другую при поворотах вокруг осей c_2 . Все элементы группы T распределяются по четырём классам: e , $(3c_2)$, $(4c_3)$, $(4c_3^2)$. Группа T определяется двумя образующими: осью второго порядка $a = c_2$ и осью третьего порядка $b = c_3$. Для того чтобы получить соотношения между этими элементами, определяющие их взаимное расположение, учтем, что остальные оси второго порядка получаются из a при помощи поворотов вокруг любой из осей третьего порядка $c_2' = c_3 c_2 c_3^{-1}$, $c_2'' = c_3^2 c_2 c_3^{-2}$; а поскольку оси c_2 и c_2' взаимно перпендикулярны, то произведение c_2 и c_2' дает поворот на π вокруг третьей оси $c_2'' = c_2' c_2$, т. е. $ab^{-1}a = bab^{-2}$. Это приводит к следующим определяющим соотношениям для группы T :

$$a^2 = e, \quad b^3 = e, \quad bab = ab^2a. \quad (3.7)$$

Все элементы группы T выражаются через образующие элементы следующим образом:

$$\begin{aligned} c_2 &= a, & c_2' &= bab^2, & c_2'' &= b^2ab; \\ c_3 &= b, & c_3' &= aba, & c_3'' &= ab, & c_3''' &= ba; \\ c_3^2 &= ab^2a, & c_3''^2 &= b^2a, & c_3'''^2 &= ab^2, & c_3^3 &= b^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Группа T_h получается из группы T добавлением инверсии, с центром инверсии в центре тетраэдра:

$$T_h = T \times C_i.$$

Так как $c_2 i = \sigma_h$, то в группе T_h появляются три взаимно перпендикулярные плоскости отражения. Кроме того, появляются зеркально-поворотные преобразования s_6 и s_6^5 , так как

$$c_3 i = c_3 c_2 \sigma_h = c_6^5 \sigma_h = s_6^5 \quad \text{и} \quad c_2' i = c_3^2 c_2 \sigma_h = s_6,$$

т. е. оси третьего порядка превращаются в зеркально-поворотные оси шестого порядка. Число классов в группе вдвое больше числа классов в T , т. е. равно 8. Эти классы сопряженных элементов получаются из классов группы T умножением на e и i . Группу T_h можно определить двумя образующими элементами $a = c_2$ и $s = s_6$.

Так как вращение s_6 переводит ось c_2 в $c_2'' = s_6 c_2 s_6^{-1}$, а $c_3 = s_6^2$ переводит ось c_2 в $c_2' = c_3 c_2 c_3^{-1}$ и $c_2' c_2 = c_2''$, то $sas^{-2} = as^{-1}a^{-1}$, откуда получаем определяющие соотношения для группы T_h :

$$a^2 = e, \quad s^6 = e, \quad sas = as^2a. \quad (3.9)$$

Группа O — группа поворотов, совмещающих куб с самим собой. Она содержит три оси четвертого порядка, проходящие через центры противоположных граней, четыре оси третьего

порядка c_3 , проходящие через противоположные вершины куба, и шесть осей второго порядка u_2 , проходящих через середины противоположных ребер (рис. 5, б).

Эта группа может быть получена добавлением оси третьего порядка к группе D_4 . В группе O оси одинакового порядка эквивалентны, все они двусторонние. В группе O 24 элемента, распределенных по пяти классам:

$$(e), \quad (4c_3, 4c_3^2), \quad (3c_4, 3c_4^3), \quad (3c_4^2), \quad (6u_2). \quad (3.10)$$

Группа октаэдра имеет два образующих элемента, за которые могут быть выбраны поворот вокруг оси четвертого порядка $a = c_4$ и поворот вокруг оси третьего порядка $b = c_3$, которые удовлетворяют следующим соотношениям:

$$a^4 = e, \quad b^3 = e, \quad aba = b^2; \quad (3.11)$$

последнее соотношение следует из того, что $u_2^2 = (ab)^2 = e$. Все остальные элементы в группе октаэдра могут быть выражены через различные степени и произведения этих образующих элементов:

$$\begin{aligned} c_4 &= a, & c'_4 &= bab^2, & c''_4 &= b^2ab, \\ c_4^2 &= a^2, & c'^2_4 &= ba^2b^2, & c''^2_4 &= b^2a^2b, \\ c_4^3 &= a^3, & c'^3_4 &= b^2a, & c''^3_4 &= ab^2, \\ c_3 &= b, & c'_3 &= aba^3, & c''_3 &= a^2ba^2, & c'''_3 &= a^3ba, \\ c_3^2 &= b^2, & c'^2_3 &= a^2b, & c''^2_3 &= a^2b^2a^2, & c'''^2_3 &= ba^2, & u'''_2 &= ba^2, \\ u_2 &= ab, & u'_2 &= a^2ba^3, & u''_2 &= a^3ba^2, & u^{(IV)}_2 &= ba^2b^2a, & u^{(V)}_2 &= b^2ab^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Группа T_d есть полная группа симметрии тетраэдра. Дополнительно к элементам группы T она содержит отражения в плоскостях, проходящих через две вершины и середину противоположного ребра (см. рис. 5, в). В группе T_d 24 элемента: 12 элементов группы T

$$e, \quad 3c_2, \quad 4c_3, \quad 4c_3^2,$$

шесть отражений в плоскостях σ_d и шесть зеркально-поворотных преобразований s_4 и s_4^3 . Эти зеркальные повороты появляются, как и в группе D_{2d} , так как плоскости отражения для осей второго порядка являются диагональными. Поскольку плоскости симметрии содержат оси c_3 , то в группе T_d , в отличие от группы T , эти оси являются двусторонними. Зеркальные повороты s_4 и s_4^3 , как и в группе D_{2d} , сопряжены и входят в один класс. Поэтому все элементы группы T_d распределены по пяти классам:

$$(e), \quad (4c_3, 4c_3^2), \quad (6\sigma), \quad (3s_4, 3s_4^3), \quad (3c_2).$$

Группа T_d изоморфна группе O , между их элементами можно установить соответствие: $s_4 \leftrightarrow c_4$, $c_3 \leftrightarrow c_3$ и $u_2 \leftrightarrow \sigma$. Поэтому определяющие соотношения для группы T_d такие же, как

и для группы O , если в качестве образующих выбрать $a = s_4$, $b = c_3$, и определяются уравнениями (3.11). Все элементы группы T_d выражаются через образующие по (3.12).

Группа O_h есть полная группа симметрии куба. Она получается добавлением к O центра инверсии:

$$O_h = O \times C_i.$$

Число элементов группы O_h равно 48. Оси третьего порядка — пространственные диагонали куба; как и в группе T_d , они превращаются в зеркально-поворотные оси шестого порядка, при этом появляются три плоскости отражения σ_h , перпендикулярные осям четвертого порядка; кроме того, появляются шесть плоскостей отражения σ_d , проходящих через каждую пару противоположных ребер. Число классов в группе O_h равно 10; пять из них совпадают с классами группы O , остальные получаются из них умножением на инверсию i . Это классы:

$$(i), (4s_6, 4s_6^5), (3s_4, 3s_4^3), (3\sigma_h), (6\sigma_d).$$

Группа O_h также может быть получена добавлением инверсии к группе T_d :

$$O_h = T_d \times C_i.$$

В качестве образующих группы O_h можно выбрать поворот $c_4 = a$ и зеркальный поворот $s_6 = s$. Эти элементы удовлетворяют следующим определяющим соотношениям:

$$a^4 = e, \quad s^6 = e, \quad as^3 = s^3a, \quad sa^3s = a. \quad (3.13)$$

Третье из этих соотношений есть условие коммутации инверсии $i = s^3$ с c_4 , а последнее следует из того, что элемент $sa^3 = s_6c_4^3 = ic_3^2c_4^3$, как легко убедиться, есть отражение в одной из плоскостей σ_d , а $\sigma_d^2 = e$.

Каждый элемент группы O_h является либо элементом группы O , либо является произведением какого-либо элемента группы O на инверсию $i = s^3$. Поэтому половина элементов группы O_h выражается через образующие a и b по формулам (3.12), где b нужно заменить на s^2 , а остальная половина получается умножением их на инверсию s^3 .

Группы икосаэдра Y и Y_h , как будет показано в § 5, не могут входить в группу симметрии кристаллов, поэтому их мы рассматривать не будем.

§ 4. ГРУППА ВРАЩЕНИЙ

Рассмотрим теперь группу симметрии сферы — сферическую группу \mathcal{H} , которая состоит из всевозможных поворотов на произвольные углы вокруг любой из осей, проходящих через центр сферы, и содержащую, таким образом, непрерывное множество элементов. Эта группа называется также группой вращений.

Хотя сама группа вращений не входит в группы симметрии кристаллов, она существенна во многих приложениях теории твердого тела, поэтому здесь будут кратко рассмотрены основные свойства этой группы.

Каждый элемент группы \mathcal{K} — поворот $c_l(\varphi)$ — характеризуется направлением оси вращения l и углом поворота φ . Поворот $c_l(\varphi)$ будем описывать вектором φ с компонентами φ_x , φ_y и φ_z , направленным по направлению оси поворота l ; длина вектора φ равна углу поворота φ :

$$|\varphi| = \sqrt{\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2}.$$

Поэтому каждый элемент группы вращения является функцией трех параметров φ_x , φ_y и φ_z , которые удовлетворяют неравенству

$$\sqrt{\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2} \leq 2\pi.$$

В качестве трех независимых параметров, характеризующих вращения, часто используют углы Эйлера θ , φ и ψ .

Все доказанные в § 1 общие теоремы, относящиеся к конечным группам и основанные на групповых свойствах, применимы и к группе вращений, если в эти теоремы не входит число элементов группы.

В сферической группе все оси вращения являются двусторонними и эквивалентными, поэтому в один класс сопряженных элементов входят все повороты на один и тот же угол $|\varphi|$ вокруг всевозможных осей.

Если к группе вращения \mathcal{K} присоединить инверсию i , то получим полную ортогональную группу

$$\mathcal{K}_h = \mathcal{K} \times C_i,$$

в которой каждая плоскость, проходящая через центр сферы, является плоскостью отражения. Каждый элемент ортогональной группы \mathcal{K}_h является либо вращением, либо может быть представлен в виде произведения инверсии на вращение.

Очевидно, что каждая конечная точечная группа является конечной подгруппой ортогональной группы.

В группе вращения определяющую роль играют повороты на бесконечно малые углы, так как поворот на конечный угол вокруг заданной оси может быть получен в результате непрерывных последовательных поворотов на бесконечно малые углы. Поэтому свойства поворотов в группе вращений определяются свойствами бесконечно малых поворотов.

Рассмотрим бесконечно малый поворот φ . Из простого геометрического рассмотрения видно, что с точностью до членов первого порядка малости по $|\varphi|$ при таком вращении тела радиус-вектор x' произвольной точки в неподвижной системе

координат переходит в новое положение:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + [\mathbf{x}\varphi] \quad (4.1)$$

При бесконечно малых вращениях вокруг осей x, y, z из (4.1) получим соответственно:

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi_x, \quad x' = x, \quad y' = y + z\varphi_x, \quad z' = z - y\varphi_x; \\ \varphi = \varphi_y, \quad x' = x - z\varphi_y, \quad y' = y, \quad z' = z + x\varphi_y; \\ \varphi = \varphi_z, \quad x' = x + y\varphi_z, \quad y' = y - x\varphi_z, \quad z' = z. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Пусть $\mathcal{F}(x, y, z)$ — однозначная дифференцируемая функция координат. Рассмотрим ее изменение при бесконечно малом повороте координатной системы, который описывается вектором φ :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\varphi) \mathcal{F}(x, y, z) &= \\ &= \mathcal{F}(\varphi^{-1}\mathbf{x}) = \mathcal{F}(x + z\varphi_y - y\varphi_z, y - z\varphi_x + x\varphi_z, z + y\varphi_x - x\varphi_y). \end{aligned}$$

Разлагая $\mathcal{F}(\varphi^{-1}\mathbf{x})$ в ряд Тейлора, получим с точностью до линейных членов по φ :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\varphi) \mathcal{F}(x, y, z) &= \mathcal{F}(x, y, z) + (\varphi_y z - \varphi_z y) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x}(x, y, z) + \\ &+ (x\varphi_z - z\varphi_x) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y}(x, y, z) + (y\varphi_x - x\varphi_y) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial z}(x, y, z) = \\ &= (1 + i\mathbf{L}\varphi) \mathcal{F}(x, y, z), \end{aligned} \quad (4.3)$$

где \mathbf{L} — векторный оператор $-i[\mathbf{x}\nabla]$ с компонентами

$$\begin{aligned} L_x &= -i \left\{ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right\}, \quad L_y = -i \left\{ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \\ L_z &= -i \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Оператор \mathbf{L} называется оператором бесконечно малого поворота и совпадает с оператором углового момента, который вводится в квантовой механике.

Нетрудно проверить непосредственно, что операторы L_x, L_y и L_z удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$L_x L_y - L_y L_x = iL_z, \quad L_y L_z - L_z L_y = iL_x, \quad L_z L_x - L_x L_z = iL_y. \quad (4.5)$$

Покажем на основании группового свойства вращений, что оператор

$$\mathcal{D}(\varphi) \mathcal{F}(x, y, z) = \mathcal{F}(\varphi^{-1}\mathbf{x}), \quad (4.6)$$

определяющий преобразование функции координат $\mathcal{F}(x, y, z)$ при вращении на любой конечный угол φ , полностью

*) Соответственно изменение радиуса-вектора точки при малом вращении φ координатной системы согласно (2.29) равно $\mathbf{x}' = \mathbf{x} - [\mathbf{x}\varphi]$.

определяется оператором бесконечно малого поворота L и углом φ .

Для этого рассмотрим два поворота вокруг одной и той же оси на углы $s\varphi$ и $t\varphi$. Поскольку последовательное применение вращений $s\varphi$ и $t\varphi$ есть также вращение вокруг этой же оси на угол $(s + t)\varphi$, то результат последовательного применения операторов $\mathcal{D}(s\varphi)$ и $\mathcal{D}(t\varphi)$ есть преобразование, осуществляемое оператором $\mathcal{D}((s + t)\varphi)$:

$$\mathcal{D}(s\varphi) \mathcal{D}(t\varphi) = \mathcal{D}((s + t)\varphi). \quad (4.7)$$

Продифференцируем это равенство по s и положим затем $s = 0$:

$$\mathcal{D}(t\varphi) \frac{d\mathcal{D}(s\varphi)}{ds} \Big|_{s=0} = \frac{d\mathcal{D}((s + t)\varphi)}{ds} \Big|_{s=0} = \frac{d\mathcal{D}(t\varphi)}{dt}.$$

Согласно (4.3)

$$\frac{d\mathcal{D}(s\varphi)}{ds} \Big|_{s=0} = iL\varphi,$$

поэтому имеем уравнение для $\mathcal{D}(t\varphi)$:

$$\frac{d\mathcal{D}(t\varphi)}{dt} = i(L\varphi) \mathcal{D}(t\varphi). \quad (4.8)$$

Поскольку при $t = 0$ $\mathcal{D}(0) = 1$ — оператору тождественного преобразования, то из (4.8) получим

$$\mathcal{D}(t\varphi) = e^{i(L\varphi)t},$$

и при $t = 1$ получим выражение для $\mathcal{D}(\varphi)$ через оператор бесконечно малого поворота L :

$$\mathcal{D}(\varphi) = e^{i(L\varphi)}. \quad (4.9)$$

Оператор $e^{iL\varphi}$ следует понимать как результат разложения в ряд:

$$e^{i(L\varphi)} = 1 + i(L\varphi) + \frac{(i(L\varphi))^2}{2} + \dots + \frac{(i(L\varphi))^n}{n!} + \dots; \quad (4.10)$$

при этом формула (4.3) есть первый член разложения оператора $\mathcal{D}(\varphi)$ в ряд по малому параметру φ .

Каждому вращению пространства можно поставить в соответствие некоторое преобразование плоскости. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим стереографическую проекцию сферы на плоскость (рис. 6). Возьмем сферу единичного радиуса с центром в точке $O(0, 0, 0)$. Каждой точке сферы P сопоставим точку P' плоскости $\xi\eta$, являющуюся точкой пересечения прямой $O'P$ с плоскостью $\xi\eta$. Ясно, что это соответствие взаимно однозначное, при этом точке $O'(0, 0, 1)$ соответствует бесконечно удаленная точка плоскости. Всякому вращению сферы, переводящему точку P в точку M на сфере, будет соответствовать некоторое преобразование плоскости $\xi\eta$, при котором точка P' перейдет в M' на плоскости $\xi\eta$.

Если ввести комплексное переменное $\zeta = \xi + i\eta$, то можно показать [1. 8], что всякому вращению сферы соответствует некоторое дробно-линейное преобразование координат ζ плоскости $\xi\eta$:

$$\zeta' = \frac{\alpha\zeta + \beta}{\gamma\zeta + \delta}, \quad (4.11)$$

которое определяется матрицей

$$u = \begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{vmatrix}$$

с комплексными параметрами α, β, γ и δ , зависящими от компонент вектора поворота φ_x, φ_y и φ_z . Матрица u является унитарной, а определитель ее равен единице *).

Таким образом, каждому вращению сферы может быть сопоставлена унитарная матрица u с определителем, равным единице, которая осуществляет дробно-линейное преобразование плоскости $\xi\eta$, соответствующее вращению сферы. При этом произведению двух вращений соответствует произведение соответствующих матриц u . Поскольку произведение двух унитарных матриц с определителем, равным единице, есть также унитарная матрица с определителем, равным единице, то такие матрицы u образуют группу \mathcal{U} , которая называется унитарной группой или группой движения. Поэтому существует соответствие между вращениями сферы, образующими группу вращения \mathcal{K} , и унитарными матрицами u с определителем, равным единице, которые являются элементами группы движения \mathcal{U} .

Однако это соответствие не является взаимно однозначным. Действительно, каждой матрице u соответствует определенное преобразование плоскости $\xi\eta$ (4.11) и, таким образом, определенное вращение сферы. Поэтому каждая матрица u однозначно определяет некоторое вращение сферы. Однако любому вращению сферы соответствует не одна, а две унитарные матрицы с определителем, равным единице, а именно матрицы u и $-u$, так как из (4.11) видно, что обеим этим матрицам соответствует одно и то же движение плоскости $\xi\eta$. Поэтому группа движения \mathcal{U} гомоморфна группе вращения \mathcal{K} . Ядром гомоморфизма является группа из двух элементов I и $-I$, где I —

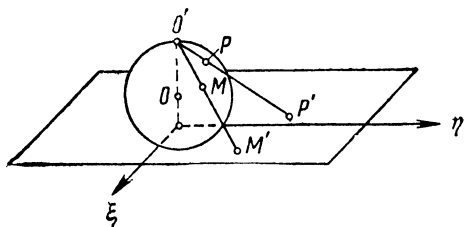


Рис. 6. Стереографическая проекция сферы на плоскость.

) Унитарность матрицы u означает, что выполняются соотношения $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1, \alpha^\gamma + \beta^*\delta = 0$. Подробнее об унитарных матрицах см. § 7.

единичная двухрядная матрица. Эта группа является центром группы \mathcal{U} . Фактор-группа по этой подгруппе изоморфна группе вращений \mathcal{K} .

Можно показать [1.8], что матрица u , соответствующая повороту φ с компонентами φ_x , φ_y и φ_z , имеет вид

$$u(\varphi) = e^{i(\sigma_x \varphi_x + \sigma_y \varphi_y + \sigma_z \varphi_z)/2} = e^{i(\sigma\varphi)/2}, \quad (4.12)$$

где вектор σ есть двухрядная матрица с компонентами

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (4.13)$$

Матрицы σ_x , σ_y и σ_z называются матрицами Паули и играют большую роль в теории представления группы вращения и в приложениях теории групп в физике. Из определения матриц Паули (4.13) следует, что они удовлетворяют соотношениям

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \quad \sigma_x \sigma_z = -\sigma_z \sigma_x, \quad \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x, \quad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y. \quad (4.14)$$

Формула (4.12) для $u(\varphi)$ является символической записью двухрядной матрицы, которую следует понимать как результат разложения в ряд экспоненты (4.12). Производя разложение в ряд $e^{i(\sigma\varphi)/2}$ по (4.10) и учитывая (4.14), легко показать, что

$$u(\varphi) = e^{i(\sigma\varphi)/2} = I \cos \frac{\varphi}{2} + i \frac{(\sigma\varphi)}{\varphi} \sin \frac{\varphi}{2}, \quad (4.15)$$

где I — единичная матрица.

Из (4.15) следует, что вращению вокруг оси z на угол φ (т. е. при $\varphi = \varphi_z$) соответствует матрица

$$u(\varphi_z) = I \cos \frac{\varphi}{2} + i \sigma_z \sin \frac{\varphi}{2} = \begin{vmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{vmatrix}. \quad (4.16)$$

Из (4.15) и (4.16) виден характер упоминавшейся выше неоднозначности соответствия $u(\varphi)$ и вращения φ . Действительно, повороты φ и $\varphi + 2\pi$ не отличаются между собой, однако, как видно из (4.15) и в частном случае поворота вокруг оси z из (4.16), матрицы $u(\varphi)$ и $u(\varphi + 2\pi)$ отличаются знаком. Так, поворотам вокруг оси z на 0 и 2π соответствуют матрицы I и $-I$.

§ 5. РЕШЕТКИ БРАВЕ

В этом и следующем параграфах будут рассмотрены группы симметрии кристаллов. При этом мы не будем перечислять все возможные пространственные группы*), а выясним их струк-

*) Описание пространственных групп имеется, например, в монографиях [1.3, 1.10] или справочниках [1.19, 1.18].

туру и укажем элементы, которые следует задать, чтобы полностью определить группу симметрии кристалла.

Все группы симметрии кристаллов оказывается возможным построить чисто математически, исходя из простых аксиом, фактически эквивалентных гипотезе об атомной структуре кристаллов. Эти группы были построены Федоровым и несколько позднее Шенфлисом, которые показали, что существует всего 230 пространственных групп симметрии кристаллической решетки.

Эквивалентными точками кристалла будем называть такие точки, которые по всем физическим и геометрическим свойствам неотличимы друг от друга.

Группа симметрии кристалла состоит из всех преобразований, совмещающих каждую точку кристалла с её эквивалентной.

Всякая кристаллическая решетка обладает фундаментальным свойством пространственной периодичности, которое может быть положено в определение кристаллической решетки. Это означает, что в группе симметрии решетки всегда существует трехмерная группа трансляций T на векторы \mathbf{a} , которые образуют некоторую трехмерную векторную группу \mathcal{F} . При этом в силу атомного строения кристаллической решетки все векторы трансляции $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$ по длине должны превышать некоторую величину, так как очевидно, что расстояния между атомами (ионами) в кристаллической решетке не могут быть сколь угодно малы. Векторная группа \mathcal{F} называется дискретной, если длина любого вектора $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$ превосходит некоторую величину d .

Во всякой трехмерной дискретной группе существуют такие три некопланарных вектора \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 , что любой вектор $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$ может быть представлен в виде их целочисленной суммы:

$$\mathbf{a} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3, \quad (5.1)$$

где m_1 , m_2 , m_3 — любые целые числа: положительные, отрицательные или нуль. Параллелепипед, построенный на основных векторах \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 , называется основным параллелепипедом или элементарной ячейкой кристалла. Отметим, что выбор базисных векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 в известной степени произволен.

Любой из основных параллелепипедов может быть построен следующим образом.

Выберем произвольный вектор $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$. За \mathbf{a}_1 выбирается вектор, принадлежащий группе \mathcal{F} , параллельный \mathbf{a} и имеющий минимальную длину. Выберем далее произвольный вектор $\mathbf{b} \in \mathcal{F}$, не параллельный \mathbf{a}_1 . Векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{b} определяют плоскость $\mathbf{a}_1\mathbf{b}$. За вектор \mathbf{a}_2 выберем любой из векторов, принадлежащих \mathcal{F} , лежащий в плоскости $\mathbf{a}_1\mathbf{b}$ и имеющий минимальную проекцию на прямую, перпендикулярную вектору \mathbf{a}_1 и лежащую в плоскости $\mathbf{a}_1\mathbf{b}$. Два вектора \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 определяют одну из граней основного параллелепипеда. В качестве вектора \mathbf{a}_3 выберем тот

из векторов $c \in \mathcal{F}$, который не лежит в плоскости $a_1 a_2$ и имеет наименьшую проекцию на прямую, перпендикулярную этой плоскости.

Из указанного способа построения основного параллелепипеда следует, что одно из его ребер может быть направлено вдоль любого вектора $a \in \mathcal{F}$, а одна из его граней может лежать в плоскости, образованной любыми двумя векторами a и $b \in \mathcal{F}$. Объем основного параллелепипеда, построенного на векторах a_1 , a_2 и a_3 , равен $(a_1 [a_2 \times a_3]) = \Omega_0$; при этом объемы всех параллелепипедов, построенных на различных тройках векторов, выбранных указанным выше способом, равны между собой.

Кристаллическую решетку можно рассматривать как построенную из тождественных элементарных ячеек. Вершины параллелепипедов, образующих каждую элементарную ячейку, являющиеся концами векторов a (5.1), называются узлами Браве, а решетка, образованная узлами Браве, называется решеткой Браве.

Следует отметить, что узлы решетки Браве в общем случае не являются реальными узлами кристаллической решетки, т. е. местами расположения атомов или ионов. Действительно, в общем случае при построении решетки Браве за нулевой узел можно выбрать произвольную точку кристалла, поэтому и остальные узлы решетки Браве могут попасть в произвольные, но эквивалентные точки кристалла.

Если на элементарную ячейку кристалла приходится один атом, то удобно совместить узлы решетки Браве с местоположением атомов, и тогда решетка Браве совпадает с реальной решеткой кристалла. Если же на элементарную ячейку приходится несколько атомов, т. е. решетка является сложной, то за нулевой узел решетки Браве может быть выбрано местоположение лишь одного из атомов элементарной ячейки, т. е. число узлов решетки Браве меньше числа реальных узлов кристаллической решетки.

Такую сложную решетку можно представить себе как решетку, состоящую из нескольких (по числу атомов в элементарной ячейке) вдвинутых одна в другую решеток Браве, нулевые узлы которых совпадают с местоположением каждого атома в нулевой элементарной ячейке. Однако трансляционная симметрия кристалла характеризуется, конечно, лишь одной из решеток Браве.

Параллельными переносами (5.1) в общем случае не исчерпываются все преобразования симметрии кристалла, так как в кристалле могут существовать эквивалентные точки, которые не могут быть совмещены друг с другом никаким переносом (5.1), и кроме трансляций (5.1) в группу симметрии решетки могут входить также и поворотные элементы: повороты, отражения и зеркальные повороты.

Симметрия решеток Браве

Совокупность отражений и вращений (зеркальных поворотов), которые преобразуют решетку Браве саму в себя и имеют неподвижную точку, образует некоторую точечную группу. Эта точечная группа симметрии решетки Браве \mathcal{K} является и группой симметрии векторной группы \mathcal{F} , характеризующей трансляционную симметрию кристалла. Каждый элемент $r \in \mathcal{K}$ переводит любой вектор $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$ в другой вектор $\mathbf{a}' = r\mathbf{a} \in \mathcal{F}$. Для дискретной векторной группы необходимым и достаточным условием этого является требование, чтобы каждый базисный вектор $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ при любом преобразовании r принадлежал группе \mathcal{F} , т. е.

$$\begin{aligned} r\mathbf{a}_1 &= m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3, \\ r\mathbf{a}_2 &= n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \\ r\mathbf{a}_3 &= l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где m_i, n_i и l_i — любые целые положительные и отрицательные числа или нуль. Фактически условие (5.2) есть условие совместности поворотов и параллельных переносов на целые периоды.

Условие совместности поворотов и трансляций (5.2) приводит к тому, что не всякая точечная группа может быть группой симметрии какой-либо векторной группы. Чтобы выяснить, какие точечные группы могут быть группами симметрии трехмерной дискретной векторной группы, рассмотрим элементы, которые содержит группа \mathcal{K} .

Поскольку во всякой векторной группе \mathcal{F} наряду с вектором \mathbf{a} имеется и вектор $-\mathbf{a}$, то в любой группе \mathcal{K} содержится инверсия.

Пусть c_n есть поворот n -го порядка, входящий в группу \mathcal{K} . Так как для любого $\mathbf{a} \in \mathcal{F}$ вектор $c_n\mathbf{a} - c_n^{-1}\mathbf{a}$ лежит в плоскости, перпендикулярной оси c_n , то трехмерная дискретная векторная группа \mathcal{F} порождает на плоскости, перпендикулярной оси c_n , некоторую дискретную группу. Пусть \mathbf{e} — самый короткий из ее векторов. Вектор $c_n\mathbf{e} + c_n^{-1}\mathbf{e}$, очевидно, параллелен вектору \mathbf{e} , поэтому он кратен вектору \mathbf{e} , причем длина его не превосходит $2\mathbf{e}$. Поэтому

$$c_n\mathbf{e} + c_n^{-1}\mathbf{e} = m\mathbf{e} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2). \quad (5.3)$$

Длина этого вектора $|c_n\mathbf{e} + c_n^{-1}\mathbf{e}| = 2e \cos(2\pi/n)$, где e — длина вектора \mathbf{e} . Отсюда получим уравнение:

$$2 \cos \frac{2\pi}{n} = m \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2). \quad (5.4)$$

Соотношение (5.4) может выполняться только при $n = 2, 3, 4$ и 6 . Таким образом из условия (5.2) следует, что в группе

симметрии любой трехмерной решетки Браве могут содержаться только оси второго, третьего, четвертого и шестого порядка. Можно также показать, что если в группе \mathcal{H} содержится подгруппа C_n с $n > 2$, то имеется также и плоскость отражения σ_v , проходящая через ось c_n , т. е. в группе \mathcal{H} содержится и подгруппа C_{nv} .

Поэтому всякая группа симметрии векторной группы содержит инверсию и может содержать оси только второго, третьего, четвертого и шестого порядка; при этом наряду с осями третьего, четвертого и шестого порядка всегда имеется плоскость отражения, проходящая через эту ось.

Легко убедиться непосредственно, что только семь групп обладают этими свойствами. Это группы S_2 , C_{2h} , D_{2h} , D_{3d} , D_{4h} , D_{6h} , O_h . Ниже будет показано, что для каждой из указанных семи точечных групп действительно можно построить векторную группу \mathcal{F} и соответственно решетку Браве, для которой эта точечная группа является группой симметрии. При этом одной и той же группе симметрии \mathcal{H} могут соответствовать различные векторные группы, т. е. различные решетки Браве. Совокупность векторных групп, имеющих одну и ту же группу симметрии, называется системой или сингонией.

Из сказанного выше следует, что существует всего семь систем. Эти системы называются: триклинная T (группа S_2), моноклинная M (группа C_{2h}), ромбическая или ортогональная O (группа D_{2h}), ромбоэдрическая или тригональная R (группа D_{3d}), тетрагональная или квадратная Q (группа D_{4h}), гексагональная H (группа D_{6h}) и кубическая K (группа O_h).

Таким образом, для всех кристаллов существует всего семь групп симметрии \mathcal{H} , т. е. семь систем решеток Браве.

Типы решеток

Две векторные группы, принадлежащие к одной системе, называются однотипными, если одна из них может быть получена из другой с помощью непрерывного преобразования базисных векторов, в процессе которого симметрия векторной группы не понижается. Из этого определения следует, что различные векторные группы, которые могут быть получены одна из другой путем непрерывного изменения параметров, допускаемых группой симметрии, например, путем изменения масштаба векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 , относятся к одному типу.

Как мы увидим ниже, для каждой системы в общем случае может существовать несколько типов решеток Браве, т. е. несколько способов расположения базисных векторов, удовлетворяющих условию (5.2) и не переводимых друг в друга непрерывным преобразованием. Всего в семи системах имеется 14 типов векторных групп, т. е. 14 типов решеток Браве.

Рассмотрим типы решеток Браве.

Триклинная система T (группа S_2). В группе симметрии S_2 имеются только два элемента: e и i , поэтому любая тройка некопланарных векторов a_1 , a_2 и a_3 может быть базисом в группе \mathcal{F} (рис. 7). Поскольку любая другая тройка некопланарных векторов может быть переведена в заданные векторы a_1 , a_2 и a_3 непрерывным преобразованием, то в триклинной системе имеется только один тип решетки Браве, который называется простым и обозначается Γ_t . Каждая решетка Браве типа Γ_t определяется шестью произвольными параметрами: длинами векторов a_1 , a_2 и a_3 и тремя углами между ними.

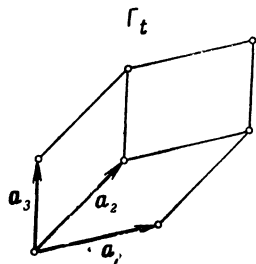


Рис. 7. Базисные векторы решетки Браве триклинной системы.

Элементарная ячейка для типа Γ_t является произвольным параллелепипедом (см. рис. 7), в вершинах которого находятся узлы решетки Браве. Она инвариантна к преобразованиям группы S_2 .

Моноклинная система M (группа C_{2h}). В моноклинной системе возможны два типа решеток Браве. Первый тип решеток Γ_m , называемый простым, показан на рис. 8, а. Расположение базисных векторов для этого типа характеризуется условиями

$$a_3 \perp a_1, \quad a_3 \perp a_2.$$

Вектор a_3 параллелен оси второго порядка c_2 , а векторы a_1 и a_2 лежат в плоскости отражения σ_h . Элементарная ячейка в типе Γ_m является прямым параллелепипедом с произвольным основанием. Она инвариантна по отношению ко всем операциям группы C_{2h} . Узлы решетки Браве находятся в вершинах элементарной ячейки.

Для второго типа решеток Браве моноклинной системы, изображенного на рис. 8, б, расположение базисных векторов характеризуется условиями

$$2a_3 - a_1 \perp a_1, \quad 2a_3 - a_1 \perp a_2.$$

Этот тип решетки называется решеткой с центрированными основаниями и обозначается Γ_m^b . В этом типе элементарная ячейка (показанная на рис. 8, б пунктиром) не является инвариантной к преобразованиям группы C_{2h} , хотя, конечно, решетка, составленная из этих ячеек, при таких преобразованиях преобразуется сама в себя, т. е. каждый базисный вектор a_1 , a_2 или a_3 превращается в линейную комбинацию (5.2) с целочисленными коэффициентами.

Для решетки Γ_m^b также можно при помощи векторов a_1 , a_2 и a_3 построить параллелепипед, инвариантный к группе C_{2h} . Это прямой параллелепипед, построенный на векторах a_1 , a_2 и $2a_3 - a_1$ (на рис. 8, б показан сплошными линиями); он

называется параллелепипедом Браве. В случае простой решетки параллелепипед Браве совпадает с элементарной ячейкой, при этом узлы решетки Браве находятся в его вершинах и на каждый параллелепипед приходится один узел. В решетке Γ_m^b узлы решетки Браве находятся, кроме того, и в центрах боковых (по отношению к оси c_2) граней, поэтому решетка Γ_m^b и называется решеткой с центрированными основаниями. В этой решетке параллелепипед Браве содержит два узла.

Параллелепипед Браве для моноклинной системы определяется четырьмя параметрами: высотой, длинами ребер основания и углом между ними, поэтому решетки Γ_m и Γ_m^b моноклинной системы определяются этими четырьмя произвольными

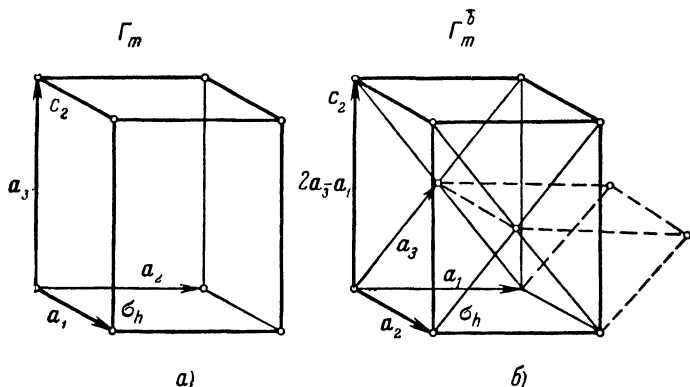


Рис. 8. Базисные векторы решетки Браве моноклинной системы. а) Простая решетка Γ_m ; б) решетка с центрированными основаниями Γ_m^b (пунктиром показана элементарная ячейка).

параметрами. Из рис. 8, б видно, что никаким непрерывным преобразованием без понижения симметрии (т. е. непрерывным изменением указанных выше четырех параметров) решетки Γ_m и Γ_m^b не могут быть сведены одна к другой.

Для каждой из решеток Браве, относящихся к одной из шести систем (исключение составляет гексагональная система), можно построить параллелепипед Браве, т. е. наименьший по объему инвариантный параллелепипед, построенный на базисных векторах. При этом в общем случае узлы решетки Браве находятся не только в вершинах параллелепипеда Браве, но также могут быть в центре параллелепипеда и в центрах его граней. Решетку Браве кристалла можно построить из тождественных параллелепипедов Браве. Инвариантные параллелепипеды Браве в известном смысле удобнее для описания решетки Браве, чем элементарная ячейка, так как ее вид зависит от частного выбора базисных векторов a_1 , a_2 и a_3 .

Параллелепипед Браве в общем случае не совпадает с элементарной ячейкой, что видно на примере моноклинной системы, где для решеток типа Γ_m^b объем параллелепипеда Браве в два раза превышает объем элементарной ячейки. В то же время для простых решеток Γ_m (а также, конечно, и для Γ_t) элементарная ячейка совпадает с параллелепипедом Браве.

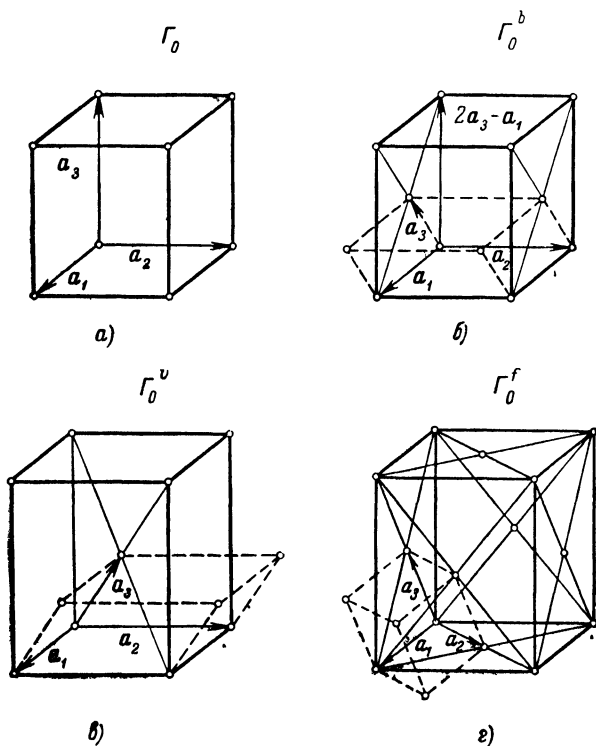


Рис. 9. Базисные векторы решеток Браве ортогональной системы. а) Простая решетка Γ_0 ; б) решетка с центрированными основаниями Γ_0^b ; в) объемноцентрированная решетка Γ_0^v ; г) гранецентрированная решетка Γ_0^f .

В дальнейшем при рассмотрении возможных типов решеток, относящихся к данной системе, мы будем исходить из параллелепипеда Браве для решеток данной системы.

Ортогональная система O (группа D_{2h}). В ортогональной системе имеются три взаимно перпендикулярные оси второго порядка, поэтому в качестве параллелепипеда Браве для этой системы можно взять параллелепипед с взаимно перпендикулярными ребрами (рис. 9). В ортогональной системе может быть четыре типа решеток Браве; они определяются возможным расположением узлов решетки в параллелепипеде Браве.

Простой решетке Γ_0 соответствует расположение узлов в вершинах параллелепипеда Браве (рис. 9, а). За базисные векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 могут быть выбраны три взаимно перпендикулярные ребра параллелепипеда

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_3.$$

Элементарная ячейка для решеток Γ_0 , совпадающая с параллелепипедом Браве, инвариантна относительно преобразований группы D_{2h} .

Решетка с центрированными основаниями Γ_0^b (рис. 9, б) аналогична решетке Γ_m^b в моноклинной системе; в этом типе решеток два узла решетки Браве находятся в центрах двух любых противоположных граней. В качестве базисных векторов для решеток Γ_0^b могут быть выбраны векторы, изображенные на рис. 9, б: \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 совпадают с ребрами параллелепипеда, а конец вектора \mathbf{a}_3 находится в центре прилегающей грани, т. е.

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp 2\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_1.$$

В ортогональной системе возможны два новых по сравнению с моноклинной системой типа решеток: объемноцентрированная и гранецентрированная решетки.

В объемноцентрированной решетке Γ_0^v один из узлов решетки Браве находится в центре параллелепипеда Браве (рис. 9, в). Базисные векторы при этом можно выбрать следующим образом: \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — по ребрам параллелепипеда Браве, а конец вектора \mathbf{a}_3 находится в центре параллелепипеда Браве:

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp 2\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1.$$

В гранецентрированной ортогональной решетке Γ_0^f центрированы все грани параллелепипеда Браве (рис. 9, г). Базисные векторы могут быть выбраны согласно рис. 9, г; они определяются условиями

$$\mathbf{a}_1 \perp 2\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1 \perp 2\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_1.$$

Параллелепипед Браве в ортогональной системе определяется тремя независимыми параметрами: длиной трех его ребер, поэтому все решетки ортогональной системы определяются тремя этими параметрами. Легко видеть, что никаким изменением длины ребер параллелепипеда Браве перечисленные выше типы решеток Браве не могут быть сведены одна к другой.

Элементарные ячейки для решеток Γ_0^b , Γ_0^v и Γ_0^f , показанные на рис. 9, б, в, г пунктиром, сами по себе не инвариантны к преобразованиям группы D_{2h} , их объем составляет соответственно $1/2$, $1/4$ и $1/8$ от объема параллелепипеда Браве.

Отметим, что в качестве параллелепипеда Браве в ортогональной системе можно было бы выбрать и прямой параллелепипед с ромбическим, а не прямоугольным основанием, который

также инвариантен к D_{2h} . В этом случае, конечно, мы также имели бы четыре типа решеток, причем, как видно из рис. 10, между ними имеется следующее соответствие:

	В основании прямоугольник	В основании ромб
Рис. 10, а	Простая Γ_0	С центрированными основаниями
Рис. 10, б	Объемноцентрированная Γ_0^v	Гранецентрированная
Рис. 10, в	С центрированными основаниями Γ_0^b	Простая
Рис. 10, г	Гранецентрированная Γ_0^f	Объемноцентрированная

Поскольку в моноклинной системе параллелепипед Браве является произвольным прямым параллелепипедом, то в ней

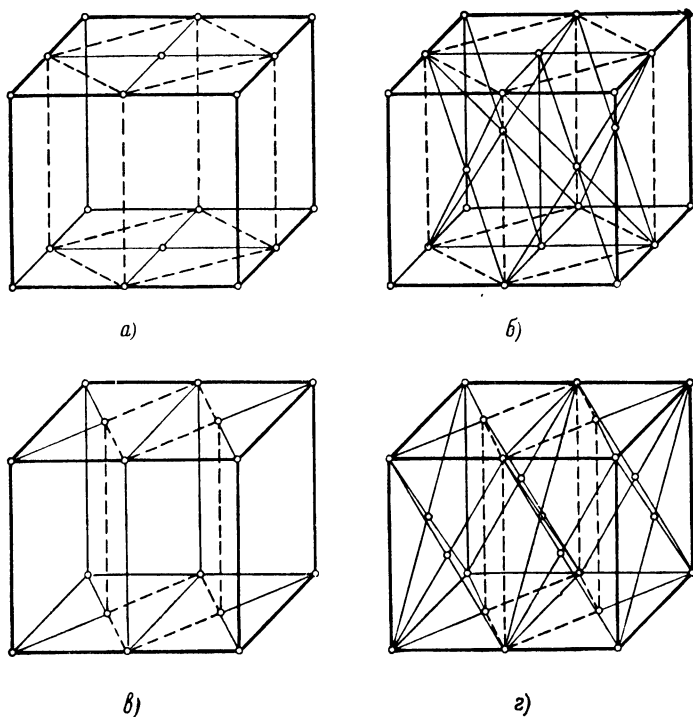


Рис. 10. Решетки Браве ортогональной системы при различном выборе параллелепипеда Браве.

исчезает разница между прямыми параллелепипедами с ромбическим и прямоугольным основаниями, что приводит к

эквивалентности в этой системе гранецентрированной и объемно-центрированной решетке Γ_m^b .

Тетрагональная система Q (группа D_{4h}). В группе D_{4h} одна из осей второго порядка группы D_{2h} становится осью четвертого порядка, поэтому параллелепипедом Браве в квадратной системе является прямой параллелепипед с квадратным основанием (рис. 11).

При переходе от ортогональной системы к квадратной прямоугольник и ромб, лежащие в основании двух возможных параллелепипедов Браве ортогональной системы, переходят в квадрат, т. е. разница между этими параллелепипедами снова исчезает.

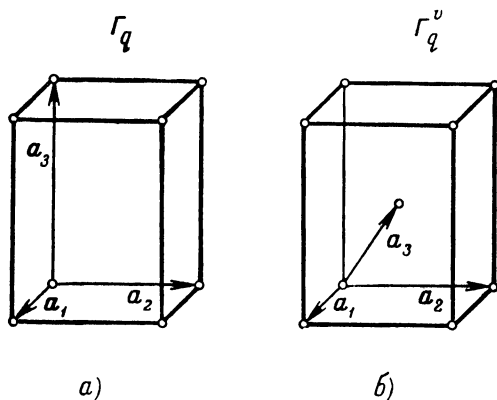


Рис. 11. Базисные векторы решеток Браве квадратной системы. а) Простая решетка Γ_q ; б) объемноцентрированная решетка Γ_q^v .

Поэтому, как ясно из рис. 10 и приведенной выше таблицы, квадратная решетка с центрированным основанием эквивалентна простой, а гранецентрированная квадратная решетка эквивалентна объемноцентрированной. Поэтому в квадратной системе возможны два типа решеток: простая Γ_q (рис. 11, а) и объемноцентрированная Γ_q^v (рис. 11, б).

Простая решетка аналогична простой решетке в группе D_{2h} . Ее базисные векторы удовлетворяют условиям

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \quad a_1 = a_2.$$

Объемноцентрированная решетка Γ_q^v также аналогична решетке Γ_0^v . Базисные векторы можно выбрать как и для решетки Γ_0^v :

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp 2\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1,$$

однако из-за наличия оси четвертого порядка имеется одно

дополнительное условие:

$$a_1 = a_2.$$

Поскольку параллелепипед Браве определяется двумя параметрами: длиной ребра и высотой, то и все решетки в квадратной системе определяются заданием этих параметров.

Кубическая система К (группа O_h). В кубической системе параллелепипедом Браве является куб. Поэтому в простой кубической решетке Γ_c элементарная ячейка является кубом, а основные векторы a_1 , a_2 и a_3 можно выбрать взаимно ортогональными и равными по величине (рис. 12, а):

$$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1, \quad a_1 = a_2 = a_3.$$

Объемноцентрированная кубическая решетка Γ_c^v является центрированным кубом. Указанные на рис. 12, б базисные векторы характеризуются условиями

$$a_1 \perp a_2, \quad a_1 \perp 2a_3 - a_2 - a_1 \perp a_2, \quad a_1 = a_2 = |2a_3 - a_2 - a_1|.$$

Выше было показано, что в квадратной системе гранецентрированная решетка эквивалентна объемноцентрированной, однако

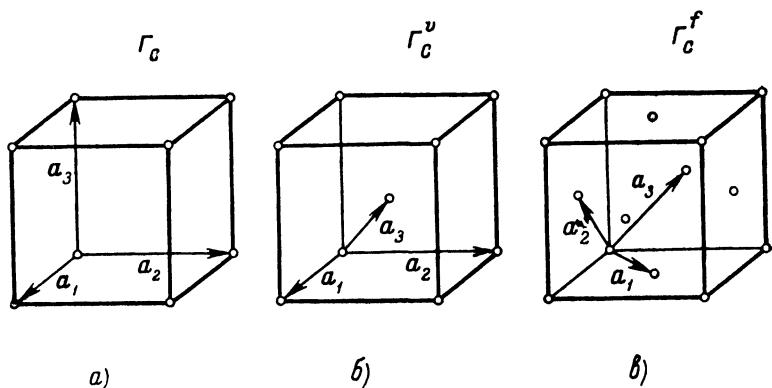


Рис. 12. Решетки Браве кубической системы. а) Простая решетка Γ_c ; б) объемноцентрированная решетка Γ_c^v ; в) гранецентрированная Γ_c^f .

в кубической системе такой эквивалентности нет, так как получаемый параллелепипед с квадратным основанием не является кубом; поэтому в кубической системе гранецентрированная решетка Γ_c^f снова становится самостоятельным типом. В этой решетке центрированы все грани куба (рис. 12, в). Базисные векторы a_1 , a_2 и a_3 можно выбрать так, чтобы они удовлетворяли условиям

$$a_1 + a_2 - a_3 \perp a_3 + a_2 - a_1, \quad a_3 + a_2 - a_1 \perp a_1 - a_2 + a_3, \\ a_1 + a_2 - a_3 \perp a_1 - a_2 + a_3, \quad a_1 = a_2 = a_3.$$

Поскольку куб определяется только одним параметром — длиной ребра, то все кубические решетки определяются одним параметром — постоянной решетки.

Ромбоэдрическая (тригональная) система R (группа D_{3d}). Симметрией D_{3d} обладает ромбоэдр — параллелепипед, который может быть получен при растяжении или сжатии куба вдоль его пространственной диагонали (рис. 13).

В ромбоэдрической системе возможен только один тип решеток Браве — простая решетка Γ_{rh} , в которой узлы расположены в вершинах ромбоэдра. Нетрудно убедиться при помощи

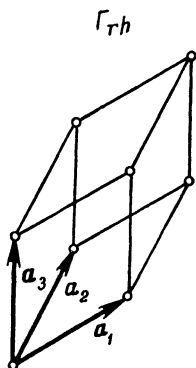


Рис. 13. Параллелепипед Браве ромбоэдрической решетки Γ_{rh} .

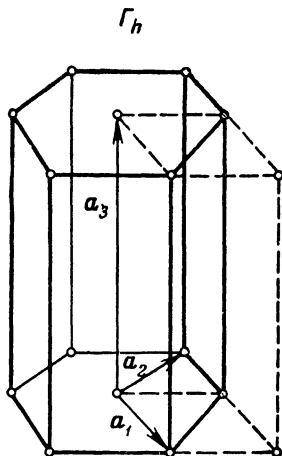


Рис. 14. Призма Браве решеток гексагональной системы Γ_h .

простого построения, что в тригональной системе гранецентрированная и объемноцентрированная решетки эквивалентны простой. Расположение базисных векторов решетки Γ_{rh} показано на рис. 13 и характеризуется условиями

$$a_1 = a_2 = a_3, \quad \widehat{a_1 a_2} = \widehat{a_1 a_3} = \widehat{a_2 a_3}.$$

Решетки тригональной системы определяются двумя параметрами: длиной ребер и углом между ними.

Гексагональная система H (группа D_{6h}). В группе D_{6h} имеется ось шестого порядка, поэтому не существует параллелепипеда, инвариантного к группе D_{6h} . Фигурой, инвариантной к преобразованиям группы D_{6h} , является шестигранная призма Браве (рис. 14).

В гексагональной системе также возможен только один тип решеток Браве — Γ_h , в котором узлы решетки Браве расположены в вершинах призмы Браве и в центрах ее оснований (см.

Типы векторных групп

Система	Тип	Основные векторы	Произвольные параметры параллелепипеда Браве
Триклинная $T (S_2)$	Простой Γ_t	Любые a_1, a_2, a_3	$\widehat{a_1}, a_2, \widehat{a_3}$, $\widehat{a_1 a_2}, \widehat{a_1 a_3}, \widehat{a_2 a_3}$
Моноклиная $M (C_{2h})$	Простой Γ_m	$a_3 \perp a_1, a_3 \perp a_2$	(рис. 8, а)
	С центрированными осевыми Γ_m^b	$2a_3 - a_1 \perp a_1, 2a_3 - a_1 \perp a_2$	(рис. 8, б)
Ортогональная $O (D_{2h})$	Простой Γ_0	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$	(рис. 9, а)
	С центрированными осевыми Γ_0^b	$a_1 \perp a_2 \perp 2a_3 - a_1 \perp a_1$	(рис. 9, б)
	Объемноцентрированный Γ_0^c	$a_1 \perp a_2 \perp 2a_3 - a_1 - a_2 \perp a_1$	(рис. 9, в)
	Гранецентрированный Γ_0^f	$a_1 \perp 2a_2 - a_1 \perp 2a_3 - a_1 \perp a_1$	(рис. 9, г)
Тетрагональная $Q (D_{4h})$	Простой Γ_q	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1, a_1 = a_2$	(рис. 11, а)
	Объемноцентрированный Γ_q^c	$a_1 \perp a_2 \perp 2a_3 - a_1 - a_2 \perp a_1, a_1 = a_2$	(рис. 11, б)
Ромбоэдрическая $R (D_{3d})$	Простой Γ_{rh}	$a_1 = a_2 = a_3, \widehat{a_1 a_2} = \widehat{a_1 a_3} = \widehat{a_2 a_3}$	$\widehat{a_1}, \widehat{a_1 a_2}$
Гексагональная $H (D_{6h})$	Простой Γ_h	$a_3 \perp a_1, a_3 \perp a_2, \widehat{a_1 a_2} = 2\pi/3, a_1 = a_2$	a_1, a_3
Кубическая $K (O_h)$	Простой Γ_c	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1, a_1 = a_2 = a_3$	(рис. 12, а)
	Гранецентрированный Γ_c^f	$a_1 + a_2 - a_3 \perp a_3 + a_2 - a_1,$ $a_3 + a_2 - a_1 \perp a_1 - a_2 + a_3,$ $a_1 + a_2 - a_3 \perp a_1 - a_2 + a_3,$ $a_1 = a_2 = a_3$	a_1
	Объемноцентрированный Γ_c^c	$a_1 \perp a_2, a_1 \perp 2a_3 - a_2 - a_1 \perp a_2,$ $a_1 = a_2 = 2a_3 - a_2 - a_1 $	(рис. 12, б)

рис. 14). Основные векторы в решетке Γ_h удовлетворяют условиям

$$\mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \quad \widehat{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2} = 2\pi/3.$$

Элементарная ячейка показана на рис. 14 пунктиром и является прямым параллелепипедом с ромбическим основанием. Угол между ребрами ромба равен $2\pi/3$.

Решетки Γ_h также определяются двумя независимыми параметрами: высотой призмы и длиной ребра основания.

Перечисленными выше решетками Браве и исчерпываются все возможные типы дискретных трехмерных решеток.

В табл. 5.1 приведены основные характеристики всех четырнадцати типов решеток Браве.

Схема подчинения систем

Из точечных групп симметрии кристаллической решетки наибольшей симметрией обладают группы O_h и D_{6h} . Остальные группы содержатся в них в качестве подгрупп. Так, из группы O_h можно перейти к S_2 путем последовательного уменьшения симметрии: $O_h \rightarrow D_{4h} \rightarrow D_{2h} \rightarrow C_{2h} \rightarrow S_2$; в этом ряду каждая последующая группа содержится в предыдущей в качестве подгруппы. Из группы O_h к группе C_{2h} можно перейти и через группу D_{3d} : $O_h \rightarrow D_{3d} \rightarrow C_{2h}$. Из группы D_{6h} к группе S_2 можно прийти через группы D_{2h} и C_{2h} : $D_{6h} \rightarrow D_{2h} \rightarrow C_{2h} \rightarrow S_2$.

Заметим также, что группа D_{3d} содержится в D_{6h} в качестве подгруппы, и, таким образом, можно было бы ожидать непрерывного перехода решеток от D_{6h} к S_2 по схеме $D_{6h} \rightarrow D_{3d} \rightarrow C_{2h} \rightarrow S_2$. Однако, как будет показано ниже, такой непрерывный переход кристаллических структур невозможен.

Для полного определения симметрии решетки Браве требуется указать наряду с группой симметрии решетки также и ее тип, поэтому надо рассмотреть, как при понижении симметрии решетки данный тип решетки высшей симметрии переходит в один из типов решеток низшей симметрии.

Будем называть систему A подчиненной системе B , $A \leftarrow B$, если точечная группа симметрии системы A является подгруппой точечной группы симметрии системы B и каждый тип решетки, принадлежащей системе B , может быть переведен в один из типов решетки A путем бесконечно малого непрерывного преобразования базисных векторов, соответствующего понижению симметрии точечной группы от B к A .

Как будет показано ниже, за исключением упоминавшегося выше случая групп D_{6h} и D_{3d} , из первого условия следует и второе.

Рассмотрим теперь более подробно схему подчинения систем.

Если растянуть (или сжать) куб вдоль одной из его осей четвертого порядка, то он превращается в прямой параллеле-

пипед с квадратным основанием — параллелепипед Браве для системы D_{4h} . При этом, очевидно, простая кубическая решетка переходит в простую квадратную: $\Gamma_c \rightarrow \Gamma_q$, а решетки Γ_c^f и Γ_c^o — в объемноцентрированную решетку Γ_q^o , так как раньше было показано, что в квадратной системе гранецентрированная решетка эквивалентна объемноцентрированной.

Параллелепипед Браве для квадратной системы можно двумя способами свести к параллелепипеду Браве для ортогональной системы.

1. При растяжении (или сжатии) его вдоль одной из боковых граней. В этом случае получается прямой параллелепипед с прямоугольными гранями, инвариантный к группе D_{2h} . При этом из четырех осей второго порядка группы D_{4h} остаются две оси, проходящие вдоль ребер параллелепипеда. При такой деформации решетки Γ_q переходят в Γ_0 , а Γ_q^o — в Γ_0^o .

2. Деформация осуществляется путем сдвига в плоскости основания параллелепипеда. При этом меняется угол между ребрами основания. В результате такого преобразования получается прямоугольный параллелепипед с ромбическим основанием, также инвариантный к D_{2h} , т. е. из четырех осей второго порядка остаются две другие оси, являющиеся диагоналями основания. Легко видеть, что при такой деформации решетки Γ_q переходят в Γ_0^b , а Γ_q^o — в Γ_0^f .

Инвариантный параллелепипед системы C_{2h} может быть получен из параллелепипеда Браве ортогональной системы при деформации основания, меняющей угол между ребрами основания. Как следует из обсуждавшейся выше связи типов решеток, в ортогональной и моноклинной системах при такой деформации типы решеток следующим образом переходят друг в друга:

$$\Gamma_0^b, \Gamma_0 \rightarrow \Gamma_m \quad \text{и} \quad \Gamma_0^o, \Gamma_0^f \rightarrow \Gamma_m^b.$$

При дальнейшем понижении симметрии, убирающем ось второго порядка, группа C_{2h} переходит в S_2 , при этом оба типа решеток в моноклинной системе переходят в решетку Γ_t :

$$\Gamma_0^b, \Gamma_0 \rightarrow \Gamma_t.$$

Рассмотрим теперь переход от O_h к S_2 через D_{3d} . Он осуществляется при растяжении (или сжатии) куба вдоль одной из его пространственных диагоналей, в результате чего куб переходит в ромбоэдр. При такой деформации все три кубические решетки переходят в простую решетку Γ_{rh} . Действительно, элементарная ячейка в решетках Γ_c^o и Γ_c^f является ромбоэдром, но с определенными углами между ребрами. При указанной

деформации элементарная ячейка превращается в ромбоэдр с произвольным углом между ребрами. В ромбоэдре имеются три оси второго порядка, перпендикулярные оси третьего порядка, и три диагональные плоскости отражения, содержащие ось третьего порядка. При этом каждая из осей второго порядка перпендикулярна одной из плоскостей отражения. При понижении симметрии от D_{3d} до C_{2h} остается одна из этих осей второго порядка и перпендикулярная ей плоскость отражения.

Такой переход может быть осуществлен, например, путем сдвиговой деформации (рис. 15), изменяющей один из углов у

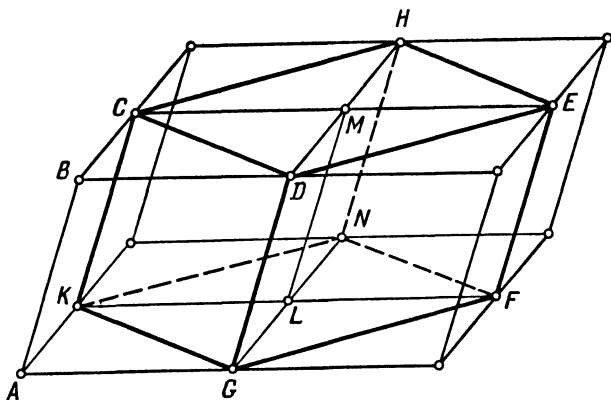


Рис. 15. Соответствие решеток Браве при переходе от ромбоэдрической к моноклинной системе.

вершины, например CBD , и изменением длины ребра AB и параллельных ему ребер CK , DG , ML . Получаемый при этом параллелепипед, инвариантный к C_{2h} , показан на рис. 15 жирными линиями. Его грань $EFGD$ является произвольным параллелограммом и лежит в одной из плоскостей отражения. Грани $CDEH$ и $CDGK$ являются прямоугольниками и перпендикулярны плоскости $EFGD$, так как их ребра CD , HE , KG и NF параллельны оси второго порядка.

Как видно из рис. 15, при этом решетка Γ_{rh} переходит в решетку с центрированными основаниями Γ_0^b . Этот результат можно получить и непосредственно, сравнивая элементарные ячейки для решеток Γ_{rh} , Γ_0^b и Γ_0 , изображенные на рис. 9 и 13, так как очевидно, что никакая малая деформация базисных векторов не сможет перевести решетку Γ_{rh} , где $\widehat{a_1 a_2} = \widehat{a_1 a_3} = \widehat{a_2 a_3}$, в простую решетку Γ_0 , для которой $a_3 \perp a_1$, $a_3 \perp a_2$.

Хотя в группе D_{6h} группа D_{3d} содержится в качестве подгруппы, никаким малым преобразованием базисных векторов невозможно гексагональную решетку перевести в ромбоэдриче-

скую, так как для гексагональных решеток Γ_h базисные векторы удовлетворяют условиям $\mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_2$, $a_1 = a_2 \neq a_3$ и их никаким малым преобразованием нельзя подчинить условиям $\widehat{\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1} = \widehat{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2} = \widehat{\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3}$ и $a_1 = a_2 = a_3$, выполняющимся для решеток ромбоэдрической системы.

Группа D_{2h} содержится в группе D_{6h} в качестве подгруппы, так как наряду с инверсией D_{6h} имеет три взаимно перпендикулярные оси второго порядка: C_6^3 и две горизонтальные оси

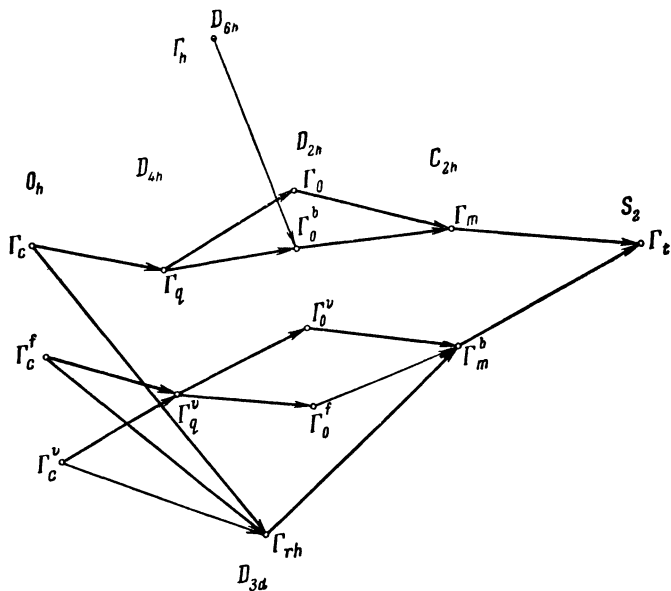


Рис. 16. Схема подчинения систем.

второго порядка, лежащие в плоскости, перпендикулярной оси шестого порядка.

При деформации вдоль горизонтальных осей второго порядка симметрия D_{6h} понижается до D_{2h} , а элементарная ячейка решетки Γ_h превращается в прямой параллелепипед с ромбическим основанием, который согласно таблице на стр. 49 эквивалентен решетке Γ_0^b . Поэтому при переходе от гексагональной системы к ортогональной системе простая гексагональная решетка переходит в решетку с центрированными основаниями Γ^b .

Рассмотренная схема подчинения систем и соответствие между типами решеток в различных системах представлены на рис. 16.

Кристаллические классы

Задание системы и типа решетки характеризует группу симметрии кристалла не полностью, так как они определяют лишь симметрию его решетки Браве. В сложных решетках, имеющих более одного атома в элементарной ячейке, совмещение решеток Браве еще не означает совмещения всех эквивалентных точек. Поэтому симметрия кристаллической решетки может и не совпадать с симметрией ее решетки Браве, а быть ниже ее.

Например, хотя решетки Браве всех кристаллов содержат инверсию, инверсия не является элементом симметрии у всех кристаллов.

Назовем эквивалентными направлениями в кристалле такие направления, вдоль которых все физические свойства кристалла одинаковы. Ясно, что два любых эквивалентных направления в кристалле содержат совокупность одинаковым образом последовательно расположенных эквивалентных точек кристалла, например одинаковые последовательности атомов.

Рассмотрим какой-нибудь элемент r точечной группы симметрии \mathcal{H} решетки Браве. По определению группы \mathcal{H} при преобразовании r решетка Браве переходит сама в себя.

Рассмотрим теперь, как преобразуются при этом все другие точки кристалла и все направления в кристалле. Очевидно, могут быть три возможности.

1. При преобразовании r все точки кристалла, а не только узлы решетки Браве, переходят в эквивалентные. При этом, конечно, и все направления переходят в эквивалентные. В этом случае элемент r принадлежит к группе симметрии кристалла G .

2. При преобразовании r все направления переходят в эквивалентные, но не все точки переходят в эквивалентные.

3. Не все направления переходят в эквивалентные.

В последнем случае преобразование r вообще не входит в группу симметрии кристалла.

Рассмотрим теперь преобразования r , переводящие все направления в кристалле в эквивалентные. Ясно, что для того, чтобы такое преобразование переводило и все точки кристалла в эквивалентные, нужно еще совершить параллельный перенос — трансляцию на некоторый вектор α , не являющийся вектором решетки Браве. Поэтому, хотя сам по себе r и не входит в группу симметрии кристалла G , элемент $t_\alpha r$ принадлежит группе G .

Элементы точечной группы \mathcal{H} , переводящие все направления в кристалле в эквивалентные (т. е. элементы r в первом и втором случае), образуют некоторую точечную группу F , которая является подгруппой \mathcal{H} . Группа F есть группа симметрии

направлений в кристалле и называется кристаллическим классом.

Для макроскопического тела группой симметрии является его группа направлений, поэтому именно кристаллический класс определяет макросимметрию кристалла. В частности, число независимых компонент и вид макроскопических тензоров определяются точечной группой F , характеризующей кристаллический класс.

Поскольку каждый класс является подгруппой группы симметрии векторной группы, то всего существует 32 различных кристаллических класса по числу различных подгрупп у семи групп симметрии решеток Браве: $e, S_2, C_s, C_2, C_{2h}, C_{2v}, D_2, D_{2h}, S_4, D_{2d}, C_4, C_{4v}, C_{4h}, D_4, D_{4h}, C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}, C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}, T, T_h, T_d, O, O_h$. При этом один и тот же класс является подгруппой различных точечных групп, определяющих симметрию решетки Браве. Так, S_2 входит во все семь точечных групп, определяющих систему.

Кристаллический класс относят к системе с наименьшей симметрией, в которой он впервые появляется, т. е. кристаллический класс F относят к системе \mathcal{K} , если F содержится в \mathcal{K} в качестве подгруппы и ни одна система \mathcal{K}_1 , подчиненная \mathcal{K} , не содержит группу F . Такое распределение классов по системам основано на следующих соображениях: кристаллы, у которых решетка Браве обладала бы более высокой симметрией, чем это требуется кристаллическим классом, была бы неустойчивой и любые малые воздействия, например, тепловое расширение, изменения взаимодействия между атомами и т. д., привели бы к понижению симметрии решетки Браве до наименьшей, допустимой кристаллическим классом. Поэтому каждый кристаллический класс относится к одной системе. Исключением является гексагональная система, решетки которой, как отмечалось выше, никакой бесконечно малой деформацией не могут быть переведены в решетки ромбоэдрической системы. Поэтому классы

Таблица 6.1

Система	Классы						
Триклинная	e, S_2						
Моноклинная	C_s, C_2, C_{2h}						
Ромбическая	C_{2v}, D_2, D_{2h}						
Тетрагональная	$S_4, D_{2d}, C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}$						
Ромбоэдрическая	$C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}$						
Гексагональная	$C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}$						
Кубическая	T, T_h, T_d, O, O_h						

ромбоэдрической системы осуществляются и в гексагональной системе.

Распределение тридцати двух кристаллических классов по системам приведено в табл. 6.1 *).

Пространственная группа

Указания кристаллического класса и типа решетки еще недостаточно для характеристики симметрии кристалла. Класс кристалла характеризует симметрию группы направлений, однако для описания пространственной группы, определяющей микросимметрию кристалла, как указано выше, требуется еще указать величину вектора трансляции α_r , которая требуется для того, чтобы совместить все точки кристалла с эквивалентными. Поэтому каждому «поворотному» элементу r из группы направлений F , т. е. поворотам, отражениям и зеркальным поворотам, соответствует некоторая нетривиальная трансляция t_{α_r} .

Таким образом, каждый элемент g пространственной группы G имеет вид

$$g = t_{\alpha} t_r = t_{\alpha + \alpha} r = (r | \alpha + \alpha), \quad (6.1)$$

где r — «поворотный» элемент, входящий в кристаллический класс, а t_{α} — соответствующая ему «нетривиальная» трансляция.

Если в точечной группе, где все элементы симметрии имеют общую точку, для определения группы достаточно перечислить все ее элементы симметрии, то в пространственной группе нужно еще указать положение каждого поворотного элемента внутри элементарной ячейки, что фактически и осуществляется заданием вектора α .

Поскольку «поворотное» преобразование r переводит все узлы решетки Браве друг в друга, а α не является целым вектором решетки Браве, то преобразование $t_{\alpha} r$ не совмещает узлы решетки Браве друг с другом. Наличие такой операции в группе симметрии кристалла означает, что кристаллическая решетка является сложной, т. е. в элементарной ячейке имеются по крайней мере два атома одинакового сорта. Такую сложную решетку, как отмечалось выше, можно рассматривать как систему вдвинутых друг в друга тождественных решеток Браве. При операциях $t_{\alpha} r$ с $\alpha \neq a$ узлы каждой из таких решеток переходят в тождественные узлы другой из этих решеток.

Все пространственные группы, принадлежащие к одному классу, отличаются различным набором векторов α_r , соответствующих различным элементам симметрии r , которые образуют группу F . Векторы α можно разложить по векторам a_1 , a_2 и a_3 :

$$\alpha = \gamma_1 a_1 + \gamma_2 a_2 + \gamma_3 a_3. \quad (6.2)$$

*) Кристаллы ромбоэдрических классов с гексагональной решеткой Браве относят к ромбоэдрической системе.

Числа γ_1 , γ_2 и γ_3 можно считать положительными и меньшими единицы *):

$$0 \leq \gamma_1 < 1, \quad 0 \leq \gamma_2 < 1, \quad 0 \leq \gamma_3 < 1. \quad (6.3)$$

Набор векторов α_i не является произвольным, так как эти векторы удовлетворяют определенным соотношениям, связанным с тем, что поворотные элементы r_i сами образуют группу. Действительно, пусть «поворотному» элементу r_1 соответствует вектор нетривиальной трансляции α_1 , элементу r_2 соответствует α_2 . Так как

$$t_{\alpha_1} r_1 t_{\alpha_2} r_2 = t_{\alpha_1 + r_1 \alpha_2} r_1 r_2,$$

то элементу $r_3 = r_1 r_2$ может соответствовать не произвольный вектор α_3 , а вектор $\alpha_3 = \alpha_1 + r_1 \alpha_2 + a$, где a — целый вектор решетки Браве, выбранный таким образом, чтобы α_3 удовлетворяло условию (6.3).

Поэтому нетривиальные трансляции a для всех поворотных элементов r из группы направлений однозначно определяются заданием векторов нетривиальных трансляций для образующих элементов группы направлений. При этом определяющие соотношения между образующими «поворотными» элементами группы F дают возможные типы векторов нетривиальных трансляций образующих элементов и, таким образом, возможные типы пространственных групп, принадлежащих одному кристаллическому классу.

Всего оказывается возможным 230 различных пространственных групп, распределенных по 7 системам, 14 типам и 32 кристаллическим классам.

Рассмотрим структуру пространственных групп. Во всякой пространственной группе есть абелева подгруппа трансляций на основные периоды решетки T с элементами t_a . Эта подгруппа является нормальным делителем пространственной группы.

Действительно, все элементы, сопряженные с t_a , также являются трансляциями и, следовательно, содержатся в T :

$$t_a r t_a (t_a r)^{-1} = t_a r t_a r^{-1} t_{-a} = t_{ra}. \quad (6.4)$$

Разобьем все элементы пространственной группы G на классы смежности по подгруппе трансляций и построим фактор-группу по этой подгруппе.

Классами смежности являются произведения всевозможных трансляций t_a на каждый из элементов $t_{\alpha_i} r_i$, т. е.

$$\{T\}, \{T t_{\alpha_1} r_1\}, \dots, \{T t_{\alpha_n} r_n\}, \quad (6.5)$$

где a — любой вектор (5.1).

*) Если не требовать, чтобы γ_1 , γ_2 и γ_3 были положительными, то их можно выбрать так, чтобы

$$|\gamma_1| \leq 1/2, \quad |\gamma_2| \leq 1/2, \quad |\gamma_3| \leq 1/2.$$

Фактор-группа любой пространственной группы, принадлежащей данному классу, изоморфна точечной группе направлений, характеризующей кристаллический класс. При этом элементу r_i группы F взаимно однозначно сопоставляется класс смежности $Tt_{a_i}r_i$:

$$r_i \leftrightarrow \{Tt_{a_i}r_i\}. \quad (6.6)$$

Действительно, в соответствии с (2.22) произведение представителей классов смежности $\{Tt_{a_1}r_1\}$ и $\{Tt_{a_2}r_2\}$

$$t_{a_1}t_{a_1}r_1t_{a_2}t_{a_2}r_2 = t_{a_1+a_2}r_1r_2$$

есть элемент класса смежности $\{Tt_{a_3}r_3\}$, который соответствует элементу $r_3 = r_1 \cdot r_2$.

Таким образом, пространственные группы, принадлежащие к одному классу, гомоморфны группе F , характеризующей кристаллический класс. При этом ядром гомоморфизма является группа трансляций T , а фактор-группа по этой подгруппе изоморфна группе F . Это не означает, конечно, изоморфизма самих пространственных групп, относящихся к одному кристаллическому классу.

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП СИММЕТРИИ

§ 7. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Закончив рассмотрение групп симметрии, перейдем к теории представлений этих групп. Теория представлений имеет особое значение, так как на ней фактически основаны все физические приложения теории групп.

Возьмем произвольную однозначную функцию φ_1 координат точки $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ в координатной системе xyz . Перейдем к новой координатной системе $x'y'z'$, получаемой из xyz преобразованием симметрии g_s . Согласно (2.29) координаты точки \mathbf{x} в новой системе координат — x'_1, x'_2, x'_3 равны

$$x'_i = \sum_j \mathcal{R}_{ji}(g_s) x_j = (g_s^{-1} \mathbf{x})_i. \quad (7.1)$$

Заменим теперь x_i в $\varphi_1(\mathbf{x})$ на x'_i и выразим x'_i через x_i согласно (7.1). В результате получим новую функцию $\varphi_s(\mathbf{x})$. Будем рассматривать это преобразование как результат действия оператора $\mathcal{D}(g_s)$ на функцию $\varphi_1(\mathbf{x})$:

$$\mathcal{D}(g_s) \varphi_1(\mathbf{x}) = \varphi_1(g_s^{-1} \mathbf{x}) = \varphi_s(\mathbf{x}). \quad (7.2)$$

Применяя последовательно все операции g к функции φ_1 , получим h функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_h$. Однако в общем случае не все из этих функций являются линейно независимыми и часть из них могут выражаться через другие. Пусть общее число линейно независимых или базисных функций φ_i равно n , тогда каждую из функций $\varphi_s(\mathbf{x})$ можно выразить в виде линейной комбинации этих функций. Применим операцию $\mathcal{D}(g)$ к одной из базисных функций $\varphi_i(\mathbf{x})$. Тогда новая функция $\varphi_i(g^{-1} \mathbf{x})$ может быть представлена как линейная комбинация базисных функций:

$$\mathcal{D}(g) \varphi_i(\mathbf{x}) = \varphi_i(g^{-1} \mathbf{x}) = \sum_j \mathcal{D}_{ji}(g) \varphi_j(\mathbf{x}). \quad (7.3)$$

Конкретный вид матриц $\mathcal{D}(g)$ и их размерность n зависят от выбора функции $\varphi_1(\mathbf{x})$. Заметим, что преобразование (7.1) также можно рассматривать как результат применения оператора $\mathcal{D}(g_s)$ к векторным функциям x_1, x_2, x_3 . При этом в соответствии с (7.2) $\mathcal{D}(g) x_i = (g^{-1} \mathbf{x})_i$, а согласно (7.3) и (7.1) матрицы $\mathcal{D}(g) = \mathcal{R}(g)$.

Убедимся, что при указанном определении оператора $\mathcal{D}(g)$ оператор $\mathcal{D}(g_s)$, соответствующий операции $g_s = g_p g_q$, равен произведению операторов:

$$\mathcal{D}(g_p g_q) = \mathcal{D}(g_p) \mathcal{D}(g_q). \quad (7.4)$$

Действительно, из (7.2) следует, что

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(g_p) \mathcal{D}(g_q) \varphi_i(\mathbf{x}) &= \mathcal{D}(g_p) \varphi_i(\mathcal{R}(g_q) \mathbf{x}) = \\ &= \varphi_i(\mathcal{R}(g_q) \mathcal{R}(g_p) \mathbf{x}) = \varphi_i(g_q^{-1} g_p^{-1} \mathbf{x}) = \\ &= \varphi_i((g_p g_q)^{-1} \mathbf{x}) = \varphi_i(g_s^{-1} \mathbf{x}) = \mathcal{D}(g_s) \varphi_i(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Проверим, что при выбранном в (7.3) порядке следования индексов в сумме аналогичное правило выполняется и для матриц:

$$\mathcal{D}(g_p) \mathcal{D}(g_q) \varphi_i = \mathcal{D}(g_p) \sum_j \mathcal{D}_{ji}(g_q) \varphi_j = \sum_j \mathcal{D}_{ji}(g_q) \sum_k \mathcal{D}_{kj}(g_p) \varphi_k.$$

С другой стороны,

$$\mathcal{D}(g_s) \varphi_i = \sum_k \mathcal{D}_{ki}(g_s) \varphi_k.$$

Следовательно, в соответствии с правилами умножения матриц

$$\mathcal{D}(g_p g_q) = \mathcal{D}(g_p) \mathcal{D}(g_q). \quad (7.5)$$

Если каждому элементу g группы \mathcal{G} сопоставлена квадратная матрица $\mathcal{D}(g)$ порядка n таким образом, что элементу g_s , равному произведению элементов $g_p g_q$, при любых p и q соответствует матрица $\mathcal{D}(g_s)$, равная произведению матриц $\mathcal{D}(g_p) \mathcal{D}(g_q)$, то такая совокупность матриц $\mathcal{D}(g)$ называется представлением группы \mathcal{G} размерности n и обозначается символом \mathcal{D} . Совокупность линейно независимых функций φ_i ($i = 1, 2, \dots, n$), преобразующаяся в соответствии с (7.3), называется базисом представления \mathcal{D} . Совокупность операторов $\mathcal{D}(g)$, определенных указанным выше способом и удовлетворяющих условию (7.4), образует операторное представление группы \mathcal{G} .

Из n произвольных линейно независимых функций всегда можно путем линейных комбинаций составить n новых функций, которые будут взаимно ортогональны и нормированы на единицу. Поэтому в дальнейшем везде предполагается, что в качестве базиса выбрана система ортонормированных функций, т. е. функций, удовлетворяющих условию

$$\langle \varphi_i \varphi_j \rangle = \int \varphi_i^* \varphi_j d\mathbf{x} = \delta_{ij}. \quad (7.6)$$

Если умножить уравнение (7.3) на $\varphi_j^*(\mathbf{x})$ и проинтегрировать по \mathbf{x} , то, учитывая (7.6), получим

$$\mathcal{D}_{ji}(g) = \int \varphi_j^* \mathcal{D}(g) \varphi_i d\mathbf{x} = \langle \varphi_j \mathcal{D}(g) \varphi_i \rangle. \quad (7.7)$$

Формула (7.7) соответствует обычному определению матричного элемента оператора в квантовой механике.

Выбор системы ортонормированных функций не является однозначным. От заданной системы φ_i всегда можно перейти к новой системе φ'_i , используя линейное преобразование

$$\varphi'_i = \mathbf{S}\varphi_i = \sum_j S_{ji}\varphi_j. \quad (7.8)$$

Для того чтобы новая система функций φ'_j также была ортонормированной, надо, чтобы матрица \mathbf{S} была унитарной, т. е. удовлетворяла условию

$$\mathbf{S}^+ = \tilde{\mathbf{S}}^* = \mathbf{S}^{-1}, \quad \text{т. е.} \quad S_{ji}^{-1} = S_{ij}^* \quad (7.9)$$

или

$$\tilde{\mathbf{S}}^* \mathbf{S} = \mathbf{S}^* \tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{I}. \quad (7.10)$$

Здесь \mathbf{S}^+ означает матрицу, эрмитово сопряженную с \mathbf{S} :

$$\mathbf{S}^+ = \tilde{\mathbf{S}}^*,$$

где звездочка, как обычно, обозначает комплексное сопряжение, а тильда (\sim) — знак транспонирования.

Формула (7.10) показывает, что унитарная матрица обладает свойством ортогональности по столбцам и строкам, т. е.

$$\sum_k S_{ki}^* S_{kj} = \delta_{ij}, \quad \sum_k S_{ik}^* S_{jk} = \delta_{ij}. \quad (7.10a)$$

При выполнении (7.10)

$$\langle \varphi'_i | \varphi'_j \rangle = \sum_{lk} S_{li}^* S_{kj} \langle \varphi_l | \varphi_k \rangle = \sum_{lk} S_{li}^* S_{kj} \delta_{lk} = \delta_{ij}.$$

Для вещественных матриц условие унитарности переходит в условие ортогональности (2.24).

Если базисные функции ортонормированы, то матрицы $\mathcal{D}(g)$ в (7.3) также унитарны. Докажем это. Значение интеграла (7.6) не изменяется при переходе к любым переменным. Если мы перейдем к переменным \mathbf{x}' , определяемым (7.1), и учтем, что при преобразованиях симметрии объем не меняется, т. е. $dx'_1 dx'_2 dx'_3 = dx_1 dx_2 dx_3$, так как якобиан преобразования

$$\left| \frac{\partial (x'_1, x'_2, x'_3)}{\partial (x_1, x_2, x_3)} \right| = 1,$$

то согласно (7.3)

$$\begin{aligned} \int \varphi_i^*(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \int \varphi_i^*(\mathbf{x}') \varphi_j(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \int \varphi_i^*(g^{-1}\mathbf{x}) \varphi_j(g^{-1}\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \sum_{kl} \mathcal{D}_{ki}^*(g) \mathcal{D}_{lj}(g) \int \varphi_k^*(\mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_k \mathcal{D}_{ki}^*(g) \mathcal{D}_{kj}(g) = \delta_{ij}; \end{aligned}$$

следовательно,

$$\mathcal{D}^{-1}(g) = \mathcal{D}(g^{-1}) = \mathcal{D}^+(g) = \tilde{\mathcal{D}}^*(g). \quad (7.11)$$

Набор n функций φ_i можно рассматривать как вектор φ в n -мерном пространстве с компонентами φ_i и записывать его в виде столбца. Оператор \mathcal{S} , определяемый (7.8), переводит вектор φ в вектор φ' с компонентами φ'_i (7.8).

Рассмотрим теперь, как преобразуются матрицы $\mathcal{D}(g)$ при переходе от представления φ_i к представлению φ'_i . В новом представлении матричный элемент равен

$$\mathcal{D}'_{ij}(g) = \langle \varphi'_i | \mathcal{D}(g) | \varphi'_j \rangle.$$

Выразив φ' через φ в соответствии с (7.8) и учитывая (7.9), получим

$$\mathcal{D}'_{ij}(g) = \sum_{kl} S_{ki}^* \mathcal{D}_{kl} S_{lj} = \sum_{kl} S_{ik}^{-1} \mathcal{D}_{kl} S_{lj} = (\mathbf{s}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{S})_{ij}$$

или

$$\mathcal{D}'(g) = \mathbf{s}^{-1} \mathcal{D}(g) \mathbf{S}, \quad (7.12)$$

что соответствует обычному правилу преобразования матриц в квантовой механике при переходе к новому представлению.

Представления, которые могут быть получены одно из другого унитарным преобразованием (7.12), называются эквивалентными. В случае же равенства матриц $\mathcal{D}(g)$ и $\mathcal{D}'(g)$ представления \mathcal{D} и \mathcal{D}' называются тождественными.

Важным свойством преобразования (7.12) является то, что оно оставляет неизменным след матрицы $\mathcal{D}(g)$, т. е. сумму ее диагональных элементов. Действительно, согласно (7.12)

$$\text{Sp } \mathcal{D}' = \sum_i \mathcal{D}'_{ii} = \sum_{ikl} S_{ik}^{-1} \mathcal{D}_{kl} S_{li} = \sum_{lk} \mathcal{D}_{kl} \delta_{kl} = \sum_k \mathcal{D}_{kk} = \text{Sp } \mathcal{D}. \quad (7.13)$$

Кроме того, при преобразовании (7.12) сохраняется и определитель матрицы $\mathcal{D}(g)$, так как

$$|\mathbf{s}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{S}| = |\mathbf{s}^{-1}| |\mathcal{D}| |\mathbf{S}| = |\mathcal{D}|.$$

Общее число матриц $\mathcal{D}(g)$ совпадает с числом элементов группы h . Однако среди этих матриц могут быть и одинаковые. Если все h матриц различны, то представление называется точным; если же нескольким элементам группы соответствуют одни и те же матрицы, то такое представление называется неточным. В последнем случае группа \mathcal{G} гомоморфна группе, составленной из фактически различных матриц \mathcal{F} . Ядро гомоморфизма составляют t элементов совокупности \mathcal{E} : e, e_2, \dots, e_m , которым соответствует единичная матрица \mathbf{I} . Эти элементы, как показано в § 1, образуют инвариантную подгруппу группы \mathcal{G} , а всем элементам класса смежности $g_k \mathcal{E}$, составленного из элементов

$g_k e_i$ ($i = 1, 2, \dots, m$), где $g_k \in \mathcal{G}$, соответствует одна матрица $\mathcal{F}_k = \mathcal{D}(g_k)$. Следовательно, матрицы $\mathcal{D}(g)$, являющиеся неточным представлением группы \mathcal{G} , всегда являются точным представлением ее фактор-группы по подгруппе \mathcal{E} . Поэтому среди возможных представлений группы \mathcal{G} есть представления всех фактор-групп, которые могут быть построены из \mathcal{G} .

Как указывалось выше, размерность представления определяется числом базисных функций φ_i . Однако может оказаться, что соответствующим образом выбранное унитарное преобразование \mathcal{S} разбивает эту систему функций на две или более групп $\varphi^1, \varphi^2, \dots$, так что при всех преобразованиях симметрии каждая из функций $\varphi_i^v(g^{-1}\mathbf{x})$ выражается только через функции этой же группы:

$$\mathcal{D}(g) \varphi_i^v(\mathbf{x}) = \varphi_i^v(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^v \varphi_j^v,$$

т. е. линейное пространство функций распадается на инвариантные подпространства. Следовательно, набор матриц $\mathcal{D}(g)$ для всех элементов группы унитарным преобразованием (7.12) превращается в систему квазидиагональных матриц вида

$$\mathcal{D}(g) = \left\| \begin{array}{ccc} \mathcal{D}_1(g) & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_2(g) & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{D}_3(g) \end{array} \right\|. \quad (7.14)$$

Это означает, что каждый из наборов матриц $\mathcal{D}_v(g)$ образует представление группы. В этом случае представление \mathcal{D} называется приводимым. Если же никакими унитарными преобразованиями дальнейшее разложение систем функций φ^v на группы не связанных друг с другом функций невозможно, то представление \mathcal{D}_v называется неприводимым. Приведение матриц \mathcal{D} к виду (7.14) называется разложением приводимого представления \mathcal{D} на неприводимые представления \mathcal{D}_v .

В общем случае среди представлений \mathcal{D}_v могут оказаться и взаимно эквивалентные представления. Соответствующим унитарным преобразованием эти эквивалентные представления всегда можно привести к тождественному виду.

Неприводимые представления играют особую роль в физических приложениях теории групп, поскольку, как будет показано ниже, волновые функции, преобразующиеся по одному неприводимому представлению, соответствуют одному и тому же собственному значению энергии. Поэтому, например, размерность неприводимых представлений сразу определяет возможную кратность вырождения термов.

В следующих параграфах будут рассмотрены свойства неприводимых представлений и будет показано, как практически может быть проведено разложение приводимого представления на неприводимые.

§ 8. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ, ХАРАКТЕРЫ

Матрицы, образующие неприводимые представления группы, обладают рядом замечательных свойств. Эти свойства следуют из фундаментальных лемм Шура.

Рассмотрим два набора квадратных матриц $\mathcal{D}(g)$ и $\mathcal{D}'(g)$, образующих представления группы \mathcal{G} с элементами $g \in \mathcal{G}$. Размерность этих матриц может быть различной. Пусть имеется некоторая прямоугольная матрица A , имеющая столько же строк, как и матрица \mathcal{D} , и число столбцов, равное размерности матрицы \mathcal{D}' , и такая, что для всех $g \in \mathcal{G}$

$$\mathcal{D}(g)A = A\mathcal{D}'(g). \quad (8.1)$$

Первая лемма Шура утверждает, что если представления \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν тождественны, т. е. $\mu = \nu$ и $\mathcal{D}_\mu(g) = \mathcal{D}_\nu(g)$, то $A = cI$, т. е. всякая матрица A , коммутирующая со всеми матрицами неприводимого представления $\mathcal{D}_\mu(g)$, кратна единичной матрице:

$$\text{если } \mathcal{D}_\mu(g)A = A\mathcal{D}_\mu(g), \text{ где } g \in \mathcal{G}, \text{ то } A = cI. \quad (8.1a)$$

При этом матрицы $\mathcal{D}_\mu(g)$ считаются унитарными.

Для доказательства (8.1a) проведем операцию эрмитового сопряжения над (8.1); учитывая, что $(AB)^+ = B^+A^+$, получим

$$A^+\mathcal{D}^+(g) = \mathcal{D}^+(g)A^+.$$

Умножив последнее уравнение слева и справа на $\mathcal{D}(g)$ и используя (7.11), получим

$$\mathcal{D}(g)A^+ = A^+\mathcal{D}(g).$$

Отсюда видно, что если соотношение (8.1) выполняется для матрицы A , то оно выполняется и для матрицы A^+ , а следовательно, и для эрмитовых матриц

$$A' = \frac{1}{2}(A + A^+) \quad \text{и} \quad A'' = \frac{i}{2}(A - A^+).$$

Всякую эрмитову матрицу, равно как и унитарную матрицу, можно привести унитарным преобразованием к диагональному виду. Если S — преобразование, диагонализующее A или A' , то из (8.1) следует:

$$\bar{\mathcal{D}}(g)a = a\bar{\mathcal{D}}(g),$$

где $\bar{\mathcal{D}} = S^{-1}\mathcal{D}S$, а $a = S^{-1}AS$ — диагональная матрица. В матричном виде последнее соотношение запишется:

$$\bar{\mathcal{D}}_{kl}(g)(a_{kk} - a_{ll}) = 0 \quad (k, l = 1, 2, \dots, h). \quad (8.16)$$

Из (8.16) следуют две возможности: либо все $a_{\mu\mu}$ одинаковы, т. е. матрица a кратна единичной, либо часть матричных элементов, например a_{kk} ($k = 1, 2, \dots, r$), не равны остальным

a_{ll} ($l = r + 1, \dots, h$). В последнем случае, согласно (8.1б), все матричные элементы

$$\mathcal{D}_{kl}(g) = 0 \quad \text{при} \quad k = 1, 2, \dots, r, \quad l = r + 1, r + 2, \dots, h,$$

а это означает, что все матрицы $\bar{\mathcal{D}}(g)$ разбиваются на блоки, т. е. могут быть представлены в виде (7.14), и каждая из подматриц с элементами $\bar{\mathcal{D}}_{kk'}(g)$ ($k, k' = 1, 2, \dots, r$) и $\bar{\mathcal{D}}_{ll'}(g)$ ($l, l' = r + 1, \dots, h$) осуществляют представление группы, т. е. представление \mathcal{D}_μ приводимо. Так как это допущение противоречит исходному предположению, то остается лишь первая возможность, т. е. для неприводимых представлений матрица $\mathbf{a} = \mathbf{cI}$, следовательно, и матрицы $\mathbf{A}' = \mathbf{SaS}^{-1}$ и \mathbf{A}'' кратны единичной, а поэтому и исходная матрица $\mathbf{A} = \mathbf{A}' - i\mathbf{A}''$ равна с точностью до константы единичной матрице.

Вторая лемма Шура утверждает, что если представления \mathcal{D} и \mathcal{D}' неприводимы и неэквивалентны, т. е. если $\mathcal{D} = \mathcal{D}_\mu$ и $\mathcal{D}' = \mathcal{D}_\nu$ и $\mu \neq \nu$, то единственная матрица \mathbf{A} , удовлетворяющая условию (8.1), есть нулевая матрица, т. е. матрица, у которой все элементы $A_{kl} = 0$, т. е.

$$\text{если } \mathcal{D}_\mu(g) \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathcal{D}_\nu(g), \quad g \in \mathcal{G} \text{ и } \mu \neq \nu, \text{ то } \mathbf{A} = 0. \quad (8.2)$$

Если же для двух представлений \mathcal{D} и \mathcal{D}' матрица $\mathbf{A} \neq 0$, то по крайней мере одно из этих представлений приводимо, причем \mathcal{D} и \mathcal{D}' содержат одно или несколько общих неприводимых представлений.

Заметим, что если представления \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν эквивалентны, т. е. матрицы $\mathcal{D}_\mu(g)$ и $\mathcal{D}_\nu(g)$ связаны между собой унитарной матрицей \mathbf{S} (7.12):

$$\mathcal{D}_\nu(g) = \mathbf{S}^{-1} \mathcal{D}_\mu(g) \mathbf{S},$$

то матрица \mathbf{A} , удовлетворяющая условию (8.2), должна быть кратна матрице унитарного преобразования, т. е. $\mathbf{A} = \mathbf{cS}$.

Пусть матрицы $\mathcal{D}_\mu(g)$ имеют размерность h_1 , а матрицы $\mathcal{D}_\nu(g)$ — размерность h_2 , т. е. матрица \mathbf{A} имеет h_1 строк и h_2 столбцов. Для определенности будем считать, что $h_2 \geq h_1$. Для доказательства второй леммы Шура проведем операцию эрмитова сопряжения; учитывая, что $\mathcal{D}^+(g) = \mathcal{D}^{-1}(g) = \mathcal{D}(g^{-1})$, получим

$$\mathbf{A}^+ \mathcal{D}_\mu(g^{-1}) = \mathcal{D}_\nu(g^{-1}) \mathbf{A}^+.$$

Умножив это соотношение справа на \mathbf{A} и учитывая, что согласно (8.2) $\mathbf{A} \mathcal{D}_\nu(g^{-1}) = \mathcal{D}_\mu(g^{-1}) \mathbf{A}$, так как $g^{-1} \in \mathcal{G}$, получим

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^+ \mathcal{D}_\mu(g^{-1}) = \mathcal{D}_\mu(g^{-1}) \mathbf{A} \mathbf{A}^+, \quad g^{-1} \in \mathcal{G}.$$

Из первой леммы Шура следует, что квадратная матрица $\mathbf{A} \mathbf{A}^+$, имеющая h_1 строк и h_1 столбцов, кратна единичной, так как

она коммутирует со всеми матрицами $\mathcal{D}_\mu(g)$, т. е.

$$AA^+ = cI$$

и, следовательно, $\text{Det } AA^+ = c^{h_1}$. Если $c \neq 0$, то $\text{Det } A \neq 0$.

Если $h_1 = h_2$, т. е. A — квадратная матрица, то из последнего условия следует, что она имеет обратную матрицу A^{-1} , и тогда, умножая (8.2) на A^{-1} , получим $A^{-1}\mathcal{D}_\mu(g)A = \mathcal{D}_\nu(g)$, а это означает, что представления \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν эквивалентны, что противоречит исходному допущению. Следовательно, при $h_1 = h_2$ величина $c = 0$, т. е. $AA^+ = 0$ или

$$\sum_l A_{kl}A_{lk}^+ = \sum_l A_{kl}A_{kl}^* = \sum_l |A_{kl}|^2 = 0,$$

что возможно лишь, если все матричные элементы $A_{kl} = 0$, т. е. $A = 0$.

Если же $h_1 < h_2$, то, дополнив матрицу A до квадратной, добавив $h_2 - h_1$ строк с элементами, равными нулю, получим матрицу \bar{A} , определитель которой равен нулю. Так как, с другой стороны, $\bar{A}\bar{A}^+ = AA^+$, то

$$\text{Det } AA^+ = \text{Det } \bar{A}\bar{A}^+ = \text{Det } \bar{A} \text{Det } \bar{A}^+ = 0,$$

а это означает, что и при $h_1 < h_2$ имеем $c = 0$, т. е. $AA^+ = 0$, откуда, как показано выше, следует, что $A = 0$.

Используя вторую лемму Шура, можно доказать следующее соотношение ортогональности:

Если матрицы $\mathcal{D}_\nu(g)$ и $\mathcal{D}_\mu(g)$ образуют неэквивалентные неприводимые представления группы \mathcal{G} , то матричные элементы $\mathcal{D}_{i_j}^\nu(g)$ и $\mathcal{D}_{k_l}^\mu(g)$ при произвольных i, j, k, l удовлетворяют соотношению ортогональности:

$$\sum_g \mathcal{D}_{i_j}^\mu(g) \mathcal{D}_{k_l}^{\nu*}(g) = 0 \quad \text{при } \mu \neq \nu. \quad (8.3)$$

Для доказательства (8.3) составим матрицу

$$A = \sum_g \mathcal{D}_\mu(g) B \mathcal{D}_\nu^{-1}(g), \quad (8.4)$$

где B — произвольная матрица. Видно, что матрица A удовлетворяет соотношению (8.2), так как в соответствии с (8.2)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\mu(g') A &= \sum_g \mathcal{D}_\mu(g') \mathcal{D}_\mu(g) B \mathcal{D}_\nu^{-1}(g) = \\ &= \sum_g \mathcal{D}_\mu(g') \mathcal{D}_\mu(g) B \mathcal{D}_\nu^{-1}(g) \mathcal{D}_\nu^{-1}(g') \mathcal{D}_\nu(g') = \\ &= \sum_{g''} \mathcal{D}_\mu(g'') B \mathcal{D}_\nu^{-1}(g'') \mathcal{D}_\nu(g') = A \mathcal{D}_\nu(g'). \end{aligned} \quad (8.5)$$

Следовательно, согласно второй лемме Шура $A = 0$, т. е.

$$\sum_g \sum_{k'l'} \mathcal{D}_{ik}^\mu(g) B_{k'l'} \mathcal{D}_{l'l}^{\nu^{-1}}(g) = 0. \quad (8.6)$$

Если теперь выбрать в качестве B матрицу с единственным отличным от нуля матричным элементом $B_{k'l'} = \delta_{k'j} \delta_{l'k}$, то из (8.6) следует:

$$\sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{k'l}^\nu(g^{-1}) = 0. \quad (8.7)$$

Формула (8.3) непосредственно следует из (8.7) и условия унитарности (7.11).

Рассмотрим теперь случай, когда представления μ и ν совпадают. При выводе (8.5) мы не накладывали никаких условий на матрицы \mathcal{D} , поэтому оно остается в силе и при $\mathcal{D}_\mu(g) = \mathcal{D}_\nu(g)$. В этом случае матрица A удовлетворяет условию (8.1), следовательно, согласно первой лемме Шура $A = cI$ или

$$\sum_g \sum_{k'l'} \mathcal{D}_{ik'}^\mu(g) B_{k'l'} \mathcal{D}_{l'l}^{\mu^{-1}}(g) = c \delta_{il}.$$

Значение константы c зависит от выбора B . Выберем, как и ранее, $B_{k'l'} = \delta_{k'j} \delta_{l'l}$, обозначив соответственно $c = c_{jk}$. Тогда

$$\sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{kl}^\mu(g^{-1}) = c_{jk} \delta_{il}.$$

Чтобы вычислить c_{jk} , положим $i=l$ и просуммируем по i . Учитывая, что

$$\sum_g \sum_i \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{ki}^\mu(g^{-1}) = \sum_g \mathcal{D}_{kj}^\mu(g^{-1}g) = h \delta_{kj},$$

а $\sum_i \delta_{ii} = n_\mu$, где n_μ — размерность неприводимого представления \mathcal{D}_μ , получим $c_{jk} = (h/n_\mu) \delta_{jk}$, и следовательно,

$$\sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{ki}^\mu(g^{-1}) = \frac{h}{n_\mu} \delta_{jk} \delta_{il}. \quad (8.8)$$

Для унитарных матриц это соотношение в соответствии с (7.11) можно переписать в виде

$$\sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{ik}^{\mu*}(g) = \frac{h}{n_\mu} \delta_{il} \delta_{jk}. \quad (8.9)$$

Уравнения (8.3) и (8.9) можно записать в виде общего соотношения ортогональности:

$$\sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g) \mathcal{D}_{ik}^{\nu*}(g) = \frac{h}{n_\mu} \delta_{\mu\nu} \delta_{il} \delta_{jk}. \quad (8.10)$$

Величину

$$\mathcal{D}'_{pq} = \left(\frac{n_\mu}{h} \right)^{1/2} \mathcal{D}_{ij}^\mu(g_q), \quad (8.11)$$

где ρ означает определенную совокупность индексов μ, i, j , можно рассматривать как q -компоненту ρ -го вектора в h -мерном пространстве. Тогда (8.10) означает, что скалярное произведение различных векторов равно нулю, т. е. что векторы с различными ρ , т. е. разными наборами чисел μ, i, j , взаимно ортогональны и нормированы. Действительно, (8.10) аналогично обычному соотношению ортогональности для единичных векторов e^α в трехмерном пространстве:

$$(e^\alpha e^\beta) = \sum_{i=1}^3 e_i^\alpha e_i^\beta = \delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3).$$

Общее число взаимно ортогональных векторов не может превышать размерности пространства, т. е. h . В данном случае число векторов $\mathcal{D}_\rho = \mathcal{D}_{i_j}^\mu$ при данном μ равно квадрату размерности представления n_μ^2 , следовательно, общее число векторов, равное $\sum_\mu n_\mu^2$, не превосходит h .

Ниже будет показано, что система этих векторов образует полный набор в g_q -пространстве с размерностью h , т. е. что число этих векторов равно размерности пространства:

$$\sum_{\mu=1}^N n_\mu^2 = h. \quad (8.12)$$

Формула (8.12) называется теоремой Берри ай-а

Можно также показать, что величины n_μ являются делителями порядка группы h , т. е.

$$h/n_\mu = m \quad (\mu = 1, 2, \dots, N), \quad (8.13)$$

где m — целые числа, а N — число неэквивалентных неприводимых представлений.

Из (8.12) следует, что индекс ρ в (8.11) пробегает h значений, т. е. приведенные матричные элементы $\mathcal{D}'_{\rho q}$ образуют квадратную матрицу \mathcal{D}' с размерностью h . Условие ортогональности (8.10) показывает, что эта матрица ортогональна по строкам, т. е. $\tilde{\mathcal{D}}'^* \mathcal{D}' = \mathbf{I}$. В соответствии с (7.9) это означает, что матрица \mathcal{D}' унитарна и, следовательно, согласно (7.10) она также ортогональна и по столбцам, т. е. $\mathcal{D}'^* \tilde{\mathcal{D}}' = \mathbf{I}$, или в обозначениях (8.10)

$$\sum_\mu \sum_{ij} n_\mu \mathcal{D}'_{ij}^{\mu*}(g) \mathcal{D}'_{ij}^\mu(g') = h \delta_{gg'}. \quad (8.14)$$

Так как конкретный вид матриц представления $\mathcal{D}(g)$ зависит от выбора базисных функций и изменяется при унитарных преобразованиях, то особое значение приобретает изучение свойств следа матрицы $\mathcal{D}(g)$ — величины, инвариантной к таким преобразованиям и совпадающей для всех эквивалент-

ных представлений. Эта величина получила в теории групп название характера представления \mathcal{D} для элемента g и обозначается символом $\chi(g)$:

$$\chi(g) = \sum_i \mathcal{D}_{ii}(g). \quad (8.15)$$

Как будет показано ниже, совокупность характеров для всех элементов полностью характеризует неприводимое представление. Из соотношения ортогональности для элементов (8.10) можно получить соотношение ортогональности для характеров. Для этого положим $i = j$ и $k = l$ и просуммируем по i и k . Получим:

$$\sum_g \chi_\mu^*(g) \chi_\nu(g) = h \delta_{\mu\nu}. \quad (8.16)$$

Это соотношение показывает, что неэквивалентные неприводимые представления не могут иметь совпадающие характеры для всех элементов. Оно сразу дает возможность определить, является ли данное представление неприводимым, и определить, какие неприводимые представления и сколько раз содержатся в данном представлении \mathcal{D} .

Согласно (8.16) для неприводимого представления

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = h. \quad (8.17)$$

Если представление \mathcal{D} приводимо, то в соответствии с (7.14) все матрицы $\mathcal{D}(g)$ могут быть приведены к квазидиагональному виду, причем каждая из подматриц образует неприводимое представление. Следовательно, след матрицы $\mathcal{D}(g)$ приводимого представления, который не меняется при таком унитарном преобразовании, равен сумме следов этих подматриц, т. е. сумме характеров всех неприводимых представлений, содержащихся в \mathcal{D} :

$$\chi(g) = \sum_\mu N_\mu \chi_\mu(g). \quad (8.18)$$

Коэффициент N_μ показывает, сколько раз данное неприводимое представление с характерами $\chi_\mu(g)$ содержится в \mathcal{D} . Зная $\chi(g)$, можно сразу определить N_μ . Для этого умножим (8.18) на $\chi_\mu^*(g)$ и просуммируем правую и левую части по g . Тогда, учитывая (8.16), получим

$$N_\mu = \frac{1}{h} \sum_g \chi_\mu^*(g) \chi(g). \quad (8.19)$$

Формула (8.19) показывает, что для определения числа неприводимых представлений, содержащихся в данном приводимом представлении, достаточно знать характеры этих представлений,

Если умножить (8.18) на сопряженную величину и просуммировать по g , то, используя (8.16), можно получить соотношение, подобное (8.17), но для приводимых представлений:

$$\sum_g |\chi(g)|^2 = \sum_{\mu\nu} N_\mu N_\nu \sum_g \chi_\mu(g) \chi_\nu^*(g) = h \sum_{\mu\nu} N_\mu N_\nu \delta_{\mu\nu} = h \sum_\mu N_\mu^2. \quad (8.20)$$

Видно, что сумма $\sum_g |\chi(g)|^2$ всегда кратна h .

Покажем, что характеры $\chi(g)$ являются функцией класса элементов ρ , т. е. все элементы g одного класса ρ имеют одинаковые характеры χ_ρ . По определению g_1 и g_2 входят в один класс, если существует элемент g_3 такой, что $g_1 = g_3 g_2 g_3^{-1}$. Следовательно, согласно (7.5)

$$\mathcal{D}(g_1) = \mathcal{D}(g_3) \mathcal{D}(g_2) \mathcal{D}^{-1}(g_3).$$

В соответствии с (7.13) отсюда следует, что $\chi(g_1) = \chi(g_2)$. Поэтому в формулах (8.16)–(8.20) можно везде суммирование характеров $\chi(g)$ по элементам группы g заменить суммированием характеров по классам ρ . Если обозначить характер элементов класса ρ для представления μ как χ_ρ^μ , соотношение ортогональности (8.16) можно переписать в виде

$$\sum_{\rho=1}^{N_\rho} h_\rho \chi_\rho^{\mu*} \chi_\rho^\nu = h \delta_{\mu\nu}. \quad (8.21)$$

Здесь h_ρ — число элементов класса ρ , а N_ρ — число классов в группе \mathcal{G} .

Число N_μ , показывающее, сколько раз представление μ содержится в данном представлении с характерами χ_ρ , в соответствии с (8.19) запишется в виде

$$N_\mu = \frac{1}{h} \sum_{\rho=1}^{N_\rho} h_\rho \chi_\rho^{\mu*} \chi_\rho. \quad (8.22)$$

Воспользуемся теперь уравнением (8.14) и докажем еще одно соотношение ортогональности характеров. Для этого положим в (8.14) $g = g_1$ и $g' = g g_2 g^{-1}$ и просуммируем правую и левую части (8.14) по g . Учитывая, что согласно (7.11) и (8.10)

$$\begin{aligned} \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{ij}^\mu(g g_2 g^{-1}) &= \sum_{lk} \mathcal{D}_{lk}^\mu(g_2) \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{jr}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{il}^\mu(g) = \\ &= \sum_{lk} \mathcal{D}_{lk}^\mu(g_2) \delta_{ij} \delta_{lk} = \chi_\mu(g_2) \delta_{ij}, \end{aligned}$$

найдем, что указанная сумма равна

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \frac{n_{\mu}}{h} \sum_{ij} \sum_g \mathcal{D}_{ij}^{\mu*}(g_1) \mathcal{D}_{ij}^{\mu}(gg_2g^{-1}) &= \sum_{\mu ij} \chi_{\mu}(g_2) \mathcal{D}_{ij}^{\mu*}(g_1) \delta_{ij} = \\ &= \sum_{\mu} \chi_{\mu}^*(g_1) \chi_{\mu}(g_2) = \sum_{\mu} \chi_{\rho}^{\mu*} \chi_{\eta}^{\mu} = \sum_g \delta_{g_1, gg_2g^{-1}}, \end{aligned}$$

где ρ — класс элемента g_1 , а η — класс элемента g_2 .

Если g_1 и g_2 входят в разные классы, то при всех g

$$g_1 \neq gg_2g^{-1} \quad \text{и} \quad \sum_g \delta_{g_1, gg_2g^{-1}} = 0.$$

Если g_1 и g_2 входят в один класс, то согласно (1.8) среди h элементов gg_2g^{-1} элемент g_1 встретится h/h_{ρ} раз и, следовательно,

$$\sum_g \delta_{g_1, gg_2g^{-1}} = \frac{h}{h_{\rho}}.$$

Это означает, что

$$\sum_{\mu} \chi_{\rho}^{\mu*} \chi_{\eta}^{\mu} = \frac{h}{h_{\rho}} \delta_{\rho\eta}. \quad (8.23)$$

Если первое соотношение ортогональности (8.21) есть соотношение ортогональности характеров, соответствующих различным неприводимым представлениям, и суммирование в (8.21) ведется по всем классам, то второе соотношение ортогональности (8.23) есть соотношение ортогональности характеров, соответствующих различным классам, а суммирование в (8.23) ведется по всем неприводимым представлениям. Уравнение (8.21) означает, что приведенные характеры

$$\chi'_{\rho\mu} = (h_{\rho}/h)^{1/2} \chi_{\rho}^{\mu} \quad (8.24)$$

можно рассматривать как ρ -компоненты ортонормированных векторов χ'_{μ} в пространстве классов ρ с размерностью N_{ρ} . Так как число ортогональных векторов, равное числу неприводимых представлений N , не может превышать размерности пространства N_{ρ} , то $N \leq N_{\rho}$.

С другой стороны, согласно (8.23) эти же величины $\chi'_{\rho, \mu}$ можно рассматривать как μ -компоненты ортонормированных векторов χ'_{ρ} в пространстве неприводимых представлений μ размерностью N . При этом число ортогональных векторов, равное числу классов N_{ρ} , не может превышать N , т. е. $N_{\rho} \leq N$. Это означает, что

$$N_{\rho} = N. \quad (8.25)$$

Следовательно, общее число N неприводимых представлений группы \mathcal{G} равно числу N_{ρ} классов сопряженных элементов этой группы.

Соотношения (8.21) и (8.23) означают, что матрица χ' соответственно ортогональна и по строкам

$$\tilde{\chi}'^* \chi' = I,$$

и по столбцам

$$\chi' \tilde{\chi}' = I.$$

Как показано выше, одновременная ортогональность по строкам и по столбцам означает, что матрица χ' квадратная, т. е. в соответствии с (8.25) $N = N_p^*$.

В заключение рассмотрим представления группы \mathcal{G} , являющейся прямым произведением двух групп \mathcal{G}_1 и \mathcal{G}_2 .

Как указывалось выше, элементами группы \mathcal{G} являются произведения элементов обеих групп $g = g^{(1)}g^{(2)}$ ($g^{(1)} \in \mathcal{G}_1$, $g^{(2)} \in \mathcal{G}_2$). Общее их число равно $h = h_1 h_2$, где h_1 и h_2 — числа элементов группы \mathcal{G}_1 и группы \mathcal{G}_2 .

Если базисом μ -го неприводимого представления группы \mathcal{G}_1 являются функции φ_i^μ ($i = 1, 2, \dots, n_\mu$), а ν -го представления группы \mathcal{G}_2 — функции ψ_j^ν ($j = 1, 2, \dots, n_\nu$), то в качестве базиса представлений группы \mathcal{G} можно выбрать функции $f_{ij}^{\mu\nu} = \varphi_i^\mu \psi_j^\nu$, которые обозначены двойными индексами. Тогда в соответствии с (7.3) матричные элементы матриц $\mathcal{D}(g^{(1)}g^{(2)})$, образующих представление группы $\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \mathcal{G}_2$, будут равны

$$\mathcal{D}_{i', k'}^{\mu\nu}(g^{(1)}g^{(2)}) = \mathcal{D}_{ik}^\mu(g^{(1)}) \mathcal{D}_{j'l}^\nu(g^{(2)}). \quad (8.26)$$

Подчеркнем, что при этом предполагается, что операция $g^{(1)}$ не действует на функции ψ группы \mathcal{G}_2 и наоборот, т. е. что функции ψ и φ определены в различных пространствах.

Полученная указанным образом матрица $\mathcal{D}(g)$ называется прямым или кронекеровским произведением матриц $\mathcal{D}^{(1)} \times \mathcal{D}^{(2)}$ (не путать с обычным произведением матриц).

Согласно (8.26) характер этого представления равен произведению характеров неприводимых представлений групп \mathcal{G}_1 и \mathcal{G}_2 :

$$\chi_{\mu\nu}(g) = \sum_{ij} \mathcal{D}_{ij, ij}^{\mu\nu}(g) = \sum_i \mathcal{D}_{ii}^\mu(g^{(1)}) \sum_j \mathcal{D}_{jj}^\nu(g^{(2)}) = \chi_\mu(g^{(1)}) \chi_\nu(g^{(2)}). \quad (8.27)$$

*) Формула (8.23) дает возможность сразу доказать теорему Бернсайда (8.12). Для этого выберем в качестве классов ρ и η класс, содержащий единичный элемент e , который не содержит никаких других элементов, т. е. $h_\rho = 1$. Так как $\chi_\mu(e) = n_\mu$, то согласно (8.23) $\sum_\mu \eta_\mu \eta_\mu = h$, что совпадает с (8.12).

Надо, однако, отметить, что наш вывод формулы (8.23) основан на соотношении (8.14), которое само было получено с учетом (8.12). Хотя (8.23) можно доказать и не используя (8.14), но этот вывод более сложен. Поэтому в следующем параграфе будет приведено независимое доказательство теоремы Бернсайда.

Размерность этого представления $n_{\mu\nu}$ равна произведению размерностей представлений $n_{\mu}^{(1)}n_{\nu}^{(2)}$. Полученные таким образом представления группы \mathcal{G} неприводимы, так как согласно (8.27) и (8.17)

$$\sum_g |\chi_{\mu\nu}(g)|^2 = \sum_{g^{(1)}} |\chi_{\mu}(g^{(1)})|^2 \sum_{g^{(2)}} |\chi_{\nu}(g^{(2)})|^2 = h_1 h_2 = h.$$

Так как сумма квадратов размерностей всех представлений согласно (8.12) равна

$$\sum_{\mu\nu} n_{\mu\nu}^2 = \sum_{\mu\nu} n_{\mu}^2 n_{\nu}^2 = h_1 h_2 = h,$$

то в соответствии с (8.17) эта формула показывает, что, перемножив попарно все неприводимые представления групп \mathcal{G}_1 и \mathcal{G}_2 , мы получаем все неприводимые представления группы \mathcal{G} .

§ 9. ПОСТРОЕНИЕ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ. ПРОИЗВЕДЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Зная матрицы неприводимых представлений, можно построить базисные функции, преобразующиеся по каждому из этих представлений. Для этого выберем произвольную функцию $\Phi_1(\mathbf{x})$. Применяя последовательно операции группы \mathcal{G} :

$$g_1 = e, g_2, \dots, g_h,$$

получим h функций

$$\Phi_i = \mathcal{D}(g_i)\Phi_1(\mathbf{x}) = \Phi_1(g_i^{-1}\mathbf{x}). \quad (9.1)$$

Функцию $\Phi_1(\mathbf{x})$ можно выбрать так, чтобы все эти функции Φ_i были линейно независимы. Функции Φ_i нормированы на единицу, если Φ_1 нормирована. Под действием операции g каждая из h функций $\Phi_i(\mathbf{x})$ перейдет в другую функцию этого набора:

$$\mathcal{D}(g)\Phi_i(\mathbf{x}) = \mathcal{D}(g)\mathcal{D}(g_i)\Phi_1(\mathbf{x}) = \Phi_1(g_i^{-1}g^{-1}\mathbf{x}). \quad (9.2)$$

Такое представление, базисом которого являются h линейно независимых функций Φ_i , называется регулярным представлением группы.

Матрицы этого представления легко построить по (9.2), используя лишь таблицу умножения группы. Так как при $g \neq e$ $gg_i \neq g_i$, то согласно (9.2) действие оператора $\mathcal{D}(g)$ при $g \neq e$ превращает каждую из функций в другую функцию из набора, не равную Φ_i . Следовательно, матрица регулярного представления $\mathcal{D}(g)$ при $g \neq e$ не имеет диагональных элементов; поэтому характер равен

$$\chi(g) = \begin{cases} h & \text{при } g = e, \\ 0 & \text{при } g \neq e. \end{cases} \quad (9.3)$$

Регулярное представление в общем случае приводимо. Для того чтобы определить, сколько раз данное неприводимое представление μ содержится в регулярном, используем формулу (8.19). Согласно (8.19) и (9.3)

$$N_\mu = \frac{1}{h} \chi_\mu^*(e) \chi(e) = \chi_\mu^*(e) = n_\mu. \quad (9.4)$$

Следовательно, каждое неприводимое представление μ содержится в регулярном представлении столько раз, какова его размерность.

Из формулы (9.4) непосредственно следует теорема Бернсайда (8.12). Действительно, согласно (9.4) все базисные функции разбиваются на группы из n_μ функций, преобразующихся по неприводимому представлению μ , причем число таких групп для каждого представления равно n_μ . Следовательно, полное число базисных функций равно $\sum_\mu n_\mu^2$. С другой стороны, это число равно размерности регулярного представления, т. е. числу элементов группы h . Следовательно, $\sum_\mu n_\mu^2 = h$.

Так как регулярное представление содержит все неприводимые представления, то из Φ_i функций можно построить h функций $\Phi_{mk}^\mu(\mathbf{x})$, являющихся базисом каждого из этих неприводимых представлений. Здесь верхний индекс μ показывает неприводимое представление, индекс m ($m = 1, 2, \dots, n_\mu$) — номер одного из эквивалентных μ -представлений, а индекс k ($k = 1, 2, \dots, n_\mu$) — номер базисной функции этого представления.

Покажем, что оператор

$$P_{mk}^\mu = \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{km}^{\mu*}(g) \mathcal{D}(g), \quad (9.5)$$

действуя на любую из функций Φ_i , дает набор функций Φ_{mk}^μ . Для этого проверим, что функции-партнеры

$$\Phi_{mk}^\mu = P_{mk}^\mu \Phi_1 = \frac{n_\mu}{h} \sum_i \mathcal{D}_{km}^{\mu*}(g_i) \Phi_i \quad (9.6)$$

при фиксированном μ и m действительно преобразуются по неприводимому представлению μ . Согласно (9.5), (9.6), (7.4) и (1.2)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(g') \Phi_{mk}^\mu &= \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{km}^{\mu*}(g) \mathcal{D}(g'g) \Phi_1 = \\ &= \frac{n_\mu}{h} \sum_{g''=g'g} \mathcal{D}_{km}^{\mu*}(g'^{-1}g'') \mathcal{D}(g'') \Phi_1 = \\ &= \frac{n_\mu}{h} \sum_l \mathcal{D}_{kl}^{\mu*}(g'^{-1}) \sum_{g''} \mathcal{D}_{lm}^{\mu*}(g'') \mathcal{D}(g'') \Phi_1 = \sum_l \mathcal{D}_{lk}^\mu(g') \Phi_{ml}^\mu. \end{aligned} \quad (9.7)$$

Используя соотношение (8.10), легко проверить, что любые функции φ_{mk}^μ , образующие базис неприводимого унитарного представления, ортогональны по всем трем индексам.

Так как все функции Φ_i линейно независимы, т. е. никакая линейная комбинация этих функций не может обратиться в нуль, то среди функций φ_{mk}^μ в соответствии с (9.6) нет ни одной функции, равной нулю, и все эти функции линейно независимы. Поэтому, действуя операторами P_{mk}^μ на функцию $\Phi_i = \Phi_1(g_i^{-1}\mathbf{x})$, мы получим функции $\varphi_{mk,i}^\mu = P_{mk}^\mu \Phi_i$, которые будут представлять суперпозицию функций $\varphi_{mk}^\mu = P_{mk}^\mu \Phi_1$ с теми же μ и k , но с разными m .

Заметим, что в общем случае нет необходимости использовать (9.6) для определения всех функций φ_{mk}^μ . Достаточно выделить по одной функции для каждого представления μ , m , например, функцию φ_{ml}^μ . Действие оператора $\mathcal{D}(g)$ на эту функцию дает лишь функции этого представления, тогда как при действии $\mathcal{D}(g)$ на Φ_i получается набор функций всех представлений. Поэтому практически удобнее получить остальные функции-партнеры φ_{mk}^μ , действуя оператором P_{lk}^μ на φ_{ml}^μ . Согласно (9.5), (9.7) и (8.10)

$$\begin{aligned} P_{lk}^\mu \varphi_{ml}^\mu &= \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{kl}^{\mu*}(g) \mathcal{D}(g) \varphi_{ml}^\mu = \\ &= \frac{n_\mu}{h} \sum_{gn} \mathcal{D}_{kl}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{in}^\mu(g) \varphi_{mn}^\mu = \sum_n \delta_{kn} \varphi_{mn}^\mu = \varphi_{mk}^\mu. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$P_{lk}^\mu \varphi_{ml}^\mu = \varphi_{mk}^\mu. \quad (9.8)$$

Например, оператор P_{mm}^μ выделяет m -ю функцию представления μ , m :

$$\varphi_{mm}^\mu = P_{mm}^\mu \Phi_1 = \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{mm}^{\mu*}(g) \mathcal{D}(g) \Phi_1, \quad (9.9)$$

из которой можно получить остальные функции этого представления:

$$\varphi_{mk}^\mu = P_{mk}^\mu \varphi_{mm}^\mu. \quad (9.10)$$

Приведенные выше формулы (9.5)—(9.10) дают полное решение задачи о построении функций, преобразующихся по любому неприводимому представлению.

Однако использование этих формул требует знания матриц неприводимых представлений и часто оказывается довольно трудоемким. Если заданы лишь характеры представлений, то, как следует из (9.9), действуя на Φ_1 оператором

$$\mathcal{P}^\mu = \sum_m P_{mm}^\mu = \frac{n_\mu}{h} \sum_g \chi_\mu(g) \mathcal{D}(g), \quad (9.11)$$

можно выделить совокупность функций

$$f^\mu = \sum_m \varphi_{mm}^\mu = \mathcal{P}^\mu \Phi_1, \quad (9.12)$$

преобразующихся по представлению μ . При этом получаем лишь одну из n_μ^2 линейно независимых функций.

Действуя операторами $\mathcal{D}(g)$, $g \in \mathcal{G}$ на эту функцию f^μ или, что эквивалентно, применяя оператор \mathcal{P}^μ ко всем функциям $\Phi_i = \mathcal{D}(g_i)\Phi_1$, можно из этой функции f^μ получить еще h функций, среди которых содержится, однако, лишь n_μ^2 линейно независимых функций φ_{mk}^μ ($m = 1, 2, \dots, n_\mu$; $k = 1, 2, \dots, n_\mu$), так как

$$f^\mu(g^{-1}\mathbf{x}) = \mathcal{D}(g)f^\mu = \sum_m \mathcal{D}(g)\varphi_{mm}^\mu = \sum_{mk} \mathcal{D}_{km}^\mu(g)\varphi_{mk}^\mu. \quad (9.13)$$

Конечно, для того чтобы выделить n_μ^2 функций φ_{mk}^μ из этих h функций $f^\mu(g^{-1}\mathbf{x})$ ($g = g_1, g_2, \dots, g_h$), надо знать все матрицы $\mathcal{D}_{km}^\mu(g)$. Однако в простых случаях эти функции можно сравнительно просто подобрать и, зная характеры, проверить, что они преобразуются по требуемым представлениям.

Приведенные выше выражения (9.5)–(9.13) справедливы независимо от выбора функций $\Phi_i(\mathbf{x})$. Поэтому, используя операторы (9.5), (9.9) или (9.11), называемые операторами проектирования, можно выделить все базисные функции тех неприводимых представлений, которые содержатся в представлении \mathcal{D} , порождаемом любой функцией $\Phi(\mathbf{x})$.

Если среди функций $\Phi_i = \Phi(g_i^{-1}\mathbf{x})$ содержится n' ($n' < h$) линейно независимых функций Φ_j , то это представление не является регулярным и часть или все из неприводимых представлений μ содержатся в \mathcal{D} менее чем n_μ раз, или вообще не содержатся в нем. Поэтому некоторые из функций, выделяемые операторами (9.5) или (9.11), окажутся линейно зависимыми или равными нулю. Если представление \mathcal{D} вообще не содержит неприводимого представления μ , то все функции φ_{mk}^μ при любых m и k и функции f^μ , выделяемые оператором (9.11), обратятся в нуль.

Если известны матрицы представления $\mathcal{D}(g)$, по которому преобразуются выбранные функции Φ_j , то операторы проектирования (9.5) и (9.11) можно записать в матричной форме:

$$\varphi_{mk}^\mu = \sum_j P_{mk,j}^\mu \Phi_j, \quad \text{где } P_{mk,j}^\mu = \frac{n_\mu}{h} \sum_g \mathcal{D}_{km}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{jl}(g); \quad (9.14)$$

$$f^\mu = \sum_j \mathcal{P}_j^\mu \Phi_j, \quad \text{где } \mathcal{P}_j^\mu = \frac{n_\mu}{h} \sum_g \chi_\mu^*(g) \mathcal{D}_{jl}(g). \quad (9.14a)$$

Зная характеры $\chi(g)$ представления \mathcal{D} , можно сразу по формулам (8.19) или (8.22) найти величину N_μ , определяющую,

сколько раз каждое неприводимое представление μ содержится в \mathcal{D} , и тем самым найти полное число линейно независимых функций Φ_{mk}^μ с заданным μ , равное $N_\mu n_\mu$. При этом общее число линейно независимых функций Φ_{mk}^μ равно размерности представления \mathcal{D} , т. е. n' . Выбрав первые $N_\mu n_\mu$ операторов P_{mk}^μ ($m = 1, 2, \dots, n_\mu$) и используя (9.14), получим $n_\mu N_\mu$ функций Φ_{mk}^μ . Если часть из этих функций окажется равными нулю или линейно зависимыми, надо использовать следующие операторы P_{mk}^μ ($m = N_\mu + 1, N_\mu + 2, \dots$), пока не получим все линейно независимые функции.

Проделав такую процедуру для всех представлений μ , мы найдем n' линейно независимых функций и определим n' компонент оператора $P_{mk, j}^\mu$, выделяющего из n' функций Φ_j n' функций Φ_{mk}^μ , образующих базисы неприводимых представлений.

Эти компоненты оператора образуют квадратную матрицу \mathbf{P} с размерностью $n' - P_{jq}$, где q означает совокупность индексов μ, m, k ($q = 1, 2, \dots, n'$). При соответствующей нумерации этих компонент эта матрица \mathbf{P} в соответствии с (7.12) превращает матрицу \mathcal{D} в $\mathcal{D}' = \mathbf{P}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{P}$, имеющую квазидиагональный вид (7.14).

Практически при построении базисных функций часто удобнее исходить не из общей функции $\Phi(\mathbf{x})$, порождающей регулярное представление, а из наиболее простых функций, например, функций x, y, z , образующих базис одного или нескольких неприводимых представлений. Базисные функции остальных представлений можно получить из гармонических полиномов более высоких степеней.

Аналогичная задача часто возникает и при других практических приложениях, когда из произведений известных функций f_i^μ ($i = 1, 2, \dots, n_\mu$), которые образуют базис представления \mathcal{D}_μ , и функций φ_k ($k = 1, 2, \dots, n_\nu$), образующих базис представления \mathcal{D}_ν , необходимо построить функции, преобразующиеся по неприводимым представлениям. Произведения этих функций $\psi_{ik} = f_i^\mu \varphi_k^\nu$ образуют базис представления $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ с размерностью $n_\mu n_\nu$, которое называется прямым произведением представлений: $\mathcal{D}_{\mu\nu} = \mathcal{D}_\mu \mathcal{D}_\nu$.

Базисные функции этого представления ψ_{ik} обозначим двумя индексами, чтобы показать их происхождение; соответственно матричные элементы представления $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ обозначим четырьмя индексами, т. е. $\mathcal{D}_{ik, jl}^{\mu\nu}$. Согласно (7.3)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(g) \psi_{ik} &= \sum_{jl} \mathcal{D}_{jl, ik}^{\mu\nu}(g) \psi_{jl} = \mathcal{D}(g) f_i \varphi_k = \\ &= \sum_{j'l'} \mathcal{D}_{ji}^\mu(g) f_j \mathcal{D}_{l'k}^\nu(g) \varphi_{l'} = \sum_{j'l'} \mathcal{D}_{ji}^\mu(g) \mathcal{D}_{l'k}^\nu(g) \psi_{j'l'}. \end{aligned}$$

Следовательно, матрицы прямого произведения $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ равны прямому (кронекеровскому) произведению матриц представлений \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν :

$$\mathcal{D}_{ik, jl}^{\mu\nu} = \mathcal{D}_{ij}^\mu \mathcal{D}_{kl}^\nu, \quad (9.15)$$

а характеры прямого произведения равны произведению характеров составляющих представлений. Действительно, согласно (9.15)

$$\chi_{\mu\nu}(g) = \sum_{ik} \mathcal{D}_{ik, ik}^{\mu\nu}(g) = \sum_i \mathcal{D}_{ii}^\mu(g) \sum_k \mathcal{D}_{kk}^\nu(g),$$

т. е.

$$\chi_{\mu\nu}(g) = \chi_\mu(g) \chi_\nu(g). \quad (9.16)$$

Прямое произведение неприводимых представлений в общем случае приводимо. Задача о разложении прямого произведения двух и более представлений часто встречается в физических приложениях.

Формулы (9.16) и (8.19) сразу определяют, какие неприводимые представления содержатся в прямом произведении. Если функции f_i и φ_k преобразуются по одному и тому же представлению, то характер прямого произведения

$$\chi_{\mu\mu}(g) = (\chi_\mu(g))^2. \quad (9.17)$$

В этом случае из n_μ^2 функций $\psi_{ik} = f_i \varphi_k$ можно составить симметризованные и антисимметризованные функции ψ_{ik}^c и ψ_{ik}^a :

$$\psi_{ik}^c = f_i \varphi_k + f_k \varphi_i \quad (i = 1, 2, \dots, n_\mu; k = 1, 2, \dots, i); \quad (9.18)$$

$$\psi_{ik}^a = f_i \varphi_k - f_k \varphi_i \quad (i = 1, 2, \dots, n_\mu; k = 1, 2, \dots, i-1). \quad (9.19)$$

Как будет показано ниже, эти функции преобразуются независимо и образуют соответственно базис симметризованного произведения $[\mathcal{D}_\mu^2]$ с характерами, обозначаемыми $[\chi_\mu^2(g)]$, и антисимметризованного произведения $\{\mathcal{D}_\mu^2\}$ с характерами $\{\chi_\mu^2(g)\}$.

Для симметризованных функций $\psi_{ik}^c = \psi_{ki}^c$, для антисимметризованных $\psi_{ik}^a = -\psi_{ki}^a$, поэтому функции ψ_{ik}^c и ψ_{ki}^c , так же как ψ_{ik}^a и ψ_{ki}^a , следует рассматривать как одну функцию. Соответственно для симметризованных функций значения второго индекса $k \leq i$, а для антисимметризованных $k < i$, так как $\psi_{ii}^a = 0$.

Общее число симметризованных функций равно:

$$n_\mu^c = \sum_{i=1}^{n_\mu} i = \frac{1}{2} n_\mu (n_\mu + 1),$$

а антисимметризованных

$$n_{\mu}^a = \sum_{i=1}^{n_{\mu}} (i-1) = \frac{1}{2} n_{\mu} (n_{\mu} - 1).$$

Полное число функций ψ_{ik}^c и ψ_{ik}^a , естественно, равно n_{μ}^2 .

Согласно (9.18) и (7.3)

$$\mathcal{D}(g) \psi_{ik}^c = \sum_{j=1}^{n_{\mu}} \sum_{l=1}^{n_{\mu}} \mathcal{D}_{jl} \mathcal{D}_{lk} (f_j \varphi_l + f_l \varphi_j).$$

Так как функции ψ_{jl}^c с $j \neq l$ входят в эту сумму дважды, то коэффициенты при них надо объединять, т. е.

$$\mathcal{D}(g) \psi_{ik}^c = \sum_{j=1}^{n_{\mu}} \left(\sum_{l=1}^{j-1} (\mathcal{D}_{ji} \mathcal{D}_{lk} + \mathcal{D}_{li} \mathcal{D}_{jk}) \psi_{jl}^c + \mathcal{D}_{ji} \mathcal{D}_{jk} \psi_{jl}^c \right).$$

Следовательно, матричные элементы симметризованного представления имеют вид

$$[\mathcal{D}_{\mu}^2]_{ik, jl} = (\mathcal{D}_{ji}^{\mu} \mathcal{D}_{lk}^{\mu} + \mathcal{D}_{li}^{\mu} \mathcal{D}_{jk}^{\mu}) \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{jl} \right). \quad (9.20)$$

Аналогично для антисимметризованного представления

$$\mathcal{D}(g) \psi_{ik}^a = \sum_{j=1}^{n_{\mu}} \sum_{l=1}^{n_{\mu}} \mathcal{D}_{ji} \mathcal{D}_{lk} (f_j \varphi_l - f_l \varphi_j) = \sum_{j=1}^{n_{\mu}} \sum_{l=1}^{j-1} (\mathcal{D}_{ji} \mathcal{D}_{lk} - \mathcal{D}_{li} \mathcal{D}_{jk}) \psi_{jl}^a,$$

т. е.

$$\{\mathcal{D}_{\mu}^2\}_{ik, jl} = \mathcal{D}_{ji}^{\mu} \mathcal{D}_{lk}^{\mu} - \mathcal{D}_{li}^{\mu} \mathcal{D}_{jk}^{\mu}. \quad (9.21)$$

Соответственно характер симметризованного произведения

$$\begin{aligned} [\chi_{\mu}^2(g)] &= \sum_{i=1}^{n_{\mu}} \sum_{k=1}^i [\mathcal{D}_{\mu}^2(g)]_{ik, ik} = \\ &= \sum_{i=1}^{n_{\mu}} \left(\sum_{k=1}^{i-1} \mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g) \mathcal{D}_{kk}^{\mu}(g) + \mathcal{D}_{ki}^{\mu}(g) \mathcal{D}_{ik}^{\mu}(g) \right) + \mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g) \mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_{\mu}} \sum_{k=1}^{n_{\mu}} \mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g) \mathcal{D}_{kk}^{\mu}(g) + \mathcal{D}_{ki}^{\mu}(g) \mathcal{D}_{ik}^{\mu}(g) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_{\mu}} \left(\mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g) \sum_{k=1}^{n_{\mu}} \mathcal{D}_{kk}^{\mu}(g) + \mathcal{D}_{ii}^{\mu}(g^2) \right), \end{aligned}$$

откуда

$$[\chi_{\mu}^2(g)] = \frac{1}{2} [(\chi_{\mu}(g))^2 + \chi_{\mu}(g^2)]. \quad (9.22)$$

Аналогично для антисимметризованного произведения

$$\{\chi_{\mu}^2(g)\} = \frac{1}{2}[(\chi_{\mu}(g))^2 - \chi_{\mu}(g^2)]. \quad (9.23)$$

Таким образом, представление $\mathcal{D}_{\mu} \times \mathcal{D}_{\mu}$, являющееся прямым произведением одинаковых представлений с характеристиками, определяемыми уравнением (9.16), в общем случае распадается на два представления — симметризованное и антисимметризованное, характеры которых определяются выражениями (9.22) и (9.23). Эти представления также могут быть приводимыми, и число неприводимых представлений, содержащихся в них, может быть определено с помощью формул (8.19), (9.22) и (9.23).

Базисные функции неприводимых представлений, содержащихся в прямых произведениях, которые являются линейными комбинациями произведений $f_i \varphi_i$, можно построить при помощи оператора проектирования (9.14) и (9.14а), используя выражения (9.15), (9.20) или (9.21) для матриц соответствующих произведений.

Для ряда приложений особый интерес представляет определение числа единичных представлений, содержащихся в данном приводимом представлении, и построение базисных функций, преобразующихся по единичному представлению. По определению единичного представления эти функции являются инвариантами, т. е. не меняются при всех операциях симметрии, входящих в данную группу.

Согласно (8.19), (9.5) и (9.14) число единичных представлений, содержащихся в представлении с характеристиками $\chi(g)$, равно

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_g \chi(g), \quad (9.24)$$

а базисные функции этого представления

$$\psi^0 = \frac{1}{h} \sum_g \mathcal{D}(g) \varphi_i = \frac{1}{h} \sum_g \sum_k \mathcal{D}_{ki}(g) \varphi_k, \quad (9.25)$$

где $\varphi_i(\mathbf{x})$ — любая из функций, образующих базис данного приводимого представления.

В частности, для регулярного представления, в котором согласно (9.4) единичное представление содержится один раз, инвариантная функция ψ^0 равна

$$\psi^0 = \frac{1}{h} \sum_g \mathcal{D}(g) \Phi_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{h} \sum_i \Phi_i(\mathbf{x}). \quad (9.26)$$

Рассмотрим теперь прямое произведение представлений $\mathcal{D}_{\mu} \times \mathcal{D}_{\nu}$. Согласно (9.24) и (9.16) это произведение содержит единичное представление, если

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_g \chi_{\mu}(g) \chi_{\nu}(g) \neq 0.$$

С другой стороны, из соотношения ортогональности (8.16) следует, что

$$\frac{1}{h} \sum_g \chi_\mu^*(g) \chi_\nu(g) = \delta_{\mu\nu}.$$

Величину χ_μ^* можно рассматривать как характер представления \mathcal{D}_μ^* , комплексно сопряженного представлению \mathcal{D}_μ . Из (7.3) видно, что если матрицы $\mathcal{D}(g)$ образуют неприводимое представление, базисом которого являются функции φ_i , то и комплексно сопряженные матрицы $\mathcal{D}^*(g)$ образуют неприводимое представление, а его базисом являются функции φ_i^* .

Следовательно, единичное представление содержится только в прямом произведении взаимно сопряженных представлений, т. е. при $\chi_\mu^* = \chi^\nu$.

Если представление имеет вещественные характеры, т. е. $\chi_\mu^*(g) = \chi_\mu(g)$, то сопряженные представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* эквивалентны, т. е. \mathcal{D} может быть превращено в \mathcal{D}^* унитарным преобразованием (7.12). Если при этом соответствующим унитарным преобразованием можно сделать все базисные функции φ_i и, соответственно, все матрицы $\mathcal{D}(g)$ вещественными, то такие представления называются вещественными. Если же характер представления вещественен, но сами матрицы $\mathcal{D}(g)$ существенно комплексны, т. е. никаким унитарным преобразованием не могут быть сделаны вещественными, то представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* называются комплексными и эквивалентными. Представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* с комплексными характерами являются комплексными и неэквивалентными.

Следовательно, для комплексных и неэквивалентных представлений инвариантную функцию можно составить лишь из произведения базисных функций φ_i и φ_i^* , образующих базис сопряженных представлений \mathcal{D} и \mathcal{D}^* , причем эта функция является единственной. Согласно (9.25), (9.15) и (8.9) эта функция

$$\begin{aligned} \psi^0 &= \frac{1}{h} \sum_g \mathcal{D}_{ik, 11}(g) \varphi_i^* \varphi_k = \frac{1}{h} \sum_g \sum_{ik} \mathcal{D}_{i1}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{k1}^\mu \varphi_i^* \varphi_k = \\ &= \frac{1}{n_\mu} \sum_{ik} \delta_{ik} \delta_{11} \varphi_i^* \varphi_k = \frac{1}{n_\mu} \sum_i \varphi_i^* \varphi_i. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Для эквивалентных представлений инвариантную функцию можно составить из произведения базисных функций одного представления. По форме эта функция совпадает с (9.27), но при этом функции φ_i^* линейно связаны с φ_i унитарным преобразованием T . Так, для вещественных представлений при $\varphi_i^* = \varphi_i$

$$\psi^0 = \frac{1}{n_\mu} \sum_i \varphi_i^2. \quad (9.28)$$

Как будет показано ниже (см. (18.27)), для вещественных представлений

$$\frac{1}{h} \sum_g \chi(g^2) = 1$$

и, следовательно, согласно (9.22) и (8.17)

$$\frac{1}{h} \sum_g [\chi_\mu^2(g)] = 1,$$

т. е. в соответствии с (9.24) для вещественных представлений симметризованное произведение, базис которого включает функции φ_i^2 , действительно содержит единичное представление. Для комплексных эквивалентных представлений согласно (18.27)

$$\frac{1}{h} \sum_g \chi(g^2) = -1,$$

т. е. для них в соответствии с (9.23) и (8.17)

$$\frac{1}{h} \sum_g \{\chi_\mu^2(g)\} = 1,$$

поэтому для комплексных эквивалентных представлений единичное представление, базисом которого является функция (9.27), содержится в антисимметризованном произведении.

§ 10. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

В этом параграфе будут кратко рассмотрены представления группы вращений.

Можно показать, что, как и для конечных групп, все представления группы вращений могут быть выбраны унитарными. Поскольку каждое вращение φ определяется тремя параметрами φ_x , φ_y и φ_z , то и каждое представление $\mathcal{D}(\varphi) = \mathcal{D}(\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z)$ есть функция этих параметров. При этом мы будем рассматривать только те представления, которые являются дифференцируемыми функциями этих параметров*).

Покажем, что матрица каждого представления $\mathcal{D}(\varphi)$ для любого конечного поворота φ полностью определяется матрицами этого представления, соответствующими бесконечно малому повороту φ .

Разложим $\mathcal{D}(\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z)$ в ряд Тейлора по φ_i . Тогда, учитывая, что $\mathcal{D}(0, 0, 0) = \mathcal{D}(0) = I$, получим в первом порядке

*) Под производной $\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \varphi_s}$ следует понимать матрицу $\left(\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \varphi_s}\right)_{ik} = \frac{\partial \mathcal{D}_{ik}}{\partial \varphi_s}$, элементы которой суть производные от соответствующих элементов матрицы \mathcal{D} по параметру φ_s .

по φ_i :

$$\mathcal{D}(\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z) = I + i(A_x \varphi_x + A_y \varphi_y + A_z \varphi_z) = I + i(A\varphi), \quad (10.1)$$

где

$$A_x = \frac{1}{i} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \varphi_x} \Big|_0, \quad A_y = \frac{1}{i} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \varphi_y} \Big|_0, \quad A_z = \frac{1}{i} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \varphi_z} \Big|_0 \quad (10.2)$$

есть матрицы бесконечно малого поворота, соответствующие представлению \mathcal{D} при вращениях на малые углы вокруг осей x , y и z соответственно.

Рассмотрим два вращения $s\varphi$ и $t\varphi$, где s и t — произвольные числа. Произведению вращений $s\varphi$ и $t\varphi$ соответствует вращение $(s+t)\varphi$. Следовательно, матрицы представления \mathcal{D} должны удовлетворять соотношению

$$\mathcal{D}((s+t)\varphi_x, (s+t)\varphi_y, (s+t)\varphi_z) = \mathcal{D}(s\varphi_x, s\varphi_y, s\varphi_z) \mathcal{D}(t\varphi_x, t\varphi_y, t\varphi_z).$$

Продифференцировав это равенство по s и полагая $s=0$, получим дифференциальное уравнение для матрицы $\mathcal{D}(t\varphi)$:

$$\frac{d}{ds} \mathcal{D}((s+t)\varphi) \Big|_{s=0} = \frac{d}{dt} \mathcal{D}(t\varphi) = \mathcal{D}(t\varphi) \frac{d\mathcal{D}}{ds}(s\varphi) \Big|_{s=0},$$

откуда согласно (10.2) следует:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{D}(t\varphi) = i \mathcal{D}(t\varphi) (A_x \varphi_x + A_y \varphi_y + A_z \varphi_z) = i \mathcal{D}(t\varphi) (A\varphi). \quad (10.3)$$

Матрицы $\mathcal{D}(t\varphi)$ удовлетворяют граничному условию

$$\mathcal{D}(t\varphi)_{t=0} = \mathcal{D}(0) = I. \quad (10.4)$$

Система (10.3) с граничным условием (10.4) имеет решение

$$\mathcal{D}(t\varphi) = e^{it(A\varphi)} = e^{it(A_x \varphi_x + A_y \varphi_y + A_z \varphi_z)}, \quad (10.5)$$

и при $t=1$ получим выражение для $\mathcal{D}(\varphi)$ через матрицы бесконечно малого поворота A_x, A_y, A_z :

$$\mathcal{D}(\varphi) = e^{i(A_x \varphi_x + A_y \varphi_y + A_z \varphi_z)} = e^{i(A\varphi)}. \quad (10.6)$$

Таким образом, нахождение представления $\mathcal{D}(\varphi)$ сводится к нахождению матриц бесконечно малого поворота A_x, A_y, A_z .

Рассмотрим некоторые свойства матриц бесконечно малого поворота. Матрицы представления \mathcal{D} для любых вращений φ_1 и φ_2 удовлетворяют соотношению

$$\mathcal{D}(\varphi_1) \mathcal{D}(\varphi_2) \mathcal{D}^{-1}(\varphi_1) = \mathcal{D}(\varphi_1 \varphi_2 \varphi_1^{-1}). \quad (10.7)$$

Из (2.1) следует, что вращение $\varphi_1 \varphi_2 \varphi_1^{-1}$ есть поворот на угол φ_2 вокруг оси $\varphi_3 = \mathcal{R}(\varphi_1) \varphi_2$, в которую переходит ось φ_2 при вращении φ_1 . Если φ_2 есть бесконечно малое вращение, то и $\varphi_1 \varphi_2 \varphi_1^{-1}$ есть также бесконечно малый поворот. Из (10.7),

используя (10.1), найдем

$$\mathbf{I} + i\mathcal{D}(\varphi_1)(A\varphi_2)\mathcal{D}^{-1}(\varphi_1) = \mathcal{D}(A(\varphi_1\varphi_2\varphi_1^{-1})) = \mathbf{I} + iA(\varphi_1\varphi_2\varphi_1^{-1}) \quad (10.8)$$

Равенство (10.8) получено для малых векторов φ_2 , но можно показать, что оно справедливо и для произвольного угла φ_2 .

Согласно (2.23) $\varphi_1\varphi_2\varphi_1^{-1} = \varphi_3 = \mathcal{R}(\varphi_1)\varphi_2$ или в компонентах $(\varphi_3)_i = \sum_s \mathcal{R}_{is}(\varphi_1)(\varphi_2)_s$; $\mathcal{R}(\varphi_1)$ — матрица преобразования компонент вектора в неподвижной системе координат. Подставляя эти выражения в правую часть равенства (10.8), увидим, что матрица A с компонентами A_x, A_y, A_z преобразуется как координаты неподвижного вектора x, y, z в подвижной системе координат:

$$\mathcal{D}(\varphi_1)A\mathcal{D}^{-1}(\varphi_1) = \mathcal{R}(\varphi_1^{-1})A \quad (10.9)$$

или

$$\mathcal{D}(\varphi_1)A_i\mathcal{D}^{-1}(\varphi_1) = \sum_s \mathcal{R}_{is}(\varphi_1^{-1})A_s = \sum_s \mathcal{R}_{si}(\varphi_1)A_s.$$

Из (10.9) можно получить соотношения коммутации, которым удовлетворяют матрицы A_x, A_y и A_z . Пусть φ_1 есть поворот вокруг оси x на малый угол φ_x . Согласно (4.2)

$$\mathcal{R}(\varphi_x) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \varphi_x & \\ 0 & \varphi_x & 1 \end{vmatrix}. \quad (10.10)$$

Тогда из (10.9) получим при $A = A_y$:

$$(1 + i\varphi_x A_x)A_y(1 - i\varphi_x A_x) = A_y + i\varphi_x(A_x A_y - A_y A_x) = A_y - \varphi_x A_z,$$

откуда следует соотношение коммутации матриц A_x и A_y :

$$A_x A_y - A_y A_x = iA_z.$$

Аналогичным образом могут быть получены перестановочные соотношения и между другими матрицами бесконечно малого поворота, которые имеют вид, подобный (4.5):

$$A_x A_y - A_y A_x = iA_z, \quad A_x A_z - A_z A_x = iA_y, \quad A_y A_z - A_z A_y = iA_x. \quad (10.11)$$

Соотношения (10.11) получены только на основании свойств вращений и поэтому справедливы для операторов бесконечно малых поворотов для всех представлений.

Из условия унитарности представлений для малых поворотов φ

$$\mathcal{D}(\varphi)\mathcal{D}^+(\varphi) = (1 + i(A\varphi))(1 - i(A^+\varphi)) = I$$

получим

$$A = A^+, \quad (10.12)$$

т. е. матрицы \mathbf{A} являются эрмитовыми. Условие (10.12) обеспечивает унитарность представления $\mathcal{D}(\varphi)$ (10.6) для любого конечного угла φ .

Вместо матриц \mathbf{A}_x , \mathbf{A}_y и \mathbf{A}_z иногда удобно вводить матрицы $\mathbf{A}_3 = \mathbf{A}_z$ и $\mathbf{A}_\pm = \mathbf{A}_x \pm i\mathbf{A}_y$, которые, как следует из (10.11), удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_+ \mathbf{A}_3 - \mathbf{A}_3 \mathbf{A}_+ &= -\mathbf{A}_+, & \mathbf{A}_- \mathbf{A}_3 - \mathbf{A}_3 \mathbf{A}_- &= \mathbf{A}_-, \\ \mathbf{A}_+ \mathbf{A}_- - \mathbf{A}_- \mathbf{A}_+ &= 2\mathbf{A}_3. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Все матрицы бесконечно малого поворота, а следовательно, и все различные неприводимые представления группы вращений могут быть получены фактически на основе соотношений коммутации (10.11) или (10.13). При этом можно показать, что каждое неприводимое представление группы вращения \mathcal{D}_j характеризуется индексом j , пробегаящим все целые и полуцелые значения:

$$j = 0, \quad 1/2, \quad 1, \quad 3/2, \quad 2, \quad \dots, \quad (10.14)$$

который называется весом представления \mathcal{D}_j . Размерность представления \mathcal{D}_j равна $2j + 1$. Таким образом, в группе вращений могут быть представления всех размерностей.

Представление $\mathcal{D}_j(\varphi)$ согласно (10.6) определяется матрицами \mathbf{A}_x^j , \mathbf{A}_y^j и \mathbf{A}_z^j . В качестве базиса представления $\mathcal{D}_j(\varphi)$ можно выбрать собственные векторы Y_m^j матрицы \mathbf{A}_3^j , которые удовлетворяют соотношениям (см. [I. 7, I. 8])

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_3^j Y_m^j &= m Y_m^j, \\ \mathbf{A}_+^j Y_m^j &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)} Y_{m+1}^j, \\ \mathbf{A}_-^j Y_m^j &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} Y_{m-1}^j, \end{aligned} \quad (10.15)$$

где m пробегает $2j + 1$ значение:

$$m = -j, \quad -j+1, \quad -j+2, \quad \dots, \quad j-1, \quad j. \quad (10.16)$$

Если j целое, то и m целые; при полуцелых j значения m тоже полуцелые.

Из (10.15) следует, что в выбранном базисе матричные элементы матриц \mathbf{A}_3^j , \mathbf{A}_+^j и \mathbf{A}_-^j таковы:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}_3^j)_{m'm} &= m \delta_{mm'}, \\ (\mathbf{A}_+^j)_{m'm} &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \delta_{m+1, m'}, \\ (\mathbf{A}_-^j)_{m'm} &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m-1, m'}. \end{aligned} \quad (10.17)$$

Легко показать, что

$$(\mathbf{A}^2)_{mm'} = (\mathbf{A}_x^j{}^2 + \mathbf{A}_y^j{}^2 + \mathbf{A}_z^j{}^2)_{mm'} = j(j+1) \delta_{mm'}. \quad (10.18)$$

Соотношения (10.15) и (10.17) выполняются в определенном образом выбранном базисе, который называется каноническим. При переходе к любому другому эквивалентному базису при помощи некоторой линейной комбинации (7.8) функций Y_m^j матрицы бесконечно малых поворотов A^j преобразуются по (7.12). Матрицы бесконечно малых поворотов (10.17) полностью определяют по (10.6) матрицу представления $\mathcal{D}(\varphi)$ для произвольных углов поворота φ . Так, при повороте вокруг оси z на угол φ матрица $\mathcal{D}_j(\varphi)$, как следует из (10.6) и (10.17), имеет вид

$$\mathcal{D}_j(\varphi) = \begin{vmatrix} e^{i\varphi} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(j-1)\varphi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(j-2)\varphi} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-ij\varphi} \end{vmatrix}. \quad (10.19)$$

Из (10.19) легко получить характер $\chi_j(\varphi)$ представления \mathcal{D}_j ,

$$\chi_j(\varphi) = \sum_m \mathcal{D}_{j, mm}(\varphi) = \sum_{m=-j}^{m=j} e^{im\varphi} = \frac{\sin(j+1/2)\varphi}{\sin \frac{\varphi}{2}}. \quad (10.20)$$

Прямое произведение неприводимых представлений $\mathcal{D}_{j_1} \times \mathcal{D}_{j_2}$ есть представление группы вращений размерности $(2j_1+1)(2j_2+1)$; оно в общем случае приводимо и его можно разложить на приводимые представления. При этом в произведении $\mathcal{D}_{j_1} \times \mathcal{D}_{j_2}$ встретятся по одному разу все неприводимые представления с весами от j_1+j_2 до $|j_1-j_2|$:

$$\mathcal{D}_{j_1} \times \mathcal{D}_{j_2} = \sum_{\mu=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{D}_{\mu}. \quad (10.21)$$

В формуле (10.21) легко убедиться, если заметить, что для малых углов поворота φ характер $\chi_j(\varphi) = 2j+1$ равен размерности представления \mathcal{D}_j . Тогда, имея в виду тождество

$$(2j_1+1)(2j_2+1) = \sum_{\mu=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2\mu+1),$$

получим

$$\chi_{j_1 \times j_2} = \sum_{\mu=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \chi_{\mu},$$

что совпадает с (10.21).

Из (10.21) следует, что произведение двух представлений с полуцелыми весами разлагается на представления с целыми весами. Прямое представление $\mathcal{D}_{j_1} \times \mathcal{D}_{j_2}$ содержит единичное представление в том и только в том случае, когда $j_1 = j_2$.

Разложим прямое произведение $\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j$ на симметризованные и антисимметризованные представления:

$$\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j = [\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j] + \{\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j\}. \quad (10.22)$$

Согласно (9.23) характер антисимметризованного произведения представлений

$$\{\chi_j^2\} = \frac{1}{2} [\chi_j^2(\varphi) - \chi_j(2\varphi)]$$

для малых углов φ равен $(2j + 1)j$. Отсюда можно получить, что антисимметризованное произведение представлений $\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j$ разлагается на представления:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j\} = \\ = \begin{cases} \mathcal{D}_{2j-1} + \mathcal{D}_{2j-3} + \mathcal{D}_{2j-5} + \dots + \mathcal{D}_1 & \text{при } j \text{ целом,} \\ \mathcal{D}_{2j-1} + \mathcal{D}_{2j-3} + \mathcal{D}_{2j-5} + \dots + \mathcal{D}_0 & \text{при } j \text{ полуцелом.} \end{cases} \end{aligned} \quad (10.23)$$

Действительно, например, при целом j сумма характеров в правой части равенства (10.23)

$$\begin{aligned} \chi_{2j-1} + \chi_{2j-3} + \dots + \chi_1 = \\ = 2(2j-1) + 1 + 2(2j-3) + 1 + \dots + 1 = (2j+1)j, \end{aligned}$$

что совпадает с $\{\chi_j^2\}$.

Из (10.21) — (10.23) следует, что

$$\{\mathcal{D}_j \times \mathcal{D}_j\} = \begin{cases} \mathcal{D}_{2j} + \mathcal{D}_{2j-2} + \dots + \mathcal{D}_0 & \text{при } j \text{ целом,} \\ \mathcal{D}_{2j} + \mathcal{D}_{2j-2} + \dots + \mathcal{D}_1 & \text{при } j \text{ полуцелом.} \end{cases} \quad (10.24)$$

Таким образом, единичное представление содержится в симметризованном прямом произведении представлений с целым весом и в антисимметризованном произведении представлений с полуцелым весом j .

Матрицы представления \mathcal{D}_j с целым j являются однозначными функциями угла поворота φ . Как видно, например, из (10.19), поворотам φ и $\varphi + 2\pi$ отвечает одна и та же матрица \mathcal{D}_j . Поэтому базисные функции Y_m^j при целых j могут быть построены из однозначных функций координат, и матрицы представления A_x^j, A_y^j, A_z^j при целых j являются, как это следует из (4.3), (4.5), (4.6) и (10.11), (10.6), (10.1), матрицами операторов момента L_x, L_y и L_z , построенных на этих однозначных функциях координат в представлении, где L_z диагонально.

Если $j = 0$, то одномерное (скалярное) представление группы вращений осуществляет любая функция \mathcal{F} , зависящая только от модуля радиуса-вектора, $\mathcal{F}(|\mathbf{x}|)$, так как она, очевидно, остается инвариантной при всех вращениях пространства.

Для $j = 1$ имеются три функции Y_1^1, Y_{-1}^1 и Y_0^1 , осуществляющие представление \mathcal{D}_1 , которые могут быть построены из трех компонент x, y, z вектора \mathbf{x} . Канонический базис осуществляется линейными комбинациями:

$$Y_0^1 = iz, \quad Y_1^1 = -i \frac{x + iy}{\sqrt{2}}, \quad Y_{-1}^1 = i \frac{x - iy}{\sqrt{2}}. \quad (10.25)$$

Из (10.21) следует, что при помощи произведений различных функций, соответствующих векторному представлению (10.25) \mathcal{D}_1 , можно получить последовательно функции, осуществляющие все неприводимые представления \mathcal{D}_j с целым j .

Особый случай представляют представления \mathcal{D}_j с полуцелым j , когда поворотам φ и $\varphi + 2\pi$, как следует из (10.19), соответствуют две матрицы, отличающиеся знаком. Поэтому представления \mathcal{D}_j с полуцелыми j являются не однозначными, а двузначными функциями поворота, и, таким образом, строго говоря, вообще не являются представлениями группы вращений в обычном смысле.

Если каждому повороту φ сопоставлять две матрицы $\pm \mathcal{D}_j(\varphi)$, то каждая пара матриц $\pm \mathcal{D}_j(\varphi)$ осуществляет так называемое «двузначное» представление группы вращений.

Неоднозначность представления \mathcal{D}_j с полуцелым весом j связана с тем, что найденные выше представления $\mathcal{D}_j(\varphi)$ являются на самом деле обычными (однозначными) представлениями группы движения \mathcal{U} (см. § 4), которая гомоморфна группе вращений \mathcal{K} . Если представления группы \mathcal{U} , которая называется группой представлений для группы вращений, рассматривать как представления группы вращений, то при этом возникают как обычные однозначные представления сферической группы — представления \mathcal{D}_j с целым j , так и «двузначные» представления \mathcal{D}_j с полуцелым j .

Рассмотрим более подробно случай $j = 1/2$. Из формул (10.17) легко найти матрицы бесконечно малого поворота $A_x^{1/2}$, $A_y^{1/2}$ и $A_z^{1/2}$ для представления $\mathcal{D}_{1/2}$. Эти матрицы, с точностью до множителя $1/2$, пропорциональны введенным ранее матрицам Паули:

$$A_x^{1/2} = \sigma_x/2, \quad A_y^{1/2} = \sigma_y/2, \quad A_z^{1/2} = \sigma_z/2, \quad (10.26)$$

и поэтому матрица представления $\mathcal{D}_{1/2}$ совпадает с матрицей u (4.12), которая является элементом группы \mathcal{U} и описывает движение плоскости $\xi\eta$ при вращении сферы. Базисные функции $Y_{1/2}^{1/2}$ и $Y_{-1/2}^{1/2}$, осуществляющие представление $\mathcal{D}_{1/2}$ и преобразующиеся при поворотах друг через друга по (7.3),

$$\mathcal{D}(\varphi) Y_m^{1/2} = \sum_{m'=-1/2}^{m=1/2} (\mathcal{D}_{1/2}(\varphi))_{m'm} Y_{m'}^{1/2}, \quad (10.27)$$

называются спинорами ранга $1/2$, а часто просто спинорами. Они не являются однозначными функциями координат и осуществляют обычное представление группы \mathcal{U} и «двузначное» представление группы вращений.

Из формулы (10.21) следует, что при помощи произведений различного числа спиноров можно построить представления группы вращений с любым j . При этом произведение нечетного количества спиноров разлагается на полуцелые представления,

а из четного числа спиноров можно построить представления любой размерности, соответствующие целому весу.

Каждый элемент ортогональной группы представляется в виде произведения инверсии на вращение.

Поскольку инверсия коммутирует со всеми вращениями, то полное число представлений в ортогональной группе удваивается по сравнению с числом представлений в группе вращений, и каждое представление \mathcal{D}_j с весом j может являться либо четным, либо нечетным в зависимости от того, меняет или не меняет знак матрица \mathcal{D}_j при инверсии.

Так, скалярные величины, преобразующиеся по представлению \mathcal{D}_0 при вращениях и не меняющие знака при инверсии, называются истинными скалярами, если же при инверсии скаляр меняет знак, то он называется псевдоскаляром.

Величины, преобразующиеся по представлению \mathcal{D}_1 и не меняющие своего знака при инверсии, называются псевдовекторами.

§ 11. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

В § 3 рассмотрены различные точечные группы и проведено разбиение их элементов по классам. Используя свойства неприводимых представлений, можно определить характеры всех неприводимых представлений точечных групп, не находя явного вида самих представлений. Как указано в § 8, число неприводимых представлений равно числу классов, их размерности n_μ являются делителями порядка группы h , а сумма квадратов размерностей всех представлений $\sum_\mu n_\mu^2$ равна h . При этом среди представлений всегда есть одномерное единичное представление, т. е. представление, у которого характеры всех элементов равны единице. Для точечных групп эти требования однозначно определяют размерности всех представлений, а условия ортогональности и нормировки (8.21) и (8.23) однозначно определяют сами характеры.

При этом полезно учесть, что характеры обратных элементов связаны соотношением

$$\chi(g^{-1}) = \chi^*(g), \quad (11.1)$$

которое непосредственно следует из унитарности матриц (7.11). Поэтому, если g и g^{-1} входят в один класс, то характеры этого класса вещественны, а если они входят в разные классы, то характеры этих классов взаимно комплексно сопряжены.

Для многих групп можно значительно упростить процедуру определения неприводимых представлений, если использовать доказанную в § 7 теорему о том, что представления группы содержат представления всех фактор-групп, которые могут быть построены из элементов группы по содержащимся в ней инвариантным подгруппам.

При определении представлений точечных групп мы ограничимся группами, содержащими оси вращения или зеркально-поворотные оси 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков, так как только такие группы могут являться в кристаллах группами направлений. Все представления этих групп приведены в табл. 11.1 в конце параграфа. В этой таблице в соответствии с [I. 7] одномерные представления обозначаются буквами A и B , причем буквой A обозначаются представления, инвариантные по отношению к повороту вокруг главной оси z , т. е. с $\chi(c_\varphi) = 1$, а буквой B — не инвариантные с $\chi(c_\varphi) \neq 1$. Двумерные представления обозначаются буквой E и трехмерные — буквой F . Для групп, являющихся произведением групп C_i или C_s на какую-либо группу, не содержащую преобразований второго рода, представления, четные относительно операций i или σ_h , обозначаются знаком плюс, а нечетные — знаком минус.

Покажем теперь, каким образом определяются эти представления и их характеры.

Циклические группы C_n и S_n . Так как эти группы абелевы, то у них число классов равно числу элементов n и все представления одномерны, т. е. характеры $\chi(g)$ совпадают с самим представлением $\mathcal{D}(g)$. Поэтому $\chi^n(c_n) = \chi(c_n^n) = \chi(e) = 1$, и для этих групп

$$\chi(c_n^k) = e^{\frac{2\pi i M}{n} k}, \quad (11.2)$$

где M — целое число. Полагая $M = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, получим все n представлений. При этом представления с $M = r$ и $M = n - r$ попарно комплексно сопряжены.

Аналогично для групп S_{2n} , изоморфных группам C_{2n} ,

$$\chi(s_{2n}^k) = e^{\frac{\pi i M}{n} k}. \quad (11.3)$$

Группы C_s и $C_i = S_2$ изоморфны C_2 , т. е. имеют, как и эта группа, два одномерных представления. Для групп, являющихся прямым произведением двух групп (обычно второй группой является группа C_i , C_s или C_2), представления и их характеры в соответствии с (8.27) определяются умножением характеров исходных групп и общее число представлений равно произведению числа представлений в этих исходных группах.

Таким образом, можно сразу определить характеры представлений групп $C_{nh} = C_n \times C_s$ и групп $S_{4p+2} = C_{2p+1} \times C_i$, $S_{4p+2} = C_{2p+1} \times C_2$, например групп $S_6 = C_3 \times C_i$, $C_6 = C_3 \times C_2$.

Так как все представления исходных групп одномерны, то и эти группы имеют все одномерные представления.

Группы C_{2v} и $D_2 = V$ изоморфны группе $C_{2h} = C_2 \times C_s = C_2 \times C_i$ и имеют такие же представления. Фактически эти группы также являются прямым произведением групп: $C_{2v} = C_s \times C'_2$, $D_2 = C_2 \times C'_2$. При этом ось c'_2 в группе C_{2v} , в отличие от C_{2h} , лежит

в плоскости σ , а в группе D_2 оси c_2 и c'_2 взаимно перпендикулярны.

Группа C_{3v} . В отличие от всех рассмотренных выше групп, группа C_{3v} некоммутативна. Она имеет шесть элементов, распределенных по трем классам, т. е. имеет три представления. Из условия (8.12) сразу видно, что два из этих представлений одномерные и одно двумерное, причем согласно (11.1) все представления вещественны, т. е. характеры одномерных представлений могут быть равны ± 1 . Тогда из условия ортогональности характеров одномерных представлений A_1 и A_2 сразу следует, что для A_2 $\chi(e) = \chi(c_3) = 1$, а $\chi(\sigma_v) = -1$. Для оставшегося двумерного представления E $\chi(e) = 2$, и из условия ортогональности по столбцам (8.23) сразу следует, что $\chi(c_3) = -1$ и $\chi(\sigma_v) = 0$.

Группа D_3 изоморфна C_{3v} и имеет такие же представления.

Группа C_{4v} содержит 8 элементов и имеет 5 классов. Отсюда следует, что она имеет 5 представлений, из них одно двумерное, причем все представления вещественны. Из условия ортогональности по строкам (8.21) следует, что для трех одномерных неединичных представлений A_2 , B_1 и B_2 характеры для двух классов из трех: c_4 , σ_v и σ'_v , должны равняться -1 , а для остальных классов, включая один из этих трех, $\chi = 1$. Отсюда сразу получаем характеры всех одномерных представлений.

Отметим, что фактор-группа группы C_{4v} по инвариантной подгруппе C_2 , состоящей из элементов e и c_2 , содержит четыре элемента, которыми являются сопряженные совокупности: eC_2 , c_4C_2 , σ_vC_2 , σ'_vC_2 . Эта группа изоморфна группе C_{2v} . Поэтому, четыре одномерных представления группы C_{4v} совпадают с представлениями группы C_{2v} и элементы, входящие в один класс смежности, имеют одинаковые характеры.

Характеры оставшегося двумерного представления E сразу определяются из условия ортогональности по столбцам: так как столбцы, соответствующие классам c_4 , σ_v и σ'_v , ортогональны к столбцу класса e без последнего представления E , то для этих классов для представления E $\chi = 0$, а для класса c_2 $\chi(c_2) = -\chi(e) = -2$.

Группы D_4 и D_{2d} изоморфны группе C_{4v} и их представления совпадают.

Характеры представлений групп $D_{2h} = D_2 \times C_i$ и $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$ определяются перемножением характеров соответствующих групп.

Аналогичным образом определяются характеры представлений группы $D_{3d} = C_{3v} \times C_i$ и изоморфных ей групп $D_{3h} = D_3 \times C_s$, $C_{6v} = C_{3v} \times C_2$ и $D_6 = D_3 \times C_2$.

Зная характеры группы D_6 , можно сразу определить и характеры представлений группы $D_{6h} = D_6 \times C_i = D_3 \times C_{2h}$.

Группа T содержит 12 элементов и 4 класса, т. е. согласно (8.12) она имеет три одномерных и одно трехмерное представление. Подгруппа D_2 этой группы образует инвариантную подгруппу. Фактор-группа, построенная на этой подгруппе, содержит три элемента, т. е. классы смежности eD_2 , c_3D_2 и $c_3^2D_2$, и изоморфна группе C_3 . Поэтому три одномерных представления группы T совпадают с представлениями группы C_3 .

Характеры классов e и c_2 для этих представлений совпадают. Из условия ортогональности по столбцам сразу определяется характер остающегося трехмерного представления F . Так как столбцы, соответствующие классам c_3 и c_3^2 , ортогональны к столбцу класса e без этого представления, то для этих классов для представления F $\chi = 0$, а для класса c_2 $\chi(c_2) = -\frac{1}{3}\chi(e) = -1$. Зная характеры представлений группы T , можно сразу определить характеры представлений группы $T_h = T \times C_i$, имеющей соответственно четыре четных и четыре нечетных представления.

Характеры представлений группы O находятся таким же образом, как и для группы T . Для группы O фактор-группа, построенная на инвариантной подгруппе D_2 , включающей элементы e и $3c_2$, содержит шесть сопряженных совокупностей по четыре элемента каждый: $eD_2 = D_2$, c_3D_2 , $c_3^2D_2$, u_2D_2 , $u_2'D_2$, $u_2''D_2$. Эта группа изоморфна группе D_3 . Поэтому характеры двух одномерных и одного двумерного представления группы O совпадают с характерами соответствующих классов группы D_3 . Общее число элементов этой группы 24, а число классов 5. Следовательно, сумма квадратов размерностей остающихся двух представлений равна $24 - 6 = 18$, т. е. эти представления трехмерные, причем согласно (11.1) характеры всех представлений вещественны.

Обозначим характеры классов c_3 , c_2 , u_2 и c_4 для каждого из этих представлений через a_1 , b_1 , c_1 , d_1 и a_2 , b_2 , c_2 , d_2 соответственно. Из условия ортогональности характеров получим три уравнения, из которых следует, что $a_i = 0$, $b_i = -1$ и $c_i = -d_i$. Далее из условия ортогональности характеров обоих трехмерных представлений найдем, что $d_1d_2 = c_1c_2 = -1$, тогда как условие нормировки (8.17) дает $d_1^2 = d_2^2 = 1$. Отсюда для одного из представлений $d_1 = -c_1 = 1$, для другого $d_2 = -c_2 = -1$.

Таким образом, мы нашли характеры всех представлений группы O .

Группа T_d , как изоморфная группе O , имеет также пять представлений, а группа $O_h = O \times C_i = T_d \times C_i$ имеет удвоенный набор представлений, характеры которых получаются умножением характеров представлений групп O или T_d и группы C_i . Соответственно пять из этих представлений четные и пять нечетные.

Таким образом, мы определили характеры представлений всех интересующих нас точечных групп, включенных в табл. 11.1.

В табл. 11.1 и 11.2 приведены базисные функции для каждого представления, построенные из компонент полярного вектора $\mathbf{x}(x, y, z)$ или аксиального вектора $\mathbf{J}(J_x, J_y, J_z)$ и их произведений. В соответствии с правилами, изложенными в § 9, эти функции можно построить следующим образом.

Прежде всего определим характеры представления, по которому преобразуются сами компоненты \mathbf{x} или \mathbf{J} , для каждой операции g , входящей в группу. Как показано в § 10, характеры этих представлений равны

$$\begin{aligned} \chi(c_\varphi) &= \frac{\sin(3\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)}, & \chi(s_\varphi) &= \mp \chi(c_\varphi), \\ \chi(i) &= \mp 3, & \chi(\sigma) &= \mp \chi(c_2) = \pm 1. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Здесь верхний знак относится к компонентам полярного вектора (представление \mathcal{D}_1^-), нижний — аксиального (представление \mathcal{D}_1^+). Вычислив характеры по (11.4) и используя уравнение (8.19) или (8.22), определим, на какие неприводимые представления раскладывается представление \mathcal{D}_1^- или \mathcal{D}_1^+ . Видно, что в кубических группах T, T_h, T_d, O, O_h представление \mathcal{D}_1^- неприводимо и соответствует представлению F, F^-, F_1 или F_1^- . В группах, не содержащих преобразований второго рода, например T и O , компоненты \mathbf{x} и \mathbf{J} , как видно из (11.4), преобразуются по одному и тому же представлению, и в табл. 11.1, 11.2 мы указываем лишь функции, построенные из компонент x, y, z . В группе T_d компоненты J_i преобразуются по F_2 ; в группе O_h , как и во всех группах, содержащих инверсию, компоненты J_i преобразуются по четным представлениям, т. е. по F_1^+ .

Очевидно, что произведения $J_i J_k$ всегда преобразуются как $x_i x_k$.

Во всех остальных группах (кроме T, T_h, T_d, O и O_h) представления \mathcal{D}_1^\pm приводимы. В группах C_{3v}, C_{4v}, C_{6v} и изоморфных им эти представления распадаются на одно одномерное и одно двумерное. Если выбрать за z направление главной оси, то можно сразу убедиться, что компонента z во всех случаях преобразуется по одномерному представлению и, следовательно, x и y образуют базис двумерного представления. То же относится к компонентам J_z и J_x и J_y соответственно.

В оставшихся группах представления \mathcal{D}_1^\pm распадаются на три одномерных представления, и в этом случае базисные функции сразу определяются с помощью уравнения (9.11). При этом удобно использовать базис (10.25):

$$Y_1^1 = -\frac{i}{\sqrt{2}}(x + iy), \quad Y_0^1 = iz, \quad Y_1^1 = \frac{i}{\sqrt{2}}(x - iy), \quad (11.5)$$

в котором согласно (10.6), (10.17) матрица \mathcal{D}_1 для операций вращения вокруг главной оси z диагональна и равна

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{mm'}^1(c_{z\varphi}) &= e^{im\varphi} \delta_{mm'} \quad (m = 1, 0, -1), \\ \mathcal{D}_{mm'}^1(i) &= \mp \delta_{mm'}, \quad \mathcal{D}_{mm'}^1(\sigma_h) = \mp e^{i\pi m} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (11.6)$$

(минус для \mathcal{D}_1^- , плюс для \mathcal{D}_1^+).

Для вращений на угол π вокруг взаимно перпендикулярных осей

$$\mathcal{D}_1(u_{2x}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \mathcal{D}_1(u_{2y}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (11.7)$$

а

$$\mathcal{D}_1(\sigma_v) = \mathcal{D}_1(u_{2x}) \mathcal{D}_1(\sigma_h), \quad \mathcal{D}_1(\sigma'_v) = \mathcal{D}_1(u_{2y}) \mathcal{D}_1(\sigma_h).$$

Определив, по каким представлениям преобразуются компоненты x_i и J_i , можно по формулам (9.16), (9.22), (9.23) и (8.22) сразу найти, по каким представлениям преобразуются их произведения. При этом надо иметь в виду, что антисимметризованное произведение $\{xy\}$ преобразуется как J_z и т. п. Если произведение двух представлений оказывается неприводимым, то базисные функции определяются сразу; это, в частности, относится ко всем случаям, когда оба представления одномерны. В остальных случаях можно использовать формулу (9.14а). Для точечных групп произведение неприводимых представлений не содержит ни одного неприводимого представления более одного раза. Поэтому эта формула, куда входят лишь характеры $\chi_\mu(g)$, определяет одну из функций, а остальные получаются применением операций $\mathcal{D}(g)$ к этой функции. Матрицы $\mathcal{D}_{ij}(g)$, по которым в соответствии с (9.15), (9.20) или (9.21) преобразуются произведения $Y_m^1 Y_{m'}^1$, определяются прямым произведением матриц (11.6) и (11.7). Так, например, для функции Y_m^1 :

$$\mathcal{D}_{mm'}(c_\varphi) = e^{2im\varphi} \delta_{mm'}. \quad (11.8)$$

Для группы T_d находим, что $[F_1^2] = A_1 + E + F_1$. Согласно (9.26) по A_1 преобразуется инвариант $x^2 + y^2 + z^2$. Легко проверить, что симметризованные произведения $[xy]$, $[xz]$, $[yz]$ преобразуются по F_2 . Следовательно, по E преобразуются две оставшиеся линейно независимые функции, которые можно составить из x^2 , y^2 , z^2 . Эти функции можно выбрать в виде

$$R_1 = x^2 + \varepsilon_3 y^2 + \varepsilon_3^2 z^2, \quad R_2 = R_1^* = x^2 + \varepsilon_3^2 y^2 + \varepsilon_3 z^2, \quad (11.9)$$

где $\varepsilon_3 = e^{2\pi i/3}$.

Определив базисные функции, можно в случае необходимости сразу построить и матрицы соответствующих представлений. Конечно, матрицы неприводимых представлений можно построить, используя определяющие соотношения для точечных групп, приведенные в § 3, и не задавая в явном виде базисные

функции, аналогично тому, как это будет сделано для проективных представлений в § 14.

Базисные функции, содержащие более высокие степени компонент x, y, z , строятся аналогичным образом.

Если известны матрицы представлений, то при построении базисных функций можно сразу исходить из функций Y_m^j с достаточно большими j , образующих базис представления \mathcal{D}_j группы вращения. Матрицы этих представлений определяются уравнениями (10.6), (10.17). Так как все точечные группы являются подгруппами полной ортогональной группы, то все их представления могут быть получены из представлений этой группы. Используя формулу (8.19), можно определить, какие неприводимые представления точечной группы содержатся в представлении \mathcal{D}_j^\pm , и по формулам (9.14) найти сами функции.

Таблица 11.1

Характеры представлений точечных групп

Группа E

E	e
A	1

Группы C_2, C_i, C_s

C_2			e	c_2	C_2	C_i	C_s
	C_i		e	i			
		C_s	e	σ_h			
A	A^+	A^+	1	1	z	J_x, J_y, J_z	x, y
B	A^-	A^-	1	-1	x, y	x, y, z	z

Группа C_3

C_3	e	c_3	c_3^2	z
A	1	1	1	
B_1	1	ϵ_3	ϵ_3^2	
B_2	1	ϵ_3^2	ϵ_3	$x + iy$
$\epsilon_3 = e^{2\pi i/3}$				

Группы C_4 , S_4

C_4		e	c_4	c_2	c_4^3	C_4	S_4
	S_4	e	s_4	c_2	s_4^3		
A	A	1	1	1	1	z	J_z
B_1	B_1	1	-1	1	-1	$x^2 - y^2$	z
B_2	B_2	1	i	-1	$-i$	$x - iy$	$x - iy, J_x + iJ_y$
B_3	B_3	1	$-i$	-1	i	$x + iy$	$x + iy, J_x - iJ_y$

Группы D_3 , C_{3v}

D_3		e	$2c_3$	$3u_2$	D_3	C_{3v}
	C_{3v}	e	$2c_3$	$3\sigma_v$		
A_1	A_1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$	z
A_2	A_2	1	1	-1	z	J_z
E	E	2	-1	0	x, y	x, y, J_x, J_y

Группы D_4 , C_{4v} , D_{2d}

D_4			e	c_2	$2c_4$	$2u_2$	$2u_2'$	D_4	C_{4v}	D_{2d}
	C_{4v}		e	c_2	$2c_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_v'$			
		D_{2d}	e	c_2	$2s_4$	$2u_2$	$2\sigma_d$			
A_1	A_1	A_1	1	1	1	1	1	$z^2, x^2 + y^2$	z	$z^2, x^2 + y^2$
A_2	A_2	A_2	1	1	1	-1	-1	z	J_z	J_z
B_1	B_1	B_1	1	1	-1	1	-1	$x^2 - y^2$	$x^2 - y^2$	$x^2 - y^2$
B_2	B_2	B_2	1	1	-1	-1	1	xy	xy	xy, z
E	E	E	2	-2	0	0	0	x, y	x, y, J_x, J_y	x, y, J_x, J_y

Таблица 11.1 (продолжение)

Группа T

T	e	$3c_2$	$4c_3$	$4c_3^2$	
A	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
B_1	1	1	ϵ_3	ϵ_3^2	$x^2 + \epsilon_3^2 y^2 + \epsilon_3 z^2$
B_2	1	1	ϵ_3^2	ϵ_3	$x^2 + \epsilon_3 y^2 + \epsilon_3^2 z^2$
E	3	-1	0	0	x, y, z

Группы T_d и O

T_d		e	$8c_3$	$3c_2$	$6\sigma_d$	$6s_4$	T_d	O
	O	e	$8c_3$	$3c_2$	$6u_2$	$6c_4$		
A_1	A_1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$	
A_2	A_2	1	1	1	-1	-1	$[J_x J_y J_z]$	xyz
E	E	2	-1	2	0	0	$x^2 + \epsilon_3 y^2 + \epsilon_3^2 z^2, x^2 + \epsilon_3^2 y^2 + \epsilon_3 z^2$ $J_x^2 + \epsilon_3^2 J_y^2 + \epsilon_3 J_z^2, J_x^2 + \epsilon_3 J_y^2 + \epsilon_3^2 J_z^2$	
F_1	F_1	3	0	-1	-1	1	J_x, J_y, J_z	x, y, z
F_2	F_2	3	0	-1	1	-1	$x, y, z; xy, xz, yz;$ $[J_x J_y], [J_x J_z], [J_y J_z]$	xy, xz, yz

Группы $D_2 = C_2 \times C_2'$, $C_{2h} = C_2 \times C_i$, $C_{2v} = C_2 \times C_s'$

D_2			e	c_{2z}	c_{2x}	c_{2y}	D_2	C_{2h}	C_{2v}
	C_{2h}		e	c_2	i	σ_h			
		C_{2v}	e	c_2	σ_v	σ_v'			
A_1	A^+	A^+	1	1	1	1	x^2, y^2, z^2	J_z	z
A_2	A^-	A^-	1	1	-1	-1	z	z	J_z
B_1	B^+	B^+	1	-1	1	-1	x	J_x, J_y	$y; J_x$
B_2	B^-	B^-	1	-1	-1	1	y	x, y	$x; J_y$

Группы $C_6 = C_3 \times C_2$, $C_{3h} = C_3 \times C_s$, $S_6 = C_3 \times C_i$

C_6			e	c_3	c_3^2	c_2	c_6^5	c_6	C_6	C_{3h}	S_6
C_{3h}			e	c_3	c_3^2	σ_h	s_3	s_3^5			
S_6			e	c_3	c_3^2	i	s_6^5	s_6			
A_1	A^+	A^+	1	1	1	1	1	1	z	J_z	J_z
A_2	A^-	A^-	1	1	1	-1	-1	-1	$(x \pm iy)^3$	z	z
B_1	B_1^+	B_1^+	1	ϵ_3	ϵ_3^2	1	ϵ_3	ϵ_3^2	$(x - iy)^2$	$x + iy$	$J_x + iJ_y$
B_2	B_1^-	B_1^-	1	ϵ_3	ϵ_3^2	-1	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_3^2$	$x + iy$	$J_x + iJ_y$	$x + iy$
B_3	B_2^+	B_2^+	1	ϵ_3^2	ϵ_3	1	ϵ_3^2	ϵ_3	$(x + iy)^2$	$x - iy$	$J_x - iJ_y$
B_4	B_2^-	B_2^-	1	ϵ_3^2	ϵ_3	-1	$-\epsilon_3^2$	$-\epsilon_3$	$x - iy$	$J_x - iJ_y$	$x - iy$

Группы $D_6 = D_3 \times C_2$, $C_{6v} = C_{3v} \times C_2$, $D_{3h} = D_3 \times C_s$

D_6			e	$2c_3$	$3u_2$	c_2	$2c_6$	$3u_2'$	D_6	C_{6v}	D_{3h}
C_{6v}			e	$2c_3$	$3\sigma_v$	c_2	$2c_6$	$2\sigma_v'$			
D_{3h}			e	$2c_3$	$3u_2$	σ_h	$2s_3$	$3\sigma_v'$			
A_1	A_1	A_1^+	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	A_2	A_1^-	1	1	1	-1	-1	-1	$(x + iy)^3 + (x - iy)^3$	$(x + iy)^3 + (x - iy)^3$	$iz [(x + iy)^3 - (x - iy)^3]$
A_3	A_3	A_2^+	1	1	-1	1	1	-1	z	J_z	J_z
A_4	A_4	A_2^-	1	1	-1	-1	-1	1	$i[(x + iy)^3 - (x - iy)^3]$	$i[(x + iy)^3 - (x - iy)^3]$	z
E_1	E_1	E^+	2	-1	0	2	-1	0	$(x + iy)^2, (x - iy)^2$	$(x + iy)^2, (x - iy)^2$	x, y
E_2	E_2	E^-	2	-1	0	-2	1	0	x, y	$x, y; J_x, J_y$	J_x, J_y

Для остальных восьми групп

$$C_{4h} = C_4 \times C_i, C_{6h} = C_6 \times C_i, D_{2h} = D_2 \times C_i, D_{3d} = D_3 \times C_i$$

$$D_{4h} = D_4 \times C_i, D_{6h} = D_6 \times C_i, T_h = T \times C_i, O_h = O \times C_i = T_d \times C_i$$

каждому из представлений исходной группы \mathcal{D} соответствуют два представления \mathcal{D}^\pm с характерами $\chi(ig) = \pm\chi(g)$, по которым преобразуются соответственно четные и нечетные функции от координат. Все функции $\varphi(J)$ преобразуются по четным представлениям.

Таблица 11.2

Базисные функции для групп T_d, O, O_h

Представления групп			Базисные функции	
T_d	O	O_h	$\varphi(x)$	$\varphi(J)$
A_1	A_1	A_1^+	$x^2 + y^2 + z^2, x^4 + y^4 + z^4$	
A_2	A_2	A_2^+	$x^4(y^2 - z^2) + y^4(z^2 - x^2) + z^4(x^2 - y^2)$	$[J_x J_y J_z]$
E	E	E^+	$x^2 + \varepsilon_3 y^2 + \varepsilon_3^2 z^2,$ $x^2 + \varepsilon_3^2 y^2 + \varepsilon_3 z^2,$ $x^4 + \varepsilon_3 y^4 + \varepsilon_3^2 z^4,$ $x^4 + \varepsilon_3^2 y^4 + \varepsilon_3 z^4$	$J_x^2 + \varepsilon_3 J_y^2 + \varepsilon_3^2 J_z^2,$ $J_x^2 + \varepsilon_3^2 J_y^2 + \varepsilon_3 J_z^2$
F_1	F_1	F_1^+	$xy(x^2 - y^2), xz(x^2 - z^2),$ $yz(y^2 - z^2)$	$J_x, J_y, J_z; J_x^3, J_y^3, J_z^3$
F_2	F_2	F_2^+	$xy, xz, yz; xyz^2, xzy^2, yzx^2;$ $zx^2y^2, xy^2z^2, yx^2z^2$	$[J_x J_y], [J_x J_z], [J_y J_z];$ $V_x = [J_x (J_y^2 - J_z^2)],$ V_y, V_z
A_1	A_2	A_1^-	xyz	
A_2	A_1	A_2^-	$xyz [x^4(y^2 - z^2) +$ $+ y^4(z^2 - x^2) + z^4(x^2 - y^2)]$	
E	E	E^-	$xyz(x^2 + \varepsilon_3 y^2 + \varepsilon_3^2 z^2),$ $xyz(x^2 + \varepsilon_3^2 y^2 + \varepsilon_3 z^2)$	
F_1	F_2	F_1^-	$x(y^2 - z^2), y(z^2 - x^2), z(x^2 - y^2);$ $x^3(y^2 - z^2), y^3(z^2 - x^2),$ $z^3(x^2 - y^2)$	
F_2	F_1	F_2^-	$x, y, z; x^3, y^3, z^3; x^5, y^5, z^5$	

Таблица умножения для групп T_d и O

	A_1	A_2	E	F_1	F_2
A_1	A_1	A_2	E	F_1	F_2
A_2	A_2	A_1	E	F_2	F_1
E	E	E	$A_1 + A_2 + E$	$F_1 + F_2$	$F_1 + F_2$
F_1	F_1	F_2	$F_1 + F_2$	$A_1 + E + F_1 + F_2$	$A_2 + E + F_1 + F_2$
F_2	F_2	F_1	$F_1 + F_2$	$A_2 + E + F_1 + F_2$	$A_1 + E + F_1 + F_2$

§ 12. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП. ЗОНА БРИЛЛУЭНА. ГРУППА ВОЛНОВОГО ВЕКТОРА

Отыскание неприводимых представлений пространственной группы мы начнем с нахождения представлений группы трансляций, которая, как было показано в § 6, является ее абелевым нормальным делителем.

Представления группы трансляций

Поскольку группа трансляций абелева, то все ее представления одномерны.

Пусть функция $\varphi(\mathbf{x})$ осуществляет неприводимое унитарное представление группы трансляций, заданной образующими элементами \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 . Тогда при трансляции на векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 функция φ умножается на множители λ_1 , λ_2 и λ_3 . (Из условия унитарности представления следует, что все λ по модулю равны единице.)

$$\begin{aligned} (e | \mathbf{a}_1) \varphi &= \varphi(t_{\mathbf{a}_1}^{-1} \mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{a}_1) = \lambda_1 \varphi(\mathbf{x}), \\ t_{\mathbf{a}_2} \varphi(\mathbf{x}) &= \lambda_2 \varphi(\mathbf{x}), \quad t_{\mathbf{a}_3} \varphi(\mathbf{x}) = \lambda_3 \varphi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (12.1)$$

Функцию $\varphi(\mathbf{x})$, осуществляющую неприводимое унитарное представление группы трансляций, будем обозначать $\varphi_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$.

Из (12.1) следует, что для общего элемента \mathbf{a} группы трансляций

$$\mathbf{a} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3$$

$\varphi_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$ преобразуется следующим образом:

$$(e | \mathbf{a}) \varphi_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(\mathbf{x}) = \varphi_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = \lambda_1^{m_1} \lambda_2^{m_2} \lambda_3^{m_3} \varphi_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(\mathbf{x}). \quad (12.2)$$

Задание чисел λ_1 , λ_2 и λ_3 полностью определяет неприводимое представление группы трансляций.

Вместо трех чисел λ_1 , λ_2 и λ_3 удобно ввести один вектор \mathbf{k} по определению:

$$\lambda_1 = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1}, \quad \lambda_2 = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}, \quad \lambda_3 = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_3}. \quad (12.3)$$

По заданным λ_1 , λ_2 и λ_3 вектор \mathbf{k} , однако, определяется не однозначно. Чтобы выяснить характер этой неоднозначности, введем векторы \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 по определению:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega_0} [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega_0} [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_0} [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2], \quad (12.4)$$

где $\Omega_0 = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])$ — объем элементарной ячейки. Из (12.4) видно, что векторы \mathbf{b}_i ортогональны векторам \mathbf{a}_j :

$$\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (12.5)$$

и поэтому удовлетворяют уравнениям

$$e^{i\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j} = 1. \quad (12.6)$$

Используя векторы \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 как базис, можно построить векторы

$$\mathbf{b} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3, \quad (12.7)$$

где n_1 , n_2 и n_3 — целые положительные или отрицательные числа или нуль. Концы таких векторов образуют решетку, которая называется обратной (или взаимной) по отношению к решетке Браве, определяемой векторами \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 . При этом если векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 имеют размерность длины, то векторы обратной решетки \mathbf{b} имеют размерность обратной длины (волнового вектора).

Из (12.6) следует, что равенства (12.3) определяют вектор \mathbf{k} с точностью до произвольного вектора обратной решетки (12.7).

Отметим некоторые свойства обратной решетки. Из определения векторов \mathbf{b} (или из соотношений (12.5)) можно показать, что точечная группа симметрии обратной решетки совпадает с группой симметрии прямой решетки Браве. Однако тип обратной решетки Браве в общем случае отличается от типа прямой решетки.

Используя определение векторов обратной решетки, можно установить показанное в табл. 12.1 соответствие между типами прямой и обратной решеток.

Объем элементарной ячейки обратной решетки, как видно из (12.5), равен $(2\pi)^3/\Omega_0$.

Таким образом, каждое неприводимое представление группы трансляций характеризуется вектором \mathbf{k} таким, что

$$t_{\mathbf{a}} \varphi_{\mathbf{k}} = (e | \mathbf{a}) \varphi_{\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (12.8)$$

Так как вектор \mathbf{k} определен с точностью до произвольного вектора обратной решетки, то два вектора, \mathbf{k} и \mathbf{k}' , будем называть эквивалентными и обозначать $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}'$, если они отличаются на вектор обратной решетки.

Система	Тип прямой решетки	Тип обратной решетки
Триклинная	Простая	Простая
Моноклинная	Простая С центрированными основаниями	Простая С центрированными основаниями
Ортогональная	Простая С центрированными основаниями Объемноцентрированная Гранецентрированная	Простая С центрированными основаниями Гранецентрированная Объемноцентрированная
Тетрагональная	Простая Объемноцентрированная	Простая Объемноцентрированная
Ромбоэдрическая	Простая	Простая
Гексагональная	Простая	Простая
Кубическая	Простая Объемноцентрированная Гранецентрированная	Простая Гранецентрированная Объемноцентрированная

Зона Бриллюэна

За область определения вектора \mathbf{k} может быть выбрана элементарная ячейка в обратной решетке. Однако это не всегда удобно, так как выбор ее в значительной мере произволен и, кроме того, в общем случае элементарная ячейка не инвариантна по отношению к преобразованиям из группы симметрии обратной решетки Браве. Инвариантные параллелепипеды Браве (или призма Браве для гексагональной системы) имеют объем, в общем случае превышающий объем элементарной ячейки.

Можно построить такую элементарную ячейку, которая будет, с одной стороны, инвариантна по отношению ко всем преобразованиям группы \mathcal{H} , а с другой стороны, будет иметь объем, равный объему элементарной ячейки; при этом решетка Браве может быть получена путем неограниченного повторения таких ячеек. Эта ячейка в прямой решетке называется симметризованной ячейкой Вигнера — Зейтца, а в обратной решетке — первой зоной Бриллюэна или просто зоной Бриллюэна. Зона Бриллюэна не является параллелепипедом, а в общем случае

представляет собой некоторый многогранник. Обычно за область определения вектора \mathbf{k} и выбирают первую зону Бриллюэна.

Рассмотрим способ построения зоны Бриллюэна. Выберем произвольный узел обратной решетки O за начало отсчета. Зоной Бриллюэна является такая область, каждая точка которой ближе (не дальше) к нулевому узлу O , чем к любому другому узлу обратной решетки Браве. Для построения зоны Бриллюэна соединим точку O с различными узлами обратной решетки Браве, определяемыми векторами \mathbf{b} (12.7), и построим перпендикулярные к \mathbf{b} плоскости, находящиеся на равных расстояниях между O и соответствующим узлом (рис. 17). Ограниченный этими плоскостями многогранник и будет зоной Бриллюэна.

Система построенных таким образом плоскостей, ограничивающих зону Бриллюэна, и сама эта ячейка инвариантны к группе симметрии решетки Браве. В частности, эта ячейка имеет центром симметрии точку O . Объем ее равен объему элементарной ячейки.

Уравнение для векторов \mathbf{x} , лежащих на плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{b} , и расположенных на расстоянии $b/2$ от начала координат, имеет вид

$$\mathbf{x}\mathbf{b} = b^2/2. \quad (12.9)$$

Выбирая разные векторы \mathbf{b} , из (12.9) легко получить в декартовых координатах аналитические выражения для плоскостей, ограничивающих зону Бриллюэна.

Из указанного способа построения симметризованной ячейки следует, что внутри зоны Бриллюэна нет ни одной пары эквивалентных векторов \mathbf{k} . Если же вектор \mathbf{k} лежит на границе зоны Бриллюэна, то всегда существует по крайней мере один эквивалентный ему вектор \mathbf{k}' , также лежащий на границе зоны Бриллюэна.

Рассмотрим вид зон Бриллюэна в порядке подчинения систем.

В кубической системе возможны три типа решеток: простая Γ_c , гранецентрированная Γ_c^f и объемноцентрированная Γ_c^v .

Для простой кубической решетки зона Бриллюэна является кубом (рис. 18, а). Видно, что она образуется путем пересечения плоскостей, перпендикулярных ребрам куба, образующего элементарную ячейку. Для гранецентрированной кубической

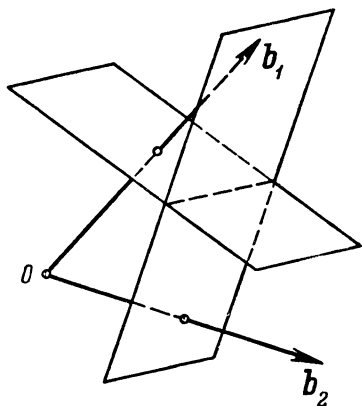


Рис. 17. Построение зоны Бриллюэна.

решетки *) зона Бриллюэна показана на рис. 18, в; она образуется в результате пересечения двенадцати плоскостей, перпендикулярных шести осям второго порядка. Это двенадцатигранник, все грани которого — ромбы. Оси третьего и четвертого порядка в случае гранецентрированной решетки пересекают симметризованную ячейку в ее вершинах.

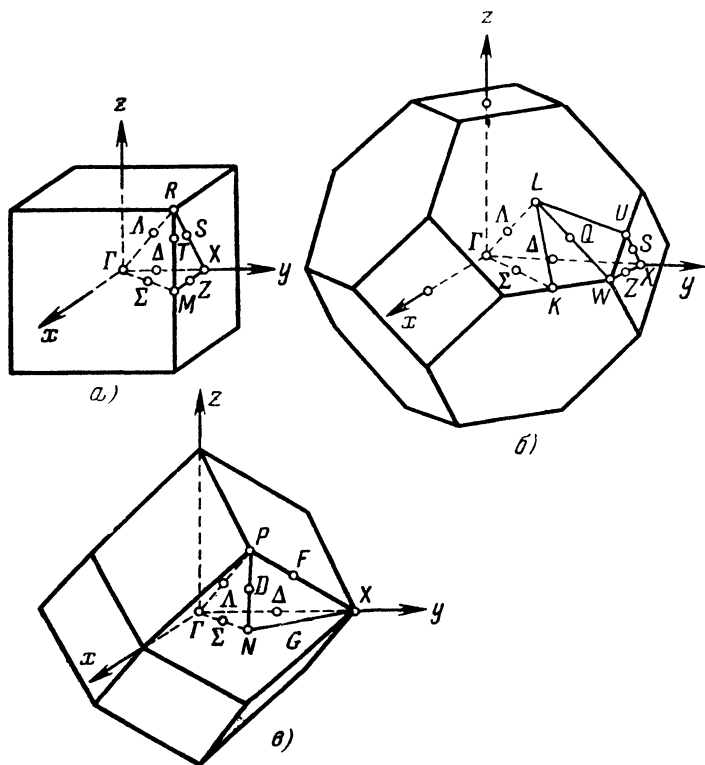


Рис. 18. Зона Бриллюэна для кубических решеток. а) Простая кубическая решетка; б) объемноцентрированная обратная решетка; в) гранецентрированная обратная решетка.

В случае объемноцентрированной решетки симметризованная ячейка образуется в результате пересечения шести плоскостей, перпендикулярных трем осям четвертого порядка, и восьми плоскостей, перпендикулярных четырем осям третьего порядка. Это четырнадцатигранник, шесть граней которого — квадраты, а восемь граней являются правильными шестиугольниками. Оси чет-

*) Во избежание недоразумений подчеркнем, что здесь всюду имеется в виду тип *обратной* решетки. Связь типов прямой и обратной решетки приведена выше на стр. 106.

вертого порядка проходят через центры квадратных граней, оси третьего порядка — через центры шестиугольных граней (рис. 18, б).

В квадратной системе возможны два типа решеток: простая Γ_q и объемноцентрированная Γ_q^v .

В случае простой решетки Γ_q зона Бриллюэна по форме совпадает с элементарной ячейкой и имеет вид четырехугольной

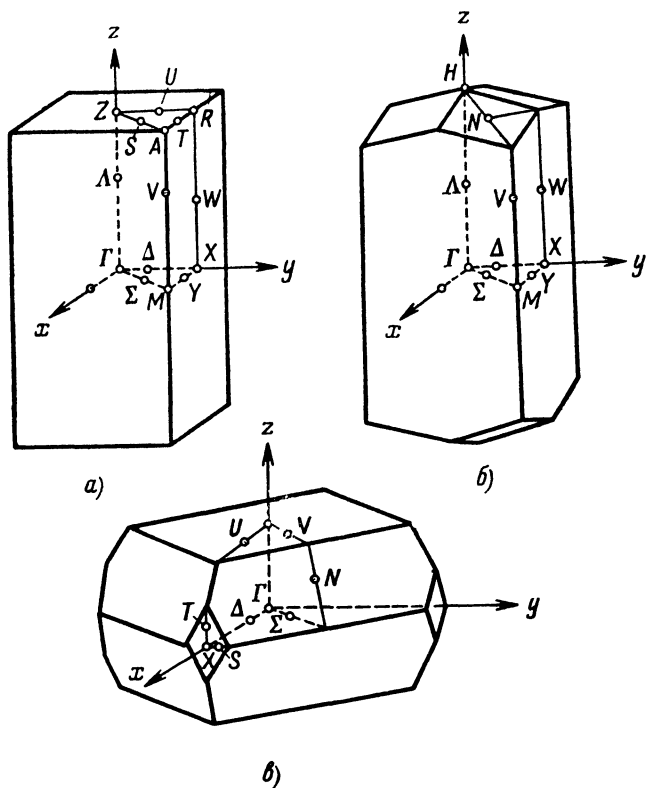


Рис. 19. Зона Бриллюэна для решеток квадратной системы. а) Простая решетка; б) объемноцентрированная, высота больше диагонали квадрата; в) объемноцентрированная, высота меньше диагонали квадрата.

призмы (рис. 19, а). Она может быть получена из зоны Бриллюэна для простой кубической решетки путем растяжения (или сжатия) вдоль оси четвертого порядка.

Для объемноцентрированной решетки в зависимости от соотношения ребер a и c параллелепипеда Браве обратной решетки возможны два типа симметризованной ячейки, так как в зависимости от того, будет ли $c > \sqrt{2}a$ или $c < \sqrt{2}a$, система плоскостей, ограничивающих симметризованную ячейку, будет

различна. Для случая $c > \sqrt{2}a$ зона Бриллюэна изображена на рис. 19, б; если же $c < \sqrt{2}a$, то симметризованная ячейка имеет вид, изображенный на рис. 19, в. Эта ситуация становится

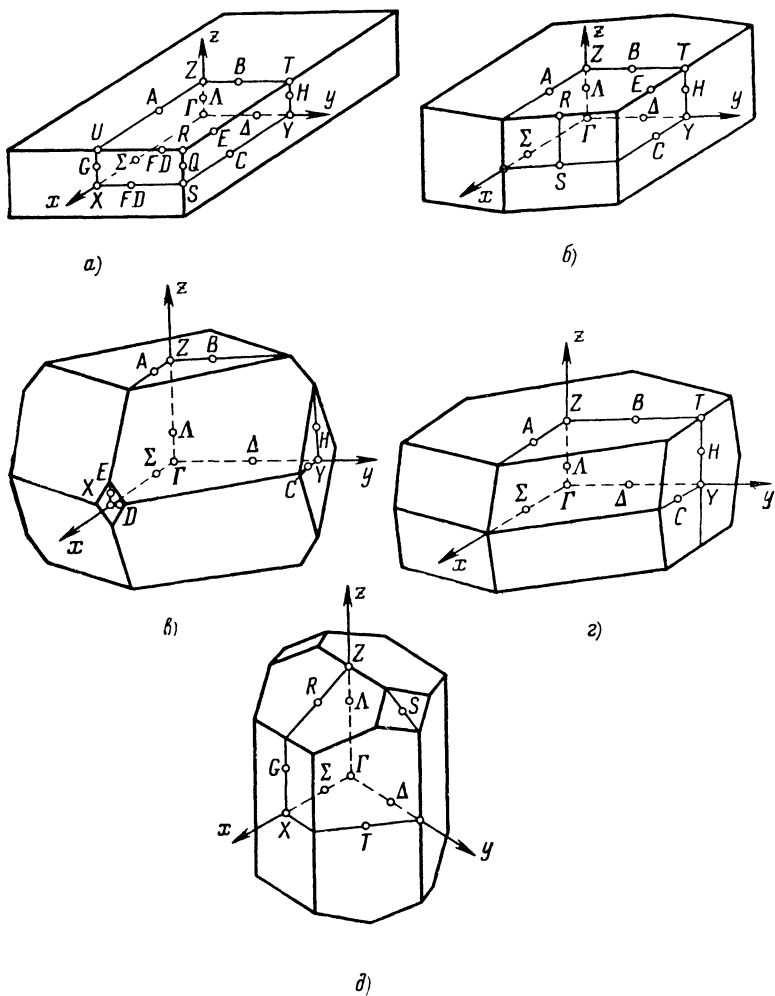


Рис. 20. Зона Бриллюэна для решеток ортогональной системы а) Простая б) решетка с центрированными основаниями; в) объемноцентрированная, высота больше диагонали прямоугольной базы; г) объемноцентрированная, высота меньше диагонали базы; д) гранецентрированная решетка.

наглядной, если вспомнить, что согласно рис. 16 решетка Γ_c^v может быть получена в результате непрерывной деформации решетки Γ_c^v и Γ_c^f .

В первом случае при небольшой деформации $c < \sqrt{2}a$ (так как в кубической решетке $c = a$) и симметризованная ячейка рис. 19, в получается из симметризованной ячейки для типа Γ_c^v путем растяжения (или сжатия) вдоль оси четвертого порядка.

Решетка Γ_c^f эквивалентна объемноцентрированной решетке квадратной системы при $c = \sqrt{2}a$. Если растянуть эту решетку вдоль оси четвертого порядка, то c превысит $\sqrt{2}a$. Следовательно, симметризованная ячейка для Γ_c^v в этом случае (рис. 19, б) получается из зоны Бриллюэна решетки Γ_c^f (рис. 18) в результате растяжения вдоль оси четвертого порядка.

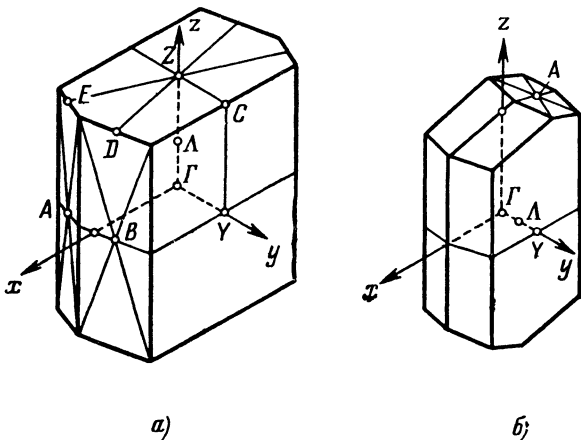


Рис. 21. Зона Бриллюэна для решеток моноклинной системы. а) Простая решетка; б) с центрированными основаниями.

В ортогональной системе возможны четыре типа решеток: Γ_0 , Γ_0^b , Γ_0^f , Γ_0^v . Для простой решетки зона Бриллюэна является прямым параллелепипедом с прямоугольными гранями (рис. 20, а). Зона Бриллюэна для решетки с центрированными основаниями изображена на рис. 20, б. Это шестиугольная призма. Для объемноцентрированной решетки, в зависимости от отношения параметров, возможны три типа зон Бриллюэна. На рис. 20, в и г показаны два типа зон Бриллюэна для объемноцентрированной решетки. Симметризованная ячейка для решетки Γ_0^f показана на рис. 20, д.

В моноклинной системе возможны два типа решеток Браве: простая Γ_m и с центрированными основаниями Γ_m^b . Параллелепипед Браве в моноклинной системе определяется четырьмя параметрами: углом α между ребрами основания и длинами ребер. Поэтому вид симметризованных ячеек будет различен для различных соотношений между этими параметрами. Для простой решетки Γ_m зона Бриллюэна показана на рис. 21, а. В зави-

симости от параметров, характеризующих элементарную ячейку, для решетки Γ_m^b может быть пять типов зон Бриллюэна. Один из них показан на рис. 21, б.

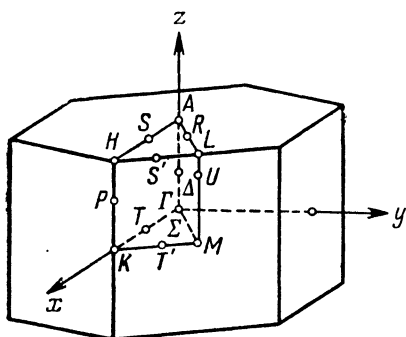


Рис. 22. Зона Бриллюэна для гексагональной решетки.

В триклинной системе возможна только простая решетка Браве Γ_1 . При этом, в зависимости от формы элементарной ячейки, имеются три типа зон Бриллюэна.

В гексагональной системе имеется один тип решетки и один тип зоны Бриллюэна, показанный на рис. 22.

В ромбоэдрической системе существует один тип решетки Браве, но в зависимости от степени вытянутости ее элементарной ячейки — ромбоэдра — воз-

можны два типа зоны Бриллюэна, получаемых растяжением зоны Бриллюэна для гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решеток, показанных на рис. 18, б и в. Эти решетки показаны на рис. 23.

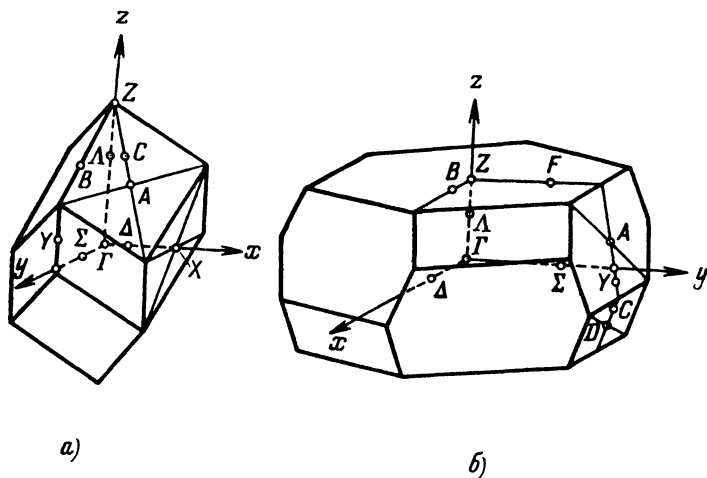


Рис. 23. Зона Бриллюэна для ромбоэдрических решеток. Три равных по длине вектора трансляции лежат на поверхности конуса вокруг оси третьего порядка. а) Высота конуса больше, чем $\sqrt{2}r$, где r — радиус его основания; б) высота конуса меньше, чем $\sqrt{2}r$.

Таким образом, у 14 решеток Браве всего имеются 24 типа зон Бриллюэна. Эти симметризованные ячейки подробнее рассмотрены в монографиях [1. 10, 1. 14].

будем подразумевать вектор $k' = rk$). Поскольку набор векторов k_i ($i = 1, 2, \dots, n$) для функций, преобразующихся по представлению \mathcal{D} , охватывает всю совокупность векторов k , то для всех $g \in G$ векторы rk совпадают с одним из векторов k_i ($i = 1, \dots, n$).

Возьмем какой-нибудь вектор k_1 из звезды представления и рассмотрим все возможные векторы rk_1 . Все они входят в звезду, причем среди них могут быть и одинаковые. При этом могут быть две возможности.

1) Совокупность векторов rk_1 исчерпывает всю звезду представления \mathcal{D} . Такая звезда называется неприводимой. Ясно, что всякая неприводимая звезда полностью определяется заданием какого-либо вектора k_1 , а остальные получаются путем применения операций g из пространственной группы G . Поэтому неприводимую звезду можно характеризовать одним вектором k_1 . Будем обозначать ее $\{k_1\}$.

2) Может оказаться, однако, что совокупность gk_1 не исчерпывает всю звезду. Такая звезда называется приводимой. Каждая приводимая звезда может быть разложена на неприводимые звезды следующим образом.

Поскольку gk_1 не исчерпывают всю звезду, то возьмем из звезды какой-либо вектор k_2 , не принадлежащий неприводимой звезде $\{k_1\}$, и, построив всевозможные векторы gk_2 , образуем неприводимую звезду $\{k_2\}$. Эти звезды не имеют общих векторов, так как это означало бы, что для каких-то r_1 и r_2 $r_1k_1 = r_2k_2$, или $r_2^{-1}r_1k_1 = k_2$, что противоречит предположению о том, что

$k_2 \notin \{k_1\}$. Если звезды $\{k_1\}$ и $\{k_2\}$ не исчерпывают звезду представления \mathcal{D} , то можно выбрать вектор k_3 , $k_3 \notin \{k_1\}$, $k_3 \notin \{k_2\}$, и построить неприводимую звезду $\{k_3\}$. Продолжая этот процесс до полного исчерпания звезды представления \mathcal{D} , мы тем самым разобьем ее на неприводимые звезды.

В дальнейшем при изучении неприводимых представлений пространственных групп для нас будут существенны неприводимые звезды, так как мы сейчас покажем, что всякое неприводимое представление обладает неприводимой звездой. (Отметим, что обратное утверждение неверно, так как в центре зоны Бриллюэна, т. е. при $k = 0$, любому представлению, в том числе и приводимому, соответствует неприводимая звезда, состоящая из единственного вектора $k = 0$.)

Пусть звезда представления \mathcal{D} состоит из двух неприводимых звезд $\{k_1\}$ и $\{k_2\}$ и соответственно пространство базисных функций, осуществляющих представление \mathcal{D} , распадается на два подпространства L_1 и L_2 . Нетрудно видеть, что каждое из этих подпространств инвариантно относительно группы G , так как любая функция $g\varphi_k$, где $k \in \{k_1\}$, характеризуется волновым вектором $k' = gk \in \{k_1\}$ и, таким образом, принадлежит подпространству L_1 . Аналогично, при всех $g \in G$ функции $g\varphi_{\tilde{k}}$, $\tilde{k} \in \{k_2\}$,

принадлежат подпространству L_2 . Но наличие двух инвариантных подпространств базисных функций свидетельствует о приводимости представления \mathcal{D} . Поэтому неприводимое представление не может иметь приводимую звезду.

Группа волнового вектора; малые представления

Группой волнового вектора G_k называется подгруппа полной пространственной группы, состоящая из таких элементов h , которые или не меняют вектор k , или переводят его в ему эквивалентный, т. е. для любого $h \in G_k$

$$hk = k \quad \text{или} \quad hk \equiv k. \quad (12.12)$$

Так как внутри зоны Бриллюэна нет ни одной пары эквивалентных векторов, то для точек внутри зоны Бриллюэна в группе G_k содержатся только такие элементы, которые не меняют вектора k . Если же k лежит на границе зоны Бриллюэна, то в G_k входят также элементы, переводящие k в эквивалентный ему вектор.

Как и в пространственной группе, в группе волнового вектора G_k имеется инвариантная подгруппа трансляций. При этом фактор-группа по этой подгруппе изоморфна точечной группе направлений F_k , включающей все «поворотные» элементы $r \in F_k$, которые либо не меняют k , либо переводят его в эквивалентный. Группа F_k определяется вектором k и является подгруппой группы направлений F , характеризующей кристаллический класс. В частном случае в точке $k = 0$ $F_k = F$; при этом $G_k = G$.

Разложим группу направлений F на классы смежности по подгруппе F_k :

$$F = F_k + \{r_2 F_k\} + \{r_3 F_k\} + \dots + \{r_n F_k\}, \quad (12.13)$$

где $r_2, r_3, \dots, r_n \in F$, но $r_2 \notin F_k, r_3 \notin F_k, \{r_2 F_k\}$ и т. д.

Возьмем какой-либо вектор k , определяющий неприводимую звезду $\{k\}$, и построим векторы

$$k_1 = k, \quad k_2 = r_2 k, \quad k_3 = r_3 k, \quad \dots, \quad k_n = r_n k. \quad (12.14)$$

Эти векторы и определяют звезду вектора k . Действительно, среди них нет равных, так как из равенства $k_i = k_j$ следовало бы, что $r_i = r_j r$, $r \in F_k$, т. е. $r_i \in \{r_j F_k\}$, что противоречит способу построения сопряженных совокупностей. С другой стороны, для любого вектора $r_i r k$, где $r \in F_k$, имеем $r_i r k = r_i k = k_i$.

Поскольку совокупности (12.13) исчерпывают всю группу F , то векторы $r_i k$ и дают все «лучи» звезды $\{k\}$. Зная группу волнового вектора $G_k(h)$ для одного из лучей звезды, легко построить группу волнового вектора для любого вектора k_i , входящего

в звезду $\{k\}$. Эта группа $G_{k_i}(h_i)$ состоит из элементов

$$h_i = g_i h g_i^{-1}, \quad (12.15)$$

где $h \in G_k$, $g_i = (r_i | \alpha_i + a)$, а r_i определяется из (12.13). Действительно, $h_i k_i = g_i h g_i^{-1} k_i = k_i$.

Группа $G_{k_i}(h_i)$ изоморфна группе G_k .

Число «лучей» звезды, т. е. различных векторов k_i (12.14), образующих звезду $\{k\}$, равно числу сопряженных совокупностей (12.13), т. е. индексу подгруппы F_k . Таким образом, между числом f элементов группы F , порядком l подгруппы F_k и числом n «лучей» звезды $\{k\}$ имеется соотношение

$$f = ln. \quad (12.16)$$

Если группа волнового вектора совпадает с группой G , то звезда состоит из одного луча; если же G_k является группой трансляций, то число лучей звезды $\{k\}$ равно порядку группы F .

Покажем, что представление группы волнового вектора \mathcal{D}^k , называемое также малым представлением, однозначно определяет представление пространственной группы \mathcal{D} с неприводимой звездой $\{k\}$. Для этого рассмотрим представление \mathcal{D}^k группы волнового вектора G_k размерности m с базисными функциями

$$\varphi_k^{(1)}, \varphi_k^{(2)}, \dots, \varphi_k^{(m)}, \quad (12.17)$$

которые под действием операции $h \in G_k$ преобразуются по формуле

$$h\varphi_k^{(t)} = \sum_q \mathcal{D}_{qt}^k(h) \varphi_k^{(q)} \quad (q, t = 1, 2, \dots, m), \quad (12.18)$$

где $\mathcal{D}_{qt}^k(h)$ — матричные элементы представления \mathcal{D}^k .

Наряду с функциями (12.17) построим еще $n-1$ наборов по m функций:

$$\varphi_{k_i}^{(1)} = g_i \varphi_k^{(1)}, \quad \varphi_{k_i}^{(2)} = g_i \varphi_k^{(2)}, \dots, \varphi_{k_i}^{(m)} = g_i \varphi_k^{(m)}; \quad g_i = (r_i | \alpha_i) \quad (i = 2, 3, \dots, n). \quad (12.19)$$

В качестве элемента g_i можно выбирать элемент, соответствующий любому представителю из сопряженной совокупности $\{r_i F_k\}$. Для того чтобы фиксировать выбор базисных функций (12.19), в качестве представителей будем выбирать сами элементы $g_i = (r_i | \alpha_i)$ из (12.13). Линейное пространство из функций

$$\varphi_{k_i}^{(t)} \equiv \varphi_i^{(t)} \quad (t = 1, 2, \dots, m; i = 1, 2, \dots, n)$$

образует базис некоторого представления \mathcal{D} , обладающего неприводимой звездой $\{k\}$.

Выразим матричные элементы этого представления через матричные элементы $\mathcal{D}^k(h)$, $h \in G_k$. Возьмем некоторый эле-

мент $g \in G$, и пусть g переводит вектор k_i в k_j , не равный в общем случае k_i :

$$gk_i = k_j. \quad (12.20)$$

Возьмем элемент

$$h = g_j^{-1} g g_i, \quad (12.21)$$

где g_j и g_i — выбранные указанным выше способом элементы, переводящие k в k_j и k_i , соответственно:

$$g_i k = k_i, \quad g_j k = k_j.$$

Легко видеть, что $h \in G_k$, так как согласно (12.21) $hk = = g_j^{-1} g g_i k = k$. Подействуем g на $\Phi_{k_i}^{(p)}$; согласно (12.19) и (12.18)

получим

$$g\Phi_{k_i}^{(p)} = g_j h g_i^{-1} \Phi_{k_i}^{(p)} = g_j h \Phi_k^{(p)} = g_j \sum_q \mathcal{D}_{qp}^k(h) \Phi_k^{(q)} = \sum_q \mathcal{D}_{qp}^k(h) \Phi_{k_j}^{(q)}. \quad (12.22)$$

В (12.22) h зависит от i и j согласно (12.21). Формула (12.22) и дает матричные элементы представления $\mathcal{D}_{ij}^{qp}(g)$:

$$\mathcal{D}_{ij}^{qp}(g) = \mathcal{D}_{qp}^k(g_j^{-1} g g_i). \quad (12.23)$$

В частности, согласно (12.23) представления группы волнового вектора $\mathcal{D}(h_i)$ с элементами $h_i \in G_{k_i}$ (12.15) связаны с представлениями $\mathcal{D}(h)$ группы G_k соотношениями

$$\mathcal{D}_{ii}^{pq}(h_i) = \mathcal{D}_{pq}^{k_i}(h_i) = \mathcal{D}_{pq}^k(g_i^{-1} h_i g_i) \quad (12.24)$$

или

$$\mathcal{D}^{k_i}(g_i h_i g_i^{-1}) = \mathcal{D}^k(h).$$

Представление \mathcal{D}^{k_i} , по которому преобразуются функции Φ_{k_i} , в общем случае не эквивалентно представлению \mathcal{D}^k , так как для произвольных g равенство

$$\mathcal{D}^k(g_i^{-1} g g_i) \neq \mathcal{D}^k(g_i^{-1}) \mathcal{D}^k(g) \mathcal{D}^k(g_i)$$

не имеет места, поскольку матрица \mathcal{D}^k определена только для элементов $h \in G_k$, а g и g_i могут и не входить в G_k .

Таким образом, формулы (12.23) и (12.24) определяют представление полной пространственной группы через неприводимые представления группы волнового вектора \mathcal{D}^k .

Если представление \mathcal{D}^k неприводимо, то и представление пространственной группы также будет неприводимым. Если представление \mathcal{D}^k унитарно, то и полное представление \mathcal{D} , определяемое формулами (12.22), унитарно.

Размерность N неприводимого представления пространственной группы, очевидно, равна произведению размерности s_k малого представления \mathcal{D}^k на число различных лучей n в звезде

вектора $\{k\}$:

$$N = s_k n. \quad (12.25)$$

В общем случае произвольной точки внутри зоны Бриллюэна, где группой волнового вектора является группа основных трансляций, размерность представления пространственной группы равна числу лучей, т. е. порядку f группы направлений F .

Приведенное рассмотрение свело задачу о нахождении неприводимых представлений пространственных групп к нахождению неприводимых представлений группы волнового вектора G_k . Эти представления определяются заданием волнового вектора k и номером неприводимого представления группы G_k .

Представления группы волнового вектора G_k

Бесконечная группа G_k имеет абелев нормальный делитель — группу трансляций, фактор-группа по этой подгруппе изоморфна точечной группе F_k .

Установим связь между представлением группы волнового вектора $\mathcal{D}^k(h)$ и представлениями ее фактор-группы F_k . Как указывалось выше, всякий элемент $h \in G_k$ имеет вид

$$h = (r | a + \alpha) = (r | \beta), \quad \beta = a + \alpha,$$

где a — трансляция на периоды решетки Браве, r — «поворотный» элемент, $r \in F_k$, а α — вектор непримитивной трансляции, соответствующий поворотному элементу r . Сопоставим каждому малому представлению $\mathcal{D}^k(h)$ матрицу $\mathcal{D}(r)$:

$$\mathcal{D}(r) = e^{ik\beta} \mathcal{D}^k(h), \quad h = (r | \beta), \quad \beta = a + \alpha. \quad (12.26)$$

Хотя в группе G_k каждому поворотному элементу r соответствует бесконечно много элементов h , отличающихся основными трансляциями, матрица $\mathcal{D}(r)$ в (12.26) определяется только поворотным элементом r , так как для любого малого представления \mathcal{D}^k согласно (12.10)

$$\mathcal{D}^k(ht_a) = e^{-ika} \mathcal{D}^k(h). \quad (12.27)$$

Установим теперь правило умножения матриц $\mathcal{D}(r)$. Пусть

$$h_1 = (r_1 | \beta_1), \quad \beta_1 = a_1 + \alpha_1, \quad h_2 = (r_2 | \beta_2), \quad \beta_2 = a_2 + \alpha_2$$

и

$$\mathcal{D}(r_1) = e^{ik\beta_1} \mathcal{D}^k(h_1), \quad \mathcal{D}(r_2) = e^{ik\beta_2} \mathcal{D}^k(h_2).$$

Составим произведение

$$\mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = e^{ik(\beta_1 + \beta_2)} \mathcal{D}^k(h_1 h_2).$$

Согласно (2.22a)

$$h_1 h_2 = (r_1 | \beta_1) (r_2 | \beta_2) = (r_1 r_2 | \beta_1 + r_1 \beta_2),$$

поэтому

$$\mathcal{D}^k(h_1 h_2) = e^{-ik(\beta_1 + r_1 \beta_2)} \mathcal{D}(r_1 r_2).$$

Следовательно,

$$\mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = \omega(r_1, r_2) \mathcal{D}(r_1 r_2), \quad (12.28)$$

где

$$\omega(r_1, r_2) = e^{i(\mathbf{k} - r_1^{-1} \mathbf{k}) \cdot \mathbf{a}_2} = e^{i \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_2}. \quad (12.29)$$

Так как $\mathbf{b}_1 \equiv \mathbf{k} - r_1^{-1} \mathbf{k}$ есть вектор обратной решетки или нуль, то $e^{i \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_2} = 1$.

Соотношение (12.28) показывает, что из-за наличия множителя $\omega(r_1, r_2)$ в законе умножения (12.28) матрицы $\mathcal{D}(r)$ не образуют представление группы $F_{\mathbf{k}}$ в обычном смысле, и поэтому представления группы волнового вектора $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}(h)$ в общем случае не связаны непосредственно с обычным представлением точечной группы $F_{\mathbf{k}}$. Если же для всех элементов r_1 и $r_2 \in F_{\mathbf{k}}$ имеем $\omega(r_1, r_2) = 1$, то, как видно из соотношения (12.28), матрицы $\mathcal{D}(r)$ осуществляют представление группы $F_{\mathbf{k}}$, и тогда формулы (12.26) сразу определяют представление группы волнового вектора $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}$ по известным представлениям точечных групп. Это имеет место, в частности, в двух весьма важных случаях:

1) если точка \mathbf{k} находится внутри зоны Бриллюэна, когда $\mathbf{k} - r^{-1} \mathbf{k} = 0$ для всех r ;

2) если группа волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$ не содержит нетривиальных винтовых осей и плоскостей скольжения.

Если в группе волнового вектора имеются нетривиальные винтовые оси или плоскости скольжения и точка \mathbf{k} лежит на границе зоны Бриллюэна, то для отыскания представлений группы волнового вектора надо построить матрицы $\mathcal{D}(r)$, удовлетворяющие соотношению (12.28). Этому вопросу посвящен следующий параграф.

§ 13. ПРОЕКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Представления, удовлетворяющие соотношениям

$$\mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = \omega(r_1, r_2) \mathcal{D}(r_1 r_2), \quad \text{где } |\omega(r_1, r_2)| = 1, \quad (13.1)$$

называются проективными или лучевыми представлениями, а совокупность чисел $\omega(r_1, r_2)$ называется фактор-системой*).

Проективные представления играют важную роль в приложениях теории групп к квантовой механике.

Фактор-система задается \hbar^2 коэффициентами $\omega(r_1, r_2)$, где \hbar — порядок точечной группы \mathcal{G} . Эти коэффициенты не могут

*) Проективные представления групп впервые были введены Шуром, который развил общую теорию проективных представлений и разработал методы построения проективных представлений конечных групп [4.1]. Связь проективных представлений с представлениями пространственной группы указана Ковалевым и Любарским. Отметим, что в монографии Любарского [1.3] проективные представления называются нагруженными, а фактор-система $\omega(r_1, r_2)$ — нагрузкой.

быть произвольными, так как из ассоциативности группового умножения $r_1(r_2r_3) = (r_1r_2)r_3$ и (13.1) следует, что

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(r_1)\mathcal{D}(r_2)\mathcal{D}(r_3) &= \mathcal{D}(r_1)\mathcal{D}(r_2r_3)\omega(r_2, r_3) = \\ &= \mathcal{D}(r_1r_2r_3)\omega(r_1, r_2r_3)\omega(r_2, r_3) = \mathcal{D}(r_1r_2r_3)\omega(r_1r_2, r_3)\omega(r_1, r_2), \end{aligned}$$

откуда следуют тождества, которым должна удовлетворять фактор-система $\omega(r_1, r_2)$ для любых r_1, r_2 и r_3 :

$$\omega(r_1, r_2r_3)\omega(r_2, r_3) = \omega(r_1r_2, r_3)\omega(r_1, r_2). \quad (13.2)$$

Можно показать, что условия (13.2) являются не только необходимыми, но и достаточными, т. е. что любая совокупность чисел $\omega(r_1, r_2)$, удовлетворяющих соотношениям (13.2), может являться фактор-системой данной группы.

Однако соотношения (13.2) не определяют фактор-систему однозначно. Действительно, если $\mathcal{D}(r)$ есть некоторое проективное представление, принадлежащее фактор-системе $\omega(r_1, r_2)$, то любое другое представление

$$\mathcal{D}'(r) = \frac{\mathcal{D}(r)}{u(r)}, \quad (13.3)$$

где $u(r)$ — произвольная однозначная функция на группе \mathcal{G} , $|u(r)| = 1$, также осуществляет проективное представление группы \mathcal{G} , но с другой фактор-системой $\omega'(r_1, r_2)$:

$$\mathcal{D}'(r_1)\mathcal{D}'(r_2) = \omega'(r_1, r_2)\mathcal{D}'(r_1r_2), \quad (13.4)$$

где

$$\omega'(r_1, r_2) = \frac{\omega(r_1, r_2)u(r_1r_2)}{u(r_1)u(r_2)}.$$

Легко убедиться, что новая фактор-система $\omega'(r_1, r_2)$ тоже удовлетворяет соотношениям (13.2).

Таким образом, из любой фактор-системы с помощью соотношений (13.4) можно получить неограниченное число новых фактор-систем, соответствующих различным выборам функций $u(r)$. Все фактор-системы и представления, связанные соотношениями (13.2), называются проективно-эквивалентными или p -эквивалентными. Совокупность всех p -эквивалентных фактор-систем называется классом фактор-систем.

Заметим, что два различных p -эквивалентных представления могут иметь и одинаковую фактор-систему. Для этого надо, чтобы $u(r_1)u(r_2) = u(r_1r_2)$, т. е. чтобы функция $u(r)$ осуществляла какое-либо из обычных одномерных представлений группы \mathcal{G} . В общем случае p -эквивалентные фактор-системы не совпадают. Однако соотношения (13.4) не исчерпывают все возможные для данной группы \mathcal{G} фактор-системы, так как могут существовать фактор-системы, которые не могут быть сведены одна к другой при помощи преобразования (13.4), т. е. у группы может быть несколько классов фактор-систем.

Так, если для двух фактор-систем $\omega(r_1, r_2)$ и $\omega'(r_1, r_2)$ для какой-либо пары коммутирующих элементов a и b

$$\frac{\omega'(a, b)}{\omega'(b, a)} \neq \frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)},$$

то эти фактор-системы относятся к различным классам, так как преобразование (13.4) не меняет отношения $\omega(a, b)/\omega(b, a)$ для коммутирующих элементов a и b .

Как будет следовать из результатов § 14, для всех точечных групп имеет место и обратное утверждение: если для всех пар коммутирующих элементов a и b

$$\frac{\omega'(a, b)}{\omega'(b, a)} = \frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)},$$

то фактор-системы ω и ω' p -эквивалентны. В частности, если $\omega(a, b) = \omega(b, a)$, то данная фактор-система p -эквивалентна единичной с $\omega(r_1, r_2) = 1$.

Зная проективные представления $\mathcal{D}(r)$ для одной фактор-системы $\omega(r_1, r_2)$, можно по (13.3) найти все проективные представления для всех остальных фактор-систем $\omega'(r_1, r_2)$ этого класса. Поэтому достаточно найти проективные представления для одной фактор-системы из каждого класса. Хотя общее число возможных фактор-систем неограниченно, можно показать, что для всякой конечной группы число классов фактор-систем конечно [I. 5, 4.1].

Для всякой группы существует класс K_0 , в котором все коэффициенты фактор-системы равны единице, $\omega(r_1, r_2) = 1$. Согласно (13.4) к этому классу относятся и все другие фактор-системы, для которых $\omega(r_1, r_2)$ имеет вид

$$\omega(r_1, r_2) = \frac{u(r_1)u(r_2)}{u(r_1r_2)}.$$

Классу K_0 с $\omega(r_1, r_2) = 1$ соответствуют обычные представления группы \mathcal{G} , называемые векторными представлениями. Другие представления класса K_0 с $\omega(r_1, r_2) \neq 1$ проективно эквивалентны векторным.

Пусть для некоторой группы \mathcal{G} существует m классов фактор-систем: K_0, K_1, \dots, K_{m-1} . Возьмем два класса K_p и K_q с фактор-системами $\omega^p(r_1, r_2)$, $\omega^q(r_1, r_2)$ и построим фактор-систему

$$\omega^R(r_1, r_2) = \omega^p(r_1, r_2) \omega^q(r_1, r_2),$$

которая является фактор-системой одного из классов K_R , принадлежащего к этой совокупности. Класс K_R , к которому принадлежит $\omega^R(r_1, r_2)$, определяется только классами K_p и K_q фактор-систем ω^p и ω^q , так как из (13.4) следует, что произведение фактор-систем, p -эквивалентных ω^p и ω^q , дает фактор-систему, p -эквивалентную ω^R . Таким образом можно

определить закон умножения классов

$$K_R = K_p K_q.$$

Совокупность классов K_0, K_1, \dots, K_{m-1} образует группу относительно этого закона умножения, в которой роль единичного элемента играет класс K_0 . Эта группа абелева, так как из определения умножения классов следует, что $K_p K_q = K_q K_p$. Она называется мультипликатором группы \mathcal{G} . Порядок мультипликатора, т. е. число элементов этой группы, равен числу классов фактор-систем. Если мультипликатор группы состоит только из одного элемента K_0 , то для группы возможны только обычные — векторные — представления. Число классов фактор-систем и структура мультипликатора определяются структурой группы \mathcal{G} .

Рассмотрим теперь свойства проективных представлений. Прежде всего отметим, что, как и для векторных представлений, матрицы \mathcal{D} проективных представлений для конечных групп всегда можно выбирать унитарными.

Два проективных представления $\mathcal{D}(r)$ и $\mathcal{D}'(r)$ называются эквивалентными, если существует унитарная матрица \mathbf{S} такая, что для всех элементов $r \in \mathcal{G}$

$$\mathcal{D}(r) = \mathbf{S} \mathcal{D}'(r) \mathbf{S}^{-1}. \quad (13.5)$$

Для того чтобы отличать p -эквивалентные представления (13.3) от эквивалентных представлений (13.5), последние мы будем называть унитарно эквивалентными.

Унитарно эквивалентные представления относятся к одной фактор-системе, так как

$$\mathcal{D}'(r_1) \mathcal{D}'(r_2) = \mathbf{S}^{-1} \mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) \mathbf{S} = \omega(r_1, r_2) \mathcal{D}'(r_1 r_2). \quad (13.6)$$

Выше отмечалось, что два p -эквивалентных представления в частном случае могут иметь одну фактор-систему, однако такие проективные представления, вообще говоря, не являются унитарно эквивалентными.

Проективное представление \mathcal{D} называется приводимым, если существует такая матрица \mathbf{S} , что для всех матриц представления $\mathcal{D}(r)$ эквивалентная ей матрица $\mathcal{D}'(r)$ (13.5) распадается на инвариантные подматрицы меньшего порядка.

Существенной особенностью проективных представлений является то, что если для группы \mathcal{G} возможны несколько классов фактор-систем, то только среди представлений, соответствующих классу K_0 , имеются одномерные представления (например, единичное), а для других классов $K_p \neq K_0$ одномерных представлений не существует. Для доказательства этого положения предположим, что для некоторого класса K_p существует одномерное представление $\mathcal{D}_0(r)$:

$$\mathcal{D}_0(r_1) \mathcal{D}_0(r_2) = \omega^p(r_1, r_2) \mathcal{D}_0(r_1 r_2), \quad (13.7)$$

где $\omega^p(r_1, r_2)$ — фактор-система, относящаяся к классу K_p . Выберем в качестве $u(r)$ само представление $\mathcal{D}_0(r)$, тогда из (13.4) и (13.7) видно, что фактор-система $\omega^p(r_1, r_2)$ p -эквивалентна фактор-системе $\omega'^p(r_1, r_2) = 1$, т. е. $\omega^p(r_1, r_2)$ принадлежит классу K_0 . Таким образом, классы $K_p \neq K_0$ не могут иметь одномерных представлений.

Число классов фактор-систем и структура мультипликатора определяются свойствами группы \mathcal{G} . Шур [4.1] дал общий способ построения всех проективных представлений конечной группы, сведя задачу к нахождению векторных, т. е. обычных, представлений некоторой расширенной группы \mathcal{G}' . Для построения группы \mathcal{G}' нужно предварительно найти мультипликатор группы \mathcal{G} .

Пусть группа \mathcal{G} определяется образующими элементами a, b, c, \dots , удовлетворяющими ν соотношениям:

$$a^{n_i} b^{l_i} c^{p_i} \dots = e \quad (i = 1, 2, \dots, \nu), \quad (13.8)$$

где n_i, l_i, p_i — целые числа или нули. Пусть $\mathbf{A} = \mathcal{D}(a)$, $\mathbf{B} = \mathcal{D}(b)$, $\mathbf{C} = \mathcal{D}(c)$ и т. д. — матрицы неприводимого представления \mathcal{D} группы \mathcal{G} для образующих элементов a, b, c, \dots .

Если \mathcal{D} является векторным представлением группы \mathcal{G} , то матрицы $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$ удовлетворяют таким же соотношениям, как и сами образующие элементы:

$$\mathbf{A}^{n_i} \mathbf{B}^{l_i} \mathbf{C}^{p_i} \dots = \mathbf{I} \quad (i = 1, 2, \dots, \nu). \quad (13.9)$$

Однако в случае проективных представлений в соотношениях (13.9) появляются дополнительные численные множители α_i ($|\alpha_i| = 1$), определяемые коэффициентами фактор-системы, и соотношения (13.9) принимают вид *)

$$\alpha_i \mathbf{A}^{n_i} \mathbf{B}^{l_i} \mathbf{C}^{p_i} \dots = \mathbf{I}, \quad (13.10)$$

где

$$\alpha_i^{-1} = \{ \omega(a^{n_i}, b^{l_i} c^{p_i} \dots) \omega(b^{l_i}, c^{p_i} \dots) \dots \} \omega_{an_i} \omega_{bl_i} \omega_{cp_i} \dots, \quad (13.11)$$

$$\omega_{an_i} = \omega(a, a) \omega(a, a^2) \dots \omega(a, a^{n_i-1}), \quad (13.12)$$

$$\omega_{bl_i} = \omega(b, b) \omega(b, b^2) \dots \omega(b, b^{l_i-1})$$

и т. д. Переходя к p -эквивалентным представлениям

$$\mathbf{A}' = \frac{\mathbf{A}}{u(a)}, \quad \mathbf{B}' = \frac{\mathbf{B}}{u(b)}, \quad \mathbf{C}' = \frac{\mathbf{C}}{u(c)}, \dots, \quad (13.13)$$

получим

$$\alpha'_i \mathbf{A}'^{n_i} \mathbf{B}'^{l_i} \mathbf{C}'^{p_i} \dots = \mathbf{I}, \quad (13.14)$$

*) Здесь и в дальнейшем будем считать, что для всякой фактор-системы $\omega(e, e) = 1$. Это всегда можно сделать, выбирая $u(e) = \omega(e, e)$, при этом $\mathcal{D}(e) = \mathbf{I}$. Из (12.29) видно, что для пространственных групп условие $\omega(e, e) = 1$ выполняется тождественно из определения фактор-системы. Из этого условия и тождества (13.2) следует, что $\omega(e, r) = \omega(r, e) = 1$ для всех r , что для пространственных групп следует и из (12.29).

где

$$\alpha'_i = \alpha_i u^{n_i}(a) u^{l_i}(b) u^{p_i}(c) \dots \quad (13.15)$$

Если путем определенного выбора функций $u(a)$, $u(b)$, $u(c)$, ... можно свести соотношения (13.14) к соотношениям (13.9), т. е. обратить все α'_i в единицы, то проективные представления группы \mathcal{G} эквивалентны векторным. В общем случае, однако, никаким выбором функций u нельзя свести все коэффициенты α'_i к единице, т. е. в соотношениях (13.14) всегда остается некоторое минимальное количество независимых коэффициентов α'_i . Пусть число таких коэффициентов равно $\nu' \leq \nu$. В дальнейшем мы будем считать, что соотношения (13.14) содержат только такие независимые параметры α'_i .

Из соотношений (13.14) получаются уравнения для определения возможных значений коэффициентов α'_i . Выбирая различным образом функции $u(a)$, $u(b)$, $u(c)$, ..., можно привести эти уравнения к наиболее простому виду. Как будет видно из результатов § 14, для всех 32 точечных групп, входящих в пространственные группы, эти уравнения можно представить в виде

$$\alpha'^2_i = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, \nu'). \quad (13.16)$$

Уравнения (13.16) дают все возможные p -неэквивалентные значения коэффициентов α'_i , среди которых, конечно, есть значения $\alpha'_i = 1$, соответствующие векторным представлениям. Каждый допустимый уравнениями (13.16) набор величин α'_i определяет класс фактор-систем, так как из способа определения возможных значений α'_i следует, что все p -эквивалентные фактор-системы характеризуются одним и тем же набором величин α'_i . Для точечных групп, когда $\alpha'_i = \pm 1$, число классов, т. е. число элементов мультипликатора, равно $2^{\nu'}$.

Если два набора $\alpha'_i(1)$ и $\alpha'_i(2)$ соответствуют классам фактор-систем K_1 и K_2 , то набор $\alpha'_i(3) = \alpha'_i(1)\alpha'_i(2)$ соответствует классу $K_3 = K_1K_2$. Составляя всевозможные произведения допустимых наборов коэффициентов α'_i , можно получить закон умножения классов фактор-систем, т. е. структуру мультипликатора. При этом наборы допустимых значений α'_i образуют представление мультипликатора. Используя этот метод, мы в § 14 построим мультипликаторы для всех 32 точечных групп, которые определяют симметрию направлений в кристалле.

Будем теперь рассматривать α'_i не как численные коэффициенты, а как некоторые элементы α_i , коммутирующие между собой и удовлетворяющие уравнениям

$$\alpha_i^2 = e, \quad \alpha_i \alpha_j = \alpha_j \alpha_i \quad (i, j = 1, 2, \dots, \nu'). \quad (13.17)$$

Соотношения (13.17) определяют группу H с образующими элементами α_i . Эта группа содержит $2^{\nu'}$ элементов h вида

$$h = \prod_{t=1, 2, \dots, \nu'} \alpha_i^{p_t t} \quad (p_t = 0, 1). \quad (13.18)$$

Группа H с элементами $h_1 = e, h_2, \dots, h_m$ ($m = 2^{\nu}$) изоморфна группе мультипликатора.

Рассмотрим теперь группу \mathcal{G}' с образующими элементами a, b, c, \dots, α_i , которая определяется соотношениями, аналогичными (13.14); при этом элементы α_i , образующие группу H , коммутируют со всеми элементами группы \mathcal{G} . Группа \mathcal{G}' определяется, таким образом, соотношениями

$$\alpha_i a^{n_i} b^{l_i} c^{p_i} = e, \quad \alpha_i^2 = e, \quad a \alpha_i = \alpha_i a, \quad b \alpha_i = \alpha_i b, \quad (13.19)$$

$$c \alpha_i = \alpha_i c, \quad \dots, \quad \alpha_i \alpha_j = \alpha_j \alpha_i.$$

Каждый элемент g' группы \mathcal{G}' имеет вид $g' = hr$, где $h \in H, r \in \mathcal{G}$. При этом, если в группе \mathcal{G} произведение элементов $r_1 r_2$ было равно элементу r_3 , т. е. $r_1 r_2 = r_3$, то в группе \mathcal{G}' в это произведение в общем случае входит также и некоторый элемент h из группы H , зависящий от элементов r_1 и r_2 , который мы обозначим h_{12} :

$$r_1 r_2 = h_{12} r_3. \quad (13.20)$$

Группа H является центром в группе \mathcal{G}' , так как по построению группы \mathcal{G}' все ее элементы коммутируют с элементами группы H . Разложим группу \mathcal{G}' по сопряженным совокупностям S_i относительно подгруппы H :

$$S_0 = \{H\}, \quad S_1 = \{r_1 H\}, \quad S_2 = \{r_2 H\}, \quad \dots, \quad S_k = \{r_k H\}, \quad (13.21)$$

где $r_i \in \mathcal{G}$. Фактор-группа по подгруппе H , т. е. группа с элементами S_0, S_1, \dots, S_k , изоморфна группе \mathcal{G} .

Действительно, установим взаимно однозначное соответствие между элементами фактор-группы S_i и элементами r_i группы \mathcal{G} следующим образом:

$$S_i \leftrightarrow r_i. \quad (13.22)$$

Тогда, если $S_i \leftrightarrow r_i$ и $S_j \leftrightarrow r_j$, то и $S_i S_j \leftrightarrow r_i r_j$, так как произведение совокупностей $S_i S_j$ есть совокупность всевозможных элементов $r_i r_j h$, т. е. совокупность $\{r_i r_j H\}$, соответствующая элементу $r_i r_j$. Это означает, что группа \mathcal{G}' гомоморфна группе \mathcal{G} , при этом ядро гомоморфизма — группа H — изоморфна мультипликатору.

Построенная таким образом группа \mathcal{G}' порядка $m k$ называется группой представлений группы \mathcal{G} . Покажем сейчас, что все проективные представления группы \mathcal{G} могут быть получены из векторных представлений группы \mathcal{G}' .

Возьмем какое-нибудь векторное представление \mathcal{D}_μ группы \mathcal{G}' . Пусть r_1 и $r_2 \in \mathcal{G}$. Их произведение в \mathcal{G}' , как указывалось выше, в общем случае содержит $h_{12} \in H$ (13.20). Так как \mathcal{D}_μ — векторные (т. е. обычные) представления, то из (13.20) получим

$$\mathcal{D}_\mu(r_1) \mathcal{D}_\mu(r_2) = \mathcal{D}_\mu(h_{12} r_3) = \mathcal{D}_\mu(h_{12}) \mathcal{D}_\mu(r_3). \quad (13.23)$$

Поскольку h_{12} коммутирует со всеми элементами из \mathcal{G}' , то и $\mathcal{D}_\mu(h_{12})$ коммутирует со всеми матрицами $\mathcal{D}_\mu(g')$, $g' \in \mathcal{G}'$. Поэтому, согласно первой лемме Шура (уравнение (8.1a)), $\mathcal{D}_\mu(h_{12})$ кратна единичной матрице,

$$\mathcal{D}_\mu(h_{12}) = \omega_{12}^\mu I, \quad (13.24)$$

и (13.23) принимает вид

$$\mathcal{D}_\mu(r_1) \mathcal{D}_\mu(r_2) = \omega_{12}^\mu \mathcal{D}_\mu(r_3) = \omega_{12}^\mu \mathcal{D}_\mu(r_1 r_2). \quad (13.25)$$

Будем рассматривать теперь совокупность матриц $\mathcal{D}_\mu(r)$ только для элементов $r \in \mathcal{G}$. Эти матрицы удовлетворяют закону умножения (13.25), т. е. осуществляют проективное представление группы \mathcal{G} , в котором роль фактор-системы $\omega(r_1, r_2)$ играют числа ω_{12}^μ , определяемые по (13.24). Определяющие соотношения для элементов группы \mathcal{G}' (13.19) приводят к соотношениям для матричных элементов представления $\mathcal{D}_\mu(r)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\mu(a_i) \mathcal{D}_\mu(a^{n_i}) \mathcal{D}_\mu(b^{l_i}) \mathcal{D}_\mu(c^{p_i}) \dots = \\ = \alpha_i'^\mu (\mathcal{D}_\mu(a))^{n_i} (\mathcal{D}_\mu(b))^{l_i} (\mathcal{D}_\mu(c))^{p_i} \dots = I, \end{aligned} \quad (13.26)$$

так как согласно (13.24) $\mathcal{D}_\mu(a_i) = \alpha_i'^\mu I$, где $\alpha_i'^\mu$ — число ($(\alpha_i'^\mu)^2 = 1$). Соотношения (13.26) совпадают с соотношениями (13.14) для матричных элементов проективных представлений. Поэтому каждое получаемое таким образом проективное представление относится к одному из возможных классов фактор-систем группы \mathcal{G} .

Покажем сейчас, что совокупность всех неприводимых представлений \mathcal{D}_μ группы \mathcal{G}' дает проективные представления, относящиеся ко всем классам фактор-систем.

Действительно, каждое из неприводимых представлений \mathcal{D}_μ группы \mathcal{G}' осуществляет, конечно, и некоторое представление ее абелевой подгруппы H , причем это представление в общем случае приводимо, а сами числа ω^μ в (13.24) при этом осуществляют неприводимые представления группы H . Поскольку совокупность всех неприводимых представлений \mathcal{D}_μ дает и все неприводимые представления группы H , то значения коэффициентов ω и, в частности, значения коэффициентов α_i' являются всеми возможными значениями матричных элементов представлений группы H . Поскольку образующие элементы α_i группы H удовлетворяют уравнениям (13.17), то все возможные значения $\mathcal{D}_\mu(\alpha_i)$ совпадают со всеми возможными корнями уравнений (13.16), т. е. совпадают с возможными значениями коэффициентов в (13.14), определяющих классы фактор-систем. Поэтому проективные представления, получаемые из полного набора представлений группы \mathcal{G}' , содержат представления, относящиеся ко всем классам фактор-систем, возможным для группы \mathcal{G} .

Как указывалось выше, для пространственных групп возможные значения $\alpha'_i = \pm 1$, и согласно (13.18) возможные значения ω_{12} также равны ± 1 . Следовательно, в случае пространственных групп для каждого класса имеется фактор-система, все коэффициенты которой $\omega(r_1, r_2)$ равны ± 1 .

Легко видеть, что если представления \mathcal{D}_μ группы представлений \mathcal{G}' неприводимы и неэквивалентны, то и соответствующие им проективные представления также неприводимы и унитарно неэквивалентны. Можно убедиться и в обратном, т. е. что из каждого неприводимого проективного представления группы \mathcal{G} можно построить неприводимое векторное представление группы \mathcal{G}' . Поэтому из полного набора неэквивалентных неприводимых представлений группы представлений \mathcal{G}' можно получить все неприводимые унитарно неэквивалентные проективные представления группы \mathcal{G} , относящиеся ко всем возможным классам фактор-систем.

Таким образом, нахождение всех неприводимых проективных представлений конечной группы \mathcal{G} сведено к принципиально решенной (хотя в общем случае и довольно трудоемкой) задаче нахождения обычных представлений группы представлений \mathcal{G}' *).

Рассмотрим теперь соотношения ортогональности проективных представлений, относящихся к одной фактор-системе, которые мы получим из соотношений ортогональности представлений группы \mathcal{G}' .

Для неприводимых представлений \mathcal{D}_μ и $\mathcal{D}_{\mu'}$ группы \mathcal{G}' справедливо соотношение ортогональности (8.10):

$$\sum_{g' \in \mathcal{G}'} \mathcal{D}_{ik}^\mu(g') \mathcal{D}_{jl}^{*\mu'}(g') = \frac{m\hbar}{n_\mu} \delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{\mu\mu'}, \quad (13.27)$$

где n_μ — размерность представления \mathcal{D}_μ . Каждый элемент группы \mathcal{G}' имеет вид $g' = hr$, поэтому суммирование в (13.27) по $g' \in \mathcal{G}'$ можно представить как суммирование по $r \in \mathcal{G}$ и $h \in H$. Тогда из (13.27) получим

$$\sum_{g' \in \mathcal{G}'} \mathcal{D}_{ik}^\mu(g') \mathcal{D}_{jl}^{*\mu'}(g') = \sum_{h \in H} \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'} \sum_{r \in \mathcal{G}} \mathcal{D}_{ik}^\mu(r) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu'}(r), \quad (13.28)$$

где ω_h^μ определяется формулами (13.23), (13.24).

Представления \mathcal{D}_μ и $\mathcal{D}_{\mu'}$ могут приводить как к одинаковым, так и к различным фактор-системам. Мы будем сейчас

*) Если функции $u(a)$ в (13.15) выбраны не оптимальным образом, так что число элементов группы H , определяемой соотношениями (13.17), превышает число элементов группы мультипликатора, то полученная группа \mathcal{G}'' , определяемая соотношениями (13.19), также будет иметь большее число элементов по сравнению с группой представлений. Ясно, что каждому векторному представлению группы \mathcal{G}'' , называемой накрывающей группой группы \mathcal{G} , также соответствуют проективные представления группы \mathcal{G} . Однако если накрывающая группа не совпадает с группой представлений, то среди этих представлений будут проективно эквивалентные.

рассматривать такие представления μ и μ' , которые приводят к одной фактор-системе; в этом случае

$$\sum_h \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'} = \sum_h |\omega_h^\mu|^2 = m,$$

и из (13.28) следует соотношение ортогональности для проективных представлений, относящихся к заданной фактор-системе,

$$\sum_r \mathcal{D}_{ik}^\mu(r) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu'}(r) = \frac{\hbar}{n_\mu} \delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{\mu\mu'}, \quad (13.29)$$

которое аналогично соответствующему условию ортогональности для векторных представлений. При этом в (13.29) индексы μ и μ' означают различные неприводимые проективные представления, относящиеся к заданной фактор-системе. Если же μ и μ' таковы, что \mathcal{D}_μ и $\mathcal{D}_{\mu'}$ соответствуют проективным представлениям с различными фактор-системами, то согласно (8.10)

$$\sum_h \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'} = 0, \quad (13.30)$$

так как ω_h^μ и $\omega_h^{*\mu'}$ образуют различные одномерные представления группы H и в этом случае (13.29) выполняется тождественно.

Чтобы получить второе соотношение ортогональности для проективных представлений, используем соотношения (8.14) для представлений группы \mathcal{G}' для элементов g'_1 и g'_2 :

$$\sum_{\mu jl} n_\mu \mathcal{D}_{il}^\mu(g'_1) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu}(g'_2) = m \hbar \delta_{g'_1 g'_2}.$$

Положим $g'_1 = hr_1$ и $g'_2 = r_2$, где $r_1, r_2 \in \mathcal{G}$, $h \in H$; тогда

$$\sum_{\mu jl} n_\mu \mathcal{D}_{il}^\mu(r_1 h) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu}(r_2) = \sum_{\mu jl} n_\mu \omega_h^\mu \mathcal{D}_{il}^\mu(r_1) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu}(r_2) = m \hbar \delta_{he} \delta_{r_1 r_2}. \quad (13.31)$$

Умножим обе части равенства (13.31) на $\omega_h^{*\mu'}$ и просуммируем по всем $h \in H$:

$$\sum_\mu \sum_{h \in H} \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'} \sum_{jl} n_\mu \mathcal{D}_{il}^\mu(r_1) \mathcal{D}_{jl}^{*\mu}(r_2) = m \hbar \delta_{r_1 r_2} \omega_e^{*\mu'} = m \hbar \delta_{r_1 r_2}, \quad (13.32)$$

так как согласно (13.23) и (13.24) $\omega_e^{*\mu'} = 1$. Поскольку ω_h^μ и $\omega_h^{*\mu'}$ осуществляют некоторое неприводимое представление группы H , то согласно (13.30) сумма

$$\sum_{h \in H} \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'}$$

отлична от нуля только в том случае, когда представления ω_h^μ и $\omega_h^{*\mu'}$ группы H , индуцируемые представлениями \mathcal{D}^μ и $\mathcal{D}^{\mu'}$ группы \mathcal{G}' , унитарно эквивалентны, т. е. если ω_h^μ и $\omega_h^{*\mu'}$ образуют одну и ту же фактор-систему. В этом случае

$$\sum_{h \in H} \omega_h^\mu \omega_h^{*\mu'} = m.$$

Поэтому в левой части (13.31) остается только сумма по представлениям μ , относящимся к той же фактор-системе, что и μ' , и из (13.32) следует второе соотношение ортогональности для проективных представлений, относящихся к одной фактор-системе:

$$\sum_{\mu/l} n_{\mu} \mathcal{D}_{jl}^{\mu}(r_1) \mathcal{D}_{ji}^{\mu}(r_2) = \hbar \delta_{r_1 r_2}. \quad (13.33)$$

Из первой теоремы ортогональности (13.29) для проективных представлений следует, что векторы $\mathcal{D}_{ik}^{\mu} \sqrt{n_{\mu}/\hbar}$ образуют ортонормированную систему в пространстве элементов группы \mathcal{G} размерности \hbar . Поскольку число таких векторов, равное $\sum_{\mu} n_{\mu}^2$, не может превосходить размерности пространства \hbar , то

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 \leq \hbar.$$

Из второго соотношения ортогональности (13.33) следует, что векторы $\mathcal{D}_{jl}^{\mu}(r) \sqrt{n_{\mu}/\hbar}$, $r \in \mathcal{G}$, с компонентами μ, j, l образуют ортонормированный набор в пространстве с числом измерений $\sum_{\mu} n_{\mu}^2$, откуда следует неравенство

$$\hbar \leq \sum_{\mu} n_{\mu}^2.$$

Следовательно, для проективных представлений, относящихся к одной фактор-системе, также справедлива теорема Бернсайда, т. е.

$$\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = \hbar. \quad (13.34)$$

Характер проективного представления \mathcal{D}_{μ} , как и для векторных представлений, определяется как след матриц \mathcal{D}_{μ} :

$$\chi_{\mu}(r) = \text{Sp } \mathcal{D}_{\mu}(r) = \sum_t \mathcal{D}_{it}^{\mu}(r), \quad (13.35)$$

и одинаков для всех унитарно эквивалентных представлений.

Из соотношений ортогональности для проективных представлений (13.29) следует условие ортогональности для характеров неприводимых проективных представлений:

$$\sum_{r \in \mathcal{G}} \chi_{\mu}^*(r) \chi_{\mu'}(r) = \hbar \delta_{\mu \mu'}. \quad (13.36)$$

Соотношения (13.36) позволяют разложить каждое приводимое проективное представление, принадлежащее к некоторой фактор-системе, по неприводимым представлениям, относящимся к той же фактор-системе:

$$\mathcal{D} = \sum_{\mu} a_{\mu} \mathcal{D}_{\mu}, \quad (13.37)$$

где аналогично (8.19) для коэффициентов a_μ получим

$$a_\mu = \frac{1}{\hbar} \sum_r \chi(r) \chi_\mu^*(r), \quad (13.38)$$

а $\chi(r)$ есть характер представления \mathcal{D} .

Характеры проективных представлений не являются функциями класса сопряженных элементов группы \mathcal{G} , так как они являются функциями классов сопряженных элементов группы \mathcal{G}' , а распределение по классам элементов в группах \mathcal{G} и \mathcal{G}' в общем случае различно и элементы, сопряженные в группе \mathcal{G} , могут входить в разные классы в группе \mathcal{G}' .

Легко убедиться непосредственно, что

$$\chi(r_1 r_2 r_1^{-1}) = \frac{\omega(r_1^{-1}, r_1)}{\omega(r_1, r_2 r_1^{-1}) \omega(r_2, r_1^{-1})} \chi(r_2) \quad (13.39)$$

и в общем случае $\chi(r_1 r_2 r_1^{-1}) \neq \chi(r_2)$. Поэтому второе соотношение ортогональности (8.23) для проективных представлений не имеет места, и число проективных представлений для всех классов фактор-систем, кроме K_0 , меньше числа классов сопряженных элементов группы \mathcal{G} .

Отметим одно свойство характеров проективных представлений. Если для какой-либо пары коммутирующих элементов r_1 и $r_2 \in \mathcal{G}$ фактор-система не симметрична, т. е. $\frac{\omega(r_1, r_2)}{\omega(r_2, r_1)} = \alpha \neq 1$ при $r_1 r_2 = r_2 r_1$, то характеры всех p -эквивалентных представлений для этих элементов равны нулю,

$$\chi(r_1) = \chi(r_2) = 0.$$

Действительно, из условия $\mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = \alpha \mathcal{D}(r_2) \mathcal{D}(r_1)$ следует $\mathcal{D}^{-1}(r_2) \mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = \alpha \mathcal{D}(r_1)$, откуда $(\alpha - 1) \chi(r_1) = 0$ и при $\alpha \neq 1$ имеем $\chi(r_1) = 0$. Аналогичным образом доказывается, что и $\chi(r_2) = 0$.

Рассмотрим произведение двух проективных представлений $\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_2$ с фактор-системами $\omega^p(r_1, r_2)$ и $\omega^q(r_1, r_2)$, относящимися к классам K_p и K_q соответственно. Произведению представлений соответствует фактор-система $\omega^R(r_1, r_2)$, равная произведению фактор-систем:

$$\omega^R(r_1, r_2) = \omega^p(r_1, r_2) \omega^q(r_1, r_2); \quad (13.40)$$

она относится к классу $K_R = K_p K_q$. Произведение неприводимых проективных представлений в общем случае приводимо и по формулам (13.37) и (13.38) может быть разложено по неприводимым представлениям, относящимся к классу K_R .

§ 14. ПРОЕКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

В § 12 было показано, что определение неприводимых представлений пространственной группы G , имеющих неприводимую звезду $\{k\}$, сводится к нахождению проективных представлений точечной группы направлений F_k группы волнового вектора G_k . Группы F_k являются всевозможными подгруппами точечной группы направлений F , характеризующей кристаллический класс кристаллической решетки. Совокупность всех подгрупп у 32 точечных групп, характеризующих кристаллический класс, совпадает с этими же 32 группами, поэтому для отыскания всех неприводимых представлений для всех 230 пространственных групп требуется знание проективных представлений лишь 32 точечных групп, указанных в § 6.

Для определения классов фактор-систем и проективных представлений точечных групп используем метод, изложенный в предыдущем параграфе.

Рассмотрим сначала циклические группы порядка n , т. е. группы с одним образующим элементом a , определяемые соотношением

$$a^n = e. \quad (14.1)$$

Пусть $\mathcal{D}(a) = A$ — матрица неприводимого проективного представления, соответствующая элементу a , тогда из (14.1) и (13.11) получим

$$A^n = \omega_{an} I, \quad (14.2)$$

где

$$\omega_{an} = \omega(a, a) \omega(a, a^2) \dots \omega(a, a^{n-1}). \quad (14.3)$$

Введем

$$A' = \mathcal{D}'(a) = \omega_{an}^{-1/n} A. \quad (14.4)$$

Тогда (14.2) превращается в

$$A'^n = I. \quad (14.5)$$

Отсюда следует, что все проективные представления циклических групп p -эквивалентны векторным. Мультипликатор для циклических групп состоит из одного элемента — класса K_0 . Так как все векторные представления циклических групп одномерны, то одномерны также и все проективные представления циклических групп.

Легко проверить, что функция $u(a^k)$, которая приводит заданную фактор-систему $\omega(a^k, a^p)$ к единичной по (13.4), имеет вид

$$u(a^k) = \frac{\omega_{an}^{k/n}}{\omega_{ak}}. \quad (14.6)$$

При этом матрицы $\mathcal{D}(a^k)$ связаны с матрицами $\mathcal{D}'(a^k) = (\mathcal{D}'(a))^k = A'^k$, осуществляющими векторные представления

циклической группы, соотношениями (13.3):

$$\mathcal{D}(a^k) = A'^k u(a^k). \quad (14.7)$$

Действительно, из равенств (13.4) и (14.6) получим

$$\omega'(a, a^k) = \frac{u(a^{k+1}) \omega(a, a^k)}{u(a) u(a^k)} = 1.$$

Отсюда $\mathcal{D}'(a^k) = \mathcal{D}'(a) \mathcal{D}'(a^{k-1}) = \dots = \mathcal{D}'^k(a)$. Это означает, что $\omega'(a^k, a^p) = 1$ для всех k и p .

Из 32 точечных групп, указанных в § 6, 10 групп: $e, S_2, C_3, C_2, S_4, C_4, C_3, S_6, C_6, C_{3h}$ циклические, поэтому в тех случаях, когда группа направлений является одной из этих групп, формула (14.7) определяет все проективные представления, относящиеся к заданной фактор-системе.

Рассмотрим теперь группу с двумя коммутирующими образующими элементами a и b порядка n и m , определяемую соотношениями

$$a^n = e, \quad b^m = e, \quad ab = ba. \quad (14.8)$$

Примером таких групп являются группы C_{nh} с $a = c_n$ и $b = \sigma_h$, при этом $m = 2$.

Пусть $A' = \mathcal{D}(a)$, $B' = \mathcal{D}(b)$ — матрицы проективного представления для элементов a и b , которые согласно (13.14) и (14.8) удовлетворяют соотношениям

$$A'^n = \omega_{an} I, \quad B'^m = \omega_{bm} I, \quad A'B' = B'A' \alpha, \quad (14.9)$$

$$\alpha = \frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)}. \quad (14.10)$$

Введем $A = \omega_{an}^{-1/n} A'$, $B = \omega_{bm}^{-1/m} B'$, тогда из (14.9) получим

$$A^n = I, \quad B^m = I, \quad AB = BA \alpha. \quad (14.11)$$

Для того чтобы определить возможные значения константы α , умножим обе части последнего равенства на A и, используя перестановочное соотношение (14.11) для A и B , получим $A^2 B = \alpha^2 B A^2$. Повторяя эту процедуру n раз и учитывая, что $A^n = I$, получим

$$\alpha^n = 1. \quad (14.12)$$

Умножая (14.11) на B m раз, аналогично получим, что

$$\alpha^m = 1. \quad (14.13)$$

Пусть d — наибольший общий делитель n и m , тогда уравнения (14.12) и (14.13) сводятся к одному:

$$\alpha^d = 1. \quad (14.14)$$

Если n и m взаимно просты, то $d = 1$ и $\alpha = 1$. Отсюда следует, что для групп C_{nh} при нечетных n все проективные представле-

ния ρ -эквивалентны векторным, что следует также и из того, что согласно § 3 эти группы являются циклическими с образующим элементом $\alpha = c_{2n}i$.

При четном n , т. е. в точечных группах $C_{2p, h}$ (C_{2h} , C_{4h} и C_{6h}), $d = 2$, и поэтому из уравнения (14.14) получим

$$\alpha^2 = 1, \quad \text{т. е.} \quad \alpha = \pm 1. \quad (14.15)$$

Поэтому для этих групп возможны два класса фактор-систем: K_0 и K_1 , соответствующие $\alpha = 1$ и $\alpha = -1$. Класс K_0 , как всегда, соответствует векторным представлениям. Так как группы (14.8) являются абелевыми, то все их векторные представления одномерны, а, следовательно, одномерны и проективные представления, относящиеся к классу K_0 . Для класса K_1 ($\alpha = -1$) матрицы представления A' и B' антикоммутируют, и поэтому среди проективных представлений класса K_1 нет одномерных, что согласуется с доказанной в § 13 общей теоремой.

Для того чтобы построить группу представлений в соответствии с (13.19), введем наряду с элементами a и b новый элемент второго порядка α , коммутирующий с a и b . Согласно (13.19), (14.11), (14.15) группа представлений определяется соотношениями

$$a^n = e, \quad b^m = e, \quad \alpha^2 = e, \quad ab = aba, \quad \alpha b = b\alpha, \quad \alpha a = a\alpha. \quad (14.16)$$

Используя (13.24) и (14.16), легко получить фактор-систему $\omega'(a^k, b^p)$ для проективных представлений группы (14.8), получаемых из векторных представлений группы (14.16). Если $r_1 = a^k b^p$, а $r_2 = a^{k'} b^{p'}$, то, используя (14.16), получим

$$r_1 r_2 = a^k b^p a^{k'} b^{p'} = \alpha^{k'p} a^{k+k'} b^{p+p'}, \quad \text{т. е.} \quad h_{12} = \alpha^{k'p},$$

и из (13.20), (13.25) следует, что

$$\omega'(a^k b^p, a^{k'} b^{p'}) = \alpha^{k'p}, \quad \text{где} \quad \alpha = \pm 1. \quad (14.17)$$

Ниже для группы (14.8) будут получены все унитарно неэквивалентные проективные представления, соответствующие фактор-системе (14.17).

В практических применениях возникают вопросы: как по виду заданной фактор-системы отнести ее к тому или иному классу и каким образом следует выбирать функции u , чтобы по (13.4) свести заданную фактор-систему к стандартному виду (14.17), соответствующему ее классу?

Ответ на первый вопрос дается уравнением (14.10). Если для заданной фактор-системы $\frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)} = 1$, то она относится к классу K_0 , если же $\frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)} = -1$, то фактор-система принадлежит классу K_1 .

Выберем $u(a^q b^p)$ в виде

$$u(a^q b^p) = u(b^p a^q) = \frac{u(a^q) u(b^p)}{\omega(a^q, b^p)}, \quad (14.18)$$

где $u(a^q)$ и $u(b^p)$ определяются уравнениями, аналогичными (14.6):

$$u(a^q) = \frac{\omega_{an}^{q/n}}{\omega_{aq}}, \quad u(b^p) = \frac{\omega_{bm}^{p/m}}{\omega_{bp}}. \quad (14.19)$$

Если подставить (14.18) в (13.4), то получим $\omega'(a^k, b^p) = 1$, откуда

$$\begin{aligned} \omega'(a^k b^p, a^{k'} b^{p'}) &= \frac{\mathcal{D}'(a^k b^p) \mathcal{D}'(a^{k'} b^{p'})}{\mathcal{D}'(a^{k+k'} b^{p+p'})} = \\ &= \frac{\mathcal{D}^{k'}(a) \mathcal{D}^{p'}(b) \mathcal{D}^{k'}(a) \mathcal{D}^{p'}(b)}{\mathcal{D}^{k+k'}(a) \mathcal{D}^{p+p'}(b)} = \alpha^{pk'}, \end{aligned} \quad (14.20)$$

т. е. ω' действительно совпадает со стандартной фактор-системой (14.17).

Таким образом, если известны все унитарно неэквивалентные неприводимые представления, относящиеся к фактор-системе (14.17), то все неприводимые представления для произвольной фактор-системы даются формулами (13.3) и (14.18), (14.19).

Поскольку классу K_0 во всех группах соответствуют обычные представления, то ниже будут рассмотрены только проективные представления, относящиеся к другим классам фактор-систем.

Поскольку группы C_{2v} и D_2 изоморфны группе C_{2h} , все результаты, полученные для группы C_{2h} , применимы также и к этим группам. Для группы C_{2h} с четырьмя элементами класса K_1 , согласно теореме Бернсайда, соответствует одно двумерное представление. Так как матрицы A и B при $\alpha = -1$ антикоммутируют и $A^2 = B^2 = I$, то в качестве этих матриц можно выбрать любые две из трех матриц Паули $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Матрицы представления для группы C_{2h} приведены в табл. 14.2 в конце параграфа.

Представление для произвольного элемента $a^q b^p$ группы C_{nh} равно

$$\mathcal{D}(a^q b^p) = \mathcal{D}(b^p a^q) = A^q B^p = \alpha^{pq} B^p A^q. \quad (14.21)$$

Согласно (13.4) матрицы представления группы C_{nh} , относящиеся к заданной фактор-системе $\omega(r_1, r_2)$, равны

$$\mathcal{D}(a^q b^p) = u(a^q b^p) A^q B^p, \quad (14.22)$$

где $u(a^q b^p)$ определяются соотношениями (14.18) и (14.19).

В группе C_{4h} восемь элементов, поэтому согласно теореме Бернсайда (13.34) она имеет два двумерных представления, принадлежащих классу K_1 .

В качестве матриц для одного из этих представлений могут быть выбраны матрицы представления группы C_{2h} .

Для отыскания матриц второго неприводимого представления класса K_1 группы C_{4h} заметим следующее. Если вместо A в группе C_{nh} ввести $A'' = \epsilon_n^q A$, где $\epsilon_n = e^{2\pi i/n}$, а $q = 0, 1, 2, \dots, n-1$, то матрицы A'' также удовлетворяют соотношениям (14.11). Однако в общем случае не все матрицы $\epsilon_n^q A$ и A унитарно неэквивалентны. Действительно, матрицы A и $\epsilon_n^q A$ при $q = 1, 2, \dots, (n/2) - 1$ и четных n унитарно неэквивалентны, так как их унитарная эквивалентность означала бы, что существует такая матрица S , что $SAS^{-1} = \epsilon_n^q A$. Возводя это равенство в квадрат и учитывая, что $A^2 = I$, мы получили бы, что $\epsilon_n^{2q} = 1$, но это противоречит указанному выбору $q < n/2$. Каждая из остальных матриц $A\epsilon_n^q$ ($q = n/2, \dots, n-1$) унитарно эквивалентна одной из матриц $A\epsilon_n^q$ с $q = 0, 1, \dots, (n/2) - 1$; так, например, A унитарно эквивалентна матрице $-A = A\epsilon_n^{n/2}$, что можно проверить непосредственно, выбрав $S = \sigma_x$.

Поэтому другое унитарно неэквивалентное представление класса K_1 группы C_{4h} может быть получено умножением матрицы A представления группы C_{2h} на $\epsilon_4 = i$.

В группе C_{6h} двенадцать элементов и согласно теореме Бернсайда в классе K_1 имеются три двумерных представления, приведенных в табл. 14.2 в конце параграфа.

Группа D_n . Группы D_n и изоморфные им группы C_{nv} определяются также двумя образующими элементами: $a = c_n$ и $b = u_2$ для группы D_n , $b = \sigma_v$ для группы C_{nv} . Они удовлетворяют соотношениям (3.4):

$$a^n = e, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{n-1}b.$$

Пусть

$$A' = \frac{\mathcal{D}(a)}{\omega_{an}^{1/n}}, \quad B' = \frac{\mathcal{D}(b)}{\omega^{1/2}(b, b)},$$

тогда для матриц A' и B' имеем соотношения

$$A'^n = I, \quad B'^2 = I, \quad B'A' = \alpha' A'^{n-1} B', \quad (14.23)$$

где

$$\alpha' = \frac{\omega(b, a) \omega(a^{n-1}, a)}{\omega_{an}^{2/n} \omega(a^{n-1}, b)}. \quad (14.24)$$

Для того чтобы определить возможные значения константы α' , умножим последнее уравнение (14.23) на A' и учтем соотношения (14.23); получим

$$B'A'^2 = \alpha'^2 A'^{2(n-1)} B'.$$

Повторяя эту процедуру n раз, найдем, что

$$\alpha'^n = 1, \quad (14.25)$$

т. е.

$$\alpha' = \epsilon_n^m \quad (m = 0, 1, 2, \dots, n-1). \quad (14.26)$$

Однако не все возможные значения α' в (14.26) соответствуют различным классам фактор-систем. Действительно, введем матрицу $A = A' \varepsilon_n^{-q}$, где q — некоторое целое число. При таком выборе матриц A они по-прежнему удовлетворяют соотношениям (14.23), но α' при этом заменяется на α :

$$\alpha = \varepsilon_n^{-2q} \alpha' = \varepsilon_n^{m-2q}.$$

Если n нечетное, $n = 2p + 1$, то всегда можно выбрать q так, чтобы α было равно единице. Действительно, в этом случае при m четном $\alpha = 1$ при $q = m/2$, а при m нечетном $\alpha = 1$ при $q = (m - n)/2$. Поэтому в случае нечетного n существует только один класс фактор-систем, K_0 , и все представления p -эквивалентны векторным. В частности, все проективные представления групп D_3, C_{3v} p -эквивалентны векторным.

Для четного n возможны два класса фактор-систем: K_0 и K_1 . Действительно, если m в (14.26) четное, то, выбрав $q = m/2$, получим, что $\alpha = 1$ и рассматриваемая фактор-система p -эквивалентна единичной и таким образом относится к классу K_0 . Если m нечетно, то никаким выбором q нельзя свести α к единице, в этом случае фактор-система относится к классу K_1 . Следовательно, все фактор-системы с нечетным $m = 1, 3, \dots, n - 1$ эквивалентны между собой и p -эквивалентны фактор-системе с $\alpha = \varepsilon_n$.

Таким образом, в группах D_n с четным n возможны два класса фактор-систем: K_0 и K_1 ; при этом легко убедиться, что произведение классов определяется соотношениями

$$K_0^2 = K_0, \quad K_0 K_1 = K_1, \quad K_1^2 = K_0.$$

Для построения группы представлений рассмотрим более подробно две возможности, которые возникают при четном n : а) $n/2$ нечетно и б) $n/2$ четно.

При нечетном $n/2$ соответствующим выбором q всегда можно обратить α в ± 1 . Действительно, в случае четного m величина $\alpha = 1$ при $q = m/2$. Если же m нечетно, то, выбрав $q = (m + \frac{n}{2})/2$, получим, что $\alpha = \varepsilon_n^{n/2} = -1$. Поэтому в случае нечетных $n/2$ величина α имеет значения ± 1 , соответствующие классам K_0 и K_1 .

Рассматривая теперь α как новый элемент a второго порядка $a^2 = e$, можно в соответствии с результатами предыдущего параграфа построить группу представлений для групп D_n для случая нечетного $n/2$, которая определяется соотношениями $a^n = e, b^2 = e, a^2 = e, ba = a a^{n-1} b, a a = a a, a b = b a$. (14.27)

Легко убедиться, что для группы (14.27) фактор-система имеет вид

$$\omega'(a^k b^p, a^{k_1} b^{p_1}) = \alpha^{k_1 p}, \quad (14.28)$$

где $\alpha = \pm 1$. При этом $p, p_1 = 0, 1; k, k_1 = 0, 1, \dots, n - 1$.

В случае, когда $n/2$ четно, а m нечетно, никаким выбором q нельзя свести α' к ± 1 , не меняя соотношений (14.23). Выберем в этом случае

$$A' = \varepsilon_{2n}^{(n/2)+m} A = +i\alpha'^{1/2} A, \quad (14.29)$$

где m определяется из уравнения (14.26); тогда третье из соотношений (14.23) принимает вид

$$BA = \alpha' A^{(n-1)} B \varepsilon_{2n}^{(n-1)} \left(m + \frac{n}{2}\right) - \frac{n}{2} - m = A^{n-1} B.$$

При таком выборе A , однако, меняется первое из соотношений (14.23):

$$A^n = (-1)^{-m-(n/2)} I = (-1)^{-m} I = \alpha I,$$

где $\alpha = \pm 1$ в зависимости от четности или нечетности m . Поэтому в случае четного $n/2$ соотношения (14.23) для матриц A (14.29) и B принимают вид

$$A^n = \alpha I, \quad B^2 = I, \quad BA = A^{n-1} B; \quad (14.30)$$

при этом $\alpha = 1$ для класса K_0 и $\alpha = -1$ для класса K_1 . Из (14.30) легко построить группу представлений для групп D_n с четным $n/2$. Она определяется соотношениями

$$a^n = \alpha, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{n-1}b, \quad \alpha a = \alpha a, \quad b\alpha = \alpha b, \quad \alpha^2 = e. \quad (14.31)$$

Группа (14.31) приводит к фактор-системе

$$\omega'(a^k b^p, a^{k'} b^{p'}) = \alpha^{\left[\frac{k+k'(1-2p+pn)}{n} \right]}, \quad (14.32)$$

где скобки $[l/n]$ означают целую часть от отношения l/n .

В § 13 отмечалось, что если для какой-либо пары коммутирующих элементов r_1 и r_2 отношение $\frac{\omega(r_1, r_2)}{\omega(r_2, r_1)} \neq 1$, то фактор-система ω не может относиться к классу K_0 . В группах D_n с четным n коммутируют две взаимно перпендикулярные оси второго порядка $c_2 = a^{n/2}$ и $u_2 = b$:

$$a^{n/2} b = b a^{n/2}.$$

Для матриц проективного представления $\mathcal{D}(a^{n/2})$ и $\mathcal{D}(b)$ отсюда получим

$$\mathcal{D}(a^{n/2}) \mathcal{D}(b) = \mathcal{D}(b) \mathcal{D}(a^{n/2}) \frac{\omega(b, a^{n/2})}{\omega(a^{n/2}, b)}.$$

Как и для группы C_{2n} , отсюда легко получить, что

$$\frac{\omega(b, a^{n/2})}{\omega(a^{n/2}, b)} = \pm 1. \quad (14.32a)$$

При этом, если это отношение равно $+1$, то заданная фактор-система относится к классу K_0 ; если же -1 , то фактор-система принадлежит классу K_1 .

Действительно, как указывалось в § 13, отношение (14.32а) одинаково для всех p -эквивалентных фактор-систем и таким образом равно $\frac{\omega'(b, a^{n/2})}{\omega'(a^{n/2}, b)}$, где ω' — стандартная фактор-система.

Но для стандартной фактор-системы из (14.28) или (14.32) сделанное утверждение проверяется непосредственно. Поэтому по величине отношения (14.32а) удобно судить о принадлежности заданной фактор-системы к тому или иному классу.

Для каждой группы D_n с четным n может быть указана такая однозначная функция $u(a^k b^p)$ ($k = 0, 1, \dots, n-1$; $p = 0, 1$) элемента $a^k b^p$ группы D_n , которая приводит любую заданную фактор-систему $\omega(a^k b^p, a^{k'} b^{p'})$ к стандартному виду (14.28) или (14.32):

$$u(a^k b^p) = \frac{u(a^k) u(b^p)}{\omega(a^k, b^p)}, \quad \text{где } u(a^k) = \frac{\omega_{an}^{k/n}}{\omega_{ak}} \varepsilon^k, \quad u(b^p) = \omega^{p/2}(b, b). \quad (14.33)$$

При четных m $\varepsilon = \alpha'^{1/2} = \varepsilon_n^{m/2}$. При нечетных m $\varepsilon = +i\alpha'^{1/2} = i\varepsilon_n^{m/2}$.

Убедимся, например, что при четных m и $n/2$

$$\omega'(a^{k'}, a^k) = \frac{\omega(a^{k'}, a^k) u(a^{k+k'})}{u(a^k) u(a^{k'})} = \alpha \left[\frac{k+k'}{n} \right].$$

Прежде всего заметим, что хотя k и $k' \leq n-1$, их сумма $k+k'$ может превосходить n . Обозначим через $\{k+k'\}$ разность между $k+k'$ и $\left[\frac{k+k'}{n} \right] n$. Таким образом, имеем по определению

$$k+k' = \{k+k'\} + \left[\frac{k+k'}{n} \right] n.$$

Поскольку u является однозначной функцией на группе, то $u(a^{k+k'}) = u(a^{\{k+k'\}})$. Поэтому для $\omega'(a^{k'}, a^k)$ получим

$$\begin{aligned} \omega'(a^{k'}, a^k) &= \frac{\omega(a^{k'}, a^k) \varepsilon^{\{k+k'\}} \omega_{an}^{\left[\frac{k+k'}{n} \right]}}{\varepsilon^{k+k'} \omega_{an}^{\frac{k+k'}{n}}} \frac{\omega_{ak} \omega_{ak'}}{\omega_{a(k+k')}} = \\ &= \varepsilon^{-n \left[\frac{k+k'}{n} \right]} \omega_{an}^{-\left[\frac{k'+k}{n} \right]} \omega(a^{k'}, a^k) \frac{\omega_{ak'} \omega_{ak}}{\omega_{a(k+k')}}; \end{aligned}$$

далее имеем

$$\begin{aligned} \omega_{an}^{-\left[\frac{k'+k}{n} \right]} \frac{\omega_{ak} \omega_{ak'} \omega(a^{k'}, a^k)}{\omega_{a(k+k')}} &= \\ &= \omega_{an}^{-\left[\frac{k'+k}{n} \right]} \frac{\mathcal{D}^{k'}(a) \mathcal{D}^k(a)}{\mathcal{D}(a^{k'}) \mathcal{D}(a^k)} \frac{\mathcal{D}(a^{\{k'+k\}})}{\mathcal{D}^{\{k'+k\}}(a)} \omega(a^{k'}, a^k) = \\ &= \omega_{an}^{-\left[\frac{k+k'}{n} \right]} \mathcal{D}^{\left[\frac{k'+k}{n} \right]}(a) = 1, \end{aligned}$$

так как $\mathcal{D}^n(a) = \omega_{an}I$. Поскольку $\varepsilon_m^n = (-1)^m = \alpha$, то

$$\omega(a^{k'}, a^k) = \alpha^{\left[\frac{k+k'}{n} \right]},$$

что совпадает с (14.32) при $\rho = \rho' = 0$.

Таким же образом можно убедиться и в том, что $u(a^k b^{\rho})$ (14.33) при ρ и $\rho' \neq 0$ приводит заданную фактор-систему к виду (14.32).

Рассмотрим проективные представления групп D_4 и D_6 , соответствующих фактор-системам (14.32) и (14.28). Поскольку группы C_{4v} , D_{2d} изоморфны группе D_4 , а группы C_{6v} , D_{3h} и D_{3d} изоморфны группе D_6 , то проективные представления групп D_4 и D_6 совпадают с проективными представлениями групп C_{4v} , D_{2d} и C_{6v} , D_{3h} , D_{3d} соответственно.

В группе D_4 содержится восемь элементов, поэтому она имеет два двумерных проективных представления, относящихся к классу K_1 . В группе D_6 имеется двенадцать элементов и соответственно три двумерных представления класса K_1 . Проективные представления групп D_4 и D_6 приведены в табл. 14.2.

Группы D_{nh} . Будем рассматривать лишь группы D_{nh} с четным n , так как в § 3 было показано, что при нечетных n группы D_{nh} изоморфны группам D_{2n} . В группах D_{nh} дополнительно к группам D_n появляется еще плоскость отражения $\sigma_h = c$, перпендикулярная оси n -го порядка и коммутирующая с остальными элементами группы D_{nh} . Группы D_{nh} определяются соотношениями (3.5):

$$a^n = e, \quad b^2 = e, \quad ba = a^{n-1}b, \quad c^2 = e, \quad ac = ca, \quad bc = cb. \quad (14.34)$$

Пусть $\mathcal{D}(a) = A'$, $\mathcal{D}(b) = B'$ и $\mathcal{D}(c) = C'$ — матрицы неприводимого проективного представления группы D_{nh} . Введем матрицы

$$A = \frac{A'}{\omega_{an}^{1/n}}, \quad B = \frac{B'}{\omega^{1/2}(b, b)}, \quad C = \frac{C'}{\omega^{1/2}(c, c)}.$$

Тогда из определяющих соотношений для группы D_{nh} получим соотношения для матриц A, B, C :

$$A^n = I, \quad B^2 = I, \quad C^2 = I, \quad BA = \alpha A^{n-1}B, \quad AC = \beta CA, \quad (14.35)$$

$$BC = \gamma CB,$$

где

$$\beta = \frac{\omega(a, c)}{\omega(c, a)}, \quad \gamma = \frac{\omega(b, c)}{\omega(c, b)}, \quad (14.36)$$

а α определяется уравнением (14.24).

Если $n/2$ нечетно, то α в (14.35) принимает значения ± 1 . Если же $n/2$ четно, то, как и в группах D_n с четным $n/2$,

соотношения (14.35) можно привести к виду

$$A^n = \alpha I, \quad B^2 = C^2 = I, \quad BA = A^{n-1}B, \quad AC = \beta CA, \quad BC = \gamma CB, \quad (14.37)$$

где $\alpha = \pm 1$.

Аналогично тому, как это делалось для групп C_{nh} , легко убедиться, что

$$\beta^2 = \gamma^2 = 1, \quad \text{т. е. } \beta = \pm 1, \quad \gamma = \pm 1. \quad (14.38)$$

Поэтому в группах D_{nh} с четным n имеется $2^3 = 8$ классов фактор-систем, соответствующих возможным значениям α, β, γ , равным ± 1 :

$$\begin{aligned} &K_0(1, 1, 1), \quad K_1(-1, 1, 1), \quad K_2(1, 1, -1), \quad K_3(1, -1, 1), \\ &K_4(1, -1, -1) = K_2K_3, \quad K_5(-1, -1, -1) = K_1K_2K_3 = K_1K_4, \\ &K_6(-1, -1, 1) = K_1K_3, \quad K_7(-1, 1, -1) = K_2K_1. \end{aligned}$$

Отсюда легко найти таблицу умножения классов фактор-систем, т. е. таблицу умножения мультипликатора. Для этого достаточно перемножить соответствующие значения констант α, β, γ и рассмотреть, к какому классу относятся произведения $\alpha_3 = \alpha_1\alpha_2$, $\beta_3 = \beta_1\beta_2$, $\gamma_3 = \gamma_1\gamma_2$.

Для построения группы представлений в группу D_{nh} вводятся новые элементы второго порядка α, β и γ , коммутирующие между собой и с другими элементами группы D_{nh} . При этом, как и в случае групп D_n , группа представлений задается различными соотношениями для нечетных и четных $n/2$.

При нечетных $n/2$ группа представлений для группы D_{nh} определяется соотношениями

$$\begin{aligned} a^n = e, \quad b^2 = e, \quad c^2 = e, \quad \alpha^2 = e, \quad \beta^2 = e, \quad \gamma = e, \quad ba = \alpha a^{n-1}b, \\ \alpha a = a\alpha, \quad b\alpha = \alpha b, \quad c\alpha = \alpha c, \quad ac = \beta ca, \quad bc = \gamma cb, \\ a\gamma = \gamma a, \quad a\beta = \beta a, \quad b\gamma = \gamma b, \quad c\gamma = \gamma c, \quad a\beta = \beta a, \quad (14.39) \\ b\beta = \beta b, \quad c\beta = \beta c, \quad a\beta = \beta a, \quad a\gamma = \gamma a, \quad b\gamma = \gamma b, \end{aligned}$$

а для четных $n/2$ — соотношениями

$$\begin{aligned} a^n = \alpha, \quad b^2 = c^2 = \alpha^2 = \beta^2 = \gamma^2 = e, \\ ba = a^{n-1}b, \quad \alpha a = a\alpha, \quad b\alpha = \alpha b, \quad c\alpha = \alpha c, \quad ac = \beta ca, \\ bc = \gamma cb, \quad a\beta = \beta a, \quad b\beta = \beta b, \quad c\beta = \beta c, \quad a\gamma = \gamma a, \quad (14.40) \\ b\gamma = \gamma b, \quad c\gamma = \gamma c, \quad a\beta = \beta a, \quad a\gamma = \gamma a, \quad b\gamma = \gamma b. \end{aligned}$$

Из определяющих соотношений (14.39) и (14.40) легко получить выражения для фактор-системы $\omega'(a^k b^p c^q, a^{k'} b^{p'} c^{q'})$, где $k, k' = 0, 1, 2, \dots, n-1$; $p, p', q, q' = 0, 1$, соответствующей группам (14.39) и (14.40).

Для нечетного $n/2$ фактор-система ω' равна

$$\omega'(a^k b^p c^q, a^{k'} b^{p'} c^{q'}) = \alpha^{nk'} \beta^{qk'} \gamma^{qp'}, \quad (14.41)$$

а для четного $n/2$

$$\omega'(a^k b^p c^q, a^{k'} b^{p'} c^{q'}) = \alpha \left[\frac{k+k'(1-2p+pn)}{n} \right] \beta^{qk'} \gamma^{qp'}. \quad (14.42)$$

Каждая заданная фактор-система по величине отношений коэффициентов фактор-системы для коммутирующих элементов

$$\frac{\omega(a^{n/2}, b)}{\omega(b, a^{n/2})}, \quad \frac{\omega(a, c)}{\omega(c, a)} \quad \text{и} \quad \frac{\omega(b, c)}{\omega(c, b)}$$

может быть легко отнесена к одному из восьми классов фактор-систем для групп D_{nh} .

Если выбрать функцию $u(a^k b^p c^q)$ в виде

$$u(a^k b^p c^q) = \frac{u(a^k) \omega^{p/2}(b, b) \omega^{q/2}(c, c)}{\omega(a^k, b^p c^q) \omega(b^p, c^q)}, \quad (14.43)$$

где $u(a^k)$ определяется формулами (14.33), то легко убедиться, что любая заданная фактор-система $\omega(a^k b^p c^q, a^{k'} b^{p'} c^{q'})$ приводится к виду (14.41) или (14.42), для которых ниже будут приведены все проективные представления.

Группа D_{2h} имеет восемь элементов и в каждом классе (кроме K_0) содержится по два двумерных представления.

Для группы D_{2h} ($n=2$) соотношения между матрицами A , B и C отличаются только перестановками чисел α , β и γ . Поэтому и представления, соответствующие классам, получаемым различными перестановками чисел α , β и γ , могут быть получены из представлений для одного класса путем соответствующих перестановок матриц представления. Так, представления для классов K_3 и K_2 , а также K_4 и K_7 могут быть получены из представлений для классов K_1 и K_6 с помощью перестановок матриц представления A , B и C .

В группе D_{4h} 16 элементов и согласно теореме Бернсайда в ней могут быть либо четыре двумерных, либо одно четырехмерное проективные представления. В классах K_1 , K_2 , K_3 , K_4 и K_7 имеется по четыре двумерных представления, а в классах K_5 и K_6 — по одному четырехмерному.

В группе D_{6h} содержится 24 элемента и поэтому в ней могут быть либо шесть двумерных, либо одно четырехмерное и два двумерных представления. Оба эти случая реализуются, при этом последний случай осуществляется в классах K_3 , K_4 , K_5 и K_6 .

Матрицы проективных представлений для образующих элементов групп D_{nh} приведены в табл. 14.2. Эти матрицы полностью определяют все проективные представления рассматриваемых групп D_{nh} , относящиеся к фактор-системам (14.41) и (14.42), так как матрица представления для произвольного элемента $a^k b^p c^q$ ($k=0, 1, \dots, n-1$; $p, q=0, 1$) равна

$$\mathcal{D}'(a^k b^p c^q) = A^k B^p C^q. \quad (14.44)$$

Представление $\mathcal{D}(a^k b^p c^q)$, соответствующее заданной фактор-системе, в соответствии с (13.3) равно

$$\mathcal{D}(a^k b^p c^q) = A^k B^p C^q u(a^k b^p c^q), \quad (14.45)$$

где $u(a^k b^p c^q)$ дается формулой (14.43).

Группа T. Эта группа определяется двумя образующими элементами $a = c_2$ и $b = c_3$, удовлетворяющими соотношениям (3.7):

$$a^2 = e, \quad b^3 = e, \quad bab = ab^2a. \quad (14.46)$$

Остальные элементы выражаются через образующие элементы по (3.8).

Из определяющих соотношений (14.46) следуют соотношения для матриц проективных представлений

$$A' = \frac{\mathcal{D}(a)}{\omega^{1/2}(a, a)} \quad \text{и} \quad B' = \frac{\mathcal{D}(b)}{\omega_{b^3}^{1/3}},$$

а именно

$$A'^2 = I, \quad B'^3 = I, \quad B'A'B' = \alpha' A'B'^2 A', \quad (14.47)$$

где

$$\alpha' = \frac{\omega^{1/2}(a, a) \omega(b, ab) \omega(a, b)}{\omega(a, b^2a) \omega(b^2, a) \omega(b, b)}. \quad (14.48)$$

Из (14.47) имеем: $B'A'B'^2 = \alpha' A'B'B'A'B' = \alpha'^2 A'B'A'B'^2 A' = \alpha'^3 B'^2 A'B'A' = \alpha'^4 B'A'B'^2$, откуда следует: $\alpha'^4 = 1$ и, следовательно,

$$\alpha' = \varepsilon_4^m \quad (m = 0, 1, 2, 3). \quad (14.49)$$

Если m четное ($m = 0, 2$), то выбором знака у A всегда можно сделать $\alpha' = 1$. В этом случае представление p -эквивалентно векторному. Если m нечетное ($m = 1, 3$), то, как и в случае четных $n/2$ в группах D_n , выбором $A = \alpha' A'$ соотношения (14.47) могут быть приведены к виду

$$A^2 = \alpha I, \quad B^3 = I, \quad BAB = AB^2A, \quad \alpha = \pm 1. \quad (14.50)$$

Поэтому в группе T возможны два класса фактор-систем: K_0 и K_1 , соответствующие $\alpha = \pm 1$.

Группа представлений для группы T определяется соотношениями

$$a^2 = a, \quad b^3 = e, \quad \alpha^2 = e, \quad bab = ab^2a, \quad aa = \alpha a, \quad ba = ab. \quad (14.51)$$

Фактор-система $\omega'(r_1, r_2)$, $r_1, r_2 \in T$ для группы T , соответствующая группе представлений (14.51), строится согласно (13.23), (13.24) следующим образом. Каждый элемент r группы T выражается через степени образующих элементов. Произведение $r_1 r_2$ есть также элемент группы T и поэтому при помощи соотношений (3.7) может быть приведен к одному из элементов (3.8). Однако в группе представления при этом может возникнуть дополнительным множителем элемент α . Если такой мно-

житель появляется, то для класса K_1 будет $\omega'(r_1, r_2) = -1$, в противном случае $\omega'(r_1, r_2) = 1$. Например, для вычисления $\omega(c_2, c'_2)$, составив произведение $c_2 c'_2$, получим $c_2 c'_2 = abab^2 = a^2 b^2 ab = ab^2 ab$, поэтому $\omega'(c_2, c'_2) = -1$. Но $\omega'(c'_2, c_2) = 1$, так как $c'_2 c_2 = bab^2 a = b^2 ab$.

В группе T имеются три двумерных представления, определяемых матрицами A и B , приведенными в табл. 14.2. Формулы (14.48) и (14.49) позволяют по коэффициентам заданной фактор-системы отнести ее к тому или иному классу. Практически удобнее, однако, рассматривать отношение коэффициентов фактор-системы для коммутирующих элементов. В группе T коммутируют повороты вокруг осей второго порядка, например c_2 и c'_2 . Для матричных элементов проективных представлений имеем

$$ABAB^2 = \beta BAB^2 A,$$

где

$$\beta = \frac{\omega(c'_2, c_2)}{\omega(c_2, c'_2)}. \quad (14.52)$$

Из соотношений (14.50) следует, что $\beta = \alpha$, и таким образом $\beta = 1$ или -1 для классов K_0 и K_1 соответственно. Поскольку отношение (14.52) одинаково для всех p -эквивалентных фактор-систем, то по величине отношения (14.52) для любой пары осей второго порядка можно легко отнести заданную фактор-систему к классу K_0 или K_1 .

Произвольный элемент группы T согласно (3.8) может быть записан в виде

$$a^k b^p a^{k'} b^{p'}, \quad \text{где } k, k' = 0, 1, \quad \text{а } p, p' = 0, 1, 2.$$

Функция $u(a^k b^p a^{k'} b^{p'})$, приводящая заданную фактор-систему ω к стандартной ω' , имеет вид

$$\begin{aligned} u(a^k b^p a^{k'} b^{p'}) &= \\ &= \tilde{u}(a^k) \tilde{u}(a^{k'}) u(b^p) u(b^{p'}) \frac{\omega'(a^k, b^p a^{k'} b^{p'}) \omega'(b^p, a^{k'} b^{p'}) \omega'(a^{k'}, b^{p'})}{\omega(a^k, b^p a^{k'} b^{p'}) \omega(b^p, a^{k'} b^{p'}) \omega(a^{k'}, b^{p'})} = \\ &= \frac{\tilde{u}(a^k) \tilde{u}(a^{k'}) u(b^p) u(b^{p'})}{\omega(a^k, b^p a^{k'} b^{p'}) \omega(b^p, a^{k'} b^{p'}) \omega(a^{k'}, b^{p'})}, \quad (14.53) \end{aligned}$$

так как согласно способу построения стандартной фактор-системы

$$\omega'(a^k, b^p a^{k'} b^{p'}) = \omega'(b^p, a^{k'} b^{p'}) = \omega'(a^{k'}, b^{p'}) = 1.$$

Функции $\tilde{u}(a^k)$ и $u(b^p)$ определяются коэффициентами заданной фактор-системы:

$$\tilde{u}(a) = \frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'}, \quad u(b^p) = \frac{\omega_{b3}^{p/3}}{\omega_{bp}}, \quad (14.54)$$

где α' определяется формулой (14.49). Используя (14.53), нетрудно написать явные выражения для функции u через коэффициенты заданной фактор-системы. Они приведены в табл. 14.1

	u		u
e	1	ab	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'} \frac{\omega_{b3}^{1/3}}{\omega(a, b)}$
a	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'}$	ba	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'} \frac{\omega_{b3}^{1/3}}{\omega(b, a)}$
bab^2	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'} \frac{\omega(b, b^2)}{\omega(b, ab^2) \omega(a, b^2)}$	b^2	$\frac{\omega_{b3}^{2/3}}{\omega(b, b)}$
b^2ab	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'} \frac{\omega(b, b^2)}{\omega(b^2, ab) \omega(a, b)}$	ab^2a	$\frac{\omega(a, a)}{\alpha'^2} \frac{\omega_{b3}^{2/3}}{\omega(b, b) \omega(a, b^2a) \omega(b^2, a)}$
b	$\omega_{b3}^{1/3}$	b^2a	$\frac{\omega^{1/2}(a, a) \omega_{b3}^{2/3}}{\alpha' \omega(b, b) \omega(b^2, a)}$
aba	$\frac{\omega(a, a)}{\alpha'^2} \frac{\omega_{b3}^{1/3}}{\omega(a, ba) \omega(b, a)}$	ab^2	$\frac{\omega^{1/2}(a, a)}{\alpha'} \frac{\omega_{b3}^{2/3}}{\omega(b, b)} \frac{1}{\omega(a, b^2)}$

Группа T_h . Эта группа является прямым произведением группы T на инверсию: $T_h = T \times C_i$. Она определяется двумя образующими элементами $a = c_2$ и $s_6 = s$, где s_6 — зеркальный поворот, связанными соотношениями (3.9):

$$a^2 = e, \quad s_6^6 = e, \quad sas = as^2a.$$

При этом поворот $c_3 = s_6^2$.

Двадцать четыре элемента группы T_h состоят из 12 элементов группы T и 12 элементов, получающихся из элементов группы T умножением на инверсию $i = s_6^3$.

Введем

$$A' = \frac{\mathcal{D}(a)}{\omega^{1/2}(a, a)}, \quad B = \frac{\mathcal{D}(s)}{\omega_{s_6}^{1/6}}; \quad (14.55)$$

тогда из определяющих соотношений получим

$$A'^2 = I, \quad B^6 = I, \quad BA'B = \alpha' A' B^2 A', \quad (14.56)$$

$$\alpha' = \frac{\omega(s, as) \omega(a, s) \omega^{1/2}(a, a)}{\omega(a, s^2a) \omega(s^2, a) \omega(s, s)}. \quad (14.57)$$

Таким же образом, как и для группы T , можно найти, что $\alpha'^4 = 1$, т. е.

$$\alpha' = \varepsilon_4^m. \quad (14.58)$$

При этом снова при $m = 0, 2$ фактор-система принадлежит классу K_0 , а при $m = 1, 3$ — классу K_1 .

Вводя $A = \alpha' A'$, можно соотношения (14.56) привести к виду, аналогичному (14.50):

$$A^2 = \alpha I, \quad B^6 = I, \quad BAB = AB^2A, \quad \alpha = \pm 1. \quad (14.59)$$

Группа представлений для группы T_h содержит 48 элементов и определяется соотношениями

$$a^2 = \alpha, \quad s^6 = e, \quad \alpha^2 = e, \quad sas = as^2a, \quad a\alpha = \alpha a, \quad sa = as. \quad (14.60)$$

Из (14.60) легко получить, что стандартная фактор-система ω'_{T_h} для группы T_h связана с фактор-системой ω'_T группы T соотношениями

$$\omega'_{T_h}(r_1, r_2) = \omega'_{T_h}(r_1, ir_2) = \omega'_{T_h}(ir_1, r_2) = \omega'_{T_h}(ir_1, ir_2) = \omega'_T(r_1, r_2), \quad (14.61)$$

где r_1 и r_2 — любые элементы группы T , а i — инверсия s^3 .

По формуле (14.53) легко найти функцию u , которая приводит любую заданную фактор-систему к виду (14.61). Для элементов группы T_h , которые входят в группу T , функция u определена в табл. 14.1, где b нужно заменить на s^2 . Для остальных элементов группы T_h , являющихся произведением элементов r группы T на инверсию i ,

$$u(r_i) = \frac{u(r) \omega^{1/2}(i, i)}{\omega(r, i)},$$

где $u(r)$ приведена в табл. 14.1.

В классе K_1 группы T_h имеется шесть двумерных представлений. Три из них являются представлениями группы T , а остальные получаются из них умножением B на множитель $\varepsilon_6 = e^{\pi i/3}$. Они приведены в табл. 14.2.

Группа O . Группа октаэдра O и изоморфная ей группа T_d определяются двумя образующими элементами. Для группы O $a = c_4$ и $b = c_3$; a и b связаны соотношениями (3.10)

$$a^4 = e, \quad b^3 = e, \quad aba = b^2.$$

Пусть

$$A' = \frac{\mathcal{D}(a)}{\omega_{a^4}^{1/4}}, \quad B' = \frac{\mathcal{D}(b)}{\omega_{b^3}^{1/3}},$$

где $\mathcal{D}(a)$ и $\mathcal{D}(b)$ — матрицы проективного представления для элементов a и b . Тогда из определяющих соотношений получим

$$A'^4 = I, \quad B'^3 = I, \quad A'B'A' = \alpha' B'^2, \quad (14.62)$$

где

$$\alpha' = \frac{\omega_{b3}^{1/3} \omega(a, ba) \omega(b, a)}{\omega_{a4}^{1/2} \omega(b, b)}. \quad (14.63)$$

Из уравнений (14.62) следует равенство $B'A'^2B' = \alpha'^3 A'^2 B'^2 A'^2$, которое аналогично третьему равенству (14.56), поэтому для α' имеем

$$\alpha'^{12} = 1, \text{ т. е. } \alpha' = \varepsilon_{12}^m \quad (m = 0, 1, 2, \dots, 11). \quad (14.64)$$

Введем теперь новые матрицы A и B уравнениями

$$A = A' \varepsilon_3^q, \quad B = \varepsilon_3^p B';$$

тогда соотношения (14.62) принимают вид

$$A^4 = \alpha I, \quad B^3 = I, \quad ABA = \alpha'' B^2, \quad \alpha = (-1)^q, \quad (14.65)$$

где

$$\alpha'' = \alpha' \varepsilon_8^{2q} \varepsilon_3^p = \varepsilon_{12}^m \varepsilon_3^p \varepsilon_4^q.$$

Поскольку $\varepsilon_{12} = \varepsilon_3 \varepsilon_4^3$, то выражение для α'' можно привести к виду

$$\alpha'' = \varepsilon_3^{m+p} \varepsilon_4^{3m+q}. \quad (14.66)$$

Из (14.66) видно, что, выбрав $p = -m$ и $q = -3m$, всегда можно сделать α'' равным единице. При этом, если m четное, то $\alpha = (-1)^{-m} = 1$ и все проективные представления p -эквивалентны векторным. Если же m нечетное, то $\alpha = -1$, $A^4 = -I$ и фактор-система принадлежит классу K_1 . Поэтому в группе $O(T_d)$ возможны два класса фактор-систем: K_0 и K_1 , соответствующие $\alpha = \pm 1$ (четные или нечетные m в уравнении (14.64)).

Как и в группе T , при этом удобно определять принадлежность заданной фактор-системы к классу K_0 или K_1 по отношению коэффициентов фактор-систем для пары коммутирующих элементов c_4^2 и $c_4'^2$, так как из (14.65) следует, что это отношение равно $\alpha'^6 = \pm 1$ для классов K_0 и K_1 соответственно.

Группа представления для группы октаэдра определяется соотношениями

$$a^4 = \alpha, \quad a^2 = e, \quad b^3 = e, \quad aba = b^2, \quad aa = aa, \quad ab = ba. \quad (14.67)$$

В группе O в классе K_1 имеется одно четырехмерное и два двумерных представления; они приведены в табл. 14.2.

Используя формулу (14.53), легко найти функцию $u(r)$, которая приводит любую заданную фактор-систему ω группы $O(T_d)$ к стандартной фактор-системе ω' , определяемой соотношениями (14.67). Для произвольного элемента группы $O(T_d)$ вида $a^k b^p a^{k'} b^{p'}$

$$u(a^k b^p a^{k'} b^{p'}) = \frac{u(a^k) u(a^{k'}) u(b^p) u(b^{p'})}{\omega(a^k, b^p a^{k'} b^{p'}) \omega(b^p, a^{k'} b^{p'}) \omega(a^{k'}, b^{p'})}, \quad (14.68)$$

где

$$u(a^k) = \frac{\varepsilon_8^{3mk} \omega_{a4}^{k/4}}{\omega_{ak}}, \quad u(b^p) = \frac{\omega_{b3}^{p/3} \varepsilon_3^{-pm}}{\omega_{bp}}; \quad (14.69)$$

m определяется уравнением (14.64).

Группа O_h . Эта группа является прямым произведением группы O (или T_d) на инверсию i . Она определяется двумя образующими элементами $a = c_4$ и $s = s_6$, подчиняющимися соотношениям (3.13):

$$a^4 = e, \quad s^6 = e, \quad sa^3s = a, \quad as^3 = s^3a. \quad (14.70)$$

В группе O_h 48 элементов, половина из них являются элементами группы O , а остальные получаются из них умножением на инверсию $i = s_6^3$.

Из (14.70) получим соотношения между матрицами

$$A' = \frac{\mathcal{D}(a)}{\omega_{a4}^{1/4}} \quad \text{и} \quad B' = \frac{\mathcal{D}(s)}{\omega_{s6}^{1/6}},$$

а именно

$$A'^4 = I, \quad B'^6 = I, \quad B'A'^3B' = \alpha'A, \quad A'B'^3 = \beta B'^3A', \quad (14.71)$$

где

$$\alpha' = \frac{\omega(s, a^3s) \omega(a^3, s) \omega_{s3}}{\omega_{a4}^{1/2} \omega_{s6}^{1/3}}, \quad \beta = \frac{\omega(a, s^3)}{\omega(s^3, a)}. \quad (14.72)$$

Из (14.71) следует, что $\beta^2 = 1$, т. е. $\beta = \pm 1$.

Для определения возможных значений α' заметим, что третье из соотношений (14.71) можно привести к виду $B'^3A'^3B'A'^3 = \alpha'B'^2$. Используя последнее из соотношений (14.71), получим $B'^4 = A'B'^2A'\alpha'\beta$, которое аналогично соответствующему соотношению для группы O . Отсюда следует, что

$$(\alpha'\beta)^{12} = \alpha'^{12} = 1, \quad \text{т. е.} \quad \alpha = \varepsilon_{12}^m.$$

Вводя матрицы $A = A'\varepsilon_4^q$, $B = B'\varepsilon_6^p$, получим соотношения

$$A^4 = \alpha I, \quad B^6 = I, \quad BA^3B = \alpha''A, \quad AB = \beta BA, \quad (14.73)$$

где

$$\alpha = (-1)^q, \quad \alpha'' = \alpha'\varepsilon_4^q\varepsilon_3^p = \varepsilon_3^{m+p}\varepsilon_4^{3m+q}.$$

Выбирая $p = -m$, $q = -3m$, найдем, что $\alpha'' = 1$, и соотношения (14.73) принимают вид

$$A^4 = \alpha I, \quad B^6 = I, \quad BA^3B = A, \quad AB^3 = \beta B^3A, \quad (14.74)$$

$$\alpha = (-1)^m = \pm 1, \quad \beta = \pm 1.$$

Как и в случае группы O , четным m соответствует $\alpha = 1$, нечетным $\alpha = -1$.

Таким образом, в группе O_h существуют четыре класса фактор-систем, соответствующих возможным значениям α и β :

$$K_0(1, 1), \quad K_1(-1, 1), \quad K_2(1, -1), \quad K_3(-1, -1) = K_1K_2.$$

Группа представлений для O_h определяется четырьмя образующими элементами a, s, α и β и определяется соотношениями $a^4 = \alpha, s^6 = e, \alpha^2 = e, \beta^2 = e, sa^3s = a, as^3 = \beta s^3 a, \alpha\beta = \beta\alpha, \alpha a = a\alpha, \alpha s = s\alpha, \beta a = a\beta, \beta s = s\beta.$ (14.75)

Половина элементов группы O_h являются элементами группы O , остальные являются произведениями этих элементов на инверсию $i = s_6^3$, которая коммутирует со всеми элементами. Однако в группе представлений, как видно из (14.75), инверсия не коммутирует с a . Поэтому для группы O_h фактор-система ω'_{O_h} , соответствующая (14.75), зависит от специального выбора элементов группы O_h . Для определенности мы будем записывать элементы группы O_h в виде r или $ri = rs^3$, где r — элемент группы O . Тогда легко показать, что фактор-система группы O_h связана с фактор-системой для группы O соотношениями

$$\begin{aligned} \omega'_{O_h}(r_1, r_2) &= \omega'_O(r_1, r_2), & \omega'_{O_h}(r_1, r_2 i) &= \omega'_O(r_1, r_2), \\ \omega'_{O_h}(r_1 i, r_2) &= \omega'_{O_h}(r_1 i, r_2 i) = \beta^\mu \omega'_O(r_1, r_2), \end{aligned} \quad (14.76)$$

где μ — число, показывающее, сколько раз нужно переставлять инверсию i и поворот четвертого порядка $c_1 = a$ при переходе от элемента ir_2 к элементу $r_2 i$.

Функция $u(r)$ ($r \in O_h$), которая приводит любую заданную фактор-систему ω для группы O_h к стандартной фактор-системе (14.76), имеет вид (14.68), а

$$u(a^k) = \frac{e^{3mk} \omega_{a^4}^{k/4}}{\omega_{ak}}, \quad u(s^p) = \frac{\omega_{s^6}^{p/6} \epsilon_6^{pm}}{\omega_{sp}}. \quad (14.77)$$

При этом нужно иметь в виду следующее. Функция $u(r)$ является по своему определению однозначной функцией элемента группы, поэтому $u(ri) = u(ir)$. Однако правая часть равенства (14.68) зависит от порядка множителей и, в частности, может быть различна для ri и ir . Чтобы устранить эту неоднозначность, мы будем в правой части равенства (14.68) писать такой порядок следования поворота r и инверсии i , когда инверсия стоит справа от поворота: ri . При таком выборе $u(r)$ приводит заданную фактор-систему к стандартной (14.76). Например,

$$\omega'(a, s^3) = \frac{\omega(a, s^3) u(as^3)}{u(a) u(s^3)} = \frac{\omega(a, s^3) u(a) u(s^3)}{\omega(a, s^3) u(a) u(s^3)} = 1,$$

но

$$\omega'(s^3, a) = \frac{\omega(s^3, a) u(a) u(s^3)}{\omega(a, s^3) u(s^3) u(a)} = \beta$$

в соответствии с (14.76).

В группе O_h в классе K_1 имеется четыре двумерных и два четырехмерных представления, в классе K_3 — три четырехмерных и в классе K_2 — одно шестимерное и три двумерных представления, которые определяются матрицами представления A

и B для образующих элементов, удовлетворяющими соотношениям (14.74). Они приведены в табл. 14.2.

Таким образом, получены проективные представления всех точечных групп, которые необходимы для построения представлений пространственных групп. Матрицы для образующих элементов для проективных представлений 32 точечных групп приведены в табл. 14.2. Двумерные представления обозначаются символом $P_n^{(m)}$; верхний индекс m означает класс фактор-системы, а нижний n — номер представления. Четырехмерные представления обозначаются буквой $Q_n^{(m)}$, шестимерные — $R_n^{(m)}$.

Характеры неприводимых проективных представлений приведены в табл. 14.3.

Эти таблицы дают возможность найти представления для любой пространственной группы.

В соответствии с результатами §§ 12, 13 и 14 для нахождения представлений пространственной группы со звездой $\{k\}$ нужно поступать следующим образом:

1) Выбрав вектор k , определить точечную группу направлений F_k , элементы которой не меняют k или прибавляют к нему вектор обратной решетки (см. (12.12)).

2) По формуле (12.29) найти фактор-систему $\omega(r_1, r_2)$, $r_1 r_2 \in \in F_k$, соответствующую выбранной точке k .

3) По соответствующим формулам § 14 для рассматриваемой группы F_k определить класс полученной фактор-системы. Знание класса фактор-системы сразу дает возможность определить размерности представлений группы волнового вектора. Если полученная фактор-система не совпадает со стандартной, соответствующей группе F_k , то по формулам § 14 найти функцию $u(r)$, которая согласно (13.4) приводит заданную фактор-систему к стандартной.

4) Представление группы волнового вектора $\mathcal{D}^k(h)$ для элемента $h = (r|a + \alpha)$ определяется по формуле

$$\mathcal{D}^k(h) = e^{i k \cdot (a + \alpha)} u(r) \mathcal{D}(r),$$

где $\mathcal{D}(r)$ — проективное представление, соответствующее стандартной фактор-системе. Если элемент $r = a^m b^n c^p \dots$, где a, b, c, \dots — образующие элементы группы F_k , то $\mathcal{D}(r) = = A^m B^n C^p \dots$, где A, B, C, \dots — матрицы проективного представления для стандартной фактор-системы, приведенные в табл. 14.2*).

5) Полное представление пространственной группы \mathcal{D}^k определяется через представление группы волнового вектора по формуле (12.23).

*) При этом нужно обратить внимание на правильность порядка следования образующих элементов $a^m b^n c^p \dots$ в элементе r , который должен совпадать с определением элемента r , приведенным в таблицах характеров проективных представлений (табл. 14.3).

Проективные представления точечных групп

Группа	Класс	Представление	A	B	Соотношения	
C_{2h} (C_{2v} , D_2)	K_1	$P^{(1)}$	σ_z	σ_x	$A^2 = B^2 = I, AB = -BA$	
C_{4h}	K_1	$P_1^{(1)}$	σ_z	σ_x	$A^4 = B^2 = I, AB = -BA$	
		$P_2^{(1)}$	$i\sigma_z$	σ_x		
C_{6h}	K_1	$P_1^{(1)}$	σ_z	σ_x	$A^6 = B^2 = I, AB = -BA$ $\varepsilon_6 = e^{\pi i/3} = \frac{1 + i\sqrt{3}}{2}$	
		$P_2^{(1)}$	$\varepsilon_6\sigma_z$	σ_x		
		$P_3^{(1)}$	$\varepsilon_3\sigma_z$	σ_x		
D_4 (C_{4v} , D_{2d})	K_1	$P_1^{(1)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_8^3 & 0 \\ 0 & \varepsilon_8 \end{vmatrix}$	σ_x	$A^4 = -I, B^2 = I$ $BA = A^3B, \varepsilon_8 = e^{\pi i/4} = \frac{1+i}{\sqrt{2}}$	
		$P_2^{(1)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_8^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_8^{-3} \end{vmatrix}$	σ_x		
D_6 (C_{6v} , D_{3h} , D_{3d})	K_1	$P_1^{(1)}$	$-\sigma_z$	σ_x	$A^6 = I, B^2 = I$ $BA = -A^5B$ $\varepsilon_6 = e^{\pi i/3} = \frac{1 + i\sqrt{3}}{2}$	
		$P_2^{(1)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6^2 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_x		
		$P_3^{(1)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6^4 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^5 \end{vmatrix}$	σ_x		
Группа	Класс	Представление	A	B	C	Соотношения
D_{2h}	K_1	$P_1^{(1)}$	σ_z	σ_x	I	$A^2 = B^2 = C^2 = I$ $AB = -BA$ $AC = CA$ $BC = CB$
		$P_2^{(1)}$	σ_z	σ_x	$-I$	
	K_5	$P_1^{(5)}$	σ_z	σ_x	$-\sigma_y$	$A^2 = B^2 = C^2 = I$ $AB = -BA$ $AC = -CA$ $BC = -CB$
$P_2^{(5)}$	$-\sigma_z$	σ_x	$-\sigma_y$			
K_6	$P_1^{(6)}$	σ_z	σ_x	σ_x	$A^2 = B^2 = C^2 = I$ $AB = -BA$ $AC = -CA$ $BC = CB$	
	$P_2^{(6)}$	σ_z	σ_x	$-\sigma_x$		

Таблица 14.2 (продолжение)

Группа	Класс	Представление	A	B	C	Соотношения
D_{4h}	K_1	$P_1^{(1)}$	$\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	I	$A^4 = -I$ $B^2 = C^2 = I$
		$P_2^{(1)}$	$-\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	I	$BA = A^3B$
		$P_3^{(1)}$	$\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	$-I$	$AC = CA$
		$P_4^{(1)}$	$-\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	$-I$	$BC = CB$
K_2	$P_1^{(2)}$	$P_1^{(2)}$	I	σ_z	σ_y	$A^4 = B^2 = C^2 = I$
		$P_2^{(2)}$	$i\sigma_z$	σ_x	σ_z	$BA = A^3B$
		$P_3^{(2)}$	$-I$	σ_z	σ_y	$AC = CA$
		$P_4^{(2)}$	$i\sigma_z$	σ_x	$-\sigma_z$	$BC = -CB$
K_3	$P_1^{(3)}$	$P_1^{(3)}$	σ_z	I	σ_y	$A^4 = B^2 = C^2 = I$
		$P_2^{(3)}$	$i\sigma_z$	σ_x	σ_x	$BA = A^3B$
		$P_3^{(3)}$	σ_z	$-I$	σ_y	$AC = -CA$
		$P_4^{(3)}$	$i\sigma_z$	$-\sigma_x$	σ_x	$BC = CB$
K_4	$P_1^{(4)}$	$P_1^{(4)}$	σ_z	σ_z	σ_x	$A^4 = B^2 = C^2 = I$
		$P_2^{(4)}$	$i\sigma_z$	$-\sigma_x$	σ_y	$BA = A^3B$
		$P_3^{(4)}$	σ_z	$-\sigma_z$	σ_x	$AC = -CA$
		$P_4^{(4)}$	$i\sigma_z$	σ_x	σ_y	$BC = -CB$
K_5	$Q^{(5)}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} -i & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 1 \\ 0 & 0 & 1 & i \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$A^4 = -I$ $B^2 = I$ $C^2 = I$ $BA = A^3B$ $AC = -CA$ $BC = -CB$	
K_6	$Q^{(6)}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} -i & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 1 \\ 0 & 0 & 1 & i \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$A^4 = -I$ $B^2 = I$ $C^2 = I$ $BA = A^3B$ $AC = -CA$ $BC = CB$	

Таблица 14.2 (продолжение)

Группа	Класс	Пред- ста- вление	A	B	C	Соотношения
D_{4h}	K_7	$P_1^{(7)}$	$\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	σ_z	$A^4 = -I, B^2 = I$
		$P_2^{(7)}$	$-\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	σ_z	$C^2 = I, BA = A^3B$
		$P_3^{(7)}$	$\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	$-\sigma_z$	$AC = CA, BC = -CB$
		$P_4^{(7)}$	$-\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	σ_x	$-\sigma_z$	
D_{6h}	K_1	$P_1^{(1)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_y	I	$A^6 = I, B^2 = I$
		$P_2^{(1)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_y	I	$C^2 = I, BA = -A^5B$
		$P_3^{(1)}$	$-\sigma_z$	σ_y	I	$AC = CA$
		$P_4^{(1)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_y	$-I$	$BC = CB$
		$P_5^{(1)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_y	$-I$	$\varepsilon_6 = e^{\pi i/3} = \frac{1 + i\sqrt{3}}{2}$
		$P_6^{(1)}$	$-\sigma_z$	σ_y	$-I$	
K_2	$P_1^{(2)}$	I	σ_z	σ_x	$A^6 = I, B^2 = I$	
	$P_2^{(2)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_x	$-\sigma_z$	$C^2 = I, BA = A^5B$	
	$P_3^{(2)}$	$-\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_x	$-\sigma_z$	$AC = CA$	
	$P_4^{(2)}$	$-I$	σ_z	σ_x	$BC = -CB$	
	$P_5^{(2)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_x	σ_z		
	$P_6^{(2)}$	$-\begin{vmatrix} \varepsilon_6^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_x	$-\sigma_z$		

Таблица 14.2 (продолжение)

Группа	Класс	Представление	A	B	C	Соотношения
D_{6h}	K_3	$P_1^{(3)}$	σ_z	I	$-\sigma_y$	$A^6 = I$ $B^2 = I$
		$P_2^{(3)}$	σ_z	$-I$	$-\sigma_y$	$C^2 = I$ $BA = A^5B$
		$Q^{(3)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$AC = -CA$ $BC = CB$
	K_4	$P_1^{(4)}$	σ_z	σ_z	σ_y	$A^6 = I$ $B^2 = I$
		$P_2^{(4)}$	σ_z	$-\sigma_z$	σ_y	$C^2 = I$ $BA = A^5B$
		$Q^{(4)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$AC = -CA$ $BC = -CB$
	K_5	$P_1^{(5)}$	σ_z	σ_x	σ_y	$A^6 = I$ $B^2 = I$
		$P_2^{(5)}$	σ_z	σ_x	$-\sigma_y$	$C^2 = I$ $BA = -A^5B$
		$Q^{(5)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$AC = -CA$ $BC = -CB$
	K_6	$P_1^{(6)}$	σ_z	σ_x	σ_x	$A^6 = I$ $B^2 = I$
		$P_2^{(6)}$	σ_z	σ_x	$-\sigma_x$	$C^2 = I$ $BA = -A^5B$
		$Q^{(6)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$AC = -CA$ $BC = CB$

Таблица 14.2 (продолжение)

Группа	Класс	Представление	A	B	C	Соотношения
D_{6h}	K_7	$P_1^{(7)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_y	σ_z	$A^6 = I, B^2 = I$
		$P_2^{(7)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_y	σ_z	$C^2 = I, BA = -A^5B$
		$P_3^{(7)}$	σ_z	σ_y	σ_z	$AC = CA$
		$P_4^{(7)}$	$\begin{vmatrix} -\varepsilon_6^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_6 \end{vmatrix}$	σ_y	$-\sigma_z$	$BC = -CB$
		$P_5^{(7)}$	$\begin{vmatrix} \varepsilon_6 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_6^{-1} \end{vmatrix}$	σ_y	$-\sigma_z$	$\varepsilon_6 = e^{\pi i/3} = \frac{1 + i\sqrt{3}}{2}$
		$P_6^{(7)}$	σ_z	σ_y	$-\sigma_z$	
Группа	Класс	Представление	A	B	Соотношения	
T	K_1	$P_1^{(1)}$	$i\sigma_x$	$(1/\sqrt{2}) e^{3\pi i/4} \delta$	$A^2 = -I$ $B^3 = I$ $BAB = AB^2A$ $\delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & i \end{vmatrix}$	
		$P_2^{(1)}$	$i\sigma_x$	$-(1/\sqrt{2}) e^{5\pi i/12} \delta$		
		$P_3^{(1)}$	$i\sigma_x$	$(1/\sqrt{2}) e^{\pi i/12} \delta$		
T_h	K_1	$P_1^{(1)}$	$i\sigma_x$	$(1/\sqrt{2}) e^{3\pi i/4} \delta$	$A^2 = -I$ $B^6 = I$ $BAB = AB^2A$ $\delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & i \end{vmatrix}$	
		$P_2^{(1)}$	$i\sigma_x$	$-(1/\sqrt{2}) e^{5\pi i/12} \delta$		
		$P_3^{(1)}$	$i\sigma_x$	$(1/\sqrt{2}) e^{\pi i/12} \delta$		
		$P_4^{(1)}$	$i\sigma_x$	$-(1/\sqrt{2}) e^{\pi i/12} \delta$		
		$P_5^{(1)}$	$i\sigma_x$	$-(1/\sqrt{2}) e^{3\pi i/4} \delta$		
		$P_6^{(1)}$	$i\sigma_x$	$(1/\sqrt{2}) e^{5\pi i/12} \delta$		
$O(T_d)$	K_1	$P_1^{(1)}$	$\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-3i\pi/4} \delta$	$A^4 = -I,$ $B^3 = I$ $ABA = B^2$ $\beta_1 = e^{5\pi i/6}$ $\beta_2 = e^{i\pi/6} = -\frac{1}{\beta_1}$ $\delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{vmatrix}$	
		$P_2^{(1)}$	$-\varepsilon_8 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-3i\pi/4} \delta$		
		$Q^{(1)}$	$\varepsilon_8^3 \begin{vmatrix} 0 & 0 & -\beta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\beta_1 \\ -\beta_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\beta_2 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\pi i/12} \begin{vmatrix} \delta & 0 \\ 0 & \varepsilon_3 \delta \end{vmatrix}$		

Таблица 14.2 (продолжение)

Группа	Класс	Представление	A	B	Соотношения
O_h	K_1	$P_1^{(1)}$	ρ	δ	$A^4 = -I, B^6 = I$ $BA^3B = A, AB^3 = B^3A$ $\rho = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} \sqrt{2} i \varepsilon^2 & 1 \\ -1 & -i\sqrt{2} \varepsilon \end{vmatrix}$ $\delta = \begin{vmatrix} \varepsilon^2 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{vmatrix}$ $\tau = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} 1 & -\sqrt{2} \varepsilon^2 \\ \sqrt{2} \varepsilon & 1 \end{vmatrix}$ $\theta = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} 1 & \sqrt{2} \varepsilon \\ -\sqrt{2} \varepsilon^2 & 1 \end{vmatrix} = -\tilde{\tau}$ $\varepsilon = \varepsilon_3$
		$P_2^{(1)}$	$-\rho$	δ	
		$P_3^{(1)}$	ρ	$-\delta$	
		$P_4^{(1)}$	$-\rho$	$-\delta$	
		$Q_1^{(1)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \tau \\ \theta & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{vmatrix}$	
		$Q_2^{(1)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \tau \\ \theta & 0 \end{vmatrix}$	$-\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{vmatrix}$	
K_2	$P_1^{(2)}$	$i\sigma_z$	σ_x	$A^4 = I, B^6 = I$ $BA^3B = A$ $AB^3 = -B^3A$ $\varepsilon = \varepsilon_3$	
		$i\sigma_x$			$\begin{vmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon^2 \end{vmatrix}$
		$i\sigma_x$			$-\begin{vmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon^2 \end{vmatrix}$
	$R^{(2)}$	$\begin{vmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$		
K_3	$Q_1^{(3)}$	$\begin{vmatrix} \rho & 0 \\ 0 & -\rho \end{vmatrix}$	$\frac{\varepsilon_8}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & -\delta \\ \delta & 0 \end{vmatrix}$	$A^4 = -I, B^6 = I$ $BA^3B = A, AB^3 = -B^3A$ $\rho = \begin{vmatrix} \varepsilon_8^3 & 0 \\ 0 & \varepsilon_8 \end{vmatrix}$ $\delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{vmatrix}$	
	$Q_2^{(3)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \rho \\ \rho & 0 \end{vmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\pi i/12} \begin{vmatrix} \varepsilon_8 \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{vmatrix}$		
	$Q_3^{(3)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \rho \\ \rho & 0 \end{vmatrix}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\pi i/12} \begin{vmatrix} \varepsilon_8 \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{vmatrix}$		

Характеры проективных представлений точечных групп

C_{2h}		C_{2v}			D_2		$a^2 = e, b^2 = e, ab = ba$ $A^2 = I, B^2 = I, AB = \alpha BA$ $\alpha = \pm i$
$a = c_2, b = i$ (или σ_h)		$a = c_2, b = \sigma_v$			$a = c_2, b = u_2$		
	e	a	b	ab	α		
$P^{(1)}$	2	0	0	0	-1		

C_{4h}		$a^4 = e, b^2 = e, ab = ba$ $A^4 = I, B^2 = I, AB = \alpha BA$ $\alpha = \pm 1$								
$a = c_4, b = i$ (или σ_h)										
	e	a	a^2	a^3	b	ab	a^2b	a^3b	α	
$P_1^{(1)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	-1	
$P_1^{(2)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	-1	

C_{6h}		$a^6 = e, b^2 = e, ab = ba$ $A^6 = I, B^2 = I, AB = \alpha BA$ $\epsilon_6 = e^{\pi i/3}, \alpha = \pm 1$											
$a = c_6, b = i$ (или σ_h)													
	e	a	a^2	a^3	a^4	a^5	b	ab	a^2b	a^3b	a^4b	a^5b	α
$P_1^{(1)}$	2	0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
$P_2^{(1)}$	2	0	$2\epsilon_6^2$	0	$2\epsilon_6^4$	0	0	0	0	0	0	0	-1
$P_3^{(1)}$	2	0	$2\epsilon_6^4$	0	$2\epsilon_6^2$	0	0	0	0	0	0	0	

C_{4v}		D_4		D_{2d}			$a^4 = e, b^2 = e, ba = a^3b$ $A^4 = \alpha I, B^2 = I, BA = A^3B$ $\alpha = \pm 1$
$a = c_4, b = \sigma_v$		$a = c_4, b = u_2$		$a = s_4, b = u_2$			
	e	a, a^3	a^2	b, a^2b	ab, a^3b	α	
$P_1^{(1)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	0	0	-1	
$P_2^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	-1	

Таблица 14.3 (продолжение)

D_6		C_{6v}		D_{3d}		D_{3h}		$a^6=e, b^2=e, ba=a^5b$ $A^6=I, B^2=I, BA=\alpha A^5B$ $\alpha = \pm 1$
$a=c_6, b=u_2$		$a=c_6, b=\sigma_v$		$a=s_6, b=u_2$		$a=s_6, b=u_2$		
	e	a	a^2, a^4	a^3	b, a^2b, a^4b	ab, a^3b, a^5b	α	
$P_1^{(1)}$	2	0	2	0	0	0		
$P_2^{(1)}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	$-i\sqrt{3}$	0	0	-1	
$P_3^{(1)}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	$i\sqrt{3}$	0	0		

D_{2h}		$a^2=b^2=c^2=e, ba=ab, cb=bc, ac=ca$ $A^2=B^2=C^2=I, BA=\alpha AB, CB=\gamma BC, AC=\beta CA$ $\alpha, \beta, \gamma = \pm 1$							
$a=c_2, b=u_2, c=i$ (или σ_h)		e	a	b	c	ab	bc	ca	abc
Класс		e	a	b	c	ab	bc	ca	abc
K_1 $\alpha=-1, \beta=\gamma=1$	$P_1^{(1)}$	2	0	0	2	0	0	0	0
	$P_2^{(1)}$	2	0	0	-2	0	0	0	0
K_2 $\alpha=\beta=1, \gamma=-1$	$P_1^{(2)}$	2	0	2	0	0	0	0	0
	$P_2^{(2)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0
K_3 $\alpha=\gamma=1, \beta=-1$	$P_1^{(3)}$	2	2	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(3)}$	2	-2	0	0	0	0	0	0
K_4 $\beta=\gamma=-1, \alpha=1$	$P_1^{(4)}$	2	0	0	0	2	0	0	0
	$P_2^{(4)}$	2	0	0	0	-2	0	0	0
K_5 $\alpha=\beta=\gamma=-1$	$P_1^{(5)}$	2	0	0	0	0	0	0	2
	$P_2^{(5)}$	2	0	0	0	0	0	0	-2
K_6 $\alpha=\beta=-1, \gamma=1$	$P_1^{(6)}$	2	0	0	0	0	2	0	0
	$P_2^{(6)}$	2	0	0	0	0	-2	0	0
K_7 $\alpha=\gamma=-1, \beta=1$	$P_1^{(7)}$	2	0	0	0	0	0	2	0
	$P_2^{(7)}$	2	0	0	0	0	0	-2	0

Таблица 14.3 (продолжение)

D_4h		$A^1=e, B^1=e, ba=a^3b$ $A^1=eA, BA=A^2B, B^2=C^2=I, AC=\beta CA, BC=\gamma CB$ $\alpha, \beta, \gamma=\pm 1$															
$a=c_4, b=u_2, c=l$ (или σ_h)																	
Класс		e	a	a^2	a^3	b	ab	a^2b	a^3b	c	ac	a^2c	a^3c	bc	abc	a^2bc	a^3bc
K_1 $\beta=\gamma=-1$ $\alpha=-1$	$P_1^{(1)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0	2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0
	$P_2^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0	2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0
	$P_3^{(1)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0	-2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0
	$P_4^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0	-2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0
K_2 $\alpha=\beta=-1$ $\gamma=-1$	$P_1^{(2)}$	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(2)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	2i	0	-2i	0	0	0	0
	$P_3^{(2)}$	2	-2	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_4^{(2)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	-2i	0	2i	0	0	0	0
K_3 $\alpha=\gamma=-1$ $\beta=-1$	$P_1^{(3)}$	2	0	2	0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(3)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	-2	0
	$P_3^{(3)}$	2	0	2	0	-2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_4^{(3)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	0	2	0
K_4 $\beta=\gamma=-1$ $\alpha=1$	$P_1^{(4)}$	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(4)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	-2
	$P_3^{(4)}$	2	0	2	0	0	-2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_4^{(4)}$	2	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	0	2
K_5 $\alpha=\beta=-1$ $\gamma=-1$	$Q^{(5)}$	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_6 $\alpha=\beta=-1$ $\gamma=1$	$Q^{(6)}$	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_7 $\alpha=\gamma=-1$ $\beta=1$	$P_1^{(7)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0	0	$-\sqrt{2}$	-2i	$\sqrt{2}$	0	0	0	0
	$P_2^{(7)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0	0	$\sqrt{2}$	-2i	$-\sqrt{2}$	0	0	0	0
	$P_3^{(7)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	0	0	0	$\sqrt{2}$	2i	$-\sqrt{2}$	0	0	0	0
	$P_4^{(7)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0	0	0	$-\sqrt{2}$	2i	$\sqrt{2}$	0	0	0	0

Таблица 14.3 (продолжение)

D_{6h}				$a^6=b^2=c^2=e, \quad ba=a^5b, \quad ca=ac, \quad cb=bc$ $A^6=B^2=C^2=I, \quad BA=\alpha A^5B, \quad CA=\beta AC, \quad CB=\gamma BC$ $\alpha, \beta, \gamma=\pm 1$												
$a=c_6, \quad b=u_2, \quad c=i$ (или σ_h)																
Класс	e	a	a^2 a^4	a^3	a^5	b a^2b a^4b	ab a^3b a^5b	c	ac	a^2c	a^3c	a^4c	a^5c	bc a^2bc a^4bc	abc a^3bc a^5bc	
K_1 $\beta=\gamma=1$ $\alpha=-1$	$P_1^{(1)}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	$-i\sqrt{3}$	0	0	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	-1	$-i\sqrt{3}$	0	0
	$P_2^{(1)}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	$i\sqrt{3}$	0	0	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	-1	$i\sqrt{3}$	0	0
	$P_3^{(1)}$	2	0	2	0	0	0	0	2	0	2	0	2	0	0	0
	$P_4^{(1)}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	$-i\sqrt{3}$	0	0	-2	$-i\sqrt{3}$	1	0	1	$i\sqrt{3}$	0	0
	$P_5^{(1)}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	$i\sqrt{3}$	0	0	-2	$i\sqrt{3}$	1	0	1	$-i\sqrt{3}$	0	0
	$P_6^{(1)}$	2	0	2	0	0	0	0	-2	0	-2	0	-2	0	0	0
K_2 $\alpha=\beta=1$ $\gamma=-1$	$P_1^{(2)}$	2	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(2)}$	2	1	-1	-2	1	0	0	0	$-i\sqrt{3}$	$-i\sqrt{3}$	0	$i\sqrt{3}$	$i\sqrt{3}$	0	0
	$P_3^{(2)}$	2	-1	-1	2	-1	0	0	0	$i\sqrt{3}$	$-i\sqrt{3}$	0	$i\sqrt{3}$	$-i\sqrt{3}$	0	0
	$P_4^{(2)}$	2	-2	2	-2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_5^{(2)}$	2	1	-1	-2	1	0	0	0	$i\sqrt{3}$	$i\sqrt{3}$	0	$-i\sqrt{3}$	$-i\sqrt{3}$	0	0
	$P_6^{(2)}$	2	-1	-1	2	-1	0	0	0	$-i\sqrt{3}$	$i\sqrt{3}$	0	$-i\sqrt{3}$	$i\sqrt{3}$	0	0
K_3 $\alpha=\gamma=1$ $\beta=-1$	$P_1^{(3)}$	2	0	2	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(3)}$	2	0	2	0	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$Q(3)$	4	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_4 $\beta=\gamma=$ $=-1$ $\alpha=1$	$P_1^{(4)}$	2	0	2	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(4)}$	2	0	2	0	0	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0
	$Q(4)$	4	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_5 $i=\beta=$ $-\gamma=-1$	$P_1^{(5)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2i
	$P_2^{(5)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2i
	$Q(5)$	4	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_6 $\alpha=\beta=$ $=-1$ $\gamma=1$	$P_1^{(6)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0
	$P_2^{(6)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	0
	$Q(6)$	4	0	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_7 $\alpha=\gamma=$ $=-1$ $\beta=1$	$P_1^{(7)}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	$-i\sqrt{3}$	0	0	0	-1	$-i\sqrt{3}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	0
	$P_2^{(7)}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	$i\sqrt{3}$	0	0	0	-1	$i\sqrt{3}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	0
	$P_3^{(7)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	2	0	2	0	2	0	0
	$P_4^{(7)}$	2	$i\sqrt{3}$	-1	0	$-i\sqrt{3}$	0	0	0	1	$i\sqrt{3}$	-2	$-i\sqrt{3}$	1	0	0
	$P_5^{(7)}$	2	$-i\sqrt{3}$	-1	0	$i\sqrt{3}$	0	0	0	1	$-i\sqrt{3}$	-2	$i\sqrt{3}$	1	0	0
	$P_6^{(7)}$	2	0	2	0	0	0	0	0	-2	0	-2	0	-2	0	0

T		$a^2 = e, b^3 = e, bab = ab^2a$ $A^2 = -I, B^3 = I, BAB = AB^2A$ $\epsilon_3 = e^{2\pi i/3}$				
$a = c_2, b = c_3$						
	e	a, bab^2, b^2ab	b, ba, ab	aba	bab, b^2a, ab^2	b^2
$P_1^{(1)}$	2	0	-1	1	1	-1
$P_2^{(1)}$	2	0	$-\epsilon_3$	ϵ_3	ϵ_3^2	$-\epsilon_3^2$
$P_3^{(1)}$	2	0	$-\epsilon_3^2$	ϵ_3^2	ϵ_3	$-\epsilon_3$

T_h			$a^2 = e, s^6 = e, sas = as^2a$ $A^2 = -I, S^6 = I, SAS = AS^2A$									
$a = c_2, s = s_6$												
	e	s^3	$\frac{a}{sas^2}$ $\frac{s^2as}{s^2as}$	$\frac{s^3a}{s^4as^2}$ $\frac{s^4as^2}{s^2as^4}$	$\frac{s}{sa}$ $\frac{as}{as}$	$\frac{s^4}{s^4a}$ $\frac{s^4a}{as^4}$	asa	as^4a	$\frac{sas}{s^2a}$ $\frac{s^2a}{as^2}$	$\frac{sas^4}{s^3a}$ $\frac{s^3a}{as^5}$	s^2	s^5
$P_1^{(1)}$	2	2	0	0	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
$P_2^{(1)}$	2	2	0	0	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_3$	ϵ_3	ϵ_3	ϵ_3^2	ϵ_3^2	$-\epsilon_3^2$	$-\epsilon_3^2$
$P_3^{(1)}$	2	2	0	0	$-\epsilon_3^2$	$-\epsilon_3^2$	ϵ_3^2	ϵ_3^2	ϵ_3	ϵ_3	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_3$
$P_4^{(1)}$	2	-2	0	0	ϵ_3^2	$-\epsilon_3^2$	$-\epsilon_3^2$	ϵ_3^2	ϵ_3	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_3$	ϵ_3
$P_5^{(1)}$	2	-2	0	0	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
$P_6^{(1)}$	2	-2	0	0	ϵ_3	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_3$	ϵ_3	ϵ_3^2	$-\epsilon_3^2$	$-\epsilon_3^2$	ϵ_3^2

O		T_d				$a^4 = e, b^3 = e, aba = b^2$ $A^4 = -I, B^3 = I, ABA = B^2$			
$a = c_4, b = c_3$		$a = s_4, b = c_3$							
	e	$\frac{a}{bab^2}$ $\frac{b^2ab}{b^2ab}$	$\frac{a^2}{ba^2b^2}$ $\frac{b^2a^2b}{b^2a^2b}$	$\frac{a^3}{b^2a}$ $\frac{b^2a}{ab^2}$	$\frac{ab}{b^2ab^2}$ $\frac{ba^2b^2a}{ba^2b^2a}$	$\frac{ba}{a^2ba^3}$ $\frac{a^3ba^2}{a^3ba^2}$	$\frac{b, b^2}{a^2b}$ $\frac{a^2b}{b^2a}$	$\frac{a^2b^2, b^2a^2}{a^2b^2a^2}$ $\frac{a^2b^2a^2}{a^2b^2a^2}$	
$P_1^{(1)}$	2	$\sqrt{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	-1	1	
$P_2^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}i$	0	$\sqrt{2}i$	0	0	-1	1	
$Q^{(1)}$	4	0	0	0	0	0	1	-1	

Таблица 14.3 (продолжение)

$O_h^*)$			$a^4 = e, b^6 = e, ba^3b = a, ab^3 = b^3a$ $A^4 = \alpha I, B^6 = I, BA^3B = A, AB^3 = \beta B^3A$ $\alpha = \pm 1, \beta = \pm 1$								
$a = c, b = s_6$											
Класс		e	a b^2ab^4 b^4ab^2 a^3 b^4a ab^4	b^2 b^4 abb^2a^4 $a^2b^2a^2$ a^2b^2a $a^2b^4a^2$ a^2b^2 b^2a^2	a^2 $b^2a^2b^4$ $b^4a^2b^2$	ab^2 b^2a b^4ab^4 $a^2b^2a^3$ $a^3b^2a^2$ $b^2a^2b^4a$	b^3	ab^3 b^2ab b^4ab^5 a^3b^3 b^4ab^3 ab	b b^5 $ab^2a^3b^3$ $a^3b^2ab^3$ a^2b^5 b^5a^2 a^2ba^2 $a^2b^5a^2$	a^2b^3 b^2a^2b $b^2a^2b^2$	ab^5 b^2ab^3 b^4ab a^2bab^2 $a^3b^5a^2$ $b^2a^2b^4ab^3$
K_1 $\alpha = -1$ $\beta = 1$	$P_1^{(1)}$	2	$\sqrt{2}$	-1	0	0	2	$\sqrt{2}$	-1	0	0
	$P_2^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}$	-1	0	0	2	$-\sqrt{2}$	-1	0	0
	$P_3^{(1)}$	2	$\sqrt{2}$	-1	0	0	-2	$-\sqrt{2}$	1	0	0
	$P_4^{(1)}$	2	$-\sqrt{2}$	-1	0	0	-2	$\sqrt{2}$	1	0	0
	$Q_1^{(1)}$	4	0	1	0	0	4	0	1	0	0
	$Q_2^{(1)}$	4	0	1	0	0	-4	0	-1	0	0
K_2 $\alpha = 1$ $\beta = -1$	$P_1^{(2)}$	2	0	2	-2	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(2)}$	2	0	-1	-2	0	0	0	$i\sqrt{3}$	0	0
	$P_3^{(2)}$	2	0	-1	-2	0	0	0	$-i\sqrt{3}$	0	0
	$R^{(2)}$	6	0	0	2	0	0	0	0	0	0
K_3 $\alpha = -1$ $\beta = -1$	$Q_1^{(3)}$	4	0	-2	0	0	0	0	0	0	0
	$Q_2^{(3)}$	4	0	1	0	0	0	0	$i\sqrt{3}$	0	0
	$Q_3^{(3)}$	4	0	1	0	0	0	0	$-i\sqrt{3}$	0	0

*) Здесь для упрощения записи инверсия b^3 пронесена через четные степени a , так как $a^2b^3 = b^3a^2$ как в группе O_h , так и в группе представлений (14.75). Поэтому, например, $a^2b^2a^2b^3 + a^2b^3a^2$.

СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В первых главах этой книги были изложены основные элементы теории симметрии и теории представлений. Перейдем теперь к рассмотрению тех физических следствий, к которым приводит учет требований симметрии в квантовой механике и теории колебаний. Определение разрешенных значений энергии и собственных функций в квантовой механике, так же как и определение частот колебаний и соответствующих им векторов смещений, являются по сути задачами на определение собственных значений и собственных функций соответствующего оператора. Общий характер спектра данного оператора существенно определяется его симметрией. Именно этой особенностью и объясняется широкое применение теории групп в квантовой механике и теории колебаний.

Теория симметрии дает возможность, не задавая конкретного вида взаимодействия, установить важные особенности электронного и колебательного спектра в атомах, молекулах и кристаллах, систематику термов и возможные типы вырождения, положения экстремальных точек для спектров в кристаллах и вид спектра вблизи этих точек, правила отбора для различных переходов, изменение спектров во внешних полях, нарушающих симметрию, и т. д.

В § 15 мы остановимся на первом из этих вопросов.

§ 15. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И КЛАССИФИКАЦИЯ ТЕРМОВ. НОРМАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Классификация электронных состояний

Стационарное состояние электрона во внешнем поле описывается уравнением Шредингера:

$$\mathcal{H}(\mathbf{x})\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right)\psi = E\psi. \quad (15.1)$$

Поскольку оператор кинетической энергии

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

инвариантен к любым операциям пространственных групп, т. е. к поворотам и трансляциям, то симметрия гамильтониана $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ определяется симметрией потенциала $V(\mathbf{x})$. Например, для электрона в идеальном кристалле потенциал $V(\mathbf{x})$ инвариантен ко всем преобразованиям соответствующей пространственной группы. Для электрона, находящегося на примесном центре в решетке, $V(\mathbf{x})$ инвариантен к преобразованиям точечной группы, определяемой симметрией кристалла и положением примесного центра в решетке. Это означает, что при всех операциях g , входящих в группу симметрии гамильтониана \mathcal{G} ,

$$\mathcal{H}(g^{-1}\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}) \quad (15.2)$$

или

$$\mathcal{D}(g)\mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(g^{-1}\mathbf{x})\psi(g^{-1}\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x})\mathcal{D}(g)\psi(\mathbf{x}).$$

Поэтому условие инвариантности \mathcal{H} к операции g означает коммутацию операторов \mathcal{H} и $\mathcal{D}(g)$:

$$\mathcal{D}(g)\mathcal{H} = \mathcal{H}\mathcal{D}(g). \quad (15.3)$$

Уравнение Шредингера (15.1) в новой системе координат $\mathbf{x}' = g^{-1}\mathbf{x}$ переписывается так:

$$\mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(g^{-1}\mathbf{x}) = E\psi(g^{-1}\mathbf{x}). \quad (15.4)$$

Из (15.1) и (15.2) видно, что функциям $\psi(\mathbf{x})$ и $\psi(g^{-1}\mathbf{x})$ соответствует одно и то же собственное значение энергии E . Совершая все преобразования группы g , мы получим таким образом h функций $\psi(g^{-1}\mathbf{x})$, из которых, вообще говоря, лишь часть функций $\psi_j(\mathbf{x})$ являются линейно независимыми, а все остальные выражаются через них. Поэтому каждая из функций, получаемая при действии оператора $\mathcal{D}(g)$ на любую функцию ψ_j , может быть линейно выражена через эти функции:

$$\mathcal{D}(g)\psi_j = \psi_j(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_i \mathcal{D}_{ij}\psi_i(\mathbf{x}). \quad (15.5)$$

Уравнение (15.5) показывает, что система собственных функций оператора \mathcal{H} , соответствующая одному собственному значению, образует базис представления \mathcal{D} группы симметрии \mathcal{G} этого гамильтониана.

Представление \mathcal{D} , вообще говоря, может быть приводимым или неприводимым. Так как, действуя всеми операторами $g \in \mathcal{G}$ на любую из функций ψ_j , мы получим все функции неприводимого представления, то это означает, что во всяком случае всем функциям неприводимого представления соответствует одна и та же энергия.

С другой стороны, совпадение собственных значений для нескольких независимых систем функций, образующих базис разных представлений, является случайным событием. Следовательно, как правило, каждому неприводимому представлению

должно соответствовать свое собственное значение энергии. Поэтому возможная степень вырождения каждого терма определяется размерностью соответствующего неприводимого представления, и среди решений уравнения Шредингера имеются термы всех кратностей, допускаемых этим условием. Поэтому состояние электрона часто характеризуют индексом соответствующего неприводимого представления. Это, конечно, не означает, что каждому представлению может соответствовать лишь один терм. Наоборот, как правило, ему соответствует целый набор термов.

Заметим, что в некоторых случаях дополнительные условия симметрии, не связанные с пространственной симметрией, приводят к совпадению энергий нескольких неприводимых представлений. Такое дополнительное вырождение, как будет показано ниже, может быть вызвано инвариантностью уравнений движения к обращению времени. В особых случаях группа симметрии гамильтониана $\mathcal{H} = T + V$ может оказаться выше симметрии потенциала V , что также вызывает дополнительное вырождение. Это имеет место для кулоновского потенциала $V = -c/x$, а также для гармонического осциллятора, для которого $V = -cx^2$.

Колебательные спектры молекул и кристаллов

Теория представлений дает возможность таким же образом произвести классификацию и колебательных спектров молекул и кристаллов. Как известно, в классической теории частоты колебаний ω и векторы смещений $\mathbf{u}(l)$ системы, состоящей из N_a атомов l , определяются системой уравнений [9.1, 9.2]

$$M_l \ddot{u}_i(l) = -M_l \omega^2 u_i(l) = - \sum_{l'=1}^{N_a} \sum_{i'=1}^3 \Phi_{il'}(l, l') u_{i'}(l'), \quad (15.6)$$

где M_l — масса данного атома, а $\Phi_{ii'}(l, l') = \Phi_{i'i}(l', l)$ — силовые постоянные, т. е. вторые производные от потенциальной энергии по данным смещениям $u_i(l)$, $u_{i'}(l')$. Уравнение (15.6) можно переписать в виде

$$\sum_{l'} (D_{il'}(l, l') - \omega^2 \delta_{ll'} \delta_{il'}) u_{i'}(l') \sqrt{M_l} = 0. \quad (15.6a)$$

Здесь \mathbf{D} — динамическая матрица с компонентами

$$D_{il'}(l, l') = D_{l'i}(l', l) = \frac{\Phi_{il'}(l, l')}{\sqrt{M_l M_{l'}}}. \quad (15.6b)$$

Перейдем от $3N_a$ переменных $\frac{1}{2} \sqrt{M_l/M} u_i(l)$ к переменным

$$a_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{ii} B_{ii}^{\alpha*} u_i(l) \sqrt{\frac{M_l}{M}}, \quad \text{где } M = \sum_l M_l, \quad (15.7)$$

выбрав матрицу \mathbf{B} так, чтобы она диагонализировала динамическую матрицу \mathbf{D} , т. е. $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{B} = \mathbf{\Omega}$, где $\mathbf{\Omega}$ — диагональная матрица с компонентами $\Omega_\alpha = \omega_\alpha^2$:

$$\sum_{ll'} B_{li}^{*\alpha} D_{il'}(l, l') B_{l'l'}^{\alpha'} = \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (15.8)$$

где собственные частоты ω_α^2 есть корни секулярного уравнения

$$|D_{il'}(l, l') - \omega^2 \delta_{il'} \delta_{il'}| = 0. \quad (15.8a)$$

При этом некоторые из собственных значений, в принципе, могут быть вырожденными, т. е. одной частоте ω_α могут соответствовать несколько функций a_α . Матрица \mathbf{B} является унитарной, т. е. $\mathbf{B}\mathbf{B}^* = \mathbf{I}$ и $\mathbf{B}^*\mathbf{B} = \mathbf{I}$, или в компонентах

$$\sum_{li} B_{li}^\alpha B_{li}^{\beta*} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (15.9a)$$

$$\sum_\alpha B_{li}^{\alpha*} B_{l'l'}^\alpha = \delta_{ll'} \delta_{il'}, \quad (15.9б)$$

т. е. собственные векторы B_{li}^α ортонормированы. Также можно показать, что $\tilde{\mathbf{B}}^\alpha \mathbf{B}^\beta = 0$ при $\omega_\alpha \neq \omega_\beta$, или в компонентах *)

$$\sum_{li} B_{li}^\alpha B_{li}^\beta = 0 \quad \text{при} \quad \omega_\alpha \neq \omega_\beta. \quad (15.9в)$$

Как следует из (15.8), в новых переменных система уравнений (15.6) распадается на $3N_\alpha$ независимых уравнений

$$(\omega_\alpha^2 - \omega^2) a_\alpha = 0. \quad (15.10)$$

Проведя преобразование, обратное (15.7), и учитывая (15.9), выразим u_l через a_α :

$$u_l(l) = 2 \sqrt{\frac{M}{M_l}} \sum_\alpha B_{li}^\alpha a_\alpha. \quad (15.11)$$

Векторы $u^\alpha(l)$, определяемые соотношениями

$$u_l^\alpha(l) = 2 \sqrt{\frac{M}{M_l}} B_{li}^\alpha a_\alpha, \quad (15.11a)$$

являются собственными функциями уравнений (15.7) при $\omega = \omega_\alpha$ и называются нормальными колебаниями. Они показывают, как смещается данный атом l при данном колебании a_α . Для того чтобы найти в явном виде компоненты B_{li}^α , надо найти собственные частоты и решить систему уравнений $\mathbf{D}\mathbf{B} =$

*) Собственные векторы \mathbf{B}^β , соответствующие частоте ω_β , удовлетворяют уравнению (15.11б): $\mathbf{D}\mathbf{B}^\beta = \Omega_\beta \mathbf{B}^\beta$. Умножим это уравнение справа на $\tilde{\mathbf{B}}^\alpha$, а транспонированное уравнение $\tilde{\mathbf{B}}^\alpha \mathbf{D} = \Omega_\alpha \tilde{\mathbf{B}}^\alpha$ слева на \mathbf{B}^β и сложим их. Учитывая, что $\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{D}$ (15.6б), получим (15.9б): $(\Omega_\alpha - \Omega_\beta) \tilde{\mathbf{B}}^\alpha \mathbf{B}^\beta = 0$.

$= \mathbf{B}\Omega$, которая в компонентах имеет вид

$$\sum_{i' i''} D_{i' i''} (l l') B_{i' i''}^{\alpha} = \omega_{\alpha}^2 B_{i i'}. \quad (15.116)$$

В кристалле каждый атом l можно характеризовать двумя индексами: номером ячейки f и номером атома в ячейке k . При этом силовые постоянные $\Phi_{i' i''} (f k, f' k')$ обладают трансляционной симметрией, т. е. зависят только от разности $f - f'$. Поэтому собственные векторы \mathbf{B}_i^{α} можно выбрать в виде

$$\mathbf{B}_{f k}^{\nu q} = \sqrt{\frac{M_k}{M_0 N}} e_{\nu}^k(\mathbf{q}) e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_f}, \quad (15.12)$$

где ν — номер ветви спектра, а \mathbf{q} — волновой вектор. Здесь N — число ячеек, $M_0 = \sum_k M_k$ — масса ячейки, а $M = M_0 N = \rho \mathcal{V}$, где ρ — плотность, а \mathcal{V} — объем кристалла. Матрица \mathbf{B} , определяемая уравнением (15.12), осуществляет переход от $3N n_a$ функций $u_{f k, i}$ к введенным ниже (уравнение (15.16)) $3N n_a$ функциям $a_{q \nu}$. Здесь n_a — число атомов в элементарной ячейке. При этом \mathbf{q} принимает N различных значений, ν меняется от 1 до $3n_a$, а матрица \mathbf{e} с компонентами $e_{\nu}^k(\mathbf{q})$ при данном \mathbf{q} осуществляет переход от $3n_a$ функций $u_{k i}(\mathbf{q})$ к $3n_a$ функциям $a_{q \nu}$. Матрица \mathbf{e} диагонализует матрицу \mathbf{D}' с компонентами

$$D'_{i' i'' k k'}(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{M_k M_{k'}}}{M} D_{i i' k k'}(\mathbf{q}), \quad (15.13)$$

где

$$D_{i i' k k'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{f f'} D_{i i' f f' k k'} e^{-i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_{f'})}. \quad (15.13a)$$

Действительно, подставив (15.12) в (15.8) и просуммировав по f и f' , получим систему уравнений:

$$\sum_{i' i''} \frac{\sqrt{M_k M_{k'}}}{M_0} e_{\nu}^{k i} D_{i i' k k'}(\mathbf{q}) e_{\nu}^{k' i'}(\mathbf{q}) = \omega_{q \nu}^2 \delta_{\nu \nu'}. \quad (15.136)$$

Согласно (15.9) векторы поляризации, относящиеся к разным ветвям или к разным атомам в ячейке, ортогональны:

$$\sum_{k l} M_k e_{\nu}^{k l}(\mathbf{q}) e_{\nu' l}^{k'}(\mathbf{q}) = M_0 \delta_{\nu \nu'}, \quad (15.14a)$$

$$\sum_{\nu} \sqrt{M_k M_{k'}} e_{\nu}^{k l}(\mathbf{q}) e_{\nu' l}^{k'}(\mathbf{q}) = M_0 \delta_{k k'} \delta_{i i'}, \quad (15.146)$$

$$\sum_{k l} M_k e_{\nu}^{k l}(\mathbf{q}) e_{\nu' l}^{k'}(\mathbf{q}) = 0 \quad \text{при} \quad \omega_{q \nu} \neq \omega_{q \nu'}. \quad (15.14b)$$

Для непосредственного определения компонент $e_{\kappa i}^{\nu}$ в соответствии с (15.11б) надо решить систему уравнений

$$\sum_{\kappa' i'} (D_{i i' \kappa \kappa'}(\mathbf{q}) - \omega_{q\nu}^2 \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{i i'}) e_{\kappa' i'}^{\nu} \sqrt{M_{\kappa'}} = 0, \quad (15.15)$$

где матрица $D_{i i' \kappa \kappa'}(\mathbf{q})$ определяется уравнением (15.13а), а $\omega_{q\nu}$ — корни секулярного уравнения

$$|D_{i i' \kappa \kappa'}(\mathbf{q}) - \omega_{q\nu}^2 \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{i i'}| = 0, \quad (15.15а)$$

которое определяет колебательный спектр кристалла, т. е. зависимость $\omega_{\nu}(\mathbf{q})$ для каждой из ветвей спектра ν , точно так же как решение уравнения Шредингера (15.1) для кристалла определяет спектр электронов в идеальной решетке $E(\mathbf{k})$ для каждой из зон.

Общее число ветвей равно утроенному числу атомов в элементарной ячейке $3n_a$. Три ветви, у которых при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ $\omega_{\nu}(\mathbf{q}) \rightarrow 0$, называются акустическими, а остальные $3(n_a - 1)$ — оптическими.

Согласно (15.11а) и (15.12) смещение атома f, κ при данном колебании $a_{q\nu}$ равно

$$u_{f\kappa, i}^{q\nu} = 2a_{q\nu} e_{\kappa i}^{\nu}(\mathbf{q}) e^{i q x_f^{\kappa}}. \quad (15.16)$$

Произвольное смещение $u_{f\kappa, i}$ может быть разложено по нормальным колебаниям $u_{f\kappa, i}^{q\nu}$. Согласно (15.7) и (15.11)

$$\begin{aligned} u_{f\kappa} &= \sum_{q\nu} u_{f\kappa}^{q\nu} = 2 \sum_{q\nu} a_{q\nu} e_{\kappa}^{\nu}(\mathbf{q}) e^{i q x_f^{\kappa}} = \\ &= \sum_{q\nu} a_{q\nu} e_{\kappa}^{\nu}(\mathbf{q}) e^{i q x_f^{\kappa}} + a_{q\nu}^* e_{\kappa}^{*\nu}(\mathbf{q}) e^{-i q x_f^{\kappa}}. \end{aligned} \quad (15.12а)$$

Если умножить последнее уравнение на $e^{-i q' x_f^{\kappa}}$ и просуммировать правую и левую части по f , то в результате получим

$$u_{\kappa}(\mathbf{q}) = 2 \sum_{\nu} e_{\kappa}^{\nu}(\mathbf{q}) a_{q\nu}, \quad (15.16а)$$

где

$$u_{\kappa}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_f u_{f\kappa} e^{-i q x_f^{\kappa}}. \quad (15.16б)$$

При квантовомеханическом описании движения атомов в молекуле или кристалле классическое уравнение движения (15.6) заменяется уравнением Шредингера с оператором

$$\mathcal{H} = \sum_{k l i j} \frac{p_i^2(k)}{2M_k} \delta_{ki} \delta_{lj} + \frac{1}{2} \Phi_{ij}(k, l) u_i(k) u_j(l), \quad (15.17)$$

где

$$p_i(k) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial u_i(k)}.$$

При этом

$$\{p_i(k) u_j(l)\} = -i\hbar \delta_{lk} \delta_{ij}. \quad (15.17a)$$

Для того чтобы диагонализировать гамильтониан (15.16), вводят операторы b_α и b_α^+ :

$$b_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \sum_{ki} B_{ki}^{\alpha*} \left(\sqrt{M_k \omega_\alpha} u_i(k) + \frac{i}{\sqrt{M_k \omega_\alpha}} p_i(k) \right), \quad (15.18a)$$

$$b_\alpha^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \sum_{ki} B_{ki}^\alpha \left(\sqrt{M_k \omega_\alpha} u_i(k) - \frac{i}{\sqrt{M_k \omega_\alpha}} p_i(k) \right). \quad (15.18b)$$

В соответствии с (15.17a)

$$\{b_\alpha b_\alpha^+\} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (15.19)$$

Чтобы выразить $u(k)$ через эти операторы, надо умножить (15.18a) на $B_{ij}^\alpha (\hbar/2M_l \omega_\alpha)^{1/2}$ и (15.18b) на $B_{ij}^{\alpha*} (\hbar/2M_l \omega_\alpha)^{1/2}$, сложить и просуммировать по α , учитывая (15.11a). Тогда получим *)

$$u_i = \sum_\alpha \left(\frac{\hbar}{2M_l \omega_\alpha} \right)^{1/2} (b_\alpha B_{li}^\alpha + b_\alpha^+ B_{li}^{\alpha*}). \quad (15.20a)$$

Аналогично, умножая (15.18a) на $B_{ij}^\alpha (\hbar M_l \omega_\alpha / 2)^{1/2}$, а (15.18b) на $B_{ij}^{\alpha*} (\hbar M_l \omega_\alpha / 2)^{1/2}$ и вычитая одно уравнение из другого, получим после суммирования по α :

$$p_i = -i \sum_\alpha \left(\frac{\hbar M_l \omega_\alpha}{2} \right)^{1/2} (b_\alpha B_{li}^\alpha - b_\alpha^+ B_{li}^{\alpha*}). \quad (15.20b)$$

Если теперь подставить (15.20a) и (15.20b) в (15.17) и выполнить суммирование по k и l , учитывая (15.15), (15.8) и (15.19), то видно, что гамильтониан \mathcal{H} распадается на сумму независимых гамильтонианов \mathcal{H}_α :

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \mathcal{H}_\alpha = \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha \left(b_\alpha^+ b_\alpha + \frac{1}{2} \right). \quad (15.21)$$

Каждый из этих гамильтонианов есть гамильтониан гармонического осциллятора. При этом b^+ есть «оператор рождения», а b — «оператор уничтожения» фона, т. е.

$$b \phi_n^\alpha = \sqrt{n_\alpha} \phi_{n-1}^\alpha, \quad b^+ \phi_n^\alpha = \sqrt{n_\alpha + 1} \phi_{n+1}^\alpha. \quad (15.22)$$

) При этом учтено, что $\sum_\alpha \omega_\alpha^{-1} (B_{ki}^{\alpha} B_{li}^\alpha - B_{ki}^\alpha B_{li}^{\alpha*}) = 0$. Действительно,

$S^* = -S$, тогда как из вещественности смещения u_i и производной $\frac{\partial}{\partial u_i} = \frac{i}{\hbar} p_i$ следует, что $S^* = S$. Отсюда $S = 0$.

Здесь ϕ_n^α — собственная функция гармонического осциллятора, соответствующая квантовому состоянию n .

Отсюда $b^+ b \phi_n = n \phi_n$ и, следовательно, собственные значения (15.21)

$$E_n^\alpha = \hbar \omega_\alpha \left(n_\alpha + \frac{1}{2} \right). \quad (15.23)$$

В состоянии теплового равновесия при данной температуре T среднее число фононов для данного нормального колебания с частотой ω_α равно

$$\bar{n}_\alpha = \frac{\sum_n n \exp(-E_n^\alpha/kT)}{\sum_n \exp(-E_n^\alpha/kT)} = \frac{1}{\exp(\hbar \omega_\alpha/kT) - 1}. \quad (15.24)$$

При $kT \gg \hbar \omega_\alpha$ имеем $n_\alpha = kT/\hbar \omega_\alpha$.

В кристалле, где $\mathbf{B}_{f\kappa}^\alpha$ можно представить в виде (15.12), смещение $\mathbf{u}_{f\kappa}$ можно записать как разложение по плоским волнам:

$$\mathbf{u}_{f\kappa} = \sum_{q\nu} a_{q\nu} e_{\kappa}^{\nu}(q) e^{-iqx_{f}^{\kappa}} + a_{q\nu}^+ e_{\kappa}^{\nu*}(q) e^{iqx_{f}^{\kappa}}. \quad (15.25)$$

Подставив (15.12) в (15.20а) и сравнивая получившиеся выражения с (15.25), установим связь операторов a и b :

$$a_{q\nu} = \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{q\nu}\mathcal{V}^0} \right)^{1/2} b_{q\nu}, \quad a_{q\nu}^+ = \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{q\nu}\mathcal{V}^0} \right)^{1/2} b_{q\nu}^+. \quad (15.26)$$

Отсюда согласно (15.22) матричные элементы оператора a равны:

$$\langle n' | a_{q\nu} | n \rangle = \left(\frac{\hbar n_{q\nu}}{2\rho\omega_{q\nu}\mathcal{V}^0} \right)^{1/2} \delta_{n', n-1}, \quad (15.26a)$$

$$\langle n' | a_{q\nu}^+ | n \rangle = \left(\frac{\hbar (n_{q\nu} + 1)}{2\rho\omega_{q\nu}\mathcal{V}^0} \right)^{1/2} \delta_{n', n+1}. \quad (15.26b)$$

Теория групп дает возможность определить, по каким неприводимым представлениям преобразуются собственные колебания a_l или $a_{q\nu}$ в кристалле, а также позволяет, зная матрицы этих представлений и используя проективные операторы, найти матрицы \mathbf{B} или \mathbf{e} соответственно, осуществляющие переход от приводимого базиса $u_i(l)$ или $u_{\kappa i}(q)$ к неприводимому базису a_l или $a_{q\nu}$.

Так как силовые постоянные $\Phi_{iiv}(l, l')$, являющиеся коэффициентами разложения потенциальной энергии молекулы или кристалла по малым смещениям $u_i(l)$ от положения равновесия, определяются несмещенными координатами атомов, то они не меняются при всех преобразованиях симметрии соответствующей пространственной группы для кристалла или точечной группы для молекулы, а компоненты матрицы \mathbf{D} , определяемые уравнением (15.13), как легко проверить, инвариантны ко всем

преобразованиях группы волнового вектора G_q . Точно так же, как это имело место для собственных функций уравнения Шредингера, все линейные комбинации $u_i(l)$ или $u_{\kappa l}(q)$, образующие базис одного и того же неприводимого представления, т. е. преобразующиеся при операции группы симметрии друг через друга, соответствуют одной и той же частоте колебаний ω_α . Следовательно, именно эти линейные комбинации и являются нормальными колебаниями.

Для того чтобы определить, по каким представлениям преобразуются функции a_l или a_{qv} , надо найти матрицы колебательного представления $\mathcal{D}_u(g)$, по которым преобразуются компоненты $u_i(l)$ или $u_{\kappa l}(q)$, и затем разложить это представление $\mathcal{D}_u(g)$ по неприводимым представлениям соответствующей группы.

Найдем матрицы $\mathcal{D}_u(g)$ и характеры $\chi_u(g)$ колебательных представлений.

Рассмотрим сначала молекулу, состоящую из N атомов. При преобразовании молекулы g^{-1} из группы симметрии молекулы $3N$ компонент смещений $u_i(l)$ преобразуются друг через друга согласно формуле

$$g^{-1}u_i(l) = \sum_{i'=1}^3 \sum_{l'=1}^N \mathcal{D}_{i'l', ii}(g) u_{i'}(l'), \quad (15.27)$$

где

$$\mathcal{D}_{i'l', ii}(g) = \mathcal{R}_{i'l'}(g) \delta_{l', g^{-1}l}.$$

Здесь $\mathcal{R}(g)$ — матрица преобразования компонент вектора (2.29), а $g^{-1}l$ — номер атома, в который переходит атом l при преобразовании g^{-1} . При этом мы учли, что преобразованию g^{-1} над молекулой соответствует преобразование g над системой координат, т. е. в соответствии с принятым определением матрица преобразования $\mathcal{D}(g)$ соответствует операции $g^{-1}u_i(l)$. Матрицы $\mathcal{D}_{i'l', ii}(g)$ образуют представление \mathcal{D}_u размерностью $3N$. В соответствии с (15.27) характер этого представления

$$\chi_u(g) = \sum_{i'l'} \mathcal{D}_{i'l', ii}(g) \delta_{i'l'} \delta_{l'l} = n_g \chi_l(g), \quad (15.27a)$$

где n_g — число атомов, которые остаются неподвижными при данном преобразовании g . При разложении \mathcal{D}_u по неприводимым представлениям, соответствующим нормальным колебаниям молекулы, надо исключить три нормальные координаты

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\sum_l M_l} \sum_l M_l u_i(l),$$

описывающие смещение центра тяжести и преобразующиеся как компоненты полярного вектора, и три нормальные координаты

$$\Omega_i = \frac{1}{\sum_l M_l} \sum_l M_l [x_i u(l)]_i$$

(\mathbf{x}_l — радиус-вектор, проведенный от центра тяжести до данного атома), которые описывают вращение молекулы как целого и преобразуются как компоненты аксиального вектора, так как эти оба типа движения не являются колебаниями*). Так как характер представления, по которому преобразуются компоненты вектора $\chi_l(g)$, в соответствии с (10.20) равен

$$\chi_l(c_\varphi) = 1 + 2 \cos \varphi, \quad \chi_l(s_\varphi) = -\chi_l(c_{\varphi+\pi}) = -1 + 2 \cos \varphi,$$

то характер представления \mathcal{D}_{u_i} , по которому преобразуются нормальные колебания молекулы, после исключения указанных шести компонент равен

$$\chi_{u_i}(c_\varphi) = (1 + 2 \cos \varphi)(n_g - 2), \quad \chi_{u_i}(s_\varphi) = (-1 + 2 \cos \varphi)n_g. \quad (15.276)$$

Ясно, что при преобразовании s_φ на месте может оставаться лишь один атом, находящийся на пересечении оси вращения и плоскости отражения или в центре инверсии, т. е. n_g равно 0 или 1 (кроме операции $\sigma_h = s_{2\pi}$).

Определим теперь закон преобразования компонент $u_\kappa(q)$, которые согласно (15.16б) связаны со смещением атомов $u_{f\kappa}$ соотношением

$$u_\kappa(q) = \frac{1}{N} \sum_f e^{-iqx_f^\kappa} u_{f\kappa}.$$

При операции $g^{-1} = (r|\tau)^{-1}$, когда компоненты $u_{f\kappa i}$ преобразуются в соответствии с (15.27), $u_{\kappa i}(q)$ переходит в

$$\begin{aligned} g^{-1}u_{\kappa i}(q) &= \frac{1}{N} \sum_{f'f} e^{-iqx_{f'}^\kappa} \sum_{i'\kappa'} \mathcal{R}_{i'i}(g) u_{f'\kappa'i'} \delta_{g\kappa', \kappa} \delta_{gf', f} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{f'f\kappa'i'} e^{-iqx_{f'}^\kappa} u_{f'\kappa'i'} \mathcal{R}_{i'i}(g) e^{iq(x_{f'}^{\kappa'} - x_f^\kappa)} \delta_{g\kappa', \kappa} \delta_{gf', f}. \end{aligned}$$

Здесь $u_{f'\kappa'}$ — смещение атома $f'\kappa'$, в который переходит атом $f\kappa$ при преобразовании $g^{-1} = (r|\tau)^{-1}$. Разность координат атомов $f'\kappa'$ и $f\kappa$ равна

$$\mathbf{x}_{f'}^{\kappa'} - \mathbf{x}_f^\kappa = r^{-1}\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_f + r^{-1}(\mathbf{x}_\kappa - \boldsymbol{\tau}) - \mathbf{x}_\kappa.$$

Здесь $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}_f^1$, а $\mathbf{x}_\kappa = \mathbf{x}_f^\kappa - \mathbf{x}_f^1$. При этом

$$q(r^{-1}\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_f) = \mathbf{x}_f(rq - q) = 2\pi m,$$

так как \mathbf{x}_f — один из векторов прямой решетки, а $rq - q$ согласно (12.12) при $g \in G_q$ равен нулю или вектору обратной решетки. Поэтому множитель $\exp\{iq(\mathbf{x}_{f'}^{\kappa'} - \mathbf{x}_f^\kappa)\}$ равен

*) Кроме линейных молекул, для которых надо исключить только две вращательные степени свободы.

$\exp\{iq(r^{-1}(x_k - \tau) - x_k)\}$ и не зависит от f . Следовательно,

$$g^{-1}u_{\kappa i}(g) = \sum_{\kappa' i'} \mathcal{D}_{\kappa' i', \kappa i}^u(g) u_{\kappa' i'}(g),$$

где

$$\mathcal{D}_{\kappa' i', \kappa i}^u(g) = \mathcal{R}_{i' i}(g) \exp\{iq(r^{-1}(x_k - \tau) - x_k) \delta_{g\kappa', \kappa}\}. \quad (15.28)$$

Отсюда видно, что характер представления \mathcal{D}_u равен

$$\chi_u(g) = \chi_1(g) \sum_{\kappa} \exp\{iq(r^{-1}(x_k - \tau) - x_k) \delta_{\kappa, g\kappa}\}, \quad (15.28a)$$

откуда

$$\chi_u(c_\varphi | \tau) = (1 + 2 \cos \varphi) \sum_{\kappa} \exp\{iq(c_\varphi^{-1}(x_k - \tau) - x_k)\} \delta_{\kappa, c_\varphi \kappa}, \quad (15.28б)$$

$$\chi_u(s_\varphi | \tau) = (-1 + 2 \cos \varphi) \sum_{\kappa} \exp\{iq(s_\varphi^{-1}(x_k - \tau) - x_k)\} \delta_{\kappa, s_\varphi \kappa}. \quad (15.28в)$$

При этом $\delta_{\kappa, g\kappa} = 1$, если при операции g атом κ смещается в эквивалентное положение, т. е. если $r^{-1}(x_k - \tau) - x_k$ равно нулю или одному из векторов прямой решетки, и $\delta_{\kappa, g\kappa} = 0$, если атом переходит в неэквивалентное положение. Для тех точек, для которых $rq = q$, в частности для всех точек внутри зоны Бриллюэна,

$$q[r^{-1}(x_k - \tau) - x_k] = (rq - q)x_k - rq\tau = -q\tau$$

и, следовательно,

$$\mathcal{D}_u(g) = \mathcal{R}(g) e^{-iq\tau n_g}, \quad (15.29)$$

где $n_g = \sum_{\kappa} \delta_{\kappa, g\kappa}$ — число атомов, остающихся на месте при преобразовании g . При этом характер соответствующего проективного представления $\chi_u(r) = \chi_1(r) n_g$, т. е. определяется формулой, подобной (15.27а). (В (15.29) роль группы симметрии молекулы играет группа волнового вектора). Для решеток, не содержащих в элементарной ячейке одинаковых атомов, при $rq = q$

$$\mathcal{D}_u(r) = \mathcal{R}(r) n_a, \quad (15.29a)$$

где n_a — число атомов в элементарной ячейке, т. е. проективное представление \mathcal{D}_u p -эквивалентно векторному и содержит только представления, входящие в \mathcal{R} по n_a раз каждое.

Используя приведенные выше формулы, мы в § 23 определим представления, соответствующие нормальным колебаниям в различных точках зоны Бриллюэна, для некоторых кубических и гексагональных кристаллов.

Расщепление термов при возмущении

Теория представлений дает возможность не только произвести классификацию термов, установить их степень вырождения и определить базисные функции, но позволяет также определить характер расщепления этих термов при наличии возмуще-

ния. Если гамильтониан \mathcal{H} может быть разбит на две части $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, причем симметрия \mathcal{H}_0 определяется группой \mathcal{G}_0 , а симметрия \mathcal{H}_1 — группой \mathcal{G}_1 , являющейся подгруппой группы \mathcal{G}_0 , то, зная характеры неприводимых представлений этих групп, можно определить, каким образом происходит расщепление термов оператора \mathcal{H}_0 на термы оператора \mathcal{H} . Степень вырождения каждого из термов \mathcal{H}_0 определяется размерностью неприводимых представлений группы \mathcal{G}_0 . Если величина расщепления термов \mathcal{H}_0 за счет возмущения \mathcal{H}_1 мала по сравнению с расстоянием между термами невозмущенного гамильтониана \mathcal{H}_0 , т. е. каждый из термов \mathcal{H} происходит за счет расщепления лишь одного из термов \mathcal{H}_0 и пересечения этих термов не происходит, то для определения характера расщепления надо каждое из неприводимых представлений группы \mathcal{G}_0 , которое в группе \mathcal{G}_1 может стать приводимым, разложить по неприводимым представлениям группы \mathcal{G}_1 . Если это представление окажется неприводимым и в группе \mathcal{G}_1 , то расщепления соответствующего терма не произойдет, а он лишь сместится. Если же оно приводимо, то терм расщепится, причем число новых термов равно числу неприводимых представлений группы \mathcal{G}_1 , содержащихся в данном представлении \mathcal{D} группы \mathcal{G}_0 .

Для практического выполнения таких расчетов надо выписать характеры представления $\mathcal{D}(g)$ для тех элементов g , которые входят в группу \mathcal{G}_1 , и далее, используя формулы § 8, разложить это представление по неприводимым представлениям группы \mathcal{G}_1 .

Если оператор \mathcal{H} разбивается на несколько частей: $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots$, причем каждую из них можно рассматривать как возмущение по сравнению с предыдущей, то, используя указанный выше метод, можно установить последовательный характер расщепления термов. Так, при помещении атома, имеющего сферическую симметрию, в кристаллическую решетку его термы расщепляются кристаллическим полем, симметрия которого определяется симметрией кристалла и местом расположения примесного атома.

Возмущение решетки за счет внешней деформации или появления в соседних узлах других чужеродных атомов может привести к дальнейшему расщеплению термов, которые в свою очередь еще далее расщепятся при помещении кристалла в магнитное поле.

Собственные функции невозмущенного атома с данным орбитальным моментом l имеют кратность вырождения $2l + 1$ и преобразуются по соответствующим представлениям полной сферической группы, характеры которых определяются уравнением (10.20). Поскольку наибольшая кратность вырождения уровней в кристаллическом поле при наивысшей кубической симметрии не превышает 3 (а с учетом спина, как будет показано ниже, максимальное вырождение равно 4), то все уровни

с $l \geq 2$ всегда расщепляются в кристаллическом поле, а уровни с $l = 3/2$ и $l = 1$, как легко проверить, не расщепляются в кубическом поле и расщепляются при более низкой симметрии. Так, например, пятикратно вырожденный атомный терм \mathcal{D}_2 , соответствующий $l = 2$ в кубическом поле, имеющем симметрию T_d (или O), расщепится на два терма, соответствующие представлениям E и F_1 . При растяжении кристалла по главной оси z его симметрия понизится до D_{2d} (или D_4 соответственно), при этом представление E расщепится на два одномерных представления A_1 и B_1 , а представление F_1 — на одномерное представление B_2 и двумерное E .

Подчеркнем, что теория представлений дает возможность определить, произойдет ли расщепление термов или нет, но не отвечает на вопрос о том, в каком приближении по возмущению имеет место это расщепление. На этот вопрос позволяет ответить теория возмущений.

Теория возмущений для вырожденного спектра

Как известно, в теории возмущений гамильтониан \mathcal{H} разбивается на две части: гамильтониан \mathcal{H}_0 , собственные значения которого E_n^0 и собственные функции φ_n считаются известными, и \mathcal{H}' , который рассматривается как возмущение. Волновая функция ψ ищется в виде ряда:

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n. \quad (15.30)$$

Подставив (15.30) в (15.1), умножив это равенство на φ_n^* и проинтегрировав по всем переменным \mathbf{x} , получим систему уравнений, определяющую коэффициенты c_n для данного собственного значения E , которую в матричной форме можно записать так:

$$\|\mathcal{H}_0 - IE + \mathcal{H}'\| \|c\| = 0. \quad (15.31)$$

Здесь $\|c\|$ — матрица из одного столбца с элементами $c_{nn'} = c_n \delta_{n'1}$, \mathcal{H}_0 — диагональная матрица,

$$\mathcal{H}_{0nn'} = E_n^0 \delta_{nn'}, \quad (15.31a)$$

а \mathcal{H}' — матрица возмущения:

$$\mathcal{H}'_{n'n} = \langle \varphi_{n'} | \mathcal{H}' | \varphi_n \rangle = \int \varphi_{n'}^* \mathcal{H}' \varphi_n d\mathbf{x}. \quad (15.31b)$$

Собственные значения E являются корнями определителя

$$|\mathcal{H}_0 - IE + \mathcal{H}'| = 0. \quad (15.32)$$

Определение собственных функций (15.30) и собственных значений E означает переход к такому представлению, в котором матрица $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$ диагональна. Для решения этой задачи обыч-

но используют метод последовательных приближений, определяя из (15.32) поправки к энергии E_m^0 и из (15.31) — поправки к волновой функции φ_m данного состояния m , т. е. коэффициент $c_n(E_m)$.

Если это состояние m не вырождено, т. е. энергии E_m^0 соответствует лишь одно состояние, то выражение для соответствующих поправок можно сразу получить в виде ряда.

Если же энергии E_m^0 соответствуют несколько состояний $\varphi_m, \varphi_{m'}, \dots$, то обычно сперва определяют правильные функции и собственные значения в нулевом приближении, т. е. полагают в (15.31) и (15.32) все матричные элементы $\mathcal{H}_{nn'}$ равными нулю, кроме элементов $\mathcal{H}'_{mm'}$ между функциями $\varphi_m, \varphi_{m'}, \dots$, соответствующими данной энергии, и затем находят поправки за счет более удаленных термов.

Однако этот метод не всегда удобен, так как даже в нулевом приближении не всегда можно точно найти корни определителя (15.32). Можно поставить задачу иначе и сразу получить систему уравнений (15.31) для данных N состояний $m, m', \dots, m^{(N)}$, которая учитывала бы вклад всех других состояний s, s', s'', \dots в требуемом порядке теории возмущений. Как будет показано ниже, именно такая задача возникает, например, при построении гамильтониана в приближении эффективной массы для вырожденных зон или для нескольких близко лежащих зон.

Для ее решения введем унитарную матрицу \mathbf{S} , частично диагонализующую гамильтониан (15.31), с тем чтобы преобразованная матрица

$$\bar{\mathcal{H}} = e^{-S} \mathcal{H} e^S \quad (15.33)$$

не содержала «недиагональных» компонент $\bar{\mathcal{H}}_{ml}$ между данными N состояниями и всеми другими состояниями l, l', \dots . Преобразование (15.33) соответствует переходу от представления \mathbf{c} к представлению $\bar{\mathbf{c}}$:

$$\bar{\mathbf{c}} = e^{-S} \mathbf{c}. \quad (15.33a)$$

Так как матрица $\bar{\mathcal{H}}$ не содержит «недиагональных» матричных элементов, то уравнения $\|\bar{\mathcal{H}} - EI\| \|\mathbf{c}\| = 0$ распадаются на две независимые системы: для N состояний $m, m', \dots, m^{(N)}$ и для всех остальных состояний l, l', \dots , причем базисом первой системы являются функции

$$\bar{\varphi}_m = \sum_l (e^{-S})_{lm} \varphi_l. \quad (15.34)$$

Если бы удалось точно определить матрицу \mathbf{S} , то тем самым поставленная задача была бы решена точно. Фактически, за исключением простейших случаев, эту задачу приходится решать,

раскладывая $e^{\mathbf{S}}$ в ряд

$$e^{\mathbf{S}} = 1 + \mathbf{S} + \frac{1}{2} \mathbf{S}^2 + \frac{1}{3!} \mathbf{S}^3 + \dots$$

и определяя матрицу \mathbf{S} методом последовательных приближений. Из унитарности преобразования (15.33) следует, что эта матрица должна быть антиэрмитова, т. е.

$$\mathbf{S}^+ = \tilde{\mathbf{S}}^* = -\mathbf{S}.$$

Разлагая в (15.33) $e^{\pm \mathbf{S}}$ в ряд, получим

$$\bar{\mathcal{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \{\mathcal{H} \mathbf{S}\}^{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(n)} + \sum_{n=0}^{\infty} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(n)}. \quad (15.35)$$

Здесь

$$\{\mathcal{H} \mathbf{S}\}^{(0)} = \mathcal{H}, \quad \{\mathcal{H} \mathbf{S}\}^{(1)} = \{\mathcal{H} \mathbf{S}\}, \quad \{\mathcal{H} \mathbf{S}\}^{(2)} = \{\{\mathcal{H} \mathbf{S}\} \mathbf{S}\}, \dots$$

При этом мы разбили матрицу \mathcal{H} на диагональную матрицу $\mathcal{H}^0 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, не содержащую недиагональных компонент \mathcal{H}_{ml} , и недиагональную \mathcal{H}_2 , не содержащую компонент $\mathcal{H}_{m'm}$ и $\mathcal{H}_{l'l}$, соответственно разделив \mathcal{H} на «диагональную» часть \mathcal{H}_1 и недиагональную \mathcal{H}_2 . Поскольку матрица \mathbf{S} , определяемая указанным требованием, также является недиагональной, то диагональная часть матрицы $\bar{\mathcal{H}}_d$ должна содержать коммутаторы $\{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(n)}$, содержащие четные степени \mathbf{S} , и коммутаторы $\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(n)}$ с нечетными степенями \mathbf{S} , а недиагональная, наоборот, — коммутаторы $\{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(n)}$ с нечетными степенями \mathbf{S} и $\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(n)}$ с четными степенями \mathbf{S} , т. е.

$$\bar{\mathcal{H}}_d = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t)!} \{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(2t)} + \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t+1)!} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(2t+1)}. \quad (15.36)$$

Матрица \mathbf{S} определяется из условия равенства нулю недиагональной части:

$$\bar{\mathcal{H}}_{nd} = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t+1)!} \{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(2t+1)} + \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t)!} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(2t)} = 0. \quad (15.37)$$

Методом последовательных приближений можно исключить слагаемые $\{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(2t+1)}$ с $t \neq 0$ из этого равенства. Для этого подставим значение $\{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}$, которое согласно (15.37) равно

$$\{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\} = - \sum_{t=1}^{\infty} \frac{1}{(2t+1)!} \{\mathcal{H}^0 \mathbf{S}\}^{(2t+1)} - \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t)!} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}\}^{(2t)},$$

во все слагаемые $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(2t+1)}$ с $t \geq 1$. В результате получим

$$\bar{\mathcal{H}}_{nd} = \{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\} + \sum_{t=2}^{\infty} b_t \{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(2t+1)} + \sum_{t=0}^{\infty} c_t \{\mathcal{H}_2\mathbf{S}\}^{(2t)}, \quad (15.38)$$

где

$$b_t = - \sum_{r=1}^{r=t-1} [(2r+1)! (2(t-r)+1)!]^{-1} =$$

$$= - \frac{1}{[2(r+1)]!} \sum_{r=1}^{r=t-1} C_{2(t+1)}^{2r+1} = - \frac{4}{[2(r+1)]!} [2^{2t-1} - t - 1], \quad (15.38a)$$

$$c_t = \frac{1}{(2t)!} - \sum_{r=1}^{r=t} [(2r+1)! (2(t-r))!]^{-1} =$$

$$= \frac{1}{(2t)!} - \frac{1}{(2t+1)!} \sum_{r=1}^t C_{2t+1}^{2r+1} = - \frac{2}{(2t+1)!} [2^{2t-1} - 2t - 1]. \quad (15.38б)$$

При этом мы использовали известное соотношение для биномиальных коэффициентов $C_t^r = t!/r!(t-r)!$:

$$\sum_{r=0}^{2r \leq t} C_t^{2r} = \sum_{r=0}^{2r+1 \leq t} C_t^{2r+1} = 2^{t-1}.$$

Формула (15.38) помимо $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}$ содержит члены $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(n)}$ с $n \geq 3$. Выразив $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}$ через остальные слагаемые и подставив это значение в $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(2t+1)}$ с $t \geq 2$, получим выражение, содержащее $\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(n)}$ с $n \geq 9$:

$$\bar{\mathcal{H}}_{nd} = \{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\} + \sum_{t=4}^{\infty} \delta_t \{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\}^{(2t+1)} + \sum_{t=0}^{\infty} \gamma_t \{\mathcal{H}_2\mathbf{S}\}^{(2t)} = 0. \quad (15.39)$$

Здесь

$$\delta_t = \sum_{r=2}^{r=t-2} b_r b_{t-r}, \quad \gamma_t = c_t - \sum_{r=2}^{r=t} b_r c_{t-r}. \quad (15.39a)$$

Следовательно, с точностью до восьмого порядка включительно

$$\{\mathcal{H}^0\mathbf{S}\} \approx - \sum_{t=0}^{t=3} \gamma_t \{\mathcal{H}_2\mathbf{S}\}^{(2t)} - \{\mathcal{H}_1\mathbf{S}\}. \quad (15.40)$$

Подставив (15.40) в (15.36), найдем, что с точностью до девятого порядка включительно

$$\bar{\mathcal{H}}_d \approx \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \sum_{t=0}^{t=3} \xi_t \{\mathcal{H}_2\mathbf{S}\}^{(2t+1)}, \quad (15.41)$$

где

$$\xi_t = \frac{1}{(2t+1)!} - \sum_{r=0}^{t-1} \frac{\gamma_r}{[2(t-r+1)]!}. \quad (15.41a)$$

Приведем значения коэффициентов γ_t и ξ_t , входящих в (15.40) и (15.41):

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 1, & \gamma_1 &= \frac{1}{3}, & \gamma_2 &= -\frac{1}{45}, & \gamma_3 &= \frac{32}{3 \cdot 7!}; \\ \xi_0 &= \frac{1}{2}, & \xi_1 &= -\frac{1}{4}, & \xi_2 &= \frac{1}{2 \cdot 5!}, & \xi_3 &= \frac{17}{8!}. \end{aligned} \quad (15.42)$$

Уравнение (15.39) можно решать методом последовательных приближений, положив

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \dots,$$

где \mathbf{S}_1 — матрица первого порядка по \mathcal{H}' , \mathbf{S}_2 — второго и т. д. Сохраняя в (15.40) последовательно слагаемые первого, второго и т. д. порядков, получим

$$\begin{aligned} \{\mathcal{H}_0 \mathbf{S}_1\} &= -\mathcal{H}_2, \\ \{\mathcal{H}_0 \mathbf{S}_2\} &= -\{\mathcal{H}_1 \mathbf{S}_1\}, \end{aligned} \quad (15.43)$$

$$\{\mathcal{H}_0 \mathbf{S}_3\} = -\{\mathcal{H}_1 \mathbf{S}_2\} - \frac{1}{3} \{\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_1\} \mathbf{S}_1\},$$

$$\{\mathcal{H}_0 \mathbf{S}_4\} = -\{\mathcal{H}_1 \mathbf{S}_3\} - \frac{1}{3} \{\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_2\} \mathbf{S}_1\} - \frac{1}{3} \{\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_1\} \mathbf{S}_2\}$$

и т. д.

Так как согласно (15.31a) $\{\mathcal{H}_0 \mathbf{S}\}_{ml} = (E_m^0 - E_l^0) S_{ml}$, то из этих формул следует, что

$$S_{1ml} = -\frac{\mathcal{H}'_{ml}}{E_m - E_l}, \quad (15.44)$$

$$S_{2ml} = \sum_{m'} \frac{\mathcal{H}'_{mm'} \mathcal{H}'_{m'l}}{(E_m^0 - E_l^0)(E_{m'}^0 - E_l^0)} - \sum_{l'} \frac{\mathcal{H}'_{ml'} \mathcal{H}'_{l'l}}{(E_m^0 - E_l^0)(E_m^0 - E_{l'}^0)}$$

и т. д.

При этом мы учли, что у оператора \mathcal{H}_1 отличны от нуля лишь «диагональные» матричные элементы $\mathcal{H}_{1mm'} = \mathcal{H}'_{mm'}$ и $\mathcal{H}_{1l'l} = \mathcal{H}'_{l'l}$, а у оператора \mathcal{H}_2 — лишь недиагональные $\mathcal{H}_{2ml} = \mathcal{H}'_{ml}$.

Вычислив \mathbf{S} , найдем оператор $\bar{\mathcal{H}}$, который согласно (15.41), (15.42) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \frac{1}{2} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_1\} + \frac{1}{2} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_2\} + \frac{1}{2} \{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_3\} - \\ &\quad - \frac{1}{24} \{\{\mathcal{H}_2 \mathbf{S}_1\} \mathbf{S}_1\} \mathbf{S}_1 - \dots \end{aligned} \quad (15.45)$$

Подставив значения S_{1ml} и S_{2ml} из (15.44), найдем с точностью до членов третьего порядка матричные элементы $\overline{\mathcal{H}}_{mm'}$:

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}_{mm'} = & \mathcal{H}_{mm'} - \frac{1}{2} \sum_s \left(\frac{1}{E_s^0 - E_m^0} + \frac{1}{E_s^0 - E_{m'}^0} \right) \mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm'} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{sm''} \left(\frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm''} \mathcal{H}'_{m''m}}{(E_s^0 - E_{m''}^0)(E_s^0 - E_{m'}^0)} + \frac{\mathcal{H}'_{mm''} \mathcal{H}'_{m''s} \mathcal{H}'_{sm'}}{(E_s^0 - E_{m''}^0)(E_s^0 - E_m^0)} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ss'} \mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{ss'} \mathcal{H}'_{s'm'} \left(\frac{1}{(E_s^0 - E_m^0)(E_{s'}^0 - E_m^0)} + \frac{1}{(E_s^0 - E_{m'}^0)(E_{s'}^0 - E_{m'}^0)} \right), \end{aligned} \quad (15.46)$$

где

$$\mathcal{H}_{mm'} = E_m^0 \delta_{mm'} + \mathcal{H}'_{mm'}.$$

При этом мы для общности не предполагаем, что всем этим состояниям соответствует одна и та же энергия. Если же вырождение имеет место, т. е. $E_m^0 = E_{m'}^0 = E_{m''}^0 = \dots$, то

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}_{mm'} = & \mathcal{H}_{mm'} - \sum_s \frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm'}}{E_s^0 - E_m^0} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m''s} \frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm''} \mathcal{H}'_{m''m'} + \mathcal{H}'_{mm''} \mathcal{H}'_{m''s} \mathcal{H}'_{sm'}}{(E_s^0 - E_{m''}^0)^2} + \sum_{ss'} \frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{ss'} \mathcal{H}'_{s'm'}}{(E_s^0 - E_m^0)(E_{s'}^0 - E_m^0)}. \end{aligned} \quad (15.47)$$

В частности, для невырожденного состояния отсюда получается обычная формула для поправки к энергии:

$$\begin{aligned} E_m^{(3)} = & E_m^0 + \mathcal{H}'_{mm} - \\ & - \sum_s \frac{|\mathcal{H}'_{ms}|^2}{E_s^0 - E_m^0} - \mathcal{H}'_{mm} \sum_s \frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm}}{(E_s^0 - E_m^0)^2} + \sum_{ss'} \frac{\mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{ss'} \mathcal{H}'_{s'm}}{(E_s^0 - E_m^0)(E_{s'}^0 - E_m^0)}. \end{aligned} \quad (15.48)$$

Если надо учитывать лишь два состояния с энергиями E_1^0 и E_2^0 , каждое из которых может быть вырождено, то формула (15.47) запишется в виде

$$\overline{\mathcal{H}}_{mm'} = \mathcal{H}_{mm'} - \frac{1}{\Delta} \sum_s \mathcal{H}'_{ms} \mathcal{H}'_{sm'} + \dots, \quad (15.49)$$

где $\Delta = E_2^0 - E_1^0$. Последнюю формулу можно переписать в матричной форме. Если записать матрицу \mathcal{H} в виде

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{21} & \mathcal{H}_{22} \end{vmatrix},$$

где \mathcal{H}_{11} и \mathcal{H}_{22} — соответственно «диагональные» матрицы с матричными элементами $\mathcal{H}_{mm'}$ и $\mathcal{H}_{ss'}$, а \mathcal{H}_{12} и $\mathcal{H}_{21} = \mathcal{H}_{12}^+$ —

недиагональные с матричными элементами \mathcal{H}_{ms} , то (15.49) перепишется в виде *)

$$\bar{\mathcal{H}}_{11} = \mathcal{H}_{11} - \frac{1}{\Delta} \mathcal{H}_{12} \mathcal{H}_{12}^+ + \dots \quad (15.49a)$$

С помощью (15.35) и (15.44) можно также сразу выразить матричные элементы любого оператора F в новом базисе (15.33) через эти элементы в базисе φ_n :

$$\bar{F} = e^S F e^{-S} = F + \{FS\} + \frac{1}{2} \{\{FS\} S\} + \frac{1}{6} \{\{\{FS\} S\} S\} + \dots, \quad (15.50)$$

откуда, например, во втором приближении

$$\bar{F}_{mm'} = F_{mm'} - \sum_s \frac{\mathcal{H}'_{ms} F_{sm'}}{E_s^0 - E_m^0} + \frac{\mathcal{H}'_{sm'} F_{ms}}{E_s^0 - E_m^0}. \quad (15.51)$$

Суммирование в (15.51), как и в (15.46)–(15.48), ведется по всем состояниям $s \neq m, m', \dots, m^{(N)}$. При этом, конечно, часть из этих состояний могут оказаться вырожденными.

Ниже будет показано, что теория симметрии дает возможность, зная лишь симметрию операторов \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}' и F , найти число отличных от нуля линейно независимых матричных элементов и установить связь между линейно зависимыми элементами. Поэтому достаточно знать лишь представление, по которому преобразуются функции φ_m невозмущенного гамильтониана, чтобы определить, в каком приближении происходит расщепление. Это дает возможность качественно оценить величину расщепления, а также позволяет выяснить, какие из компонент $\mathcal{H}'_{nn'}$ отличны от нуля и как связаны между собой компоненты с разными n и n' . Конечно, общий характер расщепления, определяемый правилами отбора для матричных элементов $\bar{\mathcal{H}}_{mm'}$, совпадает с тем, что дает общая теория представлений, если только в теории возмущений учтены все необходимые приближения. Поэтому сопоставление этих методов дает возможность сразу определить, когда требуется учет более высоких приближений теории возмущений.

*) Эту формулу легко получить сразу из уравнений $(\mathcal{H} - E)\psi = 0$, рассматривая их как систему двух матричных уравнений

$$(\mathcal{H}_{11} - E)\psi_1 + \mathcal{H}_{12}\psi_2 = 0, \quad \mathcal{H}_{21}\psi_1 + (\mathcal{H}_{22} - E)\psi_2 = 0.$$

Умножив второе уравнение на $(\mathcal{H}_{22} - E)^{-1}$, выразим ψ_2 через ψ_1 . Тогда, подставив это значение в первое уравнение, получим

$$(\bar{\mathcal{H}}_{11} - E)\psi_1 = (\mathcal{H}_{11} - \mathcal{H}_{12}(\mathcal{H}_{22} - E)^{-1}\mathcal{H}_{21} - E)\psi_1 = 0.$$

Общая формула (15.47) дает фактически способ определения матрицы $(\mathcal{H}_{22} - E)^{-1}$. В первом приближении

$$(\mathcal{H}_{22} - E)^{-1} = (E_2^0 - E_1^0)^{-1}.$$

§ 16. СПИНОРНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Рассматривая представления точечных и пространственных групп, мы до сих пор нигде не учитывали спин электрона.

Как известно, уравнение Шредингера — Паули, включающее первые исчезающие релятивистские члены, имеет вид

$$\mathcal{H}\psi = \left\{ \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} [\nabla V \mathbf{P}]) - \right. \\ \left. - \frac{i\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \mathbf{P}) - \frac{P^4}{8m^3c^2} \right\} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (16.1)$$

где $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$, а σ_i — матрицы Паули, приведенные выше (уравнения (4.13)).

Уравнение (16.1) представляет матричную форму записи системы двух уравнений для двух компонент спинора ψ_1 и ψ_2 . В матричной форме функция ψ_j записывается как однорядная матрица:

$$\psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{j1} \\ \psi_{j2} \end{pmatrix}.$$

Здесь индексы 1 и 2 относятся к двум спиновым состояниям электрона с проекцией спина на ось z , равной $+1/2$ и $-1/2$ соответственно*).

Для того, чтобы определить, как преобразуются волновые функции ψ_j при операциях g , входящих в группу симметрии гамильтониана (16.1), надо учесть, что при преобразованиях координат не только изменяется аргумент функций $\psi_{j1}(\mathbf{x})$ и $\psi_{j2}(\mathbf{x})$, но и компоненты спиноров преобразуются друг через друга, так как только при таком преобразовании гамильтониан (16.1) остается инвариантным. Из формул (10.6) и (10.26) следует, что преобразование спиноров со спином $1/2$ при вращении на угол θ по часовой стрелке вокруг оси z' , направленной по единичному вектору \mathbf{e} , проекции которого в полярной системе координат равны $e_x = \sin \theta \sin \varphi$, $e_y = \sin \theta \cos \varphi$, $e_z = \cos \theta$, описывается матрицей

$$\mathcal{D}_{1/2}(c_\theta) = e^{i(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{e})\theta/2} = \mathbf{I} \cos \frac{\theta}{2} + i(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{e}) \sin \frac{\theta}{2}. \quad (16.2)$$

Поэтому волновая функция $\psi_j(\mathbf{x})$ под действием операции g переходит в функцию

$$\psi'_j = \mathcal{D}(g) \psi_j = \mathcal{D}_{1/2}(g) \psi_j(g^{-1}\mathbf{x}) \quad (16.3)$$

*) Так как операции пространственных групп — инверсия, вращение, трансляция, а также инверсия времени — не приводят к перепутыванию «электронной» и «позитронной» компонент четырехкомпонентной волновой функции, являющейся решением уравнения Дирака, и каждая из пар компонент преобразуется независимо, то все следствия теории симметрии не зависят от того, является ли исходным точное уравнение Дирака или приближенное уравнение Шредингера — Паули (16.1), собственная функция которого имеет две компоненты.

или в матричной форме

$$\begin{vmatrix} \psi'_{j1} \\ \psi'_{j2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha^* \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_{j1}(g^{-1}\mathbf{x}) \\ \psi_{j2}(g^{-1}\mathbf{x}) \end{vmatrix}, \quad (16.4)$$

где α и β — матричные элементы матрицы $\mathcal{D}_{1/2}(g)$, определенной уравнением (16.2).

При всех операциях симметрии g , оставляющих инвариантным потенциал $V(\mathbf{x})$, волновая функция $\mathcal{D}(g)\psi_j$ должна представляться в виде комбинации линейно независимых функций $\psi_j(\mathbf{x})$, соответствующих той же энергии:

$$\mathcal{D}(g)\psi_j = \sum_i \mathcal{D}_{ij}(g)\psi_i. \quad (16.5)$$

Набор матриц $\mathcal{D}(g)$ образует представление группы \mathcal{G} , которое называется спинорным представлением. Как и обычные, спинорные представления могут быть приводимыми и неприводимыми, и каждое приводимое представление может указанным выше образом быть разложено на неприводимые. Так же как и для обычных представлений, все функции, соответствующие одной и той же энергии, образуют базис представления, которое является неприводимым, за исключением тех случаев, когда инвариантность уравнения (16.1) к инверсии времени приводит к добавочному вырождению, а также за исключением случайного вырождения. При преобразованиях g координатные функции ψ_{jk} также линейно выражаются друг через друга:

$$\mathcal{D}(g)\psi_{jk} = \psi_{jk}(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{il} \mathcal{D}'_{il,jk}\psi_{il}(\mathbf{x}). \quad (16.6)$$

Представление $\mathcal{D}'(g)$, образованное этими матрицами, вообще говоря приводимо. Зная матрицы $\mathcal{D}_{1/2}(g)$ и $\mathcal{D}(g)$, можно определить матрицу $\mathcal{D}'(g)$. Для этого приравняем l -ые строчки функции ψ'_j , определяемой матричными уравнениями (16.5) и (16.3):

$$\sum_i \mathcal{D}_{ij}(g)\psi_{il}(\mathbf{x}) = \sum_m \mathcal{D}_{1/2ml}(g)\psi_{jm}(g^{-1}\mathbf{x}).$$

Умножим правую и левую часть этого равенства на $\mathcal{D}_{1/2lk}^{-1}$ и просуммируем по l . Тогда, учитывая, что $\sum_l \mathcal{D}_{1/2ml}\mathcal{D}_{1/2lk}^{-1} = \delta_{mk}$, получим

$$\psi_{jk}(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{il} \mathcal{D}_{1/2lk}^{-1}(g)\mathcal{D}_{ij}(g)\psi_{il}(\mathbf{x}). \quad (16.7)$$

Сравнивая (16.7) и (16.6), видим, что

$$\mathcal{D}'_{il,jk}(g) = \mathcal{D}_{1/2lk}^{-1}(g)\mathcal{D}_{ij}(g) \quad (16.8)$$

или

$$\mathcal{D}' = \tilde{\mathcal{D}}_{1/2}^* \times \mathcal{D}. \quad (16.8a)$$

Возникает вопрос, в каких случаях учет спина в теории симметрии приводит к новым физическим следствиям. Из уравнения (16.1) видно, что единственным членом, который перепутывает волновые функции ψ_{jk} с разным спиновым индексом k , является так называемое спин-орбитальное взаимодействие

$$\mathcal{H}_{\text{co}} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\sigma [\nabla V P]), \quad (16.9)$$

которое в атомах описывает взаимодействие спинового момента с орбитальным. Если этим членом можно пренебречь, то матричное уравнение (16.1) распадается на два одинаковых уравнения для функций ψ_{j1} и ψ_{j2} и, следовательно, эти функции также можно считать одинаковыми. Таким образом, при пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием собственные функции уравнения (16.1) соответствуют значениям σ_z , равным $1/2$ и $-1/2$, и являются произведением координатной функции $\psi(r)$ на спиновые функции

$$\alpha = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \text{и} \quad \beta = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}.$$

Функции $\psi(r)\alpha$, $\psi(r)\beta$ преобразуются по представлению \mathcal{D} , которое является прямым произведением представления \mathcal{D}_μ , по которому преобразуются координатные функции $\psi(r)$, на представление $\mathcal{D}_{1/2}$, определяемое уравнением (16.2), по которому преобразуются спиновые функции. В том случае, если интересующий нас оператор не действует явно на спиновые функции, все правила отбора и т. п. определяются лишь представлениями, по которым преобразуются координатные функции, так как все переходы происходят с сохранением спина, а учет спина лишь удваивает число электронов в каждом состоянии.

Учет спин-орбитального взаимодействия может привести к частичному снятию вырождения, т. е. к расщеплению термов, соответствующих набору функций $\alpha\psi(r)$, $\beta\psi(r)$. Такое расщепление произойдет в том случае, когда представление $\mathcal{D} = \mathcal{D}_\mu \times \mathcal{D}_{1/2}$, по которому преобразуются эти функции, является приводимым. Эти функции уже не соответствуют определенному значению проекций спина, а являются суперпозицией состояний с σ_z , равным $+1/2$ и $-1/2$.

Если спин-орбитальное взаимодействие не учитывается, то всем этим представлениям соответствует одна и та же энергия. При его учете каждому из неприводимых представлений, содержащихся в прямом произведении $\mathcal{D}_\mu \times \mathcal{D}_{1/2}$, соответствует свое собственное значение E .

Таким образом, теория групп дает возможность сразу, не задавая конкретный вид оператора \mathcal{H}_{c_0} , определить, расщепится ли данный терм при учете спин-орбитального взаимодействия, и установить характер этого расщепления. Для этого надо лишь выяснить, какие неприводимые представления содержатся в произведении $\mathcal{D}_\mu \times \mathcal{D}_{1/2}$. Хотя величина спин-орбитального расщепления, как правило, мала по сравнению с расстоянием между термами в атомах, она обычно превышает тепловую энергию электрона в кристалле или энергию Ферми при не слишком сильном вырождении. В ряде кристаллов спин-орбитальное расщепление оказывается сравнимым с шириной запрещенной зоны или с расстоянием между зонами, возникшими в результате расщепления одного атомного терма кристаллическим полем.

Во всех этих случаях вид электронного спектра и другие свойства определяются именно спинорными представлениями.

Построение спинорных представлений

Как видно из формул (16.2), особенностью спиноров является то, что матрицы $\mathcal{D}(c_\theta)$ и $\mathcal{D}(c_{\theta+2\pi})$, соответствующие вращению вокруг произвольной оси z' на угол θ и на угол $\theta + 2\pi$, отличаются знаком, т. е.

$$\mathcal{D}(c_{\theta+2\pi}) = -\mathcal{D}(c_\theta), \quad (16.10)$$

при этом

$$\mathcal{D}(c_{2\pi}) = -\mathcal{D}(c_{4\pi}) = -\mathcal{D}(e) = -I. \quad (16.11)$$

Так как для координатных функций эти оба вращения эквивалентны, то соотношения (16.10) и (16.11) должны выполняться для любых спинорных функций. Матрицы $\mathcal{D}(i)$ для этих функций имеют такой же вид, как и для обычных функций, т. е. в зависимости от их четности

$$\mathcal{D}(i) = \pm \mathcal{D}(e) = \pm I. \quad (16.12)$$

Зеркальный поворот на угол θ можно представить как произведение инверсии и поворота на угол $\theta' = \theta + \pi$ при $\theta < \pi$ и $\theta' = \theta - \pi$ при $\theta \geq \pi$. Указанный выбор обеспечивает выполнение условия $\theta' < 2\pi$. Поэтому соотношение (16.10) имеет место и для зеркальных поворотов. В частности, операция σ_h , которую можно рассматривать как зеркальный поворот на угол $\theta = 2\pi$, равна $\sigma_h = ic_2$. Поэтому

$$\mathcal{D}(\sigma_h^2) = \mathcal{D}(c_2^2 i^2) = \mathcal{D}(c_2^2) = -I. \quad (16.13)$$

Соотношения (16.10)—(16.13) показывают, что спинорные представления точечных групп являются не обычными, а проективными представлениями группы, т. е. соответствующие

матрицы удовлетворяют соотношению

$$\mathcal{D}(r_1) \mathcal{D}(r_2) = \omega_2(r_1, r_2) \mathcal{D}(r_1 r_2). \quad (16.14)$$

Произведение любых операций группы $r_1 r_2$ можно представить как вращение вокруг некоторой оси z' на угол θ или вращение и инверсию. При этом фактор-система $\omega_2(r_1, r_2)$ в соответствии с (16.10), (16.11) определяется следующим условием:

$$\omega_2(r_1, r_2) = \begin{cases} 1 & \text{при } \theta < 2\pi, \\ -1 & \text{при } 4\pi > \theta > 2\pi, \end{cases} \quad (16.15)$$

где поворот на угол $-\theta$ совпадает с вращением на угол $4\pi - \theta$, так как $\mathcal{D}(c_{-\theta}) \mathcal{D}(c_\theta) = \mathcal{D}(c_{4\pi})$. Формула (16.15) дает возможность сразу определить $\omega_2(r_1, r_2)$, если r_1 и r_2 — повороты вокруг одной и той же оси (или повороты плюс инверсия). Если же эти оси разные, то для определения $\omega_2(r_1, r_2)$ удобно использовать определяющие соотношения.

Например, в группе C_{3v} вращения на угол π вокруг осей u'_2 и u''_2 , получаемых из u_2 поворотом на $2\pi/3$ и $4\pi/3$, выражаются как $u'_2 = c_3 u_2 c_3^{-1}$, $u''_2 = c_3^2 u_2 c_3^{-2}$. Так как $u_2 c_3 u_2^{-1} = c_3^{-1}$, то $u'_2 = c_3^2 u_2$, $u''_2 = c_3^4 u_2$. Следовательно, операция $c_3 u_2$ отличается от u'_2 поворотом на 2π , т. е. $\omega_2(c_3, u_2) = -1$, тогда как $\omega_2(c_3^2, u_2) = 1$. Аналогично согласно обычным правилам $u'_2 u_2$ и $u''_2 u'_2$ есть поворот c_3^2 , а $u''_2 u_2$ — поворот c_3 . В то же время из определяющих соотношений следует: $u'_2 u_2 = c_3^2 u_2^2$, $u''_2 u'_2 = c_3^2 u_2^2$, $u''_2 u_2 = c_3^4 u_2^2$. Это означает, что $\omega_2(u'_2, u_2) = \omega_2(u''_2, u'_2) = -1$, $\omega_2(u''_2, u_2) = 1$.

Спинорные представления можно рассматривать как обычные представления двойной группы, включающей наряду с элементами g элементы Qg , где Q — поворот на угол 2π , который коммутирует со всеми элементами g , причем для спинорных представлений $\mathcal{D}(Q) = -\mathcal{D}(e)$, а для обычных $\mathcal{D}(Q) = \mathcal{D}(e)$.

Этот метод определения спинорных представлений, предложенный Бете, фактически дает способ построения накрывающей группы, соответствующей фактор-системе (16.15). Эта группа в общем случае является подгруппой накрывающей группы, введенной в § 13, так как она содержит проективные представления лишь одного класса, соответствующего этой фактор-системе. Таким образом, метод Бете представляет вариант общего способа построения проективных представлений, предложенного Шуром.

Используя приемы, указанные в § 12, спинорные представления пространственных групп можно свести к проективным представлениям соответствующей точечной группы. При этом фактор-система $\omega(a, b)$ будет равняться произведению фактор-системы $\omega_1(a, b)$, определяемой уравнением (12.29), т. е. свойствами пространственной группы, и фактор-системы $\omega_2(a, b)$,

определяемой уравнением (16.15), т. е. свойствами спиноров:

$$\omega(a, b) = \omega_1(a, b) \omega_2(a, b). \quad (16.16)$$

Используя формулы § 14, мы определим ниже, к каким классам относятся фактор-системы $\omega_2(a, b)$ для всех точечных групп. Зная классы $K^{(1)}$ и $K^{(2)}$ фактор-систем ω_1 и ω_2 , можно сразу определить класс $K = K^{(1)}K^{(2)}$, к которому относится фактор-система ω , так как закон умножения классов совпадает с таблицей умножения группы мультипликатора. Как показано в § 13, для этого достаточно перемножить коэффициенты $\alpha_i^{(1)}$ и $\alpha_i^{(2)}$, соответствующие классам $K^{(1)}$ и $K^{(2)}$ и приведенные в табл. 14.2 (стр. 150—155). Тогда значения $\alpha_i = \alpha_i^{(1)}\alpha_i^{(2)}$ определяют класс K .

Так как в § 14 найдены все возможные проективные представления точечных групп, то спинорные представления данной пространственной группы с точностью до p -эквивалентных преобразований должны совпадать с одним из типов проективных представлений или с обычными, т. е. векторными, представлениями точечных групп*). Для определения спинорных представлений пространственных групп надо с помощью уравнений (12.29) и (16.15) построить фактор-систему, определить ее класс и, используя таблицы соответствующих проективных представлений, с помощью p -эквивалентных преобразований, приведенных в § 14, перейти от стандартной фактор-системы к фактор-системе, построенной указанным образом.

Таким образом, отличие от построения обычных представлений этих групп заключается лишь в необходимости учитывать (16.15) при построении фактор-системы (16.16). Поэтому ниже мы остановимся подробнее на определении фактор-системы (16.15) и построим спинорные представления для точечных групп.

Согласно (13.4) переход от стандартной фактор-системы, использованной при построении табл. 14.2 (стр. 150—155), к данной системе осуществляется умножением матрицы $\mathcal{D}(r)$, соответствующей стандартной системе, на величину $u(r)$:

$$\mathcal{D}'(r) = \mathcal{D}(r) u(r). \quad (16.17)$$

В табл. 16.2 (стр. 193) приведены значения $u(r)$ для всех элементов точечных групп, у которых фактор-система (16.15) соответствует классу K_0 . Для остальных групп спинорные представления соответствуют классу K_1 в табл. 14.2. Характеры этих представлений получаются умножением характеров представлений $\chi(r)$, соответствующих этим классам, на величину $u(r)$.

Покажем, как определяются классы фактор-систем (16.15) и величины $u(r)$ для конкретных групп.

*) Поэтому нет никакой необходимости дополнительно строить проективные представления двойных точечных групп, как это делается в работах [11.2, 11.3].

Спинорные представления точечных групп

Для тех групп, у которых все проективные представления p -эквивалентны векторным, спинорные представления, конечно, также p -эквивалентны векторным представлениям, характеры которых приведены в табл. 11.1 (стр. 99—102). К этим группам относятся циклические группы C_n , для которых в соответствии с (14.6) u можно записать в виде

$$u(c_n^k) = \frac{\omega_{c_n^k/n}}{\omega_{c_n^k}} = e^{\frac{i\pi M}{n} k}, \quad (16.18)$$

где M — любое целое нечетное число, которое можно выбрать наиболее удобным образом. Формула (16.18) следует из того, что, согласно (16.15),

$$\omega(c_n^k, c_n) = \begin{cases} 1 & \text{при } k < n-1, \\ -1 & \text{при } k = n-1 \end{cases} \quad (16.19)$$

и, следовательно,

$$\omega_{c_n^k} = \omega(c_n, c_n) \omega(c_n^2, c_n) \dots \omega(c_n, c_n^{k-1}) = \begin{cases} 1 & \text{при } k < n, \\ -1 & \text{при } k = n. \end{cases} \quad (16.20)$$

В соответствии с уравнением (16.13) $\omega(\sigma_h, \sigma_h) = -1$. Поэтому для группы C_s , так же как и для C_2 ,

$$u(\sigma_h) = e^{\pi i/2} = i, \quad u(c_2) = i. \quad (16.21)$$

Так как для спинорных представлений, как и для векторных, $\mathcal{D}(i) = \pm \mathcal{D}(e)$, то

$$\omega(a, b) = \omega(b, a) = 1, \quad \text{если } a = i \text{ и (или) } b = i. \quad (16.22)$$

Поэтому для группы C_4

$$u(i) = 1. \quad (16.23)$$

Для групп $C_{2h} = C_2 \times C_i$, $C_{4h} = C_4 \times C_i$, $C_{6h} = C_6 \times C_i$, $S_6 = C_3 \times C_i$ спинорные представления также p -эквивалентны векторным, что следует из формул (14.10) и (16.22), и в соответствии с (16.12) спинорные представления этих групп получаются умножением спинорных представлений групп C_n и C_i , так же как это имело место для векторных представлений. Это означает, что для указанных групп, так же как и для любых групп, являющихся произведением $G \times C_i$,

$$u(ai) = u(a), \quad (16.24)$$

где a — любой из элементов групп C_n , для которых $u(r)$ определяется уравнением (16.18).

В частности, для групп C_3 и $S_6 = C_3 \times C_2$, полагая в (16.18) $M = 3$, получим

$$u(c_3) = u(s_6^5) = -1, \quad u(c_3^2) = u(s_6) = 1. \quad (16.25)$$

Для групп C_6 и $C_{6h} = C_6 \times C_2$ также удобно положить в (16.18) $M = 3$. Это же относится и к циклической группе D_{3h} , для которой образующий элемент a можно выбрать как $a = c_6^i = c_3^2 \sigma_h$. Тогда согласно (16.18) и (16.24)

$$u(\sigma_h) = -i, \quad u(c_3 \sigma_h) = u(c_3^2 \sigma_h) = i, \quad u(c_3) = -1, \quad u(c_3^2) = 1. \quad (16.26)$$

Из групп, имеющих только один класс проективных представлений K_0 , остаются еще S_4 , D_3 и C_{3v} . Для группы S_4 согласно (16.15) и (14.3)

$$\omega(s_4, s_4) = \omega(s_4, s_4^2) = \omega(s_4, s_4^3) = -1,$$

т. е.

$$\omega_{s_4,2} = \omega_{s_4,4} = -1, \quad \omega_{s_4,3} = 1$$

и, следовательно, согласно (14.6)

$$u(s_4^k) = -(-1)^k e^{\frac{\pi i}{4} k} = e^{\pi i \left(1 - \frac{3}{4} k\right)}. \quad (16.27)$$

Спинорные представления изоморфных групп D_n и C_{nv} имеют совпадающие фактор-системы $\omega(a, b)$, где $a = c_n^k$, а $b = u_2$ или $b = \sigma_v = iu_2$ соответственно. Поэтому спинорные представления этих групп совпадают.

Значения коэффициентов $u(c_3^k)$ для групп D_3 и C_{3v} в соответствии с (14.45) определяются уравнениями (16.25). Как указывалось выше, $\omega(c_3, u) = -1$, а $\omega(c_3^2, u) = 1$. Поэтому согласно (14.45) и (16.21)

$$u(u_2') = u(c_3^2) u(u_2) = i, \quad u(u_2'') = -u(c_3) u(u_2) = i. \quad (16.28)$$

Следовательно, для всех трех элементов u_2 или σ_v u определяется уравнениями (16.21).

Для остальных групп C_{nv} и D_n спинорные представления относятся к классу K_1 , так как для этих групп согласно (16.15) отношение

$$\frac{\omega(c_n^{n/2}, u_2)}{\omega(u_2, c_n^{n/2})} \quad \text{или} \quad \frac{\omega(c_n^{n/2}, \sigma_v)}{\omega(\sigma_v, c_n^{n/2})}$$

равно -1 . Действительно, если $u_2 c_n^{n/2}$ есть поворот на угол 2π вокруг оси, перпендикулярной c_n и u_2 , то $c_n^{n/2} u_2$ есть поворот на угол -2π .

Для групп C_{2v} и D_2 в соответствии с (14.45) $u(a)$ и $u(b)$ определяются уравнениями (16.21). Здесь $a = c_2$, а $b = u_2$ или $b = \sigma_v$; $u(ab) = u(a)u(b) = -1$, так как $\omega(a, b) = 1$.

Для групп C_{4v} и D_4 для всех элементов $a^k b$, а именно u_2 , $u'_2 = c_4 u_2$, $u''_2 = c_4 u_2 c_4^{-1} = c_4^2 u_2$, $u'''_2 = c_4 u'_2 c_4^{-1} = c_4^3 u_2$, так же как и для всех элементов σ_v , величина $\omega(a^k, b) = 1$, а $\omega(b, a) = -1$, так как $u_2 c_4 = c_4^{-1} u_2$. Поэтому, согласно (14.24), (14.33) и (14.47),

$$\alpha' = \frac{\omega(u_2, c_4) \omega(c_4^3, c_4)}{\omega_{c_4^4}^{1/2} \omega(c_4^3, u_2)} = -1, \quad \text{откуда}$$

$$u(c_4^k) = e^{\frac{\pi i}{2} k},$$

$$u(c_4^k u_2) = u(c_4^k) u(u_2) = e^{\frac{\pi i}{2} (k+1)} \quad \text{и} \quad u(c_4^k \sigma_v) = e^{\frac{\pi i}{2} (k+1)}. \quad (16.29)$$

Для изоморфной группы D_{2d} в соответствии с (14.24), (14.33) и (16.26)

$$u(s_4^k) = -(-1)^k e^{\frac{\pi i}{2} k} = e^{\pi i \left(1 - \frac{k}{2}\right)}, \quad u(s_4^k u_2) = e^{-\frac{\pi i}{2} (k+1)}, \quad (16.30)$$

так как для всех элементов $a^k b$, а именно u_2 , $u'_2 = s_4 u_2 s_4^{-1} = s_4^2 u_2$, $\sigma_v = s_4 u_2$, $\sigma'_v = s_4 u'_2 = s_4^3 u_2$, также $\omega(a^k, b) = 1$, а $\omega(b, a) = -1$.

Для группы $D_{3d} = D_3 \times C_i$ в силу условия (16.25), как и для группы D_3 , спинорные представления относятся к классу K_0 , т. е. p -эквивалентны векторным, и $u(c_3^k)$ и $u(c_3^k \sigma_v)$ определяются формулами (16.25), (16.28), тогда как для остальных элементов справедлива формула (16.24).

Для группы D_{3h} , как и для C_{2v} , $\omega(\sigma_v, \sigma_h) = -\omega(\sigma_h, \sigma_v)$, поэтому спинорные представления относятся к классу K_1 , так же как и для изоморфных групп C_{6v} и D_6 . В соответствии с (14.45) $u(a^k)$, где $a = c_6^i$ или c_6 , определяется формулой (16.18); для всех остальных элементов $c_6^k u_2$, $c_6^k \sigma_v$ или $i c_6^k u_2$, как легко проверить, $\omega(c_6^k, u_2) = \omega(c_6^k, \sigma_v) = 1$, и следовательно,

$$u(c_6^k) = u(i c_6^k) = e^{\frac{\pi i}{2} k}, \quad u(c_6^k u_2) = u(c_6^k \sigma_v) = u(i c_6^k u_2) = e^{\frac{\pi i}{2} (k+1)}. \quad (16.31)$$

Что касается групп $D_{2h} = D_2 \times C_i$, $D_{4h} = D_4 \times C_i$ и $D_{6h} = D_6 \times C_i$, то для них в соответствии с (16.24) множители $u(a)$ и $u(ai)$ совпадают с их значениями для групп D_2 , D_4 и D_6 соответственно.

Из условия (16.22) сразу следует, что фактор-система (16.15) соответствует фактор-системам K_1 этих групп, так как для этих представлений $ai = ia$ при любом элементе a . Для групп T , T_h , T_d , O и O_h спинорные представления также p -эквивалентны

проективными представлениями класса K_1 , так как все они содержат взаимно перпендикулярные оси второго порядка, для которых $\omega(a, b) = -\omega(b, a)$.

Значения $u(r)$ для групп T и O определяются формулами (14.53), (14.54) и (14.68), (14.69) и для группы T приведены в табл. 14.1 (стр. 144). Для группы T_a значения $u(r)$ те же, что и для группы O , так как фактор-системы (16.15) для них совпадают. Что касается групп $T_h = T \times C_i$ и $O_h = O \times C_i$, то для них в соответствии с (16.24) значения $u(r)$ и $u(ir)$ совпадают с значениями $u(r)$ для тех же элементов групп T или O соответственно, что сразу определяет и класс фактор-систем.

Зная характеры неприводимых спинорных представлений, можно по формулам § 8 сразу определить, на какие представления разбивается произведение $\mathcal{D} \times \mathcal{D}_{1/2}$, где \mathcal{D} — любое векторное представление точечной группы, учитывая, что согласно (10.20) и (16.12) для представления $\mathcal{D}_{1/2}^+$

$$\chi(c_\varphi) = 2 \cos \frac{\varphi}{2}, \quad \chi(s_\varphi) = \chi(ic_{\varphi+\pi}) = -2 \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (16.32)$$

Базисные функции спинорных представлений можно построить из базисных функций представления $\mathcal{D} \times \mathcal{D}_{1/2}$, содержащего данное представление, для чего надо разложить систему функций $\psi_i \alpha$ и $\psi_i \beta$, где ψ_i — функции представления \mathcal{D} , по неприводимым представлениям. Эти функции также можно получить из базисных функций представлений полной сферической группы с полуцелыми j , раскладывая их по неприводимым представлениям данной точечной группы. При $j = 3/2$ в каноническом базисе

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{3/2} &= -\frac{i}{\sqrt{2}} (x + iy) \alpha, & Y_{1/2}^{3/2} &= \frac{i}{\sqrt{6}} [(x + iy) \beta - 2z\alpha], \\ Y_{-1/2}^{3/2} &= \frac{i}{\sqrt{2}} (x - iy) \beta, & Y_{-1/2}^{3/2} &= -\frac{i}{\sqrt{6}} [(x - iy) \alpha + 2z\beta]. \end{aligned}$$

В табл. 16.1 приведены характеры спинорных представлений для точечных групп, имеющих проективные представления, не эквивалентные векторным, для которых спинорные представления не относятся к классу K_0 , и указаны базисные функции. В табл. 16.2 указаны представления, по которым преобразуются спинорные функции, для тех групп, где эти представления p -эквивалентны векторным, и приведены значения произведений $\mathcal{D} \times \mathcal{D}_{1/2}$ для этих групп. Для групп, являющихся произведением указанных групп на C_i , сохраняются те же правила умножения с учетом того, что представление $\mathcal{D}_{1/2}$ четное. При этом имеется в виду, что представления \mathcal{D}'_i , по которым преобразуются спинорные функции, p -эквивалентны соответствующим векторным представлениям \mathcal{D}_i и отличаются от них множителями $u(r)$, приведенными в тексте и в табл. 16.2.

Таблицы характеров для спинорных представлений

Группы D_2, C_{2v}

D_2	e	c_{2z}	c_{2x}	c_{2y}	Базисные функции групп	Таблица умножения			
						D_2, C_{2v}	A_1	A_2	B_1
C_{2v}	e	c_2	σ_v	σ'_v					
E'	2	0	0	0	α, β	E'	E'	E'	E'

Группы D_4, C_{4v}, D_{2d}

D_4	e	c_2	c_4	c_4^3	$2u_2$	$2u'_2$	Базисные функции		Таблица умножения						
							D_4, C_{4v}	D_{2d}	A_1	A_2	B_1	B_2	E		
C_{4v}	e	c_2 <td>c_4 <td>c_4^3 <td>$2\sigma_v$ <td>$2\sigma'_v$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td></td></td>	c_4 <td>c_4^3 <td>$2\sigma_v$ <td>$2\sigma'_v$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td></td>	c_4^3 <td>$2\sigma_v$ <td>$2\sigma'_v$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td>	$2\sigma_v$ <td>$2\sigma'_v$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td>	$2\sigma'_v$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>									
D_{2d}	e	c_2 <td>s_4 <td>s_4^3 <td>$2u_2$ <td>$2\sigma_d$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td></td></td>	s_4 <td>s_4^3 <td>$2u_2$ <td>$2\sigma_d$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td></td>	s_4^3 <td>$2u_2$ <td>$2\sigma_d$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td></td>	$2u_2$ <td>$2\sigma_d$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </td>	$2\sigma_d$ <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>									
E'_1	2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	α, β	$\begin{pmatrix} (x+iy)\alpha \\ (x-iy)\beta \end{pmatrix}$	E'_1	E'_1	E'_2	E'_2	$E'_1 + E'_2$	E'_2	$E'_1 + E'_2$
E'_2	2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	$\begin{pmatrix} (x+iy)\alpha \\ (x-iy)\beta \end{pmatrix}$	α, β	E'_2	E'_2	E'_1	E'_1	$E'_1 + E'_2$	E'_1	$E'_1 + E'_2$

Группы D_6, C_{6v}, D_{3h}

D_6	e	c_2	c_3	c_3^2	c_6	c_6^5	$3u_2$	$3u'_2$	Базисные функции	
									D_6, C_{6v}	D_{3h}
C_{6v}	e	c_2 <td>c_3 <td>c_3^2 <td>c_6 <td>c_6^5 <td>$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td></td></td>	c_3 <td>c_3^2 <td>c_6 <td>c_6^5 <td>$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td></td>	c_3^2 <td>c_6 <td>c_6^5 <td>$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td>	c_6 <td>c_6^5 <td>$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td>	c_6^5 <td>$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td>	$3\sigma_v$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td>	$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td>		
D_{3h}	e	σ_h <td>c_3 <td>c_3^2 <td>s_6 <td>s_6^5 <td>$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td></td></td>	c_3 <td>c_3^2 <td>s_6 <td>s_6^5 <td>$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td></td>	c_3^2 <td>s_6 <td>s_6^5 <td>$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td></td>	s_6 <td>s_6^5 <td>$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td></td>	s_6^5 <td>$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td></td>	$3u_2$ <td>$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td> </td>	$3\sigma'_v$ <td></td> <td></td>		
E'_1	2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0	α, β	$\begin{pmatrix} (x-iy)\alpha \\ (x+iy)\beta \end{pmatrix}$
E'_2	2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0	$\begin{pmatrix} (x+iy)^3\alpha \\ (x-iy)^3\beta \end{pmatrix}$	α, β
E'_3	2	0	-2	2	0	0	0	0	$\begin{pmatrix} (x+iy)\alpha \\ (x-iy)\beta \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} (x+iy)\alpha \\ (x-iy)\beta \end{pmatrix}$

Таблица умножения

	A_1	A_2	A_3	A_4	E_1	E_2
	A_1^+	A_1^-	A_2^+	A_2^-	E^+	E^-
E'_1	E'_1	E'_1	E'_2	E'_2	$E'_2 + E'_3$	$E'_1 + E'_3$
E'_2	E'_2	E'_2	E'_1	E'_1	$E'_1 + E'_3$	$E'_2 + E'_3$
E'_3	E'_3	E'_3	E'_3	E'_3	$E'_1 + E'_2$	$E'_1 + E'_2$

Группа T

T	e	4c ₃	4c ₃ ²	3c ₂	Базисные функции	
E' ₁	2	1	-1	0	α, β	
E' ₂	2	ε ₃	-ε ₃ ²	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{-1/2}^{3/2} - iY_{3/2}^{3/2})$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{1/2}^{3/2} - iY_{-3/2}^{3/2})$
E' ₃	2	ε ₃ ²	-ε ₃	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{1/2}^{3/2} + iY_{-3/2}^{3/2})$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{-1/2}^{3/2} + iY_{3/2}^{3/2})$

Таблица умножения

	A	B ₁	B ₂	E
E' ₁	E' ₁	E' ₂	E' ₃	E' ₁ + E' ₂ + E' ₃
E' ₂	E' ₂	E' ₃	E' ₁	E' ₁ + E' ₂ + E' ₃
E' ₃	E' ₃	E' ₁	E' ₂	E' ₁ + E' ₂ + E' ₃

Группы T_d, O

T _d	e	4c ₃	4c ₃ ²	3c ₂	3s ₄	3s ₄ ³	6σ _d	Базисные функции	
O	e	4c ₃	4c ₃ ²	3c ₂	3c ₄	3c ₄ ³	6u ₂	T _d	O
E' ₁	2	1	-1	0	√2	-√2	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} [(x+iy)\beta + z\alpha]$ $\frac{i}{\sqrt{3}} [(x-iy)\alpha - z\beta]$	α, β
E' ₂	2	1	-1	0	-√2	√2	0	α, β	$\frac{1}{\sqrt{3}} [(y+ix)z\beta + xy\alpha]$ $\frac{i}{\sqrt{3}} [(y-ix)z\alpha - xy\beta]$
G'	4	-1	1	0	0	0	0	Y _{±3/2}^{3/2}, Y_{±1/2}^{3/2}}}	Y _{±3/2}^{3/2}, Y_{±1/2}^{3/2}}}

Таблица умножения

	A ₁	A ₂	E	F ₁	F ₂
E' ₁	E' ₁	E' ₂	G'	E' ₁ + G'	E' ₂ + G'
E' ₂	E' ₂	E' ₁	G'	E' ₂ + G'	E' ₁ + G'
G'	G'	G'	E' ₁ + E' ₂ + G'	E' ₁ + E' ₂ + 2G'	E' ₁ + E' ₂ + 2G'

Разложение произведений $\mathcal{D} \times \mathcal{D}_{1/2}$ на неприводимые *)

Группа	Представления, по которым преобразуются α и β		Представления, входящие в произведение $\mathcal{D}_{1/2}$ на указанное однозначное представление	$u(g)$
C_1	A	A	$A \rightarrow A' + A'$	$u(e) = 1$
C_2	A'_1	A'_2	$A_1 \rightarrow A'_1 + A'_2, A_2 \rightarrow A'_1 + A'_2$	$u(c_2) = i$
C_5	A'_1	A'_2	$A_1 \rightarrow A'_1 + A'_2, A_2 \rightarrow A'_1 + A'_2$	$u(\sigma_h) = i$
C_3	B'_2	B'_1	$A_1 \rightarrow B'_1 + B'_2, B_1 \rightarrow A'_1 + B'_2,$ $B_2 \rightarrow A'_1 + B'_1$	$u(c_3) = -1, u(c_3^2) = 1$
C_4	B'_2	A'_1	$A_1 \rightarrow A'_1 + B'_2, A_2 \rightarrow A'_2 + B'_1$ $B_1 \rightarrow A'_1 + B'_1, B_2 \rightarrow A'_2 + B'_2$	$u(c_4) = (1/\sqrt{2})(1+i)$ $u(c_2) = i$ $u(c_4^2) = -(1/\sqrt{2})(1-i)$
S_4	B'_1	A'_2	$A_1 \rightarrow A'_2 + B'_1, A_2 \rightarrow A'_1 + B'_2$ $B_1 \rightarrow A'_2 + B'_1, B_2 \rightarrow A'_1 + B'_1$	$u(s_4) = (1/\sqrt{2})(1+i)$ $u(c_2) = -i$ $u(s_4^3) = -(1/\sqrt{2})(1-i)$
C_6	B_4	B_1	$A_1 \rightarrow B'_1 + B'_2, A_2 \rightarrow B'_2 + B'_3$ $B_2 \rightarrow A'_1 + B'_4, B_2 \rightarrow A'_2 + B'_3$ $B_3 \rightarrow A'_2 + B'_1, B_4 \rightarrow A'_1 + B'_2$	$u(c_6) = u(c_6^5) = i$ $u(c_3) = -1, u(c_3^2) = 1$ $u(c_2) = -i$
C_{3h}	B_2^-	B_1^+	$A_1^+ \rightarrow B_1^{+'} + B_2^{-'}$, $A_1^- \rightarrow B_1^{-'} + B_2^{+'}$ $B_1^+ \rightarrow A_1^{+'} + B_2^{-'}$, $B_1^- \rightarrow A_1^{-'} + B_2^{+'}$ $B_2^+ \rightarrow A_1^{-'} + B_1^{+'}$, $B_2^- \rightarrow A_1^{+'} + B_1^{-'}$	$u(s_3) = u(s_3^5) = i$ $u(c_3) = -1, u(c_3^2) = 1$ $u(\sigma_h) = -i$
D_3	E'		$A_1 \rightarrow E', A_2 \rightarrow E',$ $E \rightarrow A'_1 + A'_2 + E'$	$u(c_3) = -1;$ $u(c_3^2) = 1, u(u_2) = i$
C_{3v}	E'		$A_1 \rightarrow E', A_2 \rightarrow E',$ $E \rightarrow A'_1 + A'_2 + E'$	$u(c_3) = -1;$ $u(c_3^2) = 1, u(\sigma_h) = i$

*) Для спинорных представлений повороту Φ могут соответствовать два значения $\chi(\Phi)$, отличающиеся знаком, что соответствует разному выбору $u(g)$. Здесь для всех групп, кроме S_4 , $\chi_\alpha(\Phi) = e^{-i\Phi/2}$, $\chi_\beta(\Phi) = e^{i\Phi/2}$; для S_4 знак обратный.

Так как при умножении на $u(g)$ представления могут менять четность, то здесь индексы у A и B могут не соответствовать четности представлений.

§ 17. ЭЛЕКТРОН В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Как указывалось в § 15, состояния и спектр любых элементарных возбуждений идеального кристалла, например электронов, фононов, экситонов, спиновых волн и др., могут быть классифицированы по представлениям пространственных групп. В этом параграфе результаты, полученные на основе теории групп, будут применены для характеристики волновых функций и энергетического спектра электронов в идеальном кристалле.

Волновая функция ψ электрона, движущегося в идеальном кристалле, определяется уравнением Шредингера (15.1)

$$\mathcal{H}\psi = E\psi, \quad (17.1)$$

где оператор энергии \mathcal{H} равен

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}). \quad (17.2)$$

В операторе энергии \mathcal{H} (17.2) мы пока не будем учитывать спин-орбитального взаимодействия.

Потенциальная энергия $V(\mathbf{x})$, т. е. самосогласованный потенциал, создаваемый всеми ионами и электронами, образующими идеальную решетку, а значит и оператор энергии \mathcal{H} инвариантны ко всем преобразованиям, при которых каждая точка кристалла совмещается с эквивалентной, т. е. по всем преобразованиям пространственной группы G ; следовательно, в соответствии с (15.2)

$$gV(\mathbf{x}) = V(g^{-1}\mathbf{x})g = V(\mathbf{x})g, \quad g\mathcal{H} = \mathcal{H}g. \quad (17.3)$$

Группа симметрии оператора \mathcal{H} совпадает, таким образом, с пространственной группой G , и поэтому все собственные функции ψ могут быть классифицированы по неприводимым представлениям группы G . Как указывалось в § 6, во всякой пространственной группе G содержится в качестве подгруппы абелева группа T трансляции на основные периоды решетки Браве кристалла. Отмечая трансляционную инвариантность потенциала $V(\mathbf{x})$, его часто называют периодическим потенциалом.

Представления группы трансляций характеризуются непрерывным вектором \mathbf{k} , лежащим в зоне Бриллюэна.

В качестве собственных функций оператора энергии \mathcal{H} могут быть выбраны функции $\psi_{\mathbf{k}}$, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы трансляций T , для которых, в согласии с (12.8),

$$t_{\mathbf{a}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (17.4)$$

Из (17.4) следует, что волновая функция $\psi_{\mathbf{k}}$ может быть записана в виде

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (17.5)$$

Функции (17.5) называются блоховскими функциями, а $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ — блоховскими периодическими амплитудами.

Состоянию $\psi_{\mathbf{k}}$ соответствует энергия $E(\mathbf{k}) = E(k_x, k_y, k_z)$, которая является функцией вектора \mathbf{k} .

В общем случае имеется неограниченное число линейно независимых решений уравнений (17.1) и (17.4). Будем обозначать каждое линейно независимое решение (17.1) и (17.4) индексом n : $\psi_{\mathbf{k}n} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{x})$. Этому состоянию соответствует энергия $E_n(\mathbf{k})$. Таким образом, в общем случае оператор \mathcal{H} с периодическим потенциалом имеет многозонный спектр $E_n(\mathbf{k})$ и каждая ветвь спектра характеризуется дискретным номером зоны n . Состояние внутри данной зоны n характеризуется непрерывным квантовым числом \mathbf{k} .

Различные ветви $E_n(\mathbf{k})$ могут совпадать в отдельных точках или вдоль линии в \mathbf{k} -пространстве. Это соприкосновение зон может быть как случайным, т. е. связанным с особенностями потенциала $V(\mathbf{x})$, так и следствием симметрии потенциала; в последнем случае оно может быть исследовано методом теории групп.

Из (17.2) и (17.5) следует, что $u_{n\mathbf{k}}$ удовлетворяет уравнению

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}, \quad (17.6)$$

где

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{p}}{m}. \quad (17.7)$$

В отличие от оператора \mathcal{H} (17.2) оператор $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ зависит от волнового вектора \mathbf{k} , так как включает добавочный член $\hbar \mathbf{k} \mathbf{p} / m$, где \mathbf{p} — оператор импульса. При указанном выборе $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ его собственные значения $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ отличаются от энергии электрона $E_n(\mathbf{k})$ на величину энергии свободного электрона $\hbar^2 k^2 / 2m$.

Условие периодичности функций $u_{n\mathbf{k}}$ является фактически граничным условием для уравнения (17.6), поэтому среди решений этого уравнения следует рассматривать только периодические решения.

Если уравнение (17.6) имеет m линейно независимых решений $u_{i\mathbf{k}}$ ($i = 1, 2, \dots, m$), т. е. существует m линейно независимых решений $\psi_{i\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{i\mathbf{k}}$ уравнений (17.2), (17.5), соответствующих одной энергии $E(\mathbf{k})$, то говорят, что в точке \mathbf{k} происходит m -кратное вырождение зоны. Как было показано в § 15, число линейно независимых решений уравнения Шредингера определяется размерностью неприводимых представлений группы симметрии оператора энергии, в данном случае оператора $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ (17.7). Поэтому кратность вырождения зоны в данной точке \mathbf{k} в общем случае определяется размерностью неприводимых представлений группы симметрии оператора $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$. Оператор $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ из-за наличия в нем члена $\hbar \mathbf{k} \mathbf{p} / m$ имеет группу симметрии более

низкую, чем пространственная группа G , которая является группой симметрии гамильтониана \mathcal{H} .

Действительно, для любого элемента $g \in G$ согласно (17.7)

$$\begin{aligned} g\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= \mathcal{H}_{\mathbf{k}}(g^{-1}\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(g^{-1}\mathbf{x}) + \frac{\hbar\mathbf{k}g^{-1}\mathbf{p}}{m} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \hbar\frac{g\mathbf{k}\mathbf{p}}{m} = \mathcal{H}_{g\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (17.8)$$

Таким образом, оператор $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ инвариантен только к таким преобразованиям h из группы G , которые не изменяют вектор \mathbf{k} , т. е. $h\mathbf{k} = \mathbf{k}$. Для точек внутри зоны Бриллюэна эти преобразования образуют введенную в § 13 группу волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$.

Следовательно, кратность вырождения зоны в точке \mathbf{k} определяется размерностью неприводимого представления $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}$ группы волнового вектора, по которому преобразуются блоховские функции $\psi_{i\mathbf{k}}$:

$$h\psi_{i\mathbf{k}} = \psi_{i\mathbf{k}}(h^{-1}\mathbf{x}) = \sum_s \mathcal{D}_{si}^{\mathbf{k}}(h)\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad h \in G_{\mathbf{k}}.$$

Блоховские амплитуды $u_{n\mathbf{k}}$ преобразуются по матрице $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}(r)$, введенной в § 12 (см. (12.26)), которая определяется только поворотными элементами группы $F_{\mathbf{k}}$:

$$hu_{i\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{i\mathbf{k}}(h^{-1}\mathbf{x}) = \sum_s \mathcal{D}_{si}^{\mathbf{k}}(r)u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{x}); \quad h = (r|\mathbf{a} + \mathbf{a}), \quad r \in F_{\mathbf{k}}.$$

Матрицы $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}(r)$, как было показано в § 12, для точек внутри зоны Бриллюэна образуют обычные представления группы направлений $F_{\mathbf{k}}$. Поэтому для точек внутри зоны Бриллюэна кратность вырождения зоны в точке \mathbf{k} совпадает с размерностью неприводимых представлений группы $F_{\mathbf{k}}$. Ясно, что вырождение зоны может иметь место только для точек достаточно высокой симметрии.

Базис полного представления пространственной группы $\mathcal{D}^{(\mathbf{k})}$ с неприводимой звездой $\{\mathbf{k}\}$ образуют блоховские функции $\psi_{s\mathbf{k}_i}$ с различными волновыми векторами \mathbf{k}_i , принадлежащими звезде $\{\mathbf{k}\}$. Как указывалось в § 12, эти векторы \mathbf{k}_i могут быть получены из вектора \mathbf{k} преобразованиями g_i : $\mathbf{k}_i = g_i\mathbf{k}$, которые входят в пространственную группу G , но не входят в группу волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$. Функции $\psi_{s\mathbf{k}_i}$ в соответствии с (12.19) равны

$$\psi_{s\mathbf{k}_i} = \psi_{s\mathbf{k}_i} = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{x}} u_{s\mathbf{k}_i}(\mathbf{x}) = e^{ig_i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{s\mathbf{k}_i}(\mathbf{x}). \quad (17.9)$$

Поскольку всем функциям, относящимся к одному неприводимому представлению, соответствует одна энергия, то

$$E(\mathbf{k}_i) = E(g\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) \quad (17.10)$$

для всех $g \in G$. Таким образом, зонная структура в целом обладает симметрией, характеризуемой кристаллическим классом F пространственной группы G .

Полная кратность вырождения по энергии N_0 , обусловленная симметрией решетки и равная размерности неприводимого представления пространственной группы, равна, в соответствии с (12.16), произведению кратности вырождения зоны m в точке \mathbf{k} на число лучей f в звезде $\{\mathbf{k}\}$:

$$N_0 = mf.$$

Таким образом, можно различать два типа вырождения энергетического спектра: вырождение зоны в точке \mathbf{k} , связанное с симметрией точки \mathbf{k} , и вырождение по энергии, связанное с равенством энергии в различных точках \mathbf{k} -пространства, соответствующих различным лучам звезды вектора \mathbf{k} .

Условия совместности. В кристаллах с достаточно высокой симметрией в зоне Бриллюэна всегда имеются точки или линии, в которых может иметь место вырождение зон, т. е. существуют представления группы волнового вектора размерности выше первой. Рассмотрим какую-либо такую точку \mathbf{k}_0 внутри зоны Бриллюэна, в окрестности которой нет точек более высокой симметрии. Характер вырождения зоны в точке \mathbf{k}_0 определяется представлениями группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$, а характер вырождения зоны в соседней с ней точке $\mathbf{k}_0 + \mathbf{x} = \mathbf{k}$ определяется группой $G_{\mathbf{k}}$. В общем случае точка \mathbf{k} имеет более низкую симметрию, поэтому $G_{\mathbf{k}}$ содержится в $G_{\mathbf{k}_0}$ в качестве подгруппы и размерности неприводимых представлений группы $G_{\mathbf{k}}$ в общем случае меньше размерности представлений группы $G_{\mathbf{k}_0}$. Это означает, что вырождение зоны в точке \mathbf{k} снимается полностью или частично. Поскольку группа $G_{\mathbf{k}}$ при малых \mathbf{x} определяется только направлением вектора \mathbf{x} , то и характер расщепления зоны (но не его величина) определяется только этим направлением. Если же точка \mathbf{k}_0 лежит на линии симметрии, то при движении вдоль этой линии симметрия точек \mathbf{k}_0 и \mathbf{k} совпадает и вырождение зон не снимается.

Возникает вопрос, на какие из возможных представлений группы $G_{\mathbf{k}}$ распадается заданное представление $\mathcal{D}^{\mathbf{k}_0}$ группы $G_{\mathbf{k}_0}$ и в какое представление группы $G_{\mathbf{k}}$ переходит данное представление $\mathcal{D}^{\mathbf{k}_0}$, если вырождение не снимается. Такие соотношения, связывающие представления в заданной и близлежащих точках, называются соотношениями совместности.

Задача определения условий совместности вполне аналогична задаче о расщеплении термов при внесении возмущения, понижающего симметрию от $G_{\mathbf{k}_0}$ до $G_{\mathbf{k}}$, и сводится, как указано в § 16, к определению коэффициентов в разложении $\mathcal{D}^{\mathbf{k}_0}$ по представлениям $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}$ группы $G_{\mathbf{k}}$:

$$\mathcal{D}^{\mathbf{k}_0} = \sum_{\mathfrak{s}} c_{\mathfrak{s}} \mathcal{D}_{\mathfrak{s}}^{\mathbf{k}}. \quad (17.11)$$

Коэффициенты c_s , показывающие, сколько раз представление \mathcal{D}_s^k содержится в \mathcal{D}^{k_0} , можно определить по известным характеристам представлений \mathcal{D}^{k_0} и \mathcal{D}^k , используя (8.18). Отличие c_s от нуля в (17.11) означает совместность представлений \mathcal{D}^{k_0} и \mathcal{D}_s^k . Из (12.26) видно, что для точек, находящихся внутри зоны Бриллюэна, в условиях совместности (17.11) можно вместо матриц $\mathcal{D}^k(h)$ использовать матрицы $\mathcal{D}^k(r)$.

Учет спин-орбитального взаимодействия. Как показано в § 16, для учета спин-орбитального взаимодействия в гамильтониан \mathcal{H} следует включить оператор $\mathcal{H}_{\text{со}}$. Если опустить в (16.1) не зависящие от σ два последних релятивистских члена, то оператор энергии \mathcal{H} для электрона, движущегося в периодическом поле, будет иметь вид

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} ([\nabla V \mathbf{p}] \sigma). \quad (17.12)$$

Соответственно оператор \mathcal{H}_k , действующий на двухкомпонентную функцию u_{nk} , равен

$$\mathcal{H}_k = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + \frac{\hbar k p}{m} + \frac{\hbar}{4m^2c^2} ([\nabla V \mathbf{p}] \sigma) + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (\mathbf{k} [\sigma \nabla V]). \quad (17.13)$$

Оператор \mathcal{H}_k (17.13) можно записать в виде

$$\mathcal{H}_k = \mathcal{H}_0 + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \boldsymbol{\pi}, \quad (17.14)$$

где \mathcal{H}_0 — оператор, совпадающий с (17.2), а вектор $\boldsymbol{\pi}$ согласно (17.13) равен

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} [\sigma \nabla V]. \quad (17.15)$$

Второй член в (17.14), как и в (17.12), смешивает состояния с различной проекцией спина.

Оператор энергии \mathcal{H} (17.12) по-прежнему имеет в качестве группы симметрии пространственную группу G , при этом классификация состояний электрона со спином в периодическом поле должна проводиться по спинорным представлениям пространственных групп. Для спинорных представлений справедливы все результаты, полученные в § 12. Так, каждое неприводимое спинорное представление пространственной группы характеризуется неприводимой звездой $\{\mathbf{k}\}$ вектора \mathbf{k} и индексом неприводимого представления группы волнового вектора G_k .

Как указано в § 12, эти представления могут быть получены по (12.23), если известны проективные представления $\mathcal{D}^k(r)$ группы направлений F_k .

Если без учета спин-орбитального взаимодействия волновые функции $\psi_{s\mathbf{k}}$ в точке \mathbf{k} преобразовывались по представлению \mathcal{D}^k размерности m , то с учетом спиновых функций α и β функции $\psi_{s\mathbf{k}}\alpha$ и $\psi_{s\mathbf{k}}\beta$ образуют базис представления $\mathcal{D}^k \times \mathcal{D}_{1/2}$ размер-

ности $2m$. В соответствии с правилами, изложенными в § 16, для определения характера расщепления зоны за счет спин-орбитального взаимодействия нужно разложить представление $\mathcal{D}^k \times \mathcal{D}_{1/2}$ по неприводимым спинорным представлениям группы волнового вектора \mathcal{D}_v^k :

$$\mathcal{D}^k \times \mathcal{D}_{1/2} = \sum_v c_v \mathcal{D}_v^k, \quad (17.16)$$

где c_v — целые коэффициенты, определяемые на основе теории характеров.

Если представление $\mathcal{D}^k \times \mathcal{D}_{1/2}$ неприводимо, то спин-орбитальное взаимодействие не снимает вырождения зоны. Вместо (17.16) можно раскладывать по неприводимым проективным представлениям группы направлений произведение $\mathcal{D}^k(r) \times \mathcal{D}_{1/2}$. Для точек на границе зоны Бриллюэна прямое произведение проективных представлений $\mathcal{D}^k(r) \times \mathcal{D}_{1/2}$, относящихся к классам K_1 и K_2 соответственно, следует раскладывать по неприводимым представлениям $\mathcal{D}_v^k(r)$, относящимся к классу $K_3 = K_2 K_1$.

Условия совместности справедливы и для спинорных представлений пространственных групп.

Аналитические свойства блоховских функций. Блоховские функции ψ_{nk} как функции непрерывного спектра мы будем нормировать на объем кристалла \mathcal{V} :

$$\int \psi_{nk}^* \psi_{n'k'} d\tau = \langle \psi_{nk} | \psi_{n'k'} \rangle = \mathcal{V} \delta_{nn'} \delta_{kk'}, \quad (17.17)$$

при этом интегрирование в (17.17) проводится по всему объему кристалла. Поскольку $\mathcal{V} = N\Omega_0$, где N — число элементарных ячеек, а Ω_0 — объем одной ячейки, то из периодичности $\psi_{nk}^* \psi_{n'k'}$ и из (17.17) следует, что функции u_{nk} нормированы на объем элементарной ячейки:

$$\langle u_{nk} | u_{n'k'} \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{nk}^* u_{n'k'} d\tau_0 = \delta_{nn'}; \quad (17.18)$$

здесь интегрирование ведется по объему элементарной ячейки.

Отметим, что функции u_{nk} и $u_{n'k'}$ с различными k и k' не ортогональны при $k \neq k'$, так как они являются собственными функциями разных операторов \mathcal{H}_k и $\mathcal{H}_{k'}$.

Рассмотрим поведение волновых функций вблизи точки вырождения k_0 . Пусть в точке k_0 имеется m функций $\psi_{s k_0} = e^{i k_0 x} \times \times u_{s k_0}(x)$ ($s = 1, 2, \dots, m$), относящихся к энергии $E(k_0)$. Сместимся в соседнюю с k_0 точку $k = k_0 + x$. Как указывалось выше, симметрия волновых функций в точке k определяется группой волнового вектора G_k , которая в общем случае является подгруппой G_{k_0} . Поэтому при удалении от точки k_0 зона расщепляется на несколько ветвей, т. е. происходит полное или

частичное снятие вырождения. При малых векторах \mathbf{x} симметрия волновой функции и характер расщепления зоны определяются только направлением \mathbf{x} . Величина расщепления зон зависит, конечно, и от величины вектора \mathbf{x} . Поэтому в любой малой окрестности точки вырождения \mathbf{k}_0 волновые функции $\psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{x}}$, соответствующие каждой из отщепившихся зон $E_i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{x})$, существенно зависят от направления вектора \mathbf{x} и могут быть различными для сколь угодно малых, но различающихся по направлению векторов \mathbf{x} , так как при приближении к точке \mathbf{k}_0 волновые функции $\psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{x}}$ переходят в некоторую комбинацию вырожденных функций $\psi_{s\mathbf{k}_0}$, которая существенным образом зависит от направления подхода к точке \mathbf{k} . Таким образом, волновые функции, соответствующие каждой из отщепившихся зон, как функции \mathbf{k} терпят разрыв в точке \mathbf{k}_0 . В невырожденной зоне волновая функция непрерывна в любой точке \mathbf{k} , так как при подходе с любого направления к \mathbf{k}_0 волновая функция $\psi_{\mathbf{k}_0 + \mathbf{x}}$ переходит в $\psi_{\mathbf{k}_0}$.

Для установления аналитических свойств функций $u_{n\mathbf{k}}$ и энергии $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ полезным является равенство

$$(\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{k}')) \langle u_{n\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} (k_{\alpha} - k'_{\alpha}) \pi_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^{\alpha}, \quad (17.19)$$

которое следует из тождеств

$$\langle u_{n\mathbf{k}}, \mathcal{H}_{\mathbf{k}'} u_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{k}') \langle u_{n\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k}'} \rangle, \quad \langle \mathcal{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}, u_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) \langle u_{n\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k}'} \rangle$$

и самосопряженности оператора $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$. В (17.19) $\pi_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^{\alpha}$ — матричный элемент оператора π^{α} , вычисленный на периодических функциях $u_{n\mathbf{k}}$:

$$\pi_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^{\alpha} = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{n\mathbf{k}}^* \pi^{\alpha} u_{n'\mathbf{k}'} d\tau_0 = p_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^{\alpha} + \frac{\hbar}{4mc^2} [\sigma \nabla V]_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^{\alpha}. \quad (17.20)$$

При учете спин-орбитального взаимодействия $u_{n\mathbf{k}}$, как обычно, является двухкомпонентной функцией.

Рассмотрим сначала невырожденную в точке \mathbf{k}_0 зону n . Положим в равенстве (17.19) $n' = n$ и устремим \mathbf{k}' к \mathbf{k} . Учитывая (17.18) и разлагая $\mathcal{E}_n(\mathbf{k}')$ в ряд вблизи \mathbf{k}_0 , получим

$$\sum_{\alpha} (k_{\alpha} - k'_{\alpha}) \frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial k_{\alpha}} = \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} (k_{\alpha} - k'_{\alpha}) \pi_{n\mathbf{k}, n\mathbf{k}'}^{\alpha}.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} = \frac{\hbar}{m} \pi_{n\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^{\alpha}. \quad (17.21)$$

Так как $\pi_{n\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^{\alpha}$ — непрерывная функция \mathbf{k} , то из (17.21) следует, что в случае невырожденной зоны $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ является непрерывно дифференцируемой функцией \mathbf{k} ,

Перейдем теперь к случаю вырожденной в точке \mathbf{k}_0 зоны. Рассмотрим две ветви спектра i и j и положим $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}$, где λ — произвольное число. Тогда из (17.19) получим

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}) - \mathcal{E}_j(\mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}) \langle u_{i, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}} u_{j, \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}} \rangle = \\ = \frac{\hbar}{m} (1 - \lambda) \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \pi_{i, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}; j, \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (17.22)$$

Устремим теперь $\boldsymbol{\kappa} \rightarrow 0$. Разлагая $\mathcal{E}_j(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa})$ и $\mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa})$ в ряд по $\boldsymbol{\kappa}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_j(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}) &= \mathcal{E}_j(\mathbf{k}_0) + \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{E}_j}{\partial k_{\alpha}} + \dots, \\ \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}) &= \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0) + \lambda \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial k_{\alpha}} + \dots, \end{aligned}$$

и учитывая, что согласно (17.18)

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \langle u_{i, \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}} u_{j, \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}} \rangle = \delta_{ij},$$

а также равенство $\mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0) = \mathcal{E}_j(\mathbf{k}_0)$, получим

$$\delta_{ij} \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial k_{\alpha}}(\mathbf{k}_0) = \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \pi_{i \mathbf{k}_0, j \mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}), \quad (17.23)$$

т. е. оператор $\sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \pi^{\alpha}$, вычисленный на функциях $\lim_{\lambda \rightarrow 0} u_{i, \mathbf{k}_0 + \lambda \boldsymbol{\kappa}}$, диагонален по i и j и

$$\frac{\partial \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0)}{\partial k_{\alpha}} = \frac{\hbar}{m} \pi_{i \mathbf{k}_0, i \mathbf{k}_0}^{\alpha}. \quad (17.24)$$

Поскольку $\pi_{i \mathbf{k}_0, i \mathbf{k}_0}^{\alpha}$ вычислены на волновых функциях, зависящих от направления подхода к точке \mathbf{k}_0 и имеющих поэтому разрыв в этой точке, то и сами матричные элементы, и производная $\frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial k_{\alpha}}$ терпят разрыв в точке \mathbf{k}_0 .

Рассмотрим теперь поведение функции $u_{n, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}}$ вблизи точки \mathbf{k}_0 . Разложим эту функцию по полной системе периодических функций $u_{m \mathbf{k}_0}$. Учитывая, что коэффициенты разложения суть скалярные произведения $\langle u_{n, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}} u_{m \mathbf{k}_0} \rangle$, получим из (17.19)

$$u_{n, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}} = \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha m} \frac{\kappa_{\alpha} \pi_{m \mathbf{k}_0, n \mathbf{k}_0}^{\alpha}}{\mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}) - \mathcal{E}_m(\mathbf{k}_0)} u_{m \mathbf{k}_0}. \quad (17.25)$$

Из (17.25) получим первый член разложения $u_{n, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}}$ в ряд по малому параметру $\boldsymbol{\kappa}$ в случае невырожденной зоны:

$$u_{n, \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}} = u_{n \mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m} \sum_{m \neq n} \frac{\kappa_{\alpha} \pi_{m \mathbf{k}_0, n \mathbf{k}_0}^{\alpha}}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} u_{m \mathbf{k}_0}, \quad (17.26)$$

так как $\mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) - \mathcal{E}_m(\mathbf{k}_0) = E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)$. Из (17.26) следует, что для невырожденной зоны функция $u_{n\mathbf{k}}$ является дифференцируемой функцией \mathbf{k} :

$$\frac{\partial u_{n\mathbf{k}_0}}{\partial k_\alpha^0} = \frac{\hbar}{m} \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{m\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\alpha}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} u_{m\mathbf{k}_0},$$

откуда для матричного элемента оператора $\frac{\partial}{\partial k_\alpha}$ получим

$$\left\langle u_{m\mathbf{k}_0} \frac{\partial}{\partial k_\alpha^0} u_{n\mathbf{k}_0} \right\rangle = \frac{\hbar}{m} \frac{\pi_{m\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\alpha}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} \quad (m \neq n). \quad (17.27)$$

Из (17.26) следует разложение по \varkappa матричных элементов $\pi_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0+\varkappa}^\alpha$:

$$\pi_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0+\varkappa}^\alpha = \pi_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\alpha + \frac{\hbar}{m} \sum_{\beta, m \neq n} \frac{\varkappa_\beta \pi_{n\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^\alpha \pi_{m\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)}, \quad (17.28)$$

и из (17.21) получим дальнейшие члены разложения энергии вблизи точки \mathbf{k}_0 в невырожденной зоне:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0 + \varkappa) &= \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m} \sum_a \varkappa_a \pi_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^a + \\ &+ \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\beta} \varkappa_\alpha \varkappa_\beta \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{n\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^\alpha \pi_{m\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)}. \end{aligned} \quad (17.29)$$

Из (17.29) следует, что

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0)}{\partial k_\alpha^0 \partial k_\beta^0} = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{n\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^\alpha \pi_{m\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)}. \quad (17.30)$$

Аналогичным образом для невырожденной зоны могут быть получены и дальнейшие разложения волновых функций $u_{n, \mathbf{k}_0+\varkappa}$ и энергии $\mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0 + \varkappa)$ по \varkappa . Отсюда следует, что волновые функции и энергия являются аналитическими функциями \mathbf{k} вблизи точек, где нет вырождения зоны.

Для вырожденной зоны суммирование по m в правой части (17.25) разобьем на две части: суммирование по зонам j , относящимся к данной вырожденной зоне, и суммирование по другим зонам m . Тогда при малых \varkappa получим

$$u_{i, \mathbf{k}_0+\varkappa} = u_{i\mathbf{k}_0}(\varkappa) + \frac{\hbar}{m} \sum_{m \neq n} \frac{\varkappa_\alpha \pi_{m\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^\alpha(\varkappa)}{E_i(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} u_{m\mathbf{k}_0}. \quad (17.31)$$

Здесь

$$u_{i\mathbf{k}_0}(\varkappa) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} u_{i, \mathbf{k}_0+\lambda\varkappa}, \quad \pi_{m\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^\alpha(\varkappa) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \pi_{m\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0+\lambda\varkappa}^\alpha. \quad (17.32)$$

Отсюда найдем поправку к матричному элементу $\pi_{i\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0+\boldsymbol{\kappa}}^\alpha$:

$$\pi_{i\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0+\boldsymbol{\kappa}}^\alpha = \pi_{i\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0}^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{\hbar}{m} \sum_{m \neq n_0, \beta} \frac{\kappa_\beta \pi_{i\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) \pi_{m\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0}^\beta(\boldsymbol{\kappa})}{E_i(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)}. \quad (17.33)$$

Разложение энергии вблизи точки вырождения \mathcal{E}_i имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa}) = & \mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha} \pi_{i\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) + \\ & + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha} \kappa_{\beta} \sum_{m \neq i} \frac{\pi_{i\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) \pi_{m\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^{\beta}(\boldsymbol{\kappa})}{E_i(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)}; \end{aligned} \quad (17.34)$$

это разложение формально совпадает с выражением (17.29) для невырожденной зоны. Следует, однако, подчеркнуть существенное отличие (17.34) от (17.29), которое заключается в том, что в (17.34) все матричные элементы зависят от направления вектора $\boldsymbol{\kappa}$, т. е. терпят разрыв при $\boldsymbol{\kappa} = 0$. Поэтому разложение (17.34) для вырожденной зоны не является обычным разложением $\mathcal{E}_i(\mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\kappa})$ в ряд Тейлора, как это имеет место для невырожденной зоны. Так, если $\pi_{i\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) \neq 0$, то в случае вырожденной зоны не существует второй производной $\mathcal{E}_i(\mathbf{k})$, так как $\frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial k_{\alpha}}$ терпит разрыв.

Если в точке вырождения \mathbf{k}_0 все $\pi_{i\mathbf{k}_0, i\mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) \equiv 0$, то согласно (17.34) вторая производная $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_i}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}}$ терпит разрыв в точке вырождения, а из (17.19) следует, что волновые функции $u_{i\mathbf{k}_0}(\boldsymbol{\kappa})$ диагонализуют по i и j квадратичную форму

$$\frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha} \kappa_{\beta} \sum_m \frac{\pi_{i\mathbf{k}_0, m\mathbf{k}_0}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) \pi_{m\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0}^{\beta}(\boldsymbol{\kappa})}{\mathcal{E}_0(\mathbf{k}_0) - \mathcal{E}_m(\mathbf{k}_0)}.$$

Аналитические свойства энергии электрона

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mathcal{E}_n(\mathbf{k})$$

и блоховских волновых функций

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}},$$

очевидно, совпадают со свойствами $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ и $u_{n\mathbf{k}}$, так как $\hbar^2 k^2/2m$ и $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ являются аналитическими функциями вектора \mathbf{k} .

Так, для невырожденной зоны $E_n(\mathbf{k})$ и $\psi_{n\mathbf{k}}$ — аналитические функции вектора \mathbf{k} , и мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} &= \frac{\hbar^2}{m} k_{\alpha} + \frac{\hbar}{m} \pi_{n\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^{\alpha}, \\ \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} &= \frac{\hbar^2}{m} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{n\mathbf{k}, m\mathbf{k}}^{\alpha} \pi_{m\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^{\beta} + \pi_{n\mathbf{k}, m\mathbf{k}}^{\beta} \pi_{m\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^{\alpha}}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (17.35)$$

Второе из равенств (17.35) называется правилом f -сумм. В случае вырожденной зоны первое из равенств (17.35) справедливо всегда, а второе — только в случае равенства нулю $\pi_{ik, ik}^\alpha$.

Рассмотрим теперь оператор скорости $v = \{x\mathcal{H}\} = \pi/m$ электрона в периодическом поле. Оператор скорости диагонален по вектору \mathbf{k} и имеет как междузонные, так и внутризонные матричные элементы:

$$v_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^\alpha = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \psi_{n\mathbf{k}}^* v^\alpha \psi_{n'\mathbf{k}'} d\tau = \frac{\hbar^2}{m} k_\alpha \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{\hbar}{m} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \pi_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}^\alpha. \quad (17.36)$$

Диагональный элемент оператора скорости согласно (17.36) и (17.35) равен

$$v_{n\mathbf{k}, n\mathbf{k}}^\alpha = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}. \quad (17.37)$$

§ 18. ИНВЕРСИЯ ВРЕМЕНИ

Как видно из (15.1), оператор энергии в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием и в отсутствие магнитного поля *) является вещественным и уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (18.1)$$

инвариантно к обращению времени: если в (18.1) заменить t на $-t$ и перейти к комплексно сопряженному уравнению, то получим

$$\mathcal{H}\psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (18.2)$$

Из (18.1) и (18.2) видно, что операция инверсии времени, которую обычно обозначают оператором K , превращает функцию ψ в новую функцию

$$K\psi = \psi^*, \quad (18.3)$$

которая удовлетворяет при вещественном \mathcal{H} тому же уравнению, что и функция ψ . В стационарных условиях уравнение Шредингера принимает вид

$$(\mathcal{H} - E)\psi = 0. \quad (18.4)$$

При вещественном гамильтониане, когда $\mathcal{H}^* = K^{-1}\mathcal{H}K = \mathcal{H}$, собственные функции ψ и $K\psi$ соответствуют одной и той же энер-

*) Уравнения квантовой механики инвариантны к обращению времени при одновременном обращении скоростей, а следовательно, при изменении направлений токов и магнитного поля. Соответственно член в \mathcal{H} , содержащий нечетные степени магнитного поля \mathbf{H} , мнимый и

$$K^{-1}\mathcal{H}(\mathbf{H})K = \mathcal{H}^*(\mathbf{H}) = \mathcal{H}(-\mathbf{H}).$$

В этом случае оператор K превращает $\psi(\mathbf{H})$ в $K\psi(\mathbf{H}) = \psi^*(-\mathbf{H})$ и связывает волновые функции, соответствующие разным значениям энергий $E(\mathbf{H})$ и $E(-\mathbf{H})$.

гии, так же как, например, функции ψ и $g\psi$, где g — один из элементов группы симметрии гамильтониана \mathcal{G} . Поэтому операцию инверсии времени K можно рассматривать как новый элемент симметрии.

Легко показать, что эта операция K коммутирует со всеми преобразованиями пространственной группы G . Так как ψ и ψ^* преобразуются по комплексно сопряженным представлениям \mathcal{D} и \mathcal{D}^* этой группы, то

$$g\psi_i = \sum_j \mathcal{D}_{ji}\psi_j \quad \text{и} \quad g(K\psi_i) = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^*(K\psi_j). \quad (18.5)$$

С другой стороны,

$$Kg\psi_i = K\left(\sum_j \mathcal{D}_{ji}\psi_j\right) = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^*\psi_j^*,$$

т. е.

$$Kg = gK. \quad (18.6)$$

Собственные функции ψ и $K\psi$, удовлетворяющие одному и тому же уравнению (18.4) и соответствующие одной и той же энергии, могут либо быть линейно независимыми, и в этом случае одному собственному значению E соответствуют два независимых набора ортонормированных функций ψ и $K\psi$, либо могут линейно выражаться друг через друга при помощи унитарной матрицы T :

$$K\psi_i = \sum_j T_{ji}\psi_j. \quad (18.7)$$

Очевидно, что в последнем случае представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* эквивалентны.

В случае, если функции ψ и $K\psi$ линейно независимы, они могут преобразовываться либо по эквивалентным представлениям, либо по неэквивалентным.

Таким образом, следует различать три случая*):

а) функции ψ и $K\psi$ линейно зависимы;

б) функции ψ и $K\psi$ линейно независимы и преобразуются по неэквивалентным представлениям \mathcal{D} и \mathcal{D}^* , т. е. $\chi(g) \neq \chi^*(g)$;

с) функции ψ и $K\psi$ линейно независимы и преобразуются по эквивалентным представлениям \mathcal{D} и \mathcal{D}^* , т. е. $\chi(g) = \chi^*(g)$.

Так как линейно независимые функции ψ и $K\psi$ соответствуют одной и той же энергии, то это означает, что в случаях б) и с) инвариантность к инверсии времени приводит к дополнительному вырождению, и в этих случаях представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* , по

*) Указанная классификация представлений, которая является наиболее удобной для физических приложений, несколько отличается от вводимой в большинстве курсов по теории групп, где к случаю а) относят вещественные представления, а к случаям б) и с) — комплексные неэквивалентные и эквивалентные представления. Для обычных представлений обе классификации совпадают, а для спинорных представлений случаи а) и с) в них меняются местами.

которым преобразуются эти функции, надо объединять вместе. При этом в случае b объединяются комплексно сопряженные неэквивалентные представления, а в случае c — эквивалентные. Поэтому практически важно уметь различать эти три случая, т. е. определять, когда инвариантность к инверсии времени накладывает дополнительные требования на волновые функции, связанные с линейной зависимостью функций ψ и $K\psi$, и когда она приводит к дополнительному вырождению.

Для того чтобы получить ответ на этот вопрос, рассмотрим подробнее свойства комплексно сопряженных представлений. В случаях a и c , когда представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* эквивалентны, т. е. их характеры вещественны и совпадают, существует унитарная матрица T , переводящая все матрицы $\mathcal{D}(g)$ в $\mathcal{D}^*(g)$:

$$\mathcal{D}^*(g) = T^{-1} \mathcal{D}(g) T. \quad (18.8)$$

Подчеркнем, что наличие такой матрицы T еще не означает линейной связи (18.7), но если такая связь имеется, то матрицы T в (18.7) и (18.8) совпадают.

Рассмотрим теперь свойства матрицы T . Применим операцию комплексного сопряжения к правой и левой частям равенства (18.8):

$$\mathcal{D}(g) = T^{*-1} \mathcal{D}^*(g) T^*. \quad (18.9)$$

Подставим в (18.9) $\mathcal{D}^*(g)$ из (18.8):

$$\mathcal{D}(g) = (TT^*)^{-1} \mathcal{D}(g) (TT^*). \quad (18.10)$$

Равенство (18.10) означает, что матрица TT^* коммутирует со всеми матрицами $\mathcal{D}(g)$ данного неприводимого представления. Поэтому согласно первой лемме Шура (8.1a) эта матрица должна быть кратна единичной матрице, т. е. $TT^* = cI$ или $T = cT^{*-1} = c\tilde{T}$. Применив операцию транспонирования к обеим частям этого равенства, получим $\tilde{T} = cT = c^2\tilde{T}$. Отсюда $c = \pm 1$, и, следовательно, возможны два случая:

$$T = \tilde{T}, \text{ т. е. } TT^* = I, \text{ или } T = -\tilde{T}, \text{ т. е. } TT^* = -I. \quad (18.11)$$

Очевидно, что для вещественных матриц, т. е. при $\mathcal{D}^* = \mathcal{D}$, матрица T в уравнении (18.8) равна I , т. е. реализуется первая из этих возможностей: $T = \tilde{T}$. Так как при унитарном преобразовании матрицы \mathcal{D} , т. е. при переходе от \mathcal{D} к $S\mathcal{D}S^{-1}$, матрица T переходит в $T' = ST\tilde{S}$, то свойство (18.11) матрицы T при этом не меняется, т. е. $T'T'^* = TT^*$. Поэтому для всякого представления \mathcal{D} , которое может быть сделано вещественным, матрица T должна удовлетворять условию $\tilde{T} = T$.

Следовательно, если $\tilde{T} = -T$, то представление существенно комплексно, т. е. не может быть приведено к вещественному виду.

Покажем, что условие $\tilde{T} = T$ является не только необходимым, для того чтобы представление \mathcal{D} было вещественным, но и достаточным, т. е. что при $\tilde{T} = T$ всегда существует матрица B , приводящая представление \mathcal{D} к вещественному виду:

$$\mathcal{D}'^* = (B^{-1} \mathcal{D} B)^* = B^{-1} \mathcal{D} B = \mathcal{D}'. \quad (18.12)$$

Для этого прежде всего приведем матрицу T посредством унитарного преобразования u к диагональной форме $\tau = u^{-1} T u$, где $\tau_{ii} = e^{i\alpha_{ii}}$, что всегда возможно, так как матрица T унитарна. Перейдем от равенства

$$T u = u \tau \quad (18.13)$$

к транспонированному,

$$\tilde{u} \tilde{T} = \tilde{\tau} \tilde{u}.$$

Учитывая, что τ как диагональная матрица симметрична, т. е. $\tilde{\tau} = \tau$, а $\tilde{T} = T$ и $\tilde{u} = u^{*-1}$, получим

$$T u^* = u^* \tau. \quad (18.14)$$

Сокупность n чисел u_{lk} ($l = 1, 2, \dots, n$), где n — размерность матрицы T , называется k -м собственным вектором матрицы T , соответствующим собственному значению τ_k , т. е. k -му корню определителя $|T - \tau| = 0$, и обозначается символом u_k . Так как собственный вектор согласно (18.13) определяется системой однородных уравнений $\sum_l (T_{ll} - \tau_k \delta_{li}) u_{lk} = 0$, то он задается с точностью до постоянного множителя c_k . Для того чтобы матрица u оставалась унитарной, необходимо, чтобы $c_k c_k^* = 1$, т. е. $c_k = e^{i\varphi_k}$. Это означает, что матрицы u и u^* в (18.13) и (18.14) совпадают с точностью до диагональной матрицы c с элементами $c_{kk'} = e^{i\varphi_k} \delta_{kk'}$ и, следовательно, $u^* = u c$, откуда

$$(u c^{1/2})^* = u c^{1/2}, \quad (18.15)$$

где $c^{1/2}$ — матрица с элементами $c_{kk'}^{1/2} = e^{i\varphi_k/2} \delta_{kk'}$. Заменим в (18.13) u на $u c^{1/2}$, т. е. в соответствии с (18.15) будем считать матрицу u в (18.13) вещественной и унитарной. Такая матрица, удовлетворяющая условию $u^{-1} = \tilde{u}$, называется ортогональной. Введем матрицу B , равную

$$B = u \theta u^{-1}, \quad (18.16)$$

где $\theta^2 = \tau$, т. е. θ — диагональная матрица с элементами $\theta_{ii} = \tau_{ii}^{1/2} = e^{i\alpha_{ii}/2}$. Эта матрица, согласно (18.13), удовлетворяет следующим соотношениям:

$$B^2 = u \tau u^{-1} = T, \quad \tilde{B} = \tilde{u}^{-1} \tilde{\theta} \tilde{u} = u \theta u^{-1} = B. \quad (18.17)$$

Проверим, что матрица B , свойства которой определяются соотношениями (18.17), действительно удовлетворяет уравнениям

(18.12), т. е. приводит \mathcal{D} к вещественному виду. Согласно (18.8) и (18.17)

$$\mathcal{D}' = (\mathbf{B}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{B})^* = \mathbf{B} \mathcal{D}^* \mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B} \mathbf{T}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{T} \mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \mathcal{D} \mathbf{B} = \mathcal{D}'.$$

Таким образом, условие $\mathbf{T} \mathbf{T}^* = \mathbf{I}$ является критерием вещественности представлений. При этом, как указывалось в § 9, вещественными представлениями называются представления, все матрицы которых могут быть приведены к вещественному виду, независимо от того, проведено ли фактически такое преобразование или нет.

Рассмотрим теперь, как связаны условия, накладываемые на матрицу \mathbf{T} в (18.8), с указанными выше свойствами функций ψ и $K\psi$. Допустим сперва, что между функциями ψ и $K\psi$ имеется связь (18.7), т. е. имеет место случай *a*. Тогда, применяя операцию K к (18.7), получим

$$K^2 \psi_i = \sum_j T_{ji}^* K \psi_j = \sum_{jl} T_{ji}^* T_{lj} \psi_l = \sum_l (T T^*)_{li} \psi_l. \quad (18.18)$$

Так как в данном случае $K^2 \psi = K \psi^* = \psi$, т. е.

$$K^2 = 1, \quad (18.19)$$

то, следовательно, матрица \mathbf{T} должна удовлетворять условию $\mathbf{T} \mathbf{T}^* = \mathbf{I}$, т. е. представление \mathcal{D} , по которому преобразуются эти функции, вещественно.

Условие (18.19), однако, справедливо лишь для обычных представлений, т. е. без учета спина электрона.

Как отмечалось в § 16, уравнение Шредингера — Паули, в отличие от уравнения (18.1), включает комплексный член, описывающий спин-орбитальное взаимодействие:

$$\mathcal{H}_{\text{co}} = -\frac{i\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} [\nabla V \nabla]). \quad (18.20)$$

Поэтому при замене t на $-t$ и переходе к комплексно сопряженному уравнению \mathcal{H}_{co} переходит в $\mathcal{H}_{\text{co}}^*$, что соответствует замене $\boldsymbol{\sigma}_i$ на $-\boldsymbol{\sigma}_i^*$. Таким образом, в этом случае

$$\mathcal{H}^*(\boldsymbol{\sigma}_i) = \mathcal{H}(-\boldsymbol{\sigma}_i^*).$$

Однако можно перейти от функций ψ^* , являющихся решением уравнения $(\mathcal{H}^* - E)\psi^* = 0$, к функциям $\mathbf{S}\psi$, где \mathbf{S} — унитарный оператор, действующий на спиновые матрицы, выбрав \mathbf{S} таким образом, чтобы в новом представлении

$$\mathbf{S}^{-1} \mathcal{H}^*(\boldsymbol{\sigma}_i) \mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1} \mathcal{H}(-\boldsymbol{\sigma}_i^*) \mathbf{S} = \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}_i). \quad (18.21)$$

Из (18.20) видно, что так как $\boldsymbol{\sigma}_x^* = \boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y^* = -\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z^* = \boldsymbol{\sigma}_z$, то для выполнения (18.21) матрица \mathbf{S} должна удовлетворять уравнениям

$$\mathbf{S}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{S} = -\boldsymbol{\sigma}_x, \quad \mathbf{S}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_y \mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma}_y, \quad \mathbf{S}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{S} = -\boldsymbol{\sigma}_z. \quad (18.22)$$

Учитывая, что матрицы σ_i подчиняются соотношениям

$$\sigma_i \sigma_k = i \sigma_l \delta_{ikl},$$

где δ_{ikl} — единичный антисимметричный тензор, легко проверить, что унитарная матрица S , удовлетворяющая (18.22), с точностью до произвольного фазового множителя совпадает с σ_y . Этот фазовый множитель можно положить равным единице, выбрав

$$S = S^{-1} = \sigma_y.$$

Следовательно, функция $\sigma_y \psi^* = \sigma_y K_0 \psi$, где K_0 — операция комплексного сопряжения, удовлетворяет тому же уравнению, что и функция ψ . Эту функцию

$$\sigma_y \begin{vmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -i\psi_2^* \\ i\psi_1^* \end{vmatrix}$$

будем рассматривать как результат применения оператора инверсии времени K к функции $\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}$. Это означает, что для спиновых функций оператор инверсии времени имеет вид

$$K\psi = \sigma_y K_0 \psi = \sigma_y \psi^*. \quad (18.23)$$

Проверим, что оператор K , определяемый соотношением (18.23), коммутирует со всеми элементами пространственной группы, т. е. удовлетворяет условию (18.6). Согласно (16.3) и (18.23)

$$gK\psi(x) = g\sigma_y \psi^*(x) = \mathcal{D}_{1/2}(g) \sigma_y \psi^*(g^{-1}x),$$

а

$$Kg\psi(x) = \sigma_y (\mathcal{D}_{1/2}(g) \psi(g^{-1}x))^* = \sigma_y \mathcal{D}_{1/2}^*(g) \psi^*(g^{-1}x),$$

где $\mathcal{D}_{1/2}(g)$ — матрица, осуществляющая преобразование спинов со спином $1/2$ при преобразовании g . Согласно (16.2) эта матрица в общем случае имеет вид

$$\mathcal{D}_{1/2}(g) = \begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{vmatrix}.$$

Легко проверить, что $\sigma_y \mathcal{D}_{1/2}^*(g) = \mathcal{D}_{1/2}(g) \sigma_y$ и, следовательно, соотношение коммутации (18.6) действительно выполняется. Из условия коммутации следует, что спинорные функции ψ и $K\psi$ преобразуются по комплексно сопряженным представлениям. Действительно, если

$$g\psi_i = \sum_j \mathcal{D}_{ji} \psi_j,$$

то согласно (18.6)

$$gK\psi_i = Kg\psi_i = \sigma_y K_0 \sum_j \mathcal{D}_{ji} \psi_j = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^* \sigma_y \psi_j^* = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^* (K\psi)_j.$$

Для спинорных функций также могут иметь место указанные выше три случая a , b и c . При этом в случаях a и c , когда представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* эквивалентны, существует матрица T , переводящая \mathcal{D} в \mathcal{D}^* и удовлетворяющая уравнениям (18.8) — (18.11) и (18.18).

Однако для спинорных функций

$$K^2\psi = \sigma_y K_0 \sigma_y K_0 \psi = \sigma_y \sigma_y^* \psi = -\psi,$$

т. е. в отличие от (18.19) в этом случае

$$K^2 = -1; \quad (18.24)$$

следовательно, в случае a , когда имеется линейная связь (18.7) между функциями ψ и $K\psi$, матрица T в случае спинорных функций согласно (18.24) удовлетворяет условию

$$TT^* = K^2 I = -I,$$

т. е. представление \mathcal{D} , по которому преобразуются функции ψ , является существенно комплексным и эквивалентно представлению \mathcal{D}^* , по которому преобразуются функции $K\psi$.

Таким образом, мы показали, что условие

$$TT^* = K^2 I \text{ или } \tilde{T} = K^2 T, \text{ где } K^2 = \begin{cases} +1 & \text{для обычных} \\ & \text{представлений,} \\ -1 & \text{для спинорных} \\ & \text{представлений,} \end{cases} \quad (18.25)$$

является необходимым следствием линейной зависимости ψ и $K\psi$.

Покажем теперь, что это условие является достаточным, т. е. что при $TT^* = K^2 I$ функции ψ и $K\psi$ должны быть линейно зависимыми, если только нет случайного вырождения, т. е. случайного совпадения энергий двух несвязанных представлений.

Составим функции

$$\psi_{i+} = \psi_i + \Theta_i, \quad \text{где } \Theta = TK\psi,$$

а T — матрица, определяемая уравнением (18.8). При всех операциях пространственной группы функции ψ_+ преобразуются друг через друга: действительно, согласно (18.8) $T\mathcal{D}^* = \mathcal{D}T$, и

$$\mathcal{D}\psi_+ = \mathcal{D}\psi + TK\mathcal{D}\psi = \mathcal{D}\psi + T\mathcal{D}^*K\psi = \mathcal{D}\psi_+.$$

При инверсии времени они также преобразуются друг в друга, так как в соответствии с (18.25)

$$K\psi_+ = K\psi + KTK\psi = T^{-1}\Theta + T^{-1}K^4\psi = T^{-1}\psi_+.$$

Легко видеть, что аналогичное соотношение выполняется и для функций $\psi_{i-} = \psi_i - \Theta_i$.

Таким образом, при $TT^* = K^2 I$ можно составить два набора функций ψ_+ и ψ_- , преобразующихся независимо друг через друга при всех операциях пространственной группы и инверсии

времени. Если эти функции независимы, то имеет место случайное вырождение. Если же такого вырождения нет, то либо функции ψ_- должны линейно выражаться через ψ_+ , либо одни из этих функций должны тождественно обращаться в нуль. В обоих случаях ψ и $K\psi$ должны быть линейно зависимы.

Таким образом, условие (18.25) является необходимым и достаточным для реализации случая a . Следовательно, в альтернативном случае c , когда функции ψ и $K\psi$ преобразуются по эквивалентным представлениям, но являются линейно независимыми, т. е. когда инверсия времени приводит к дополнительному вырождению, должна реализоваться вторая из возможностей, предоставляемых условием (18.11). Таким образом,

$$\begin{aligned} \text{в случае } a \quad \tilde{T} &= K^2 T, \quad \text{т. е. } TT^* = K^2 I; \\ \text{в случае } c \quad \tilde{T} &= -K^2 T, \quad \text{т. е. } TT^* = -K^2 I. \end{aligned} \quad (18.26)$$

Фробениус и Шур показали, что, используя свойства матрицы T , можно установить, является ли представление вещественным или комплексным, зная лишь его характеры: если сумма характеров квадратов элементов группы равна числу элементов группы h , то $T = \tilde{T}$ и представление вещественно; если эта сумма равна $-h$, то $T = -\tilde{T}$ и представление комплексно и эквивалентно сопряженному, и если сумма равна нулю, то представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* комплексны и неэквивалентны.

Поскольку нас интересует возможность различать случаи b и c , когда инверсия времени приводит к дополнительному вырождению, и случай a , когда такое вырождение отсутствует, то этот критерий можно записать в виде

$$\Sigma = \frac{1}{h} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi(g^2) = \begin{cases} K^2 - \text{случай } a, \\ 0 - \text{случай } b, \\ -K^2 - \text{случай } c. \end{cases} \quad (18.27)$$

Докажем эту теорему.

Для случая b формула (18.27) непосредственно следует из соотношения ортогональности (8.10). Согласно (8.15)

$$\Sigma = \frac{1}{h} \sum_g \chi_\mu(g^2) = \frac{1}{h} \sum_{gi} \mathcal{D}_{ii}^\mu(g^2) = \frac{1}{h} \sum_{gik} \mathcal{D}_{ik}^\mu(g) \mathcal{D}_{ki}^\mu(g). \quad (18.28)$$

Для комплексных неэквивалентных представлений $\mathcal{D}_{ki}^\mu(g) = = \mathcal{D}_{ki}^{\lambda^*}(g)$, и так как $\mu \neq \lambda$, то согласно (8.10) эта сумма равна нулю.

В случаях a и c , когда представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* эквивалентны, выразим \mathcal{D}_{ki}^μ в (18.28) через $\mathcal{D}_{k'i'}^{\mu^*}$ согласно (18.8). Тогда,

используя соотношение ортогональности (8.10), получим

$$\begin{aligned} \Sigma &= \frac{1}{h} \sum_g \sum_{iklm} \mathcal{D}_{ik}^\mu(g) T_{kl} \mathcal{D}_{lm}^{*\mu} T_{mi}^{-1} = \frac{1}{h} \sum_{iklm} T_{kl} T_{mi}^{-1} \sum_g \mathcal{D}_{ik}^\mu(g) \mathcal{D}_{lm}^{*\mu}(g) = \\ &= \frac{1}{n_\mu} \sum_{iklm} T_{kl} T_{mi}^{-1} \delta_{li} \delta_{km} = \frac{1}{n_\mu} \sum_{ik} T_{ki} T_{ki}^{-1} = \frac{1}{n_\mu} \sum_i (\mathbf{T}^* \mathbf{T})_{ii}. \end{aligned}$$

Согласно (18.26) эта сумма равна K^2 в случае a и $-K^2$ в случае c .

Формула (18.27) непосредственно применима для точечных и вообще конечных групп. Легко проверить, что для обычных представлений точечных групп все представления с вещественными характерами вещественны, т. е. относятся к случаю a , а все представления с комплексными характерами — к случаю b и, следовательно, должны объединяться попарно.

Для спинорных представлений этих групп также следует объединять все представления с комплексными характерами, а также удваивать все одномерные представления. Действительно, при $\tilde{\mathbf{T}} = -\mathbf{T}$

$$\text{Det } \mathbf{T} = \text{Det } \tilde{\mathbf{T}} = \text{Det } (-\mathbf{T}) = (-1)^{n_\mu} \text{Det } \mathbf{T}.$$

Следовательно, в случае a спинорные представления должны иметь четную размерность n_μ , и поэтому одномерные представления с вещественным характером всегда относятся к случаю c . Все остальные спинорные представления с вещественными характерами относятся к случаю a .

Однако для пространственных групп в случае, когда звезда включает более чем одну точку, эти простые правила неприменимы, так как обычно задаются лишь представления группы волнового вектора, а эти представления могут иметь комплексные характеры, даже если полное представление пространственной группы вещественно. Поэтому прежде всего преобразуем критерий (18.27) для пространственных групп. Элементы пространственной группы можно представить в виде произведения основных элементов группы $g' = (r|\tau)$, включающих лишь непримитивные трансляции, на элементы группы трансляций $(e|\mathbf{t})$. Последнюю группу можно формально сделать конечной, введя обычные циклические граничные условия Борна — Кармана.

Так как $(r|\tau + \mathbf{t})^2 = (r^2|\tau + r\tau + \mathbf{t} + r\mathbf{t})$, то согласно (12.27)

$$\begin{aligned} \chi[(r|\tau + \mathbf{t})^2] &= \sum_i \chi_{k_i}(g^2) e^{-i\mathbf{k}_i(\mathbf{t} + g\mathbf{t})} = \\ &= \sum_i \chi_{k_i}(g^2) e^{-i\mathbf{t}(\mathbf{k}_i + g^{-1}\mathbf{k}_i)}, \quad g \in G', \quad (18.29) \end{aligned}$$

где суммирование ведется по всем лучам \mathbf{k}_i звезды $\{\mathbf{k}\}$. Поэтому при суммировании по \mathbf{t} в (18.27) останутся лишь члены с $\mathbf{k}_i + g\mathbf{k}_i = 0$, причем число одинаковых слагаемых равно числу

элементов группы трансляций, т. е. полному числу h элементов пространственной группы, деленному на число основных элементов h' (элементов, не содержащих примитивных трансляций \mathbf{t}). Поэтому суммирование в (18.27) можно вести лишь по основным элементам g' , заменив h на h' :

$$\Sigma = \frac{1}{h} \sum_{g \in G} \chi(g^2) = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'} \sum_i \chi_{\mathbf{k}_i}(g^2) \delta_{\mathbf{k}_i, -g\mathbf{k}_i}. \quad (18.30)$$

Здесь, как обычно, векторы, отличающиеся на \mathbf{b} , где \mathbf{b} — вектор обратной решетки, считаются равными, т. е. $\mathbf{k}_i + g\mathbf{k}_i$ может быть равно нулю или \mathbf{b} .

Учитывая, что согласно (12.24)

$$\chi_{\mathbf{k}_i}(g^2) = \chi_{g_i\mathbf{k}}(g^2) = \chi_{\mathbf{k}}(g_i^{-1}g^2g_i),$$

где g_i — фиксированная операция из числа элементов, превращающих $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i$ в \mathbf{k}_i , сумму (18.30) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \Sigma &= \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'} \sum_i \chi_{\mathbf{k}}(g_i^{-1}g^2g_i) \delta_{g_i\mathbf{k}, -gg_i\mathbf{k}} = \\ &= \frac{1}{h'} \sum_i \sum_{g \in G'} \chi_{\mathbf{k}}[(g_i^{-1}gg_i)^2] \delta_{\mathbf{k}, -g_i^{-1}gg_i\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (18.31)$$

Когда элемент g в этой сумме пробегает все значения от e до $g_{h'}$, элемент $g' = g_i^{-1}gg_i$ пробегает в другом порядке значения, совпадающие с g или отличающиеся от него на целочисленную трансляцию. Фазовые множители, связанные с этими трансляциями, для элементов g , удовлетворяющих условию $\mathbf{k} + g\mathbf{k} = 0$, обратятся в единицу. Поэтому каждая из сумм по g в (18.31) не будет зависеть от индекса i и суммирование по i сведется к умножению на число лучей звезды f . В результате критерий (18.27) для пространственных групп примет вид

$$\Sigma = \frac{f}{h'} \sum_{g \in G'_k} \chi_{\mathbf{k}}(g^2) \delta_{\mathbf{k}, -g\mathbf{k}} = \begin{cases} K^2 & \text{— случай } a, \\ 0 & \text{— случай } b, \\ -K^2 & \text{— случай } c. \end{cases} \quad (18.32)$$

Здесь h'/f — число основных элементов группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$, т. е. элементов, не содержащих примитивных трансляций. Критерий (18.32) был выведен впервые Херрингом [13.2]. Суммирование в (18.32) ведется по основным элементам группы волнового вектора $g^2 \in G'_k$, удовлетворяющим условию

$$g\mathbf{k} = -\mathbf{k}. \quad (18.33)$$

Очевидно, что для спинорных представлений суммирование в (18.27) или (18.32) следует вести по всем основным элементам двойной группы, т. е. группы, включающей элементы g^2 и $(gQ)^2$.

Однако, так как $(gQ)^2 = g^2Q^2 = g^2$, то фактически достаточно суммировать лишь по элементам обычной группы. Конечно, характеры для этих элементов надо брать из таблиц соответствующих спинорных представлений данной группы *).

Отметим, что для точек, не находящихся на краю зоны Бриллюэна, значение суммы (18.32) не зависит от наличия в элементе g непримитивных трансляций, и вместо $\chi(g^2)$ в этом случае можно подставлять значения характеров $\chi(r^2)$ представлений точечной группы направлений, соответствующих данной группе G_k . Действительно, так как суммирование в (18.32) ведется лишь по элементам $g = (r|\tau)$, удовлетворяющим условию (18.33), то для точек внутри зоны

$$\chi(g^2) = \chi(r^2) \exp[-ik(r\tau + \tau)] = \chi(r^2) \exp[-i\tau(r^{-1}k + k)] = \chi(r^2).$$

Рассмотрим теперь, к каким следствиям приводит наличие или отсутствие линейной связи между функциями ψ и $K\psi$ для пространственных групп.

Как указывалось выше, в случаях b и c , когда функции ψ и $K\psi$ линейно независимы, представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* , по которым преобразуются эти функции, объединяются вместе. Однако для пространственных групп функции $\psi = u_k e^{ikx}$ и $K\psi = (Ku_k) e^{-ikx}$ относятся, вообще говоря, к разным лучам звезд $\{k\}$ и $\{-k\}$ и инверсия времени переводит звезду $\{k\}$ в звезду $\{-k\}$. Поэтому при объединении представлений существенна связь между этими звездами, и для каждого из рассмотренных выше случаев следует различать три возможности:

1) точки k и $-k$ эквивалентны, т. е. $k = -k$;

2) k не эквивалентно $-k$, но пространственная группа содержит элемент R , обращающий k в $-k$:

$$Rk = -k;$$

3) точки k и $-k$ входят в разные звезды.

В последнем случае среди элементов группы нет ни одного обращающего k в $-k$ и, следовательно, сумма (18.32) равна нулю, т. е. представления \mathcal{D} и \mathcal{D}^* комплексны и неэквивалентны, т. е. при этом может реализоваться только случай b . Объединение этих представлений сводится лишь к объединению звезд $\{k\}$ и $\{-k\}$ и, таким образом, инверсия времени приводит к равенству энергии в точках k и $-k$:

$$E(k) = E(-k). \quad (18.34)$$

*) При использовании таблиц проективных представлений надо иметь в виду, что элемент $g^2 = (r^2|r\tau + \tau)$ может содержать примитивную трансляцию t , а также элемент Q . Соответственно его характер будет отличаться от характера проективного представления для элемента $(r^2|\tau, \tau)$ фазовым множителем $\exp(-ikt)$, а если r^2 включает Q , то и дополнительным множителем -1 .

Конечно, условие (18.34) справедливо и во всех остальных случаях, однако в этих случаях оно является следствием пространственной симметрии. Таким образом, в указанном выше случае b_3 объединение представлений полной пространственной группы не приводит к объединению представлений групп волнового вектора.

В случае a_1 наличие линейной связи между функциями ψ и $K\psi$ означает линейную связь между функциями $\psi_{\mathbf{k}}$ и $K\psi_{\mathbf{k}}$, относящимися к одному лучу звезды.

В случае a_2 такая связь имеется между функциями $\psi_{\mathbf{k}}$ и $KR\psi_{\mathbf{k}}$, также относящимися к одному лучу.

В остальных случаях b_1 , b_2 , c_1 и c_2 объединение представлений пространственной группы приводит к объединению представлений групп волнового вектора, т. е. к дополнительному вырождению зон в соответствующих точках \mathbf{k} -пространства *). При этом в случае b_1 объединяются сопряженные представления $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}$ и $\mathcal{D}^{*\mathbf{k}}$, т. е. представления с сопряженными характерами, а в случаях c_1 и c_2 — эквивалентные представления, т. е. представления с совпадающими характерами.

Сложнее обстоит дело в случае b_2 , когда базисом объединяемых представлений $\mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}}$ и $\mathcal{D}_{\lambda}^{\mathbf{k}}$, как указано выше, являются функции ψ_i^{μ} и $\psi_i^{\lambda} = KR\psi_i^{\mu}$, где R — операция, обращающая \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$, и поэтому представление μ группы волнового вектора является комплексно сопряженным не по отношению к представлению $\mathcal{D}_{\lambda}^{\mathbf{k}}$, а к представлению $\mathcal{D}_{\lambda}^{-\mathbf{k}}$, относящемуся к точке $-\mathbf{k}$, базисом которого являются функции $\psi_i^{\lambda, -\mathbf{k}} = R\psi_i^{\lambda}$. При этом согласно (12.24)

$$\mathcal{D}_{\lambda i j}^{-\mathbf{k}}(g) = \mathcal{D}_{\lambda i j}^{\mathbf{k}}(R^{-1}gR)$$

и соответственно

$$\mathcal{D}_{\mu i j}^{\mathbf{k}}(g) = \mathcal{D}_{\lambda i j}^{*\mathbf{k}}(R^{-1}gR),$$

откуда

$$\chi_{\mu}^{\mathbf{k}}(g) = \chi_{\lambda}^{*\mathbf{k}}(R^{-1}gR). \quad (18.35)$$

Формула (18.35) определяет характеры представления $\mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}}$, которые надо объединять с $\mathcal{D}_{\lambda}^{\mathbf{k}}$. Так как элемент R не входит в группу волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$, то элементы g и $R^{-1}gR$ могут

*) Так, из критерия Херринга сразу следует, что в кристаллах с центром инверсии все термы в произвольной точке зоны Бриллюэна с учетом спина по крайней мере двукратно вырождены. Действительно, если группа волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$ не содержит ни одного элемента, кроме единичного, то единственным элементом, обращающим \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$, является инверсия, так как при наличии еще одного такого элемента g в группу $G_{\mathbf{k}}$ входил бы элемент $gi \neq e$. Поэтому $\Sigma = \chi(i|\tau)^2 = \chi(e|\tau + i\tau) = \chi(e|0) = 1$. Следовательно, согласно (18.32) спинорные представления в этом случае относятся к случаю c , т. е. они комплексны и объединяются попарно.

входить в разные классы, и поэтому характеры представлений \mathcal{D}_μ^k и \mathcal{D}_λ^k вообще говоря не являются взаимно сопряженными. Если среди элементов $R = (\rho | \tau)$ имеется такой элемент $R' = (\rho' | \tau')$, что ρ' коммутирует со всеми элементами точечной группы r , соответствующими элементам группы волнового вектора $g = (r | \tau)$, т. е.

$$R'^{-1}gR' = (r | \tau + t'), \quad (18.36)$$

где $t' = \rho'^{-1}\tau - \tau + r\rho'^{-1}\tau' - \rho'^{-1}\tau'$ — одна из примитивных трансляций, то в качестве элемента R в (18.35) удобно выбрать этот элемент R' . Тогда согласно (18.35) и (18.36)

$$\chi_\mu^k(g) = \chi_\lambda^{k*}(g) e^{-ikt'}. \quad (18.37)$$

Например, если в группу направлений входит операция инверсии, которая коммутирует со всеми элементами точечной группы, то, выбрав $R = (i | \tau_1)$, получим $t' = \tau_1 - r\tau_1 - 2\tau$.

Очевидно, что формулы (18.35) и (18.37) справедливы и в случаях a_2 и c_2 , когда представления \mathcal{D}_λ^k и \mathcal{D}_μ^k эквивалентны, т. е. их характеры совпадают. Уравнение (18.35) накладывает на эти характеры условие

$$\chi_\lambda^k(g) = \chi_\lambda^{k*}(R^{-1}gR), \quad (18.38)$$

из которого видно, что в случаях a_2 и c_2 вещественными являются не только характеры полного представления пространственной группы, равные сумме характеров представления для всех точек звезды, но и попарные суммы характеров представлений групп волновых векторов противоположных лучей k и $-k$, которые согласно (18.37) и (12.24) равны

$$\chi_\lambda^k(g) + \chi_\lambda^{-k}(g) = \chi_\lambda^k(g) + \chi_\lambda^k(R^{-1}gR) = 2 \operatorname{Re} \chi_\lambda^k(g).$$

Конечно, сами характеры представлений группы волнового вектора при этом могут быть комплексными. В случаях a_1 и c_1 , когда точки k и $-k$ эквивалентны и $R = (e | 0)$, эти характеры, как следует из (18.37), всегда вещественны.

В заключение отметим, что операция инверсии времени не может быть обычным образом включена в одну группу вместе с операциями симметрии. Причина этого заключается в том, что оператор K является антилинейным и антиунитарным оператором.

Действительно, для линейных и унитарных операторов, например операторов пространственной симметрии, при $a = \text{const}$ имеют место соотношения

$$\mathcal{D}(a\psi) = a\mathcal{D}\psi \quad (18.39)$$

и

$$\langle \mathcal{D}\psi_1 | \mathcal{D}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 \mathcal{D}^+ \mathcal{D}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 \psi_2 \rangle, \quad (18.40)$$

где $\langle \psi_1 \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 d\tau$ — интеграл по конфигурационному пространству. Для оператора K , определяемого уравнениями (18.3) или (18.23), эти соотношения имеют другой вид:

$$K(a\psi) = a^* K\psi \quad (18.41)$$

и

$$\langle K\psi_1 | K\psi_2 \rangle = \langle K_0\psi_1 | K_0\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 \psi_2 \rangle^*. \quad (18.42)$$

Для спиновых функций, когда K определяется соотношениями (18.23), последнее равенство является следствием унитарности преобразования σ_y .

Рассмотрим теперь, какие дополнительные условия накладывает инвариантность к инверсии времени на матричные элементы оператора V :

$$\langle \psi_1 V \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* V \psi_2 d\tau.$$

Согласно (18.42)

$$\langle \psi_1 V \psi_2 \rangle^* = \langle K\psi_1, KV\psi_2 \rangle = \langle K\psi_1, KVK^{-1}K\psi_2 \rangle.$$

С другой стороны

$$\langle \psi_1 V \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 V^+ \psi_1 \rangle.$$

Поэтому

$$\langle \psi_1 V \psi_2 \rangle = \langle K\psi_1, KVK^{-1}K\psi_2 \rangle^* = \langle K\psi_2, KV^+K^{-1}K\psi_1 \rangle. \quad (18.43)$$

Здесь мы учли, что $(KVK^{-1})^+ = KV^+K^{-1}$.

Будем рассматривать операцию $\Theta V = KV^+K^{-1}$ как результат действия инверсии времени на оператор. Так как $\Theta^2 V = V$, то любой оператор V можно разложить на два оператора:

$$V = V_+ + V_-, \quad \text{где } V_+ = \frac{1}{2}(V + \Theta V) \text{ и } V_- = \frac{1}{2}(V - \Theta V).$$

При этом

$$\Theta V_{\pm} = KV_{\pm}^+K^{-1} = fV_{\pm}, \quad \text{где } f = \begin{cases} +1 & \text{для } V_+, \\ -1 & \text{для } V_-. \end{cases} \quad (18.44)$$

Соответственно оператор V_+ будем называть четным, а V_- — нечетным по отношению к инверсии времени. Это название связано с тем, что для четных операторов среднее значение $\bar{V}(t) = \langle \psi V \psi \rangle$ не меняется при замене t на $-t$, т. е. при замене ψ на $K\psi$, тогда как для нечетных оно меняет знак при такой замене. Действительно, согласно (18.43), (18.44)

$$K\bar{V} = \langle K\psi V K\psi \rangle = \langle K^2\psi KV^+K^{-1}K^2\psi \rangle = f\langle \psi V \psi \rangle = f\bar{V}. \quad (18.45)$$

Поэтому операторы величин, не меняющих знак при инверсии времени, например координат, энергии, — четные, а операторы величин, меняющих знак при замене t на $-t$, например скоростей, импульсов, токов, — нечетные. При этом операторы V ,

соответствующие вещественным величинам \bar{V} , эрмитовы, т. е. для них $V^+ = V$, причем если эти операторы не действуют на спиновые переменные, то $KV^+K^{-1} = KVK^{-1} = V^*$.

Таким образом, для четных или нечетных операторов инвариантность к инверсии времени накладывает согласно (18.43) и (18.44) дополнительное условие на матричные элементы:

$$\langle \psi_i V \psi_j \rangle = f \langle K \psi_j V K \psi_i \rangle, \quad \text{где } f = \pm 1. \quad (18.46)$$

Из (18.46) можно получить два полезных соотношения для матричных элементов от крамерсово сопряженных функций. Так, если $\psi_i = \psi_j$, то в соответствии с (18.45)

$$\langle K \psi_i V K \psi_i \rangle = f \langle \psi_i V \psi_i \rangle. \quad (18.47)$$

Положим теперь $\psi_j = K \psi_i$, тогда из (18.46) следует, что

$$\langle \psi_i V K \psi_i \rangle = f K^2 \langle \psi_i V K \psi_i \rangle,$$

откуда видно, что

$$\langle \psi_i V K \psi_i \rangle = 0 \quad \text{при } f K^2 = -1, \quad (18.48)$$

т. е. матричные элементы четного оператора на крамерсово сопряженных спинорных функциях равны нулю, а у нечетного оператора равны нулю матричные элементы на комплексно сопряженных координатных функциях.

В заключение заметим, что хотя операция K является антиунитарной, ее можно объединить вместе с унитарными операциями g в особую группу. При этом функции ψ и $K\psi$, если они линейно независимы, также объединяются и образуют представление этой группы, называемое копредставлением, которое было введено впервые Вигнером [1. 1]. Свойства таких копредставлений, естественно, отличаются от свойств обычных представлений. Они подробно рассмотрены в работе [13.4]. При рассмотрении влияния инверсии времени на спектр, правила отбора и другие характеристики можно либо сразу использовать эти копредставления, либо исходить из обычных представлений пространственных или точечных групп, а влияние инверсии времени учитывать дополнительно. Оба пути ведут к одним и тем же результатам. В настоящей книге используется второй способ, который нам представляется физически более наглядным.

§ 19. ПРАВИЛА ОТБОРА

В теории возмущений, теории квантовых переходов и т. п. необходимо знать матричные элементы заданного оператора V между известными волновыми функциями ψ :

$$V_{ij} = \langle \psi_i V \psi_j \rangle = \int \psi_i^* V \psi_j dx. \quad (19.1)$$

Например, квадрат модуля матричного элемента $|V_{ij}|^2$ определяет вероятность перехода из состояния ψ_i в состояние ψ_j под действием возмущения V . В ряде задач нет необходимости явно вычислять эти матричные элементы, а достаточно выяснить, будут ли соответствующие интегралы отличны от нуля, найти число линейно независимых компонент V_{ij} и установить связь между различными линейно зависимыми матричными элементами.

Так как любой оператор V можно представить в виде суммы l -х компонент операторов $V^{\kappa l}$, преобразующихся по неприводимому представлению κ группы симметрии \mathcal{G} гамильтониана \mathcal{H}_0 , собственными функциями которого являются ψ_i и ψ_j , то далее мы будем считать, что не только волновые функции ψ_i^u и ψ_j^v , но и операторы $V^{\kappa l}$ преобразуются по соответствующим неприводимым представлениям \mathcal{D}_μ , \mathcal{D}_ν и \mathcal{D}_κ группы \mathcal{G} , и покажем, каким образом, зная эти представления, можно получить ответ на указанные выше вопросы.

Применение теории групп к правилам отбора основывается на следующей лемме: если функция $\mathcal{F}_i(\mathbf{x})$ преобразуется по неприводимому представлению \mathcal{D}_μ , то интеграл

$$J_i = \int \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

отличен от нуля лишь в том случае, когда это представление единичное, т. е. $\mathcal{D}_\mu = \mathcal{D}_0$.

Для доказательства этой леммы заметим, что интеграл J не изменится при переходе к новой системе координат $\mathbf{x}' = g\mathbf{x}$, так как это означает простую замену переменных под знаком интеграла. С другой стороны, если g есть одна из операций группы, то функция $g\mathcal{F}_i(\mathbf{x}) = \mathcal{F}_i(g^{-1}\mathbf{x})$ в соответствии с (7.3) при преобразовании g переходит в

$$g\mathcal{F}_i(\mathbf{x}) = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^\mu(g) \mathcal{F}_j(\mathbf{x}).$$

Из соотношений ортогональности (8.3) и (8.10) следует, что

$$\frac{1}{h} \sum_{g \in \mathcal{G}} \mathcal{D}_{ji}^\mu(g) = \delta_{\mu 0}.$$

Последнее соотношение непосредственно получается из (8.3) и (8.10), если там положить $\mathcal{D}_\nu(g) = \mathcal{D}_0(g)$. Поэтому, суммируя

$$gJ_i = \int \mathcal{F}_i(g^{-1}\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

по всем g и учитывая, что $gJ_i = J_i$, получим

$$J_i = \frac{1}{h} \sum_{g \in \mathcal{G}} gJ_i = \frac{1}{h} \sum_j \sum_{g \in \mathcal{G}} \mathcal{D}_{ji}^\mu(g) \int \mathcal{F}_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{\mu 0} J_i,$$

что и доказывает сформулированное выше утверждение.

Если представление \mathcal{D} , по которому преобразуется функция $\mathcal{F}_i(\mathbf{x})$, приводимо, то очевидно, что интеграл

$$J = \int \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

может быть отличен от нуля лишь в том случае, если это представление содержит единичное. Действительно, применив к $\mathcal{F}_i(\mathbf{x})$ операцию g и суммируя по всем g , получим

$$J = \frac{1}{h} \sum_g \int g \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int P^1 \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Оператор

$$P^1 = \frac{1}{h} \sum_g \mathcal{D}(g)$$

есть оператор проектирования (9.5), который выделяет из совокупности функций $\mathcal{F}_j(\mathbf{x})$ комбинацию $\mathcal{F}_0(\mathbf{x})$, преобразующуюся по единичному представлению. Ясно, что эта функция $\mathcal{F}_0(\mathbf{x})$ отлична от нуля, лишь если представление \mathcal{D} содержит единичное.

Вернемся к интегралу (19.1). В соответствии с (7.3), входящие в подынтегральное выражение функции при операции переходят в

$$g\psi_j^v = \sum_{j'} \mathcal{D}_{j'j}^v(g) \psi_{j'}^v, \quad g\psi_i^{\mu*} = \sum_{i'} \mathcal{D}_{i'i}^{\mu*}(g) \psi_{i'}^{\mu*}, \quad gV_i^x = \sum_{i'} \mathcal{D}_{i'i}^x(g) V_{i'}^x.$$

Поэтому представление, определяющее преобразование подынтегральной функции, есть представление с матричными элементами

$$\mathcal{D}_{v_i, v_j, v_l}(g) = \mathcal{D}_{i'i}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{j'j}^v(g) \mathcal{D}_{l'l}^x(g), \quad (19.2)$$

т. е. \mathcal{D} является прямым произведением представлений

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\mu^* \times \mathcal{D}_v \times \mathcal{D}_x \quad (19.3)$$

и в общем случае приводимо.

В соответствии с изложенной выше леммой это означает, что матричный элемент оператора V^{kl} , взятый между функциями, преобразующимися по представлениям \mathcal{D}_μ^* и \mathcal{D}_v , может быть отличен от нуля, лишь если прямое произведение представлений (19.3) содержит единичное представление. Согласно (9.24) и (8.16) для этого необходимо, чтобы произведение представлений $\mathcal{D}_\mu^* \times \mathcal{D}_v$ содержало представление \mathcal{D}_x^* . Преобразование, определяемое равенством

$$gV_{i_j}^l = \sum_{i'l'} \mathcal{D}_{i'i}^{\mu*}(g) \mathcal{D}_{j'j}^v(g) \mathcal{D}_{l'l}^x(g) V_{i'l'}^l, \quad (19.4)$$

можно рассматривать как результат действия оператора $\mathcal{D}(g)$ на $V_{i_j}^l$, а совокупность $n_\mu n_v n_x$ различных матричных элементов

V_{ij}^l , соответствующих различным значениям $i = 1, 2, \dots, n_\mu$; $j = 1, 2, \dots, n_\nu$; $l = 1, 2, \dots, n_\kappa$, можно рассматривать как базис представления \mathcal{D} . Применяя последовательно все операции группы $g \in \mathcal{G}$, можно в общем случае найти h линейных соотношений (19.4), связывающих один из элементов V_{ij}^l с другими матричными элементами $V_{i'j'}^l$. Сумму

$$P^1 V_{ij}^l = \frac{1}{h} \sum_g \mathcal{D}(g) V_{ij}^l = \frac{1}{h} \sum_g \sum_{i'j'} \mathcal{D}_{i'i, j'j, l}(g) V_{i'j'}^l \quad (19.5)$$

в соответствии с (9.5) можно рассматривать как результат действия оператора проектирования P^1 на V_{ij}^l . Для того чтобы проверить, не равен ли нулю данный матричный элемент, надо подействовать на него оператором P^1 , т. е. убедиться, что сумма (19.5) не равна нулю.

Действуя оператором P^1 на разные элементы V_{ij}^l , можно, вообще говоря, получить разные функции вида (19.4), преобразующиеся по единичному представлению. Так как согласно (19.5) каждый из отличных от нуля матричных элементов может быть выражен через эти функции, то общее число линейно независимых отличных от нуля матричных элементов равно числу линейно независимых инвариантов, содержащихся в прямом произведении (19.3). Согласно (9.24) это число N_0 равно

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_g \sum_{ijl} \mathcal{D}_{ijl}(g) = \frac{1}{h} \sum_g \chi_\mu^*(g) \chi_\nu(g) \chi_\kappa(g). \quad (19.6)$$

Таким образом, для определения числа отличных от нуля линейно независимых компонент достаточно знать характеры представлений, по которым преобразуются сам оператор и волновые функции, тогда как для определения неравных нулю компонент нужно найти инварианты (19.5), для чего необходимы сами представления.

Учет инвариантности к инверсии времени. Как указывалось выше, инвариантность к инверсии времени накладывает на матричные элементы дополнительное условие (18.46):

$$V_{ij}^l = \langle \psi_i^\mu V_{ij}^\kappa \psi_j^\nu \rangle = f \langle K \psi_j^\nu V_{ij}^\kappa K \psi_i^\mu \rangle, \quad (19.7)$$

где $f = \pm 1$ в зависимости от того, является ли оператор четным или нечетным по отношению к инверсии времени. Если волновые функции $K\psi^\mu$ и ψ^ν являются линейно зависимыми, то это условие приводит к дополнительным соотношениям, уменьшающим общее число линейно независимых матричных элементов. Как указывалось в § 18, линейная связь между функциями $K\psi^\mu$ и ψ^ν имеет место в случае a , когда функции ψ^μ и ψ^ν относятся к одному представлению, т. е. $\mu = \nu$, и это представление \mathcal{D}_ν вещественно в случае обычных представлений или комплексно и эквивалентно \mathcal{D}_ν^* для спинорных представлений. В этом случае

согласно (18.7)

$$K\psi_i^y = \sum_{i'} T_{i'i} \psi_{i'}^y.$$

Поэтому преобразование F , определяемое равенством

$$FV_{ij}^l = f \langle T\psi_j^y V_i^* T\psi_i^y \rangle = f \sum_{i'} T_{i'j}^* T_{i'i} V_{i'i}^l, \quad (19.8)$$

можно рассматривать как результат действия оператора F на V_{ij}^l , причем из условия инвариантности к инверсии времени следует $FV_{ij}^l = V_{ij}^l$. Если функции ψ_i^y и $K\psi_i^y$ линейно независимы, то представления \mathcal{D}_v^* и \mathcal{D}_v объединяются в одно. В этом случае имеются «диагональные» матричные элементы типа

$$V_{ij} = \langle \psi_i^y V \psi_j^y \rangle, \quad V_{Kl, Kl} = \langle K\psi_i^y V K\psi_j^y \rangle$$

и «недиагональные»

$$V_{Ki, j} = \langle K\psi_i^y V \psi_j^y \rangle, \quad V_{i, Kl} = \langle \psi_i^y V K\psi_j^y \rangle.$$

Условие (19.7) связывает диагональные элементы первого и второго типа соотношением

$$V_{Kl, Kl} = \langle K\psi_i^y V K\psi_j^y \rangle = f \langle \psi_j^y V \psi_i^y \rangle = fV_{ji} \quad (19.9)$$

и накладывает дополнительное условие симметрии на «недиагональные»:

$$V_{Ki, j} = \langle K\psi_i^y V \psi_j^y \rangle = FV_{Kl, j}^l \equiv f \langle K\psi_j^y V K^2\psi_i^y \rangle = fK^2V_{Kl, i}. \quad (19.10)$$

Для определения числа линейно независимых матричных элементов можно ввести расширенную группу, состоящую из элементов g и gF , где оператор F определяется согласно (19.8) или (19.10). При этом согласно (19.8) в случае a

$$\mathcal{D}_{vi, rj, vl}(Fg) = f(\mathcal{D}_v(g) \mathbf{T}_{i'j}^* (\mathcal{D}_v(g) \mathbf{T})_{j'i} \mathcal{D}_{v'i}^*(g)). \quad (19.11)$$

Согласно (19.10) в случаях b и c для «недиагонального» элемента $\langle K\psi_i^y V \psi_j^y \rangle^*$

$$\mathcal{D}_{vi, rj, vl}(Fg) = fK^2 \mathcal{D}_{i'j}^y(g) \mathcal{D}_{j'i}^y(g) \mathcal{D}_{v'i}^*(g). \quad (19.12)$$

Число линейно независимых компонент V_{ij}^l равно числу единичных представлений, содержащихся в представлении \mathcal{D} расширенной группы, определяемом соотношениями (19.4) и (19.11) в случае a или (19.4) и (19.12) в случаях b и c **). При этом

$$N_0 = \frac{1}{2h} \sum_g \sum_{ijl} \mathcal{D}_{ii, ll, ll}(g) + \mathcal{D}_{ii, ll, ll}(Fg).$$

) Для матричного элемента $\langle \psi_i^y V K\psi_j^y \rangle$ $\mathcal{D}_v(g)$ заменяется на $\mathcal{D}_v^(g)$. Соответственно в окончательной формуле (19.13) вместо $\chi_v(g)$ будет стоять $\chi_v^*(g)$, что эквивалентно замене $\chi_x(g)$ на $\chi_x^*(g)$. В случае a оба эти выражения совпадают, так как в этом случае $\chi_v(g) = \chi_v^*(g)$.

**) Аналогичным образом можно, например, определить число единичных представлений, содержащихся в симметризованном или антисимметризован-

Первый член этой суммы сводится к (19.6), причем в этом случае $\chi_\mu^*(g) = \chi_\mu(g) = \chi_\nu(g)$, так как представление \mathcal{D}_μ^* эквивалентно \mathcal{D}_ν . Второй член согласно (19.11) можно преобразовать:

$$\begin{aligned} \sum_{ijl} \mathcal{D}(Fg)_{il, jl, ll} &= f \sum_{ijl} (\mathcal{D}_\nu(g) \mathbf{T})_{ij}^* (\mathcal{D}_\nu(g) \mathbf{T})_{jl} \mathcal{D}_{ll}^*(g) = \\ &= f \chi_\kappa(g) \sum_j (\mathcal{D}_\nu(g) \mathbf{T} \mathcal{D}_\nu^*(g) \mathbf{T}^*)_{jj} = f \chi_\kappa(g) \sum_j (\mathcal{D}_\nu(g^2) \mathbf{T} \mathbf{T}^*)_{jj} = \\ &= K^2 f \chi_\kappa(g) \chi_\nu(g^2). \end{aligned}$$

Здесь учтено, что согласно (18.8) $\mathcal{D}_\nu^*(g) = \mathbf{T}^{-1} \mathcal{D}_\nu(g) \mathbf{T}$ и в соответствии с (18.26) $\mathbf{T} \mathbf{T}^* = K^2$, где $K^2 = 1$ для обычных представлений и $K^2 = -1$ для спинорных. В том случае, когда $\mathcal{D}(Fg)$ определяется уравнением (19.12), аналогично получим

$$\sum_{ijl} \mathcal{D}_{il, jl, ll}(Fg) = f K^2 \sum_{ijl} \mathcal{D}_{ij}^\nu(g) \mathcal{D}_{jl}^\nu(g) \mathcal{D}_{ll}^*(g) = K^2 f \chi_\kappa(g) \chi_\nu(g^2),$$

т. е. в обоих случаях

$$N_0 = \frac{1}{2h} \sum_g \chi_\kappa(g) [\chi_\nu^2(g) + K^2 f \chi_\nu(g^2)]. \quad (19.13)$$

Формулы (19.6) и (19.13) применимы для любой конечной группы, в том числе и для пространственной группы, которую всегда можно сделать конечной, вводя, например, циклические граничные условия типа Борна — Кармана. Однако применять их непосредственно в виде (19.6) или (19.13) для пространственных групп неудобно, так как для этого необходимо знать характеры представлений пространственных групп $\mathcal{D}_\mu^{(k')}$, $\mathcal{D}_\nu^{(k)}$ и $\mathcal{D}_\kappa^{(q)}$ в полном базисе, включающем базисные функции представлений μ , ν и κ для всех лучей звезд $\{k'\}$, $\{k\}$ и $\{q\}$ соответственно.

Согласно (12.27) характеры этих представлений определяются выражениями:

$$\chi(r|\tau + t) = \sum_i \chi^{k_i}(r|\tau) e^{-ik_i t}. \quad (19.14)$$

Суммирование в (19.14) ведется по всем лучам k_i звезды $\{k\}$, а χ^{k_i} — характер представления группы волнового вектора G_{k_i} . При этом если $g = (r|\tau)$ не входит в группу волнового вектора G_{k_i} , то в соответствии с (12.23) $\chi^{k_i}(g) = 0$ ($g \notin G_{k_i}$).

ном произведении: вместо того чтобы строить симметризованные или антисимметризованные функции (9.18) или (9.19), можно рассматривать все функции ψ_{ij} как независимые, ввести операцию перестановки индексов f , подобную (19.10), и проводить суммирование в (9.24) по всем элементам g и gf . При этом $\mathcal{D}(f) = \mathbf{I}$ для симметризованного произведения и $\mathcal{D}(f) = -\mathbf{I}$ для антисимметризованного. В результате получатся такие же выражения, как и при суммировании по g характеров симметризованного или антисимметризованного произведений, определяемых уравнениями (9.22) или (9.23) соответственно.

Как указано в § 12, обычно представления пространственной группы задаются не полным характером (19.14), а указанием звезды $\{k\}$ и характером представления группы волнового вектора G_k одного из лучей звезды $\{k\}$. Поэтому мы преобразуем общие формулы (19.6) и (19.13), с тем чтобы оставить в них лишь характеры основных элементов, т. е. элементов, не содержащих основных трансляций t , групп волновых векторов одного из лучей k' , k и q каждой из звезд $\{k'\}$, $\{k\}$ и $\{q\}$.

Перейдем к рассмотрению конкретных случаев.

Представления $\mathcal{D}_\mu^{(k')}$ и $\mathcal{D}_\nu^{(k)}$ соответствуют разным энергиям, звезды $\{-k'\}$ и $\{k\}$ не совпадают. Матричные элементы такого типа определяют, например, вероятность излучения или поглощения фонона при непрямых оптических переходах, т. е. переходах, происходящих с участием фотона и фонона.

Для определения N_0 в этом случае подставим (19.14) в (19.6) и просуммируем по всем примитивным трансляциям. Тогда получим

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_g \sum_{ijl} \chi_\mu^{k_i'}(g) \chi_\nu^{k_j}(g) \chi_\kappa^{q_l}(g) \delta_{k_i - k_j, q_l}. \quad (19.15)$$

Здесь суммирование ведется только по основным элементам $g = (r|\tau)$ группы G , не содержащим примитивных трансляций, а h обозначает число этих элементов, равное числу элементов группы направлений. При этом, как видно из (19.15), переходы могут происходить лишь с сохранением квазиимпульса, т. е. при

$$k_i' - k_j - q_l = 0. \quad (19.16)$$

Здесь, как обычно, векторы, отличающиеся на b , где b — любой вектор обратной решетки, считаются совпадающими. Обозначим три любых луча, удовлетворяющих условию (19.16), через $k_i' = k'$, $k_j = k$ и $q_l = q$ соответственно, т. е. пусть

$$k' - k - q = 0. \quad (19.17)$$

Применяя к (19.17) операции $g \in G$, найдем другие значения k_i' , k_j , q_l , удовлетворяющие (19.16):

$$gk' - gk - gq = 0. \quad (19.18)$$

При этом, как указывалось в § 12, на векторы k действуют лишь поворотные операции r , т. е. при $g = (r|\tau)$ $gk = rk$.

Допустим сперва, что, перебрав в (19.18) все основные элементы g группы G , мы получим все возможные значения k_i' , k_j , q_l , удовлетворяющие (19.16), т. е. среди операций g , не входящих в G_k , нет таких, что

$$k' - g_2k - g_3q = 0, \quad (19.19)$$

если g_2 не входит в G_k , а g_3 — в G_q . Тогда суммирование по всем значениям i , j и l в (19.15) можно заменить суммирова-

нием по всем g . Однако при таком суммировании каждая из различных троек векторов k'_i, k_j и q_l , удовлетворяющих (19.16), встретится h_0 раз, где h_0 — число элементов g , не меняющих с точностью до эквивалентности ни один из векторов k', k и q . Эти элементы g_0 входят одновременно в группы $G_{k'}$, G_k и G_q и образуют группу G_0 , называемую пересечением этих трех групп:

$$G_0 = G_{k'} \cap G_k \cap G_q.$$

Поэтому, заменяя суммирование в (19.15) по i, j и l суммированием по g , надо разделить сумму на h_0 :

$$N_0 = \frac{1}{hh_0} \sum_{g'} \sum_g \chi_\mu^{*gk'}(g') \chi_\nu^{gk}(g') \chi_\kappa^{gq}(g'). \quad (19.20)$$

Характеры представлений групп волнового вектора, соответствующие различным точкам одной и той же звезды $\{k\}$, в соответствии с (12.24) связаны соотношениями

$$\chi^{ki}(g) = \chi^{g_i k}(g) = \chi^k(g_i^{-1} g g_i), \quad (19.21)$$

где g_i — фиксированная операция, переводящая луч $k = k_i$ в k_i (12.20).

Если подставить (19.21) в (19.20), то при суммировании по всем основным элементам g' , когда этот элемент пробегает все значения от g'_1 до g'_h , элемент $g_i^{-1} g' g_i$ пробегает в другой последовательности те же значения g' или отличающиеся от g' на примитивную трансляцию t . Фазовые множители, связанные с этой трансляцией t , в силу условия (19.17) исчезают, поэтому сумма

$$\begin{aligned} \sum_{g'} \chi_\mu^{*gk'}(g') \chi_\nu^{gk}(g') \chi_\kappa^{gq}(g') &= \\ &= \sum_{g'} \chi_\mu^{*k'}(g^{-1} g' g) \chi_\nu^{k}(g^{-1} g' g) \chi_\kappa^q(g^{-1} g' g) = \sum_{g'} \chi_\mu^{*k'}(g') \chi_\nu^k(g') \chi_\kappa^q(g') \end{aligned} \quad (19.22)$$

не зависит от g и суммирование по g в (19.20) сведется к умножению на число основных элементов группы G , равное h . Входящие в (19.22) произведения отличны от нуля лишь в том случае, если элемент g' входит одновременно в группы волновых векторов $G_{k'}, G_k, G_q$. Поэтому окончательное суммирование в (19.20) надо вести лишь по основным элементам группы G_0 , являющейся пересечением групп волновых векторов $G_{k'} \cap G_k \cap G_q$, число которых равно h_0 :

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0 \in G_0} \chi_\mu^{*k'}(g_0) \chi_\nu^k(g_0) \chi_\kappa^q(g_0). \quad (19.23)$$

Формула (19.23) фактически дает ответ на вопрос, сколько раз представление \mathcal{D}_κ^* с звездой $\{-q\}$ содержится в прямом

произведении представлений $\mathcal{D}_\mu \times \mathcal{D}_\nu$ со звездами $\{-k'\}$ и $\{k\}$, а условие (19.16) означает, что N_0 отлично от нуля, лишь если звезда $\{-q\}$ содержится в прямом произведении звезд $\{-k'\}$ и $\{k\}$.

Если (19.18) не исчерпывает всех значений k'_i, k_i, q_i , удовлетворяющих (19.16), т. е. имеется другая тройка векторов $k' = k'_1, k_2 = g_2 k, q_2 = g_3 q$, удовлетворяющая (19.19), то, применяя операцию g к (19.19), найдем другую серию векторов, удовлетворяющих (19.16) и не входящих в (19.18). В результате в (19.23) кроме имеющихся там слагаемых войдет вторая сумма

$$\sum_{\bar{g}} \chi_\mu^{k'^*}(\bar{g}) \chi_\nu^{g_2 k}(\bar{g}) \chi_\kappa^{g_3 q}(\bar{g}), \quad (19.24)$$

где \bar{g} — основные элементы группы \bar{G} , являющейся пересечением групп: $\bar{G} = G_{k'} \cap G_{g_2 k} \cap G_{g_3 q}$, число которых также равно h_0 . При произвольном расположении звезд $\{k'\}$, $\{k\}$ и $\{q\}$ появление двух независимых соотношений (19.17) и (19.19) является случайностью. Однако если звезда $\{k\}$ совпадает со звездой $\{-k'\}$, то могут иметься две группы векторов, удовлетворяющих этим соотношениям. В этом случае имеется операция g_s , переводящая k в $-k'$, т. е.

$$-k' = g_s k. \quad (19.25)$$

При этом, если (19.25) выполняется для одной операции g_s , то оно выполняется и для всех операций $g_s g_k$, где g_k — любая из операций группы G_k . В этом случае соотношение (19.17) можно записать в виде

$$-k' + k + q = g_s k + k + q = 0. \quad (19.26)$$

Переставив первые два слагаемых, получим

$$k + g_s k + q = 0. \quad (19.27)$$

Умножив (19.27) на g_s и учитывая (19.25), последнее соотношение можно записать в виде

$$-k' + g_s^2 k + g_s q = 0. \quad (19.27a)$$

Соотношение (19.27a) не может быть получено из (19.26) применением к нему какой-либо операции g (без перестановки членов), если ни один из элементов g_s^2 не является произведением элементов $g_{k'} g_k$, входящих в группы волнового вектора $G_{k'}$ и G_k , и в этом случае соотношения (19.26) и (19.27a) надо рассматривать как независимые; тогда N_0 определяется суммой (19.23) и (19.24), причем в данном случае, как видно из сравнения (19.19) и (19.27a), $g = g_s^2$, а $g_3 = g_s$. Выразив характеры представлений групп $G_{g_s^2 k}$ и $G_{g_s q}$ через характеры представлений групп волновых векторов G_k и G_q с помощью (19.21),

окончательно получим

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_{\mu}^{k^*} (g_0) [\chi_{\nu}^k (g_0) \chi_{\kappa}^q (g_0) + \chi_{\nu}^k (g_s^{-2} g_0 g_s^2) \chi_{\kappa}^q (g_s^{-1} g_0 g_s)]. \quad (19.28)$$

Если же хотя бы один из элементов $g_s = g_k g_s' g_k$ удовлетворяет соотношению $g_s^2 = g_k g_k$, то очевидно, что $g_k^{-1} g_s \in G_q$ и соотношение (19.27а) не надо учитывать отдельно, так как оно является следствием (19.26)*).

Формулу (19.28), справедливую при $g_s^2 \neq g_k g_k$, можно переписать в более симметричном виде. Для этого в соответствии с (19.22) для второго слагаемого заменим суммирование по g_0 суммированием по $g_s^{-1} g_0 g_s$ и учтем, что согласно (19.25) и (19.21)

$$\chi_{\mu}^{k'} (g) = \chi_{\mu}^{-g_s k} (g) = \chi_{\mu}^{-k} (g_s^{-1} g_0 g_s), \quad \chi_{\mu}^{k'} (g_s g g_s^{-1}) = \chi_{\mu}^{-k} (g). \quad (19.29)$$

Тогда получим

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_{\kappa}^q (g_0) [\chi_{\mu}^{-k^*} (g_s^{-1} g_0 g_s) \chi_{\nu}^k (g_0) + \chi_{\mu}^{-k^*} (g_0) \chi_{\nu}^k (g_s^{-1} g_0 g_s)], \quad (19.30)$$

где $g_0 \in G_0 = G_{-g_s k} \cap G_k \cap G_q$.

При определении вероятностей прямых оптических переходов, т. е. переходов, происходящих без изменения импульса, а также в ряде других задач мы имеем дело с вертикальными переходами. В этих случаях $q_l = 0$ и операторы V_l^* трансляционно инвариантны и преобразуются по представлениям точечной группы направлений F с характеристиками $\chi_{\kappa}(g)$. При этом если k и $-k' = -k$ входят в одну звезду, то $g_s = e$ и, следовательно, любая операция $g_s^2 = g_k g_k$, так как g_k и g_s входят в G_k . Поэтому в этом случае всегда справедлива формула (19.23), причем суммирование ведется по всем основным элементам группы G_k , т. е.

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_{g \in G_k} \chi_{\mu}^{k^*} (g) \chi_{\nu}^k (g) \chi_{\kappa} (g). \quad (19.31)$$

Представления \mathcal{D}_{μ} и \mathcal{D}_{ν} относятся к одной энергии. В этом случае представления совпадают или объединяются в силу инвариантности к инверсии времени. Матричные элементы такого типа определяют, например, вероятность междуминимумных переходов с поглощением или излучением фононов.

Прежде всего рассмотрим случай, когда функции ψ^{ν} и $K\psi^{\nu}$ линейно независимы. Пусть переход происходит между

*) Поэтому для тех групп, для которых произведение элементов $g_k g_k$ исчерпывает всю группу, соотношение (19.27а) заведомо не является независимым.

состояниями $\psi_{\mathbf{k}}^{\nu}$, относящимися к одному и тому же представлению, но, вообще говоря, к разным точкам звезды, например \mathbf{k} и $\mathbf{k}' = g_r \mathbf{k}$, т. е. эти векторы удовлетворяют уравнению (19.17):

$$g_r \mathbf{k} - \mathbf{k} - \mathbf{q} = 0. \quad (19.32)$$

В этом случае N_0 определяется уравнением (19.23), но так как представления \mathcal{D}_{μ} и \mathcal{D}_{ν} совпадают, то согласно (19.21)

$$\chi_{\mu}^{\mathbf{k}'}(g_0) = \chi_{\nu}^{g_r \mathbf{k}}(g_0) = \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(g_r^{-1} g_0 g_r) \quad (19.33)$$

и, следовательно,

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_{\nu}^{\mathbf{k}'}(g_r^{-1} g_0 g_r) \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(g_0) \chi_{\mu}^{\mathbf{q}}(g_0), \quad (19.34)$$

где

$$g_0 \in G_0 = G_{g_r \mathbf{k}} \cap G_{\mathbf{k}} \cap G_{\mathbf{q}}.$$

Формула (19.34) применима, например, в случае b_3 , когда объединение представлений \mathcal{D}_{ν} и \mathcal{D}_{ν}^* сводится к объединению звезд, для переходов между точками, относящимися к одной звезде. Она также применима для определения числа «диагональных» компонент в случаях b_1 , b_2 и c_1 и c_2 , когда объединяются представления групп волнового вектора в каждой точке звезды. При этом, если ни одна из операций g_s^2 , где g_s превращает \mathbf{k} в $-\mathbf{k}' = -g_r \mathbf{k}$, не равна $g_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}}$, то вместо (19.23) надо использовать (19.30). В данном случае операцию g_s можно записать как $g_s = g_r R^{-1}$, где R — операция, обращающая \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$. Так как

$$\chi_{\mu}^{-\mathbf{k}}(g) = \chi_{\nu}^{-\mathbf{k}}(g) = \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(R^{-1} g R), \quad (19.35)$$

то

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_{\mu}^{\mathbf{q}}(g_0) [\chi_{\nu}^{\mathbf{k}'}(g_r^{-1} g_0 g_r) \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(g_0) + \chi_{\nu}^{\mathbf{k}'}(R^{-1} g_0 R) \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(R g_r^{-1} g_0 g_r R^{-1})]. \quad (19.36a)$$

Для случаев b_1 и c_1 , когда точки \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ эквивалентны, $R = e$ и

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_{\mu}^{\mathbf{q}}(g_0) [\chi_{\nu}^{\mathbf{k}'}(g_r^{-1} g_0 g_r) \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(g_0) + \chi_{\nu}^{\mathbf{k}'}(g_0) \chi_{\nu}^{\mathbf{k}}(g_r^{-1} g_0 g_r)]. \quad (19.36b)$$

Число линейно независимых недиагональных компонент в случаях b и c определяется уравнением (19.13). В случае b_3 эти недиагональные компоненты соответствуют переходу между точками, относящимися к разным звездам, например между \mathbf{k}_j и $\mathbf{k}'_i = -\mathbf{k}_i$. Во всех этих случаях недиагональные компоненты $\langle K \psi_{-\mathbf{k}_i}^{\nu} | V \psi_{\mathbf{k}_j}^{\nu} \rangle$ соответствуют переходу между состояниями $\psi_{\mathbf{k}_j}^{\nu}$ и

$\psi_{k_i}^\mu = K\psi_{-k_i}^\nu$, а компоненты $\langle \psi_{k_i}^\mu | V K \psi_{-k_j}^\mu \rangle$ — переходам из состояния $\psi_{k_j}^\nu = K\psi_{-k_j}^\mu$ в $\psi_{k_i}^\mu$. Причем если для диагональных компонент $\mathcal{D}_\mu = \mathcal{D}_\nu$, то для недиагональных $\mathcal{D}_\mu = \mathcal{D}_\nu^*$. Согласно (19.33) и (18.35)

$$\chi_\mu^{k'^*}(g) = \chi_\nu^{-k'}(g) = \chi_\nu^k(g_s^{-1} g g_s), \quad (19.37)$$

где g_s — операция, обращающая k в $-k'$.

Число линейно независимых компонент в случае a , когда функции ψ и $K\psi$ линейно зависимы, также определяется уравнением (19.13). При этом $\mathcal{D}_\mu = \mathcal{D}_\nu$, так как $\mu = \nu$, но сопряженные характеры согласно (18.38) также удовлетворяют условию (19.37). Первая часть суммы в (19.13) отличается от (19.6) лишь коэффициентом $1/2$, так как величину $(\chi_\nu(g))^2$ в (19.13) можно записать как $\chi_\mu^*(g)\chi_\nu(g)$, причем в случае a $\mu = \nu$. Поэтому это слагаемое сводится к (19.23), и остается вычислить лишь вторую часть суммы (19.13), которую ниже будем обозначать как Σ_2 .

Подставив (19.14) в (19.13) и просуммировав по всем примитивным трансляциям, получим следующее выражение:

$$\Sigma_2 = \frac{1}{2h} \sum_g \sum_{j_l} \chi_\nu^{q_l}(g) \chi_\nu^{k_j}(g^2) \delta_{k_j + g'^{-1} k_j + q_l, 0}. \quad (19.38)$$

При этом учтено, что

$$\chi_\nu^k[(r|\tau + t)^2] = \chi_\nu^k[(r|\tau)^2] e^{-ik(t+rt)}.$$

Если между векторами $-k_i = g_s k_j$, k_j и q_l имеется только одно независимое соотношение (19.17), то все остальные могут быть получены последовательным применением операций $g \in G_k$ (19.17):

$$g g_s k + g k + g q = 0. \quad (19.39)$$

Уравнение (19.39) определяет все возможные значения векторов k_i , k_j и q_l , удовлетворяющих условию типа (19.16): для выполнения этого условия эти векторы должны быть связаны соотношениями

$$-k_i = g'^{-1} k_j = g g_s k, \quad k_j = g k, \quad q_l = g q; \quad (19.40)$$

при этом каждая одинаковая тройка встретится в (19.39) h_0 раз, где h_0 — число основных элементов группы G_0 , являющейся пересечением групп G_k , $G_{g_s k}$, G_q . Поэтому суммирование по j и l в (19.38) можно заменить суммированием по g , разделив сумму на h_0 . Учитывая (19.39) и (19.40), аргумент δ -функции можно переписать в виде

$$\begin{aligned} g'^{-1} k_j + k_j + q_l &= g'^{-1} g k + g k + g q = \\ &= g'^{-1} g k - g g_s k = g(g^{-1} g'^{-1} g - g_s) k. \end{aligned}$$

Поэтому сумму (19.38) можно аналогично (19.22) преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \sum_g \sum_{g'} \chi_x^{gq}(g') \chi_v^{gk}(g'^2) \delta_{g^{-1}g'^{-1}gk, g_s k} &= \\ &= \sum_g \sum_{g'} \chi_x^q(g^{-1}g'g) \chi_v^k[(g^{-1}g'g)^2] \delta_{g^{-1}g'^{-1}gk, g_s k} = \\ &= h \sum_{g'} \chi_x^q(g') \chi_v^k(g'^2) \delta_{g'k, g_s^{-1}k}. \end{aligned}$$

Дельта-функция $\delta_{gk, g_s^{-1}k}$ отлична от нуля, лишь если $g' = g_s^{-1}g_k$, где $g_k \in G_k$. Поэтому суммирование по g' можно заменить суммированием по основным элементам группы G_k . Учитывая, что произведение характеров отлично от нуля, лишь если элемент $g' = g^{-1}g_k$ входит в G_q , а его квадрат $g'^2 = (g_s^{-1}g_k)^2$ входит в G_k , и используя (19.31) и (19.37), окончательное выражение для N_0 можно записать в виде

$$\begin{aligned} N_0 = \frac{1}{2h_0} \left[\sum_{g_0} \chi_x^q(g_0) \chi_v^k(g_0) \chi_v^k(g_s^{-1}g_0g_s) + \right. \\ \left. + K^2 f \sum_{g_k} \chi_x^q(g_s^{-1}g_k) \chi_v^k((g_s^{-1}g_k)^2) \right], \quad (19.41) \end{aligned}$$

где

$$g_0 \in G_0 = G_k \cap G_{g_s k} \cap G_q, \quad g_k \in G_k, \quad (g_s^{-1}g_k)^2 \in G_k, \quad g_s^{-1}g_k \in G_q.$$

Как указывалось выше, если хотя бы один из элементов g_s^2 может быть представлен как произведение $g_k g_k$, то соотношение (19.27) не является независимым и не должно учитываться отдельно. Легко показать, что в случае, когда k и $-k$ входят в одну звезду, условие $g_s^2 = g_k g_k$ эквивалентно условиям

$$(g_s g_k)^2 \in G_k \quad \text{и} \quad (g_s^{-1}g_k)^2 \in G_k.$$

Действительно, в этом случае $k' = g_r k$ и $g_k = g_r g_k g_r^{-1}$, а $g_r = g_s R$. Поэтому из условия $g_s^2 = g_k g_k = g_s R g_k R^{-1} g_s^{-1} g_k$ следует, что $(g_s^{-1}g_k)^2 = R g_k^{-1} R g_k \in G_k$. Поэтому, если хотя бы для одного из элементов $g_s^2 = g_k g_k$, то вторая сумма в (19.41) отлична от нуля. Если же ни один из элементов g_s не удовлетворяет этому соотношению, то второе слагаемое в (19.41) обращается в нуль, а первое слагаемое надо заменить выражением (19.30). Как видно из (19.37), оба слагаемых в (19.30) в последнем случае совпадают. В результате, учитывая, что в (19.13) в знаменателе

стоит величина $2h_0$, получим

$$N_0 = \frac{1}{h_0} \sum_{g_0} \chi_v^k(g_0) \chi_v^k(g_s^{-1} g_0 g_s) \chi_x^q(g_0), \quad (19.42)$$

где $g_0 \in G_0 = G_k \cap G_{g_s k} \cap G_q$.

Переходы между состояниями, относящимися к одному лучу звезды. Как будет показано ниже, матричные элементы такого типа определяют, например, вид спектра $E(\mathbf{k})$ в этой точке. Если матричный элемент берется между функциями ψ_i^v и ψ_j^v и функции $K\psi^v$ и ψ^v линейно независимы, то N_0 определяется уравнением (19.34). Так как здесь $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, то $g_r = e$ и $q = 0$ и

$$N_0 = \frac{1}{h'} \sum_{g' \in G_k} |\chi_v^k(g)|^2 \chi_x(g). \quad (19.43)$$

Суммирование в (19.43) ведется по всем основным элементам g группы G_k , так как все эти элементы входят и в группу направлений F_k .

Формула (19.43) применима в том случае, когда точки \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ входят в разные звезды (случай b). Если \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ входят в одну звезду, а функции ψ^v и $K\psi^v$ линейно независимы и объединяются в одно представление (случаи b_1, b_2, c_1, c_2), то эта формула определяет число линейно независимых «диагональных» компонент, соответствующих переходам между состояниями ψ_i^v и ψ_j^v , а число линейно независимых «недиагональных» компонент, соответствующих переходам между состояниями ψ_i^v и $K\psi_j^v$, определяется уравнением (19.41), которое в данном случае переписется в виде *)

$$N_0 = \frac{1}{2h} \sum_{g \in G_k} \{ \chi_x(g) \chi_v^k(g) \chi_v^k(R^{-1}gR) + K^2 f \chi_x(gR) \chi_v^k[(gR)^2] \}. \quad (19.44)$$

Здесь суммирование ведется по основным элементам группы G_k , а R — один из элементов, превращающих \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$. В случаях b_1 и c_1 , когда точки \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ входят в одну звезду, $R = e$ и N_0

*) Заметим, что для точек внутри зоны Бриллюэна значение $\chi[(Rg)^2]$, как и величина $|\chi(g)|^2$, не зависит от наличия непримитивных трансляций и совпадает с значением $\chi[(Rr)^2]$ для группы направлений, соответствующей данной группе G_k . Действительно, так как $Rg\mathbf{k} = -\mathbf{k}$, то при $R = (R | \tau_R)$, $g = (r | \tau)$

$$\begin{aligned} \chi[(Rg)^2] &= \chi[(Rr)^2] \exp[-i\mathbf{k}(Rr(\tau_R + R\tau) + \tau_R + R\tau)] = \\ &= \chi[(Rr)^2] \exp[-i(\tau_R + R\tau)((Rr)^{-1}\mathbf{k} + \mathbf{k})] = \chi[(Rr)^2]. \end{aligned}$$

определяется формулой

$$N_0 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{g \in G_k} \chi_x(g) [\chi_v^{k^2}(g) + K^2 f \chi_v^k(g^2)], \quad (19.45)$$

которая отличается от (19.13) лишь тем, что суммирование проводится не по всем элементам группы, а по основным элементам группы волнового вектора.

В случае a , когда функции ψ^v и $K\psi^v$ линейно зависимы, N_0 также определяется уравнением (19.44), причем если точки k и $-k$ эквивалентны (случай a_1), то справедлива формула (19.45), а в том случае, когда они неэквивалентны, — формула (19.44), которую, учитывая, что в данном случае представления \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν совпадают и выполняется уравнение (19.37), можно переписать в виде

$$N_0 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{g \in G_k} \{ \chi_x(g) |\chi_v^k(g)|^2 + K^2 f \chi_x(gR) \chi_v^k[(gR)^2] \}. \quad (19.46)$$

Указанные выше формулы полностью решают задачу определения числа линейно независимых матричных элементов, т. е. дают ответ на вопрос, разрешены или запрещены те или иные переходы. В тех же случаях, когда необходимо кроме этого выяснить, какие именно матричные элементы отличны от нуля, и установить связь между ними, можно использовать соответствующие проекционные операторы, т. е. использовать уравнение (19.5). При этом суммирование в (19.5) достаточно проводить лишь по тем основным элементам пространственной группы $g = (r|\tau)$, а также по элементам Fg , по которым ведется суммирование в соответствующих суммах, определяющих число этих компонент N_0 .

§ 20. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИНЕЙНО НЕЗАВИСИМЫХ КОМПОНЕНТ МАТЕРИАЛЬНЫХ ТЕНЗОРОВ

Изложенный в предыдущем параграфе метод определения линейно независимых матричных элементов непосредственно применим и для определения отличных от нуля линейно независимых компонент материальных тензоров, определяющих свойства кристаллов, например тензора проводимости σ , тензора упругих постоянных \mathbf{S} и т. п.

Каждый материальный тензор \mathbf{S} связывает между собой два полевых тензора \mathbf{A} и \mathbf{B} . Эти тензоры \mathbf{A} и \mathbf{B} могут быть разного ранга, в частности \mathbf{A} и \mathbf{B} могут быть векторами, т. е. тензорами первого ранга. Например, тензор проводимости σ связывает компоненты плотности тока \mathbf{j} с напряженностью электрического поля \mathcal{E} : $j_i = \sum_k \sigma_{ik} \mathcal{E}_k$. Тензор упругих постоянных связывает тен-

зор деформации ε с тензором напряжений T : $\varepsilon_{ij} = \sum_{kl} S_{ijkl} T_{kl}$.

Ранг тензора S равен суммарному рангу тензоров A и B . Итак, пусть

$$A_i = \sum_k S_{ik} B_k, \quad (20.1)$$

где A_i и B_k — всевозможные компоненты тензоров A и B . При переходе к новой системе координат $x' = rx$ эти компоненты преобразуются по соответствующим тензорным представлениям \mathcal{D}_A и \mathcal{D}_B полной сферической группы. Это означает, что компоненты тензоров A и B в новой системе координат A'_i и B'_k связаны с компонентами A_i и B_k в старой системе соотношениями

$$A'_i = r A_i = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^A(r) A_j, \quad B'_k = r B_k = \sum_l \mathcal{D}_{lk}^B(r) B_l. \quad (20.2)$$

Подчеркнем, что здесь аналогично (2.29) предполагается, что операция r произведена над координатной системой, что эквивалентно применению операции r^{-1} к самим тензорам. Если же операция r применена к самим тензорам, то матрицы $\mathcal{D}(r)$ в (20.2) заменяются на транспонированные. Для тензора ранга n тензорное представление \mathcal{D}_n в общем случае является прямым произведением n векторных или псевдовекторных представлений \mathcal{D}_1^\pm , характеры которого определяются уравнением (10.20).

Эти тензорные представления приводимы и содержат представления \mathcal{D}_j полной сферической группы, определяемые формулой (10.21), согласно которой

$$\mathcal{D}_{j'} \times \mathcal{D}_{j''} = \sum_{j=|j'-j''|}^{j'+j''} \mathcal{D}_j. \quad (20.3)$$

При этом произведение представлений одинаковой четности дает четные представления \mathcal{D}_j^+ , а разной четности — нечетные \mathcal{D}_j^- .

Если матрицы $\mathcal{D}_A(r)$ и $\mathcal{D}_B(r)$ известны, то легко найти закон преобразования тензора S . Для этого выразим B_k через B'_k :

$$B_k = r^{-1} B'_k = \sum_l \mathcal{D}_{lk}^{B^{-1}}(r) B'_l = \sum_l \mathcal{D}_{kl}^{B^*}(r) B'_l. \quad (20.2a)$$

Подставив это значение в равенство

$$A'_m = \sum_i \mathcal{D}_{im}^A(r) A_i = \sum_{im} \mathcal{D}_{im}^A(r) S_{ik} B_k, \quad (20.4)$$

которое следует из (20.1) и (20.2), получим

$$A'_m = \sum_{iml} \mathcal{D}_{im}^A(r) \mathcal{D}_{kl}^{B^*}(r) S_{ik} B'_l. \quad (20.4a)$$

Так как, с другой стороны,

$$A'_m = \sum_l S'_{ml} B'_l, \quad (20.4b)$$

то из сравнения (20.4а), (20.4б) следует, что компоненты тензора \mathbf{S} при переходе к новой системе координат преобразуются по закону

$$S'_{ml} = r S_{ml} = \sum_{m'l'} \mathcal{D}_{m'm, l'l}(r) S_{m'l'}, \quad (20.5)$$

где

$$\mathcal{D}_{m'm, l'l}(r) = \mathcal{D}_{m'm}^A(r) \mathcal{D}_{l'l}^{B*}(r). \quad (20.6)$$

Здесь для удобства индексы i и k в (20.4а) заменены на m' и l' соответственно.

Таким образом, компоненты тензора \mathbf{S} образуют базис представления \mathcal{D}_S , являющегося прямым произведением представлений \mathcal{D}_A и \mathcal{D}_B^* :

$$\mathcal{D}_S = \mathcal{D}_A \times \mathcal{D}_B^*. \quad (20.7)$$

Формула (20.5) и (20.6) определяют закон преобразования компонент тензора S_{ml} при переходе к новой системе координат и справедливы при любом преобразовании r .

В общем случае это тензорное представление (20.6) приводимо и его можно разложить по неприводимым представлениям данной пространственной группы. При этом компоненты тензора \mathbf{S} , так же как и \mathbf{A} и \mathbf{B} , естественно, преобразуются по трансляционно инвариантным представлениям, т. е. представлениям, соответствующим точке $\mathbf{k} = 0$, так как макроскопические свойства кристаллов определяются только группой направлений F , т. е. они совпадают для всех пространственных групп, входящих в один и тот же кристаллический класс.

Если r — один из элементов симметрии кристаллической группы F , т. е. операция r переводит все направления в кристалле в эквивалентные, то компоненты S_{ml} в новой и старой системах координат совпадают, т. е. при $r \in F$

$$S_{ml} = r S_{ml} = \sum_{m'l'} \mathcal{D}_{m'm, l'l}^S(r) S_{m'l'}. \quad (20.8)$$

Применяя последовательно все операции $r \in F$, можно таким образом получить h соотношений, связывающих S_{ml} с другими компонентами. Если теперь просуммировать (20.8) по r , то видно, что каждую из компонент S_{ml} можно выразить через инвариант группы F :

$$S_{ml} = \frac{1}{h} \sum_r \sum_{m'l'} \mathcal{D}_{m'm, l'l}^S(r) S_{m'l'} = P^1 S_{ml}. \quad (20.9)$$

Таким образом, все матричные элементы могут быть выражены через их инвариантные комбинации, преобразующиеся по единичному представлению, и, следовательно, общее число линейно независимых отличных от нуля компонент N_0 равно числу таких линейно независимых инвариантов, т. е. числу единичных

представлений, содержащихся в прямом произведении (20.7). Поэтому согласно (9.24)

$$N_0 = \frac{1}{h} \sum_r \sum_{ml} \mathcal{D}_{mm, u}^S(r) = \frac{1}{h} \sum_r \chi_A(r) \chi_B^*(r). \quad (20.10)$$

Если представления \mathcal{D}_A и \mathcal{D}_B в группе F приводимы, то их можно разбить на неприводимые, выделив соответствующие компоненты A_m^x и B_m^x , преобразующиеся по определенному неприводимому представлению \mathcal{D}_x группы F . Компоненты тензора S_{ml}^{xv} , связывающие A_m^x и B_l^y , преобразуются по представлению $\mathcal{D}_{xv} = \mathcal{D}_x \times \mathcal{D}_v^*$. Как показано в § 9, такое произведение содержит единичное представление лишь в том случае, если представления \mathcal{D}_x и \mathcal{D}_v совпадают, причем в этом случае единичное представление содержится в произведении $\mathcal{D}_x \times \mathcal{D}_x^*$ один раз. Поэтому,

$$\text{если } \mathcal{D}_A = \sum_x N_x^A \mathcal{D}_x, \quad \mathcal{D}_B = \sum_x N_x^B \mathcal{D}_x, \quad \text{то } N_0 = \sum_x N_x^A N_x^B. \quad (20.11)$$

Матрицы представления \mathcal{D}_{xv} , по которому преобразуются компоненты S_{ml}^{xv} , в соответствии с (20.6) определяются выражением

$$\mathcal{D}_{mm', u'}^{xv}(r) = \mathcal{D}_{m'm}^x(r) \mathcal{D}_{l'l}^{v*}(r). \quad (20.12)$$

Подставив (20.12) в (20.9) и используя соотношение ортогональности (8.10), получим

$$\begin{aligned} S_{ml}^{xv} &= \frac{1}{h} \sum_r \sum_{m'l'} \mathcal{D}_{m'm}^x(r) \mathcal{D}_{l'l}^{v*}(r) S_{m'l'}^{xv} = \\ &= \frac{\delta_{xv}}{n_x} \sum_{l'm'} \delta_{m'l'} \delta_{ml} S_{m'l'}^{xv} = \delta_{xv} \delta_{ml} \frac{1}{n_x} \sum_{m'} S_{m'm}^{xx}. \end{aligned} \quad (20.13)$$

Формула (20.13) показывает, что при указанном выборе компонент A_m^x и B_m^x лишь диагональные компоненты S_{mm}^{xx} отличны от нуля, причем все компоненты одного представления одинаковы, т. е. $S_{mm}^{xx} = S_{ll}^{xx}$ ($l = 1, 2, \dots, n_x$).

Подчеркнем, что в (20.13) предполагается, что функции A_m^x и B_m^x преобразуются по сопряженным представлениям. При этом индекс m указывает номер функции данного представления. Равенство этих индексов в (20.13) отнюдь не предполагает в общем случае совпадения обычных (т. е. координатных) индексов у компонент тензоров. Например, в группе C_2 , где функции x и y преобразуются по одному и тому же одномерному представлению B , функция A_1^B может означать и j_x , и j_y , а B_1^B — и \mathcal{E}_x , и \mathcal{E}_y , и в этом случае тензор имеет σ четыре отличные от нуля линейно независимые компоненты: σ_{xx} , σ_{yy} , $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, а

также σ_{zz} , связывающую компоненты j_z и \mathcal{E}_z , преобразующиеся по представлению A .

Как известно, инвариантность уравнений движения к инверсии времени накладывает на кинетические коэффициенты дополнительные условия, называемые соотношениями Онзагера. Эти соотношения приводят к связи между различными кинетическими тензорами, например тензором Пельтье и тензором термоэдс, а также накладывают в ряде случаев на компоненты тензоров S_{ik} добавочные условия симметрии к перестановке индексов i и k . Аналогичные условия накладываются и на другие материальные тензоры. Эти обобщенные соотношения Онзагера могут быть сформулированы в следующей форме*):

Если изменение полной энтропии $\frac{dL}{dt}$ или внутренней энергии $\frac{dU}{dt}$ может быть выражено в виде суммы $-\sum_k B_k A_k$, то тензор S , связывающий в соответствии с (20.11) компоненты тензоров A и B , удовлетворяет условию

$$S_{ik}(H) = S_{ki}(-H), \quad (20.14)$$

если оба оператора A и B вещественные или мнимые, и

$$S_{ik}(H) = -S_{ki}(-H), \quad (20.15)$$

если один из этих операторов вещественный, а второй мнимый.

Например, тензор проводимости σ , тензор упругости S и обратный ему тензор жесткости C удовлетворяют условию (20.14).

Добавочные условия симметрии к перестановке индексов тензора S могут быть также связаны с симметрией полевых тензоров A и B . Например, тензоры деформаций ϵ и напряжений P симметричны, т. е. $\epsilon_{ik} = \epsilon_{ki}$ и $P_{ik} = P_{ki}$. Соответственно и тензор упругих постоянных S и тензор жесткости C должны быть симметричны и к перестановке индексов внутри первой и второй пар, т. е.

$$S_{iklm} = S_{kilm} = S_{ikml} = S_{lmik}. \quad (20.16)$$

Все эти добавочные условия могут быть учтены в (20.4) введением дополнительных элементов симметрии p_i , означающих перестановку соответствующих индексов. При этом суммирование в (20.10) надо вести по всем элементам r, rp_1, rp_2, \dots , учитывая, что операция p приводит к перестановке соответствующих индексов в правой части (20.6). Однако эти добавочные условия проще учесть сразу при определении представления \mathcal{D}_S в (20.7).

*) См., например, Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, М., 1964, § 122; Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, М., 1957, § 88.

Так, например, симметрия тензоров ε и \mathbf{P} к перестановке индексов означает, что они преобразуются по представлению \mathcal{D} , являющемуся симметризованным произведением $[\mathcal{D}_1^2]$. Так как согласно (10.23), (10.24) при целом j'

$$[\mathcal{D}_{j'}^2] = \sum_{j=0}^{j'} \mathcal{D}_{2j}, \quad \{\mathcal{D}_{j'}^2\} = \sum_{j=0}^{j'-1} \mathcal{D}_{2j+1}, \quad (20.17)$$

то это произведение $[\mathcal{D}_1^2] = \mathcal{D}_0 + \mathcal{D}_2$.

Симметрия или антисимметрия тензора S_{ik} к перестановке индексов i и k , которая, конечно, может иметь место лишь при совпадении представлений \mathcal{D}_B и \mathcal{D}_A^* , означает, что тензор \mathbf{S} преобразуется соответственно по симметризованному или антисимметризованному произведениям $\mathcal{D}_S = [\mathcal{D}_B^2]$ или $\mathcal{D}_S = \{\mathcal{D}_B^2\}$, характеры которых определяются выражениями (9.22) или (9.23).

При этом, если $\mathcal{D}_B = \sum_j \mathcal{D}_j$, то согласно (9.22) и (9.23)

$$\begin{aligned} [\chi^2(g)] &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\sum_j \chi_j(g) \right)^2 + \sum_j \chi_j(g^2) \right\} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_j \{ \chi_j^2(g) + \chi_j(g^2) \} + \sum_j \sum_{i \neq j} \chi_i(g) \chi_j(g), \end{aligned}$$

т. е.

$$[\mathcal{D}_B^2] = \left[\left(\sum_j \mathcal{D}_j \right)^2 \right] = \sum_j [\mathcal{D}_j^2] + \sum_j \sum_{i \neq j} \mathcal{D}_i \mathcal{D}_j; \quad (20.18)$$

аналогично для антисимметризованного произведения

$$\{\mathcal{D}_B^2\} = \left\{ \left(\sum_j \mathcal{D}_j \right)^2 \right\} = \sum_j \{\mathcal{D}_j^2\} + \sum_j \sum_{i \neq j} \mathcal{D}_i \mathcal{D}_j. \quad (20.19)$$

Заметим, что выражения (20.18) и (20.19) справедливы независимо от того, имеются ли среди представлений \mathcal{D}_j одинаковые или нет и являются ли эти представления неприводимыми. Так, например, тензоры \mathbf{S} или \mathbf{C} согласно (20.16) — (20.18) и (20.3) преобразуются по представлениям

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_S &= [(\mathcal{D}_0^+ + \mathcal{D}_2^+)^2] = [\mathcal{D}_0^{+2}] + [\mathcal{D}_2^{+2}] + \mathcal{D}_0^+ \mathcal{D}_2^+ = \\ &= \mathcal{D}_4^+ + 2\mathcal{D}_2^+ + 2\mathcal{D}_0^+. \end{aligned} \quad (20.20)$$

Тензор σ в отсутствие магнитного поля в соответствии с (20.14) преобразуется по представлению

$$\mathcal{D}_\sigma = [\mathcal{D}_1^{-2}] = \mathcal{D}_2^+ + \mathcal{D}_0^+. \quad (20.21)$$

Тензор холловской проводимости σ_H , описывающий изменение тока в магнитном поле $j_i = \sum_{kl} \sigma_{ikl}^H \mathcal{E}_k H_l$, в соответствии с (20.14) антисимметричен к перестановке первых двух индексов и,

следовательно, преобразуется по представлению

$$\mathcal{D}_{\sigma_H}^H = \{\mathcal{D}_1^{-2}\} \mathcal{D}_1^+ = \mathcal{D}_1^+ \mathcal{D}_1^+ = \mathcal{D}_2^+ \oplus \mathcal{D}_1^+ \oplus \mathcal{D}_0^+. \quad (20.22)$$

В изотропной среде, симметрия которой описывается полной сферической группой, число линейно независимых компонент тензора в соответствии с (20.10) равно числу единичных представлений \mathcal{D}_0 , содержащихся в представлении \mathcal{D}_S , по которому преобразуются компоненты этого тензора. Например, тензор \mathbf{C} или \mathbf{S} имеет в изотропной среде две линейно независимые компоненты, а тензоры $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\sigma}_H$ — по одной. Если при этом разложить тензоры \mathbf{A} и \mathbf{B} в (20.1) по неприводимым представлениям этой группы A_m^j и B_m^j , то в соответствии с (20.13) при указанном выборе компонент \mathbf{A} и \mathbf{B} отличны от нуля лишь диагональные компоненты S_{mm}^{jj} , причем все компоненты S_{mm} с данными j одинаковы. При понижении симметрии представления \mathcal{D}_j при $j \geq 1$ (в кубических группах — при $j \geq 2$) становятся приводимыми и могут содержать единичное представление данной группы. При этом для определения полного числа единичных представлений, содержащихся в \mathcal{D}_S , достаточно знать, какие из представлений \mathcal{D}_j , имеющиеся в \mathcal{D}_S , содержат единичное представление данной группы и сколько раз.

§ 21. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. k_p -МЕТОД

Для детального определения спектра $E_n(\mathbf{k})$ во всей зоне Бриллюэна требуется численное решение уравнения Шредингера (17.1). В последнее время разработан ряд приближенных методов определения волновых функций и энергетического спектра электронов в твердом теле, однако численное решение уравнения Шредингера наталкивается на ряд практических трудностей, связанных главным образом с определением самосогласованного потенциала $V(\mathbf{x})$.

В полупроводниках, однако, в большинстве случаев знание всего энергетического спектра не является необходимым, поэтому для них очень плодотворным оказался другой подход. Поскольку обычно в полупроводниках число носителей тока — электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне — мало по сравнению с полным числом атомов в кристалле, то при достаточно широкой разрешенной зоне в условиях термодинамического равновесия электроны концентрируются вблизи минимума зоны проводимости, а дырки — вблизи максимума валентной зоны. Поэтому в большинстве задач физики полупроводников достаточно знать энергетический спектр только вблизи экстремумов зон.

Существенно при этом, что возможные виды спектра вблизи данной точки могут быть определены только на основании соображений симметрии, без численного решения уравнения Шредингера.

Так как вид спектра вблизи экстремума существенно определяет наблюдаемые на опыте свойства полупроводников, то из сопоставления экспериментальных данных с теорией можно определить, какой из возможных видов спектра реализуется в данном полупроводнике, и найти константы, входящие в выражение для энергии.

Необходимым условием экстремума зоны является равенство нулю всех производных энергии по k_α :

$$\frac{\partial E_n(\mathbf{k}_0)}{\partial k_\alpha} = 0, \quad (21.1)$$

т. е. наклона зоны в точке \mathbf{k}_0 .

Хотя экстремумы зоны в принципе могут находиться в произвольной точке \mathbf{k} -пространства, почти во всех полупроводниках, в которых положение экстремумов известно, они находятся в тех точках зоны Бриллюэна, в которых нулевой наклон зоны для всех или некоторых направлений k_α является следствием симметрии точки \mathbf{k}_0 . Поэтому существенно выяснить, какие из точек зоны Бриллюэна могут быть точками нулевого наклона, а следовательно вероятными точками положения экстремумов зон.

Эта задача может быть решена методами теории групп. Очевидно, одновременное обращение в нуль всех производных $\partial E_n / \partial k_\alpha$ может происходить только в отдельных точках \mathbf{k} -пространства. «Подозрительными» на экстремум точками следует считать точки в \mathbf{k} -пространстве, в которых из-за условий симметрии или инверсии времени обращаются в нуль все компоненты скорости, либо точки на линиях симметрии, в которых тождественно обращаются в нуль две компоненты скорости, а также точки на плоскости, в которых одна из компонент скорости равна нулю из-за симметрии или инверсии времени.

Экстремум, конечно, может находиться и в произвольной точке зоны Бриллюэна, не обладающей никакой симметрией, где для конкретного потенциала $V(\mathbf{x})$ все три компоненты скорости обращаются в нуль.

Качественное исследование спектра вблизи точки \mathbf{k}_0 основано на так называемом $\mathbf{k}p$ -методе, который является вариантом теории возмущений и по существу близок к использованному в § 17 методу исследования аналитических свойств волновых функций и энергий. В § 17 использовались блоховские функции $\psi_{n\mathbf{k}}$, которые являются точными решениями уравнения Шредингера (17.1), (17.2) для идеального кристалла. В полупроводниках, где существенны области \mathbf{k} -пространства, достаточно близкие к точке экстремума зоны \mathbf{k}_0 , для исследования энергетического спектра носителей тока в идеальном кристалле, а особенно при исследовании поведения носителей тока в медленно меняющихся электрических и магнитных полях удобным оказалось другое представление — так называемое представление Латтинжера и Кона. В этом представлении волновой вектор \mathbf{k} отсчитывается от точки экстремума \mathbf{k}_0 , т. е. $\mathbf{k} = \mathbf{K} - \mathbf{k}_0$, где \mathbf{K} — волновой вектор рассматриваемой точки в \mathbf{k} -пространстве (в § 17 разность $\mathbf{K} - \mathbf{k}_0$ обозначена $\boldsymbol{\kappa}$). В качестве базиса выбираются не блоховские функции $\psi_{n\mathbf{K}}$ (17.5), а функции $\varphi_{n\mathbf{k}}$:

$$\varphi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2}} \psi_{n\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad (21.2)$$

где $\psi_{n\mathbf{k}_0}$ — блоховская функция в точке экстремума \mathbf{k}_0

$$\psi_{n\mathbf{k}_0} = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}_0},$$

являющаяся собственной функцией оператора $\mathcal{H}_0 = (p^2/2m) + V(\mathbf{x})$ и соответствующая энергии $E_n(\mathbf{k}_0)$.

Функция φ_{nk} нормирована на объем кристалла $\mathcal{V} = N\Omega_0$, где N — число элементарных ячеек в кристалле, а Ω_0 — объем элементарной ячейки. Функции u_{nk_0} нормированы на объем элементарной ячейки:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{nk_0}^* u_{nk_0} d\tau_0 = 1. \quad (21.3)$$

Функция φ_{nk} преобразуется по тому же представлению группы трансляции, т. е. соответствует тому же \mathbf{k} , что и точная функция ψ_{nK} , но отличается от нее тем, что функции φ_{nk} соответствует периодическая функция u_{nk_0} , а не u_{nK} .

Функции φ_{nk} ортогональны:

$$\langle \varphi_{n'\mathbf{k}'} | \varphi_{n\mathbf{k}} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (21.4)$$

Здесь для удобства мы считаем объем кристалла \mathcal{V} конечным и соответственно накладываем на функции φ_{nk} циклические граничные условия, поэтому значения \mathbf{k} являются дискретными.

Ортогональность функций φ_{nk} по \mathbf{k} , как и ортогональность по \mathbf{k} функций ψ_{nK} , следует из того, что при трансляции на вектор решетки Браве матричный элемент $\langle \varphi_{n'\mathbf{k}'} | \varphi_{n\mathbf{k}} \rangle$ приобретает множитель $e^{i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')}$, не равный единице, так как векторы \mathbf{k} и \mathbf{k}' лежат в зоне Бриллюэна. Ортогональность по n является следствием ортогональности периодических функций u_{nk_0} .

Волновую функцию ψ_{nK} можно разложить по функциям φ_{nk} , имеющим ту же периодичность:

$$\psi_{nK} = \sum_{n'} c_{n'} \varphi_{n'\mathbf{k}}. \quad (21.5)$$

Коэффициенты $c_{n'}$ осуществляют переход от блоховского представления к представлению Латтинжера и Кона.

Рассмотрим сначала метод расчета спектра $E(\mathbf{k})$ без учета спин-орбитального взаимодействия.

Подставляя разложение (21.5) в уравнение Шредингера $(\mathcal{H}_0 - E)\psi = 0$, умножив его слева на $\varphi_{n\mathbf{k}}$ и проинтегрировав по \mathbf{x} , получим систему уравнений

$$\sum_{n'} \left\{ \left(E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar \mathbf{k} p_{nn'}}{m} \right\} c_{n'} = 0. \quad (21.6)$$

При этом мы учли, что

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \mathcal{H}_0(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}). \quad (21.7)$$

В (21.6) $p_{nn'}$ — матричные элементы импульса, вычисленные на блоховских функциях ψ_{nk_0} :

$$p_{nn'} = p_{nk_0, n'\mathbf{k}_0} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \psi_{nk_0}^* \mathbf{p} \psi_{n'\mathbf{k}_0} d\tau_0. \quad (21.8)$$

В уравнении (21.6) при малых k слагаемые

$$\mathcal{H}_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \mathcal{H}_2 = \frac{\hbar k p}{m} \quad (21.9)$$

можно рассматривать как возмущение, причем междузонные матричные элементы, как и в (15.35) и (15.45), имеет только оператор \mathcal{H}_2 . Для их устранения нужно совершить преобразование (15.33), после чего во втором приближении по k в соответствии с формулой (15.47) получим

$$\sum_{n'} \left\{ \left(E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar k}{m} p_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0} + \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{n'' \neq n} k_\alpha k_\beta \frac{p_{n\mathbf{k}_0, n''\mathbf{k}_0}^\alpha p_{n''\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n''}(\mathbf{k}_0)} \right\} c_{n'} = 0. \quad (21.10)$$

Невырожденные зоны. Для невырожденной зоны из (21.10) следует, что энергия $E(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ в квадратичном по k приближении равна

$$E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^{\alpha} + \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}} k_{\alpha} k_{\beta}, \quad (21.11)$$

где согласно (21.10)

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{p_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^{\alpha} p_{n'\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^{\beta} + p_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^{\beta} p_{n'\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^{\alpha}}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} + \frac{1}{m} \delta_{\alpha\beta}. \quad (21.12)$$

Существенно, что, исходя только из соображений симметрии и используя правила отбора для матричных элементов импульса, можно определить количество не равных нулю констант p^{α} и $1/m_{\alpha\beta}$ и установить соотношения между ними, т. е. получить качественный вид спектра $E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ (21.11). Так как оператор импульса преобразуется по представлению \mathcal{D}_1 (в группе $G_{\mathbf{k}_0}$ оно может быть и приводимым), то в общем случае число отличных от нуля компонент $p_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^{\alpha}$ равно числу N_1 единичных представлений, входящих в прямое произведение

$$\mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}_0} \times \mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_{\mu}^{*\mathbf{k}_0} = \mathcal{D}_1,$$

и определяется формулой (19.43)

$$N_1 = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} |\chi_{\mu}(g)|^2 \chi_1(g) = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} \chi_1(g), \quad (21.13)$$

поскольку для одномерных представлений произведение $\mathcal{D}_{\mu}^{*\mathbf{k}_0} \times \mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}_0}$ всегда является единичным представлением.

Из (21.13) следует, что отличны от нуля лишь те константы $p_{n\mathbf{k}_0, n\mathbf{k}_0}^{\alpha}$, которые соответствуют компонентам k_{α} , преобразую-

щимся по единичному представлению группы G_{k_0} , т. е. инвариантным к преобразованиям из группы G_{k_0} .

Поскольку $\partial E_n / \partial k_\alpha = p_{nk_0, nk_0}^\alpha$, то формула (21.13) определяет точки нулевого наклона, т. е. точки k_0 , в которых тождественно, в силу условий симметрии, обращаются в нуль те или иные компоненты скорости $\partial E / \partial k_\alpha$.

Так, если в группу симметрии точки k_0 входит инверсия, то обращаются в нуль все компоненты импульса, т. е. в этом случае $\partial E_n / \partial k_\alpha = 0$ для всех направлений вектора k . Если же точка k_0 лежит на оси симметрии второго или четвертого порядка, то инвариантной ко всем поворотам будет только составляющая вектора k_0 , параллельная рассматриваемой оси, т. е. в этом случае две перпендикулярные оси симметрии компоненты скорости обращаются в нуль из-за условий симметрии. В том случае, когда точка лежит на плоскости симметрии, в нуль обращается компонента скорости, перпендикулярная плоскости симметрии, так как она меняет знак при отражении в этой плоскости.

Для одномерных представлений эти условия согласно (21.13) не зависят от самого одномерного представления $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$, а только от симметрии точки k_0 .

Рассмотрим теперь, как преобразуется сумма (21.12) под действием элемента $g \in G_{k_0}$.

Если одна из зон n' , по которым ведется суммирование в (21.12), m -кратно вырождена, то в сумму (21.12) с одним энергетическим знаменателем $E_n(k_0) - E_{n'}(k_0)$ входят m слагаемых, по числу вырожденных функций $\psi_{s(n')k_0}$ ($s = 1, 2, \dots, m$) зоны n' . Под действием элемента $g \in G_{k_0}$ сумма этих слагаемых переходит в выражение

$$\begin{aligned} & \sum_s \langle g \psi_{nk_0} | g p^\alpha | g \psi_{s(n')k_0} \rangle \langle g \psi_{s(n')k_0} | g p^\beta | g \psi_{nk_0} \rangle = \\ & = \sum_{ss't\alpha'\beta'} \mathcal{D}_\mu^{*k_0}(g) \mathcal{D}_1^{\alpha'\alpha}(g) \mathcal{D}_{\mu's's}^{k_0}(g) \mathcal{D}_{\mu'ts}^{*k_0}(g) \mathcal{D}_1^{\beta'\beta}(g) \mathcal{D}_\mu^{k_0}(g) \times \\ & \quad \times \langle \psi_{nk_0} | p^{\alpha'} | \psi_{s'(n')k_0} \rangle \langle \psi_{t(n')k_0} | p^{\beta'} | \psi_{nk_0} \rangle, \end{aligned}$$

где $\mathcal{D}_1(g)$ — представление, по которому преобразуется импульс p , а $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$ — представление, по которому преобразуются функции $\psi_{s(n')k_0}$. Используя соотношение унитарности (7.11)

$$\sum_s \mathcal{D}_{\mu's's}^{k_0}(g) \mathcal{D}_{\mu'ts}^{*k_0}(g) = \delta_{s't},$$

получим, что

$$\begin{aligned} & \sum_s \langle g \psi_{nk_0} | g p^\alpha | g \psi_{s(n')k_0} \rangle \langle g \psi_{s(n')k_0} | g p^\beta | g \psi_{nk_0} \rangle = \\ & = \sum_{s\alpha'\beta'} \langle \psi_{nk_0} | p^{\alpha'} | \psi_{s(n')k_0} \rangle \langle \psi_{s(n')k_0} | p^{\beta'} | \psi_{nk_0} \rangle \times \\ & \quad \times \mathcal{D}_1^{\alpha'\alpha}(g) \mathcal{D}_1^{\beta'\beta}(g) \mathcal{D}_\mu^{*k_0}(g) (\mathcal{D}_\mu^{k_0})(g), \end{aligned}$$

т. е. каждое слагаемое в (21.12) преобразуется как $\langle \psi_{n\mathbf{k}_0} | p^\alpha p^\beta + p^\beta p^\alpha | \psi_{n\mathbf{k}_0} \rangle$, а потому и вся сумма (21.12) (т. е. константы $1/m_{\alpha\beta}$) преобразуется по прямому произведению

$$\mathcal{D}_\mu^{k_0^*} [\mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_1] \mathcal{D}_\mu^{k_0} = [\mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_1]. \quad (21.14)$$

Число N_2 независимых констант $1/m_{\alpha\beta}$ равно в соответствии с (21.14) и (19.43)

$$N_2 = \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G'_{k_0}} |\chi_\mu(g)|^2 (\chi_1^2(g) + \chi_1(g^2)) = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{k_0}} [\chi_1^2(g)]. \quad (21.15)$$

Из (21.14) и (21.15) следует, что квадратичная часть разложения энергии (21.11) содержит только комбинации $k_\alpha k_\beta$, инвариантные к преобразованиям из группы G_{k_0} . Вблизи точки экстремума энергия является квадратичной функцией k_α , при этом для существования экстремума требуется также положительная определенность формы $\frac{1}{m_{\alpha\beta}} k_\alpha k_\beta$.

Вблизи экстремума энергия $E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ может быть записана в виде

$$E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}} k_\alpha k_\beta. \quad (21.16)$$

Величины $1/m_{\alpha\beta}$ называются тензором обратной эффективной массы.

Таким образом, вблизи точки экстремума зависимость энергии от k_α в низшем по k_α приближении носит параболический характер, но в отличие от свободного электрона характеризуется анизотропной эффективной массой.

Симметричный тензор $1/m_{\alpha\beta}$ может быть приведен к главным осям, в которых (21.16) принимает вид

$$E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2m_\alpha} k_\alpha^2. \quad (21.17)$$

Поэтому в случае невырожденной зоны поверхности постоянной энергии вблизи экстремума всегда являются эллипсоидами, определяемыми шестью параметрами: шестью компонентами симметричного тензора $1/m_{\alpha\beta}$ или тремя главными значениями $1/m_\alpha$ и тремя направлениями главных осей эллипсоида энергии.

Симметрия эллипсоида (21.16) определяется только симметрией точки \mathbf{k}_0 . Так, если точка экстремума находится на оси симметрии, то одна из осей эллипсоида энергии совпадает с осью симметрии. Если ось симметрии является осью третьего, четвертого или шестого порядка, то эллипсоид энергии является эллипсоидом вращения, две другие оси эллипсоида могут быть выбраны произвольно в плоскости, перпендикулярной оси

Группа симметрии Fk_0	Равные нулю компоненты p^a	Энергия вблизи точки экстремума	Расположение главных осей эллипсоида
e	—	$\frac{\hbar^2}{2m_1} k_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} k_2^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3} k_3^2$	Может быть любым
C_1	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2}{2m_1} k_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} k_2^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3} k_3^2$	Может быть любым
C_s	p^z	$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Оси x, y — в плоскости σ_h , ось z перпендикулярна плоскости σ_h
C_2	p^x, p^y	$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Оси x, y — в плоскости, перпендикулярной оси c_2 ; ось z направлена по оси c_2
C_{2h}	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси c_2 , оси x, y — в плоскости σ_h
C_{2v}	p^x, p^y	$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси c_2 , оси x, y — по линиям пересечения плоскостей σ_v с плоскостями, перпендикулярными c_2
D_2, D_{2h}	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Оси x, y, z направлены по трем осям второго порядка
S_4, D_{2d}	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2 (k_1^2 + k_2^2)}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси s_4 , оси x, y — произвольно в плоскости, перпендикулярной s_4
C_4, C_{4v}	p^x, p^y	$\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси c_4 , оси x, y — произвольно в плоскости, перпендикулярной оси c_4
D_{4h}, C_{4h}, D_4	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси c_4 , оси x, y — произвольно в плоскости, перпендикулярной оси c_4

Группа симметрии F_{k_0}	Равные нулю компоненты p^a	Энергия вблизи точки экстремума	Расположение главных осей эллипсоида
$C_{6v}, C_{3v}, C_3, C_{2v}$	p^x, p^y	$\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	Ось z — по оси c_3 , оси x, y — произвольно в плоскости, перпендикулярной оси c_3
$C_{3h}, D_{3h}, C_{6h}, D_3, S_6, D_{3d}, D_6, D_{6h}$	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$	То же
O, O_h, T, T_h, T_d	p^x, p^y, p^z	$\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$	Любые

симметрии. Если точка k_0 находится на пересечении трех взаимно перпендикулярных осей второго порядка, т. е. имеет группу симметрии D_2 , или же лежит на оси второго порядка и в плоскости отражения σ_v , т. е. имеет группу симметрии C_{2v} , то эллипсоид характеризуется тремя различными эффективными массами. Главные оси эллипсоида при этом направлены вдоль элементов симметрии, т. е. вдоль взаимно перпендикулярных осей второго порядка, а для группы C_{2v} — вдоль оси второго порядка и вдоль линий пересечения плоскостей отражения σ_v с плоскостью, перпендикулярной оси второго порядка.

В табл. 21.1 указаны компоненты импульса, обращающиеся в нуль в силу условий симметрии (21.13), для одномерных представлений всех точечных групп симметрии точки k_0 , а также указано расположение осей эллипсоидов энергии.

Если экстремум находится в центре зоны Бриллюэна $k_0 = 0$, то группа F_{k_0} совпадает с полной группой направлений F , характеризующей кристаллический класс, и имеется один эллипсоид, симметрия которого совпадает с макросимметрией кристалла.

Аналогичная ситуация может иметь место и в тех случаях, когда экстремум невырожденной зоны находится на границе зоны Бриллюэна, если группа симметрии точки k_0 совпадает с пространственной группой.

Если же экстремум зоны находится не в центре зоны Бриллюэна, то симметрия точки k_0 в общем случае ниже симметрии, определяемой кристаллическим классом, и симметрия энергии $E(k)$ вблизи экстремума также может быть ниже симметрии кристалла. Но в этом случае звезда вектора k_0 всегда содержит и другие лучи k_0^i , при этом энергия во всех точках звезды одинакова, $E(k_0^i) = E(k_0)$, а вид $E(k_0^i + k)$ вблизи точки k_0^i получает-

ся из эллипсоида (21.16) применением тех элементов g_i группы G , которые переводят вектор k_0 в k_0^i : $k_0^i = g_i k_0$. Поэтому эллипсоид энергии в точке k_0^i получается из эллипсоида энергии в точке k_0 соответствующим элементом g_i поворотом осей.

В целом энергетический спектр в согласии с (17.10) обладает симметрией кристалла.

Этот тип зон называется многоэллипсоидной или многодолинной зонной структурой. При этом имеется вырождение по энергии в различных точках k -пространства, хотя зона в каждом экстремуме k_0^i не вырождена.

Вырожденные в точке k_0 зоны. В соответствии с теорией возмущения для вырожденного уровня в системе уравнений (21.10) следует рассматривать все состояния n' , которые имеют одну и ту же энергию в точке k_0 . Эти состояния мы будем обозначать индексами $i, j = 1, 2, \dots, m$, где m — кратность вырождения зоны в точке k_0 . Система уравнений (21.10) для вырожденной в точке k_0 зоны имеет вид

$$\sum_j \mathcal{H}_{ij}(k_0, k) c_j = E c_i, \quad (21.18)$$

где согласно (21.10)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ij}(k_0, k) = & \sum_{\alpha} \frac{\hbar}{m} k_{\alpha} p_{i k_0, j k_0}^{\alpha} + \frac{\hbar^2}{2m} \delta_{ij} k^2 + \\ & + \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{\alpha\beta} k_{\alpha} k_{\beta} \sum_{n' \neq i, j} \frac{p_{i k_0, n' k_0}^{\alpha} p_{n' k_0, j k_0}^{\beta} + p_{i k_0, n' k_0}^{\beta} p_{n' k_0, j k_0}^{\alpha}}{E(k_0) - E_{n'}(k_0)}. \end{aligned} \quad (21.19)$$

Условием разрешимости системы (21.19) является равенство нулю ее определителя:

$$\text{Det} \|\mathcal{H} - IE\| = 0, \quad (21.20)$$

что приводит к алгебраическому уравнению порядка m для энергии $E = E(k_0 + k) - E(k_0)$, которое имеет m решений E_j ($j = 1, 2, \dots, m$). После определения E_j система уравнений (21.18) дает возможность определить коэффициенты c_{ji} , соответствующие энергии E_j и определяющие волновую функцию φ'_{j, k_0+k} :

$$\varphi'_{j, k_0+k} = \sum_i c_{ji} \left\{ \psi_{i k_0} + \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha, n' \neq i} k_{\alpha} \frac{p_{n' k_0, i k_0}^{\alpha}}{E(k_0) - E_{n'}(k_0)} \psi_{n' k_0} \right\} e^{i k x} \quad (21.21)$$

Коэффициенты c_{ji} образуют унитарную матрицу c .

Если число различных решений уравнения (21.20) равно m , т. е. вырождение полностью снимается, то все миноры определителя (21.20) отличны от нуля. В этом случае система (21.18) имеет единственное нормированное решение с точностью до произвольного фазового множителя в каждом столбце. Если же

происходит только частичное снятие вырождения, т. е. число различных решений уравнения (21.20) меньше m , то система уравнений (21.18), естественно, дает решения только с точностью до произвольного унитарного преобразования волновых функций, относящихся к состояниям, которые остаются вырожденными. Энергия $E(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ и волновые функции $\varphi'_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$ вблизи точки \mathbf{k}_0 , получающиеся из решения уравнений (21.18) и (21.20), автоматически удовлетворяют условиям совместности для представлений в точке \mathbf{k}_0 и соседних точках $\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}$: в тех направлениях, где согласно теории групп вырождение снимается не полностью, уравнение (21.20) будет иметь совпадающие решения, а волновые функции $\psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}} = \sqrt{\mathcal{V}} \varphi'_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$, определяемые по (21.21), преобразуются по представлениям $\mathcal{D}_V^{\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$, на которые согласно условиям совместности распадается представление $\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}$.

При достаточно малых \mathbf{k} квадратичные по \mathbf{k} члены в матрице \mathcal{H} малы по сравнению с линейными и \mathcal{H} является линейной функцией k_α . Поэтому вблизи окрестности точки \mathbf{k}_0 поправка к энергии $E_i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}_0)$ является однородной функцией первого порядка по k_α . Как следует из (21.18), коэффициент c_{ij} , будучи отношением двух однородных функций первого порядка, сам является однородной функцией k_α нулевого порядка, т. е. не зависит от величины \mathbf{k} , а только от направления вектора \mathbf{k} .

Таким образом, в достаточно малой окрестности вблизи точки вырождения зоны \mathbf{k}_0 волновые функции $\psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$ зависят от направления приближения к точке \mathbf{k}_0 . Этот результат был получен ранее в § 17. Формула (21.21) дает возможность конкретно определить зависимость $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$ от направления вектора \mathbf{k} .

Если линейные по k_α члены отсутствуют, то добавка к энергии $E_i(\mathbf{k})$ является однородной квадратичной функцией k_α и $\psi_{i, \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}}$ по-прежнему зависят только от направления вектора \mathbf{k} .

Явный вид матрицы $\mathcal{H}_{ij}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$, а поэтому и матрицы $c(\mathbf{k})$ зависит, естественно, от конкретного выбора базисных функций ψ_{i, \mathbf{k}_0} , однако энергия $E_i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ не зависит, конечно, от выбора базиса.

Необходимым условием экстремума, как и в случае невырожденной зоны, является обращение в нуль всех матричных элементов импульса:

$$p_{i\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0}^\alpha = 0.$$

Все изложенные выше соображения относительно «подозрительных» на экстремум точек в зоне Бриллюэна справедливы и для случая вырожденных зон.

Если волновые функции в точке \mathbf{k}_0 преобразуются по представлению $\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}$, то число отличных от нуля компонент оператора

импульса $p_{i\mathbf{k}_0, j\mathbf{k}_0}^\alpha$ равно числу N_1 единичных представлений, встречающихся в прямом произведении

$$\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0} \times \mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0},$$

где \mathcal{D}_1 — векторное представление, по которому преобразуются компоненты импульса. Число N_1 можно определить по характеристам представлений $\chi_\mu^{\mathbf{k}_0}$ и χ_1 согласно (19.43):

$$N_1 = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} |\chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 \chi_1(g). \quad (21.22)$$

Заметим, что, в отличие от случая невырожденной зоны, N_1 зависит от представления $\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}$, по которому преобразуются волновые функции в точке \mathbf{k}_0 .

Повторяя вывод, аналогичный выводу формулы (21.14) для случая невырожденной зоны, можно показать, что квадратичные по k_α матричные элементы $\mathcal{H}^{(2)}$ преобразуются как матричный элемент

$$\mathcal{H}_{ij}^{(2)} \sim \langle \psi_{i\mathbf{k}_0} | p^\alpha p^\beta + p^\beta p^\alpha | \psi_{j\mathbf{k}_0} \rangle. \quad (21.23)$$

Отсюда следует, что число независимых констант, определяющих матрицу $\mathcal{H}^{(2)}$ и, соответственно, спектр вблизи экстремума, равно числу N_2 единичных представлений, входящих в разложение прямого произведения представлений

$$\mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0} [\mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_1] \mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0},$$

т. е.

$$N_2 = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} |\chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 [\chi_1^2(g)]. \quad (21.24)$$

Если звезда $\{\mathbf{k}_0\}$ имеет несколько лучей \mathbf{k}_0^i , то в каждом из них зона m -кратно вырождена, а энергия $E(\mathbf{k}_0^i + \mathbf{k})$ вблизи точки \mathbf{k}_0^i получается, как и в случае невырожденной зоны, из энергии $E(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ вблизи точки \mathbf{k}_0 при помощи преобразования g_i , переводящего \mathbf{k}_0 в \mathbf{k}_0^i : $E(\mathbf{k}_0^i + \mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0 + g_i^{-1}\mathbf{k})$.

Инверсия времени. Учет инвариантности к инверсии времени при расчете энергетического спектра сказывается в двух отношениях. Во-первых, размерность представления, по которому преобразуются волновые функции в точке \mathbf{k}_0 , принадлежащие одной энергии $E(\mathbf{k}_0)$, должна быть удвоена в тех случаях, когда инверсия времени приводит к объединению представлений в точке \mathbf{k}_0 . Во-вторых, инверсия времени может накладывать дополнительные требования на волновые функции, что может привести к обращению в нуль матричных элементов импульса, не равных нулю из-за соображений симметрии.

Рассмотрим сначала случай 1, когда k_0 и $-k_0$ эквивалентны. Этот случай реализуется для $k_0 = 0$, а также тогда, когда k_0 находится на границе зоны Бриллюэна и $k_0 \equiv -k_0$. Как указывалось в § 18, этому случаю соответствуют три варианта: a_1 , b_1 и c_1 .

В случае a_1 наличие линейной связи между функциями $K\psi_{sk_0}$ и ψ_{sk_0} приводит к дополнительным ограничениям на матричные элементы операторов p^α и $p^\alpha p^\beta$, входящих в \mathcal{H} (21.19). Учитывая, что p^α по отношению к инверсии времени является нечетным оператором, для чисел N_1 и N_2 линейно независимых матричных элементов p^α и $p^\alpha p^\beta + p^\beta p^\alpha$ при $K^2 = 1$ согласно (19.45) получим

$$N_1 = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G_{k_0}} \chi_1(g) \{\chi_\mu^{k_0^2}(g)\}, \quad N_2 = \frac{1}{h'} \sum_{g \in G_{k_0}} [\chi_1^2(g)] [\chi_\mu^{k_0^2}(g)]. \quad (21.25)$$

В случаях b_1 и c_1 волновые функции $\psi_{sk_0}^*$ и ψ_{sk_0} линейно независимы, при этом в случае b_1 представления полной пространственной группы $\mathcal{D}_\mu^{(k_0)}$ и $\mathcal{D}_\mu^{(k_0)*}$ комплексны и неэквивалентны, а в случае c_1 комплексны и эквивалентны. Поэтому в случае b_1 представления группы волнового вектора $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*k_0}$ неэквивалентны и имеют комплексно сопряженные характеры, а в случае c_1 представления $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*k_0}$ эквивалентны. В случаях b_1 и c_1 происходит объединение полных представлений пространственных групп $\mathcal{D}_\mu^{(k_0)}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*(k_0)}$, которое приводит к объединению в каждой точке луча k_0^i представлений группы волнового вектора $\mathcal{D}_\mu^{k_0^i}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*k_0^i}$.

Таким образом, в случаях b_1 и c_1 кратность вырождения зоны в точке k_0 удваивается и базис состоит теперь из $2n_\mu$ функций ψ_{ik_0} и $\psi_{ik_0}^*$, $i = 1, 2, \dots, n_\mu$, где n_μ — размерность представления $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$.

При преобразованиях из группы G_{k_0} эти $2n_\mu$ функций преобразуются по объединенному представлению, которое является приводимым и имеет квазидиагональный вид:

$$\left\| \begin{array}{cc} \mathcal{D}_\mu^{k_0} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_\mu^{*k_0} \end{array} \right\|. \quad (21.26)$$

При вычислении матрицы возмущения \mathcal{H}_{ij} (21.19) ($i, j = 1, 2, \dots, 2n_\mu$), определяющей спектр и волновые функции вблизи точки k_0 , появятся как «диагональные» матричные элементы операторов p^α и $p^\alpha p^\beta$ между функциями ψ_{ik_0} , ψ_{jk_0} или $\psi_{ik_0}^*$, $\psi_{jk_0}^*$, так и «недиагональные» матричные элементы, соответствующие состояниям ψ_{ik_0} , $\psi_{jk_0}^*$. Число независимых «диагональных» матричных элементов операторов p^α и $p^\alpha p^\beta + p^\beta p^\alpha$ согласно (19.43)

определяется формулами (21.22) и (21.24), тогда как число «недиагональных» матричных элементов N_1 и N_2 в случаях c_1 и b_1 определяется формулами (21.25).

В случае 2 вектор $-\mathbf{k}_0$ не эквивалентен вектору \mathbf{k}_0 , но входит в звезду $\{\mathbf{k}_0\}$. Это будет в тех случаях, когда в группе G существует элемент R , который переводит \mathbf{k}_0 в $-\mathbf{k}_0$:

$$R\mathbf{k}_0 = -\mathbf{k}_0. \quad (21.27)$$

Поскольку звезда $\{\mathbf{k}_0\}$ неприводима, это означает, что звезды $\{\mathbf{k}_0\}$ и $-\{\mathbf{k}_0\}$ совпадают. Соотношение (21.27) может быть написано для каждого луча \mathbf{k}_0^i звезды $\{\mathbf{k}_0\}$ со своим $R^i = g_i R g_i^{-1}$, где g_i — элемент группы G , переводящий \mathbf{k}_0 в \mathbf{k}_0^i .

Как указывалось в § 18, в случае 2 также существуют три возможности: a_2 , b_2 и c_2 .

В случае a_2 существует линейная связь между функциями $K\psi_{s\mathbf{k}_0} = \psi_{s\mathbf{k}_0}^*$ и функциями $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и полные представления пространственной группы $\mathcal{D}_\mu^{(\mathbf{k}_0)}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0}$ эквивалентны.

Согласно (12.19) $\psi_{t, -\mathbf{k}_0} = R\psi_{t\mathbf{k}_0}$, поэтому в случае a_2 , как указывалось в § 18, существует линейная связь между функциями $\psi_{t\mathbf{k}_0}$ и функциями $KR\psi_{t\mathbf{k}_0}$, относящимися к одному лучу, что приводит к дополнительным требованиям на матричные элементы импульса, и в соответствии с (19.46) N_1 и N_2 определяются формулами

$$N_1 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} \chi_1(g) |\chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 - \chi_1(gR) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}((gR)^2),$$

$$N_2 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} [\chi_1^2(g)] |\chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 + [\chi_1^2(gR)] \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}((gR)^2). \quad (21.28)$$

В случаях b_2 и c_2 волновые функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}^*$ и $\psi_{t\mathbf{k}_0}$ линейно независимы. В этом случае нужно объединять полные представления пространственной группы $\mathcal{D}_\mu^{(\mathbf{k}_0)}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0}$, что приводит к объединению представлений в группе волнового вектора \mathbf{k}_0 .

Поскольку функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}^*$ относятся к лучу $-\mathbf{k}_0$, то в точке \mathbf{k}_0 , как указывалось в § 18, надо объединять представления, по которым преобразуются функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $KR\psi_{s\mathbf{k}_0}$, относящиеся к тому же лучу \mathbf{k}_0 , т. е. представления $\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}(g)$ и $\mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR)$, характеры которых связаны соотношением (18.35). Эти представления в случае c_2 эквивалентны, а в случае b_2 неэквивалентны. Поэтому в случаях b_2 и c_2 объединенное представление имеет вид

$$\left\| \begin{array}{cc} \mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}(g) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR) \end{array} \right\|. \quad (21.29)$$

Число независимых «диагональных» элементов матрицы \mathcal{H} , вычисленных на функциях $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $KR\psi_{s\mathbf{k}_0}$, определяется формулами (21.22) и (21.24); при этом в (21.22) и (21.24) нужно подставлять характеры представлений $\mathcal{D}_\mu^{\mathbf{k}_0}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR)$ соответственно. Для числа независимых «недиагональных» элементов матрицы \mathcal{H} в случаях b_2 и c_2 согласно (19.44) справедливы формулы

$$N_1 = \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G_{\mathbf{k}_0}'} \{ \chi_1(g) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR) - \chi_1(gR) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}((gR)^2) \},$$

$$N_2 = \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G_{\mathbf{k}_0}'} [\chi_1^2(g) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(g) \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR) + [\chi_1^2(gR)] \chi_\mu^{\mathbf{k}_0}((gR)^2)].$$
(21.30)

В случае 3 вектор $-\mathbf{k}_0$ не входит в звезду $\{\mathbf{k}_0\}$, т. е. в пространственной группе G нет элементов, превращающих \mathbf{k}_0 в $-\mathbf{k}_0$. В этом случае, как указывалось в § 18, возможен только вариант b_3 . Инверсия времени приводит к объединению полных представлений пространственной группы $\mathcal{D}_\mu^{(\mathbf{k}_0)}$ и $\mathcal{D}_\mu^{*(\mathbf{k}_0)}$, но поскольку их звезды $\{\mathbf{k}_0\}$ и $\{-\mathbf{k}_0\}$ не совпадают, это приводит не к увеличению размерности представления в точках \mathbf{k}_0 звезды $\{\mathbf{k}_0\}$, а к равенству энергии в точках \mathbf{k}_0 и $-\mathbf{k}_0$, которое в случае b_3 само по себе не является следствием симметрии кристалла.

Для случая b_3 для чисел N_1 и N_2 независимых матричных элементов p^α и $p^\alpha p^\beta + p^\beta p^\alpha$ справедливы формулы (21.22) и (21.24).

Спин-орбитальное взаимодействие. Учет спин-орбитального взаимодействия в зонной теории может быть проведен двумя способами.

В первом методе, справедливом при произвольном по величине спин-орбитальном взаимодействии, оператор \mathcal{H}_{c_0} (16.9) с самого начала включается в самосогласованный потенциал, так что новый потенциал $V' = V + \mathcal{H}_{c_0}$ таким образом становится зависящим от спиновых переменных. При этом волновые функции классифицируются по неприводимым двузначным представлениям пространственной группы.

Изложенный выше способ определения спектра полностью применим в этом случае, с тем отличием, что в соответствующих формулах нужно заменить оператор p на π (17.15), который, так же как и p , преобразуется по векторному представлению \mathcal{D}_1 и является нечетным по отношению к инверсии времени:

$$K^{-1}\pi K = K_0\sigma_y\pi\sigma_y K_0 = -\pi.$$

В случае двузначных представлений инверсия времени приводит в ряде случаев к объединению представлений группы волнового вектора, а также к дополнительным условиям на матричные элементы.

При этом и для двузначных представлений возможны случаи 1, 2 и 3, рассмотренные в § 18, однако при использовании критерия Херринга (18.32) нужно иметь в виду, что для спинорных представлений $K^2 = -1$. Вследствие этого, как указано в § 18, изменяется знак перед соответствующими слагаемыми в формулах для определения N_1 и N_2 .

Так, в случае a_1 , когда имеется линейная зависимость между функциями $K\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $\psi_{s\mathbf{k}_0}$,

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} \chi_1(g) [\chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0^2}(g)], \\ N_2 &= \frac{1}{h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} [\chi_1^2(g)] \{\chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0^2}(g)\}. \end{aligned} \quad (21.31)$$

В случаях b_1 и c_1 функции $K\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ линейно независимы, и в этом случае происходит объединение представлений $\mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}_0}$ и $\mathcal{D}_{\mu}^{*\mathbf{k}_0}$. Полная матрица представления группы волнового вектора имеет вид (21.26). Числа независимых «диагональных» матричных элементов матрицы \mathcal{H} определяются формулами (21.22) и (21.24), а «недиагональных» — формулами (21.31).

В случае a_2 , когда \mathbf{k}_0 и $-\mathbf{k}_0$ входят в одну звезду, функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $KR\psi_{i\mathbf{k}_0}$ линейно зависимы и числа N_1 и N_2 равны

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} \chi_1(g) |\chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 + \chi_1(gR) \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}((gR)^2), \\ N_2 &= \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} [\chi_1^2(g)] |\chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(g)|^2 - [\chi_1^2(gR)] \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}((gR)^2). \end{aligned} \quad (21.32)$$

В случаях b_2 и c_2 объединяются представления $\mathcal{D}_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(g)$ и $\mathcal{D}_{\mu}^{*\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR)$, матрица представления в точке \mathbf{k}_0 имеет вид (21.29). Числа N_1 и N_2 для «диагональных» элементов матрицы \mathcal{H} определяются формулами (21.22) и (21.24), а для «недиагональных» — формулой (19.44):

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} \chi_1(g) \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(g) \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR) + \chi_1(gR) \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}((gR)^2), \\ N_2 &= \frac{1}{2h'} \sum_{g \in G'_{\mathbf{k}_0}} [\chi_1^2(g)] \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(g) \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}(R^{-1}gR) - [\chi_1^2(gR)] \chi_{\mu}^{\mathbf{k}_0}((gR)^2). \end{aligned} \quad (21.33)$$

В случае b_3 инверсия времени снова приводит к эквивалентности точек \mathbf{k}_0 и $-\mathbf{k}_0$, а числа N_1 и N_2 даются формулами (21.22) и (21.24).

Подчеркнем, что при учете спин-орбитального взаимодействия в соответствующих формулах стоят характеры двузначных представлений пространственных групп.

Однако обычно величина спин-орбитального взаимодействия значительно меньше энергии порядка атомной, поэтому часто удобнее использовать второй метод, когда спин-орбитальное взаимодействие рассматривается как возмущение. В этом методе отчетливо выступают особенности зонной структуры, связанные именно со спин-орбитальным взаимодействием, и в зонных параметрах можно выделить релятивистски малые члены.

Поскольку расстояние между ближайшими зонами в ряде полупроводников также значительно меньше атомной энергии, то могут иметь место различные соотношения между величиной спин-орбитального расщепления и расстоянием до ближайшей зоны, которое, в частности, может быть шириной запрещенной зоны.

Рассмотрим сначала схему *kp*-метода в случае, когда спин-орбитальное взаимодействие значительно меньше расстояния до ближайшей зоны. В этом случае можно строить спектр при учете спин-орбитального взаимодействия только для рассматриваемой зоны.

Если без учета спина эта зона *m*-кратно вырождена в точке \mathbf{k}_0 и волновые функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ преобразуются по некоторому представлению \mathcal{D}^{k_0} группы волнового вектора (которое может быть и приводимым за счет объединения нескольких неприводимых представлений), то с учетом спина имеется $2m$ функций $\psi_{s\mathbf{k}_0\alpha}$ и $\psi_{s\mathbf{k}_0\beta}$, которые образуют базис представления $\mathcal{D}^{k_0} \times \mathcal{D}_{1/2}$. Это представление является в общем случае приводимым и может быть разложено по неприводимым двузначным представлениям пространственной группы, что означает, что спин-орбитальное взаимодействие в общем случае снимает *m*-кратное вырождение зоны в точке \mathbf{k}_0 .

Для определения величины спин-орбитального расщепления зоны и получения правильных функций в точке \mathbf{k}_0 , которые в данном случае являются линейными комбинациями функций $\psi_{s\mathbf{k}_0\alpha}$ и $\psi_{s\mathbf{k}_0\beta}$, нужно диагонализировать матрицу $\mathcal{H}_{\mathbf{c}\mathbf{o}}$, вычисленную на функциях $\psi_{s\mathbf{k}_0\alpha}$ и $\psi_{s\mathbf{k}_0\beta}$. Эта задача сводится к решению системы уравнений (21.20), где роль матрицы \mathcal{H} играет матрица $\mathcal{H}_{\mathbf{c}\mathbf{o}}$. Решая соответствующее системе характеристическое уравнение, получим $\mu \leq 2m$ решений $E_i(\mathbf{k}_0)$, разделенных некоторыми энергетическими интервалами Δ_i , описывающими спин-орбитальное расщепление зоны.

Для определения спектра вблизи точки \mathbf{k}_0 для каждой из отщепившихся зон $E_i(\mathbf{k}_0)$ можно использовать полученные выше формулы, при этом оператор \mathbf{p} следует всюду заменить на $\boldsymbol{\pi}$. Отличие от первого способа заключается в том, что здесь отчет-

ливо видно, из какой зоны без учета спин-орбитального взаимодействия произошла рассматриваемая зона.

Рассмотрение каждой из отщепившихся зон по отдельности возможно только в случае достаточно малых k , когда

$$E_i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}_0) \ll \Delta_i.$$

Если же энергия, отсчитанная от дна i -й расщепившейся зоны, становится сравнимой с расстоянием до ближайших расщепившихся зон, то для определения спектра следует решать уравнение (21.20) порядка $2m$, включая в матрицу \mathcal{H} , наряду с членами $k_\alpha p^\alpha$ и $k_\alpha k_\beta p^\alpha p^\beta$, и спин-орбитальное взаимодействие $\mathcal{H}_{\text{со}}$. Если величина спин-орбитального расщепления рассматриваемой зоны порядка или даже превосходит расстояние до ближайшей зоны, в частности ширину запрещенной зоны, то при вычислении волновых функций и энергии в точке \mathbf{k}_0 с учетом $\mathcal{H}_{\text{со}}$ следует в качестве базиса выбрать $2(m_1 + m_2)$ функций, относящихся к обеим зонам, т. е.

$$\psi_{s(n_1)\mathbf{k}_0\alpha}, \quad \psi_{s(n_1)\mathbf{k}_0\beta}, \quad \psi_{t(n_2)\mathbf{k}_0\alpha}, \quad \psi_{t(n_2)\mathbf{k}_0\beta},$$

где $s(n_1) = 1, 2, \dots, m_1$; $t(n_2) = 1, 2, \dots, m_2$.

Для определения правильных волновых функций в точке \mathbf{k}_0 , которые в этом случае могут включать все $2(m_1 + m_2)$ функций обеих зон, нужно решать систему (21.20), в которой роль возмущения играет матрица $\mathcal{H}_{\text{со}}$, вычисленная в указанном базисе, а энергия $E_i(\mathbf{k}_0)$ с учетом $\mathcal{H}_{\text{со}}$ дается корнями соответствующего характеристического уравнения (21.20).

Определение энергии вблизи \mathbf{k}_0 для каждой из полученных таким образом зон проводится рассмотренным выше методом. Может оказаться, что без учета $\mathcal{H}_{\text{со}}$ зона в точке \mathbf{k}_0 имеет нулевой наклон, но за счет релятивистских членов появляются отличные от нуля линейные по k_α члены в разложении энергии вблизи \mathbf{k}_0 . При этом в линейном по спин-орбитальному взаимодействию приближении такие члены возникают только во втором порядке теории возмущений по отношению к операторам $(\mathcal{H}_{\text{со}})_{\mathbf{k}_0}$ и $\hbar k p / m$ как перекрестные произведения их матричных элементов.

В первом приближении теории возмущения вклад от релятивистского слагаемого в π , т. е. от оператора $\frac{\hbar}{4mc^2} [\sigma \nabla V]$, равен нулю.

Действительно, этот вклад пропорционален матричным элементам $\langle n\mathbf{k}_0 | \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} | n'\mathbf{k}_0 \rangle$, где $n' = n$ для невырожденной зоны, а в случае вырожденной зоны состояния n и n' имеют одну энергию. Вычисляя матричный элемент от коммутатора

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \mathcal{H}_0 \right\} = \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}, \quad (21.34)$$

получим

$$\langle n\mathbf{k}_0 | \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} | n'\mathbf{k}_0 \rangle = i(E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)) p_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\alpha, \quad (21.35)$$

откуда следует, что для всех состояний n и n' с одинаковой энергией $E_n(\mathbf{k}_0) = E_{n'}(\mathbf{k}_0)$

$$\langle n\mathbf{k}_0 | \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} | n'\mathbf{k}_0 \rangle = 0.$$

В тех случаях, когда линейные по k_α члены в точке \mathbf{k}_0 имеют релятивистскую малость, точку \mathbf{k}_0 следует рассматривать как «подозрительную» на экстремум, так как малые линейные члены только несколько смещают его от точки \mathbf{k}_0 . В этом случае в матрицу \mathcal{H} наряду с квадратичными по k_α членами следует включать и малые линейные по k_α члены. Собственные значения матрицы \mathcal{H} дадут спектр вблизи точки \mathbf{k}_0 и новые положения экстремумов зоны \mathbf{k}'_0 .

Природу линейных по k_α членов можно определить с помощью теории групп. Использование однозначных представлений пространственных групп дает правила отбора для матричных элементов оператора ρ , в то время как соответствующие формулы для двузначных представлений определяют число не равных нулю компонент линейных по \mathbf{k} членов, входящих в матрицу \mathcal{H} при учете спин-орбитального взаимодействия. Если согласно правилам отбора для двузначных представлений какая-либо компонента $\pi^\alpha \neq 0$, но при этом использование однозначных представлений дает $p^\alpha = 0$, то это означает, что рассматриваемый матричный элемент имеет релятивистскую природу.

Изложенный в этом параграфе $k\rho$ -метод дает возможность найти спектр $E_i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ вблизи точки \mathbf{k}_0 и в более высоких приближениях по \mathbf{k} .

В связи с этим возникает вопрос, каков безразмерный параметр разложения энергии вблизи точки \mathbf{k}_0 и является ли квадратичное разложение энергии вблизи экстремума достаточным для описания различных физических явлений в полупроводниках.

Как видно из структуры формул теории возмущений (21.10), безразмерным параметром разложения является величина

$$\frac{\hbar}{m} \frac{k\rho_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}, \quad (21.36)$$

где $\rho_{n\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}$ — матричный элемент импульса (или оператора π при учете спин-орбитального взаимодействия) между зонами n и n' , а $E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)$ — расстояние между зонами в точке \mathbf{k}_0 .

Используя выражение (21.16) для энергии вблизи экстремума, легко показать, что параметр разложения может быть записан также в виде $\sqrt{E_k/\bar{E}}$, где E_k — кинетическая энергия носителей,

отсчитанная от дна зоны, а \bar{E} — некоторое среднее расстояние между рассматриваемой зоной и другими зонами n' . Если экстремумы валентной зоны и зоны проводимости находятся в одной точке \mathbf{k}_0 и матричный элемент импульса $p_{v\mathbf{k}_0, c\mathbf{k}_0}$ между валентной зоной и зоной проводимости не равен нулю, то в суммах (21.10) и (21.19) главный вклад в энергию дает взаимодействие этих двух зон и $\bar{E} \simeq E_g$. В этом случае критерий применимости квадратичного разложения имеет вид

$$\sqrt{E_k/E_g} \ll 1. \quad (21.37)$$

Поскольку в условиях термодинамического равновесия $E_k \simeq kT$ или μ для невырожденного и вырожденного электронного газа соответственно, где k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, μ — уровень Ферми, то из (21.37) следует, что в полупроводниках с достаточно большой шириной запрещенной зоны при не очень высоких температурах и не слишком больших концентрациях носителей тока критерий (21.37) может быть выполнен с достаточно хорошей точностью.

Двухзонная модель. В полупроводниках с малой шириной запрещенной зоны, однако, уже при сравнительно невысоких температурах и концентрациях носителей тока появляются заметные отклонения от параболической зависимости $E(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ от \mathbf{k} . Для описания спектра в этом случае используется так называемое двухзонное приближение. В двухзонном приближении гамильтониан $\mathcal{H}(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ строится сразу для двух близко расположенных зон, $\mathbf{k}p$ -взаимодействие между которыми учитывается точно, а взаимодействие с другими, более удаленными зонами — по теории возмущений.

В такой модели матричные элементы $\mathcal{H}_{nn'}$ определяются общей формулой (15.46). При этом в квадратичном по \mathbf{k} приближении «диагональные» блоки матрицы \mathcal{H} , т. е. матричные элементы между состояниями внутри зоны проводимости (которые мы будем обозначать индексами s, s') или состояниями валентной зоны (индексы t, t'), учитывают вклады от более далеких зон:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s(c), s'(c)} &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n' \neq c, v} k_\alpha k_\beta \left(\frac{p_{s(c)\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\alpha p_{n'\mathbf{k}_0, s'(c)\mathbf{k}_0}^\beta}{E_c(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{p_{s'(c)\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\beta p_{n'\mathbf{k}_0, s(c)\mathbf{k}_0}^\alpha}{E_c(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{ss'} + E_g \delta_{ss'}, \\ \mathcal{H}_{t(v), t'(v)} &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \left\{ \sum_{n' \neq c, v} \frac{p_{t(v)\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\alpha p_{n'\mathbf{k}_0, t'(v)\mathbf{k}_0}^\beta}{E_v(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{p_{t'(v)\mathbf{k}_0, n'\mathbf{k}_0}^\beta p_{n'\mathbf{k}_0, t(v)\mathbf{k}_0}^\alpha}{E_v(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \right\} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{tt'}. \end{aligned} \quad (21.38)$$

«Недиагональные» блоки матрицы \mathcal{H} между состояниями внутри валентной зоны и зоны проводимости содержат линейные по k_α члены:

$$\mathcal{H}_{s(c), t(v)} = \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{s(c)k_0, t(v)k_0}^{\alpha}. \quad (21.39)$$

В случае необходимости можно учесть междузонные члены и более высокого порядка по k .

В соответствии с формулой (15.34) базисом этого представления являются функции

$$\begin{aligned} \psi'_{s(c)k_0} &= \psi_{s(c)k_0} + \frac{\hbar}{m} \sum_{n' \neq c, v, \alpha} \frac{k_{\alpha} p_{n'k_0, s(c)k_0}^{\alpha} \psi_{n'k_0}}{E_c(k_0) - E_{n'}(k_0)}, \\ \psi'_{t(v)k_0} &= \psi_{t(v)k_0} + \frac{\hbar}{m} \sum_{n' \neq c, v, \alpha} \frac{k_{\alpha} p_{n'k_0, t(v)k_0}^{\alpha} \psi_{n'k_0}}{E_v(k_0) - E_{n'}(k_0)}. \end{aligned} \quad (21.40)$$

При малых k , когда энергия E_k , отсчитанная от дна соответствующей зоны E_c или E_v , мала по сравнению с $E_g = E_c(k_0) - E_v(k_0)$, двухзонная модель приводит к тем же результатам, что и рассмотрение каждой из зон отдельно, но если $E_k \sim E_g$, в каждой из зон возникает непараболическая зависимость энергии от k .

Точность двухзонного приближения определяется параметром $\sqrt{E_k/\bar{E}}$, где \bar{E} — расстояние до более далеких зон, и обычно вполне достаточна для удовлетворительного описания спектра в полупроводниках с малой шириной запрещенной зоны.

§ 22. ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КРИСТАЛЛЕ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Уравнение, описывающее движение электрона в кристалле при наличии внешних полей, возмущающих периодическое поле решетки $V_0(\mathbf{x})$, имеет вид

$$\mathcal{H}\Psi = \left[\mathcal{H}_0 \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathcal{A}(\mathbf{x}, t) \right) + U(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} g_0 \mu_0 (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}) \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (22.1)$$

где

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} ([\boldsymbol{\sigma} \nabla V_0] \mathbf{p}) \quad (22.1a)$$

— оператор Шредингера для идеальной решетки, $\mu_0 = e\hbar/2mc$ — магнетон Бора, g_0 — g -фактор для свободных электронов.

Внешние поля, электрическое и магнитное, задаются векторным потенциалом $\mathcal{A}(\mathbf{x}, t)$ и скалярным потенциалом $U(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathcal{E} = -\nabla U + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathcal{A}.$$

Хотя всегда можно выбрать калибровку, где $U = 0$, мы рас-

смотрим общий случай, так как в ряде задач удобнее задавать именно скалярный потенциал.

Точное решение уравнения (22.1) является еще более сложной задачей, чем определение спектра и волновых функций в идеальном кристалле. Однако если внешние поля достаточно плавные, т. е. мало меняются на расстояниях порядка постоянной решетки, а частота их изменения со временем намного меньше величины $\Delta E/\hbar$, где ΔE — расстояние между ближайшими зонами по вертикали, т. е. при том же \mathbf{k}_0 , то для электронов, находящихся вблизи экстремума \mathbf{k}_0 , задачу о движении в возмущенном периодическом поле можно свести к задаче о движении частицы с определенной эффективной массой в медленно меняющемся внешнем поле. В случае вырожденных зон движение этой частицы описывается системой уравнений, определяемых тем же оператором $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ (21.19), которым согласно (21.20) определяется и спектр носителей вблизи экстремума. Поэтому это приближение называется методом эффективной массы.

В этом методе волновая функция Ψ записывается в виде произведения медленно меняющихся функций $\mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t)$ и собственных функций $\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{x})$ невозмущенного гамильтониана \mathcal{H}_0 в точке \mathbf{k}_0 :

$$\Psi = \sum_n \mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t) \psi_{n\mathbf{k}_0}. \quad (22.2)$$

При этом зона в общем случае предполагается вырожденной, т. е. одному значению энергии могут соответствовать разные функции $\psi_{n\mathbf{k}_0}$, в том числе и состояния, отличающиеся спином.

Функцию $\mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t)$ разложим в ряд Фурье:

$$\mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V^{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad (22.3)$$

где

$$c_{n\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{V^{\mathcal{V}}} \int \mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (22.4)$$

Здесь, как и в § 21, объем кристалла \mathcal{V} предполагается конечным и соответственно значения \mathbf{k} дискретны. Если функции $\mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t)$ достаточно плавные, то основной вклад в (22.3) дают малые \mathbf{k} . Подставив (22.3) в (22.2), получим разложение $\Psi(\mathbf{x}, t)$

по функциям $\varphi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{V^{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \psi_{n\mathbf{k}_0} = \frac{1}{V^{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}_0}$:

$$\Psi = \sum_n \sum_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}(t) \varphi_{n\mathbf{k}}. \quad (22.5)$$

Перейдем теперь в $n\mathbf{k}$ -представление, для чего подставим (22.5) в (22.1), умножим правую и левую части уравнения на $\varphi_{n'\mathbf{k}'}^* = \frac{1}{V^{\mathcal{V}}} \psi_{n'\mathbf{k}_0}^* e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{x}}$ и проинтегрируем по \mathbf{x} , учитывая, что

согласно (21.4), (21.8) и (21.7)

$$\langle \varphi_{n'k'} | \varphi_{nk} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{kk'}, \quad \langle \varphi_{n'k'} | \pi \varphi_{nk} \rangle = \pi_{n'n} \delta_{kk'},$$

$$\mathcal{H}(p) e^{ikx} = e^{ikx} \mathcal{H}(p + \hbar k).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n'k'} | \mathcal{H} | \varphi_{nk} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{V}^0} \langle \psi_{n'k_0} e^{i(k-k')x} | \mathcal{H}_0(p) | \psi_{nk_0} \rangle + \\ &+ \frac{1}{2m} \frac{1}{\mathcal{V}^0} \langle \psi_{n'k_0} e^{i(k-k')x} | 2\hbar k \pi + \frac{e}{c} (\mathcal{A} \pi + \pi \mathcal{A}) | \psi_{nk_0} \rangle + \\ &+ \frac{1}{2m} \langle \varphi_{n'k'} | \left(\hbar k + \frac{e}{c} \mathcal{A} \right)^2 | \varphi_{nk} \rangle + \langle \varphi_{n'k'} | U(x, t) | \varphi_{nk} \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} g_0 \mu_0 \langle \varphi_{n'k'} | \sigma \mathbf{H} | \varphi_{nk} \rangle. \end{aligned} \quad (22.6)$$

Далее разложим все функции от координат $\mathcal{A}(x)$, $\mathcal{A}^2(x)$, $U(x)$ и $\mathbf{H}(x)$ в ряды Фурье:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(x) &= \sum_q \mathcal{A}_q e^{iqx}, & \mathcal{A}^2(x) &= \sum_q \mathcal{A}_q^{(2)} e^{iqx}, \\ U(x) &= \sum_q U_q e^{iqx}, & \mathbf{H}(x) &= \sum_q \mathbf{H}_q e^{iqx}, \end{aligned} \quad (22.7)$$

где

$$\mathcal{A}_q = \frac{1}{\mathcal{V}^0} \int \mathcal{A}(x) e^{-iqx} dx, \quad \mathcal{A}_q^{(2)} = \frac{1}{\mathcal{V}^0} \int \mathcal{A}^2(x) e^{-iqx} dx \quad \text{и т. д.},$$

причем при конечном объеме \mathcal{V}^0 векторы q , как и k , принимают дискретные значения.

Как видно из (22.6), матричные элементы берутся либо непосредственно от этих функций, либо от произведений $\mathcal{A} \pi$ или $\pi \mathcal{A}$. Разложив произведение $\psi_{n'k_0}^* \psi_{nk_0}$, которое является периодической функцией координат, в ряд Фурье по векторам обратной решетки b_M ,

$$\psi_{n'k_0}^* \psi_{nk_0} = \mathcal{V}^0 \sum_M B_M^{n'n} e^{-ib_M x},$$

найдем, что для любой функции $f(x) = \sum_q f_q e^{iqx}$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n'k'} | f(x) | \varphi_{nk} \rangle &= \\ &= \sum_{Mq} f_q B_M^{n'n} \int e^{i(k-k'+q-b_M)x} dx = \mathcal{V}^0 \sum_M f_{k'-k+b_M} B_M^{n'n}. \end{aligned}$$

Если функция $f(x)$ мало меняется на расстояниях порядка постоянной решетки, то всеми компонентами $f_{k'+b_M-k}$, кроме компоненты с $M=0$, можно пренебречь, и так как согласно (21.4) $\mathcal{V}^0 B_0^{n'n} = \frac{1}{\mathcal{V}^0} \langle \psi_{n'k_0} \psi_{nk_0} \rangle = \delta_{nn'}$, то

$$\langle \varphi_{n'k'} | f(x) | \varphi_{nk} \rangle = f_{k-k'} \delta_{nn'}. \quad (22.8)$$

Аналогичным образом можно разложить в ряд Фурье периодическую функцию

$$\psi_{n'k_0} \pi \psi_{nk_0} = \gamma \sum_M R_M^{n'n} e^{ib_M x}.$$

Тогда после интегрирования по x при достаточно плавной функции $\mathcal{A}(x)$ в сумме

$$\frac{1}{\gamma} \langle \psi_{n'k_0} e^{i(k-k')x} | \mathcal{A}(x) \pi | \psi_{nk_0} \rangle = \gamma \sum_M \mathcal{A}_{k'+b_{M-k}} R_M^{n'n}$$

надо также оставить лишь слагаемое с $M=0$. Так как

$$\gamma R_0^{n'n} = \frac{1}{\gamma} \langle \psi_{n'k_0} \pi \psi_{nk_0} \rangle = \pi_{n'n}, \quad \text{а} \quad \pi e^{iqx} = e^{iqx} (\pi + \hbar q),$$

то

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \langle \psi_{n'k_0} e^{i(k-k')x} | \mathcal{A}(x) \pi | \psi_{nk_0} \rangle &= \mathcal{A}_{k'-k} \pi_{n'n}, \\ \frac{1}{\gamma} \langle \psi_{n'k_0} e^{i(k-k')x} | \pi \mathcal{A}(x) | \psi_{nk_0} \rangle &= \mathcal{A}_{k'-k} (\pi_{n'n} + \hbar(k' - k) \delta_{nn'}). \end{aligned} \quad (22.9)$$

Используя (22.7) — (22.9), матрицу $\mathcal{H}_{n'k', nk}$ можно представить в виде суммы трех матриц: матрицы \mathcal{H}_0 ,

$$(\mathcal{H}_0)_{n'k', nk} = E_n \delta_{n'n} \delta_{k'k}, \quad \text{где} \quad E_n = E_n(k_0), \quad (22.10a)$$

матрицы \mathcal{H}_1 , содержащей только внутризонные члены,

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_1)_{n'k', nk} &= \frac{1}{2m} \left\{ \hbar^2 k^2 \delta_{kk'} + \frac{e\hbar}{c} (k' + k) \mathcal{A}_{k'-k} + \frac{e^2}{c^2} \mathcal{A}_{k'-k}^{(2)} \right\} \delta_{nn'} + \\ &+ U_{k'-k} \delta_{nn'} + \frac{1}{2} g_0 \mu_0 \sigma_{n'n} H_{k'-k}, \end{aligned} \quad (22.10b)$$

и матрицы \mathcal{H}_2 , содержащей междузонные члены,

$$(\mathcal{H}_2)_{n'k', nk} = \frac{1}{m} \left(\hbar k \delta_{kk'} + \frac{e}{c} \mathcal{A}_{k'-k} \right) \pi_{n'n}. \quad (22.10b)$$

В результате получаем систему уравнений

$$\sum_n \sum_k \{ (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)_{n'k', nk} + E_n \delta_{nn'} \delta_{k'k} \} c_{nk} = i\hbar \frac{\partial c_{n'k'}}{\partial t}. \quad (22.11)$$

Система уравнений (22.11) содержит сумму по всем зонам. Для того чтобы получить приближенное уравнение, содержащее лишь функции c_{mk} одной зоны, надо устранить в соответствующем приближении междузонные члены, которые содержатся в \mathcal{H}_2 . Если бы уравнение (22.1) включало только скалярный

потенциал, то оператор \mathcal{H}_2 совпадал бы с оператором \mathcal{H}_2 в (21.9) и для устранения этих членов надо было бы совершить такое же преобразование, как и при переходе к (21.10). Если же \mathcal{H}_2 включает и слагаемое $\mathcal{A}\pi$ и вектор-потенциал явно зависит от t , то и матрица \mathbf{S} преобразования (15.33) в соответствии с (15.40) и (15.43) также явно зависит от t . Поэтому при преобразовании (15.33) правая часть уравнения (22.11) переходит в

$$i\hbar e^{-S} \frac{\partial}{\partial t} c_{n'k'} = i\hbar \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \bar{c}_{n'k'}, \quad (22.11a)$$

где согласно (15.33a) $\bar{c} = e^{-S} c$.

Если характерная частота изменения \mathcal{A} , а следовательно и \mathbf{S} , равна ω , то первое слагаемое в (22.11a) в соответствии с (15.44) равно

$$\sum_s \frac{\hbar\omega}{E_s - E_{n'}} (\mathcal{H}_2)_{n'k', sk} \bar{c}_{n'k'}.$$

Следовательно, оно в $\hbar\omega/(E_s - E_{n'})$ раз меньше основного слагаемого $(\mathcal{H}_2)_{n'k', sk}$, устраняемого преобразованием (15.33). Если $\hbar\omega$ мало по сравнению с расстоянием до ближайшей из зон s , для которой матричный элемент π_{ms} отличен от нуля, то этим слагаемым можно пренебречь. Если же это условие не выполняется, то метод эффективной массы, во всяком случае в однозонной модели, неприменим.

Опустив указанное слагаемое, получим систему уравнений, содержащих лишь внутризонные матричные элементы:

$$\sum_{mk} \mathcal{H}_{m'k', mk} \bar{c}_{mk} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{c}_{m'k'}, \quad \text{где } \bar{c}_{mk} = \bar{c}_{mk} e^{-iE_m t/\hbar} \quad (22.12)$$

и в соответствии с (15.47) во втором приближении теории возмущений

$$\mathcal{H}_{m'k', mk} = (\mathcal{H}_1)_{m'k', mk} + (\mathcal{H}_2)_{m'k', mk} + \sum_{sk''} \frac{(\mathcal{H}_2)_{m'k', sk''} (\mathcal{H}_2)_{sk'', mk}}{E_m - E_s}. \quad (22.13)$$

В отличие от (15.47) здесь каждое состояние характеризуется двумя индексами n и k , и поэтому суммирование по промежуточным состояниям включает суммирование по k'' , но энергии E_m и E_s , как видно из (22.10a), от k'' не зависят. Для того чтобы в (22.12) снова перейти к x -представлению, надо в соответствии с (22.3) умножить правую и левую части на $(1/\sqrt{\mathcal{V}}) e^{ik'x}$ и просуммировать по k' .

Как видно из (22.10), здесь имеются суммы четырех типов. Прежде всего это суммы вида $\sum_{k'k} \hat{f}_{k'-k} e^{ik'x} c_{mk}$, где \hat{f}_q — фурье-компоненты U , H_α , \mathcal{A}_α или \mathcal{A}^2 . В соответствии с (22.3) и (22.7)

эти суммы можно преобразовать:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_{kk'} f_{k'-k} e^{ik'x} \bar{c}_{mk} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_q f_q e^{iqx} \sum_k \bar{c}_{mk} e^{ikx} = \bar{f}(x) F_m(x), \end{aligned} \quad (22.14a)$$

где

$$F_m(x) = \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_k \bar{c}_{mk} e^{ikx}, \quad q = k' - k.$$

Как указывалось выше, здесь предполагается, что $f(x)$ является плавной функцией и основной вклад в (22.3) и (22.7) дают q , малые по сравнению с обратными векторами решетки; при этом условии сумма по q не зависит от верхнего предела, а следовательно, и от k , и сумму от произведения можно заменить произведением сумм*).

При выполнении этого условия таким же образом можно преобразовать и суммы вида

$$\frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_{k'k} k_a^n e^{ik'x} \delta_{kk'} \bar{c}_{mk} = \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_a} \right)^n \sum_k e^{ikx} \bar{c}_{mk} = k_a^n F_m(x), \quad (22.14б)$$

где $k = -i\nabla$. Аналогично

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_{kk'} (k + k') \mathcal{A}_{k'-k} e^{ik'x} \bar{c}_{mk} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_{qk} (2k + q) \mathcal{A}_q e^{iqx} \bar{c}_{mk} e^{ikx} = (k\mathcal{A} + \mathcal{A}k) F_m(x). \end{aligned} \quad (22.14в)$$

Для последнего слагаемого в (22.13), содержащего междузонные члены, таким же образом получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\gamma^p}} \sum_{k''k'} \left(\hbar k_a \delta_{k'k''} + \frac{e}{c} \mathcal{A}_{k'-k''}^\alpha \right) \left(\hbar k_\beta'' \delta_{k''k} + \frac{e}{c} \mathcal{A}_{k''-k}^\beta \right) e^{ik'x} \bar{c}_{mk} &= \\ &= \left(\hbar k_a + \frac{e}{c} \mathcal{A}_\alpha \right) \left(\hbar k_\beta + \frac{e}{c} \mathcal{A}_\beta \right) F_m(x). \end{aligned} \quad (22.14г)$$

*) Тем самым истинный потенциал $f(x)$ заменяется сглаженным

$$\bar{f}(x) = \sum_{q \leq 1/a_0} f_q e^{iqx},$$

который «в среднем» совпадает с $f(x)$, но на малых расстояниях, сравнимых с постоянной решетки a_0 , может сильно осциллировать. Если f_q слабо убывает с q , как это имеет место, например, в случае линейного хода $U(x) = -e\mathcal{E}x$ или $\mathcal{A}(x) = 1/2 [Hx]$, то выражения (22.14) справедливы, лишь если $F(x)$ — достаточно плавная функция. Например, в последнем случае требуется, чтобы магнитная длина $L = (\hbar c/eH)^{1/2}$ была намного больше a_0 ; при этом погрешность при замене $f(x)$ на $\bar{f}(x)$ порядка $\exp(-L^2/a_0^2)$.

В результате система уравнений (22.11) в x -представлении запишется так:

$$\sum_m \mathcal{H}_{m'm} F_m(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} F_{m'}(\mathbf{x}, t), \quad (22.15)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'm} = & \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \delta_{mm'} + \frac{\hbar K}{m} \pi_{m'm} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_s \frac{(K\pi_{m's})(K\pi_{sm})}{E_m - E_s} + \\ & + U(\mathbf{x}) \delta_{mm'} + \frac{1}{2} \mu_0 g_0 (\sigma_{m'm} \mathbf{H}), \end{aligned} \quad (22.16)$$

где

$$K = -i\nabla + \frac{e}{\hbar c} \mathcal{A}(\mathbf{x}, t). \quad (22.17)$$

При наличии магнитного поля, когда компоненты K_α не коммутируют, удобно представить произведение $K_\alpha K_\beta$ в (22.16) в виде симметризованного и антисимметризованного произведений:

$$[K_\alpha K_\beta] = \frac{1}{2} (K_\alpha K_\beta + K_\beta K_\alpha), \quad (22.18)$$

$$\{K_\alpha K_\beta\} = K_\alpha K_\beta - K_\beta K_\alpha = -i \frac{e}{\hbar c} \left(\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta} \right) = -\frac{ie}{\hbar c} \sum_\gamma \delta_{\alpha\beta\gamma} H_\gamma, \quad (22.19)$$

где $\delta_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор; $\delta_{\alpha\beta\gamma} = 1$, если все три индекса различны и следуют в прямом порядке, т. е. как x, y, z ; при обратном порядке $\delta_{\alpha\beta\gamma} = -1$, а при равных индексах $\delta_{\alpha\beta\gamma} = 0$.

В результате для точек нулевого наклона, где $\pi_{m'm} = 0$, выражение (22.16) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'm} = & \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\alpha\beta} [K_\alpha K_\beta] \left(\delta_{\alpha\beta} \delta_{mm} + \frac{1}{m} \sum_s \frac{\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta + \pi_{m's}^\beta \pi_{sm}^\alpha}{E_m - E_s} \right) + \\ & + U(\mathbf{x}) \delta_{m'm} + \frac{1}{2} \mu_0 \sum_\gamma H_\gamma \left(g_0 \sigma_{m'm}^\gamma - \frac{i}{m} \sum_{s\alpha\beta} \frac{\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta}{E_m - E_s} \delta_{\alpha\beta\gamma} \right). \end{aligned} \quad (22.20)$$

Если внешние поля отсутствуют, то $F_m = \exp\{i[\mathbf{k}\mathbf{x} - (Et/\hbar)]\}$, и из формулы (22.15) следует выражение (21.19), определяющее спектр $E(\mathbf{k})$ вблизи точки \mathbf{k}_0 . Если зона вырождена из-за инверсии времени, то, как указывалось в § 18, в качестве базиса можно выбрать две линейно независимые функции, соответствующие энергии E_m : $\psi_{1\mathbf{k}_0}$ и $\psi_{2\mathbf{k}_0} = KR\psi_{1\mathbf{k}_0}$, где K — операция инверсии времени, а R — операция, обращающая \mathbf{k}_0 в $-\mathbf{k}_0$. Соответственно плавные функции $F_m(\mathbf{x})$ можно представить в виде одной двухкомпонентной функции с компонентами $F_1(\mathbf{x})$ и $F_2(\mathbf{x})$. Если вырождение не снимается при $\mathbf{k} \neq 0$, то матрица $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ в соответствии с (21.11), (21.12) диагональна, и эти функции, согласно

(22.20), определяются уравнением

$$\left(\sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}} [K_{\alpha} K_{\beta}] + U(\mathbf{x}, t) + \mu_0 \left(\frac{1}{2} g_0 \sigma + \mathbf{L}, \mathbf{H} \right) \right) F = i\hbar \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (22.21)$$

При этом тензор $m_{\alpha\beta}^{-1}$ определяется выражением (21.12), а компоненты матрицы \mathbf{L} , описывающей орбитальный вклад в эффективный магнитный момент электрона, в соответствии с (22.20) равны

$$L_{ij}^Y = - \frac{i}{2m} \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta_{\alpha\beta\gamma} \frac{\pi_{i_s}^{\alpha} \pi_{s_j}^{\beta}}{(E_m - E_s)} \quad (i = 1, 2; \quad j = 1, 2). \quad (22.22)$$

Таким образом, уравнение (22.21) отличается от уравнения Шредингера для свободного электрона лишь заменой массы m на эффективную массу, которая в общем случае анизотропна, и σ — на $\sigma + \mathbf{L}$.

В приведенных выше формулах оператор спин-орбитального взаимодействия \mathcal{H}_{co} везде включался в \mathcal{H}_0 . Если спин-орбитальное расщепление невелико по сравнению с расстоянием до ближайшей зоны, то оператор \mathcal{H}_{co} можно рассматривать как возмущение, как это делалось в § 21, и в качестве базиса можно взять произведение координатных функций на спиновые: $\psi_{m\mu k_0} = \psi_{m k_0} Y_{\mu}^{1/2}$ ($\mu = \pm 1/2$). При этом оператор π нужно заменить на p , а в $\mathcal{H}_{m'k, m k}$ надо включить $\mathcal{H}_{co}^0 = \mathcal{H}_{co}(0)$, члены первого порядка по \mathcal{H}_{co} и перекрестные члены — первого порядка по $\mathcal{H}_{co}^0 = \mathcal{H}_{co}(0)$ и по \mathcal{H}_2 , появляющиеся во втором приближении теории возмущений. При необходимости учета релятивистских поправок к эффективной массе и магнитному моменту надо также учесть члены третьего приближения: первого порядка по \mathcal{H}_{co}^0 и второго по \mathcal{H}_2 . Учет этих слагаемых в соответствии с (15.51) эквивалентен переходу в (22.20) от базиса $\psi_{m\mu k_0}$ к базису

$$\bar{\psi}_{m\mu k_0} = \psi_{m\mu k_0} + \sum_{s\mu'} \frac{(\mathcal{H}_{co})_{s\mu', m\mu}}{E_m - E_s} \psi_{s\mu' k_0}. \quad (22.23)$$

В приведенных выше общих формулах природа внешних полей не конкретизировалась. Практически эти поля либо создаются примесями или дефектами в полупроводнике, либо прикладываются извне. Из последних задач особый интерес представляет рассмотрение свойств полупроводника в постоянном магнитном поле и скрещенных электрическом и магнитном полях.

Остановимся коротко на вопросе о пределах применимости метода эффективной массы. В приведенном выше выводе предполагалось, что поля $\mathcal{E}(\mathbf{x})$ и $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ достаточно плавные и поэтому в разложениях (22.7) можно пренебречь всеми слагаемыми, которые содержат q , выходящее за пределы первой зоны Бриллюэна, т. е. существенные значения q должны быть меньше

любого из векторов обратной решетки. В задаче о примесном центре этот критерий выполняется лишь на достаточно больших расстояниях от примеси, тогда как на расстояниях, сравнимых с постоянной решетки, поле центра уже не является кулоновским и может меняться достаточно резко. Поэтому здесь существен размер области локализации электрона, о котором можно судить по величине энергии связи. Если эта область захватывает достаточно большой объем по сравнению с объемом элементарной ячейки, то метод эффективной массы применим. Энергия ионизации таких центров мала по сравнению с шириной запрещенной зоны, и поэтому они называются мелкими. Если же электрон локализован в пределах элементарной ячейки и уровни электрона на этом центре лежат вблизи середины запрещенной зоны, то для их описания метод эффективной массы неприменим. Такие центры называются глубокими.

Для электрона во внешнем магнитном поле условие плавности поля H , как указывалось выше, является недостаточным. Необходимо также, чтобы поле было не очень сильным, для того чтобы магнитная длина, т. е. область локализации электрона $L = (\hbar c/eH)^{1/2}$, существенно превышала постоянную решетки. Соответственно расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_c = eH/m^*c$ должно быть мало по сравнению с шириной запрещенной зоны E_g . В электрическом поле \mathcal{E} должно быть мало отношение $e\mathcal{E}a_0/E_g$.

В случае скрещенных электрических и магнитных полей условие, накладываемое на величину электрического поля, более жесткое. В этом случае электрон, вращаясь вокруг оси z , направленной вдоль магнитного поля, дрейфует в направлении x , перпендикулярном \mathcal{E} и H , со скоростью $v_x = c\mathcal{E}/H$. Энергия, соответствующая этому движению, $m^*v_x^2/2 = m^*c^2\mathcal{E}^2/2H^2$. Такую же кинетическую энергию электрон в среднем набирает и при своем вращении за счет ускорения электрическим полем.

Очевидно, что метод эффективной массы применим до тех пор, пока эта энергия мала по сравнению с шириной запрещенной зоны, т. е. при

$$\frac{\mathcal{E}}{H} \ll \left(\frac{E_g}{2m^*c^2} \right)^{1/2} = \frac{s}{c}; \quad \text{здесь} \quad s^2 = \frac{E_g}{2m^*}. \quad (22.24)$$

Если расстояние между двумя или несколькими ближайшими зонами мало по сравнению с их расстоянием до других зон, то можно существенно расширить пределы применимости метода эффективной массы, перейдя от однозонного приближения к двух- или многозонному. Условием применимости этого приближения является малость соответствующих энергий или частот изменения внешних полей по сравнению с расстоянием до других более далеких зон, которое может значительно превышать ширину запрещенной зоны. Конечно, требование плавности внешних полей при этом остается в силе.

Многозонная модель. Как указывалось в § 21, в многозонной модели в уравнении (22.11) преобразованием (15.33) устраняются лишь междузонные члены, соответствующие взаимодействию рассматриваемых зон с более далекими, а взаимодействие ближайших зон учитывается точно.

При этом энергию удобно отсчитывать от значения \bar{E} , лежащего между рассматриваемыми зонами, и соответственно в экспоненте в (22.12) надо писать \bar{E} . Тогда система уравнений в \mathbf{k} -представлении будет отличаться от (22.12) лишь заменой $\mathcal{H}_{m'k', mk}$ на $\mathcal{H}_{m'k', mk} + E_m \delta_{mm'} \delta_{kk'}$. При этом в соответствии с общей формулой (15.46) во втором приближении теории возмущений вместо (22.13) будем иметь

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'k', mk} &= E_m \delta_{mm'} \delta_{kk'} + (\mathcal{H}_1)_{m'k', mk} + (\mathcal{H}_2)_{m'k', mk} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_s \sum_{k''} (\mathcal{H}_2)_{m'k', sk''} (\mathcal{H}_2)_{sk'', mk} \left(\frac{1}{E_m - E_s} + \frac{1}{E_{m'} - E_s} \right). \end{aligned} \quad (22.25)$$

Соответственно после перехода к \mathbf{x} -представлению вместо (22.15) и (22.20) получим систему уравнений

$$\sum_m (\mathcal{H}_{m'm} + E_m \delta_{mm'}) F_m = i\hbar \frac{\partial F_{m'}}{\partial t}, \quad (22.26)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'm} &= \frac{\hbar \mathbf{K}}{m} \pi_{m'm} + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\alpha\beta} [K_\alpha K_\beta] \times \\ &\times \left\{ \delta_{\alpha\beta} \delta_{m'm} + \frac{1}{2m} \sum_s (\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta + \pi_{m's}^\beta \pi_{sm}^\alpha) \left(\frac{1}{E_m - E_s} + \frac{1}{E_{m'} - E_s} \right) \right\} + \\ &+ U(\mathbf{x}) \delta_{mm'} + \frac{1}{2} \mu_0 \sum_\gamma H_\gamma \left\{ g_0 \sigma_{m'm}^\gamma - \frac{i}{2m} \sum_{\alpha\beta} \pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta \delta_{\alpha\beta\gamma} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{1}{E_m - E_s} + \frac{1}{E_{m'} - E_s} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (22.27)$$

Как указывалось в § 21, при определении спектра в квадратичном по \mathbf{k} приближении междузонные члены второго порядка по \mathbf{k} в $\mathcal{H}_{m'm}$ можно не учитывать, так как они дают вклад в энергию третьего порядка по \mathbf{k} . Однако при рассмотрении различных эффектов во внешних полях эти члены могут быть существенны. Так, именно эти слагаемые приводят к комбинированному резонансу, т. е. перевороту спина, вызываемому переменным электрическим полем (см. § 33), а не магнитным, как это имеет место при парамагнитном резонансе. Эти же слагаемые приводят к эффекту Покелса, т. е. двойному лучепреломлению в кубических кристаллах без центра инверсии, возникающему при наложении постоянного электрического поля и связанному с линейным по полю изменением диэлектрической проницаемости.

Заметим, что в тех случаях, когда группа волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$ включает инверсию и ее представления имеют определенную четность, матрица $\mathcal{H}_{m'm}$ может содержать или линейные по \mathbf{k} междузонные члены, если представления, соответствующие зонам m и m' , имеют разную четность, или лишь квадратичные, если четность этих представлений одинакова.

Рассмотрим коротко некоторые конкретные задачи, решаемые в методе эффективной массы.

Мелкий примесный центр. Из случаев, когда поле создается примесями или дефектами, особый интерес представляет задача о мелком примесном центре, создаваемом ионом примеси, замещающим один из атомов решетки и имеющим избыточный положительный или отрицательный заряд Ze . На достаточном расстоянии от иона, превышающем одну-две постоянных решетки, поле иона можно считать кулоновским:

$$U(\mathbf{x}) = -\frac{Ze^2}{\kappa|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|}, \quad (22.28)$$

где \mathbf{x}_0 — координата иона, а κ — статическая диэлектрическая проницаемость. В анизотропных кристаллах, где κ является тензором, величину $\kappa|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$ надо заменить на

$$[\kappa_{yy}\kappa_{zz}(x - x_0)^2 + \kappa_{zz}\kappa_{xx}(y - y_0)^2 + \kappa_{xx}\kappa_{yy}(z - z_0)^2]^{1/2},$$

где оси x, y, z направлены по главным осям кристалла. Задача о мелком примесном центре в кубических кристаллах будет подробно рассмотрена в § 27.

Постоянное магнитное поле. В этом случае $U(\mathbf{x}) = 0$; калибровку вектор-потенциала можно выбрать различным способом, например, условию $\text{rot } \mathcal{A} = \mathbf{H}$ удовлетворяет $\mathcal{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}\mathbf{x}]$. Практически часто используется другая калибровка: если ось z направить по направлению \mathbf{H} , то удобно выбрать $\mathcal{A}_x = Hy$, $\mathcal{A}_y = \mathcal{A}_z = 0$.

Постоянное электрическое поле. В этом случае $U = -e\mathcal{E}x$, $\mathcal{A} = 0$. При рассмотрении различных эффектов, вызываемых постоянным электрическим полем \mathcal{E} , например электрооптических эффектов, туннельного эффекта и др., в (22.26), (22.27) удобно перейти к \mathbf{k} -представлению. Тогда, учитывая, что

$$\int x_\alpha e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -i \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -i \frac{\partial}{\partial k_\alpha} F_m(\mathbf{k}),$$

получим систему уравнений, определяющих функции $F_m(\mathbf{k})$, отличающиеся от (22.26), (22.27) заменой операторов \mathbf{k} на C -числа \mathbf{k} и оператора $U = -e\mathcal{E}x$ на

$$U = ie\mathcal{E}\nabla_{\mathbf{k}}. \quad (22.29)$$

В результате вместо системы дифференциальных уравнений второго порядка получим систему уравнений первого порядка, причем ее порядок не повышается и при учете членов более высокого порядка по \mathbf{k} , появляющихся в следующих приближениях.

Скрещенные электрические и магнитные поля. При решении задачи о движении электрона во взаимно перпендикулярных электрическом и магнитном полях удобно направить ось y по полю \mathcal{E} и выбрать $\mathcal{A}_x = Hy$, $\mathcal{A}_y = \mathcal{A}_z = 0$, $U = -e\mathcal{E}y$. Тогда гамильтониан (22.20) или (22.27) зависит только от одной переменной y . При этом характер движения электронов существенно зависит от отношения электрического и магнитного полей. В простой двухзонной модели (определяемой приведенным ниже уравнением (26.34)) при $\mathcal{E} > (s/c)H$, где $s = (E_g/2m^*)^{1/2}$, движение инфинитно, т. е., как и в одном электрическом поле, электрон движется по незамкнутой орбите. При $H > (c/s)\mathcal{E}$, наоборот, электрон, как и в одном магнитном поле, движется по замкнутым орбитам. В случае более сложных зон значение отношения полей, соответствующих переходу от одного случая к другому, зависит от волнового вектора электрона, т. е. для разных электронов переход от инфинитного движения к финитному происходит при разных полях. Однако во всех случаях, когда орбиты в магнитном поле были замкнутыми, они остаются замкнутыми и при достаточно слабом электрическом поле. Наоборот, в достаточно сильном электрическом поле орбиты всех электронов размыкаются.

§ 23. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП В КУБИЧЕСКИХ И ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПО НЕПРИВОДИМЫМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯМ

В этом параграфе, используя проективные представления точечных групп, мы построим представления группы волнового вектора в различных точках зоны Бриллюэна для пространственных групп O_h^1 , O_h^5 , O_h^7 , T_d^2 и C_{6v}^4 . В следующих параграфах мы определим энергетический спектр в некоторых точках зоны Бриллюэна.

Группа O_h^7 является группой симметрии таких «классических» полупроводников, как Ge и Si, имеющих решетку типа алмаза. В каждой элементарной ячейке такой решетки содержатся два одинаковых атома. Их расположение показано на рис. 24. Решетка является гранецентрированной кубической Γ_c^f . Ее базисным векторам

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a_0}{2} (110), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a_0}{2} (101), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a_0}{2} (011)$$

соответствуют векторы обратной решетки

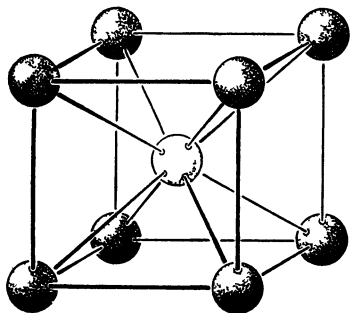
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0} (11\bar{1}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} (1\bar{1}1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a_0} (\bar{1}11), \quad (23.1)$$

где a_0 — ребро куба Браве.

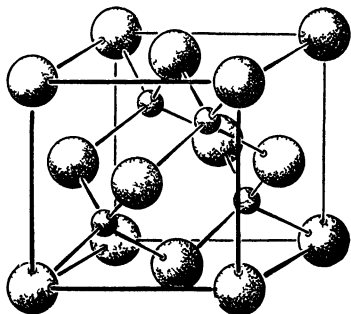
Нулевой узел решетки Браве поместим в один из атомов. Половина элементов группы O_h^7 , соответствующих элементам

группы T_d , не имеют нетривиальных трансляций, а остальные элементы, равные произведению инверсии i на элементы группы T_d , сопровождаются нетривиальной трансляцией $\tau = (a_0/4)(111)$. Если определять группу O_h , как это делалось в § 3, двумя образующими элементами c_4 и $s_6 = ic_3^2$, то в группе O_h^7 оба они сопровождаются нетривиальной трансляцией τ . Группа O_h^7 является группой симметрии и для кристаллов со структурой шпинели: Fe_2MgO_4 , Fe_3O_4 и др., поэтому полученные ниже теоретико-групповые результаты применимы и к этой группе веществ.

Довольно хорошо изученные в настоящее время полупроводники типа PbS , $PbSe$, $PbTe$ имеют решетку типа каменной соли,



Каменная соль



Цинковая обманка

Рис. 24. Решетка каменной соли и цинковой обманки.

т. е. гранецентрированную решетку Браве Γ_c^f , и группу O_h в качестве кристаллического класса. В этих кристаллах на элементарную ячейку приходится по одному атому каждого сорта, один из которых расположен в вершине куба Браве, а другой — в его центре (рис. 24). Поэтому в их пространственной группе не содержится нетривиальных трансляций. Такие группы называются симморфными. Для класса O_h решетки Γ_c^f симморфной является группа O_h^5 .

В этом параграфе будут рассмотрены представления группы волнового вектора симморфной группы O_h^1 с простой кубической решеткой Γ_c , которая является группой симметрии кристаллов типа $CsCl$, а также представления группы волнового вектора для кристаллов с решеткой типа цинковой обманки, в которой кристаллизуется большинство соединений типа A_3B_5 : $InSb$, $GaSb$, $GaAs$ и др. Кристаллическая решетка показана на рис. 24; она отличается от решетки алмаза тем, что в элементарной ячейке имеются два различных атома. Поэтому в их группу симметрии не входит инверсия, группой симметрии их является

симморфная группа T_d^2 . Зоны Бриллюэна для простой Γ_c и гра-
нецентрированной решетки Γ_c^f показаны на рис 25.

Определим группы симметрии указанных на рис 25 точек
зоны Бриллюэна. При этом мы будем указывать только группу
направлений F_k каждой точки k , имея в виду, однако, что
в группу симметрии G_k точки k различные поворотные элементы
входят с теми нетривиальными трансляциями, которыми они
сопровождаются в группе G .

Для кристаллов класса O_h группа симметрии точки Γ — цент-
ра зоны Бриллюэна — совпадает с группой направлений O_h .

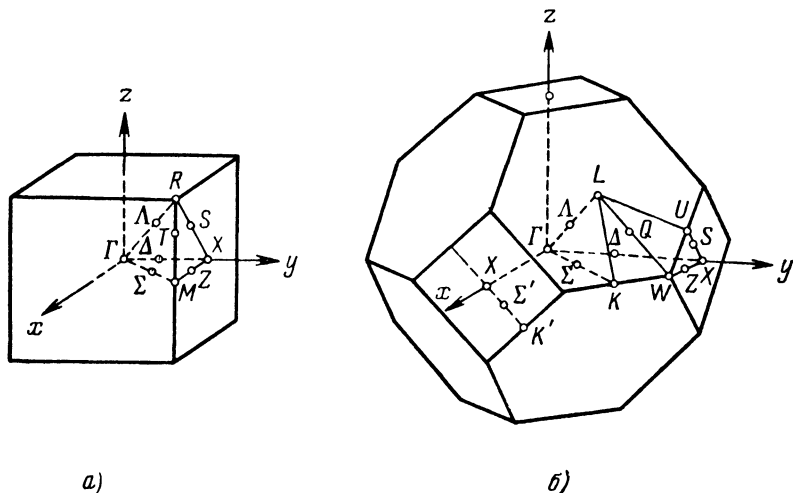


Рис. 25. Зона Бриллюэна для кубических решеток. а) Простая решетка
(каменная соль), б) гранецентрированная (цинковая обманка, алмаз).

Точка Δ с координатами $k_0(100)$ находится на оси четвертого
порядка внутри зоны Бриллюэна; группой симметрии ее является
группа C_{4v} . В зоне Бриллюэна имеется 6 точек типа Δ , а именно
 $\pm k_0(100)$, $\pm k_0(010)$, $\pm k_0(001)$, которые переходят друг в друга
при инверсии и поворотах вокруг осей третьего порядка.

Точка Λ с координатами $k_0(111)$ находится на оси третьего
порядка; ее группой симметрии является группа C_{3v} . Внутри
зоны Бриллюэна имеется 8 точек типа Λ : $\pm k_0(111)$, $\pm k_0(1\bar{1}\bar{1})$,
 $\pm k_0(1\bar{1}1)$, $\pm k_0(\bar{1}11)$, которые переходят друг в друга при инвер-
сии и поворотах вокруг осей четвертого порядка.

Точка Σ с координатами $k_0(110)$ находится на оси второго
порядка, соединяющей середины противоположных ребер куба;
ее группой симметрии является группа C_{2v} . Имеются 12 точек
типа Σ : $\pm k_0(110)$, $\pm k_0(101)$, $\pm k_0(011)$, $\pm k_0(\bar{1}\bar{1}0)$, $\pm k_0(10\bar{1})$,
 $\pm k_0(0\bar{1}\bar{1})$.

В решетке Γ_c точка R с координатами $k = (\pi/a_0)(111)$, где a_0 — длина ребра куба, находится в вершине куба; она является предельным положением точки Λ в решетке Γ_c при выходе ее на границу зоны Бриллюэна. Поскольку все вершины куба отличаются на целые векторы обратной решетки, все векторы k типа R эквивалентны. Так как все они совмещаются друг с другом при преобразованиях из кубической группы, то группой симметрии точки R , как и точки Γ , является полная группа O_h .

Точка X с координатами $(\pi/a_0)(100)$ находится в центре грани куба и является предельным положением точки Δ на поверхности зоны Бриллюэна. Поскольку точки, находящиеся на противоположных гранях куба, эквивалентны, в группу симметрии точки X к элементам из C_{4v} добавляется инверсия i , поэтому группой симметрии ее является группа $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$. Число неэквивалентных точек типа X в зоне Бриллюэна равно трем.

Точка M с координатами $(\pi/a_0)(110)$ находится в середине ребра куба. Поскольку все точки, расположенные в серединах параллельных ребер куба, отличаются на целые векторы обратной решетки, то соответствующие им векторы эквивалентны. Поэтому в группу симметрии точки M входят дополнительно по сравнению с Σ ось четвертого порядка и инверсия i , и группой симметрии точки M является группа D_{4h} . В зоне Бриллюэна имеются три неэквивалентных точки M .

В решетке Γ_c^f внутренние точки зоны Бриллюэна Γ , Δ , Σ , Λ имеют такую же симметрию, как и в решетке Γ_c . Точка X с координатами $(2\pi/a_0)(100)$ в решетке Γ_c^f , как и в решетке Γ_c , имеет группой симметрии группу D_{4h} .

Точка L с координатами $(\pi/a_0)(111)$ находится в центре шестиугольной грани зоны Бриллюэна на пересечении ее с осью третьего порядка. Группой симметрии ее, в отличие от точки R в решетке Γ_c , является группа $D_{3d} = C_{3v} \times C_i$. Число неэквивалентных точек типа L в зоне Бриллюэна равно 4.

Группой симметрии точки $K = (3\pi/2a_0)(110)$, как и точки Σ , является группа C_{2v} , поэтому в решетке Γ_c^f не появляются дополнительные элементы симметрии, когда точка Σ выходит на границу зоны Бриллюэна.

Группы направления рассмотренных точек в зоне Бриллюэна для решеток Γ_c и Γ_c^f класса O_h приведены в таблице:

Группа	O_h	D_{4h}	C_{3v}	C_{2v}	C_{4v}	D_{3d}
Точка	Γ, R	X, M	Λ	Σ, K	Δ	L
Число точек в звезде	1	3	8	12	6	4

Для кристаллов класса T_d с решеткой Γ_c^f центр зоны Бриллюэна — точка Γ — имеет в качестве группы симметрии группу T_d .

Точка Δ в качестве группы симметрии имеет группу C_{2v} . В зоне Бриллюэна, как и для группы класса O_h , имеется 6 точек типа Δ , которые переходят друг в друга при преобразованиях из группы T_d . Точка Λ , как и в группе O_h , имеет симметрию C_{3v} , число таких точек равно 4. В отличие от группы O_h точки Λ и $-\Lambda$ не входят в одну звезду.

Группой симметрии точки Σ является группа C_s .

Точка X дополнительно к элементам группы C_{2v} точки Δ имеет еще преобразования s_4 и s_4^3 , переводящие k в $-k$, поэтому группой симметрии точки X является группа D_{2d} , число точек типа X равно 3.

Группа симметрии точки L , как и точки Λ , является группой C_{3v} . Группа симметрии точки K также совпадает с группой симметрии точки Σ ; это группа C_s .

Симметрия рассмотренных точек в зоне Бриллюэна для кристаллического класса T_d решетки Γ_c^f приведена в таблице:

Группа	T_d	D_{2d}	C_{3v}	C_{2v}	C_s
Точка	Γ	X	L, Λ	Δ	Σ, K
Число точек в звезде	1	3	4	6	12

Рассмотрим теперь представления группы волнового вектора и возможные кратности вырождения зоны в рассмотренных точках в кристаллах класса O_h .

Класс O_h

Точка Γ . В этой точке блоховские функции совпадают с модулирующими функциями $u(\mathbf{x})$ и представления $\mathcal{D}^*(g)$ и $\mathcal{D}^*(r)$ совпадают и являются представлениями точечной группы O_h для пространственных групп O_h^1, O_h^5 и O_h^7 .

В группе $O_h = T_d \times C_i$ имеется 10 однозначных представлений $A_1^\pm, A_2^\pm, E^\pm, F_2^\pm$ и F_1^\pm и 6 двузначных представлений: $E_1'^\pm, E_2'^\pm$ и G^\pm . В литературе по зонной теории, следуя работе Боукарта, Вигнера и Смолуховского [16.1], представления группы волнового вектора обозначаются по названию соответствующей точки в зоне Бриллюэна.

Ниже приведена связь между представлениями точечной группы O_h и представлениями пространственной группы в точке Γ . Все представления в точке Γ относятся к случаю a_1 , так как

характеры представлений пространственной группы вещественны, они совпадают с характерами представлений точечной группы O_h

Представление группы $O_h = T_d \times C_i$	A_1^+	A_2^+	E^+	F_1^+	F_2^+	A_1^-	A_2^-	E^-	F_1^-	F_2^-	$E_1'^-$	$E_2'^-$	G'^{\pm}	$E_1'^+$	$E_2'^+$
Представление в точке Γ	Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ_{15}'	Γ_{25}'	Γ_2'	Γ_1'	Γ_{12}'	Γ_{25}	Γ_{15}	Γ_6^-	Γ_7^-	Γ_8^{\pm}	Γ_7^+	Γ_6^+

В точке Γ без учета спина возможно однократное, двукратное и трехкратное вырождение зоны, а с учетом спина — двукратное и четырехкратное.

Для того чтобы определить характер расщепления зоны в точке Γ за счет спин-орбитального взаимодействия, нужно разложить на двучленные неприводимые представления группы O_h произведения $\Gamma_i \times \mathcal{D}_{1/2}$. Это разложение приведено в табл. 16.1 (стр. 192). Из этой таблицы видно, что представления $\Gamma_1, \Gamma_1', \Gamma_2, \Gamma_2', \Gamma_{12}, \Gamma_{12}'$ не расщепляются спин-орбитальным взаимодействием и учет спина для этих представлений приводит лишь к удвоению кратности вырождения зоны.

Как отмечалось в § 11, представление \mathcal{D}_1 группы вращения с базисными p -функциями x, y, z является неприводимым и в кубической группе и переходит в представление Γ_{15}^- . Прямое произведение $\mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{1/2} + \mathcal{D}_{3/2}$ содержит представления $\mathcal{D}_{3/2}$ и $\mathcal{D}_{1/2}$ размерности 4 и 2. Эти представления также неприводимы в кубической группе и переходят соответственно в представления Γ_8^- и Γ_6^- в соответствии с разложением $\Gamma_{15}^- \times \mathcal{D}_{1/2} = \Gamma_8^- + \Gamma_6^-$. Поэтому в качестве базисных функций для представлений Γ_8^- выбраны функции $\psi_m^{3/2}$ ($m = \pm 1/2, \pm 3/2$) в базисе Латтинжера — Кона [17.3]:

$$\begin{aligned} \psi_{3/2}^{3/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\alpha, & \psi_{1/2}^{3/2} &= \frac{i}{\sqrt{6}}[(X + iY)\beta - 2Z\alpha], \\ \psi_{-1/2}^{3/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY)\alpha + 2Z\beta], & \psi_{-3/2}^{3/2} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\beta \end{aligned} \quad (23.2)$$

и функции $\psi_m^{1/2}$ ($m = \pm 1/2$) для представлений Γ_6^- :

$$\psi_{1/2}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY)\beta + Z\alpha], \quad \psi_{-1/2}^{1/2} = \frac{i}{\sqrt{3}}[-(X - iY)\alpha + Z\beta]. \quad (23.3)$$

Здесь X, Y, Z — блоховские функции u_n при $k = 0$, преобразующиеся при операциях кубической группы как x, y, z соответственно.

Все полученные результаты для точки Γ справедливы для всех пространственных групп класса O_h .

Точка Δ . Согласно (12.26) представления группы волнового вектора $\mathcal{D}_v^\Delta(g)$ в точке Δ равны

$$\mathcal{D}_v^\Delta(g) = e^{-k\beta} \mathcal{D}_v^\Delta(r) = e^{-ik_0\beta_x} \mathcal{D}_v^\Delta(r), \quad (23.4)$$

где $\mathcal{D}_v^\Delta(r)$ — проективное представление группы направлений точки Δ , а $\beta = \alpha + \tau$, где α и τ — тривиальная и нетривиальная трансляции, соответствующие поворотному элементу $r \in C_{4v}$, $g = (r|\beta)$. Поскольку точка Δ находится внутри зоны Бриллюэна, то $\mathcal{D}_v^\Delta(r)$ являются матрицами обычных представлений точечной группы C_{4v} . В группе C_{4v} имеется 5 однозначных представлений A_1, A_2, B_1, B_2, E и два двузначных представления E'_1 и E'_2 . Из них представления A_1, A_2, B_1, B_2 одномерные, а E и E'_1, E'_2 — двумерные. Каждому из этих представлений группы C_{4v} согласно (23.4) соответствует представление группы волнового вектора той же размерности; они обозначаются буквой Δ по названию точки Δ . Их связь с представлениями группы C_{4v} приведена в таблице:

Представление C_{4v}	A_1	A_2	B_1	B_2	E	E'_1	E'_2
Представление в точке Δ	Δ_1	Δ'_1	Δ_2	Δ'_2	Δ_5	Δ_6	Δ_7

Хотя матрицы $\mathcal{D}_v^\Delta(r)$ одинаковы для всех пространственных групп класса O_h , матрицы представления группы волнового вектора $\mathcal{D}_v^\Delta(g)$ различны для различных пространственных групп, в частности для групп O_h^1, O_h^5 и O_h^7 .

Так, для групп O_h^1 и O_h^5 , не содержащих нетривиальных трансляций, матрицы \mathcal{D}_v^Δ на элементах, не содержащих тривиальных трансляций, совпадают с матрицами представления группы C_{4v} и не зависят от положения точки Δ на оси четвертого порядка.

В группе O_h^7 половина элементов группы направлений $C_{4v} - c_4, c_4^3, \sigma_v, c_4^2\sigma_v$ — сопровождаются нетривиальной трансляцией τ , поэтому матрицы $\mathcal{D}_v^\Delta(g)$ и $\mathcal{D}_v^\Delta(r)$ для этих элементов отличаются множителем $\lambda = e^{-ik_0\tau_x} = e^{-i(\pi/2)p}$, где $p = \frac{k_0}{2\pi/a_0}$ — отношение длины вектора k_0 к расстоянию до границы зоны Бриллюэна. При этом $p=0$ в точке Γ и $p=1$ в точке X . Поэтому в группе O_h^7 матрицы $\mathcal{D}_v^\Delta(g)$ и характеры представлений группы волнового вектора отличаются от соответствующих представлений группы C_{4v} и зависят от положения точки на оси четвертого порядка.

Из (18.32) следует, что как однозначные, так и двузначные представления пространственной группы со звездой Δ относятся к случаю a_2 , т. е. между функциями ψ_{ik} и $RK\psi_{ik}$ имеется линейная связь. В качестве элемента R , переводящего k в $-k$, может быть выбрана инверсия.

При выходе на поверхность зоны Бриллюэна точка Δ переходит в точку X , в которой возникает существенное различие в представлениях групп O_h^1 , O_h^5 и O_h^7 .

Точка X . Согласно (23.4) представления группы волнового вектора $\mathcal{D}_v^X(g)$ в точке X равны

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_v^X(g) &= e^{-i(\pi/a_0)\beta_x} \mathcal{D}_v^X(r) \quad (\text{для } O_h^1), \\ \mathcal{D}_v^X(g) &= e^{-i(2\pi/a_0)\beta_x} \mathcal{D}_v^X(r) \quad (\text{для } O_h^5, O_h^7), \end{aligned} \quad (23.5)$$

где $\mathcal{D}_v^X(r)$ — проективные представления группы D_{4h} . При этом в группах O_h^1 и O_h^5 , не содержащих нетривиальных трансляций, фактор-система согласно (12.29) является единичной и все проективные представления относятся к классу K_0 , т. е. являются обычными представлениями группы D_{4h} .

В группе $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$ имеется 10 однозначных представлений: 5 четных и 5 нечетных относительно инверсии, а также 4 двумерных двузначных представления. Каждому из этих представлений по (23.5) для групп O_h^1 и O_h^5 соответствует представление группы волнового вектора \mathcal{D}^X , обозначаемое буквой X_i , согласно таблице:

Представление группы $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$	A_1^\pm	A_2^\pm	B_1^\pm	B_2^\pm	E^\pm	$E_1'^\pm$	$E_2'^\pm$
Представление в точке X	X_1^\pm	X_2^\pm	X_3^\pm	X_4^\pm	X_5^\pm	X_6^\pm	X_7^\pm
Представление в точке M	M_1^\pm	M_2^\pm	M_3^\pm	M_4^\pm	M_5^\pm	M_6^\pm	M_7^\pm

Таким образом, с учетом спина зона в точке X двукратно вырождена. Поскольку в группе волнового вектора содержится инверсия, все представления относятся к случаю 1, а поскольку при отсутствии нетривиальных трансляций критерий Херринга (18.32) сводится к критерию Шура (18.27) для группы D_{4h} , то все представления для точки X в группах O_h^1 и O_h^5 относятся к случаю a_1 .

Рассмотрим теперь представления в точке X для группы O_h^7 , содержащей нетривиальные трансляции.

$r_1 \backslash r_2$	$(e 0)$	$(c_{4x} \tau)$	$(c_{2x} 0)$	$(c_{4x}^3 \tau)$	$(c_{2yz} \tau)$	$(c_{2z} 0)$	$(c_{2y\bar{z}} \tau)$	$(c_{2y} 0)$	$(i \tau)$	$(s_{4x}^3 0)$	$(\sigma_x \tau)$	$(s_{4x} 0)$	$(\sigma_{yz} 0)$	$(\sigma_z \tau)$	$(\sigma_{y\bar{z}} 0)$	$(\sigma_y \tau)$
$(e Q)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(c_{4x} \tau)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(c_{2x} 0)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(c_{4x}^3 \tau)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(c_{2yz} \tau)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(c_{2z} 0)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(c_{2y\bar{z}} \tau)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(c_{2y} 0)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(i \tau)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(s_{4x}^3 0)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(\sigma_x \tau)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$(s_{4x} 0)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(\sigma_{yz} 0)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(\sigma_z \tau)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(\sigma_{y\bar{z}} 0)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$(\sigma_y \tau)$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
u	1	i	-1	- i	i	-1	- i	1	i	-1	- i	1	1	i	-1	- i

Фактор-система в точке X для группы O_h^7 приведена в табл. 23.1. Для определения принадлежности этой фактор-системы к одному из классов группы D_{4h} нужно согласно § 14 найти отношения коэффициентов фактор-системы для пар коммутирующих элементов:

$$\alpha = \frac{\omega(u_2, c_4^2)}{\omega(c_4^2, u_2)} = 1, \quad \beta = \frac{\omega(c_4, i)}{\omega(i, c_4)} = -1, \quad \gamma = \frac{\omega(u_2, i)}{\omega(i, u_2)} = 1.$$

Следовательно, рассматриваемая фактор-система относится к классу K_3 , в котором имеется 4 двумерных проективных представления. Поэтому в группе O_h^7 в точке X имеется двукратное принудительное вырождение зоны.

Для того чтобы привести заданную фактор-систему к стандартному для ее класса виду (14.42), для которого в § 14 приведены матрицы проективных представлений, нужно вычислить функцию u (14.43). Для рассматриваемой фактор-системы

$$\omega(b, b) = \omega(u_2, u_2) = -1, \quad \omega(c, c) = \omega(i, i) = -1, \\ \omega_{a_4} = \omega(c_4, c_4) \omega(c_4, c_4^2) \omega(c_4, c_4^3) = 1,$$

а величина α' (см. (14.24)) равна -1 , т. е. в уравнении (14.25) $m = 2$. Учитывая, что для рассматриваемой фактор-системы $\omega(a^k, b^p c^q) = 1$, получим

$$u(a^k b^p c^q) = \frac{i^{p+q+k}}{\omega(b^p, c^q)}.$$

Соответствующие значения u приведены в табл. 23.1.

Согласно (23.5) матрицы представления группы волнового вектора в точке X равны

$$\mathcal{D}^X = e^{-i(2\pi/a_0)\beta_x} \mathcal{D}'(r) u(r), \quad (23.6)$$

где $\mathcal{D}'(r)$ — матрицы проективных представлений, которые для элемента $r = a^k b^p c^q$ равны соответствующему произведению матриц A, B, C :

$$\mathcal{D}'(a^k b^p c^q) = A^k B^p C^q. \quad (23.7)$$

Матрицы A, B, C приведены в табл. 14.2 (стр. 151).

Как указывалось в § 16, двузначные представления точечных групп являются проективными представлениями точечной группы. Поэтому прямое произведение проективных представлений $\mathcal{D}(r) \times \mathcal{D}_{1/2}$ является одним из проективных представлений группы D_{4h} . В § 16 было показано, что в группе D_{4h} спинорные представления относятся к классу K_1 . Поэтому двузначные представления в точке X относятся к классу $K_1 K_3 = K_6$, в котором имеется одно четырехмерное представление. Таким образом, с учетом спина в точке X в группе O_h^7 имеется четырехкратное вырождение зоны.

Фактор-система, соответствующая обычно вводимым спинорным представлениям группы D_{4h} , как отмечалось в § 16, отличается от принятой нами стандартной фактор-системы (14.42) для класса K_1 , но может быть приведена к ней по формуле (13.3) с функцией u , указанной в (16.29). Поэтому спинорное представление группы волнового вектора также определяется формулами (23.6), (23.7), но под u следует иметь в виду произведение $u_1 u_2$, где u_1 приведено выше, а u_2 — в (16.29).

Характеры представлений группы волнового вектора в точке X приведены в табл. 23.2.

Отметим существенную разницу между представлениями X_i ($i = 1, 2, 3, 4$) и X_5 . В обоих случаях матрицы $\mathcal{D}'(r)$ образуют проективные представления точечной группы D_{4h} , но представления X_i ($i = 1, \dots, 4$), рассматриваемые на всех элементах группы волнового вектора, включая тривиальные трансляции, являются обычными представлениями группы волнового вектора, в то время как X_5 является спинорным (т. е. проективным класса K_1) представлением группы волнового вектора.

Поскольку в точке X $k \equiv -k$, то в критерии Херринга (18.32) следует суммировать по всем элементам группы D_{4h} ,

Характеры представлений группы волнового вектора
в точке X для решетки типа Ge

Элементы		$X_1 (K_3)$	$X_2 (K_3)$	$X_3 (K_3)$	$X_4 (K_3)$	$X_5 (K_6)$
$(e 0)$	$(e 0)$	2	2	2	2	4
$(c_{4x} \tau)$	$(c_4 \tau)$	0	0	0	0	0
$(c_{2x} 0)$	$(c_4^2 0)$	-2	2	-2	2	0
$(c_{4x}^3 \tau)$	$(c_4^3 \tau)$	0	0	0	0	0
$(c_{2yz} \tau)$	$(u_2 \tau)$	2	0	-2	0	0
$(c_{2z} 0)$	$(c_4 u_2 0)$	0	0	0	0	0
$(c_{2yz} \tau)$	$(c_4^2 u_2 \tau)$	-2	0	2	0	0
$(c_{2y} 0)$	$(c_4^3 u_2 0)$	0	0	0	0	0
$(i \tau)$	$(i \tau)$	0	0	0	0	0
$(s_{4x}^3 0)$	$(c_4 i 0)$	0	0	0	0	0
$(\sigma_x \tau)$	$(c_4^2 i \tau)$	0	0	0	0	0
$(s_{4x} 0)$	$(c_4^3 i 0)$	0	0	0	0	0
$(\sigma_{yz} 0)$	$(u_2 i 0)$	0	2	0	-2	0
$(\sigma_z \tau)$	$(c_4 u_2 i \tau)$	0	0	0	0	0
$(\sigma_{yz} 0)$	$(c_4^2 u_2 i 0)$	0	2	0	-2	0
$(\sigma_y \tau)$	$(c_4^3 u_2 i \tau)$	0	0	0	0	0

учитывая при этом, что элемент g^2 может содержать тривиальную трансляцию, а для представления X_5 — также элемент Q . Все представления X_i относятся к случаю a_1 .

Точка Λ . Представления группы волнового вектора в точке Λ соотношением

$$\mathcal{D}^\Lambda(g) = e^{-ik_0(\beta_x + \beta_y + \beta_z)} \mathcal{D}(r) \quad (23.8)$$

связаны с матрицами $\mathcal{D}(r)$, образующими обычные представления группы C_{3v} . Так как C_{3v} является подгруппой T_d , ее элементы не сопровождаются нетривиальными трансляциями, поэтому представления \mathcal{D}^Λ на элементах, не содержащих основных трансляций, одинаковы для групп O_h^1 , O_h^5 и O_h^7 , не зависят от положения точки Λ на оси третьего порядка и совпадают с однозначными или двузначными представлениями группы C_{3v} .

В группе C_{3v} имеется 3 однозначных представления: два одномерных A_1 , A_2 и одно двумерное E , а также два одномерных E'_1 , E'_2 и одно двумерное E'_3 двузначные представления. Представления группы волнового вектора, соответствующие этим

представлениям, обозначаются $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ и Λ_4, Λ_5 и Λ_6 соответственно. Из критерия Херринга (18.32) следует, что представления $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ и Λ_6 относятся к случаю a_2 , а одномерные двузначные представления Λ_4 и Λ_5 с комплексно сопряженными характеристиками относятся к случаю b_2 . В последнем случае объединение полных представлений пространственной группы приводит к объединению представлений Λ_4 и Λ_5 группы волнового вектора.

Точка L . Представления группы волнового вектора в точке L :

$$\mathcal{D}^L(g) = e^{-i(\pi/a_0)(\beta_x + \beta_y + \beta_z)} \mathcal{D}(r), \quad (23.9)$$

где $\mathcal{D}(r)$ — проективные представления группы $D_{3d} = C_{3v} \times C_i$. Для группы O_h^5 представления $\mathcal{D}(r)$ совпадают с обычными представлениями группы D_{3d} . В группе D_{3d} 6 однозначных представлений A_1^\pm, A_2^\pm (одномерные) и E^\pm (двумерные) и 6 двузначных представлений $E_1'^\pm, E_2'^\pm$ (одномерные) и $E_3'^\pm$ (двумерные), каждому из которых по (23.9) соответствует представление группы волнового вектора \mathcal{D}^L , указанное в таблице:

Представление группы $D_{3d} = C_{3v} \times C_i$	A_1^+	A_1^-	A_2^+	A_2^-	E^+	E^-	$E_1'^+$	$E_1'^-$	$E_2'^+$	$E_2'^-$	$E_3'^+$	$E_3'^-$
Представление в точке L	L_1	L_2'	L_2	L_1'	L_3	L_3'	L_4	L_5'	L_5	L_4'	L_6	L_6'

В группе O_h^7 фактор-система для точки L не является единичной. Так как группа D_{3d} изоморфна группе D_6 , то для определения принадлежности фактор-системы к одному из классов нужно найти отношение $\omega(i, u_2)/\omega(u_2, i)$, которое в данном случае равно 1. Поэтому фактор-система и все представления в точке L группы O_h^7 относятся к классу K_0 и p -эквивалентны обычным представлениям группы D_{3d} .

Используя (12.29), легко вычислить фактор-систему в точке L и по (14.33), (14.34) найти функцию u , которая приводит данную фактор-систему к единичной.

Представления группы волнового вектора в точке L равны

$$\mathcal{D}^L(g) = e^{-(\pi/a_0)(\beta_x + \beta_y + \beta_z)} u(r) \mathcal{D}'(r),$$

где $\mathcal{D}'(r)$ — матрицы обычного представления точечной группы D_{3d} . Легко непосредственно убедиться, что в рассматриваемом случае $\exp\{-i(\pi/a_0)(\tau_x + \tau_y + \tau_z)\} u(r) = 1$ для всех элементов группы D_{3d} , поэтому в точке L представления группы волнового вектора $\mathcal{D}^L(g)$ для элементов g , не содержащих основных трансляций, просто совпадают с матрицами представления точечной группы D_{3d} , как и для точек Λ внутри зоны Бриллюэна.

Этот результат является естественным, так как при отсутствии принудительного вырождения в точке L представление \mathcal{D}^A непрерывно переходит в представление \mathcal{D}^L .

Из критерия Херринга следует, что представления L_4^\pm и L_5^\pm относятся к случаю b_1 . При этом за счет инверсии времени происходит объединение представлений L_4^+ , L_5^+ и L_4^- , L_5^- . Остальные представления относятся к случаю a_1 .

Точка Σ . Представления группы волнового вектора \mathcal{D}^Σ в точке Σ равны

$$\mathcal{D}^\Sigma(g) = e^{-ik_0(\beta_x + \beta_y)} \mathcal{D}(r), \quad (23.10)$$

где $\mathcal{D}(r)$ — представления группы C_{2v} .

Для групп O_h^1 и O_h^5 представления \mathcal{D}^Σ на элементах, не содержащих основных трансляций, не зависят от положения точки Σ на оси второго порядка и совпадают с представлениями группы C_{2v} . Для группы O_h^7 для элементов c_2 и $c_2\sigma_v$ в (23.10) возникает множитель $e^{-i(3\pi/4)p}$, где $p = k_0 / \frac{3}{2} \frac{\pi}{a_0}$; при этом $p=0$ для точки Γ и $p=1$ для точки K . Поэтому в группе O_h^7 представления \mathcal{D}^Σ зависят от положения Σ на оси второго порядка.

Группа C_{2v} имеет 4 одномерных однозначных представления A_1, A_2, B_1, B_2 и одно двумерное двузначное представление E' , которые приводят согласно (23.10) к представлениям группы волнового вектора соответствующей размерности, обозначаемым через $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3, \Sigma_4$ и Σ_5 соответственно.

Согласно критерию Херринга как однозначные, так и двузначные представления в точке Σ относятся к случаю a_2 , что означает наличие линейной связи между функциями ψ и $(i|\tau)K\psi$, принадлежащими одному лучу звезды Σ .

Как отмечалось выше, при выходе точки Σ на границу зоны Бриллюэна в решетке Γ_c^f ее симметрия не повышается, поэтому все результаты для точки Σ в группах O_h^7 и O_h^5 полностью применимы к точке $K = \frac{3}{2} \frac{\pi}{a_0}$ (110).

Точка M . Представления \mathcal{D}^M в точке M :

$$\mathcal{D}^M(g) = e^{-i(\pi/a_0)(\beta_x + \beta_y)} \mathcal{D}(r). \quad (23.11)$$

Поскольку в группе O_h^1 нет нетривиальных трансляций, то $\mathcal{D}^M(r)$ совпадают с $\mathcal{D}(r)$, которое для точки M является представлением группы D_{4h} . Поэтому для точки M справедливы все результаты, полученные выше для точки X в группе O_h^5 .

Аналогичным образом могут быть получены представления группы волнового вектора и в других точках зоны Бриллюэна.

Отметим, что в согласии с замечанием, сделанным в § 18, из-за наличия инверсии в группе O_h в произвольной точке зоны Бриллюэна с учетом спина имеется по крайней мере двукратное вырождение энергетического спектра.

Группа T_d^2

Рассмотрим представления группы волнового вектора в некоторых точках k -пространства группы T_d^2 . Поскольку в группе T_d^2 не имеется нетривиальных трансляций, все представления группы волнового вектора для элементов, не содержащих основных трансляций, совпадают с соответствующими представлениями точечной группы направлений.

В точке Γ представления пространственной группы совпадают с представлениями группы волнового вектора, которые являются представлениями группы T_d . В группе T_d имеется 5 однозначных представлений A_1, A_2, E, F_2 и F_1 , которые обозначаются как $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}$ и Γ_{25} соответственно, а также 3 спинорных представления E'_1, E'_2 и G' , которые обозначаются Γ_6, Γ_7 и Γ_8 .

Все представления в точке Γ относятся к случаю a_1 .

В точке Δ представления группы волнового вектора совпадают с представлениями группы C_{2v} . Эта группа абелева, она имеет только одномерные однозначные представления A_1, A_2, B_1, B_2 , обозначаемые через $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ и Δ_4 соответственно.

С учетом спина зона в точке Δ всегда двукратно вырождена, так как в группе C_{2v} имеется двумерное двузначное представление E' , обозначаемое Δ_5 , при этом $\Delta_i \times \mathcal{D}_{1/2} = \Delta_5$ ($i = 1, 2, 3, 4$). Все представления в точке Δ относятся к случаю b_3 : они комплексны и неэквивалентны. Инверсия времени в этом случае приводит к равенству энергии в точках k и $-k$, т. е. $E(k) = E(-k)$.

В точке X представления группы волнового вектора X_i для элементов, не содержащих основных трансляций, совпадают с представлениями группы D_{2d} . В этой группе имеется 5 однозначных представлений: A_1, A_2, B_1, B_2 и E и два двумерных спинорных представления E'_1 и E'_2 . В точке X однозначные представления обозначаются X_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5$), а спинорные X_6, X_7 .

Представление группы D_{2d}	A_1	A_2	B_1	B_2	E	E'_1	E'_2
Представление в точке X	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7

Для точки X $k \equiv -k$ и все представления относятся к случаю a_1 .

Точки L и Λ . Поскольку симметрия точек Λ и L в группе T_d^2 одинакова, они имеют одинаковые представления группы волнового вектора, совпадающие с рассмотренными выше представ-

лениями группы волнового вектора в точке Λ в группах O_h^5 и O_h^7 . Различие между точками Λ и L возникает при учете инверсии времени.

Представления в точке Λ относятся к случаю b_3 , поскольку группа волнового вектора не содержит элементов, превращающих \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$. В точке L $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$ и представления с вещественными характеристиками L_1, L_2, L_3 и L_6 относятся к случаю a_1 , а два двузначных представления L_4 и L_5 (аналогично тому, как было в точке Λ группы O_h) с комплексными характеристиками относятся к случаю b_2 , когда следует объединять оба эти представления группы волнового вектора.

Таким образом, в точке L в группе T_d^2 с учетом спина зона всегда двукратно вырождена, в то время как в точке Λ даже с учетом спина возможно полное расщепление зоны.

В группе T_d^2 точки Σ и K имеют в качестве группы симметрии группу C_s , в которой имеются два одномерных однозначных представления A^+ и A^- и два одномерных двузначных представления A'^+ и A'^- , которым соответствуют 4 представления группы волнового вектора $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ и Σ_4 (или K_1, K_2, K_3 и K_4 для точки K). Поэтому в этих точках возможны только однократно вырожденные зоны. Все представления для точек Σ и K относятся к случаю b_3 .

Условия совместности

Рассмотрим теперь условия совместности представлений в кристаллах кубической группы, которые дают связь возможных представлений в различных точках зоны Бриллюэна. При этом условия совместности представлений двух внутренних точек зоны Бриллюэна одинаковы для всех пространственных групп, относящихся к одному кристаллическому классу. Если же одна из точек находится на границе зоны Бриллюэна, то условия совместности могут быть различными для различных пространственных групп.

Условия совместности представлений в точках Γ и Δ для групп класса O_h имеют вид

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &\rightarrow \Delta_1, & \Gamma_2 &\rightarrow \Delta_2, & \Gamma'_1 &\rightarrow \Delta'_1, & \Gamma'_2 &\rightarrow \Delta'_2, & \Gamma_{12} &\rightarrow \Delta_1 + \Delta_2 \\ \Gamma'_{12} &\rightarrow \Delta'_1 + \Delta'_2, & \Gamma_{15} &\rightarrow \Delta_1 + \Delta_5, & \Gamma'_{15} &\rightarrow \Delta'_1 + \Delta'_5, & \Gamma_{25} &\rightarrow \Delta_2 + \Delta_5, \\ \bar{\Gamma}'_{25} &\rightarrow \Delta'_2 + \Delta'_5, & \Gamma_6^\pm &\rightarrow \Delta_6, & \Gamma_7^\pm &\rightarrow \Delta_7, & \Gamma_8^\pm &\rightarrow \Delta_6 + \Delta_7. \end{aligned}$$

Условия совместности представлений в точках X и Δ различны для групп O_h^1, O_h^5 и O_h^7 . Для групп O_h^1, O_h^5 условия совместности таковы:

$$\begin{aligned} X_1^+, X_4^- &\rightarrow \Delta_1, & X_1^-, X_4^+ &\rightarrow \Delta'_2, & X_2^+, X_3^- &\rightarrow \Delta'_1, \\ X_2^-, X_3^+ &\rightarrow \Delta_2, & X_5^\pm &\rightarrow \Delta_5, & X_6^\pm &\rightarrow \Delta_6, & X_7^\pm &\rightarrow \Delta_7, \end{aligned}$$

а для группы O_h^7 они имеют вид

$$X_{1,3} \rightarrow \Delta_5, \quad X_2 \rightarrow \Delta_1 + \Delta'_2, \quad X_4 \rightarrow \Delta'_1 + \Delta_2, \quad X_5 \rightarrow \Delta_6 + \Delta_7.$$

Условия совместности представлений при движении вдоль оси третьего порядка для групп O_h^5 и O_h^7 :

$$\begin{aligned} \Gamma_1, \Gamma'_2 &\rightarrow \Lambda_1, & \Gamma_2, \Gamma'_1 &\rightarrow \Lambda_2, & \Gamma_{12}, \Gamma'_{12} &\rightarrow \Lambda_3, & \Gamma'_{25}, \Gamma_{15} &\rightarrow \Lambda_1 + \Lambda_3, \\ \Gamma'_{15}, \Gamma_{25} &\rightarrow \Lambda_3 + \Lambda_2, & \Gamma_7^\pm, \Gamma_6^\pm &\rightarrow \Lambda_6, & \Gamma_8^\pm &\rightarrow \Lambda_4 + \Lambda_5 + \Lambda_6; \\ L_1, L'_2 &\rightarrow \Lambda_1, & L_2, L'_1 &\rightarrow \Lambda_2, & L_3, L'_3 &\rightarrow \Lambda_3, \\ L_4, L'_5 &\rightarrow \Lambda_4, & L_5, L'_4 &\rightarrow \Lambda_5, & L_6, L'_6 &\rightarrow \Lambda_6. \end{aligned}$$

Для группы O_h^1 условия совместности в точках Γ и Λ такие же, как и в группах O_h^5 и O_h^7 , а в точках Λ и R — такие же, как и для точек Λ и Γ .

Для точек Γ и Σ условия совместности имеют вид

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &\rightarrow \Sigma_1, & \Gamma_2 &\rightarrow \Sigma_4, & \Gamma_{12} &\rightarrow \Sigma_1 + \Sigma_4, & \Gamma'_{15} &\rightarrow \Sigma_2 + \Sigma_3 + \Sigma_4, \\ \Gamma'_{25} &\rightarrow \Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3, & \Gamma'_1 &\rightarrow \Sigma_2, & \Gamma'_2 &\rightarrow \Sigma_3, & \Gamma'_{12} &\rightarrow \Sigma_2 + \Sigma_3, \\ \Gamma_{15} &\rightarrow \Sigma_1 + \Sigma_4 + \Sigma_3, & \Gamma_{25} &\rightarrow \Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_4, & \Gamma_6^\pm &\rightarrow \Sigma_5, & \Gamma_7^\pm &\rightarrow \Sigma_5, \\ \Gamma_8^\pm &\rightarrow 2\Sigma_5. \end{aligned}$$

В группах O_h^5 и O_h^7 представления в точках Σ и K непрерывно переходят друг в друга, поэтому для этих групп в точках Σ и K условия совместности тривиальны.

Условия совместности представлений в точках M и Σ в группе O_h^1 :

$$M_1^\pm, M_4^\pm \rightarrow \Sigma_1, \quad M_2^\pm, M_3^\pm \rightarrow \Sigma_2, \quad M_5^\pm \rightarrow \Sigma_2 + \Sigma_3, \quad M_6^\pm, M_7^\pm \rightarrow \Sigma_5.$$

Условия совместности для группы T_d^2 имеют вид:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &\rightarrow \Lambda_1, & \Gamma_2 &\rightarrow \Delta_2, & \Gamma_{12} &\rightarrow \Delta_1 + \Delta_2, & \Gamma_{15} &\rightarrow \Delta_1 + \Delta_3 + \Delta_4, \\ \Gamma_{25} &\rightarrow \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4, & \Gamma_6 &\rightarrow \Delta_5, & \Gamma_7 &\rightarrow \Delta_5, & \Gamma_8 &\rightarrow 2\Delta_5, \\ X_1 &\rightarrow \Delta_1, & X_2 &\rightarrow \Delta_2, & X_3 &\rightarrow \Delta_2, & X_4 &\rightarrow \Delta_1, & X_5 &\rightarrow \Delta_3 + \Delta_4, \\ X_6 &\rightarrow \Delta_5, & X_7 &\rightarrow \Delta_5, \\ \Gamma_1 &\rightarrow \Lambda_1, & \Gamma_2 &\rightarrow \Lambda_2, & \Gamma_{12} &\rightarrow \Lambda_3, & \Gamma_{15} &\rightarrow \Lambda_1 + \Lambda_3, & \Gamma_{25} &\rightarrow \Lambda_2 + \Lambda_3, \\ \Gamma_6 &\rightarrow \Lambda_6, & \Gamma_7 &\rightarrow \Lambda_7, & \Gamma_8 &\rightarrow \Lambda_4 + \Lambda_5 + \Lambda_6, \\ \Gamma_1 &\rightarrow \Sigma_1, & \Gamma_2 &\rightarrow \Sigma_2, & \Gamma_{12} &\rightarrow \Sigma_1 + \Sigma_2, & \Gamma_{25} &\rightarrow \Sigma_1 + 2\Sigma_2, \\ \Gamma_{15} &\rightarrow \Sigma_2 + 2\Sigma_1, & \Gamma_6 &\rightarrow \Sigma_3 + \Sigma_4, & \Gamma_7 &\rightarrow \Sigma_3 + \Sigma_4, & \Gamma_8 &\rightarrow 2\Sigma_3 + 2\Sigma_4. \end{aligned}$$

Группа C_{6v}^4

Рассмотрим представления группы волнового вектора в некоторых точках k -пространства в кристаллах с решеткой вюрцита. В этой решетке кристаллизуется ряд полупроводников, например, гексагональные CdS, CdSe.

Решетка вюрцита — гексагональной модификации ZnS — показана на рис. 26. Поместим узлы решетки Браве в местоположения атомов серы, изображенных на рис. 26 маленькими шариками. В пространственной группе симметрии решетки вюрцита

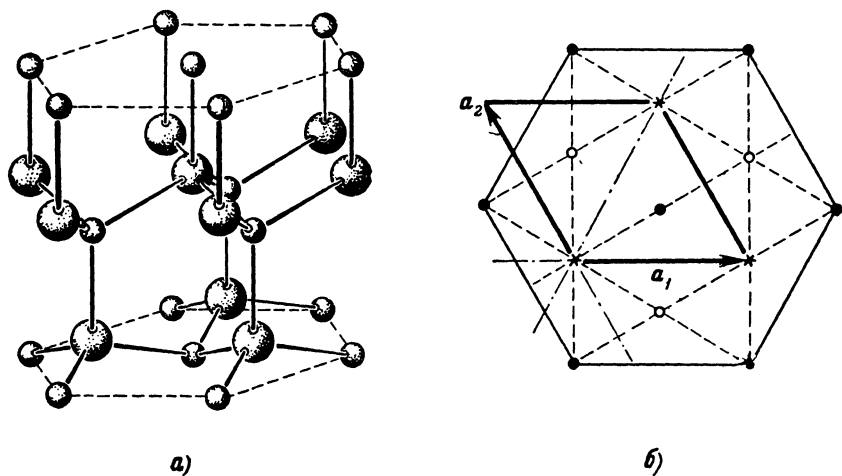


Рис. 26. Решетка вюрцита: общий вид (а) и проекция (б). Сплошными кружками на схеме справа указаны атомы первого слоя, полыми — атомы второго слоя, звездочками — положение осей 6-го порядка; жирные линии показывают основание элементарной ячейки.

C_{6v}^4 ось шестого порядка является винтовой и половина плоскостей отражения являются плоскостями скольжения. Двенадцать поворотных элементов группы C_{6v}^4 вместе с нетривиальными трансляциями приведены в таблице:

$(e 0)$	$(c_6 \tau)$	$(c_6^2 0)$	$(c_6^3 \tau)$	$(c_6^4 0)$	$(c_6^5 \tau)$
$(\sigma_1 \tau)$	$(c_6\sigma_1 0)$	$(c_6^2\sigma_1 \tau)$	$(c_6^3\sigma_1 0)$	$(c_6^4\sigma_1 \tau)$	$(c_6^5\sigma_1 0)$

Здесь $\tau = c/2$ — вектор нетривиальной трансляции, направленный по оси c_6 , c — размер элементарной ячейки вдоль оси шестого порядка.

Зона Бриллюэна для гексагональной решетки является шестигранной призмой, она показана на рис. 27. Точка Γ находится

в центре зоны Бриллюэна, точки Δ и A находятся на оси шестого порядка: Δ — внутри, A — на границе зоны Бриллюэна. Точки H , P и K находятся на боковом ребре призмы: точка H — в вершине призмы, K — посередине ребра, а P занимает произвольное положение на ребре.

Группа направлений F_k указанных точек и число лучей в звезде приведены в таблице:

Группа F_k	C_{6v}	C_{3v}
Точки	Γ, Δ, A	H, P, K
Число лучей в звезде	1	2

Представления группы волнового вектора в точке Γ ($k=0$) совпадают с представлениями точечной группы C_{6v} . В этой группе имеется 4 одномерных A_1, A_2, B_2, B_1 и два двумерных E_1 и E_2 однозначных представления, которые обозначаются $\Gamma_1, \dots, \Gamma_6$; двузначные представления E'_1, E'_2, E'_3 , обозначаемые Γ_7, Γ_8 и Γ_9 ,

двумерны. Все представления в точке Γ относятся к случаю a_1 . В точке Δ , $k = k_0(001)$, представления группы волнового вектора Δ_i ($i = 1, \dots, 9$) для элементов, не содержащих основных трансляций, получаются из представлений группы C_{6v} умножением на множитель $e^{-ik_0\tau_r}$, где τ_r — нетривиальная трансляция, соответствующая поворотному элементу r . Представления Δ_i зависят от положения точки Δ на оси симметрии.

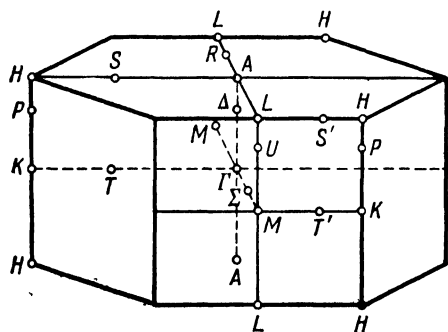


Рис. 27. Зона Бриллюэна для решетки вюрцита.

Поскольку при подходе к границе зоны Бриллюэна — к точке A — не появляются дополнительные элементы симметрии по сравнению с точкой Δ , то представления в точке A получаются из представлений в точке Δ , если положить $k_0 = \pi/c$.

Разница между точками Δ и A возникает при учете инверсии времени. Поскольку для точки Δ в группе C_{6v} нет элементов, превращающих k в $-k$, все представления в точке Δ относятся к случаю b_3 .

В точке A $k \equiv -k$, и из критерия Херринга следует, что представления A_1, \dots, A_8 относятся к случаю b_1 , а представле-

ние A_9 — к случаю c_1 . При этом согласно результатам § 18 за счет инверсии времени попарно объединяются представления $A_1—A_4$, $A_2—A_3$, $A_5—A_6$, $A_7—A_8$, а представление A_9 должно быть удвоено.

Рассмотрим теперь представления группы волнового вектора для точек на ребре призмы. Их группа симметрии C_{3v} , поэтому согласно результатам § 14 все проективные представления эквивалентны векторным. При этом для точки на ребре призмы все коэффициенты фактор-системы равны единице, так как в группе волнового вектора содержится нетривиальная трансляция τ , направленная по оси шестого порядка, а все векторы b в (12.29) лежат в плоскости, перпендикулярной этой оси. Поэтому все представления группы волнового вектора для точек P , K и H для элементов, не содержащих основных трансляций, равны однозначным или двузначным представлениям группы C_{3v} , умноженным на $e^{-ik_z\tau}$, при этом $k_z = 0$ для точки K и $k_z = \pi/c$ для точки H .

В группе C_{3v} имеется 3 однозначных представления A_1, A_2, E (двумерное) и 3 двузначных представления E'_1, E'_2, E'_3 (двумерное), которые приводят к представлениям $K_1, \dots, K_6, P_1, \dots, P_6$ и H_1, \dots, H_6 соответствующей размерности. Условия совместности этих представлений при движении вдоль ребра призмы тривиальны. В точке K k и $-k$ входят в одну звезду, все представления K_1, \dots, K_6 относятся к случаю a_2 . В точке P все представления относятся к случаю b_3 . В точке H представления H_1, H_2, H_4 и H_5 относятся к случаю b_2 , а представления H_3 и H_6 — к случаю a_2 . В этом случае за счет инверсии времени объединяются представления H_1, H_2 и H_4, H_5 .

Распределение нормальных колебаний по неприводимым представлениям

Используя формулы (15.28), определим, по каким неприводимым представлениям преобразуются нормальные колебания в симметричных точках q -пространства в решетках типа алмаза, цинковой обманки, каменной соли и вюрцита.

Рассмотрим сперва решетку типа алмаза. В табл. 23.3 приведены характеры представления \mathcal{D}_u , по которому преобразуются компоненты $u_{\chi_i}^v(q)$ в этой решетке. Как указано выше, эта решетка содержит два атома в элементарной ячейке с координатами (000) и $(a_0/4)(111)$.

Так как все 24 элемента, содержащие непримитивную трансляцию $\tau = (a_0/4)(111)$, переводят оба атома в неэквивалентное положение, то для этих элементов $\chi_q^\mu(g) = 0$. Остальные 24 преобразования оставляют на месте первый атом и смещают второй на один из векторов решетки a_i . В табл. 23.3 указаны эти смещения и приведены значения $\chi_q^\mu(g)$ при произвольном

Характеры представления \mathcal{D}_u для решетки типа алмаза

Элемент группы	$\chi_1(r)$	Смещение атома	Характеры представления χ_q^u			
			при произвольном q	в точке $\Gamma(000)$	в точке $X\left(\frac{2\pi}{a_0}(100)\right)$	в точке $L\left(\frac{\pi}{a_0}(111)\right)$
$(e 0)$	3	0	6	6	6	6
$(c_{2x} 0)$	-1	a_3	$-1 - e^{iqa_3}$	-2	-2	—
$(c_{2y} 0)$	-1	a_2	$-1 - e^{iqa_2}$	-2	0	—
$(c_{2z} 0)$	-1	a_1	$-1 - e^{iqa_1}$	-2	0	—
$(s_{4x} 0)$	-1	a_1	$-1 - e^{iqa_1}$	-2	0	—
$(s_{4y} 0)$	-1	a_3	$-1 - e^{iqa_3}$	-2	—	—
$(s_{4z} 0)$	-1	a_2	$-1 - e^{iqa_2}$	-2	—	—
$(s_{4x}^3 0)$	-1	a_2	$-1 - e^{iqa_2}$	-2	0	—
$(s_{4y}^3 0)$	-1	a_1	$-1 - e^{iqa_1}$	-2	—	—
$(s_{4z}^3 0)$	-1	a_3	$-1 - e^{iqa_3}$	-2	—	—
$(\sigma_{xy} 0)$	1	0	2	2	—	2
$(\sigma_{xy}^- 0)$	1	a_1	$1 + e^{iqa_1}$	2	—	—
$(\sigma_{xz} 0)$	1	0	2	2	—	2
$(\sigma_{xz}^- 0)$	1	a_3	$1 + e^{iqa_3}$	2	—	—
$(\sigma_{yz} 0)$	1	0	2	2	2	2
$(\sigma_{yz}^- 0)$	1	a_3	$1 + e^{iqa_3}$	2	2	—
$8(c_3 0), (c_3^2 0)$	0	—	0	0	0	0
$24(gi \tau)$	—	Переходит в неэквивалентное положение	0	0	0	0

Векторы прямой решетки

$$a_1 = (a_0/2)(110), \quad a_2 = (a_0/2)(101), \quad a_3 = (a_0/2)(011).$$

Векторы обратной решетки

$$b_1 = (2\pi/a_0)(11\bar{1}), \quad b_2 = (2\pi/a_0)(\bar{1}11), \quad b_3 = (2\pi/a_0)(\bar{1}\bar{1}1).$$

значении q , а также для точек $\Gamma(000)$, $X\left(\frac{2\pi}{a_0}(100)\right)$ и $L\left(\frac{\pi}{a_0}(111)\right)$ для всех элементов, входящих в группу волнового вектора этих точек. Согласно (15.28а)

$$\chi_q^u(r|\tau) = \chi_1(r) \sum_x \exp\{iq[r^{-1}(X_x - \tau) - X_x]\} \delta_{x, gk}$$

где $\chi_1(r)$ — характер векторного представления. В точке Γ для всех 24 элементов, не содержащих непримитивную трансляцию τ , т. е. для всех элементов группы T_d , $\chi_u(g) = 2\chi_{F_2}(g)$, а для остальных 24 элементов $\chi_u(g) = 0$. Следовательно, $\mathcal{D}_u = F_2^+ + F_2^-$. Так как для акустических колебаний, описывающих смещение ячейки как целого, компоненты a_{qv} преобразуются как компоненты полярного вектора, то акустические колебания соответствуют представлению $F_2^- = \Gamma_{15}$, а оптические — представлению $F_2^+ = \Gamma'_{25}$. Разложение представления \mathcal{D}_u на неприводимые для других точек приведено в табл. 23.4.

Таблица 23.4

Распределение колебаний по неприводимым представлениям G_R

Тип кристалла	Γ		X	Λ	L	Δ	Σ, κ	H, P, K
	акустич.	оптич.						
Ge, Si	Γ_{15}	Γ'_{25}	X_1, X_2, X_3	$2\Lambda_1, 2\Lambda_3$	L_1, L'_2, L_3, L'_3	$2\Delta_1, 2\Delta_5$	$2\Sigma_1, 2\Sigma_3, \Sigma_1, \Sigma_5$	—
InSb	Γ_{25}	Γ_{25}	$X_1, X_1, 2X_5$	$2\Lambda_1, 2\Lambda_3$	$2L, 2L_3$	$2\Delta_1, 2\Delta_3, 2\Delta_4$	$4\Sigma_1, 2\Sigma_2$	—
PbS	Γ_{15}	Γ'_{25}	$2X_4^-, 2X_5^-$	$2\Lambda_1, 2\Lambda_3$	L_1, L'_2, L_3, L'_3	$2\Delta_1, 2\Delta_5$	$2\Sigma_1, 2\Sigma_3, \Sigma_4, \Sigma_5$	—
ZnS (вюрцит)	Γ_1, Γ_5	$\Gamma_1, 2\Gamma_4, \Gamma_5, 2\Gamma_6$	—	—	—	$2\Delta_1, 2\Delta_4, 2\Delta_5, 2\Delta_6$	—	$2H_1, 2H_2, 4H_3$

Аналогичным образом легко найти представления, по которым преобразуются нормальные колебания в других решетках, указанных выше. Результаты этих расчетов сведены в табл. 23.4.

§ 24. СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППОЙ O_h^1, O_h^5, O_h^7

В настоящем параграфе мы найдем возможный вид спектра в кристаллах с пространственной группой O_h^1, O_h^5 и O_h^7 в рассмотренных в предыдущем параграфе точках зоны Бриллюэна.

Точка Γ является точкой нулевого наклона для всех представлений из-за наличия инверсии в группе O_h .

Для одномерных представлений $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma'_1, \Gamma'_2$ спектр вблизи $\mathbf{k} = 0$ согласно табл. 21.1 (стр. 245) описывается одной эффективной массой m^* и имеет вид

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (24.1)$$

Поскольку двумерные представления Γ_{12} и Γ'_{12} отличаются только поведением относительно инверсии, то спектр для обоих этих представлений одинаков.

Учитывая, что импульс преобразуется по векторному представлению Γ'_{15} , из (21.25) получим, что $N_2 = 2$, т. е. матрица (21.19) и спектр для представлений Γ_{12} и Γ'_{12} определяются двумя независимыми константами.

Для построения матрицы \mathcal{H} выберем в качестве базисных функций представления Γ_{12} функции, преобразующиеся как

$$\psi_1 = z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2), \quad \psi_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}(x^2 - y^2).$$

Тогда согласно (21.23) для матрицы \mathcal{H} получим

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} Ak^2 + \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2) & \frac{\sqrt{3}}{2}B(k_x^2 - k_y^2) \\ \frac{\sqrt{3}}{2}B(k_x^2 - k_y^2) & Ak^2 - \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2) \end{vmatrix}, \quad (24.2)$$

где

$$A = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_n \frac{|(1|p_x|n)|^2 + |(2|p_x|n)|^2}{E_0 - E_n},$$

$$B = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle 1|p_x|n\rangle \langle n|p_x|2\rangle}{E_0 - E_n}. \quad (24.3)$$

Собственные значения \mathcal{H} , дающие две ветви спектра $E_{1,2}$, равны

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm |B| \sqrt{k^4 - 3(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)}. \quad (24.4)$$

В направлении $[111]$, когда $k_x = k_y = k_z$, вырождение зоны не снимается: $E_1(\mathbf{k}) = E_2(\mathbf{k})$ в соответствии с условиями совместности, показывающими, что в направлении $[111]$ представления Γ_1 и Γ'_{12} переходят в двумерное представление Λ_3 .

Поскольку каждое из трехмерных представлений $\Gamma_{15}, \Gamma'_{15}, \Gamma_{25}$ и Γ'_{25} получается умножением одного из них на какое-либо из одномерных представлений кубической группы, то все они проективно эквивалентны и, как будет показано в § 25, спектр вблизи $\mathbf{k} = 0$ для них одинаков. При построении матрицы \mathcal{H} для представления Γ'_{15} выберем базисные функции X, Y, Z .

Используя (21.19), получим, что в этом базисе матрица \mathcal{H} имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_xk_y & Nk_xk_z \\ Nk_xk_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_yk_z \\ Nk_xk_z & Nk_yk_z & Lk_z^2 + M(k_y^2 + k_x^2) \end{vmatrix}, \quad (24.5)$$

где L , M и N — независимые константы, равные

$$\begin{aligned} L &= \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{|\langle X | p^x | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}, \\ M &= \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{|\langle X | p^y | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}, \\ N &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle X | p^x | n \rangle \langle n | p^y | Y \rangle + \langle X | p^y | n \rangle \langle n | p^x | Y \rangle}{E_0 - E_n}. \end{aligned} \quad (24.6)$$

Задача определения спектра сводится к решению характеристического уравнения (21.20) третьего порядка $|\mathcal{H} - \mathbf{I}E| = 0$. Решение может быть получено в явном виде для трех симметричных направлений [100], [111] и [110]:

$$\begin{aligned} E_1 &= Lk^2, \quad E_2 = E_3 = Mk^2, \quad k_x = k, \quad k_y = k_z = 0; \\ E_1 &= \left(\frac{L + 2M}{3} + \frac{2}{3} N \right) k^2, \quad E_2 = E_3 = \frac{L + 2M - N}{3} k^2, \\ & \quad k_x = k_y = k_z = \frac{k}{\sqrt{3}}; \end{aligned} \quad (24.7)$$

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{L + M + N}{2} k^2, \quad E_2 = \frac{L + M - N}{2} k^2, \quad E_3 = Mk^2, \\ & \quad k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}, \quad k_z = 0. \end{aligned}$$

Как видно из (24.7), вдоль направлений [100] и [111] вырождение полностью не снимается, а остается двукратное вырождение зоны. Это вырождение сохраняется на осях четвертого и третьего порядка вплоть до границы зоны Бриллюэна в соответствии с условиями совместности для этих направлений: $\Gamma'_{15} \rightarrow \Delta_1 + \Delta_5$, $\Gamma'_{15} \rightarrow \Delta_1 + \Delta_3$, хотя, конечно, спектр при достаточном удалении от точки Γ будет отличаться от (24.7).

При учете спин-орбитального взаимодействия в точке Γ имеются двукратные Γ_6^\pm , Γ_7^\pm и четырехкратные представления Γ_8^\pm , при этом спектр для представлений Γ_6^\pm , Γ_7^\pm одинаков, так же как и для представлений Γ_8^+ и Γ_8^- .

Рассмотрим спектр для двукратно вырожденных зон.

Элементы \mathcal{H}_{ij} матрицы \mathcal{H} согласно (21.23) преобразуются как

$$k_\alpha k_\beta \int \varphi_i^* (\pi^\alpha \pi^\beta + \pi^\beta \pi^\alpha) \varphi_j d\tau,$$

где φ_i, φ_j ($i, j = 1, 2; \alpha, \beta = x, y, z$) — базисные функции представления Γ_6^\pm или Γ_7^\pm . Поскольку для точки Γ представления относятся к случаю a_1 , то согласно (21.31) правила отбора для этих матричных элементов определяются представлением, по которому преобразуется антисимметризованное произведение функций $\varphi_i\varphi_j$:

$$\{\Gamma_6^\pm \times \Gamma_6^\pm\} = \{\Gamma_7^\pm \times \Gamma_7^\pm\} = \Gamma_1.$$

Поэтому матричный элемент отличен от нуля только для инвариантных комбинаций $\pi_\alpha\pi_\beta$, т. е. для $\pi^2 = \pi_x^2 + \pi_y^2 + \pi_z^2$. При этом из-за ортогональности представлений матричный элемент

$$k^2 \int \varphi_i^* \pi^2 \varphi_j d\tau \sim k^2 \delta_{ij},$$

т. е. матрица $\mathcal{H}_{ij} \sim E(\mathbf{k})\delta_{ij}$, а спектр $E(\mathbf{k})$ двукратно вырожден и совпадает со спектром (24.1) в невырожденной зоне.

Этот результат получен без использования какого-либо конкретного выбора базисных функций и справедлив при любой величине спин-орбитального взаимодействия.

Рассмотрим теперь спектр вблизи точки Γ для представления Γ_8^\pm . С учетом спина электрона трехкратное вырождение зоны в точке Γ , соответствующее представлению Γ'_{15} , удваивается и становится шестикратным, а базисные функции

$$X\alpha, Y\alpha, Z\alpha, X\beta, Y\beta, Z\beta \quad (24.8)$$

преобразуются по представлению $\Gamma'_{15} \times \mathcal{D}_{1/2}$. В (24.8) α, β — спиновые функции, соответствующие проекции спина $\pm 1/2$. Без учета спин-орбитального взаимодействия матрица \mathcal{H} в базе (24.8) имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} \mathcal{H}_1 & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_1 \end{vmatrix}, \quad (24.9)$$

где \mathcal{H}_1 — матрица (24.5).

Спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению шестикратно вырожденной в точке Γ зоны на четырехкратно вырожденную зону (представление Γ_8^-) и двукратно вырожденную зону Γ_6^- . Если величина спин-орбитального расщепления Δ зон Γ_8^- и Γ_6^- в точке $\mathbf{k} = 0$ значительно меньше расстояния до других зон, то в качестве базисных функций представлений Γ_8^- и Γ_6^- можно выбрать функции (23.2) и (23.3).

В новом представлении, определяемом функциями (23.2) и (23.3), в котором оператор \mathcal{H}_{co} диагонален, матрица \mathcal{H} (24.9) переходит в

$$\mathcal{H}' = S^{-1} \mathcal{H} S,$$

где унитарная матрица S преобразует функции (24.8) в функции (23.2), (23.3). Непосредственный расчет дает для $\mathcal{H}'_{jm', jm}$:

i, m i', m'	$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	F	H	I	I	0	$\frac{iH}{\sqrt{2}}$	$-i\sqrt{2}I$
$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	H^*	G	0	0	I	$\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$	$\frac{i\sqrt{3}H}{\sqrt{2}}$
$\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	I^*	0	G	G	$-H$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$\frac{i(G-F)}{\sqrt{2}}$
$\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	I^*	$-H^*$	$-H^*$	F	$-i\sqrt{2}I^*$	$-\frac{iH^*}{\sqrt{2}}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{iH^*}{\sqrt{2}}$	$-\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$i\sqrt{2}I$	$\frac{(F+G)}{2}$	0
$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$i\sqrt{2}I^*$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$-\frac{i(G-F)}{\sqrt{2}}$	$-\frac{i(G-F)}{\sqrt{2}}$	$\frac{iH}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{(F+G)}{2}$

(24.10)

где

$$F = \frac{L+M}{2}(k_x^2 + k_y^2) + Mk_z^2, \quad G = \frac{F}{3} + \frac{2}{3}[M(k_x^2 + k_y^2) + Lk_z^2], \quad (24.11)$$

$$H = -\frac{N}{\sqrt{3}}(k_y k_z + ik_x k_z), \quad I = \frac{1}{\sqrt{12}}\{(L-M)(k_x^2 - k_y^2) - 2iNk_x k_y\}.$$

В общем случае для определения спектра с учетом спин-орбитального расщепления зоны следует находить собственные значения матрицы (24.10).

Если Δ велико по сравнению с кинетической энергией носителей тока, отсчитанной от дна каждой из отщепившихся зон, то задача упрощается и в этом случае для определения спектра достаточно найти собственные значения матрицы четвертого порядка

$$\begin{vmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{vmatrix} \quad (24.12)$$

и диагональной матрицы второго порядка, которые дают отдельно спектр каждой из расщепившихся зон. Решая соответствующие характеристические уравнения, найдем спектр в зоне Γ_8 :

$$E_{1,2} = \frac{F+G}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{F-G}{2}\right)^2 + |H|^2 + |I|^2}, \quad (24.13)$$

откуда

$$E_{1,2} = Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + C^2(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)}, \quad (24.13a)$$

и в зоне Γ_6 :

$$E_3 = \frac{F+G}{2} - \Delta = Ak^2 - \Delta, \quad (24.13b)$$

где введены константы:

$$A = \frac{L+2M}{3}, \quad B = \frac{L-M}{3}, \quad C^2 = D^2 - 3B^2, \quad D = \frac{N}{\sqrt{3}}. \quad (24.14)$$

Каждое собственное значение двукратно вырождено из-за инверсии времени.

Для вырожденной зоны Γ_8 в соответствии с результатами § 17 вторая производная от энергии по компонентам вектора \mathbf{k} терпит разрыв в точке $\mathbf{k} = 0$. Матрица (24.12) и спектр (24.13a) для представления Γ_8 получен нами в приближении слабого спин-орбитального взаимодействия. Легко показать, что и при любой величине спин-орбитального взаимодействия вид матрицы \mathcal{H} и спектр $E(\mathbf{k})$ совпадают с (24.12) и (24.13); в частности они определяются тремя независимыми константами A, B, D , в чем можно убедиться из (21.31).

Однако соотношения (24.14) между константами A, B, D для уровня Γ_8 и L, M, N для уровня Γ_{15} , так же как и связь эффективной массы в зоне Γ_6 с этими константами, справедливы лишь при слабом спин-орбитальном взаимодействии (см. (26.15а)).

Поверхности постоянной энергии (24.13) являются «деформированными» сферами.

Волновые функции дырок в низшем по k приближении согласно (21.21) равны

$$\psi_{lk} = e^{ikx} \sum_{m'=\pm 3/2, \pm 1/2} c_{m'}^l(\mathbf{k}) \psi_{m'}^{3/2}, \quad (24.15)$$

а функции $\psi_{m'}^{3/2}$ определены в (23.2).

Волновые функции (24.15) удобно записывать в виде столбца коэффициентов $c_{m'}^l(\mathbf{k})$ разложения ψ_{lk} по функциям дна зоны $\psi_{m'}^{3/2}$:

$$\psi_{lk} = e^{ikx} \begin{pmatrix} c_{3/2}^l(\mathbf{k}) \\ c_{1/2}^l(\mathbf{k}) \\ c_{-1/2}^l(\mathbf{k}) \\ c_{-3/2}^l(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \equiv e^{ikx} \mathcal{F}_{lk}. \quad (24.16)$$

Матрица c определяется из решения системы уравнений (21.18) с матрицей \mathcal{H} (24.12). Поскольку собственные значения матрицы (24.12) двукратно вырождены из-за инверсии времени, коэффициенты матрицы c определяются не однозначно, а с точностью до унитарного преобразования вырожденных функций. Поскольку представление Γ_8 относится к случаю a_1 , то между базисными функциями $\psi_m^{3/2}$ и функциями $K\psi_m^{3/2} = \sigma_y K_0 \psi_m^{3/2}$ существует линейная связь (18.7). Легко убедиться, что для функций (23.2) эти соотношения имеют вид

$$K\psi_{3/2}^{3/2} = \psi_{-3/2}^{3/2}, \quad K\psi_{1/2}^{3/2} = -\psi_{-1/2}^{3/2}, \quad K\psi_{-1/2}^{3/2} = \psi_{1/2}^{3/2}, \quad K\psi_{-3/2}^{3/2} = -\psi_{3/2}^{3/2}. \quad (24.17)$$

Эти соотношения определяют матрицу T (18.7).

При переходе к базису $K\psi$ матрица \mathcal{H} переходит в матрицу *)

$$T^{-1} \mathcal{H} T = \mathcal{H}^*,$$

что и обеспечивает двукратное вырождение собственных значений матрицы (24.12). Коэффициенты c_i^l и $c_i^{l'}$ двух вырожденных функций ψ_{lk} и $\psi_{l'k}$ можно подчинить условию, подобному (24.17):

$$c_{3/2}^{l'} = -c_{-3/2}^{*l}, \quad c_{1/2}^{l'} = c_{-1/2}^{*l}, \quad c_{-1/2}^{l'} = -c_{1/2}^{*l}, \quad c_{-3/2}^{l'} = c_{3/2}^{*l}. \quad (24.18)$$

*) Отметим, что это условие инвариантности матрицы \mathcal{H} к инверсии времени и вид матрицы T , определяемой преобразованиями (24.17), однозначно определяют вид (24.12) матрицы \mathcal{H} для представления Γ_8 .

Собственные функции \mathcal{F}_k матрицы \mathcal{H} , удовлетворяющие условию (24.18), равны

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_{k1} &= \frac{1}{\sqrt{(E_1 - F)(E_1 - E_2)}} \begin{vmatrix} H \\ E_1 - F \\ 0 \\ I^* \end{vmatrix}; \\
 \mathcal{F}'_{k1} &= \frac{1}{\sqrt{(E_1 - F)(E_1 - E_2)}} \begin{vmatrix} -I \\ 0 \\ -(E_1 - F) \\ H^* \end{vmatrix}; \\
 \mathcal{F}_{k2} &= \frac{1}{\sqrt{(E_2 - F)(E_2 - E_1)}} \begin{vmatrix} H \\ E_2 - F \\ 0 \\ I^* \end{vmatrix}; \\
 \mathcal{F}'_{k2} &= \frac{1}{\sqrt{(E_2 - F)(E_2 - E_1)}} \begin{vmatrix} -I \\ 0 \\ -(E_2 - F) \\ H^* \end{vmatrix},
 \end{aligned} \tag{24.19}$$

где $E_{1,2}$, I , F и H определены в (24.11) и (24.13).

В согласии с общими результатами § 17 и § 21 функции \mathcal{F}_{kl} и ψ_{kl} зависят только от направления вектора k и как функции k терпят разрыв в точке $k = 0$.

В тех случаях, когда энергия дырок сравнима с величиной спин-орбитального расщепления зон Γ_8 и Γ_6 , следует находить собственные значения матрицы (24.10), что сводится к решению кубического уравнения, так как из-за инверсии времени каждое собственное значение двукратно вырождено.

Используя формулы (15.49), (15.49a) теории возмущений, легко найти поправки к энергии $E_{1,2}(k)$ за счет взаимодействия зон Γ_8 и Γ_6 . Для этого нужно учесть поправки к матрице (24.12), которые для матрицы \mathcal{H} (24.10) имеют вид

$$\begin{aligned}
 F' &= F + \frac{1}{2\Delta} (|H|^2 + 4|I|^2), \\
 G' &= G + \frac{1}{2\Delta} ((F - G)^2 + 3|H|^2), \\
 H' &= H + \frac{1}{2\Delta} (H(G - F) - 2\sqrt{3}H^*I), \\
 I' &= I - \frac{1}{2\Delta} (\sqrt{3}H^2 + 2I(G - F)).
 \end{aligned} \tag{24.20}$$

Отсюда получим поправку к энергии $\delta E_{1,2}(k) \sim k^4/\Delta$, которая дает непараболичность спектра за счет взаимодействия зон Γ_8 и Γ_6 :

$$\delta E_{1,2} = \frac{1}{\Delta} \{B^2 k^4 + C^2 \Theta \pm \frac{1}{2} \frac{2B^3 k^6 + 9B \left(\frac{D^2}{3} - B^2\right) k^2 \Theta + 27 \left(\frac{2D}{\sqrt{3}} + B\right) k_x^2 k_y^2 k_z^2}{\sqrt{B^2 k^4 + C^2 \Theta}}\}, \quad (24.21)$$

где $\Theta = k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2$.

Полученные выше формулы определяют возможные типы спектра в точке Γ для всех пространственных групп класса O_h .

Точка Δ . Поскольку представления в точке Δ относятся к случаю a_2 , для определения числа отличных от нуля матричных элементов импульса следует использовать (21.28), (21.32), где в качестве элемента R может быть выбрана инверсия. Как указано в § 18, для внутренних точек зоны Бриллюэна в формулах (21.28), (21.32) стоят характеры представлений точечной группы направлений, поэтому полученные ниже результаты для точки Δ справедливы для всех групп класса O_h . Учитывая, что оператор π (или ρ) является нечетным как по отношению к пространственной инверсии, так и к инверсии времени, формулы (21.28), (21.32) имеют вид

$$N = \sum_{r \in F_R} \chi(r) (|\chi_v(r)|^2 + K^2 \chi_v(r^2)). \quad (24.22)$$

Для всех одномерных однозначных представлений $[\Delta_i^* \times \Delta_i] = A_1$, а для двузначных представлений $\{\Delta_i^* \times \Delta_i\} = A_1$. Для двумерного однозначного представления $[\Delta_5^* \times \Delta_5] = A_1 + A_2 + B_2$.

Представление, по которому преобразуются компоненты векторов π или ρ , приводимо и распадается на единичное A_1 , по которому преобразуется π_x , и двумерное E , по которому преобразуются π_y, π_z . Из (24.22) следует, что в точке Δ для всех представлений отлична от нуля только одна компонента импульса $\pi_x(\rho_x)$.

Для одномерных представлений поверхность постоянной энергии в точке Δ вблизи экстремума согласно табл. 21.1 является эллипсоидом вращения:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m_{\perp}}. \quad (24.23)$$

Для двумерного представления Δ_5 в базисе функций Y, Z матрица \mathcal{H} в точке экстремума имеет вид

$$\mathcal{H} = \left\| \begin{array}{cc} Ak_x^2 + Bk_y^2 + Ck_z^2 & Dk_y k_z \\ Dk_y k_z & Ak_x^2 + Ck_y^2 + Bk_z^2 \end{array} \right\|, \quad (24.24)$$

где

$$A = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{|(Y|p^x|n)|^2}{E_0 - E_n},$$

$$D = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle Y|p^z|n\rangle \langle n|p^y|Z\rangle + \langle Z|p^z|n\rangle \langle n|p^y|Y\rangle}{E - E_n}; \quad (24.25)$$

выражения для B и C отличаются от выражения для A заменой p^x на p^y и p^z соответственно.

Спектр $E_{1,2}$ для представлений Δ_5 равен

$$E_{1,2}(k) = E(k_0) + Ak_x^2 + \frac{B+C}{2}(k_y^2 + k_z^2) \pm \sqrt{\left(\frac{C-B}{2}\right)^2 (k_y^2 - k_z^2)^2 + D^2 k_y^2 k_z^2} \quad (24.26)$$

и определяется четырьмя параметрами A , B , C и D .

С учетом спина и спин-орбитального взаимодействия одномерные представления переходят в двумерные Δ_6 и Δ_7 , а четырехмерное представление $\Delta_5 \times \mathcal{D}_{1/2}$ расщепляется на два двумерных.

Поскольку $\{\Delta_7^* \times \Delta_7\} = \{\Delta_6^* \times \Delta_6\} = A_1$, то число независимых констант, определяющих спектр в точке нулевого наклона, равно числу единичных представлений, содержащихся в прямых произведениях $[\Delta_1 \times \Delta_1] = A_1$ и $[\Delta_5 \times \Delta_5] = A_1 + B_2 + A_2$, т. е. равно двум. Этими инвариантными комбинациями $\pi^\alpha \pi^\beta + \pi^\beta \pi^\alpha$ являются комбинации π_x^2 и $\pi_y^2 + \pi_z^2$, поэтому для двузначных представлений $\mathcal{H}_{ij} = (Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2))\delta_{ij}$, т. е. для двузначных представлений спектр в точке Δ совпадает со спектром (24.23) в невырожденной зоне.

Точка X. Поскольку для точки X в группе направлений D_{4h} содержится инверсия, которая коммутирует со всеми элементами в пространственных группах O_h^1 и O_h^5 , то волновые функции в точке X обладают определенной четностью и поэтому точка X является точкой нулевого наклона для всех представлений групп O_h^1 и O_h^5 .

Так как $D_{4h} = C_{4v} \times C_i$, то возможный вид спектра в точке X для групп O_h^1 и O_h^5 совпадает со спектром в точке нулевого наклона точки Δ и определяется формулами (24.23) и (24.26). Возможные виды спектра в точке M в группе O_h^1 совпадают с возможными вариантами зонной структуры в точке X для этой группы. Иная ситуация имеет место в точке X группы O_h^7 , где имеется принудительное вырождение зон.

В группе O_h^7 инверсия i сопровождается нетривиальной трансляцией τ , поэтому она не коммутирует со всеми элементами пространственной группы, и базисные функции представле-

ний группы волнового вектора не обладают определенной четностью. Поэтому в группе O_h^7 наличие инверсии в группе направления само по себе не приводит автоматически к обращению в нуль матричных элементов импульса. Поскольку в точке X представления относятся к случаю a_1 , для определения числа линейно независимых компонент оператора импульса следует использовать (21.25) и (21.31).

Так как $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$, то произведение представлений $X_i \times X_i$ ($i = 1, 2, \dots, 5$) мы будем раскладывать по представлениям группы $D_{2d} \times C_i$.

Нетрудно проверить по таблицам характеров, что

$$\begin{aligned} \{X_1^* \times X_1\} &= \{X_3^* \times X_3\} = A_2^-, & [X_1^* \times X_1] &= [X_3^* \times X_3] = A_1^+ + B_1^- + B_2^+, \\ \{X_2^* \times X_2\} &= \{X_4^* \times X_4\} = B_2^-, & [X_2^* \times X_2] &= [X_4^* \times X_4] = A_1^+ + A_1^- + B_2^+, \\ \{X_5^* \times X_5\} &= A_2^+ + A_2^- + B_1^+ + B_2^+ + 2E^+ + E^-, \\ \{X_5^* \times X_5\} &= A_1^+ + A_1^- + B_1^- + B_2^+ + E^-. \end{aligned} \quad (24.27)$$

Поскольку компоненты импульса в точке X преобразуются по представлениям B_2^- (π_x) и E^- (π_y, π_z), то из (24.27) следует, что точка X является точкой нулевого наклона для представлений X_1, X_3 , в то время как для представлений X_2 и X_4 отличен от нуля матричный элемент p_x (и, соответственно, $\partial E / \partial k_x$). Для спинорного представления X_5 отличны от нуля все три компоненты π_x, π_y, π_z . При этом матричные элементы π_y, π_z имеют релятивистскую малость, а π_x релятивистски мал только для тех представлений X_5 , которые произошли от представлений X_1, X_3 .

Здесь мы рассмотрим спектр в точке X для представлений X_1, X_3 . Матричные элементы квадратичных компонент импульса согласно (21.25) определяются симметризованными произведениями представлений.

Симметризованное произведение $[\mathcal{D}_1^2]$ раскладывается на неприводимые представления группы $D_{2d} \times C_i$ следующим образом:

$$[\mathcal{D}_1^2] = 2A_1^+ + B_1^+ + B_2^+ + E^+.$$

Таким образом, согласно (24.27) матрица \mathcal{H} и спектр $E(\mathbf{k})$ определяются тремя комбинациями компонент: $k_x^2, k_y^2 + k_z^2$, преобразующимися по представлению A_1 , и $k_y k_z$, преобразующимся по B_2 . Вид матрицы \mathcal{H} зависит от конкретного выбора базисных функций. При построении матрицы \mathcal{H} (24.2), (24.5) и (24.24) использовался явный вид базисных функций. Однако можно строить матрицы \mathcal{H} , не задаваясь явным видом базисных функций, если известны матрицы представления.

Для представлений X_1 и X_3 мы построим матрицу \mathcal{H} в базисе функций ψ_1 и ψ_2 , который определяется матрицами преобразования, приведенными для образующих элементов группы D_{2d} в табл. 14.2 (стр. 151).

Для инвариантных комбинаций p_x^2 и $p_y^2 + p_z^2$ матричные элементы (21.23) \mathcal{H}_{ij} равны

$$\langle \psi_i | p_x^2 | \psi_j \rangle = \langle \psi_1 | p_x^2 | \psi_1 \rangle \delta_{ij}, \quad \langle \psi_i | p_y^2 + p_z^2 | \psi_j \rangle = \langle \psi_1 | p_y^2 + p_z^2 | \psi_1 \rangle \delta_{ij}.$$

Диагональные матричные элементы $\langle \psi_1 | p_y p_z | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | p_y p_z | \psi_2 \rangle = 0$, так как из табл. 14.2 следует, что они меняют знак при преобразованиях s_4 . Единственным недиагональным элементом матрицы \mathcal{H} в выбранном базисе будет матричный элемент $\langle \psi_1 | p_y p_z | \psi_2 \rangle$, поэтому в соответствии с (21.23) для представлений X_1, X_3 матрица \mathcal{H} имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2) & Ck_y k_z \\ C^* k_y k_z & Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2) \end{vmatrix}, \quad (24.28)$$

где A, B и C — константы.

Энергетический спектр $E_{1,2}(\mathbf{k})$ для представлений X_1, X_3 имеет вид

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) \mp Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2) \pm |C| k_y k_z, \quad (24.29)$$

и поверхности постоянной энергии (24.29) являются двумя трехосными эллипсоидами с главными осями по направлениям $[100]$, $[011]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$.

Хотя каждый из них и не инвариантен к преобразованиям из группы D_{4h} , в целом спектр (24.29) инвариантен относительно преобразований из D_{4h} .

Точка Λ . В точке Λ для одномерных однозначных представлений Λ_1 и Λ_2 отлична от нуля одна компонента импульса, параллельная оси третьего порядка. В точке нулевого наклона поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения, с главной осью z , направленной вдоль оси третьего порядка. В этих осях

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_x^2)}{2m_{\perp}}. \quad (24.30)$$

Для двумерного однозначного представления Λ_3 , относящегося к случаю a_2 , при определении N_1 следует использовать формулы (21.28), (21.32), где в качестве элемента R может быть выбрана инверсия. Из (21.28) следует, что для представления Λ_3 отличны от нуля компоненты импульса, преобразующиеся по представлению $[E \times E] = \mathbf{A}_1 + E$, т. е. все три компоненты импульса. Поэтому точка Λ не является точкой нулевого наклона для представления Λ_3 .

Одномерные двузначные представления Λ_4 и Λ_5 относятся к случаю b_2 и должны быть объединены. Согласно (21.22) имеется одна отличная от нуля линейно независимая константа, соответствующая «диагональному» матричному элементу импульса π_z ; «недиагональные» матричные элементы импульса равны нулю.

В точке нулевого наклона, где обращается в нуль продольная компонента импульса, спектр согласно (21.23) двукратно вырожден и определяется формулой (24.30). Двумерное двузначное представление Λ_6 относится к случаю a_2 и согласно (21.32) выражения для N_1 и N_2 определяются антисимметризованным произведением $\{\Lambda_6 \times \Lambda_6\} = A_1$. Поэтому в точке Λ для представления Λ_6 отлична от нуля только продольная компонента π_z , а в точке нулевого наклона спектр определяется формулой (24.29).

Таким образом, в точке Λ вблизи экстремума для всех представлений поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения (24.30) для всех групп O_h^1 , O_h^5 и O_h^7 .

Точка L. Поскольку в группе волнового вектора в точке L имеется инверсия, коммутирующая со всеми элементами группы, то точка L является точкой нулевого наклона для всех представлений.

Для однозначных одномерных представлений L_1^\pm , L_2^\pm спектр $E(\mathbf{k})$ в точке L определяется формулой (24.30). Для двумерных однозначных представлений L_3^\pm спектр одинаков. Для представления L_3^- базисные функции могут быть выбраны в виде

$$\psi_1 = X + iY, \quad \psi_2 = X - iY,$$

где оси x , y лежат в плоскости, перпендикулярной оси третьего порядка z . В этом базисе матрица \mathcal{H} имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} Ak_z^2 + B(k_x^2 + k_y^2) & Ck_zk_- \\ C^*k_zk_+ & Ak_z^2 + B(k_x^2 + k_y^2) \end{vmatrix} \quad (24.31)$$

и приводит к спектру

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + Ak_z^2 + B(k_y^2 + k_x^2) \pm \frac{1}{2}|C|k_zk_\perp; \quad (24.32)$$

в этих формулах $k_\pm = (k_x \pm ik_y)/2$, $k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, а A , B и C — константы.

Для двумерного спинорного представления L_6^\pm из (21.31) имеем: $\{L_6^\pm \times L_6^\pm\} = A_1^+$, поэтому спектр для этих представлений определяется формулой (24.30) и двукратно вырожден.

Для объединенных представлений L_4^+ , L_5^+ и L_4^- , L_5^- следует использовать формулы (21.22) и (21.24), из которых следует, что матрица \mathcal{H} для этих представлений включает только инвариантные по отношению к группе D_{3d} комбинации компонент

k_z^2 и $k_x^2 + k_y^2$. Поэтому она кратна единичной, ее собственные значения двукратно вырождены и определяются формулой (24.30).

Точка Σ . Для одномерных представлений $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ и Σ_4 согласно табл. 21.1 отличен от нуля только один матричный элемент компоненты импульса p_z , где ось z направлена по оси второго порядка.

В точке нулевого наклона поверхности постоянной энергии для одномерных представлений являются трехосными эллипсоидами:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_3}, \quad (24.33)$$

где оси x и y направлены по линиям пересечения плоскости, перпендикулярной оси второго порядка, с плоскостями отражения σ_v .

Для двумерного спинорного представления Σ_5 из (21.28) следует, что отличен от нуля также только матричный элемент компоненты импульса π_z . В точке нулевого наклона спектр двукратно вырожден и определяется формулой (24.33).

Все полученные результаты для точки Σ справедливы и для соответствующих представлений точки K .

Модель Кейне

В ряде полупроводников с решеткой типа цинковой обманки, например в InSb, экстремумы зоны проводимости и валентной зоны находятся в одной точке Γ и ширина запрещенной зоны у них мала. Поэтому для этих кристаллов квадратичное по \mathbf{k} приближение для $E(\mathbf{k})$ в ряде задач оказывается недостаточным и при построении $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ необходимо строить его сразу для зоны проводимости и валентной зоны. Если не учитывать линейных по \mathbf{k} релятивистских членов, которые будут рассмотрены в § 26, то $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ для этих кристаллов в точке Γ не отличается от соответствующего гамильтониана для решетки Ge и Si, так же как и для других кубических кристаллов. В соответствии с (23.2) в качестве базисных функций для валентной зоны выберем нечетные функции ψ_m^{j-} с $j = 3/2$ и $j = 1/2$, а в качестве базисных функций зоны проводимости — четные функции $\psi_m^{1/2+}$. Согласно (21.38), матрица $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ в этом базисе имеет вид, представленный в табл. 24.1, где

$$p = \frac{\hbar}{m} \langle S | p_x | X \rangle, \quad k_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_x \pm ik_y). \quad (24.34)$$

При этом константы L', M' и N' в $F', G' H'$ и I' отличаются от констант L, M, N в F, G, H, I в (24.10), так как они учитывают взаимодействие валентной зоны со всеми зонами, кроме зоны проводимости, тогда как L, M и N включают и взаимодействие

Матрица $\mathcal{E}(k)$ для двухзонной модели

	$1/2, 1/2$	$1/2, -1/2$	$3/2, 3/2$	$3/2, 1/2$	$3/2, -1/2$	$3/2, -3/2$	$1/2, 1/2$	$1/2, -1/2$
$1/2, 1/2$	$E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	pk_-	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_+$	$-i \sqrt{\frac{2}{3}} pk_z$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_z$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} pk_+$
$1/2, -1/2$	0	$E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} pk_z$	$\frac{i}{\sqrt{3}} pk_-$	ipk_+	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_-$	$\frac{i}{\sqrt{3}} pk_z$
$3/2, 3/2$	pk_+	0	F'	H'	I'	0	$\frac{iH'}{\sqrt{2}}$	$-i\sqrt{2}I'$
$3/2, 1/2$	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_-$	$\sqrt{\frac{2}{3}} pk_z$	H'	G'	0	I'	$\frac{i}{\sqrt{2}}(G' - F')$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H'$
$3/2, -1/2$	$i\sqrt{\frac{2}{3}} pk_z$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} pk_+$	I'	0	G'	$-H'$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H'$	$\frac{i}{\sqrt{2}}(G' - F')$
$3/2, -3/2$	0	$-ipk_-$	0	I'	$-H'$	F'	$-i\sqrt{2}I'$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H'$
$1/2, 1/2$	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{3}} pk_+$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H'$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}(G' - F')$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H'$	$i\sqrt{2}I'$	$-\Delta + \frac{F'+G'}{2}$	0
$1/2, -1/2$	$\frac{i}{\sqrt{3}} pk_-$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} pk_z$	$i\sqrt{2}I'$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H'$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}(G' - F')$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H'$	0	$-\Delta + \frac{F'+G'}{2}$

с зоной проводимости. Для того чтобы перейти от табл. 24.1 к (24.10), надо исключить в ней междузонные члены, учитывающие это взаимодействие. Точно так же сумма

$$\frac{1}{2m'_c} = \frac{1}{m^2} \sum_n \frac{|\langle S | p_x | n \rangle|^2}{E_0 - E_n} + \frac{1}{2m}$$

включает взаимодействие со всеми зонами n , кроме валентной зоны.

§ 25. МЕТОД ИНВАРИАНТОВ

Как было показано в предыдущих параграфах, гамильтонианом для электрона в приближении эффективной массы является оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, который имеет вид матрицы размерности $n_s \times n_s$, где n_s — размерность соответствующего представления \mathcal{D}^{k_s} группы волнового вектора G_{k_s} . Для свободных носителей собственные значения матрицы $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ определяют спектр $E(\mathbf{k})$. Для построения $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ в этих параграфах использовалась теория возмущений, которая позволяет установить общий вид $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ и получить явные выражения для входящих в \mathcal{H} констант через соответствующие матричные элементы. Однако обычно достаточно знать лишь общий вид \mathcal{H} , так как входящие в него константы, как правило, определяются из экспериментальных данных. Для определения общего вида \mathcal{H} нет необходимости использовать довольно громоздкую теорию возмущений; $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ можно построить, зная лишь закон преобразования базисных функций $\psi_{k,m}$ и компонент k_i при операциях группы волнового вектора.

Требования, накладываемые на $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ условиями симметрии

Рассмотрим гамильтониан \mathcal{H} , построенный в базисе функций ψ_i ($i = 1, 2, \dots, n_s$), преобразующихся по представлению $\mathcal{D}(g)$ группы G , $g \in G$ размерности n_s . При этом мы будем считать, что \mathcal{H} зависит не только от волнового вектора \mathbf{k} , но и от внешних полей: магнитного \mathbf{H} и электрического \mathcal{E} , причем в последнем случае \mathcal{H} может явно зависеть от координат \mathbf{x} . Кроме того, как будет подробно показано в следующей главе, \mathcal{H} может включать члены, пропорциональные компонентам тензора деформации. Все эти величины мы обозначим символом \mathcal{K} , имея в виду, что закон преобразования компонент \mathcal{K}_i определяется правилами преобразования соответствующих векторов или тензоров при данной операции g . При преобразовании g , входящем в группу G , функции $\psi_j(\mathbf{x})$ переходят в

$$\psi'_j(\mathbf{x}) = \psi_j(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_i \mathcal{D}_{ij}(g) \psi_i(\mathbf{x})$$

и в соответствии с (7.12) $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ переходит в $\mathcal{D}^{-1}(g) \mathcal{H}(\mathcal{K}) \mathcal{D}(g)$.

С другой стороны, преобразование g системы координат эквивалентно обратному преобразованию g^{-1} всех векторов или тензоров \mathcal{H} , в результате которого $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ переходит в $\mathcal{H}(g^{-1}\mathcal{K})$. Следовательно, $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ должно удовлетворять условиям

$$\mathcal{D}^{-1}(g)\mathcal{H}(\mathcal{K})\mathcal{D}(g) = \mathcal{H}(g^{-1}\mathcal{K}), \quad g \in G. \quad (25.1a)$$

Эти соотношения являются обычными условиями инвариантности гамильтониана к преобразованию g :

$$\mathcal{H}'(\mathcal{K}') = \mathcal{D}(g)\mathcal{H}(g^{-1}\mathcal{K})\mathcal{D}^{-1}(g) = \mathcal{H}(\mathcal{K}). \quad (25.16)$$

Каждое матричное уравнение (25.1) представляет n_s^2 уравнений для матричных элементов $\mathcal{H}_{ij}(\mathcal{K})$ матрицы $\mathcal{H}(\mathcal{K})$.

Уравнения (25.1) должны выполняться при всех операциях $g \in G$. Однако легко проверить, что если они справедливы для всех образующих элементов группы G , то они выполняются и для любого элемента группы g , так как эти элементы могут быть записаны как произведение образующих элементов.

Если не учитывать дополнительных требований, накладываемых на $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ условиями, связанными с инвариантностью гамильтониана к инверсии времени, которые будут рассмотрены ниже, то система уравнений (25.1) для всех образующих элементов полностью определяет вид $\mathcal{H}(\mathcal{K})$. Если матрицы представлений известны, то можно построить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, непосредственно используя эти уравнения. Несмотря на кажущуюся громоздкость, практически этот способ обычно оказывается достаточно простым. Однако, как будет показано ниже, в большинстве случаев можно построить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, зная лишь характеры представлений. Конечно, и в этом случае $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ строится в определенном базисе, но этот базис в явном виде не задается.

Матрицу $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ размерностью $n_s \times n_s$ можно представить в виде произведения соответствующих компонент \mathcal{H}_i на n_s^2 линейно независимых матриц $X_i (i=1, 2, \dots, n_s^2)$, не зависящих от \mathcal{K} . Рассмотрим подробнее свойства этих базисных матриц X_i . Если применить к любой из них операцию g , которую в соответствии с (10.9) определим как

$$g^{-1}X_i = X'_i = \mathcal{D}(g)X_i\mathcal{D}^{-1}(g), \quad (25.2)$$

то полученную в результате такого преобразования матрицу X'_i можно разложить по полной системе матриц X_j :

$$X'_i = \sum_j \mathcal{D}_{ji}^X(g)X_j. \quad (25.3)$$

Матрицы $\mathcal{D}^X(g)$ образуют представление группы G , в чем легко убедиться, повторяя рассуждения, приведенные в § 7 при выводе уравнения (7.5). Размерность этого представления \mathcal{D}^X равна n_s^4 . Для определения характеров представления \mathcal{D}^X обозначим

матрицы X_i двумя индексами: X^{lk} ($l = 1, 2, \dots, n_s, k = 1, 2, \dots, n_s$) и выберем их так, чтобы каждая матрица X^{lk} имела только один отличный от нуля матричный элемент $X_{lk}^{lk} = 1$, т. е.

$$X_{l'k'}^{lk} = \delta_{ll'} \delta_{kk'}.$$

В этом представлении, согласно (25.2) и (25.3),

$$\mathcal{D}_{ijl'j'}^x(g) = \mathcal{D}_{l'i}(g) \mathcal{D}_{j'j}^{-1}(g) = \mathcal{D}_{il'}(g) \mathcal{D}_{j'j}^*(g),$$

т. е. матрицы \mathcal{D}^x являются прямым произведением матриц $\mathcal{D}(g) \mathcal{D}^*(g)$. Отсюда следует, что характер представления \mathcal{D}^x , который не зависит от конкретного выбора матриц X_i , равен

$$\chi_x(g) = \sum_{ij} \mathcal{D}_{ijij}^x(g) = \chi(g) \chi^*(g) = |\chi(g)|^2, \quad (25.4)$$

где $\chi(g)$ — характер представления $\mathcal{D}(g)$.

Представление \mathcal{D}^x в общем случае приводимо и может быть разложено по неприводимым представлениям. Это означает, что из n_s^2 линейно независимых матриц X_i можно составить линейные комбинации X_i^x , преобразующиеся в соответствии с (25.2), (25.3) по неприводимым представлениям \mathcal{D}_x группы G , входящим в $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$, т. е. удовлетворяющие соотношениям

$$g^{-1} X_i^x = \mathcal{D}(g) X_i^x \mathcal{D}^{-1}(g) = \sum_{i'} \mathcal{D}_{i'i}^x(g) X_{i'}^x. \quad (25.5)$$

Из компонент векторов или тензоров также можно составить комбинации \mathcal{H}_i^x , преобразующиеся по различным представлениям \mathcal{D}_x группы G . Тогда матрицы $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ в соответствии с правилами построения инвариантов, изложенными в § 9 (см. (9.27)), можно записать в виде произведения матриц X_i^x и компонент \mathcal{H}_i^{x*} , преобразующихся по комплексно сопряженным представлениям:

$$\mathcal{H}(\mathcal{H}) = \sum_x a_x \sum_l X_l^x \mathcal{H}_l^{x*}, \quad (25.6)$$

где a_x — произвольные константы, которые могут быть либо комплексными, либо чисто вещественными или мнимыми с тем, чтобы $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ был эрмитов. Если компоненты \mathcal{H}_l^x выбраны вещественными, а матрицы X_l^x — эрмитовыми, то эти константы должны быть вещественны. При этом, вообще говоря, одни и те же компоненты \mathcal{H}_l^x могут входить в (25.6) в виде произведений не с одним, а с несколькими различными наборами матриц X_l^x , преобразующимися по одному представлению, и, соответственно, с разными константами a_x .

Используя (25.5), легко проверить, что оператор $\mathcal{H}(\mathcal{H})$, построенный в соответствии с (25.6), действительно удовлетворяет

условию (25.1). При этом надо иметь в виду, что компоненты $\mathcal{K}_i^{\alpha\alpha^*}$ в соответствии с (7.3) преобразуются по закону

$$\mathcal{K}_i^{\alpha\alpha^*} = g^{-1} \mathcal{K}_i^{\alpha\alpha^*} = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu i}^{\alpha\alpha^*}(g) \mathcal{K}_{\nu}^{\alpha\alpha^*} = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{i\nu}^{\alpha\alpha^*}{}^{-1}(g) \mathcal{K}_{\nu}^{\alpha\alpha^*}. \quad (25.7)$$

Следовательно, соотношения (25.4)–(25.6) означают, что в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ могут входить лишь те компоненты $\mathcal{K}_i^{\alpha\alpha^*}$, которые преобразуются по представлениям \mathcal{D}_{α} , входящим в прямое произведение $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$, т. е. представлениям, для которых величина N_{α} , определяемая уравнением (19.43), отлична от нуля.

К последней формуле можно прийти и несколько иным путем. Если подставить (25.6) в (25.16), то, приравнявая множители при одинаковых компонентах $\mathcal{K}_i^{\alpha\alpha^*}$, получим

$$\mathbf{X}_i^{\alpha} = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu i}^{\alpha}(g) \mathcal{D}^{-1}(g) \mathbf{X}_{\nu}^{\alpha} \mathcal{D}(g)$$

или в развернутой форме

$$X_{i, ij}^{\alpha} = \sum_{\nu' \nu''} \mathcal{D}_{\nu' i}^{\alpha}(g) \mathcal{D}_{i \nu''}^{\alpha^*}(g) \mathcal{D}_{\nu'' \nu'}(g) X_{\nu', \nu''}^{\alpha}. \quad (25.8)$$

Последние соотношения совпадают с выражениями (19.4), определяющими закон преобразования матричных элементов V_{ij}^{α} при операциях g . Поэтому число наборов линейно независимых матриц \mathbf{X}_i^{α} , преобразующихся по данному неприводимому представлению \mathcal{D}_{α} точечной группы F , равно числу представлений \mathcal{D}_{α} , содержащихся в произведении $\mathcal{D}(g) \times \mathcal{D}^*(g)$, и определяется формулой (19.6).

Во всех предыдущих рассуждениях не предполагалось, что представление $\mathcal{D}(g)$ является неприводимым, имея в виду, что в некоторых случаях необходимо строить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ сразу для нескольких представлений. Рассмотрим общий случай, когда представление $\mathcal{D}(g)$ является приводимым и разлагается, например, на два представления \mathcal{D}_I и \mathcal{D}_{II} размерности n_I и n_{II} с базисом ψ_I и ψ_{II} :

$$\mathcal{D} = \left\| \begin{array}{cc} \mathcal{D}_I & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_{II} \end{array} \right\|. \quad (25.9)$$

Тогда в этом базисе матрица $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathcal{K}) = \left\| \begin{array}{cc} \mathcal{H}^{I I} & \mathcal{H}^{I II} \\ \mathcal{H}^{II I} & \mathcal{H}^{II II} \end{array} \right\|. \quad (25.10)$$

Поскольку матрица \mathcal{D} (25.9) является квазидиагональной, то условие инвариантности гамильтониана (25.1) приводит к

следующим соотношениям для каждого «блока» матрицы $\mathcal{H}(\mathcal{K})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_I^{-1}(g) \mathcal{H}^{I I}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_I(g) &= \mathcal{H}^{I I}(g^{-1} \mathcal{K}), \\ \mathcal{D}_{II}^{-1}(g) \mathcal{H}^{II II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_{II}(g) &= \mathcal{H}^{II II}(g^{-1} \mathcal{K}), \\ \mathcal{D}_I^{-1}(g) \mathcal{H}^{I II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_{II}(g) &= \mathcal{H}^{I II}(g^{-1} \mathcal{K}), \\ \mathcal{D}_{II}^{-1}(g) \mathcal{H}^{II I}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_I(g) &= \mathcal{H}^{II I}(g^{-1} \mathcal{K}); \end{aligned} \quad (25.11)$$

при этом для диагональных блоков эти соотношения, естественно, совпадают с (25.1). В этом случае каждые блоки матрицы \mathcal{H} можно разложить по базисным матрицам $X_I^{I I}$, $X_{II}^{II II}$, $X_I^{I II}$ и $X_{II}^{II I}$, соответственно. Базисные матрицы $X^{I I}$ и $X^{II II}$ являются квадратными матрицами $n_I \times n_I$ и $n_{II} \times n_{II}$, соответственно; матрица $X^{I II}$ имеет n_I строк и n_{II} столбцов, а матрица $X^{II I}$, наоборот, n_{II} строк и n_I столбцов. Если $n_I = n_{II}$, то все базисные матрицы являются квадратными.

Легко убедиться, что как диагональные, так и недиагональные матрицы по отдельности образуют базис представления группы G с характерами:

$$\chi_{I I}(g) = |\chi_I(g)|^2, \quad \chi_{II II}(g) = |\chi_{II}(g)|^2, \quad (25.12a)$$

$$\chi_{I II}(g) = \chi_I^*(g) \chi_{II}(g), \quad \chi_{II I}(g) = \chi_I(g) \chi_{II}^*(g) = \chi_{I II}^*(g). \quad (25.12b)$$

Применим эти общие соображения к задаче построения гамильтониана $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{K})$ в точке k_0 . В этом случае группа G есть группа волнового вектора G_{k_0} , представление $\mathcal{D} = \mathcal{D}_{\mu}^{k_0}$. В соответствии с (25.4) характер $\chi_{k_0}^x$ представления \mathcal{D}^x в точке k_0 равен

$$\chi_X^{k_0} = |\chi_{\mu}^{k_0}(g)|^2, \quad (25.13)$$

где $\chi_{\mu}^{k_0}(g)$ — характер представления $\mathcal{D}_{\mu}^{k_0}$.

Из (25.5) следует, что \mathcal{D}^x в этом случае не зависит от трансляций на периоды решетки Браве и определяется, таким образом, только поворотными элементами r группы направлений F_{k_0} , т. е. \mathcal{D}^x всегда является обычным, т. е. векторным представлением группы F_{k_0} и может быть разложено по обычным представлениям точечной группы F_{k_0} . Поэтому базисные матрицы X также всегда преобразуются по обычным представлениям группы F_{k_0} . И, следовательно, в согласии с формулой (19.43), которая следует из (19.6), число наборов X^x , преобразующихся по представлению \mathcal{D}_x точечной группы F_{k_0} , равно числу представлений \mathcal{D}_x , содержащихся в произведении $\mathcal{D}_{\mu}^{*k_0} \times \times \mathcal{D}_{\mu}^{k_0}$:

$$N_x = \frac{1}{h} \sum_{g \in G'_{k_0}} |\chi_{\mu}^{k_0}(g)|^2 \chi^x(g). \quad (25.14)$$

Здесь суммирование ведется по всем основным элементам группы волнового вектора, не содержащим примитивных трансляций. Легко видеть, что выражения (25.1), (25.4), (25.5), (25.11) и (25.14) не изменятся, если, используя (12.26), перейти от представлений группы волнового вектора $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$ к проективным представлениям точечной группы $\mathcal{D}_\mu^{k_0}(r) = \mathcal{D}_\mu^{k_0}(g) e^{i k_0 r}$. Поэтому последнюю формулу можно переписать в виде

$$N_\kappa = \frac{1}{h} \sum_{r \in F_{k_0}} |\chi_\mu^{k_0}(r)|^2 \chi^\kappa(r). \quad (25.14a)$$

Здесь суммирование ведется по всем элементам точечной группы направлений F_{k_0} , а $\chi_\mu^{k_0}(r)$ — характеры соответствующих проективных представлений.

Для случая объединения двух представлений \mathcal{D}_μ и \mathcal{D}_ν число N_κ для диагональных подматриц X^{II} и X^{IIII} в соответствии с (25.12a) определяется формулой, подобной (25.14), а для недиагональных подматриц X^{IPII} — согласно (19.31):

$$N_\kappa = \frac{1}{h} \sum_{g \in G'_{k_0}} \chi_\mu^{k_0}(g) \chi_\nu^{k_0}(g) \chi^\kappa(g). \quad (25.15)$$

Выше мы рассматривали ограничения на $\mathcal{H}(\mathcal{H})$, связанные только с условиями симметрии.

Дополнительные ограничения, накладываемые на матрицу $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ инвариантностью гамильтониана к инверсии времени

Как указывалось в § 19, формула (19.43) применима в том случае, когда точки k_0 и $-k_0$ входят в разные звезды (случай b_3). Во всех остальных случаях надо учесть дополнительные требования к $\mathcal{H}(\mathcal{H})$, связанные с инвариантностью к инверсии времени.

Так как операция инверсии времени K переводит k_0 в $-k_0$, то в тех случаях, когда точки k_0 и $-k_0$ не эквивалентны, т. е. в случаях a_2 , b_2 и c_2 , сперва будем считать, что оператор $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ построен одновременно для обеих точек k_0 и $-k_0$, т. е. его базисными функциями являются функции ψ , т. е. ψ_{k_0} и $\psi_{-k_0} = R\psi_{k_0}$, а в случаях b_2 и c_2 — также функции $K\psi$, т. е. $K\psi_{k_0}$ и $KR\psi_{k_0}$, где R — одна из операций, обращающих k_0 в $-k_0$.

Рассмотрим сначала случай a , когда $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ строится в базисе функций ψ_i , таких, что между ψ_i и $K\psi_i$ имеется линейная связь (18.7):

$$K\psi_i = \sum_j T_{ji} \psi_j.$$

При переходе от базиса ψ к базису $K\psi$ матрица $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ переходит в матрицу $T^{-1} \mathcal{H}(\mathcal{H}) T$.

Переменные \mathcal{H}_i , как показано в § 18, всегда можно разбить на четные и нечетные по отношению к инверсии времени, так что $K\mathcal{H}_i = f\mathcal{H}_i$, где $f = \pm 1$. Так, для компонент волнового вектора и магнитного поля, нечетных по отношению к инверсии времени, $f = -1$, а для электрического поля, координат, компонент тензора деформации $f = 1$.

Инвариантность $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ к инверсии времени означает, что при инверсии времени $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ переходит в $\mathcal{H}^*(\mathcal{H})$ и поэтому в случае a матрица $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ должна удовлетворять дополнительному условию:

$$\mathbf{T}^{-1}\mathcal{H}(f\mathcal{H})\mathbf{T} = \mathcal{H}^*(\mathcal{H}) = \tilde{\mathcal{H}}(\mathcal{H}). \quad (25.16)$$

Из (25.16) следует, что базисные матрицы \mathbf{X}_i^\times должны удовлетворять соотношениям

$$K\mathbf{X}_i^\times = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{X}_i^\times\mathbf{T} = f\mathbf{X}_i^{\times*} = f\tilde{\mathbf{X}}_i^\times. \quad (25.17)$$

При этом предполагается, что все компоненты \mathcal{H} выбраны вещественными, так же как и константы a_ν . При этом условии из эрмитовости \mathcal{H} следует, что и матрицы $\tilde{\mathbf{X}}$ должны быть эрмитовыми.

Таким образом, в случае a все базисные матрицы \mathbf{X}_i^\times можно разбить на четные и нечетные по отношению к инверсии времени в смысле (25.17), при этом матрицы одной четности преобразуются независимо по представлению \mathcal{D}_κ . Любую заданную матрицу \mathbf{X}_i^\times можно разбить на четные и нечетные матрицы, построив матрицы $\mathbf{X}_{i,1,2}^\times$ по формуле

$$\mathbf{X}_{i,1,2}^\times = \frac{1}{2}(\mathbf{X}_i^\times \pm K^2\mathbf{T}\tilde{\mathbf{X}}_i^\times\mathbf{T}^{-1}). \quad (25.18)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} K\mathbf{X}_{i,1,2}^\times &= \frac{1}{2}(\mathbf{T}^{-1}\mathbf{X}_i^\times\mathbf{T} \pm K^2\tilde{\mathbf{X}}_i^\times) = \pm \frac{K^2}{2}(\tilde{\mathbf{X}}_i^\times \pm K^2\mathbf{T}^{-1}\mathbf{X}_i^\times\mathbf{T}) = \\ &= \pm \frac{K^2}{2}(\overline{\mathbf{X}_i^\times \pm K^2\mathbf{T}\tilde{\mathbf{X}}_i^\times\mathbf{T}^{-1}}) = \pm K^2\tilde{\mathbf{X}}_{i,1,2}^\times. \end{aligned}$$

При этом мы учли, что матрица \mathbf{T} унитарна и, согласно (18.26), $\tilde{\mathbf{T}} = K^2\mathbf{T}$. Таким образом, при $K^2 = 1$ матрицы \mathbf{X}_{i1}^\times являются четными, а \mathbf{X}_{i2}^\times — нечетными по отношению к инверсии времени (при $K^2 = -1$, наоборот, \mathbf{X}_{i1}^\times — нечетные, а \mathbf{X}_{i2}^\times — четные). Условие (25.16) означает, что в $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ входят произведения матриц \mathbf{X}_i^\times и компонент \mathcal{H}_i^\times одинаковой четности по отношению к инверсии времени.

В развернутом виде формула (25.17) имеет вид

$$X_{i,ij}^\times = f \sum_{i',i''} T_{i'i}^* X_{i',i''}^\times T_{i''i} \quad (25.19)$$

Эта формула совпадает с (19.8). Как показано в § 19, из соотношения (19.8) и соотношения (19.4), подобного (25.8), следует формула (19.13) для $N_{\mathcal{K}}$. Надо, однако, иметь в виду, что поскольку мы строим $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ лишь для одной из точек звезды, то соотношения (25.8) должны выполняться лишь для элементов группы волнового вектора G_{k_0} , тогда как формулы (19.4) справедливы при всех операциях пространственной группы G . Мы, однако, могли бы строить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ не для одной точки звезды, а для всех ее точек, т. е. для полного представления пространственной группы. В этом представлении матрица $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ имела бы квазидиагональный вид и состояла бы из N матриц размерностью $n_{\mu} \times n_{\mu}$, где N — число точек звезды, а n_{μ} — размерность представления $\mathcal{D}_{\mu}^{k_0}$. Тогда условия (25.1) и следующее из них соотношение (25.8) при $g \in G_{k_0}$ определяли бы вид $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{K})$, а при $g \in G_{k_0}$ — оператор $\mathcal{H}_k(\mathcal{K})$, относящийся к другой точке звезды. Поэтому формула (25.8) полностью эквивалентна (19.4), и, следовательно, число линейно независимых четных и нечетных наборов матриц X^{α} , преобразующихся по представлению \mathcal{D}_{α} , в случае a_1 определяется формулой (19.45), а в случае a_2 — формулой (19.46).

Соотношения (25.16), (25.17), (25.18) непосредственно применимы к случаю a_1 , когда имеется линейная связь между функциями ψ_{k_0} и $K\psi_{k_0}$. В случае a_2 , как указано выше, они справедливы для матрицы $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, построенной одновременно для точек k_0 и $-k_0$, т. е. в базисе функций ψ_{ik_0} и $R\psi_{ik_0} = \psi_{i,-k_0}$. В этом базисе $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathcal{K}) = \begin{vmatrix} \mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{K}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{K}) \end{vmatrix}. \quad (25.20)$$

В этом случае между функциями $K\psi_{ik_0}$ и $R\psi_{ik_0}$ имеет место линейная связь: $K\psi_{ik_0} = TR\psi_{ik_0}$. При преобразовании R матрица преобразования в указанном базисе имеет вид

$$\mathcal{D}(R) = \begin{vmatrix} 0 & \mathcal{D}_{\mu}^{k_0}(R^2) \\ I & 0 \end{vmatrix}. \quad (25.21)$$

Подставив (25.20) и (25.21) в условие (25.1), установим связь между $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{K})$ и $\mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{K})$ в (25.20), которая является следствием симметрии кристалла:

$$\mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{K}) = \mathcal{H}_{k_0}(R^{-1}\mathcal{K}). \quad (25.22)$$

При преобразовании K набор функций ψ_{ik_0} , $R\psi_{ik_0}$ переходит в $K\psi_{ik_0}$, $KR\psi_{ik_0} = TR^2\psi_{ik_0}$, т. е. матрица преобразования имеет вид

$$T_1 = \begin{vmatrix} 0 & T \\ T\mathcal{D}_{\mu}^{k_0}(R^2) & 0 \end{vmatrix}. \quad (25.23)$$

Подставив (25.23) и (25.20) в (25.16), получим следующее соотношение, связывающее $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{H})$ и $\mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{H})$:

$$\mathbf{T}^{-1} \mathcal{H}_{-k_0}(f\mathcal{H}) \mathbf{T} = \mathcal{H}_{k_0}^*(\mathcal{H}) = \tilde{\mathcal{H}}_k(\mathcal{H}). \quad (25.24)$$

Из (25.24) и (25.22) следует условие

$$\mathbf{T}^{-1} \mathcal{H}_{k_0}(R^{-1}\mathcal{H}) \mathbf{T} = \mathcal{H}_{k_0}^*(f\mathcal{H}) = \tilde{\mathcal{H}}_k(f\mathcal{H}), \quad (25.25)$$

накладываемое на матрицу $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{H})$ в случае a_2 . Это условие означает, что матрицы X_i^* в этом случае должны удовлетворять соотношению

$$K X_i^* = \mathbf{T}^{-1} X_i^* \mathbf{T} = f \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu i}^*(R) \tilde{X}_{\nu}^*, \quad (25.26)$$

где $\mathcal{D}_{\nu}(R)$ — матрица преобразования компонент \mathcal{H}_{ν}^* при операции R .

Из (25.26) и (25.8) можно получить формулу (19.46) для N_{\times} , которая, как показано выше, определяет число наборов четных и нечетных матриц X^* , преобразующихся по представлению \mathcal{D}_{\times} . При этом в данном случае построение четных и нечетных матриц для \mathcal{D}^{k_0} должно производиться с помощью соотношения (25.26).

Как указывалось в §§ 18 и 19, в случаях b и c инверсия времени приводит к объединению представлений $\mathcal{D}_{\mu}^{k_0}$ и $\mathcal{D}_{\mu}^{*k_0}$. В объединенном базисе матрица $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ имеет вид (25.10). При инверсии времени базис ψ_i и $K\psi_i$, в котором построена $\mathcal{H}(\mathcal{H})$, преобразуется сам в себя при помощи матрицы \mathbf{T}_2 :

$$\mathbf{T}_2 = \left\| \begin{array}{cc} 0 & K^2 \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & 0 \end{array} \right\|, \quad (25.27)$$

где \mathbf{I} — единичная матрица размерности n_{μ} . В этом полном базисе $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ должно удовлетворять условию (25.16) с $\mathbf{T} = \mathbf{T}_2$, которое приводит к следующим соотношениям для «диагональных» и «недиагональных» матриц:

$$\mathcal{H}_{\text{II II}}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_{\text{I I}}^*(f\mathcal{H}), \quad (25.28a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{II I}}(\mathcal{H}) = K^2 \mathcal{H}_{\text{I II}}^*(f\mathcal{H}) = K^2 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{II I}}(f\mathcal{H}). \quad (25.28b)$$

В равенстве (25.28b) мы использовали условие эрмитовости гамильтониана $\mathcal{H}(\mathcal{H})$.

Условия (25.28), таким образом, не накладывают дополнительных ограничений на $\mathcal{H}_{\text{I I}}(\mathcal{H})$, а только устанавливают связь между $\mathcal{H}_{\text{II II}}(\mathcal{H})$ и $\mathcal{H}_{\text{I I}}(\mathcal{H})$. Поэтому для определения чисел N_{\times} для «диагональных» матриц $\mathcal{H}_{\text{I I}}(\mathcal{H})$ и $\mathcal{H}_{\text{II II}}(\mathcal{H})$ справедлива формула (25.14). Соотношение (25.28b) накладывает на недиагональные матрицы $X_i^{* \text{II II}}$ условие

$$X_i^{* \text{II II}} = f K^2 \tilde{X}_i^{* \text{II II}}, \quad (25.29)$$

Следовательно, недиагональные подматрицы в этом случае, аналогично (25.18), можно разбить на четные и нечетные, введя

$$\mathbf{X}_{l,2}^{I\ II} = \frac{1}{2} (\mathbf{X}_{l,2}^{I\ II} \pm K^2 \tilde{\mathbf{X}}_{l,2}^{I\ II}). \quad (25.30)$$

В развернутом виде формула (25.29) совпадает с (19.10). Это означает, что число линейно независимых четных и нечетных недиагональных подматриц в случаях b_1 , b_2 и c также определяется формулой (19.13), которая в случаях b_1 и c_1 сводится к формуле (19.45), а в случаях b_2 и c_2 — к (19.44). Как и в случае a , соотношения (25.27) — (25.30) непосредственно применимы к случаю b_1 и c_1 . В случае b_2 и c_2 они справедливы для матрицы $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, построенной в базисе $\psi_{i\mathbf{k}_0}$, $KR\psi_{i\mathbf{k}_0}$, $R\psi_{i\mathbf{k}_0}$ и $KR^2\psi_{i\mathbf{k}_0}$. При этом первая пара функций относится к точке \mathbf{k}_0 и образует базис $\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}$, а вторая — к точке $-\mathbf{k}_0$ и образует базис $\mathcal{H}_{-\mathbf{k}_0}$, т. е. в этом базисе $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ имеет вид (25.20) и, как легко показать, удовлетворяет условию (25.22).

При инверсии времени K рассматриваемый базис преобразуется сам в себя при помощи матрицы \mathbf{T}'_2 :

$$\mathbf{T}'_2 = \begin{vmatrix} 0 & \mathbf{T} \\ K^2 \tilde{\mathbf{T}} & 0 \end{vmatrix}, \quad \text{где } \mathbf{T} = \begin{vmatrix} 0 & K^2 \mathcal{D}_\mu^{k_0}(R^2) \\ \mathbf{I} & 0 \end{vmatrix}. \quad (25.31)$$

Подставив (25.31) и (25.20) в условие инвариантности (25.16), получим следующие соотношения для диагональных и недиагональных подматриц $\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}(\mathcal{K})$ в случаях b_2 и c_2 :

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{I\ II}(\mathcal{K}) = \mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{*I\ II}(\mathcal{K}) = \tilde{\mathcal{H}}^{I\ II}(\mathcal{K}), \quad (25.32a)$$

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{I\ II}(\mathcal{K}) = K^2 \mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{*I\ II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_\mu^{*k_0}(R^2) = K^2 \tilde{\mathcal{H}}^{I\ II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}_\mu^{*k_0}(R^2). \quad (25.32b)$$

Так как в данном случае $\mathcal{D}_{II}(g) = \mathcal{D}_I^*(R^{-1}gR)$, то, согласно (25.11), недиагональные подматрицы $\mathcal{H}^{I\ II}$ должны также удовлетворять соотношению

$$\mathcal{D}^{-1}(g) \mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{I\ II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}^*(R^{-1}gR) = \mathcal{D}_{\mathbf{k}_0}^{I\ II}(g^{-1}\mathcal{K}). \quad (25.33)$$

Условие (25.32a) устанавливает связь $\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{I\ II}(\mathcal{K})$ и $\mathcal{H}_{\mathbf{k}_0}^{II\ II}(\mathcal{K})$ в случаях b_2 и c_2 . Условие (25.32b) накладывает дополнительные требования на недиагональные подматрицы $\mathbf{X}^{I\ II}$, которые имеют вид

$$\mathbf{X}_i^{I\ II} = K^2 \int \sum_{l'} \tilde{\mathbf{X}}_{l'}^{I\ II} \mathcal{D}_{l'}(R^{-1}) \mathcal{D}_\mu^{*k_0}(R^2), \quad (25.34)$$

где $\mathcal{D}_{l'}(R^{-1})$ — матрица преобразования компонент \mathcal{K}_l (25.7):

$$R\mathcal{K}_l = \sum_{l'} \mathcal{D}_{l'}(R^{-1}) \mathcal{K}_{l'}.$$

Из этих условий (учитывая (25.11)) можно получить формулу (19.44), которая, как показано выше, определяет число N_x для недиагональных подматриц X_i^x в случаях b_2 и c_2 .

Таким образом, число линейно независимых наборов матриц X_i^x , преобразующихся по представлению \mathcal{D}_x , в случае b_3 определяется общей формулой (25.14). Эта же формула определяет число диагональных подматриц X^{II} и X^{III} в случаях b и c . При этом инверсия времени лишь приводит к связи $\mathcal{H}_{k_0}(\mathcal{K})$ и $\mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{K})$:

$$\mathcal{H}_{-k_0}(\mathcal{K}) = \mathcal{H}_{k_0}(f\mathcal{K}). \quad (25.35)$$

В случае a_1 число N_x определяется формулой (19.45),

$$N_x = \frac{1}{2h} \sum_{g \in G'_{k_0}} \chi_x(g) [(\chi_{v_0}^{k_0}(g))^2 + K^2 f \chi_{v_0}^{k_0}(g^2)], \quad (25.36)$$

а в случае a_2 — формулой (19.46):

$$N_x = \frac{1}{2h} \sum_{g \in G'_{k_0}} \{\chi_x(g) |(\chi_v^{k_0}(g)|^2 + K^2 f \chi_x(gR) \chi_v^{k_0}[(gR)^2]\}. \quad (25.37)$$

Для недиагональных компонент $\mathcal{H}^{III} = \tilde{\mathcal{H}}^{III} N_x$ в случаях b_1 и c_1 определяется формулой (25.36), а в случаях b_2 и c_2 — формулой (19.44):

$$N_x = \frac{1}{2h} \sum_{g \in G'_{k_0}} \{\chi_x(g) \chi_{v_0}^{k_0}(g) \chi_{v_0}^{k_0}(R^{-1}gR) + K^2 f \chi_x(gR) \chi_{v_0}^{k_0}[(gR)^2]\}, \quad (25.38)$$

где R — один из элементов, превращающих k_0 в $-k_0$. Так как функции \mathcal{K} должны преобразовываться по тем же представлениям, что и X^x , то приведенные выше формулы (25.14), (25.30) — (25.38) решают вопрос о том, какие функции $f(\mathcal{K})$ могут входить в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ при данной симметрии, т. е. заданной группе волнового вектора.

Базисные матрицы X_i^x , по которым раскладывается $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, в принципе можно определить из соотношений (25.8), (25.19), (25.26), если, конечно, известны представления $\mathcal{D}(g)$ или проективные представления $\mathcal{D}(r)$. В случаях, когда объединяются сопряженные представления, эти матрицы определяются уравнениями (25.29) и (25.34). При этом достаточно, используя эти соотношения лишь для образующих элементов данной точечной группы, определить только образующие матрицы, например, матрицы, преобразующиеся как x, y, z , непосредственным перемножением которых можно получить все остальные n_s^4 матрицы X_i^x . Если же для данного представления \mathcal{D} матрицы, преобразующиеся как x, y, z , равны нулю, то в качестве образующих матриц удобно взять матрицы, преобразующиеся как анти-

симметризованные произведения $\{x_i x_k\}$, т. е. как компоненты аксиального вектора J_i , а если и они равны нулю, то матрицы, преобразующиеся как симметризованные произведения $[x_i x_k]$.

Как будет показано в следующем параграфе, в большинстве случаев для построения базисных матриц нет необходимости знать в явном виде матрицы $\mathcal{D}(g)$ или $\mathcal{D}(r)$, а достаточно знать лишь характеры соответствующих представлений. Конечно, вид $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ зависит от выбора представлений, однако при использовании указанных в § 26 методов вид этого представления в явном виде не задается.

§ 26. МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ БАЗИСНЫХ МАТРИЦ. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ИНВАРИАНТОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

В настоящем параграфе будут подробно рассмотрены различные способы построения базисных матриц в методе инвариантов и этот метод будет применен для расчета спектра кристаллов с пространственными группами O_h^7 и T_d^2 . Другие примеры использования метода инвариантов будут приведены в § 31, где рассматривается спектр кристаллов с решеткой вюрцита и его изменение при деформации.

Двукратное вырождение

Очевидно, что если представление $\mathcal{D}(g)$ одномерно, то в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ могут входить лишь компоненты \mathcal{K} , преобразующиеся по единичному представлению, и для определения вида спектра достаточно лишь найти эти компоненты, т. е. по формулам (25.14), (25.36) или (25.37) определить, для каких компонент $N_1 \neq 0$. Этот вывод естественно совпадает с полученным ранее в § 21 при построении спектра kp -методом.

В случае двумерного представления для построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ также достаточно знать лишь характеры представления. Для того чтобы показать это, рассмотрим условие, накладываемое на определитель $|\mathcal{H}(\mathcal{K}) - IE|$ уравнением (25.1):

$$|\mathcal{H}(\mathcal{K}) - IE| = |\mathcal{H}(g\mathcal{K}) - IE|. \quad (26.1)$$

Из (26.1) можно определить четыре компоненты \mathcal{K}_i , которые могут входить в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ (или четыре суммы различных по природе, но тождественно преобразующихся компонент, например k_x^2 и ε_{xx} , каждая из которых входит со своими коэффициентами a). Обозначим через \mathcal{K}_0 компоненту, преобразующуюся по единичному представлению, и через \mathcal{K}_i — остальные три. Прямое произведение $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ может включать, помимо единичного представления, еще либо трехмерное, либо двух- и одномерное, либо три одномерных. Так как представление $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$

имеет вещественный характер, то в первых двух случаях все представления вещественны, а в последнем два из трех одномерных могут быть комплексно сопряженными. Поэтому будем считать, что в операторе

$$\mathcal{H}(\mathcal{H}) = a_0 X_0 \mathcal{H}_0 + \sum_{ix} a_x X_i \mathcal{H}_i \mathcal{H}_i^* \quad (26.2)$$

функции \mathcal{H}_0 и \mathcal{H}_1 всегда вещественны, а \mathcal{H}_2 и \mathcal{H}_3 либо вещественны, либо комплексно сопряжены.

Матрицы X_i являются линейной комбинацией матриц σ_x , σ_y , σ_z и не включают единичную матрицу, так как если бы матрицы X_i имели ненулевой шпур, то определитель (26.1) содержал бы инвариантное слагаемое $E\mathcal{H}_i$. Унитарным преобразованием эрмитову матрицу с нулевым следом X_1 всегда можно сделать равной σ_z (с точностью до константы), тогда матрицы X_2 и X_3 не будут включать σ_z , так как в противном случае определитель (26.1) содержал бы инвариантное произведение $\mathcal{H}_1\mathcal{H}_2$ или $\mathcal{H}_1\mathcal{H}_3$, а согласно (9.27) при вещественном \mathcal{H}_1 инвариант может включать лишь \mathcal{H}_1^2 . Далее унитарным преобразованием $S = (1 + \alpha^2)^{-1/2}(I + \alpha\sigma_z)$, не меняющим X_1 , можно привести оставшиеся матрицы X_2 и X_3 к виду σ_x и σ_y , если \mathcal{H}_2 и \mathcal{H}_3 вещественны, или к $\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y)$ и $\sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y)$, если $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_3^*$.

Действительно, из (26.1) видно, что если $X_1 = \sigma_z$ и $X_2 = \sigma_x$, то X_3 должно быть пропорционально σ_y . Следовательно, для двумерных представлений \mathcal{D} входящие в (26.2) матрицы X_i , которые преобразуются по неприводимым представлениям, входящим в $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$, можно всегда выбрать в виде

$$X_0 = I, X_1 = \sigma_z, X_2 = \sigma_x, X_3 = \sigma_y \quad \text{при } \mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3 \text{ вещественных,} \quad (26.3)$$

$$X_2 = \sigma_+ = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, X_3 = \sigma_- = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \text{при } \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_3^*$$

независимо от конкретного вида представления \mathcal{D} .

Что касается входящих в (26.2) констант a_x , то из общей формулы (25.6) видно, что если $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ содержит помимо единичного одно трехмерное представление, то $\mathcal{H}(\mathcal{H})$ содержит кроме a_0 еще только одну вещественную константу; если же $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ включает двумерное и одномерное представление, то число констант увеличивается до трех, причем все они также вещественны. В том случае, когда все представления \mathcal{D}^* одномерны, то четыре константы a_x должны быть вещественны, если эти представления вещественны (а компоненты \mathcal{H}_i и матрицы X_i выбраны указанным выше образом); если же два из этих представлений \mathcal{D}_2 и \mathcal{D}_3 комплексно сопряжены, то из условия эрмитовости следует, что $a_2 = a_3^*$, при этом a_2 и a_3 комплексны,

т. е. число независимых вещественных констант остается равным четырем.

В качестве примера найдем спектр в решетке типа алмаза для двумерных представлений Γ_{12}^{\pm} и X_1, X_3 .

Для построения спектра прежде всего, используя базисные функции, приведенные в табл. 11.1 (стр. 99), построим функции от компонент k_i , преобразующиеся по неприводимым представлениям группы O_h и группы $D_{4h} = D_{2d} \times C_4$, являющейся группой направлений в точке X . Эти функции приведены в табл. 26.1 и 26.2. Там же указаны функции, преобразующиеся по соответствующим представлениям групп T_d и D_{2d} . Так как все представления Γ_i^{\pm} и X_i относятся к случаю a_1 , то из формулы (25.36) согласно таблице характеров 11.1 следует, что для представления Γ_{12}^{\pm} в $\mathcal{H}(k)$ должны входить четные функции от k_i , преобразующиеся по представлениям Γ_1^+ и Γ_{12}^+ , и нечетные, преобразующиеся по Γ_2^+ . Так как базисные функции представления Γ_{12}^{\pm}

Таблица 26.1

Распределение базисных функций по представлениям группы $D_{4h} = D_{2d} \times C_4$

Представления		Нечетные (по отношению к инверсии времени)	Четные
Группа D_{2d}	Группа D_{4h}		
A_1	A_1^+		$k_x^2, k_y^2 + k_z^2, \epsilon_{xx}; \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$
	A_1^-		$\sigma_y k_y - \sigma_z k_z$
A_2	A_2^+	σ_x	
	A_2^-		$\sigma_y k_z + \sigma_z k_y$
B_1	B_1^+		$k_y^2 - k_z^2, \epsilon_{yy} - \epsilon_{zz}$
	B_1^-		$\sigma_y k_y + \sigma_z k_z; \sigma_x k_x$
B_2	B_2^+		$k_y k_z; \epsilon_{yz}$
	B_2^-	k_x	$\sigma_y k_z - \sigma_z k_y$
E	E^+	σ_y, σ_z	$k_x k_y, k_x k_z; \epsilon_{xz}, \epsilon_{xy}$
	E^-	k_y, k_z	$\sigma_x k_y, \sigma_x k_z; \sigma_y k_x, \sigma_z k_x$

Распределение базисных функций по представлениям групп O_h и T_d

Представления		Нечетные (по отношению к инверсии времени)	Четные
Группа T_d	Группа O_h		
A_1 (Γ_1)	A_1^+		k^2 ; Sp e
	A_1^-		$k_x\sigma_x + k_y\sigma_y + k_z\sigma_z$
A_2 (Γ_2)	A_2^+	$[[J_z J_y] J_x]$	
	A_2^-		
E (Γ_{12})	E^+		$J_1 = J_x^2 + e_3 J_y^2 + e_3^2 J_z^2, J_2 = J_1^+$ $k_1 = k_x^2 + e_3 k_y^2 + e_3^2 k_z^2, k_2 = k_1^*$ $e^{(1)} = e_{xx} + e_3 e_{yy} + e_3^2 e_{zz}, e^{(2)} = e^{(1)*}$
	E^-		$K_1 = k_x\sigma_x + e_3 k_y\sigma_y + e_3^2 k_z\sigma_z, K_2 = K_1^+$
F_1 (Γ_{25})	F_1^+	$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ $J_x, J_y, J_z; J_x^3, J_y^3, J_z^3$	
	F_1^-		$k_x\sigma_y + k_y\sigma_x, k_y\sigma_z + k_z\sigma_y, k_z\sigma_x + k_x\sigma_z$
F_2 (Γ_{15})	F_2^+	$V_x = [J_x(J_y^2 - J_z^2)]$ $V_y = [J_y(J_z^2 - J_x^2)]$ $V_z = [J_z(J_x^2 - J_y^2)]$	$[J_x J_y], [J_y J_z], [J_z J_x]$ $k_x k_y, k_y k_z, k_z k_x; e_{xy}, e_{yz}, e_{zx}$
	F_2^-	k_x, k_y, k_z	$k_x\sigma_y - k_y\sigma_x, k_y\sigma_z - k_z\sigma_y, k_z\sigma_x - k_x\sigma_z$

$$e_3 = e^{2\pi i/3}$$

комплексно сопряжены, то в соответствии с (26.3)

$$\mathcal{H}(k) = Ak^2 + B[\sigma_+(k_x^2 + e_3 k_y^2 + e_3^2 k_z^2) + \sigma_-(k_x^2 + e_3^2 k_y^2 + e_3 k_z^2)]. \quad (26.4)$$

Решая уравнение $|\mathcal{H}(k) - IE| = 0$, получим для $E(k)$

$$E(k) = Ak^2 \pm B \{k^4 - 3(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)\}^{1/2}, \quad (26.5)$$

что совпадает с (24.4). Эта же формула справедлива и для представления Γ_{12} группы T_d^2 , так как в группе T_d по представлениям Γ_1 и Γ_{12} преобразуются те же компоненты k_i .

Для представлений X_1 и X_3 согласно (25.36) и табл. 11.1 в $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ должны входить четные функции от k_i , преобразующиеся по представлениям $[X_{1,3}^+] = A_1^+ + B_1^- + B_2^+$ группы D_{4h} , и нечетные, преобразующиеся по $[X_{1,3}^-] = A_2^-$. Выбирая эти функции вещественными в соответствии с (26.3), получим

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = A_1 k_x^2 + A_2 (k_y^2 + k_z^2) + 2A_3 \sigma_z k_y k_z. \quad (26.6)$$

Так как в этом случае по A_1^+ преобразуются две линейно независимые функции k_x^2 и $k_y^2 + k_z^2$, то каждая из них входит в $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ со своей константой. Следовательно, спектр электронов для представлений $X_{1,3}$ таков:

$$E(\mathbf{k}) = A_1 k_x^2 + A_2 (k_y^2 + k_z^2) \pm 2A_3 k_y k_z = \\ = A_1 k_x^2 + (A_2 \pm A_3) k_{y'}^2 + (A_2 \mp A_3) k_{z'}^2. \quad (26.7)$$

$$\text{Здесь } k_{y'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_y + k_z), \quad k_{z'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_z - k_y).$$

Выражение (26.7), естественно, совпадает с (24.29), однако, если в § 24 для его вывода потребовалось знание матриц этих представлений, то при использовании метода инвариантов для построения $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ достаточно знать лишь характеры.

Базисные функции преобразуются по векторным или спинорным представлениям или p -эквивалентным им проективным представлениям

Если представление $\mathcal{D}(r)$ в формуле (25.14а) является векторным или спинорным, то соответствующие базисные функции, как указывалось в §§ 11, 16, преобразуются как определенные комбинации функций Y_m^j с разными m и определенным целым или полуцелым весом j . Эти функции Y_m^j , осуществляющие неприводимое представление группы вращения, как показано в § 10, являются собственными функциями оператора J_z . В соответствии с уравнением (10.9) при всех преобразованиях группы вращения матрицы J_α^j преобразуются как компоненты вектора:

$$\mathcal{D}_j(r^{-1}) J_\alpha^j \mathcal{D}_j(r) = \sum_{\alpha'} \mathcal{D}_1^{-1}{}_{\alpha\alpha'}(r) J_{\alpha'}^j = r J_\alpha^j, \quad (26.8)$$

где \mathcal{D}_1 — матрица представления \mathcal{D}_1 , а при операциях инверсии не меняют знак, так как $\mathcal{D}_j^\pm(i) = \pm I$. Следовательно, и при любых преобразованиях конечной точечной группы, которая является подгруппой ортогональной группы, матрицы J_α^j преобразуются

как компоненты псевдовектора. Поэтому в указанном случае в качестве матриц X_i^x можно взять матрицы J_x^i, J_y^i, J_z^i и их произведения, построенные в соответствующем базисе.

Поскольку представление \mathcal{D}_j для точечной группы может оказаться приводимым, то матрицы J_a^i и их произведения распадаются на подматрицы меньшей размерности, которые при операциях точечной группы преобразуются по формуле (26.8) независимо друг от друга. Размерность этих подматриц определяется размерностью представлений, на которые распадается представление \mathcal{D}_j . В этом случае в качестве базисных матриц X для данного представления \mathcal{D}_x надо взять эти подматрицы в соответствующем базисе. Соответственно из всех возможных функций, которые можно составить из компонент J_x, J_y, J_z и их произведений, надо оставить n_s^2 функций X_i^x , преобразующихся по представлениям \mathcal{D}_x , содержащимся в произведении $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$. Далее надо составить инвариантный оператор, куда в соответствии с (25.6) войдут произведения X_i^x и X_i^x , преобразующихся по комплексно сопряженным представлениям, и заменить в нем операторы J_i на матрицы J_i в соответствующем базисе, определяемые формулами (10.17). Так как для всех проективно-эквивалентных представлений матрицы X_i^x в соответствии с (25.5) можно выбрать совпадающими, то достаточно построить эти матрицы для одного из этих представлений, причем удобнее всего выбрать представление, базисом которого являются функции Y_m^i с наименьшим j .

Как указывалось в § 13, два унитарно неэквивалентных представления \mathcal{D} и \mathcal{D}' , относящиеся к одной фактор-системе, являются p -эквивалентными, если одно из них получается из другого умножением на какое-либо из одномерных представлений. Отсюда следует, что для всех групп, являющихся прямым произведением некоторой группы на C_i, C_s или C_2 , векторные и спинорные представления, четные и нечетные относительно операции i, σ_h или c_2 соответственно, всегда p -эквивалентны. Точно так же трехмерные представления F_1 и F_2 групп O и T_d p -эквивалентны, так как $F_2 = F_1 A_2$. Это означает, что у всех точечных групп, которые имеют несколько трехмерных представлений, все эти представления p -эквивалентны. Поэтому для всех трехмерных представлений матрицы X_i^x можно выбрать одинаковыми. То же относится и к четырехмерным спинорным представлениям точечных групп. Векторных или спинорных представлений большей размерности точечные группы не имеют, а для двумерных представлений удобнее использовать изложенный выше более простой метод.

Так как базисом одного из трехмерных представлений каждой из этих групп являются функции Y_m^1 ($m = 1, 0, -1$), а базисом одного из четырехмерных представлений — функции

$Y_m^{3/2}$ ($m = \pm 3/2, \pm 1/2$), то практически достаточно построить лишь матрицы $J_i^{3/2}$ и J_i^1 и их произведения, которые приведены в табл. 26.3 в конце параграфа.

Для учета добавочных требований, накладываемых на \mathcal{H} (\mathcal{H}) условием инвариантности к инверсии времени, надо определить, какие из матриц X_i^α являются четными и какие нечетными по отношению к инверсии времени. Используя формулы (25.36) или (25.37), можно сразу найти те представления, по которым преобразуются четные и нечетные матрицы. В случае a_1 это разделение можно произвести сразу. Действительно, матрицы оператора J_i , как нечетного по отношению к инверсии времени, согласно (18.46) удовлетворяют условию $T^{-1}J_iT = -J_i$, т. е. в соответствии с (25.17) для них $f = -1$. Следовательно, в случае a_1 все матрицы, не меняющие знак при замене J_i на $-J_i$ и перемене порядка следования компонент в произведениях $J_i J_k J_l \dots$ на обратный $\dots J_l J_k J_i$, являются четными, а матрицы, меняющие знак при такой замене, — нечетными.

Это простое правило, конечно, не справедливо в других случаях, например, в случае a_2 , когда четность или нечетность матрицы $X_i^\alpha(J)$ в соответствии с (25.26) определяются соотношениями

$$T^{-1}X(J)T = f\tilde{X}(R^{-1}J) \quad \text{с } f = +1 \text{ или } f = -1$$

соответственно. В этом случае для построения четных и нечетных матриц проще сразу использовать формулу (25.37).

В качестве примера построим спектр для представлений Γ_{15}^\pm и Γ_{25}^\pm в решетке O_h и представлений Γ_{15} и Γ_{25} в решетке T_d .

Для трехмерных представлений Γ_{15} , Γ_{25} в качестве матриц X_i можно взять 9 линейно независимых матриц:

$$J_x, J_y, J_z, J_x^2, J_y^2, J_z^2, [J_x J_y], [J_x J_z], [J_y J_z]$$

в представлении Y_m^1 .

В соответствии с формулой (25.36) в \mathcal{H} (\mathcal{H}) должны входить произведения четных функций от \mathcal{H}_i и J_i , преобразующиеся по представлениям $\Gamma_1^+ + \Gamma_{12}^+ + \Gamma_{25}^+$, и нечетных, преобразующихся по Γ_{15}^+ . Следовательно, гамильтониан \mathcal{H} (\mathcal{H}) имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(k) = & Ak^2I - B[(k_x^2 + \epsilon_3 k_y^2 + \epsilon_3^2 k_z^2)(J_x^2 + \epsilon_3^2 J_y^2 + \epsilon_3 J_z^2) + \\ & + (k_x^2 + \epsilon_3^2 k_y^2 + \epsilon_3 k_z^2)(J_x^2 + \epsilon_3 J_y^2 + \epsilon_3^2 J_z^2)] - 2\sqrt{3}D(k_x k_y [J_x J_y] + \\ & + k_x k_z [J_x J_z] + k_y k_z [J_y J_z]) = Lk^2I - (L-M)(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) - \\ & - 2N(k_x k_y [J_x J_y] + k_x k_z [J_x J_z] + k_y k_z [J_y J_z]). \quad (26.9) \end{aligned}$$

При этом мы учли, что $J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = j(j+1)I = 2I$.

Если теперь выписать (26.9) в матричном виде, используя матрицы, приведенные в табл. 26.3, то получим матрицу $\mathcal{H}(k)$, совпадающую с (24.5). Для решетки T_d матрица $\mathcal{H}(k)$, как

видно из табл. 26.2, также определяется выражением (26.9), так как она должна включать четные функции от k_i , преобразующиеся по представлениям $\Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{25}$, и нечетные, преобразующиеся по Γ_{15} . При наличии магнитного поля матрица (26.9) будет также включать член

$$\mathcal{H}(\mathbf{H}) = \mu_0 g_0 \frac{3k - 1}{2} (\mathbf{JH}), \quad (26.10)$$

так как компоненты H_i преобразуются по представлению Γ_{15}^{\pm} и являются нечетными функциями по отношению к инверсии времени.

Проективные представления не эквивалентны векторным или спинорным

В этом общем случае для проективных представлений с размерностью выше второй базисные матрицы приходится искать непосредственно из соотношений (25.5) для образующих элементов. Как и в предыдущем случае, достаточно построить лишь базисные матрицы для одного из p -эквивалентных проективных представлений, соответствующих каждой фактор-системе, имеющей проективные представления размерностью выше второй, которые не p -эквивалентны спинорным представлениям. Как видно из таблиц 14.2 и 14.3, такие представления имеют лишь группы D_{4h}, D_{6h} и O_h . Группа D_{4h} имеет по одному четырехмерному представлению для классов фактор-систем K_5 и K_6 . По формуле (25.14a) можно сразу определить, что для обоих этих представлений $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ содержит все одномерные векторные представления по одному разу и все двумерные представления группы D_{4h} по два раза, следовательно, среди матриц \mathbf{X}_i^{\times} имеется одна матрица, преобразующаяся по представлению A_2^- , т. е. как z , и по две матрицы, преобразующиеся по E^- , т. е. как x и y .

Группа D_{6h} имеет по одному четырехмерному представлению для классов фактор-систем K_3, K_4, K_5, K_6 .

Для всех этих представлений произведение $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ содержит по одному разу все векторные представления, т. е. среди матриц \mathbf{X}_i^{\times} имеется по одной матрице, преобразующейся как z (по A_2^-), и как x и y (по E_1^-).

Группа O_h имеет три четырехмерных и одно шестимерное проективные представления, не являющиеся p -эквивалентными друг другу или спинорным представлениям. Эти представления относятся к классам фактор-систем K_2 и K_3 . Для четырехмерных представлений $Q_2^{(3)}$ и $Q_3^{(3)}$ $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ содержит $A_1^+ + A_2^+ + E^- + F_1^+ + F_1^- + F_2^+ + F_2^-$, а для представления $Q_1^{(3)}$ $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ включает $A_1^{\pm}, A_2^{\pm}, F_1^{\pm}, F_2^{\pm}$, т. е. в обоих случаях имеется по одной матрице, преобразующейся как x, y и z по F_1^- . Для шестимерного представления $R^{(2)}$ $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$ содержит по одному

разу A_1^\pm и A_2^\pm и по два раза E^\pm , F_1^\pm , F_2^\pm , т. е. в последнем случае имеются по две линейно независимые матрицы, преобразующиеся как x , y , z по F_1^- . Эти матрицы приведены в табл. 26.4 в конце параграфа. Остальные линейно независимые матрицы X_i^\pm легко получить перемножением этих матриц.

Спинорные представления пространственных групп

Для спинорных представлений пространственных и точечных групп оператор $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ можно строить двумя способами. Во-первых, можно сразу использовать спинорные представления $\mathcal{D}(g)$. Тогда можно применить один из методов построения матриц X_i^\pm , указанных выше. При определении N_x надо лишь иметь в виду, что для спинорных представлений $K^2 = -1$, тогда как для обычных $K^2 = 1$. Этот метод эквивалентен такому способу построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ в теории возмущений, когда оператор спинорбитального взаимодействия $(\mathcal{H}_{\text{co}})_k$ включается в \mathcal{H}_0 . Его недостатком является невозможность сразу определить, какие из констант a_x , входящих в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, являются релятивистски малыми.

Последний вопрос сразу решается при построении $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ вторым способом, когда в качестве базиса выбираются функции $\psi_{m\alpha} = \psi_m(\mathbf{x})\alpha$, преобразующиеся по представлению $\mathcal{D} = \mathcal{D}_l \times \times \mathcal{D}_{1/2}$, являющемуся прямым произведением представления \mathcal{D}_l , по которому преобразуются координатные функции $\psi_m(\mathbf{x})$, и представления $\mathcal{D}_{1/2}$, по которому преобразуются спиновые функции α , β . В этом представлении матрицы X в (25.6) можно представить в виде прямого произведения матриц X_i^\pm , матричные элементы которых $X_{l, mm'}^\pm$ определяются только координатными функциями ψ_m , и матриц операторов σ_x , σ_y , σ_z , действующих только на спиновые переменные. Это означает, что оператор $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ в данном случае можно представить в виде произведения матриц X_i^\pm , компонент \mathcal{K}_i^\pm и матриц σ_i или единичной матрицы. Так как согласно (10.9) и (10.26) матрицы σ_i преобразуются как компоненты псевдовектора, т. е.

$$\mathcal{D}_{1/2}^{-1}(g) \sigma_i \mathcal{D}_{1/2}(g) = \sum_j \mathcal{D}_{1/2}^{+ij}(g^{-1}) \sigma_j = g \sigma_i,$$

то условие (25.1) в представлении $\mathcal{D}(g) = \mathcal{D}_l(g) \mathcal{D}_{1/2}(g)$ можно записать в виде

$$\mathcal{D}_l^{-1}(g) \mathcal{H}(g\sigma, g\mathcal{K}) \mathcal{D}_l(g) = \mathcal{H}(\sigma, \mathcal{K}). \quad (26.11)$$

Формула (26.11) формально отличается от (25.1) лишь тем, что наряду с компонентами \mathcal{K} , т. е. k , ϵ , x , H и т. д., включает и компоненты псевдовектора σ с $f_x = -1$ и их произведения на остальные компоненты \mathcal{K} . Все эти произведения можно разложить по неприводимым представлениям и обозначить по-прежнему символом X_i^\pm . В остальном метод построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$

не изменится. Подчеркнем, что при этом способе построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ и вид базисных матриц, и значения N_x определяются только представлением \mathcal{D}_i , по которому преобразуются координатные функции. Далее в окончательных формулах произведения $X_i^x \sigma_i$ надо заменить прямым произведением соответствующих матриц X_i^x и σ_i .

Фактически этот второй способ соответствует выбору в качестве базиса собственных функций оператора \mathcal{H}_0 , не включающего \mathcal{H}_{co} ; при этом оператор \mathcal{H}_{co} вместе с другими членами в \mathcal{H} рассматривается как возмущение. Этот способ позволяет сразу определить, какие из коэффициентов, входящих в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$, малые.

Так как без учета спин-орбитального взаимодействия оператор \mathcal{H} , а следовательно, и $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ не включают компонент σ_i , то все коэффициенты при слагаемых, содержащих спиновые операторы, должны быть релятивистскими. Надо, однако, иметь в виду, что, как это отмечалось в § 21, релятивистские слагаемые в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ не всегда малы. Если спин-орбитальное расщепление сравнимо с шириной запрещенной зоны E_g или с расстоянием δE до других ближайших зон или превышает их, то в этих случаях для того, чтобы правильно определить порядок коэффициентов, надо строить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ сразу для всех близко лежащих термов.

При втором способе построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ этот оператор строится сразу для всех неприводимых представлений, входящих в $\mathcal{D} \times \mathcal{D}_{1/2}$. Если необходимо определить $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ лишь для одного из этих представлений, то соответствующим образом нужно диагонализировать полученный оператор, что может потребовать довольно громоздких выкладок, и тогда предпочтительнее окажется первый способ.

В качестве примера рассмотрим построение спектра в точках Γ и X для решетки O_h^7 и в точке Γ для решетки T_d с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Рассмотрим сперва точку Γ . Используя первый метод, можно сразу построить $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ для четырехкратно вырожденных спиновых представлений Γ_8^\pm и Γ_8 . В этом случае в качестве базиса можно выбрать 16 линейно независимых матриц $J_x, J_y, J_z, J_x^2, J_y^2, J_z^2, [J_x J_y], [J_x J_z], [J_y J_z], J_x^3, J_y^3, J_z^3, V_x = [J_x (J_y^2 - J_z^2)], V_y, V_z, [J_x [J_y J_z]]$ в представлении $Y_m^{3/2}$; они приведены в табл. 26.3. Для представлений Γ_8^\pm группы O_h в соответствии с (25.36) в $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ должны входить четные функции от \mathbf{k} , преобразующиеся по представлениям $\{\Gamma_8^{\pm 2}\} = \Gamma_1^+ + \Gamma_{12}^+ + \Gamma_{25}^+$, и нечетные, преобразующиеся по $[\Gamma_8^{\pm 2}] = \Gamma_2^+ + 2\Gamma_{15}^+ + \Gamma_{25}^+$, которые приведены в табл. 26.2. Следовательно, гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2\mathbf{I} + 2\gamma_2(J_x^2 k_x^2 + J_y^2 k_y^2 + J_z^2 k_z^2) + 4\gamma_3([J_x J_y] k_x k_y + [J_x J_z] k_x k_z + [J_y J_z] k_y k_z). \quad (26.12)$$

Здесь мы сразу преобразовали произведение $J_1 k_2 + J_2 k_1$, как и в (26.9).

Если теперь подставить соответствующие матрицы J_i из табл. 26.3, то получим матрицу $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, совпадающую с (24.12), которая приводит к спектру (24.13):

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm [B^2 k^4 + (D^2 - 3B^2)(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)]^{1/2}.$$

Константы γ_1 , γ_2 и γ_3 (в 26.12), которые с точностью до размерного множителя $\hbar^2/2m$ совпадают с безразмерными константами Латтинжера [20.1], связаны с константами, введенными в (24.6), (24.14) и (26.9), соотношениями

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= -\frac{L+2M}{3} = -A, & \gamma_2 &= -\frac{L-M}{6} = -\frac{B}{2}, \\ \gamma_3 &= -\frac{N}{6} = -\frac{D}{2\sqrt{3}}. \end{aligned} \quad (26.13)$$

В магнитном поле гамильтониан $\mathcal{H}(\mathbf{H})$ будет включать произведения компонент H_i на \mathbf{J}_i и на \mathbf{J}_i^3 , так как представление Γ_{15}^+ , по которому преобразуются компоненты H_i , входит в $[\Gamma_8^{\pm 2}]$ дважды. Поэтому

$$\mathcal{H}(\mathbf{H}) = \mu_0 g_0 \{ \mathcal{K}(\mathbf{JH}) + \varphi (J_x^3 H_x + J_y^3 H_y + J_z^3 H_z) \}. \quad (26.14)$$

Если $\gamma_2 = \gamma_3$, то $\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2 \mathbf{I} + 2\gamma_2(\mathbf{Jk})^2$ и обладает сферической симметрией. Его собственные функции есть функции момента $j=3/2$: $\Psi_m^{3/2\mathbf{k}}$ с $m = \pm 3/2, \pm 1/2$ и с осью квантования, направленной по \mathbf{k} . При этом $E_{\pm 3/2} = -\gamma_1 + 2\gamma_2$, $E_{\pm 1/2} = -\gamma_1 - 2\gamma_2$. Функции $\Psi_{m'}^{3/2\mathbf{k}'}$ и $\Psi_m^{3/2\mathbf{k}}$ с различными осями квантования связаны соотношением

$$\Psi_{m'}^{3/2\mathbf{k}'} = \sum_m \mathcal{D}_{mm'}^{3/2}(g) \Psi_m^{3/2\mathbf{k}},$$

где $\mathcal{D}_{j_1 j_2}(g)$ — матрицы представлений группы вращения с $j=3/2$ для элемента g , переводящего \mathbf{k}' в \mathbf{k} : $\mathbf{k}' = g\mathbf{k}$. В частности, указанное соотношение связывает функции $\Psi_m^{3/2\mathbf{k}}$ при произвольном \mathbf{k} с функциями (23.2), у которых ось квантования направлена по z . Поэтому при $\gamma_2 = \gamma_3$ коэффициенты в (24.16) можно выбрать в виде матричных элементов $\mathcal{D}_{mm'}^{3/2}$.

Как указывалось выше, представление Γ_8^{\pm} может произойти либо в результате расщепления представлений Γ_{15}^{\pm} или Γ_{25}^{\pm} за счет спин-орбитального взаимодействия, либо из представления Γ_{12}^{\pm} , которое не расщепляется. Если строить матрицу $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ вторым способом для представлений Γ_{15}^{\pm} и Γ_{25}^{\pm} с учетом релятивистских членов, то она будет включать нечетные по отношению к инверсии времени добавочные слагаемые, преобразующиеся по

Γ_{25}^{\pm} , содержащие компоненты σ_i :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) = & A_1 k^2 \mathbf{I} + \Delta_1 (\sigma_x \mathbf{J}_x + \sigma_y \mathbf{J}_y + \sigma_z \mathbf{J}_z) - A_2 (J_x^2 k_x^2 + J_y^2 k_y^2 + J_z^2 k_z^2) - \\ & - 2A_3 ([J_x J_y] k_x k_y + [J_x J_z] k_x k_z + [J_y J_z] k_y k_z) + a_1 k^2 (J\sigma) + \\ & + a_2 (J_x \sigma_x k_x^2 + J_y \sigma_y k_y^2 + J_z \sigma_z k_z^2) + \\ & + a_3 ([J_x \sigma_y] k_x k_y + [J_y \sigma_z] k_y k_z + [J_x \sigma_z] k_x k_z), \end{aligned} \quad (26.15)$$

где $A_1 = L$, $A_2 = L - M$, $A_3 = N$. Здесь второе слагаемое определяет спин-орбитальное взаимодействие, а последние три — релятивистские поправки к константам A , B и D в (24.12) — (24.13а):

$$\delta A = a_1 - \frac{1}{3} a_2, \quad \delta B = -\frac{2}{3} a_2, \quad \delta D = -\frac{1}{\sqrt{3}} a_3. \quad (26.15a)$$

Для зоны Γ_6 в (24.13б) $\delta A = -2a_1 + \frac{2}{3} a_2$. Из всех констант в (26.12), (26.14) лишь константа g имеет релятивистскую природу и, следовательно, мала по сравнению с \hbar^* .

Если представление Γ_8^{\pm} происходит из Γ_{12}^{\pm} , то, как видно из сравнения (24.4) и (24.13а), в нерелятивистском приближении $D = 0$ и $C^2 = -3B^2$. Если строить $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ для представления Γ_{12}^{\pm} с учетом релятивистских слагаемых, то в соответствии с (25.15) надо включить нечетное по отношению к инверсии времени произведение компонент σ_i и $k_i k_m$, преобразующееся по представлению Γ_2^+ :

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = Ak^2 + B(\rho_+ k_1 + \rho_- k_2) + a\rho_z (\sigma_x k_y k_z + \sigma_y k_x k_z + \sigma_z k_x k_y). \quad (26.16)$$

Здесь ρ_i — базисные матрицы X_i^* , определяемые формулами (26.3), а σ_i — спинорные матрицы; $\rho_i \sigma_k$ означает прямое произведение соответствующих матриц. В матричном виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) = & \\ = & \begin{vmatrix} Ak^2 + ak_x k_y & a(k_y - ik_x) k_z & Bk_1 & 0 \\ a(k_y + ik_x) k_z & Ak^2 - ak_x k_y & 0 & Bk_1 \\ Bk_2 & 0 & Ak^2 - ak_x k_y & -a(k_y - ik_x) k_z \\ 0 & Bk_2 & -a(k_y + ik_x) k_z & Ak^2 + ak_x k_y \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (26.16a)$$

Уравнение $|\mathcal{H}(\mathbf{k}) - E\mathbf{I}| = 0$ приводит к выражению для $E(\mathbf{k})$, совпадающему с (24.13), при этом $D^2 = a^2$.

Для представления Γ_8 группы T_d гамильтониан $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ включает четные произведения компонент k_i , преобразующиеся по

*) Например, для p -Ge по данным [31.4] $\hbar = 3,41 \pm 0,03$, $g = 0,06 \pm 0,01$.

представлениям $\Gamma_1 + \Gamma_{12} + \Gamma_{25}$, т. е. те же, что и для группы O_h , и нечетные, преобразующиеся по $\Gamma_2 + 2\Gamma_{15} + \Gamma_{25}$, т. е., в отличие от (26.12), в $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ входят линейные по \mathbf{k} члены, содержащие произведения компонент k_i и V_i , преобразующихся согласно табл. 26.2 по представлению Γ_{25} :

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}) = \frac{4}{\sqrt{3}} \kappa_0 (k_x [J_x (J_y^2 - J_z^2)] + k_y [J_y (J_z^2 - J_x^2)] + k_z [J_z (J_x^2 - J_y^2)]). \quad (26.17)$$

В матричном виде (26.17) запишется так:

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}) = \kappa_0 \begin{vmatrix} 0 & k_y - ik_x & -2k_z & \sqrt{3}(k_y + ik_x) \\ k_y + ik_x & 0 & -\sqrt{3}(k_y - ik_x) & 2k_z \\ -2k_z & -\sqrt{3}(k_y + ik_x) & 0 & k_y - ik_x \\ \sqrt{3}(k_y - ik_x) & 2k_z & k_y + ik_x & 0 \end{vmatrix}. \quad (26.17a)$$

Для представления Γ_{12} группы T_d линейная по \mathbf{k} матрица $\mathcal{H}'(\mathbf{k})$ может быть построена и вторым способом. Для этого надо включить в \mathcal{H} четные по отношению к инверсии времени релятивистски малые компоненты $K_1 = k_x \sigma_x + e_3 k_y \sigma_y + e_3^2 k_z \sigma_z$ и $K_2 = K_1^+$, преобразующиеся по представлению Γ_{12} :

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = 2\kappa_0 (\rho_+ K_1 + \rho_- K_2). \quad (26.18)$$

Матрицу (26.18) унитарным преобразованием можно привести к виду (26.17a).

Так как матрица (26.9), построенная для представлений Γ_{15} и Γ_{25} группы T_d , не содержит линейных по \mathbf{k} членов, то ясно, что константа κ_0 в (26.17) является релятивистски малой и для представления Γ_8 , произошедшего из Γ_{15} или Γ_{25}

Секулярное уравнение $|\mathcal{H}(\mathbf{k}) + \mathcal{H}'(\mathbf{k}) - \mathbf{I}E| = 0$ согласно (24.12) и (26.17) имеет вид

$$\begin{aligned} (E - Ak^2)^4 - 2(E - Ak^2)^2 (B^2 k^4 + C^2 \Theta + 4\kappa_0^2 k^2) + \\ + 16\sqrt{3} (E - Ak^2) D \kappa_0^2 \Theta + (B^2 k^4 + C^2 \Theta)^2 + \\ + (2\kappa_0)^4 (k^4 - 3\Theta) + 8B^2 \kappa_0^2 (k_x^6 + k_y^6 + k_z^6) - \\ - 4(3B^2 + 2D^2) \kappa_0^2 k^2 \Theta + 84B^2 \kappa_0^2 k_x^2 k_y^2 k_z^2 = 0, \end{aligned} \quad (26.19)$$

$$\text{где } \Theta = k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2.$$

Это уравнение можно точно решить лишь для отдельных направлений. Так, если \mathbf{k} направлен по [100], т. е. $k_y = k_z = 0$, или по [010] или [001], то

$$E_{100}(k) = Ak^2 \pm (B^2 k^4 + 4\kappa_0^2 k^2)^{1/2}. \quad (26.20)$$

Следовательно, по этим направлениям каждый из термов остается двукратно вырожденным.

По направлению [111] и эквивалентным ему одна ветвь (соответствующая тяжелым дыркам при $A < 0$ и $D < 0$) расщепляется полностью:

$$E_{111}^- = \left(A - \frac{D}{\sqrt{3}} \right) k^2 \pm 2\sqrt{2} \kappa_0 k, \quad (26.21a)$$

а другая ветвь (легких дырок) остается вырожденной и не изменяется:

$$E_{111}^+ = \left(A + \frac{D}{\sqrt{3}} \right) k^2. \quad (26.21b)$$

В результате наличия линейных по k членов экстремум смещается из точки $k = 0$ в точки, лежащие на осях третьего порядка. Из (26.21) видно, что экстремальная точка соответствует $k_0 = \frac{\sqrt{2} \kappa_0}{A - D/\sqrt{3}}$ и энергия в этой точке на величину ΔE , равную

$$\Delta E = \frac{2\kappa_0^2}{A - D/\sqrt{3}}, \quad (26.22)$$

ниже значения энергии в точке $k = 0$.

Поверхности постоянной энергии вблизи экстремумов, т. е. при $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \ll k_0$, — эллипсоиды вращения, вытянутые вдоль осей [111], при этом для дырок вблизи экстремума *)

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} = - \left(A - \frac{D}{\sqrt{3}} \right), \quad \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} = - \frac{1}{2} \left(3A - 4B + \frac{D}{\sqrt{3}} \right). \quad (26.23)$$

Рассмотрим теперь спектр в точке X решетки O_h^7 для представления X_5^{\pm} . Так как это четырехкратно вырожденное представление происходит из представления X_1 или X_3 , то для построения $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ надо добавить к (26.6) релятивистские члены, включающие приведенные в табл. 26.1 (стр. 317) произведения компонент σ_i и k_i , четные по отношению к инверсии времени, преобразующиеся по $A_1^+ + B_1^- + B_2^+$, и нечетные, преобразующиеся по A_2^- . Так как произведения $\sigma_i k_i$ преобразуются по нечетным представлениям, а произведения $\sigma_i k_l k_m$ — по четным представлениям, то остаются лишь компоненты, преобразующиеся по B_1^- , т. е. $\sigma_x k_x$ и $\sigma_y k_y + \sigma_z k_z$, т. е.

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2) + 2C\sigma_z k_y k_z + \rho_x [a(\sigma_x k_x) + b(\sigma_y k_y + \sigma_z k_z)], \quad (26.24)$$

*) Измерения циклотронного резонанса показали, что для p -InSb

$$\Delta E = (6 \pm 3) \cdot 10^{-4} \text{ эв}, \quad m_{\perp}^*/m_0 = 0,15 \pm 0,02, \quad m_{\parallel}^*/m_0 = 0,57 \pm 0,10.$$

откуда

$$E(\mathbf{k}) = Ak_x^2 + B(k_y^2 + k_z^2) \pm [4C^2 k_y^2 k_z^2 + a^2 k_x^2 + b^2(k_y^2 + k_z^2)]^{1/2}. \quad (26.25)$$

Для представления X_5 , произошедшего из X_2 или X_4 , $E(\mathbf{k})$ естественно имеет такой же вид, но там константа a при линейном по k_x члене не релятивистски малая. Для спектра, определяемого уравнением (26.25), в зависимости от соотношения констант минимум энергии находится либо на оси k_x в точке $k_{x_0} = a/2A$, где $E = -a^2/4A$, либо на осях k'_y и k'_z , проходящих под углом 45° к осям k_y и k_z .

Объединение нескольких представлений

Рассмотрим способы построения базисных матриц для двух- и многозонной модели, когда $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ строится сразу для нескольких зон. В этом случае представление $\mathcal{D}(g)$ приводимо и объединяет представления $\mathcal{D}^I(g)$, $\mathcal{D}^{II}(g)$, ..., соответствующие первой, второй и т. д. зонам, и матрица $\mathcal{D}(g)$ имеет квазидиагональную форму, аналогично тому, как это имело место при объединении комплексно сопряженных представлений в случаях $b_{1,2}$ и c . Однако в отличие от указанных случаев здесь представления \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} не связаны между собой. Поэтому для недиагональных частей $\mathcal{H}^{I,II}(\mathcal{K}) = \mathcal{H}^{II,I}(\mathcal{K})$, удовлетворяющих условию

$$\mathcal{D}^I(g^{-1}) \mathcal{H}^{I,II}(\mathcal{K}) \mathcal{D}^{II}(g) = \mathcal{H}^{I,II}(g^{-1}\mathcal{K}), \quad (26.26)$$

N_x согласно (25.12) определяется выражением, подобным (19.31):

$$N_x = \frac{1}{h} \sum_{g \in G'_k} \chi_x(g) \chi^{II*}(g) \chi^I(g), \quad (26.27)$$

т. е. в недиагональные части $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ могут входить компоненты \mathcal{K}_i^* , преобразующиеся по представлениям \mathcal{D}_x , входящим в произведения $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{II*}$ и $\mathcal{D}^{I*} \times \mathcal{D}^{II}$. Добавочные требования, связанные с инвариантностью к инверсии времени, здесь учитывать не надо, потому что, как отмечалось в § 19, они не накладывают никаких ограничений на недиагональные компоненты.

Для диагональных частей $\mathcal{H}^{I,I}(\mathcal{K})$ и $\mathcal{H}^{II,II}(\mathcal{K})$ число N_x определяется одной из формул (25.36) — (25.38) в зависимости от свойств и представлений \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} по отношению к инверсии времени. Матрицы X_i^* в этом случае можно разделить на междузонные, у которых отличны от нуля только «недиагональные» матричные элементы и которые преобразуются по представлениям, входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{II*}$ и $\mathcal{D}^{I*} \times \mathcal{D}^{II}$, и внутризонные, преобразующиеся по представлениям $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{I*}$ и $\mathcal{D}^{II} \times \mathcal{D}^{II*}$, которые содержат только «диагональные» элементы.

Так как $\mathcal{D}(g)$ имеет квазидиагональный вид, то при всех преобразованиях, включая инверсию времени, эти матрицы преобразуются независимо. Их построение может быть проведено одним из указанных выше методов.

Если проективные представления $\mathcal{D}^I(r)$ и $\mathcal{D}^{II}(r)$ p -эквивалентны и соответствующие матрицы могут быть записаны в виде

$$\mathcal{D}^{II}(r) = \mathcal{D}(r) \mathcal{D}^I(r), \quad (26.28)$$

где $\mathcal{D}(r)$ — некоторое одномерное представление, и если матрицы X_i^* для одной зоны, преобразующиеся по представлениям \mathcal{D}_x , входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{I*}$, известны, то для объединенного представления $\mathcal{D}(g)$ в качестве внутрizonных матриц можно взять матрицы

$$IX_i^* = \begin{vmatrix} X_i^* & 0 \\ 0 & X_i^* \end{vmatrix}, \quad \rho_z X_i^* = \begin{vmatrix} X_i^* & 0 \\ 0 & -X_i^* \end{vmatrix}, \quad (26.29a)$$

преобразующиеся по тому же представлению, что и X_i^* . В качестве междузонных матриц в этом случае можно взять матрицы

$$\rho_+ X_i^* = \begin{vmatrix} 0 & X_i^* \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho_- X_i^* = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ X_i^* & 0 \end{vmatrix}, \quad (26.29b)$$

преобразующиеся соответственно по представлениям $\mathcal{D}_x = \mathcal{D} \times \mathcal{D}_x$, входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{II}$, и $\mathcal{D}_{x'} = \mathcal{D}^* \times \mathcal{D}_x$, входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{II*}$. Представления \mathcal{D}_x и $\mathcal{D}_{x'}$ p -эквивалентны представлению \mathcal{D}_x , но могут быть унитарно неэквивалентны при $\mathcal{D}^*(r) \neq \mathcal{D}(r)$. Если $\mathcal{D}^* = \mathcal{D}$, то в качестве междузонных матриц можно взять матрицы

$$\rho_x X_i^* = \begin{vmatrix} 0 & X_i^* \\ X_i^* & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho_y X_i^* = \begin{vmatrix} 0 & -iX_i^* \\ iX_i^* & 0 \end{vmatrix}. \quad (26.29b)$$

При этом один из этих наборов матриц, например $\rho_x X_i^*$, можно считать четным по отношению к инверсии времени, а другой $\rho_y X_i^*$ — нечетным, что соответствует определенному выбору фаз у базисных функций.

Базисные матрицы в виде (26.29) удобно использовать, в частности, в случае, когда представления \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} объединяются в силу инверсии времени. При этом в случае c представления \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} совпадают, а в случае b p -эквивалентны. Этот выбор базиса отличается от (25.9) и соответствует такому унитарному преобразованию \mathcal{D}^{II} в (25.9), когда $\mathcal{H}^{II}(\mathcal{H})$ переходит в $\tilde{\mathcal{H}}^{II}(\mathcal{H})$. При этом, согласно (25.11) и (25.27), матрицы $\tilde{\mathcal{H}}^{II}(\mathcal{H})$ и $\mathcal{H}^{II}(\mathcal{H})$ должны быть связаны

соотношениями:

$$\begin{aligned} \text{случай } b_1, c_1: \quad \tilde{\mathcal{H}}^{\text{II}}(\mathcal{K}) &= \mathcal{H}^{\text{I}}(f\mathcal{K}), \\ \text{случай } b_2, c_2: \quad \tilde{\mathcal{H}}^{\text{II}}(\mathcal{K}) &= \mathcal{H}^{\text{I}}(fR^{-1}\mathcal{K}). \end{aligned} \quad (26.30)$$

Видно, что в первом случае диагональные матрицы всегда можно выбрать в виде (26.29а), а во втором — лишь если компоненты \mathcal{K} выбраны так, что $fR^{-1}\mathcal{K} = \pm \mathcal{K}$. При этом матрицы $\mathbf{I}X_i^x$ входят в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ с функциями, не меняющими знак при операциях K или RK , а матрицы $\rho_z X_i^x$ — с функциями, меняющими знак, т. е. первые из них являются четными к этим операциям, а вторые — нечетными. В случае, когда представления \mathcal{D}^{I} и \mathcal{D}^{II} независимы и никакие добавочные условия на недиагональные части $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ не накладываются, каждая функция X_i^x входит в $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ с обеими матрицами с независимыми константами.

Если представления \mathcal{D}^{I} и \mathcal{D}^{II} ρ -эквивалентны векторному и совпадают между собой или отличаются только четностью, то в качестве внутризонных матриц можно выбрать матрицы $\mathbf{I}J_i$ и $\rho_z J_i$, построенные указанным выше методом и преобразующиеся как компоненты псевдовектора J_i (или их произведения), а в качестве междузонных матриц — матрицы $\rho_+ J_i$ и $\rho_- J_i$ или матрицы $\rho_x J_i$ и $\rho_y J_i$, которые преобразуются как аналогичные компоненты псевдовектора, если четность \mathcal{D}^{I} и \mathcal{D}^{II} совпадает, или как компоненты полярного вектора, если четность различна. Для одномерных представлений, которые всегда ρ -эквивалентны, в качестве внутризонных матриц можно взять матрицы \mathbf{I} и $\rho_z = \sigma_z$, которые преобразуются по единичному представлению, а в качестве междузонных — матрицу $\rho_+ = \sigma_+$, преобразующуюся по представлению $\mathcal{D}^{\text{I}*} \times \mathcal{D}^{\text{II}}$, и $\rho_- = \sigma_-$, преобразующуюся по $\mathcal{D}^{\text{I}} \times \mathcal{D}^{\text{II}*}$. Если представления \mathcal{D}^{I} и \mathcal{D}^{II} вещественны или совпадают, то в качестве междузонных матриц можно взять матрицы $\rho_x = \sigma_x$ и $\rho_y = \sigma_y$.

Для двумерных ρ -эквивалентных представлений 16 базисных матриц могут быть выбраны в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{I}\sigma_i &= \begin{vmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{vmatrix}, & \rho_z \sigma_i &= \begin{vmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{vmatrix}, \\ \rho_+ \sigma_i &= \begin{vmatrix} 0 & \sigma_i \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, & \rho_- \sigma_i &= \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_i & 0 \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (26.31)$$

где σ_i — двумерные матрицы Паули, включая единичную. Для вещественных представлений вместо матриц $\rho_+ \sigma_i$ и $\rho_- \sigma_i$ надо взять «четные» матрицы $\rho_x \sigma_i$ и «нечетные» $\rho_y \sigma_i$. При этом матрицы \mathbf{I} и ρ_z преобразуются по единичному представлению, а остальные матрицы $\mathbf{I}\sigma_i$ и $\rho_z \sigma_i$ — по другим представлениям

\mathcal{D}_x , входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{I^*} = \mathcal{D}^{II} \times \mathcal{D}^{II^*}$. Матрицы ρ_+ и ρ_- преобразуются по представлениям $\mathcal{D}(r)$ и $\mathcal{D}^*(r)$, а матрицы $\rho_+ \sigma_i$ и $\rho_- \sigma_i$ — по $\mathcal{D}_x \times \mathcal{D}$ и $\mathcal{D}_x \times \mathcal{D}^*$, входящим в $\mathcal{D}^I \times \mathcal{D}^{II^*}$ и $\mathcal{D}^{I^*} \times \mathcal{D}^{II}$. В этом случае для построения $\mathcal{H}(\mathcal{K})$ достаточно знать лишь характеры представлений \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} .

Если же представления \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} не p -эквивалентны и хотя бы одно из них имеет размерность 2 или выше, то для определения матриц X_i^* надо знать либо базис, либо матрицы представлений $\mathcal{D}(g)$ для образующих элементов.

Так, если представления $\mathcal{D}^I(r)$ и $\mathcal{D}^{II}(r)$ p -эквивалентны векторным или спинорным, то их базисные функции можно выбрать в виде суперпозиции функций Y_m^j ; при этом значения j для представлений \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} , равные j^I и j^{II} , вообще говоря различны. В этом случае в качестве междузонных матриц X_i^* можно взять матрицы A_m , преобразующиеся в общем случае как компоненты тензора соответствующего ранга.

Общие выражения для отличных от нуля компонент соответствующих матриц приведены, например, в [1.7] (см. § 29). Так, при $j^I = j^{II}$ эти компоненты с точностью до произвольных констант $C_I^{II} = C_{II}^{I^*}$ определяются формулами (10.17). При $|j^I - j^{II}| = 1$ матрицы R_m , преобразующиеся как компоненты аксиального вектора при одинаковой четности представлений \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} или как компоненты полярного вектора при их разной четности, определяются выражениями

$$\begin{aligned} (R_z)_{j-1, m}^{jm} &= [(R_z)_{jm}^{j-1, m}]^* = C_{j-1}^j (j^2 - m^2)^{1/2}, \\ (R_-)_{j-1, m}^{j, m-1} &= [(R_+)_{j, m-1}^{j-1, m}]^* = C_{j-1}^j [(j - m + 1)(j - m)]^{1/2}, \\ (R_+)_{j-1, m-1}^{jm} &= [(R_-)_{jm}^{j-1, m-1}]^* = -C_{j-1}^{j^*} [(j + m - 1)(j + m)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (26.32)$$

При этом для двух наборов матриц R_m константы $C_I^{II} = C_{II}^{I^*}$ или $C_{j-1}^j = (C_{j-1}^{j-1})^*$ должны быть выбраны так, чтобы эти матрицы были линейно независимы. Для этого достаточно взять их для одного набора вещественными, а для другого чисто мнимыми, положив

$$C_I^{II(1)} = C_{II}^{I(1)} = 1, \quad C_I^{II(2)} = -C_{II}^{I(2)} = -i. \quad (26.33)$$

В качестве примера в табл. 26.5 в конце параграфа приведены матрицы R_x, R_y, R_z , построенные в базисе Y^0, Y_m^1 . Эти матрицы являются базисными для пар представлений A и F группы T , A_1 или A_2 и F_1 или F_2 группы T_d , A_1^\pm и F_1^\pm (или p -эквивалентных им пар A_2^\pm и F_2^\pm) групп O и O_h . Перемножая их, можно построить все остальные 16 матриц, в частности матрицы $\{R_x R_y\}$, преобразующиеся как J_z и др. и совпадающие

с точностью до констант с соответствующими матрицами J_z, J_x, J_y , приведенными в табл. 26.3.

Что касается учета спина в двухзонной модели, то он может быть проведен одним из двух способов, указанных выше. В первом способе в качестве представлений \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} берутся неприводимые спинорные представления, во втором — представления $\mathcal{D}_l^I \times \mathcal{D}_{1/2}$ и $\mathcal{D}_l^{II} \times \mathcal{D}_{1/2}$, и тогда в \mathcal{K} включаются компоненты σ_i в соответствии с правилами, изложенными выше.

В качестве примера рассмотрим двухзонную модель для классов O_h и T_d (точка Г).

В простейшем случае, когда оба представления \mathcal{D}^I и \mathcal{D}^{II} двумерные, с учетом спина $\mathcal{H}(k)$ включает линейные по k междузонные члены лишь для пары представлений Γ_6 и Γ_7 , а в решетке O_h — для пар Γ_6^+, Γ_7^- и Γ_6^-, Γ_7^+ . В этом случае в $\mathcal{H}(k)$ войдут междузонные члены, преобразующиеся по $\Gamma_6^\pm \times \Gamma_7^\mp = \Gamma_2^- + \Gamma_{15}^-$, и внутризонные: четные, преобразующиеся по $\{\Gamma_6^2\} = \{\Gamma_7^2\} = \Gamma_1^+$, и нечетные, преобразующиеся по $[\Gamma_6^2] = [\Gamma_7^2] = \Gamma_{25}^+$. Так как эти представления p -эквивалентны: $\Gamma_6 = \Gamma_7 \Gamma_2$, то в качестве четных внутризонных матриц надо взять матрицы I и ρ_z , а нечетные можно выбрать в виде σ_i и $\rho_z \sigma_i$. Междузонные матрицы ρ_x и ρ_y преобразуются по Γ_2 , а $\rho_x \sigma_i$ и $\rho_y \sigma_i$ преобразуются по Γ_{15} . При этом матрицы $\rho_x \sigma_i$ будем считать четными, $\rho_y \sigma_i$ — нечетными. Как указывалось выше, при таком выборе базисных матриц функции \mathcal{H}_i^x надо брать вещественными. Эти функции приведены в табл. 26.2.

Для кристаллов класса O_h

$$\mathcal{H}(k) = \rho_z \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar k^2}{2m_1} + \rho_z \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} + A \rho_y (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y + \sigma_z k_z). \quad (26.34)$$

Для кристаллов класса T_d гамильтониан $\mathcal{H}(k)$ будет включать дополнительное слагаемое

$$\mathcal{H}''(k) = a \rho_x (\sigma_x k_y k_z + \sigma_y k_x k_z + \sigma_z k_x k_y), \quad (26.35)$$

так как в группе T_d компоненты k_i и произведения $k_i k_j$ преобразуются по одному представлению Γ_{15} . Спектр, определяемый (26.34), имеет вид

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \pm \left\{ \left(\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \right)^2 + A^2 k^2 \right\}^{1/2}. \quad (26.36)$$

При $1/m_1 = 1/m_2 = 0$ уравнение $\mathcal{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ совпадает по форме с уравнением Дирака, отличаясь от него заменой скорости света c на $s = A/\hbar$ и m на $m^* = E_g/2s^2$. В этом случае спектр вблизи края зон

$$E(k) = \pm \left(\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right).$$

Аналогия между двухзонным уравнением и уравнением Дирака оказывается полезной в ряде задач. Так, из нее сразу следует, что двухзонное уравнение (26.34) при $1/m_1 = 1/m_2 = 0$ инвариантно к преобразованию, отличающемуся от преобразования Лорентца в теории относительности лишь заменой c на s .

Входящая в (26.34) константа A является релятивистски малой в случае, когда представления Γ_6 и Γ_7 происходят из невырожденных представлений Γ_1 и Γ_2 . Если же одно из этих представлений произошло в результате расщепления термов $\Gamma_{15} \times \mathcal{D}_{1/2} = \Gamma_7 + \Gamma_8$ или $\Gamma_{25} \times \mathcal{D}_{1/2} = \Gamma_6 + \Gamma_8$, а другое из Γ_1 или Γ_2 соответственно, то эта константа не мала, в этом случае и в нерелятивистском приближении междузонные элементы для пар Γ_{15} , Γ_1 или Γ_{25} , Γ_2 будут включать линейные по k члены.

Если необходимо построить $\mathcal{H}(k)$ для всех термов, входящих в эти пары представлений, то в качестве базиса можно взять матрицы R_m , построенные в представлении $\mathcal{D}_0 + \mathcal{D}_1$, приведенные в табл. 26.5, т. е. 6 междузонных матриц R_x, R_y, R_z (четные) и R'_x, R'_y, R'_z и 10 внутризонных: $I, R_x^2, R_y^2, R_z^2, \{R_x R_y\}, \{R_x R_z\}, \{R_y R_z\}, [R_x R_y], [R_y R_z], [R_z R_x]$. Если учесть лишь не зависящие от k нерелятивистские члены, то $\mathcal{H}(k)$ для решетки T_d будет иметь вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(k) = & \Delta_1 R^2 + 2i\Delta_2 \sum_i \sigma_i \{R_{i+1} R_{i+2}\} + A_1 R^2 k^2 + A_2 \sum_i R_i^2 k_i^2 + \\ & + A_3 \sum_{i \neq j} [R_i R_j] k_i k_j + A_4 \sum_i R'_i k_i + A_5 \sum_i R_i k_{i+1} k_{i+2}. \end{aligned} \quad (26.37)$$

Для решетки O_h последний член отсутствует. Матрицу (26.37) унитарным преобразованием, диагонализующим второе слагаемое в $\mathcal{H}(k)$, описывающее спин-орбитальное взаимодействие, можно привести к виду, совпадающему с точностью до констант с табл. 24.1.

Таблица 26.3

Матрицы J_i и их произведения

Для представления D_1 в базисе x, y, z

$J_x = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{vmatrix}$	$J_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$J_z = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$
$J_x^2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$J_y^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$J_z^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$
$2 [J_x J_y] = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$2 [J_y J_z] = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$	$2 [J_x J_z] = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$

Для представления $\mathcal{D}_{3/2}$ в базисе $Y_{3/2}^m$ (23.2)

$$\begin{aligned}
 J_x &= \begin{vmatrix} 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix} & J_y &= \begin{vmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix} & J_z &= \begin{vmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{vmatrix} \\
 J_x^2 &= \begin{vmatrix} \frac{3}{4} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{7}{4} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{7}{4} & 0 & \frac{7}{4} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{7}{4} & \frac{3}{4} \end{vmatrix} & J_y^2 &= \begin{vmatrix} \frac{3}{4} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{7}{4} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{7}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{4} \end{vmatrix} & J_z^2 &= \begin{vmatrix} \frac{9}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{9}{4} \end{vmatrix} \\
 [J_x J_y] &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \end{vmatrix} & [J_x J_z] &= \begin{vmatrix} 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix} & [J_y J_z] &= \begin{vmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix}
 \end{aligned}$$

$$J_x^3 = \begin{vmatrix} 0 & i\frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 & -i\frac{3}{4} \\ -i\frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 & i\frac{10}{4} & 0 \\ 0 & -i\frac{10}{4} & 0 & i\frac{7\sqrt{3}}{8} \\ i\frac{3}{4} & 0 & -i\frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 & \frac{3}{4} \\ \frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 & \frac{10}{4} & 0 \\ 0 & \frac{10}{4} & 0 & \frac{7\sqrt{3}}{8} \\ \frac{3}{4} & 0 & \frac{7\sqrt{3}}{8} & 0 \end{vmatrix}$$

$$2V_x = \begin{vmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & i\frac{3}{2} \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & i\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{3}{2} & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -i\frac{3}{2} & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{3}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

$$2[J_x[J_y J_z]] = \begin{vmatrix} 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$2[J_i J_k] = J_i J_k + J_k J_i, \quad V_x = [J_x(J_y^2 - J_z^2)]$$

$$J_z^3 = \begin{vmatrix} \frac{27}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{27}{8} \end{vmatrix}$$

$$2V_z = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Базисные матрицы для проективных представлений

Группа	Класс	Представление	X	Y	Z
D_{4h}	K_5	$Q^{(5)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{vmatrix}$
			$\begin{vmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{vmatrix}$	$-\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{vmatrix}$	
	K_6	$Q^{(6)}$	$\begin{vmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -\sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{vmatrix}$
			$\begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_y \\ i\sigma_y & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_z \\ i\sigma_z & 0 \end{vmatrix}$	
D_{6h}	K_3	$Q^{(3)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{vmatrix}$	$-\begin{vmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{vmatrix}$
	K_4	$Q^{(4)}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{vmatrix}$
	K_5	$Q^{(5)}$	$\begin{vmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -\sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{vmatrix}$
	K_6	$Q^{(6)}$	$\begin{vmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{vmatrix}$	$-\begin{vmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{vmatrix}$

Таблица 26.4 (продолжение)

Группа	Класс	Представление	x	y	z
O_h	K_2	$R^{(2)}$	$\begin{vmatrix} \varphi & 0 \\ 0 & -\varphi \end{vmatrix}, \varphi = \begin{vmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \gamma & 0 \\ 0 & -\gamma \end{vmatrix}, \gamma = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} x & 0 \\ 0 & -x \end{vmatrix}, x = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{vmatrix}$
			$\begin{vmatrix} 0 & \lambda \\ \lambda & 0 \end{vmatrix}, \lambda = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{vmatrix}, \delta = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & \eta \\ \eta & 0 \end{vmatrix}, \eta = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$
K_3	$Q_1^{(3)}$	$Q_2^{(3)}$ $Q_3^{(3)}$	$\begin{vmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{vmatrix}$
			$\begin{vmatrix} 0 & \varepsilon_6 \sigma_x \\ \varepsilon_6^{-1} \sigma_x & 0 \end{vmatrix}, \varepsilon_6 = e^{\frac{2\pi i}{6}}$	$\begin{vmatrix} 0 & \varepsilon_6^{-1} \sigma_y \\ \varepsilon_6 \sigma_y & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{vmatrix}$

Для групп D_{nh} ось z направлена по C_n , а ось x — по u_2 .

Матрицы компонент полярного вектора в представлении $(Y^0, Y_1^1, Y_0^1, Y_1^1)$

$$R_x = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$R_y = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$R_z = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$R'_x = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$R'_y = \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$R'_z = \begin{vmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

§ 27. МЕЛКИЕ ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ И ЭКСИТОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Мелкие примесные центры

Как показано в § 22, для определения волновых функций и энергии E мелкого примесного центра в методе эффективной массы нужно решать систему уравнений (22.26)

$$\sum_{m'} \mathcal{H}_{mm'}(\mathbf{k}) f_{m'} = E f_m, \quad (27.1)$$

которая в матричном виде записывается так:

$$\mathcal{H}f = Ef, \quad \text{где } f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}.$$

Здесь m и m' пробегает значения от 1 до N , где N — кратность вырождения зоны в экстремуме, а

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) + U(\mathbf{r})I. \quad (27.2)$$

В (27.2) $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$ — матрица, определяющая спектр вблизи экстремума зоны, $k_\alpha = -i \frac{\partial}{\partial r_\alpha}$, а $U = -Ze^2/\kappa r$ — кулоновский потенциал, κ — диэлектрическая постоянная*), Z — заряд примеси**).

Каждому решению f^s системы (27.1), которое является столбцом с компонентами f_m^s , соответствует волновая функция примесного центра

$$\Psi^s = \sum_{m=1}^N f_m^s \psi_{m\mathbf{k}_0}, \quad (27.3)$$

где $\psi_{m\mathbf{k}_0}$ — блоховские функции на дне зоны. Рассмотрим закон преобразования волновых функций примесного центра f .

Согласно (25.16) для матрицы $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ имеем

$$\mathcal{D}^{-1}(g) \mathcal{H}(g\mathbf{k}) \mathcal{D}(g) = \mathcal{H}(\mathbf{k}), \quad (27.4)$$

где $\mathcal{D}(g)$ — матрица преобразования функций дна зоны $\psi_{m\mathbf{k}_0}$. Если в группу направлений входят элементы g , содержащие не-

*) Имея в виду дальнейшее рассмотрение примесных центров в кубических кристаллах, мы полагаем κ скаляром.

**) Поскольку в задаче об экситоне, рассматриваемой в этом параграфе, существенна зависимость ψ от спинов, мы, в отличие от § 22, здесь будем сразу учитывать зависимость базисных функций от спиновых индексов. Поэтому ниже везде пространственные координаты обозначаются как \mathbf{r} , а \mathbf{x} включает и спиновые индексы.

тривиальные трансляции, то в общем случае $U(\mathbf{g}\mathbf{r}) \neq U(\mathbf{r})$, однако на расстояниях, больших по сравнению с постоянной решетки, когда и справедливо приближение эффективной массы, можно считать, что $U(\mathbf{g}\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$. Поэтому и весь оператор (27.1) удовлетворяет соотношению (27.4).

Пусть имеется μ линейно независимых решений уравнения (27.1) f^s ($s = 1, 2, \dots, \mu$). Используя (27.4), из уравнения

$$\mathcal{H}(g^{-1}\mathbf{k})f^s(g^{-1}\mathbf{r}) = Ef^s(g^{-1}\mathbf{r})$$

получим равенство

$$\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{D}(g)f^s(g^{-1}\mathbf{r}) = E\mathcal{D}(g)f^s(g^{-1}\mathbf{r}),$$

откуда следует, что функция $\mathcal{D}(g)f^s(g^{-1}\mathbf{r})$ с компонентами

$$(\mathcal{D}(g)f^s(g^{-1}\mathbf{r}))_m = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}(g)f_{m'}^s(g^{-1}\mathbf{r}) \quad (27.5)$$

соответствует той же энергии E , что и функции $f^s(\mathbf{r})$ ($s = 1, 2, \dots, \mu$). Поэтому между этими функциями имеется линейная связь

$$\mathcal{D}(g)f^s(g^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{s'} T^{s's}(g)f^{s'}(\mathbf{r}), \quad (27.6)$$

откуда

$$\begin{aligned} f^s(g^{-1}\mathbf{r}) &= \mathcal{D}^{-1}(g) \sum_{s'} T^{s's}(g)f^{s'}(\mathbf{r}), \\ f_m^s(g^{-1}\mathbf{r}) &= \sum_{s'm'} T^{s's}(g) \mathcal{D}_{m'm}^*(g)f_{m'}^{s'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (27.7)$$

Таким образом, преобразование функций $f_m^s(g^{-1}\mathbf{r})$ включает в себя как линейное преобразование столбцов f^s друг через друга, определяемое матрицей T , так и преобразование компонент внутри одного столбца, определяемое матрицей \mathcal{D} .

Нетрудно проверить непосредственно, что матрицы $T(g)$ образуют представления группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$, при этом они определяют преобразование функций Ψ^s (27.3):

$$\Psi^s(g^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{s'} T^{s's}(g)\Psi^{s'}(\mathbf{r}). \quad (27.8)$$

Таким образом, волновые функции Ψ (27.3) примесного центра вблизи \mathbf{k}_0 преобразуются по представлению группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$.

Из (27.7) следует, что функции f преобразуются по представлению \mathcal{D}_f группы направлений волнового вектора

$$\mathcal{D}_f = \mathcal{D}^* \times T, \quad (27.9)$$

где \mathcal{D} — представление $G_{\mathbf{k}_0}$, по которому преобразуются функции дна зоны, а T — представление, по которому преобразуется волновая функция примесного центра. Эта формула показывает, по каким представлениям могут преобразовываться

медленные функции при заданной симметрии T полной волновой функции.

Поскольку потенциальная энергия в уравнении (27.1) минимальна вблизи примесного центра, то следует ожидать, что основному состоянию примесного центра соответствуют функции f , конечные в начале координат, т. е. среди функций f основного состояния должны быть функции, преобразующиеся по единичному представлению группы G_{k_0} . Из (27.9) следует, что представление \mathcal{D}_f будет содержать единичное только в том случае, когда $\mathcal{D} = T$. Поэтому можно ожидать, что вырождение основного состояния мелкого примесного центра совпадает с вырождением зоны в точке экстремума; это подтверждается экспериментально во всех исследованных в настоящее время случаях.

До сих пор рассматривалось состояние примесного центра вблизи одной точки экстремума k_0 . Если имеется несколько эквивалентных экстремумов k_l , $l = 1, 2, \dots, n$, где n — число экстремумов, то появляется дополнительное вырождение уровня мелкого примесного центра, так как в методе эффективной массы волновая функция центра Ψ является произвольной линейной комбинацией функций с одной энергией E (27.3), соответствующих различным экстремумам Ψ_l :

$$\Psi = \sum_{l=1}^n c_l \Psi_l. \quad (27.10)$$

Поэтому в методе эффективной массы кратность вырождения уровня основного состояния мелкого примесного центра равна кратности вырождения зоны в точке экстремума, умноженной на число эквивалентных экстремумов, т. е. совпадает с размерностью неприводимого представления пространственной группы со звездой $\{k_0\}$.

Такая большая кратность вырождения, однако, связана с приближением эффективной массы, а не является следствием соображений симметрии. На самом деле кратность вырождения основного состояния примесного центра в общем случае ниже, так как возможная кратность вырождения терма определяется размерностью неприводимых представлений точечной группы локальной симметрии местоположения узла примесного атома. Поэтому за счет взаимодействий, не учитываемых в методе эффективной массы, которые будут обсуждены ниже, избыточное вырождение, связанное с приближением эффективной массы, снимается.

В методе эффективной массы энергетический спектр различных примесных атомов с одним и тем же эффективным зарядом одинаков, так как согласно (27.1) он определяется только параметрами зоны вблизи экстремума и диэлектрической постоянной кристалла. Поправки к методу эффективной массы, приво-

дящие к изменению энергии основного состояния и расщеплению вырождения, характерного для многоэллипсоидной модели, т. е. химический сдвиг*), различны для различных примесных атомов.

Если величина химического сдвига значительно меньше энергии основного состояния (отсчитанной от дна зоны), то правильные волновые функции являются определенными линейными комбинациями функций (27.10) и характер расщепления и эти функции могут быть получены на основании теории групп, без детального исследования механизма химического сдвига. Для этого следует разложить представление пространственной группы $\mathcal{D}^{(k_0)}$, по которому преобразуются функции (27.10), по неприводимым представлениям точечной группы локальной симметрии G_i местоположения примесного иона. При этом следует иметь в виду, что в группу локальной симметрии могут входить только такие поворотные элементы из пространственной группы, которые не сопровождаются нетривиальными трансляциями.

Для любого элемента $g \in G_i$ характер представления $\mathcal{D}^{(k_0)}$ пространственной группы равен согласно (12.24)

$$\chi(g) = \sum_l \chi_l(g) = \sum_l \chi(g_l g g_l^{-1}). \quad (27.11)$$

Здесь χ — характер представления, по которому преобразуются волновые функции Ψ_1 (27.3) примесного центра в точке k_1 , а g_l — элемент, переводящий k_1 в k_l , т. е. $g_l k_1 = k_l$. Суммирование проводится по всем лучам звезды $\{k_0\}$, в группу симметрии G_{k_l} которых входит g .

Если волновые функции Ψ_1 в точке экстремума преобразуются по единичному представлению, то $\chi_l(g) = 1$, и из (27.10) следует, что в этом случае характер представления пространственной группы

$$\chi(g) = N_g, \quad (27.12)$$

где N_g — число лучей звезды, которые остаются на месте при преобразовании g .

Теория характеров дает возможность, таким образом, определить расщепление уровня примесного центра, а при помощи проекционных операторов нетрудно непосредственно определить линейные комбинации функций (27.10), которые соответствуют состоянию с одной энергией.

Отметим, что в приближении эффективной массы в кристаллах, имеющих центр инверсии, волновая функция примесного центра всегда является четной или нечетной. Однако если группа локальной симметрии не содержит инверсию, то полная

*) В иностранной литературе это расщепление, связанное с переходом из одной долины в другую, называется также valley-orbit splitting.

волновая функция примесного центра при учете поправок к методу эффективной массы не обладает определенной четностью.

Рассмотрим теперь волновые функции мелких примесных центров в некоторых точках зоны Бриллюэна в кубических кристаллах.

Сферическая зона в $k_0 = 0$. Для такой зоны уравнение (27.1) имеет вид

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \frac{e^2}{\kappa r} + E \right) f = 0. \quad (27.13)$$

Уравнение (27.13) совпадает с уравнением Шредингера для атома водорода, если в нем заменить m на m^* и e^2 на e^2/κ . Центры такого типа называются водородоподобными. Основное состояние водородоподобного центра не вырождено, ему соответствует $f_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \exp(-r/a_B)$, где $a_B = \hbar^2 \kappa / m^* e^2$ — борковский

радиус примесного центра. Энергия основного состояния для водородоподобного центра

$$E_0 = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \kappa^2}.$$

Энергия возбужденных состояний $E_n = -E_0/n^2$, где n — главное квантовое число; $n = n_r + l + 1$, n_r — радиальное квантовое число, l — азимутальное квантовое число. Четность водородоподобных состояний $P = (-1)^l$.

Примесный центр в многоэллипсоидной модели. Рассмотрим случай, когда экстремумы зоны находятся в точке $k_0 \neq 0$ на осях симметрии, так что поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{\perp}}, \quad (27.14)$$

при этом ось z направлена по оси вращения эллипсоида. Уравнение (27.1) в этом случае имеет вид

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2}{\kappa r} + E \right) f = 0. \quad (27.15)$$

Введем безразмерный параметр $\gamma = m_{\perp}/m_{\parallel}$, безразмерные координаты в единицах борковского радиуса $a_B = \hbar^2 \kappa / m_{\perp} e^2$ и безразмерную энергию в единицах $E_B = m_{\perp} e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2$; тогда уравнение (27.15) переписется в виде

$$\left(\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2}{r} + E \right) f = 0. \quad (27.16)$$

В общем случае переменные в этом уравнении не разделяются и получить решение в общем виде не удается, кроме рассмотренного выше случая $\gamma = 1$ и так называемого «адиабатического»

случая $\gamma \ll 1$, в котором решение может быть получено в виде ряда по малому параметру γ [21.2].

Для энергии основного состояния хорошие результаты дает прямой вариационный метод при использовании пробной функции вида

$$f = (\pi a_{\perp}^2 a_{\parallel})^{-1/2} \exp \left\{ - \left(\frac{\rho^2}{a_{\perp}^2} + \frac{z^2}{a_{\parallel}^2} \right)^{1/2} \right\}, \quad (27.17)$$

где $\rho^2 = x^2 + y^2$, a_{\parallel} и a_{\perp} — вариационные параметры, определяемые из условия минимума функционала

$$E = \int f \mathcal{H} f \, dr = \frac{1}{3a_{\perp}^2} \left(2 + \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \right) - \frac{2}{a_{\perp}} \frac{\operatorname{arcsch} \alpha}{\alpha}, \quad a_{\parallel} = a_{\perp} (1 + \alpha^2). \quad (27.18)$$

Минимизация этого функционала с пробной функцией (27.17) приводит к следующим уравнениям для a_{\perp} и α :

$$a_{\perp} = \frac{1}{3} \left(2 + \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \right) \frac{\alpha}{\operatorname{arcsch} \alpha}, \quad \gamma = 2(1 + \alpha^2)^{3/2} \frac{\sqrt{1 + \alpha^2} \operatorname{arcsch} \alpha - \alpha}{\alpha \sqrt{1 + \alpha^2} - \operatorname{arcsch} \alpha}. \quad (27.19)$$

Уравнения (27.18) и (27.19) написаны для случая $\gamma > 1$; при $\gamma < 1$ в них нужно заменить $1 + \alpha^2$ на $1 - \alpha^2$ и $\operatorname{arcsch} \alpha$ на $\operatorname{arcsin} \alpha$.

Сравнение полученных вариационным методом значений энергии с точным решением при $\gamma = 0$ показывает, что ошибка в энергии порядка 7,5% при $\gamma = 0$ и меньше при других значениях γ , т. е. сравнительно невелика, а при $\gamma = 1$ (27.17) является точным решением (27.13). Зависимость энергии основного состояния от γ , вычисленная по (27.18), (27.19), приведена на рис. 28.

Остановимся кратко на классификации возбужденных состояний для уравнений (27.15), (27.16). При $m_{\parallel} = m_{\perp}$, т. е. при $\gamma = 1$, имеется вырождение по квантовому числу l , характерное для кулоновского центра. Если же $\gamma \neq 1$, то это вырождение снимается. Гамильтониан метода эффективной массы (27.15), (27.16) обладает аксиальной симметрией $C_{\infty v} \times C_i$, поэтому его собственные функции характеризуются магнитным квантовым числом $m_z = m$ и четностью P . При этом без учета спина состояния с $m = 0$ однократны, а состояния с $m \neq 0$ двукратно вырождены по $\pm m$. При повороте вокруг оси симметрии на угол ϕ вырожденные функции умножаются на $e^{\pm im\phi}$, а при отражении σ_v переходят друг в друга. Поэтому собственные функции гамильтониана (27.15) с заданным m и четностью P являются суперпозициями состояний кулоновского центра с различными n , но с заданными m и четностью. Так, волновая функция с $m = 0$ и положительной четностью является суперпозицией состояний $1s, 2s, 3s, 3d, 4s, 4d$ и т. д. с $m = 0$.

Если расстояния между возбужденными уровнями в кулоновском спектре больше возмущения, связанного с неравенством масс m_{\parallel} и m_{\perp} , то состояния оператора (27.15) в первом приближении образуются из возбужденных состояний кулоновского центра с одним n . Так, состояния с $n = 1, 2$ переходят в состояния: $1s \rightarrow 1s(0, +)$; $2p \rightarrow 2p_0(0, -) + 2p_{\pm}(\pm 1, -)$; $2s \rightarrow 2s(0, +)$ (в скобках указаны магнитное квантовое число m и четность). Для многоэллипсоидной зоны возбужденные состояния, как и основное, дополнительно вырождены по числу экстремумов. При учете поправок к методу эффективной массы это вырождение снимается, характер расщепления может быть определен по (27.11). Однако из-за большого радиуса волновых

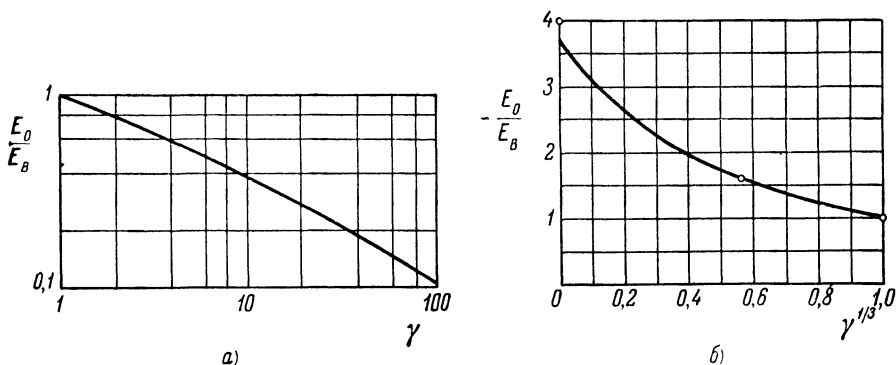


Рис. 28. Зависимость энергии основного состояния E_0/E_B примесного центра от параметра анизотропии $\gamma = m_{\perp}/m_{\parallel}$. а) $\gamma \geq 1$ [21.10]; б) $\gamma \leq 1$ [21.2].
 $E_B = m_{\perp} e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2$.

функций поправки к методу эффективной массы для возбужденных состояний невелики, а для состояний, для которых $f(0) = 0$, эти поправки практически отсутствуют.

Рассмотрим подробнее структуру донорных центров в Ge и Si, зона проводимости которых имеет многоэллипсоидную структуру.

В Si в зоне проводимости имеется 6 минимумов, расположенных внутри зоны Бриллюэна на осях четвертого порядка, при этом $m_{\parallel} = 0,98 m$, $m_{\perp} = 0,19 m$, а $\kappa = 11$. Из рис. 28 следует, что энергия основного состояния $E_0 = 0,029$ эв; экспериментальные значения энергии ионизации для различных доноров приведены в табл. 27.1.

Из уравнения (27.1) видно, что метод эффективной массы дает правильный порядок значения энергии ионизации, однако для тяжелых атомов расхождение между теоретическими и экспериментальными значениями может достигать до 50%.

Донор	Энергия ионизации, эв		Донор	Энергия ионизации, эв	
	Si	Ge		Si	Ge
P	0,044	0,013	Li	0,033	—
As	0,049	0,014	Bi	—	0,013
Sb	0,039	0,010			

В методе эффективной массы основное состояние $1s$ донорного центра в Si шестикратно вырождено по числу минимумов в зоне проводимости. Ионы доноров в Si и Ge являются примесями замещения, их группой локальной симметрии является T_d . Используя (27.12), легко убедиться, что в результате химического сдвига шестикратно вырожденное состояние $1s$ расщепляется на синглетное представление A_1 , двукратно вырожденное E и трехкратно вырожденное состояние F_2 :

$$1s = A_1 + E + F_2.$$

Если обозначить функции (27.3), соответствующие экстремумам

$$k_0(100), k_0(\bar{1}00), k_0(010), k_0(0\bar{1}0), k_0(001), k_0(00\bar{1}),$$

индексами 1, 2, ..., 6 соответственно, то правильные волновые функции (27.10), определяемые коэффициентами c_i , имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (111111), & \Psi_{F_2}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1\bar{1}0000), \\ \Psi_E^1 &= \frac{1}{2} (11\bar{1}\bar{1}00), & \Psi_{F_2}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (001\bar{1}00), \\ \Psi_E^2 &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (1111\bar{2}\bar{2}), & \Psi_{F_2}^3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (00001\bar{1}). \end{aligned} \quad (27.20)$$

Поправки к методу эффективной массы для основного состояния доноров в Si описываются в общем случае тремя константами: Δ_0 , определяющей понижение синглета A_1 , и константами Δ_2 и Δ_1 , определяющими расстояние от синглета A_1 до дублета E и триплета F_2 .

Экспериментальные исследования, в том числе и исследования оптических и парамагнитных спектров донорных центров в деформированных кристаллах, показывают, что для всех доноров в Si, за исключением Li, нижним является орбитальный синглет A_2 , при этом состояния E и F_2 практически имеют одну и ту же энергию, т. е. $\Delta_1 \approx \Delta_2$.

Энергия возбужденных состояний доноров в Si рассчитывалась Латтинжером и Коном [21.2]. Они использовали вариационный метод, исправленный с учетом точных значений энергии при $\gamma = 1$ и $\gamma = 0$, которые можно получить аналитически.

Результаты расчета для нескольких ближайших возбужденных состояний приведены в табл. 27.2, в которой указан также вид пробной функции.

Таблица 27.2

Состояние	Пробная функция	Si	
		$E_{\text{вар}}$	$E_{\text{испр}}$
1s	$c \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$	0,029	
2p ₀	$cz \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$	0,0107	0,0113
2s	$(c_1 + c_2 \rho^2 + c_3 z^2) \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$	0,0082	0,0088
2p _±	$cx \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$	0,0057	0,0059
3p ₀	$(c_1 + c_2 \rho^2 + c_3 z^2) z \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$	0,0052	0,0057

В приближении эффективной массы каждое состояние с $m = 0$ шестикратно вырождено, а каждое возбужденное состояние с $m \neq 0$ имеет 12-кратное вырождение. Используя формулу (27.11), легко убедиться, что при учете химического сдвига вырожденные состояния будут расщепляться по схеме:

$$\begin{aligned}
 m = 0: & \quad A_1 + E + F_2; \\
 m \neq 0, \text{ четное:} & \quad A_1 + A_2 + 2E + F_1 + F_2; \\
 m \text{ нечетное:} & \quad 2F_1 + 2F_2.
 \end{aligned} \tag{27.21}$$

Однако величина этого расщепления для возбужденных состояний, кроме, может быть, состояния 2s, очень мала, так что его практически можно не учитывать. Согласно оценкам [21.12] для состояния 2s в Si разница энергий однократного состояния A_1 и пятикратного $E + F_2$ порядка 0,14—0,12 мэв.

В Ge минимумы зоны проводимости находятся на осях третьего порядка на границе зоны Бриллюэна. Значения компонент тензора эффективной массы $m_{\parallel}/m_0 = 1,4$, $m_{\perp}/m_0 = 0,083$ и диэлектрической постоянной $\kappa = 16$ дают для энергии основного состояния в методе эффективной массы $E_0 = 0,008$ эв. Экспериментальные значения E приведены в табл. 27.1. Видно, что для Ge метод эффективной массы дает более близкое совпадение с экспериментальными значениями, чем для Si, что связано с тем, что донорные центры в Ge являются более «мелкими». В приближении эффективной массы основное состояние примесного центра в Ge является четырехкратно вырожденным.

Химический сдвиг приводит к расщеплению вырожденного состояния на синглет A_1 и трехкратно вырожденное состояние F_2 , которым в базисе функций (27.3) с экстремумами на осях $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$ соответствуют волновые функции

$$\begin{aligned}\Psi_{A_1} &= \frac{1}{2}(1111); \\ \Psi_{F_2}^1 &= \frac{1}{2}(11\bar{1}\bar{1}), \quad \Psi_{F_2}^2 = \frac{1}{2}(1\bar{1}1\bar{1}), \quad \Psi_{F_2}^3 = \frac{1}{2}(1\bar{1}\bar{1}1).\end{aligned}\quad (27.22)$$

Приведенная выше классификация термов, произошедших из основного $1s$ состояния для Ge и Si, не учитывает спин-орбитального взаимодействия, и поэтому каждое из полученных выше состояний имеет дополнительное двукратное вырождение по спину. При учете спина эти представления переходят в:

$$A_1 \rightarrow E'_1(\Gamma_6), \quad E \rightarrow G'(\Gamma_8), \quad F_2 \rightarrow E'_2(\Gamma_7) + G'(\Gamma_8).$$

Поэтому в результате спин-орбитального взаимодействия шестикратно вырожденное (с учетом спина) состояние F_2 расщепляется на двукратно и четырехкратно вырожденные состояния E'_2 и G' .

Вырожденная зона. Рассмотрим структуру мелкого примесного центра в вырожденной зоне типа валентной зоны Ge и Si, в которой волновые функции в точке экстремума преобразуются по представлению Γ_8^+ . Поскольку в Ge величина спин-орбитального расщепления валентной зоны, равная $0,29 \text{ эВ}$, значительно превосходит энергию ионизации акцепторов, то это приближение является для Ge достаточно хорошим. Волновые функции f мелкого акцепторного центра определяются системой уравнений (27.1) с матрицей \mathcal{H} , приведенной в (24.12).

Решение системы (27.1) для Ge в явном виде получить не удастся, поэтому и здесь для отыскания волновых функций и энергии E_0 основного состояния используется вариационный метод. При этом вид пробных функций не является произвольным, а должен удовлетворять определенным условиям, накладываемым требованиями симметрии.

Для функций основного состояния мелкого акцепторного центра в зоне Γ_8^\pm (или Γ_8), преобразующихся также по представлению Γ_8^\pm (Γ_8), из (27.9) следует, что функции f преобразуются по представлениям

$$\Gamma_8^\pm \times \Gamma_8^\pm = 2\Gamma_{15}^+ + 2\Gamma_{25}^+ + \Gamma_{12}^+ + \Gamma_2^+ + \Gamma_1^+.$$

Функции f , преобразующиеся по этим представлениям, могут быть выбраны в виде соответствующих кубических гармоник, построенных из гармонических полиномов степени l , умноженных на экспоненциальные множители вида e^{-r/r_l} . При этом каждая кубическая гармоника, преобразующаяся по заданному представлению кубической группы, может быть построена из

гармонических полиномов, соответствующих различным значениям l . Однако гармоники с большим l дают меньший вклад в энергию основного состояния, так как соответствующие им функции быстро обращаются в нуль при $z = 0$, поэтому с целью уменьшения объема вычислений можно ограничиться гармониками с малыми l . Шехтер [21.4] в вариационных вычислениях для функций основного состояния ограничился гармониками с $l \leq 2$, т. е. функциями s - и d -типа, преобразующимися по представлениям Γ_1^+ ($l=0$), Γ_{12}^+ ($l=2$), Γ_{25}^+ ($l=2$).

Исходя из выбранных кубических гармоник, при помощи проекционных операторов можно построить пробные функции примесного центра f , преобразующиеся по представлению Γ_8^- :

$$f_1 = c_1 \Phi_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \Phi_2 \begin{vmatrix} \chi_1 \\ 0 \\ -\chi_2 \\ 0 \end{vmatrix} + c_3 \Phi_3 \begin{vmatrix} 0 \\ (i/\sqrt{3})(\epsilon_2 + i\epsilon_1) \\ i\epsilon_3/\sqrt{3} \\ 0 \end{vmatrix} + c_4 \Phi_4 \begin{vmatrix} 0 \\ (2/\sqrt{15})(\epsilon_1 - i\epsilon_2) \\ (1/\sqrt{15})i\epsilon_3 \\ -(1/\sqrt{5})(\epsilon_1 + i\epsilon_2) \end{vmatrix}, \quad (27.23)$$

$$f_2 = c_1 \Phi_1 \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \Phi_2 \begin{vmatrix} 0 \\ -\chi_1 \\ 0 \\ -\chi_2 \end{vmatrix} + c_3 \Phi_3 \begin{vmatrix} -(\epsilon_1 + i\epsilon_2)/\sqrt{3} \\ 0 \\ 0 \\ i\epsilon_3/\sqrt{3} \end{vmatrix} + c_4 \Phi_4 \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ -(1/\sqrt{5})(\epsilon_1 - i\epsilon_2) \\ -i\sqrt{3/5}\epsilon_3 \end{vmatrix},$$

где

$$\left. \begin{aligned} \chi_1 &= z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \\ \chi_2 &= \frac{\sqrt{3}}{2}(x^2 - y^2) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \epsilon_1 &= yz \\ \epsilon_2 &= xz \\ \epsilon_3 &= xy \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} \chi_1 \\ \chi_2 \end{aligned}} \right\} \Gamma_{12}^+, \Gamma_{25}^+, \quad (27.24)$$

$$\Phi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r/r_1} r_1^{-3/2}, \quad \Phi_2 = \frac{e^{-r/r_2} r_2^{-7/2}}{3\sqrt{\pi}},$$

$$\Phi_3 = e^{-r/r_2} r_2^{-7/2} \sqrt{\frac{2}{3\pi}}, \quad \Phi_4 = e^{-r/r_3} r_3^{-7/2} \sqrt{\frac{2}{3\pi}},$$

а c_1, c_2, c_3 и c_4 — численные коэффициенты, удовлетворяющие условию нормировки $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 1$. Функции f_4 и f_3 являются крамерово сопряженными по отношению к f_1 и f_2 , при этом следует иметь в виду преобразования (24.18) функций дна зоны при инверсии времени. Вариационными параметрами при таких пробных функциях являются $r_1, r_2, r_3, c_1, c_2, c_3$ и c_4 .

В работе [21.4] используются «укороченные» функции (27.23), т. е. полагается $c_4 = 0$. Вариационные расчеты для Ge при значениях зонных параметров $A = -13,2 \hbar^2/2m_0$, $B = -8,9 \hbar^2/2m_0$, $C = 12,5 \hbar^2/2m_0$ дают $E_0 = 0,008$ эв. Вариационные параметры приведены в табл. 27.3.

Таблица 27.3

	$E, \text{эв}$	$r_1, \text{Å}$	$r_2, \text{Å}$	c_1	c_2	c_3
Ge	0,0088	44,0	34,4	0,86	-0,28	0,43
Si	0,031	17,71	13,21	0,92	-0,14	0,32

Экспериментальные значения энергии ионизации для акцепторов в Ge приведены в табл. 27.4.

Таблица 27.4

Акцептор	Энергия ионизации, эв		Акцептор	Энергия ионизации, эв	
	Ge	Si		Ge	Si
B	0,104	0,045	Ga	0,0108	0,065
Al	0,0102	0,057	In	0,112	0,16

Видно, что в Ge для всех акцепторов, кроме In, метод эффективной массы дает близкую к экспериментальному значению величину энергии ионизации.

Аналогичные расчеты для Si при использовании значений зонных параметров $A = -4,04 \hbar^2/2m_0$, $B = -1,24 \hbar^2/2m_0$, $C = 4,0 \hbar^2/2m_0$ дают $E_0 = 0,031$. Вариационные параметры и экспериментальные значения энергии ионизации акцепторов приведены в таблицах 27.3—27.5.

В Si величина энергии ионизации акцепторных примесей порядка или больше величины спин-орбитального расщепления валентной зоны $\Delta = 0,04$ эв, поэтому для Si использованное выше приближение $\Delta \gg E_0$ несправедливо.

Шехтер [21.4] произвел расчет энергии ионизации акцепторного центра в противоположном предельном случае равного нулю спин-орбитального расщепления, т. е. для зоны Γ_{15} . Пробные волновые функции, преобразующиеся по представлению Γ_{15} ,

выбирались в виде

$$f_1 = c_1 \Phi_1(r) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \Phi_2(r) \begin{vmatrix} \sqrt{3} \chi_2 - \chi_1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_3 \Phi_3(r) \begin{vmatrix} 0 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_2 \end{vmatrix},$$

$$f_2 = c_1 \Phi_1(r) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \Phi_2(r) \begin{vmatrix} 0 \\ -(\chi_1 + \sqrt{3} \chi_2) \\ 0 \end{vmatrix} + c_3 \Phi_3(r) \begin{vmatrix} \epsilon_3 \\ 0 \\ \epsilon_1 \end{vmatrix}, \quad (27.25)$$

$$f_3 = c_1 \Phi_2(r) \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} + c_2 \Phi_2(r) \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\chi_1 \end{vmatrix} + c_3 \Phi_3(r) \begin{vmatrix} \epsilon_2 \\ \epsilon_1 \\ 0 \end{vmatrix},$$

где

$$\Phi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r/r_1} r_1^{-7/2}, \quad \Phi_2(r) = \frac{e^{-r/r_2} r_2^{-7/2}}{3\sqrt{2\pi}}, \quad \Phi_3(r) = \frac{e^{-r/r_2} r_2^{-7/2}}{\sqrt{3\pi}}, \quad (27.26)$$

а коэффициенты c_1 , c_2 и c_3 удовлетворяют условию нормировки $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1$. В табл. 27.5 приведены вариационные расчеты для Si при указанных выше значениях зонных параметров для случая $\Delta = 0$.

Таблица 27.5

$B > 0$						$B < 0$					
$E, эв$	$r_1, \text{Å}$	$r_2, \text{Å}$	c_1	c_2	c_3	$E, эв$	$r_1, \text{Å}$	$r_2, \text{Å}$	c_1	c_2	c_3
0,054	9,12	7,09	0,83	-0,33	0,42	0,035	15,61	12,0	0,93	0,10	0,32

Расчеты показывают, что в Si, где примесные центры являются более глубокими, метод эффективной массы хотя и дает правильный порядок величины для энергии ионизации акцепторов, однако приводит к численным значениям, отличающимся от экспериментальных данных.

Возбужденные состояния акцепторов в приближении эффективной массы также характеризуются неприводимыми представлениями группы O_h , т. е. они могут преобразовываться по представлениям Γ_6^\pm , Γ_7^\pm и Γ_8^\pm . При этом состояния Γ_6^\pm , Γ_7^\pm являются крамеровскими дублетами, а Γ_8^\pm четырехкратно вырождены.

При $B = 0$ и $D = 0$ оператор энергии в методе эффективной массы (24.12) обладал бы сферической симметрией, и плавные функции акцепторного центра в зоне Γ_8 соответствовали бы состояниям кулоновского центра с массой $m^* = \hbar^2/2A$, при этом каждое состояние имело бы еще дополнительное четырехкратное вырождение вследствие вырождения валентной зоны.

При $B = D/\sqrt{3}$, т. е. при $\gamma_2 = \gamma_3$, гамильтониан (27.1) с $\mathcal{H}(k)$, определяемым (24.2) или (26.12), сохраняет сферическую симметрию и коммутирует с оператором $F = L + J$, где L — оператор орбитального момента (4.4). При заданном F состояние Ψ_m^F вырождено по $m = -F, -F + 1, \dots, F$ и угловая часть представляет набор шаровых функций Y_m^l с $l = F \pm 3/2$ и $F \pm 1/2$ (при $F = 1/2$ $l = 1, 2$) [21.14].

При $B \neq D/\sqrt{3}$, когда симметрия понижается до кубической, это вырождение частично снимается. Характер этого расщепления легко может быть определен на основании теории групп.

Если B и D не малы, то каждое состояние Γ_i^\pm ($i = 6, 7, 8$) является смесью тех водородоподобных состояний с различными n и l , для которых произведение $\mathcal{D}_i^\pm \times \Gamma_8^\pm$ содержит Γ_i^\pm . Так, медленную функцию основного состояния в общем случае можно считать суперпозицией водородоподобных $1s, 3d, 5g$ и т. д. состояний, а ближайшие возбужденные состояния $\Gamma_8^-, \Gamma_7^-, \Gamma_6^-$ являются смесью состояний $2p, 4f$ и т. д.

Вариационные расчеты Шехтера [21.4] (см. формулы (27.23) и табл. 27.4) показывают, что вклад d -функции в волновую функцию основного состояния весьма существен.

Шехтер произвел вариационный расчет ближайших возбужденных состояний $\Gamma_8^-, \Gamma_6^-, \Gamma_7^-$. Для этих состояний он использовал плавную функцию p - и f -типа. Следует отметить, что пробные функции для возбужденных состояний, использованные Шехтером, обладают тем недостатком, что их радиальные части не имеют нулей кроме $r = 0$, в то время как водородоподобные p -, d - и f -функции имеют такие нули при $n_r > 1$.

В работе Мендельсона и Джеймса [21.5] угловая часть пробной функции записывалась в виде линейной комбинации сферических гармоник, обеспечивающей правильные свойства симметрии и данную четность функции, но радиальные функции и коэффициенты определялись из решения системы дифференциальных уравнений. При этом состояния примесного центра классифицируются, кроме индекса представления и четности, также и числом нулей радиальной волновой функции.

Основное состояние Γ_8^+ , не имеющее нулей, $\Gamma_8^+(0)$, происходит из $1s$ - и $3d$ -функций водородоподобного центра. Энергия ионизации равна $0,0093 \text{ эв}^*$. Еще одно состояние $\Gamma_8^+(1)$, имеющее один нуль у радиальной функции, которое не рассматривалось

*) Мендельсон и Джеймс проводили вычисления, используя значения зонных параметров, полученные Левингером и Франклем [27.21]. Они отмечают, что при использовании зонных параметров Дрессельхауза, Киппа и Киттеля [19.1] разница в энергиях — порядка 1%, а разница в волновых функциях — порядка 4%.

Шехтером, происходит в основном из $2s$ - и $3d$ -водородоподобных состояний. Состояние $\Gamma_6^-(0)$ строится из $2p$ - и $4f$ -функций водородоподобного типа. Из Γ_7^- состояний Мендельсон и Джеймс рассмотрели состояние $\Gamma_7^-(0)$, которое, как и $\Gamma_6^-(0)$, происходит из $2p$ - и $4f$ -функций, и состояние $\Gamma_7^-(1)$, имеющее один нуль у радиальной функции, которое строится из состояний $3p$ и $5f$.

Мендельсон и Джеймс вычислили энергии нескольких состояний Γ_8^- . Два из них, обозначаемые ими $\Gamma_8^-(0, 1)$ и $\Gamma_8^-(0, 2)$, не имеют нулей у радиальной функции, но имеют различный вид угловых функций; их можно интерпретировать как две разные суперпозиции $2p$ - и $4f$ -функций водородоподобного спектра. Состояние $\Gamma_8^-(1)$ с одним нулем у радиальной функции и угловой частью, очень близкой к функции $\Gamma_8^-(0, 1)$, происходит из $3p$ - и $5f$ -состояний.

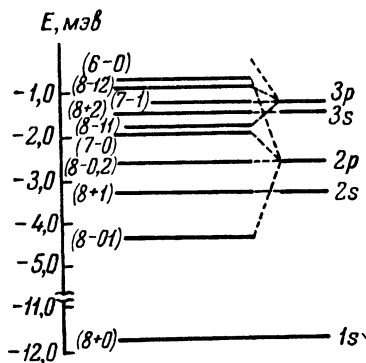


Рис. 29. Схема возбужденных состояний акцепторных центров в Ge.

На рис. 29 приведена схема расположения возбужденных состояний для мелкого акцепторного центра In в Ge, построенная по экспериментальным данным [41.6]. Эти данные находятся в хорошем согласии с теоретическими расчетами [21.5].

Рассмотрим асимптотическое поведение волновых функций мелкого примесного центра на больших расстояниях от ядра примеси. Будем искать асимптотику волновой функции f в виде $f \sim e^{-kr}$. Тогда из уравнения (27.15) для эллипсоидальных поверхностей постоянной энергии получим связь между k и энергией связанного состояния $E < 0$ в зависимости от направления r :

$$k = \sqrt{-\frac{2E}{\hbar^2} (m_{\perp} (n_x^2 + n_y^2) + m_{\parallel} n_z^2)}, \quad \text{где } n_i = r_i/r. \quad (27.27)$$

Таким образом, асимптотика волновой функции анизотропна: волновая функция, согласно (27.27), наиболее далеко простирается в направлении наименьшей эффективной массы. Отметим, что асимптотический вид волновой функции по форме совпадает с асимптотикой вариационной функции, но отличается от нее заменой a_{\parallel}^{-2} и a_{\perp}^{-2} на $-2m_{\parallel}E/\hbar^2$ и $-2m_{\perp}E/\hbar^2$ соответственно.

Несколько сложнее обстоит дело в случае вырожденной зоны. Мы рассмотрим здесь асимптотическое поведение акцепторных состояний в Ge и Si, т. е. в случае зоны Γ_8 . Если искать асимптотическое решение уравнения метода эффективной массы (27.1)

в форме

$$\mathbf{f} \sim \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} e^{-kr}, \quad (27.28)$$

то для коэффициентов c_s получим однородную систему

$$\sum_s \mathcal{H}_{is}(k^2 n_\alpha n_\beta) c_s = E c_i, \quad (27.29)$$

где матрица $\mathcal{H}_{is}(k^2 n_\alpha n_\beta)$ совпадает с матрицей (24.12), если заменить в ней $k_\alpha k_\beta$ на $k^2 n_\alpha n_\beta$. Условие разрешимости системы

$$|\mathcal{H} - EI| = 0 \quad (27.29a)$$

дает зависимость k^2 от E , подобную (24.13a):

$$k^2 (|A| \pm \sqrt{B^2(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4) + C^2(n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2)}) = -E. \quad (27.30)$$

Уравнение (27.29a) имеет два корня (27.30), отвечающие двум ветвям спектра дырок. Это означает, что асимптотическое поведение волновой функции определяется двумя слагаемыми вида (27.28) с разными величинами k_1, k_2 , удовлетворяющими уравнению (27.30), и с разными коэффициентами c_i и c'_i , которые по отдельности удовлетворяют уравнению (27.29) с $k = k_1$ и $k = k_2$ соответственно. Поскольку для уровней Γ_8 имеется четырехкратное вырождение, то имеются четыре функции вида (27.28), которые попарно крамеровсо сопряжены. Как следует из (27.30), асимптотическое поведение волновой функции существенным образом зависит от направления и повторяет вид поверхности постоянной энергии дырок в \mathbf{k} -пространстве. Коэффициенты c_i и c'_i также зависят от n_α и определяются формулами (24.19), если в них заменить k_α на kn_α . На больших расстояниях «выживает» только одна экспонента, соответствующая зоне легких дырок.

Таким образом, асимптотическое поведение волновых функций мелкого примесного центра в вырожденной зоне определяется спектром легких носителей, хотя в энергию эта ветвь спектра может давать и незначительный вклад. Поскольку отношение масс тяжелых и легких дырок может быть весьма значительным, то учет этого обстоятельства существен для различных эффектов, которые определяются поведением волновых функций примесного центра на больших расстояниях.

Поправки к методу эффективной массы. Рассмотрим теперь поправки к гамильтониану (27.2), связанные с учетом членов более высокого порядка по \mathbf{k} , а также с учетом матричных элементов потенциала $U_{\mathbf{k}}$ с большим $k \approx b_M$, опущенных в (22.8).

Первые слагаемые приводят к поправкам порядка E_0^2/E_g , которые могут быть существенны для сравнительно глубоких центров, вторые слагаемые ответственны за химический сдвиг.

Для расчета поправок к энергии порядка E_0^2/E_g в уравнениях (22.15) метода эффективной массы надо сохранить члены четвертого порядка по \mathbf{k} , которые легко получить обычным k_p -методом или методом инвариантов*), а также учесть поправки к кулоновскому потенциалу ΔU , появляющиеся в третьем приближении теории возмущений при учете членов, квадратичных по $\mathcal{H}_2 = \hbar(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi})/m$ и линейных по $\mathcal{H}_1 = -U(\mathbf{r})$. Учитывая, что согласно (22.10б) и (22.10в) оператор \mathcal{H}_2 диагонален по \mathbf{k} , а \mathcal{H}_1 диагонален по n , в соответствии с общей формулой (15.47) получим для поправки к потенциалу ΔU следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Delta U_{m'k', mk} &= -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{s\alpha\beta} \frac{\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta}{(E_s - E_m)^2} U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} (k'_\alpha k'_\beta - 2k'_\alpha k_\beta + k_\alpha k_\beta) = \\ &= -\left[\sum_{\alpha\beta} (k' - k)_\alpha (k' - k)_\beta G_{m'm}^{\alpha\beta} - ([\mathbf{k}'\mathbf{k}] \mathbf{g}_{m'm}) \right] U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (27.31)$$

где

$$G_{m'm}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_s \frac{[\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta]}{(E_s - E_m)^2} = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_s \frac{\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta + \pi_{m's}^\beta \pi_{sm}^\alpha}{(E_s - E_m)^2}, \quad (27.32)$$

$$g_{m'm}^\gamma = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{s\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta\gamma} \frac{\pi_{m's}^\alpha \pi_{sm}^\beta}{(E_s - E_m)^2} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\gamma s} \frac{\pi_{m's}^{\gamma+1} \pi_{sm}^{\gamma+2} - \pi_{m's}^{\gamma+2} \pi_{sm}^{\gamma+1}}{(E_s - E_m)^2}, \quad (27.33)$$

$\delta_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор. Для того чтобы найти оператор ΔU в координатном представлении, надо в соответствии с (22.14а) умножить ΔU на $e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{r}}$ и просуммировать по $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ при фиксированном векторе \mathbf{k} , который затем заменяется на оператор $\mathbf{k} = -i\nabla$. В результате первое слагаемое в (27.31) дает

$$\Delta U_{m'm}^1 = - \sum_{\alpha\beta} G_{m'm}^{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}} q_\alpha q_\beta U_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \sum_{\alpha\beta} G_{m'm}^{\alpha\beta} \left(\frac{\partial}{\partial r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta} U(\mathbf{r}) \right).$$

При вычислении этого слагаемого надо иметь в виду, что

$$\nabla^2 U(\mathbf{r}) = \frac{4\pi Ze^2}{x} \delta(\mathbf{r})$$

сингулярно при $\mathbf{r} = 0$, поэтому соответствующий член надо выделить отдельно. В результате получим

$$\Delta U_{m'm}^1 = \left[\sum_{\alpha\beta} \left(G_{m'm}^{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \text{Sp } G_{m'm} \delta_{\alpha\beta} \right) \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} + \frac{1}{3} \text{Sp } G_{m'm} \nabla^2 \right] U(\mathbf{r}).$$

*) При отсутствии в группе $G_{\mathbf{k}_0}$ инверсии оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ будет также включать и члены третьего порядка по \mathbf{k} .

Подставив значение $\nabla^2 U$ и выполнив дифференцирование в первом члене, окончательно найдем

$$\Delta U_{m'm}^1 = -\frac{Ze^2}{\kappa} \left[\sum_{\alpha\beta} G_{m'm}^{\alpha\beta} \left(\frac{3r_\alpha r_\beta}{r^5} - \frac{1}{r^3} \delta_{\alpha\beta} \right) - \frac{4\pi}{3} \text{Sp } G_{m'm} \delta(r) \right], \quad (27.34)$$

где

$$\text{Sp } G_{m'm} = \sum_{\alpha} G_{m'm}^{\alpha\alpha}.$$

При вычислении второго слагаемого воспользуемся тем, что $[k'k] = [qk]$ и, следовательно,

$$\Delta U_{m'm}^2 = \sum_q ([qk] g_{m'm}) U_q e^{iqr} = -([\nabla U \cdot \nabla] g_{m'm}) = -\frac{Ze^2}{\kappa r^3} ([r\nabla] g_{m'm}).$$

Следовательно,

$$\Delta U_{m'm}^2 = -i \frac{Ze^2}{\kappa r^3} (\mathbf{M} g_{m'm}), \quad (27.35)$$

где $\mathbf{M} = -i[r\nabla]$ — оператор момента количества движения.

Первый член ΔU^1 соответствует эффективному диполь-дипольному и контактному взаимодействию. Определяющая его матрица $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ подобна матрице $\mathcal{H}^{\alpha\beta}$ (21.19), определяющей спектр, имеет такое же число линейно независимых компонент и формально может быть получена ее дифференцированием:

$$G_{m'm}^{\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{H}_{m'm}^{\alpha\beta}}{\partial E_m}. \quad (27.36)$$

Второй член ΔU^2 описывает взаимодействие орбитальных моментов медленных и быстрых функций. Это слагаемое вызывает расщепление терма в тех случаях, когда представление $\Gamma_f \times \mathcal{D}_{1/2}$ с учетом спина приводимо. Определяющая его матрица \mathbf{g}^y подобна матрице \mathbf{L}^y (22.22), определяющей эффективный магнитный момент, и равна

$$g_{m'm}^y = -\frac{i\hbar^2}{m} \frac{\partial L_{m'm}^y}{\partial E_m}. \quad (27.37)$$

В простейшем случае двухзонной сферической модели в суммах (27.32) и (27.33) имеется один междузонный член с $s = n$ и индексы m и n принимают два значения $m = 1, 2$ и $n = 1, 2$, соответствующие спину $\pm 1/2$. В этой модели, согласно (26.34),

$$E_m - E_n = E_g = 2m^* s^2, \quad \pi_{mn} = m^* s \sigma_{mn}. \quad (27.38)$$

В этом случае

$$G_{m'm}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 s^2}{E_g^2} \sum_n (\sigma_{m'n}^\alpha \sigma_{nm}^\beta) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 s^2}{E_g^2} \delta_{m'm} \delta_{\alpha\beta}, \quad (27.39a)$$

$$g_{m'm}^\gamma = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 s^2}{E_g^2} \sum_n \delta_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{m'n}^\alpha \sigma_{nm}^\beta = i \frac{\hbar^2 s^2}{E_g^2} \sigma_{m'm}^\gamma \quad (27.39b)$$

и, следовательно,

$$\Delta U^1 = \frac{2\pi Z e^2 \hbar^2 s^2}{E_g^2} \delta(\mathbf{r}), \quad (27.40)$$

$$\Delta U^2 = \frac{Z e^2 \hbar^2 s^2}{E_g^2} \frac{1}{r^3} (\sigma \mathbf{M}). \quad (27.41)$$

Члены четвертого порядка по \mathbf{k} в \mathcal{H} , которые дают такого же порядка вклад в энергию, что и ΔU , в этой модели имеют вид

$$\Delta \mathcal{H} = - \frac{1}{E_g} \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} \right)^2. \quad (27.42)$$

Соответствующие поправки к энергии основного водородо-подобного состояния $f_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$ за счет ΔU^1 и $\Delta \mathcal{H}$ равны соответственно $4E_0^2/E_g$ и $-5E_0^2/E_g$, так что результирующая поправка равна $-E_0/E_g^*$.

При учете поправок, связанных с короткодействующей частью потенциала $U(\mathbf{r})$, в (22.8) достаточно сохранить лишь внутризонные члены

$$U_{m'k', m\mathbf{k}} = \langle \varphi_{m'k'} | U(\mathbf{r}) | \varphi_{m\mathbf{k}} \rangle = \mathcal{V} \sum_M U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{b}_M} B_M^{m'm}, \quad (27.43)$$

так как междузонные члены приводят к поправкам, имеющим дополнительный малый параметр E_0/E_g . Из этого матричного элемента (27.43) мы сохраняли в (27.2) лишь слагаемое с $M=0$. Следовательно, добавочное слагаемое

$$\begin{aligned} \delta U_{m'k', m\mathbf{k}} &= \mathcal{V} \sum_{M \neq 0} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{b}_M} B_M^{m'm} \approx \mathcal{V} \sum_{M \neq 0} U_{\mathbf{b}_M} B_M^{m'm} = \\ &= \mathcal{V} \sum_M U_{\mathbf{b}_M} B_M^{m'm} - U_0 \delta_{m'm}. \end{aligned} \quad (27.44)$$

*) Так как для этой модели двухзонное уравнение (26.34) совпадает по форме с уравнением Дирака, отличаясь от него лишь константами, то в этом случае задача о примесном центре может быть решена точно в двухзонном приближении, аналогично задаче о спектре атома водорода в модели Дирака [21.9]. Точное выражение для энергии основного состояния

$$E_0 = m^* s^2 \left\{ \left[1 - \left(\frac{Z e^2}{\hbar s} \right)^2 \right]^{1/2} - 1 \right\}.$$

Здесь мы пренебрегли малой величиной $k' - k$ по сравнению с векторами обратной решетки b_M , а также учли, что

$$\mathcal{V} B_0^{m'm} U_0 = U_0 \delta_{m'm} = \frac{1}{\mathcal{V}} \delta_{m'm} \int U(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Первое слагаемое в (27.44), как видно из (27.43), равно $U_{m'k_0, n'k_0} = U_{m'n'}$ и, следовательно,

$$\begin{aligned} \delta U_{m'k, mk} &= U_{m'm} - U_0 \delta_{m'm} = \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int U(\mathbf{r}) \psi_{m'k_0}^* \psi_{mk_0} d\mathbf{x} - \delta_{m'm} \frac{1}{\mathcal{V}} \int U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int U(\mathbf{r}) [u_{m'k_0}^* u_{mk_0} - \delta_{m'm}] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (27.45)$$

Для перехода к \mathbf{r} -представлению надо, как и в (22.14), умножить (27.45) на $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ и просуммировать по \mathbf{q} . Учитывая, что $\delta U_{m'k', mk}$ не зависит от \mathbf{k} и \mathbf{k}' , т. е. от \mathbf{q} , а $\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \mathcal{V} \delta(\mathbf{r})$,

так как $\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \mathcal{V} \delta_{\mathbf{q}0}$, найдем, что

$$\delta U_{m'm}(\mathbf{r}) = \mathcal{V} (U_{m'm} - U_0 \delta_{m'm}) \delta(\mathbf{r}), \quad (27.46)$$

и, следовательно, соответствующий матричный элемент этой матрицы на функциях f_m^s (27.1) равен

$$\delta U_{s's} = \mathcal{V} \sum_{mm'} (U_{m'm} - U_0 \delta_{m'm}) f_{m'}^{*s'}(0) f_m^s(0). \quad (27.47)$$

Очевидно, что основной вклад в матричный элемент (27.45) вносит интегрирование по ячейке, находящейся вблизи примесного центра. Учет поправок (27.47) приводит к изменению энергии, а также может привести к дополнительному расщеплению вырожденного уровня в данном экстремуме k_0 . Оператор δU имеет группу симметрии $\bar{G} = G_i \cap G_{k_0}$, которая в общем случае ниже G_{k_0} . В частности, она не содержит нетривиальных трансляций, так как G_i их не содержит. Если представление $\mathcal{D}_\mu^{k_0}$ группы G_{k_0} , по которому преобразуются волновые функции ψ_{mk_0} , в группе \bar{G} приводимо, то матрица δU (27.47) не кратна единичной матрице, и в этом случае возмущение (27.46) приводит к расщеплению термов.

Для акцепторных центров в Ge и Si поправки к методу эффективной массы не приводят к какому-либо расщеплению четырехкратно вырожденного основного состояния, так как кратности вырождения уровней для симметрии $G_0 = O_h$ и $\bar{G} = T_d$ совпадают.

При учете поправок к методу эффективной массы волновые функции примесного центра уже не обладают определенной четностью, так как группа T_d не содержит инверсию, поэтому

за счет этих поправок в акцепторных центрах могут наблюдаться некоторые эффекты, которые из-за наличия инверсии в группе O_h в приближении эффективной массы отсутствуют [40.4].

Если зона имеет несколько эквивалентных экстремумов, находящихся в точках \mathbf{k}_{0i} , то наряду с «внутризонными» членами (27.43) надо учитывать матричные элементы между функциями, относящимися к разным экстремумам:

$$\begin{aligned} \delta U_{m'k_{0i}, mk_{0j}} &= \mathcal{V} \sum_M B_M^{m'_i m_j} U_{\mathbf{k}_{0i} - \mathbf{k}_{0j} + \mathbf{b}_M} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \psi_{m'k_{0i}}^* U(\mathbf{r}) \psi_{mk_{0j}} d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int u_{m'k_{0i}}^*(\mathbf{x}) U(\mathbf{r}) u_{mk_{0j}}(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}_{0j} - \mathbf{k}_{0i}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (27.48)$$

Здесь, как и в (27.44), мы пренебрегаем малой разностью векторов $\mathbf{k}'_i - \mathbf{k}_j$, отсчитанных от соответствующих экстремумов \mathbf{k}_{0i} и \mathbf{k}_{0j} , по сравнению с величиной $\mathbf{k}_{0i} - \mathbf{k}_{0j} + \mathbf{b}_M$.

В \mathbf{r} -представлении соответствующий оператор имеет вид, подобный (27.46):

$$\delta U_{m'_i m_j}(\mathbf{r}) = \mathcal{V} U_{m'k_{0i}, mk_{0j}} \delta(\mathbf{r}). \quad (27.49)$$

Этот оператор определяет химический сдвиг в многодолинных полупроводниках и приводит к снятию многодолинного вырождения. Число линейно независимых компонент этой матрицы, так же как и матрицы (27.46), можно легко определить, используя общие формулы § 19, имея в виду, что потенциал $U(\mathbf{r})$ преобразуется по единичному представлению группы симметрии примесного центра G_i . Из формулы (27.49) следует, что для того, чтобы выяснить характер расщепления многодолинного вырождения примесного центра, нужно согласно общим формулам § 19 разложить представление пространственной группы со звездой $\{\mathbf{k}_0\}$, по которому преобразуются волновые функции $\psi_{m\mathbf{k}_{0i}}$, по неприводимым представлениям группы G_i , что соответствует формулам (27.11), (27.12).

Экситоны

Мелкие экситоны, т. е. экситоны, энергия связи которых мала по сравнению с шириной запрещенной зоны, можно рассматривать как связанные состояния электрона и дырки*). Уравнение, определяющее волновые функции и спектр таких экситонов, подобно соответствующему уравнению для примесного центра. Для того чтобы получить это уравнение, выведем сперва гамильтониан, описывающий в приближении эффективной массы взаимодействие двух электронов, один из которых

*) Такая модель экситона была предложена Ванье и Моттом, поэтому мелкие экситоны называют экситонами Ванье — Мотта.

находится в зоне проводимости m вблизи экстремума \mathbf{k}_c , а другой — в валентной зоне n с экстремумом \mathbf{k}_v , причем каждое из состояний может быть вырожденным, а разность энергий $E_m(\mathbf{k}_c) - E_n(\mathbf{k}_v) = E_m^0 - E_n^0$ существенно превышает энергию связи экситона.

Исходное уравнение Шредингера, описывающее систему из двух электронов, находящихся в среде с диэлектрической проницаемостью κ , имеет вид

$$\{\mathcal{H}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) - E\} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \\ = [(\mathcal{H}_0(\mathbf{x}_1) + \mathcal{H}_0(\mathbf{x}_2) + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - E) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 0. \quad (27.50)$$

Здесь $\mathcal{H}_0(\mathbf{x})$ определяется выражением (22.1а), а $U(\mathbf{r}) = e^2/\kappa r$.

Рассмотрим сперва прямой экситон, когда $\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_c = \mathbf{k}_0$. Волновую функцию $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ для двух электронов запишем в виде, подобном (22.2), (22.5):

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{st} F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_{s\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}_1) \Psi_{t\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}_2) = \\ = \sum_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} \Phi_{s\mathbf{k}_1}(\mathbf{x}_1) \Phi_{t\mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_2). \quad (27.51)$$

Здесь

$$F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\gamma^0} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2)}, \quad (27.51a)$$

$$C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} = \frac{1}{\gamma^0} \int F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (27.51б)$$

Волновая функция $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ должна быть антисимметричной, так как электроны подчиняются принципу Паули, т. е. $\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = -\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$. Отсюда следует, что

$$C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} = -C_{t\mathbf{k}_2, s\mathbf{k}_1} \quad \text{или} \quad F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -F_{ts}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (27.52)$$

Если подставить функцию (27.51) в уравнение (27.50), умножить его слева на $\Phi_{s'\mathbf{k}'_1}^*(\mathbf{x}_1) \Phi_{t'\mathbf{k}'_2}^*(\mathbf{x}_2)$, проинтегрировать по $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ и просуммировать по спиновой переменной α , то в результате получим систему уравнений, подобную (22.11):

$$\sum_{s\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} [(E_{st}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - E) \delta_{ss'} \delta_{tt'} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_1} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2} + \\ + \mathcal{H}_{1\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2} \delta_{ss'} \delta_{tt'} + \mathcal{H}_{2s't'} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_1} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2}] C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} = 0. \quad (27.53)$$

Здесь, в отличие от (22.10), мы включили член $\hbar^2 k^2/2m$ в E^0 , т. е.

$$E_{st}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = E_{st}^0 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}, \quad (27.54)$$

где

$$E_{st}^0 = E_m^0 + E_n^0 = E_{m\mathbf{k}_0} + E_{n\mathbf{k}_0}.$$

При вычислении матричного элемента от кулоновского потенциала мы, как и в (22.8), (22.10б), в первом приближении оставляем в разложении

$$\sum_{\alpha} \psi_{s\mathbf{k}_0}^* \psi_{s'\mathbf{k}_0} = \mathcal{V} \sum_M B_M^{ss'} e^{-ibM^r},$$

где сумма по α означает суммирование по спиновым переменным, лишь члены с $M = 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{1s'k'_1, t'k'_2}^{sk_1, tk_2} &= \mathcal{V}^2 \sum_{ML} B_M^{s's} B_L^{t't} U_{k'_1 - k_1 + b_M} \delta_{k'_1 - k_1 + b_M, k_2 - k'_2 - b_L} \approx \\ &\approx \delta_{s's} \delta_{t't} U_{k'_1 - k_1} \delta_{k'_1 + k'_2, k_2 + k_1}. \end{aligned} \quad (27.55)$$

При этом мы учли, что здесь существенны лишь состояния с малыми k_1 и k_2 , так как рассматриваются экситоны большого радиуса, находящиеся вблизи экстремума экситонной зоны. Оператор \mathcal{H}_2 в (27.53) имеет вид, подобный (22.6), (22.10в):

$$\mathcal{H}_{2s'k'_1, t'k'_2}^{sk_1, tk_2} = \frac{\hbar}{m} [(\mathbf{k}_1 \pi_{s's}) \delta_{t't} + (\mathbf{k}_2 \pi_{t't}) \delta_{s's}] \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2}. \quad (27.56)$$

Далее, как и в § 22, надо вывести уравнение в методе эффективной массы, содержащее лишь функции $\tilde{C}_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}$, описывающие состояние, когда один электрон находится в зоне m , другой в зоне n , исключив остальные междузонные матричные элементы. Базисом такого «укороченного» уравнения являются $2N_m N_n$ функций $\psi_m(\mathbf{x}_1) \psi_n(\mathbf{x}_2)$ и $\psi_m(\mathbf{x}_2) \psi_n(\mathbf{x}_1)$. Здесь $\psi_n = \psi_{n\mathbf{k}_0}$, а N_m и N_n — кратности вырождения зон m и n в точке \mathbf{k}_0 . Исключив междузонные матричные элементы, получим систему уравнений для коэффициентов $\bar{C}_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}$ и $\bar{C}_{n\mathbf{k}_2, m\mathbf{k}_1}$, подобную (22.12):

$$\sum_{mn\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \bar{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ mk_1, nk_2}} \bar{C}_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} + \bar{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ nk_2, mk_1}} \bar{C}_{n\mathbf{k}_2, m\mathbf{k}_1} = E \bar{C}_{m'k'_1, n'k'_2},$$

которую, учитывая (27.52), можно переписать в виде

$$\sum_{mn\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \left(\bar{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ mk_1, nk_2}} - \bar{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ nk_2, mk_1}} \right) \bar{C}_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} = E \bar{C}_{m'k'_1, n'k'_2}. \quad (27.57)$$

При этом энергия E отсчитывается от $E_{mn}^0 = E_m^0 + E_n^0$.

Для коэффициентов $\bar{C}_{n\mathbf{k}_2, m\mathbf{k}_1}$ можно получить аналогичную систему уравнений, однако эти уравнения не являются независимыми, а следуют из (27.57), (27.52) и условия

$$\bar{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ mk_1, nk_2}} = \bar{\mathcal{H}}_{\substack{nk_2, mk_1 \\ n'k'_2, m'k'_1}},$$

которое является следствием симметрии исходного гамильтониана (27.50): $\mathcal{H}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathcal{H}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$. Поэтому достаточно рассматривать систему из $N_m \times N_n$ уравнений (27.57).

Используя общие формулы (15.47), можно найти из (27.55), (27.56) явные выражения для $\overline{\mathcal{H}}$ в требуемом приближении теории возмущений, аналогично тому, как это сделано в § 22. Если сохранить лишь члены первого и второго порядка, то

$$\overline{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ mk_1, nk_2}} = [\mathcal{H}(\mathbf{k}_1)_{m'm} \delta_{n'n} + \mathcal{H}(\mathbf{k}_2)_{n'n} \delta_{m'm}] \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} + \\ + U_{k'_1 - k_1} \delta_{k'_1 + k'_2, k_1 + k_2} \delta_{m'm} \delta_{n'n}, \quad (27.58)$$

где $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ определяется формулой (21.19), а $\overline{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ nk_2, mk_1}}^{(2)} = 0$.

В третьем приближении

$$\Delta U_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ mk_1, nk_2}} = \left(\Delta U_{\substack{m'k'_1 \\ mk_1}} \delta_{n'n} + \Delta U_{\substack{n'k'_2 \\ nk_2}} \delta_{m'm} \right) \delta_{k'_1 + k'_2, k_1 + k_2}; \quad (27.59)$$

здесь $\Delta U_{\substack{m'k' \\ mk}}$ определяется выражением (27.31), а

$$\overline{\mathcal{H}}_{\substack{m'k'_1, n'k'_2 \\ nk_2, mk_1}}^{(3)} = \sum_{\alpha\beta} Q_{nm}^{\alpha\beta} U_{k'_1 - k_2} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2)_\alpha (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2)_\beta \delta_{k'_1 + k'_2, k_1 + k_2}, \quad (27.60)$$

где

$$Q_{nm}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{\pi_{m'n}^\alpha \pi_{n'm}^\beta}{(E_m^0 - E_n^0)^2}. \quad (27.60a)$$

Для того чтобы перейти к \mathbf{r} -представлению, надо умножить уравнение (27.57) с гамильтонианом (27.58) — (27.60) на $\exp[i(\mathbf{k}'_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}'_2 \mathbf{r}_2)]$ и просуммировать по \mathbf{k}'_1 и \mathbf{k}'_2 . При этом, учитывая малость \mathbf{k} и \mathbf{k}' , можно, как и в (22.14), заменить суммирование по \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}'_1 и \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}'_2 отдельным суммированием по $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2$, а в последнем слагаемом, т. е. в (27.60), по $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2$, и далее использовать те же преобразования, что и при выводе уравнения (27.34). При этом последнее слагаемое (27.60) будет содержать сумму

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \overline{C}_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} \exp[i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1)] = F_{mn}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

в отличие от остальных слагаемых, содержащих $F_{mn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Поэтому оператор $\overline{\mathcal{H}}$ в \mathbf{r} -представлении с учетом (27.60) будет интегральным оператором и система уравнений для функций

$F_{mn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ будет иметь вид

$$\sum_{mn} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left\{ [\mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{k}_1) \delta_{n'n} + \mathcal{H}_{n'n}(\mathbf{k}_2) \delta_{m'm}] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) + U_{m'n'} \left(\begin{smallmatrix} \mathbf{r}'_1 & \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \end{smallmatrix} \right) - \mathcal{H}_{nm}^{\text{обм}} \left(\begin{smallmatrix} \mathbf{r}'_1 & \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \end{smallmatrix} \right) \right\} F_{mn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = EF_{m'n'}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2). \quad (27.61)$$

Здесь $\mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{k})$ и $\mathcal{H}_{n'n}(\mathbf{k})$ — матрицы (21.19), определяющие спектр вблизи экстремума каждой из зон, а

$$U_{m'n'} \left(\begin{smallmatrix} \mathbf{r}'_1 & \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \end{smallmatrix} \right) = [U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta_{m'm} \delta_{n'n} + \Delta U_{m'm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta_{n'n} + \Delta U_{n'n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta_{m'm}] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2), \quad (27.61a)$$

$$\mathcal{H}_{nm}^{\text{обм}} \left(\begin{smallmatrix} \mathbf{r}'_1 & \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \end{smallmatrix} \right) = - \sum_{\alpha\beta} Q_{m'n'}^{\alpha\beta} \frac{\partial^2 U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial r_{1\alpha} \partial r_{1\beta}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1). \quad (27.61b)$$

Оператор взаимодействия (27.61a) включает помимо кулоновского потенциала $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ поправки к этому потенциалу

$$\Delta U_{m'm}(\mathbf{r}) = \Delta U_{m'm}^1(\mathbf{r}) + \Delta U_{m'm}^2(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \Delta U_{n'n}(\mathbf{r}),$$

определяемые формулами (27.34) и (27.35) для каждой из зон, а последний член описывает обменное взаимодействие; здесь $Q_{m'n', nm}^{\alpha\beta}$ — матрица (27.60a).

Оператор (27.61) описывает взаимодействие двух электронов. Для того чтобы получить гамильтониан, описывающий взаимодействие электрона m и дырки n , надо, во-первых, изменить знак на обратный в слагаемом $\mathcal{H}_{n'n}(\mathbf{k}_2)$, определяющем энергию электрона в валентной зоне, и в операторах, определяющих взаимодействие электронов в разных зонах, так как энергия дырки равна с обратным знаком энергии недостающего электрона, а взаимодействие электрона с дыркой равно с обратным знаком энергии взаимодействия с недостающим электроном.

Далее надо иметь в виду, что если волновая функция кристалла, в котором имеется один электрон, в состоянии ψ_n соответствует представлению \mathcal{D} , то волновая функция кристалла с одной дыркой n , т. е. в состоянии, когда все уровни валентной зоны кроме n заполнены, соответствует представлению \mathcal{D}^* , т. е. преобразуется как $K\psi_n = \psi_{kn}$. Это видно из того, что состояние, в котором на уровне n имеются и электрон и дырка, т. е. вся зона заполнена, соответствует единичному представлению, а это представление содержится лишь в произведении $\mathcal{D} \times \mathcal{D}^*$. Поэтому, например, отсутствие электрона с волновым вектором \mathbf{k} и спином $+1/2$ означает наличие дырки с волновым вектором

$\mathbf{k}^h = -\mathbf{k}^e$ и спином $-1/2$. Так как рождение электрона означает уничтожение дырки и наоборот, то при переходе от электрона к дырке надо также изменить на обратный порядок индексов валентной зоны. В результате получим следующие соотношения, определяющие правила перехода от электрон-электронного к электрон-дырочному взаимодействию *):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n'n}^h(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) &= -\mathcal{H}_{KnKn'}^e(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2), \\ \mathcal{H}_{mn}^{eh}\left(\begin{matrix} \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \end{matrix}\right) &= -\mathcal{H}_{m'Kn}^{ee}\left(\begin{matrix} \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \end{matrix}\right). \end{aligned} \quad (27.62)$$

При этом надо учесть, что согласно (18.46) $p_{ns}^a = -p_{KsKn}^a$, поэтому для матрицы \mathcal{H} (21.19), так же как и для \mathbf{G}^{ab} (27.32), $\mathcal{H}_{KnKn'} = \mathcal{H}_{n'n}$, $G_{KnKn'}^{ab} = G_{n'n}^{ab}$, а для матрицы \mathbf{g} (27.33) $g_{KnKn'}^y = -g_{n'n}^y$ **). При этом слагаемое $\mathcal{H}_{n'n}^h(\mathbf{k}_2) = -\mathcal{H}_{KnKn'}^e(-\mathbf{k}_2) = -\mathcal{H}_{n'n}^e(\mathbf{k}_2)$ в (27.62) есть обычный гамильтониан, определяющий спектр дырок в приближении эффективной массы.

В результате указанных преобразований оператор взаимодействия электрон — дырка примет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mn}^{eh}\left(\begin{matrix} \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \end{matrix}\right) &= \left[\mathcal{H}_{m'm}^e(\mathbf{k}_1) \delta_{n'n} + \mathcal{H}_{n'n}^h(\mathbf{k}_2) \delta_{m'm} + \right. \\ &+ U^{eh}(\mathbf{r}) \delta_{m'm} \delta_{n'n} + \Delta U_{mn}^1{}_{m'n'}(\mathbf{r}) + \Delta U_{mn}^2{}_{m'n'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left. \right] \times \\ &\times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) + \Delta U_{mn}{}_{m'n'}\left(\begin{matrix} \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \end{matrix}\right). \end{aligned} \quad (27.63)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'm}^e(\mathbf{k}) &= \sum_{\alpha\beta} \mathcal{H}_{m'm}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta, \\ \mathcal{H}_{n'n}^h(\mathbf{k}) &= \sum_{\alpha\beta} -\mathcal{H}_{n'n}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta, \end{aligned} \quad (27.63a)$$

$$U^{eh}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\kappa r}, \quad \text{где } \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (27.63b)$$

*) Указанные правила перехода легко получить, если записать гамильтониан (27.61) в представлении вторичного квантования. Соответствующий вывод приведен в приложении к настоящему параграфу.

**) Символ $\mathcal{H}_{KnKn'}$ означает, что если в качестве базиса выбраны волновые функции дырок ψ_n^h , то матричные элементы \mathcal{H} надо вычислять на функциях $K\psi_n^h$.

$$\Delta U_{m'n}^1(r) = -\frac{e^2}{\kappa} \left\{ \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{3r_\alpha r_\beta}{r^5} - \frac{1}{r^3} \delta_{\alpha\beta} \right) \left(G_{m'm}^{\alpha\beta} \delta_{n'n} + G_{n'n}^{\alpha\beta} \delta_{m'm} \right) - \frac{4\pi}{3} \delta(r) [\text{Sp } G_{m'm} \delta_{n'n} + \text{Sp } G_{n'n} \delta_{m'm}] \right\}, \quad (27.63\text{В})$$

$$\Delta U_{m'n}^2(r_1, r_2) = -\frac{e^2}{\kappa r^3} \left[([r\nabla_{r_1}] \mathbf{g}_{m'm}) \delta_{n'n} - ([r\nabla_{r_2}] \mathbf{g}_{n'n}) \delta_{m'm} \right].$$

Последний оператор ΔU в (27.63) — нелокальный. Согласно (27.61б) и (27.62)

$$\begin{aligned} \Delta U_{m'n}^1(r_1, r_2) &= \mathcal{H}_{m'n}^{\text{обм}}(r_1, r_2) = \\ &= -\sum_{\alpha\beta} Q_{Kn'm}^{\alpha\beta} \frac{\partial^2 U(r_1 - r_2)}{\partial r_{1\alpha} \partial r_{1\beta}} \delta(r_1 - r_2) \delta(r'_1 - r'_2), \end{aligned} \quad (27.64)$$

где

$$Q_{Kn'm}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{\pi_{m'Kn'}^\alpha \pi_{Knm}^\beta}{(E_m^0 - E_n^0)^2}. \quad (27.65)$$

Отметим, что учет пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости κ приводит к поправкам к энергии экситона (а также и примесного центра) такого же порядка, что и $\Delta U^{1,2}$.

Удобно перейти от переменных r_1 и r_2 к переменным

$$r = r_1 - r_2, \quad \mathcal{R} = ar_1 + br_2. \quad (27.66)$$

Матрицы a и b могут быть выбраны произвольным образом, но так, чтобы они удовлетворяли условию $a + b = I$, с тем, чтобы якобиан преобразования $\left| \frac{\partial(r_1, r_2)}{\partial(r, \mathcal{R})} \right| = 1$. В новых переменных

$$k_1 = k + \tilde{a}\mathcal{K}, \quad k_2 = -k + \tilde{b}\mathcal{K}, \quad (27.66a)$$

где

$$k = -i\nabla_r, \quad \mathcal{K} = -i\nabla_{\mathcal{R}}.$$

При этом

$$\mathcal{K} = k_1 + k_2, \quad k = \tilde{b}k_1 - \tilde{a}k_2. \quad (27.66б)$$

Поэтому

$$k_1 r_1 + k_2 r_2 = kr + \mathcal{K}\mathcal{R}. \quad (27.66в)$$

В новых переменных (27.66) оператор (27.64) имеет вид

$$\Delta U_{m'n}^1 \begin{pmatrix} r' & \mathcal{R}' \\ r & \mathcal{R} \end{pmatrix} = -\sum_{\alpha\beta} Q_{Kn'm}^{\alpha\beta} \frac{\partial^2 U(\mathcal{R} - \mathcal{R}')}{\partial \mathcal{R}_\alpha \partial \mathcal{R}_\beta} \delta(r) \delta(r'). \quad (27.67)$$

Поскольку оператор (27.63) трансляционно-инвариантен по отношению к \mathcal{R} , то в методе эффективной массы волновую функцию экситона $F_{\mathcal{K}}^l(\mathbf{r}, \mathcal{R})$ можно записать в виде столбца:

$$F_{\mathcal{K}}^l(\mathbf{r}, \mathcal{R}) = \frac{1}{\sqrt{\gamma^{\rho}}} e^{i\mathcal{K}\mathcal{R}} \begin{pmatrix} f_{\mathcal{K}m_1n_1}^l \\ f_{\mathcal{K}m_1n_2}^l \\ \dots \\ f_{\mathcal{K}m_2n_1}^l \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (27.68)$$

Матричный элемент оператора (27.67), вычисленный на функциях (27.68), равен:

$$\Delta U_{i'j\mathcal{K}} = \frac{4\pi e^2}{\kappa} \sum_{\alpha\beta mnm'n'} Q_{m'Kn}^{\alpha\beta} \frac{\mathcal{K}_{\alpha}\mathcal{K}_{\beta}}{\mathcal{K}^2} f_{\mathcal{K}m'n'}^{*j'}(0) f_{\mathcal{K}mn}^i(0). \quad (27.69)$$

Заметим, что хотя последнее слагаемое возникло в результате учета обменного взаимодействия электронов в валентной зоне и зоне проводимости, оно описывает дальнедействующее взаимодействие электрона и дырки, которое можно рассматривать как результат виртуальной рекомбинации и генерации экситона [22.6, 22.8]. Поэтому в различных работах оно называется либо обменным, либо резонансным или аннигиляционным взаимодействием.

Из (27.69) видно, что величина ΔU существенно зависит от направления вектора \mathcal{K} . Если учесть поправки, связанные с короткодействующей частью потенциала $U(\mathbf{r})$, гамильтониан \mathcal{H} будет включать обменные члены, не зависящие от направления \mathcal{K} .

Учет короткодействующего потенциала. Для учета этих членов надо сохранить в (27.55) слагаемые с $M \neq 0$ и $L \neq 0$. Прежде всего рассмотрим не обменные члены. Пренебрегая в (27.55) зависимостью $U_{q_1+b_M}$ от малой величины $q_1 = k'_1 - k_1$ и учитывая, что при $q_1 \ll b_M$ и $q_2 = k'_2 - k_2 \ll b_L$

$$\delta_{b_M+q_1, -b_L-q_2} = \delta_{b_M, -b_L} \delta_{q_1, -q_2},$$

получим

$$\begin{aligned} \delta U_{m'k'_1, n'k'_2; mk_1, nk_2} &= \gamma^{\rho 2} \sum_{\substack{M \neq 0 \\ L \neq 0}} B_M^{m'm} B_L^{n'n} U_{b_M} \delta_{b_M, -b_L} \delta_{q_1, -q_2} = \\ &= \left(\gamma^{\rho 2} \sum_{ML} B_M^{m'm} B_L^{n'n} U_{b_M} \delta_{b_M, -b_L} - U_0 \delta_{m'm} \delta_{n'n} \right) \delta_{q_1, -q_2}. \end{aligned} \quad (27.70)$$

Из (27.55) видно, что первое слагаемое здесь равно $U_{m'0, n'0} = U_{m'n'}$ и, следовательно,

$$\delta U_{m'k'_1, n'k'_2; mk_1, nk_2} = \left(U_{m'n'} - U_0 \delta_{m'm} \delta_{n'n} \right) \delta_{q_1, -q_2}, \quad (27.71)$$

где

$$U_{mn}^{m'n'} = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) u_{m'}^*(\mathbf{x}_1) u_m(\mathbf{x}_1) u_n^*(\mathbf{x}_2) u_n(\mathbf{x}_2). \quad (27.71a)$$

Переходя к \mathbf{r} -представлению, т. е. умножая на $\exp[i(\mathbf{q}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2\mathbf{r}_2)]$ и суммируя по \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 , найдем

$$\delta U_{mn}^{m'n'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{V}^2 (U_{mn}^{m'n'} - U_0 \delta_{m'm} \delta_{n'n}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (27.72)$$

Переходя теперь в соответствии с (27.62) от электрон-электронного к электрон-дырочному взаимодействию, найдем:

$$\delta U_{mn}^{eh, m'n'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\mathcal{V}^2 (U_{mn}^{m'n'} - U_0 \delta_{m'm} \delta_{n'n}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (27.73)$$

так как $U_{m'Kn, mKn'} = U_{m'n', mn}$.

Выпишем теперь обменные члены:

$$\delta \mathcal{H}_{n k_2, m k_1}^{obm, m' k_1', n' k_2'} = \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \varphi_{m' k_1'}^*(\mathbf{x}_1) \varphi_{n' k_2'}^*(\mathbf{x}_2) \varphi_{n k_2}(\mathbf{x}_1) \varphi_{m k_1}(\mathbf{x}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

В разложении

$$\sum_{\alpha} \psi_{m'}^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) = \mathcal{V}^2 \sum_M B_M^{m'n} e^{-i\mathbf{b}M\mathbf{r}}$$

первое слагаемое $B_0^{m'n} = 0$, так как функции u_m и u_n ортогональны. При $\mathbf{b}_M \neq 0$, как и выше, можно пренебречь зависимостью матричного элемента от \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Тогда получим выражение, подобное (27.71):

$$\delta \mathcal{H}_{n k_2, m k_1}^{obm, m' k_1', n' k_2'} = U_{nm}^{m'n'} \delta_{k_1'+k_2', k_1+k_2}, \quad (27.74)$$

где

$$U_{nm}^{m'n'} = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_{m'}^*(\mathbf{x}_1) \psi_m(\mathbf{x}_2) \psi_n(\mathbf{x}_1) \psi_n^*(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \quad (27.75)$$

Отсюда

$$\delta \mathcal{H}_{mn}^{obm, m'n'} \begin{pmatrix} \mathbf{r}'_1 & \mathbf{r}'_2 \\ \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \end{pmatrix} = \mathcal{V}^2 U_{nm}^{m'n'} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2). \quad (27.76)$$

Из (27.76) и (27.62) видно, что оператор $\delta \mathcal{H}^{obm}$ при переходе к электрон-дырочному взаимодействию, как и δU , сохраняет локальный характер:

$$\delta \mathcal{H}_{mn}^{obm, eh, m'n'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\mathcal{V}^2 U_{Kn'm}^{m'Kn} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (27.77)$$

Интеграл (27.75), определяющий величину этого обменного расщепления по порядку величины, близок к значению обменного

взаимодействия в соответствующих атомах [22.5]. Поэтому обменное расщепление экситона примерно в $(a_0/a_B)^3$ раз меньше атомного расщепления; здесь a_B — боровский радиус экситона, a_0 — постоянная решетки.

Непрямые экситоны. Для непрямого экситона, когда $\mathbf{k}_c \neq \mathbf{k}_v$, волновую функцию $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ надо разложить по произведению функций

$$\begin{aligned}\varphi_{s\mathbf{k}_c} &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} \psi_{s\mathbf{k}_c} e^{i\mathbf{k}r} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} u_{s\mathbf{k}_c} e^{i(\mathbf{k}_c + \mathbf{k})r}, \\ \varphi_{t\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} \psi_{t\mathbf{k}_v} e^{i\mathbf{k}r} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} u_{t\mathbf{k}_v} e^{i(\mathbf{k}_v + \mathbf{k})r},\end{aligned}\quad (27.78)$$

где $\psi_{s\mathbf{k}_c}$ и $\psi_{t\mathbf{k}_v}$ — собственные функции \mathcal{H}_0 в точках \mathbf{k}_c и \mathbf{k}_v соответственно для всех зон. Функция $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, удовлетворяющая условию антисимметрии, имеет вид

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{st} F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{s\mathbf{k}_c}(\mathbf{x}_1) \psi_{t\mathbf{k}_v}(\mathbf{x}_2) - F_{st}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \psi_{s\mathbf{k}_c}(\mathbf{x}_2) \psi_{t\mathbf{k}_v}(\mathbf{x}_1).\end{aligned}\quad (27.79)$$

Если теперь записать $F_{st}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в виде (27.51а), то вместо (27.51) получим

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{s\mathbf{k}_1 t\mathbf{k}_2} C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2} \varphi_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2}^a(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (27.80)$$

где

$$\varphi_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2}^a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{s\mathbf{k}_1}(\mathbf{x}_1) \varphi_{t\mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_2) - \varphi_{s\mathbf{k}_1}(\mathbf{x}_2) \varphi_{t\mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_1)]. \quad (27.81)$$

Подставим (27.81) в (27.50), умножим слева на $\varphi_{s'\mathbf{k}'_1, t'\mathbf{k}'_2}^{*a}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ и проинтегрируем по \mathbf{x}_1 и \mathbf{x}_2 . В результате получим систему уравнений для $C_{s\mathbf{k}_1, t\mathbf{k}_2}$, подобную (27.53), в которой диагональные члены \mathcal{H}_0 и междузонные члены \mathcal{H}_2 , как и для прямых экситонов, определяются уравнениями (27.54) и (27.56) соответственно.

Если пренебречь короткодействующими силами, т. е. пренебречь всеми компонентами $U_{\mathbf{k}}$ с \mathbf{k} , содержащими либо векторы обратной решетки \mathbf{b}_M , либо разность $\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_v$, то для \mathcal{H}_1 получим выражение, также совпадающее с (27.55). Однако в отличие от прямых экситонов, когда в (27.57) надо оставлять коэффициенты C_{st} с $s = m, t = n$ и с $s = n, t = m$, здесь функции зоны проводимости $\psi_{m\mathbf{k}_c}$ имеются только среди функций $\psi_{s\mathbf{k}_c}$, а валентной зоны $\psi_{m\mathbf{k}_v}$ — среди функций $\psi_{t\mathbf{k}_v}$. Поэтому при учете только дальнедействующего потенциала обменные члены для непрямых экситонов отсутствуют, а необменные определяются теми же формулами (27.63а) — (27.63в), как и для прямого экситона.

Если учесть короткодействующие силы, т. е. сохранить в U все компоненты $U_{\mathbf{k}}$ с большими \mathbf{k} , пренебрегая, как и в (27.70), (27.74), их зависимостью от малых величин $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2$, то в результате получим для необменных членов формулу, совпадающую с (27.73). Выражение для $U_{m'n', mn}$ подобно (27.71а).

Так как функции разложения (27.81) представляют антисимметризованное произведение, то при учете короткодействия \mathcal{H}^{eh} будет включать и обменные члены, определяемые выражением (27.77), где для непрямых экситонов

$$U_{\substack{mKn \\ Kn'm}} = \frac{1}{\gamma^2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 u_{m'\mathbf{k}_c}^*(\mathbf{x}_2) K u_{n'\mathbf{k}_v}(\mathbf{x}_1) \times \\ \times U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) u_{m\mathbf{k}_c}(\mathbf{x}_2) (K u_{n\mathbf{k}_v}(\mathbf{x}_2))^* e^{i(\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}. \quad (27.82)$$

Экситон при различных зонных структурах. Рассмотрим основные случаи различных зонных структур без учета поправочных членов в (27.63).

Если обе зоны без учета спина не вырождены, то матрицы \mathcal{H}^e и \mathcal{H}^h в этом приближении диагональны и система уравнений (27.63) сводится к уравнению

$$\left(\sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}^e} k_{1\alpha} k_{1\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}^h} k_{2\alpha} k_{2\beta} - \frac{e^2}{\kappa r} - E \right) F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0. \quad (27.83)$$

Если для обеих зон эллипсоиды постоянной энергии соосны, то, выбрав в (27.66) $a^{ii} = m_{ii}^e / (m_{ii}^e + m_{ii}^h)$, получим уравнение для $f_{\mathcal{X}}(\mathbf{r})$ в главных осях эллипсоидов:

$$\left(\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} k_{\alpha}^2 - \frac{e^2}{\kappa r} + \frac{\hbar^2 \mathcal{X}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} - E \right) f_{\mathcal{X}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (27.84)$$

В этом случае энергия орбитального движения не зависит в рассматриваемом приближении от поступательного движения и уравнение для $f_{\mathcal{X}}(\mathbf{r})$ подобно соответствующему уравнению (27.15) для примесного центра, отличаясь от него заменой $1/m_{\alpha}^e$ на

$$\frac{1}{m_{\alpha}} = \frac{1}{m_{\alpha}^e} + \frac{1}{m_{\alpha}^h}, \quad (27.85)$$

а энергия поступательного движения определяется суммарной массой электрона и дырки

$$M_{\alpha} = m_{\alpha}^e + m_{\alpha}^h. \quad (27.86)$$

Для сферических зон энергия связи экситона имеет водородоподобный спектр

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 \kappa^2 n^2} + \frac{\hbar^2 \mathcal{X}^2}{2M}. \quad (27.87)$$

В случае, если поверхности постоянной энергии — эллипсоиды вращения с совпадающей главной осью, то пробную функцию $f_{\mathcal{K}}(\mathbf{r})$ для основного состояния можно выбрать в виде (27.17) и его энергию можно определить, используя графики рис. 28. В этом случае представление, по которому преобразуется полная волновая функция прямого экситона в точке $\mathcal{K} = 0$, является произведением представления \mathcal{D}_f , по которому преобразуются функции $f_0(\mathbf{r})$, и представлений \mathcal{D}_m и \mathcal{D}_n^* групп G_k , по которым преобразуются базисные функции $\psi_{m\mathbf{k}_0}$ и $\mathcal{K}\psi_{n\mathbf{k}_0}$:

$$\mathcal{D}^{ex} = \mathcal{D}_f \times \mathcal{D}_m \times \mathcal{D}_n^* \quad (27.88)$$

Это представление обычно приводимо, и в этом случае возмущение, связанное с обменным взаимодействием, приводит к его расщеплению на неприводимые представления.

Если не вырождена без учета спина лишь одна из зон, например зона m , а зона n вырождена, то уравнения (27.63) распадаются на две одинаковые системы из N_n уравнений. Для вырожденных зон энергия связи сама зависит от величины \mathcal{K} , т. е. орбитальное движение может приводить к расщеплению экситонной зоны, так же как это имеет место для вырожденных электронных зон.

При $\mathcal{K} = 0$ соответствующие уравнения для прямого экситона в Ge по форме совпадают с аналогичными уравнениями (27.1) — (27.2) для примесного центра, отличаясь от них заменой $|A|$ на $|A| + (\hbar^2/2m^e)$, где m^e — эффективная масса электрона в зоне проводимости в точке $\mathbf{k} = 0$. Вариационные функции основного состояния, которое, так же как и состояние примесного центра, четырехкратно вырождено, можно выбрать в виде (27.23). Соответствующий расчет [22.4] дает для энергии связи значение 0,00138 эв, что практически совпадает с экспериментальными значениями. При этом $r_1 = 320 \text{ \AA}$, $r_2 = 220 \text{ \AA}$.

В работах [22.12, 21.14] предложен другой метод приближенного решения уравнения (27.1) для мелкого примесного центра или экситона в случае вырожденной валентной зоны типа Ge. Этот метод заключается в том, что из гамильтониана (27.2) с оператором $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, определяемым формулой, подобной (26.12), выделяется сферическая часть

$$\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} + \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\bar{\nu}(\mathbf{J}\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) \right) \quad (27.88a)$$

а остающаяся несферическая часть

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}) = -2(\gamma_2 - \bar{\nu}) \sum_i J_i^2 k_i^2 - 4(\gamma_3 - \bar{\nu}) \sum_{i>j} [J_i J_j] k_i k_j \quad (27.88b)$$

рассматривается как возмущение. Собственные функции гамильтониана (27.88a) — произведения собственных функций оператора $F = L + J$ на радиальные функции, которые определяются системой из двух дифференциальных уравнений и рассчитываются

численными методами. В [22.12] константа $\bar{\nu}$ выбрана равной $\bar{\nu} = \frac{1}{5}(2\gamma_2 + 3\gamma_3)$, при этом условии $\gamma_2 - \bar{\nu} = \frac{3}{5}(\gamma_2 - \gamma_3)$, $\gamma_3 - \bar{\nu} = -\frac{2}{5}(\gamma_2 - \gamma_3)$. При расчете спектра по-видимому удобнее выбирать $\bar{\nu}$ таким, чтобы поправки к энергии данного терма от \mathcal{H}' в первом приближении обращались в нуль.

Так как функции основного состояния преобразуются по представлению Γ_8^+ , то полные экситонные функции в этом случае преобразуются по представлению $\mathcal{D}^{ex} = \Gamma_8^+ \times \Gamma_7^- = \Gamma_{12}^- + \Gamma_{15}^- + \Gamma_{25}^-$. Поэтому это восьмикратно вырожденное состояние под действием обменного взаимодействия расщепляется на два трехкратно и одно двукратно вырожденные состояния.

Для непрямых экситонов полная волновая функция преобразуется по представлению группы G' , являющейся пересечением групп волновых векторов G_{k_c} и G_{k_v} . Соответственно представления \mathcal{D}_m и \mathcal{D}_n^* групп G_{k_c} и G_{k_v} переходят в представления \mathcal{D}'_m и \mathcal{D}'_n группы G' , которые в принципе могут быть приводимы.

Если плавная функция f в случае простых зон преобразуется по представлению \mathcal{D}_f группы G' , то полная функция преобразуется по представлению $\mathcal{D}_f \times \mathcal{D}'_m \times \mathcal{D}'_n$, и это состояние расщепляется только в результате обменного взаимодействия.

Если же одна из зон, например валентная, вырождена и представление \mathcal{D}_n^* в группе G' приводимо, то расщепление экситонного состояния произойдет и без учета обменного взаимодействия. Например, для непрямых экситонов в Ge и Si восьмикратно вырожденное основное состояние расщепляется на два четырехкратно вырожденных, так как представление Γ_8^+ в группе $C_{3v} \times C_i$ (точка L) расщепляется на $L_4 + L_5$ и L_6 , а в группе C_{4v} (точка Δ) — на Δ_6 и Δ_7^*). Обменное взаимодействие приводит к дополнительному расщеплению этих представлений.

Переход от электрон-электронного к электрон-дырочному представлению (приложение к § 27)

Оператор (27.61) в представлении вторичного квантования можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{ee} = & \sum_{\substack{mm' \\ nn'}} \mathcal{H}_{m'm}(r'_1, r_1) \psi_{m'}^+(r'_1) \psi_m(r_1) \delta(r'_2 - r_2) \delta_{n'n} + \\ & + \mathcal{H}_{n'n}(r'_2, r_2) \psi_{n'}^+(r'_2) \psi_n(r_2) \delta(r'_1 - r_1) \delta_{m'm} + \\ & + \mathcal{H}_{m'n'} \left(\begin{matrix} r'_1 & r'_2 \\ r_1 & r_2 \end{matrix} \right) \psi_{m'}^+(r'_1) \psi_{n'}^+(r'_2) \psi_m(r_1) \psi_n(r_2). \quad (27.89) \end{aligned}$$

*) По данным W. H. Kleiner, B. Lax, Progress in Semicond., v. 5, для Ge это расщепление равно $1 \cdot 10^{-3}$ эв при энергии связи $3,5 \cdot 10^{-3}$ эв.

Коммутаторы от операторов рождения электрона $\psi_m^+(\mathbf{r})$ и уничтожения $\psi_m(\mathbf{r})$ удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \{\psi_m^+(\mathbf{r}) \psi_{m'}(\mathbf{r}')\} &= \delta_{mm'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ \{\psi_m^+(\mathbf{r}) \psi_{m'}^+(\mathbf{r}')\} &= \{\psi_m(\mathbf{r}) \psi_{m'}(\mathbf{r}')\} = 0. \end{aligned} \quad (27.90)$$

При этом среднее по вакууму

$$\langle 0 | \psi_m(\mathbf{r}) \psi_{m'}^+(\mathbf{r}') | 0 \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{mm'}. \quad (27.91)$$

Для того чтобы получить уравнение (27.61) в \mathbf{r} -представлении, надо подействовать оператором \mathcal{H} на функцию $F_{m''n''}(\mathbf{r}_1'', \mathbf{r}_2'') \psi_{m''}^+(\mathbf{r}_1'') \psi_{n''}^+(\mathbf{r}_2'') | 0 \rangle$, умножить слева на $\langle 0 | \psi_{m'''}(\mathbf{r}_1''') \psi_{n'''}(\mathbf{r}_2''')$ и взять среднее, проинтегрировав по $\mathbf{r}_{1,2}$, $\mathbf{r}'_{1,2}$ и $\mathbf{r}''_{1,2}$.

Введем операторы рождения и уничтожения дырки $\varphi_n^+(\mathbf{r})$ и $\varphi_n(\mathbf{r})$, определив их так:

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = \psi_{Kn}^+(\mathbf{r}), \quad \varphi_n^+(\mathbf{r}) = \psi_{Kn}(\mathbf{r}). \quad (27.92)$$

Выразим ψ_n через φ_n , подставим в (27.89) и, используя (27.90), приведем \mathcal{H} к виду, отличающемуся от (27.89) лишь заменой ψ_n на φ_n . Для этого нам надо переобозначить $K^{-1}n$ на n' и $K^{-1}n'$ на n , \mathbf{r}_2 на \mathbf{r}'_2 и \mathbf{r}'_2 на \mathbf{r}_2 . В результате, опуская слагаемые, описывающие взаимодействие электрона проводимости со всеми электронами заполненной зоны и включенные фактически в \mathcal{H}_0 , получим

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{eh} &= \sum_{mm'n'n'} \mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) \psi_{m'}^+(\mathbf{r}'_1) \psi_m(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2) \delta_{n'n} - \\ &- \mathcal{H}_{Kn, Kn'}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \varphi_{n'}^+(\mathbf{r}'_2) \varphi_n(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) \delta_{m'm} - \\ &- \mathcal{H}_{m'Kn'}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) \psi_{m'}^+(\mathbf{r}'_1) \varphi_{n'}^+(\mathbf{r}'_2) \psi_m(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (27.93)$$

Действуя этим оператором на функцию $F_{m''n''}(\mathbf{r}_1'', \mathbf{r}_2'') \psi_{m''}^+(\mathbf{r}_1'') \varphi_{n''}^+(\mathbf{r}_2'') | 0 \rangle$, умножая слева на $\langle 0 | \psi_{m'''}(\mathbf{r}_1''') \varphi_{n'''}(\mathbf{r}_2''')$ и выполнив необходимые интегрирования, получим уравнения в \mathbf{r} -представлении, отличающиеся от (27.61) заменой:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n'n}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2) &\quad \text{на} \quad - \mathcal{H}_{KnKn'}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2), \\ \mathcal{H}_{m'n'}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) &\quad \text{на} \quad - \mathcal{H}_{m'Kn'}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2), \end{aligned}$$

откуда и следует правило преобразования (27.62).

Аналогичным образом можно установить, что при переходе от электрон-электронного к электрон-дырочному взаимодействию в \mathbf{k} -представлении закон преобразования определяется формулами

$$\mathcal{H}_{n'k_2}^{eh} = - \mathcal{H}_{Kn', -k_2}^e, \quad \mathcal{H}_{m'k_1 n' k_2}^{eh} = - \mathcal{H}_{m'k_1 Kn', -k_2}^{ee}$$

так как $K\mathbf{k} = -\mathbf{k}$.

СПЕКТР В ДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ

§ 28. ИЗМЕНЕНИЕ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ
ПРИ ДЕФОРМАЦИИ

Малая однородная деформация определяется симметричным тензором деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}$:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad (28.1)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ — вектор смещения точки при деформации. Связь тензора деформации и тензора напряжения $P_{\alpha\beta}$, согласно теории упругости, определяется тензором жесткости \mathbf{S} :

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} S_{\alpha\beta, \gamma\delta} P_{\gamma\delta}. \quad (28.2)$$

Вид тензора $S_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ зависит от кристаллического класса F .

Формулы (28.1) и (28.2) определяют макроскопический тензор деформации упругой анизотропной среды, не имеющей внутренней структуры.

В кристаллах, в которых имеется более одного атома на элементарную ячейку, тензор деформации (28.1) определяет только деформацию элементарной ячейки в целом, в то время как относительные смещения атомов внутри ячейки, будучи пропорциональными нагрузке (деформации), различны для разных атомов.

В общем случае при приложении нагрузки к кристаллу его группа симметрии понижается.

Точечная группа симметрии K' решетки Браве деформированного кристалла, которая является подгруппой группы симметрии K решетки Браве недеформированного кристалла, содержит те элементы из группы K , которые сохраняются при деформации кристалла.

Базисные векторы решетки Браве деформированного кристалла \mathbf{a}'_i получаются деформацией векторов \mathbf{a}_i недеформированного кристалла:

$$\mathbf{a}'_i = (1 + \varepsilon) \mathbf{a}_i, \quad \text{или} \quad a_i'^\alpha = a_i^\alpha + \sum_{\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} a_i^\beta. \quad (28.3)$$

При этом объем элементарной ячейки Ω'_0 , построенной на векторах \mathbf{a}'_i , равен

$$\Omega'_0 = \Omega_0 (1 + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = \Omega_0 (1 + \text{Sp } \varepsilon). \quad (28.4)$$

Отметим, что при деформации может происходить изменение типа решетки Браве в соответствии с возможными типами решеток в новой системе K' согласно рис. 16; в этом случае новая решетка Браве характеризуется базисными векторами, которые могут существенно отличаться от a'_i (28.3), однако во всех случаях объем новой элементарной ячейки отличается от Ω_0 на величину, пропорциональную деформации (см. (28.4)). Зона Бриллюэна, которая не зависит от конкретного выбора базисных векторов, в деформированном кристалле получается путем соответствующей деформации зоны Бриллюэна недеформированного кристалла.

Рассмотрим, как изменяется симметрия решеток Браве при однородной деформации.

При деформации кубических решеток класса O_h вдоль оси четвертого порядка $K' = D_{4h}$ и согласно рис. 16 кубические решетки Γ_c , Γ_c^f и Γ_c^v переходят в решетки Γ_q и Γ_q^v тетрагональной системы: $\Gamma_c \rightarrow \Gamma_q$; $\Gamma_c^f, \Gamma_c^v \rightarrow \Gamma_q^v$.

Переход от решеток тетрагональной системы D_{4h} к ромбической D_{2h} , как указывалось в § 5, может быть осуществлен двумя путями:

1. При помощи деформации вдоль оси второго порядка, параллельной ребру основания параллелепипеда Браве (при $\epsilon_{xx} \neq 0$ или $\epsilon_{yy} \neq 0$, если ось z выбрана вдоль оси четвертого порядка, а оси x и y — вдоль ребер основания параллелепипеда). В этом случае $\Gamma_q \rightarrow \Gamma_0$, $\Gamma_q^v \rightarrow \Gamma_0^v$.

2. Деформация происходит вдоль другой (не эквивалентной) оси второго порядка, направленной вдоль диагонали основания: $\epsilon_{xy} \neq 0$. При этом $\Gamma_q \rightarrow \Gamma_0^b$, $\Gamma_q^v \rightarrow \Gamma_0^b$.

Переход от решеток ортогональной системы к моноклинной $K' = C_{2h}$ происходит при деформации параллелепипеда Браве ортогональной системы в плоскости, перпендикулярной одной из осей второго порядка, удаляющей горизонтальные оси второго порядка, при наличии деформации сдвига ϵ_{xy} (или ϵ_{xz} , или ϵ_{yz}) (оси x , y , z выбраны вдоль взаимно перпендикулярных осей второго порядка). Согласно рис. 16 в этом случае $\Gamma_0^b, \Gamma_0 \rightarrow \Gamma_m$ и $\Gamma_0^v, \Gamma_0^f \rightarrow \Gamma_m^b$.

Решетки моноклинной системы Γ_m^b, Γ_m переходят в решетку Γ_t триклинной системы при деформации под углом (не равным нулю или 90°) к оси второго порядка, когда появляются сдвиговые компоненты тензора деформации ϵ_{xz} , ϵ_{yz} (при этом ось z выбрана вдоль оси второго порядка).

Решетки Браве кубической системы переходят в решетку Γ_r ромбоэдрической системы при деформации вдоль пространственной диагонали куба Браве. Решетки Браве гексагональной системы переходят в решетку Γ_m при деформации в плоскости, перпендикулярной оси шестого порядка.

Кристаллический класс F' деформированного кристалла является подгруппой класса F недеформированного кристалла и получается из него путем удаления поворотных элементов, которые исчезают в деформированном кристалле. При этом может оказаться, что класс F' относится не к системе K' , в которую переходит система K при деформации, а к системе K'' , которая является подчиненной системе K' . В этом случае у деформированного кристалла решетка Браве обладает более высокой симметрией, чем следует из кристаллического класса, что на первый взгляд противоречит соображениям, изложенным в § 5. Этот результат, однако, является приближенным и справедлив только в линейном по нагрузке приближении. Если в $\epsilon_{\alpha\beta}$ учитывать члены, квадратичные по напряжению, то симметрия решетки Браве деформированного кристалла (28.3) соответствует его кристаллическому классу F' , в полном согласии с соображениями, развитыми в § 5.

Рассмотрим изменение кристаллических классов при понижении симметрии при деформации.

При переходе от системы O_h к системе D_{4h} , когда убирается ось третьего порядка, кристаллические классы системы O_h переходят в классы:

$$O_h \rightarrow D_{4h}, \quad O \rightarrow D_4, \quad T_d \rightarrow D_{2d}, \quad T_h \rightarrow D_{2h}, \quad T \rightarrow D_2.$$

При этом классы D_{4h} , D_4 и D_{2d} относятся к системе D_{4h} , а классы D_2 и D_{2h} — к менее симметричной системе D_{2h} . Поэтому для классов T и T_h возникает указанная выше ситуация, когда решетка Браве деформированного кристалла обладает более высокой симметрией D_{4h} , чем это требуется кристаллическим классом.

Если же учитывать и квадратичные по нагрузке члены в тензоре деформации, которые описывают изменение упругих констант $S_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ при деформации,

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} S_{\alpha\beta, \gamma\delta} P_{\gamma\delta} + \sum_{\gamma\delta, \gamma'\delta'} B_{\alpha\beta\gamma\delta\gamma'\delta'} P_{\gamma\delta} P_{\gamma'\delta'},$$

где $B_{\alpha\beta\gamma\delta\gamma'\delta'}$ — тензор шестого ранга, определяемый кристаллическим классом недеформированного кристалла, то с учетом квадратичных по нагрузке членов решетка Браве деформированного кристалла, определяемая векторами a'_i (28.3), относится именно к системе D_{2h} , а не D_{4h} , и соответствует классам D_{2h} и D_2 деформированного кристалла. Действительно, для классов T и T_h компонента $B_{xxxxzz} \neq B_{yyzzzz}$ (оси x , y , z направлены по осям второго порядка группы T), поэтому при растяжении кубического кристалла класса T или T_h вдоль оси z произойдет квадратичное по деформации искажение параллелепипеда Браве вдоль оси x или y . Для кристаллов класса T_d , O или O_h , в которых имеется ось четвертого порядка (или зеркально-поворотная ось четвертого порядка), $B_{xxxxzz} = B_{yyzzzz}$ и параллелепипед Браве при растяжении по оси z остается четырехугольной призмой,

в соответствии с классами D_{4h} , D_4 и D_{2d} , к которым относится деформированный кристалл. При переходе от тетрагональной системы к ромбической, когда ось четвертого порядка превращается в ось второго порядка, классы тетрагональной системы переходят в классы:

$$C_4 \rightarrow C_2, \quad S_4 \rightarrow S_2, \quad C_{4v} \rightarrow C_{2v}, \quad D_4 \rightarrow D_2, \quad D_{4h} \rightarrow D_{2h}, \\ C_{4h} \rightarrow C_{2h}, \quad D_{2d} \rightarrow D_2.$$

Как и в рассмотренном выше случае решеток кубической системы, наименее симметричные классы системы D_{4h} , а именно C_4 , S_4 , C_{4h} , переходят в классы моноклинной системы.

При деформации в плоскости отражения группы D_{2h} , когда удаляются повороты вокруг осей второго порядка, лежащие в плоскости отражения, группы ромбической системы переходят в группы моноклинной,

$$C_{2v} \rightarrow C_2, \quad D_2 \rightarrow C_2, \quad D_{2h} \rightarrow C_{2h}.$$

При дальнейшем понижении симметрии от C_{2h} к S_2

$$C_2 \rightarrow e, \quad C_s \rightarrow e, \quad C_{2h} \rightarrow S_2.$$

Переход от кубической системы к ромбоэдрической осуществляется путем деформации куба вдоль его пространственной диагонали, когда остаются следующие элементы симметрии: ось третьего порядка, три плоскости отражения, проходящие через нее, и перпендикулярные ей три оси второго порядка. При этом классы кубической системы переходят в классы ромбоэдрической системы:

$$T \rightarrow C_3, \quad T_h \rightarrow S_6, \quad T_d \rightarrow D_{3d}, \quad O \rightarrow D_3, \quad O_h \rightarrow D_{3d}.$$

При произвольной деформации решеток гексагональной системы в плоскости, перпендикулярной оси шестого порядка, классы гексагональной системы переходят в классы:

$$C_3 \rightarrow e, \quad C_{3v} \rightarrow e, \quad C_6 \rightarrow C_2, \quad S_6 \rightarrow S_2, \quad D_3 \rightarrow C_2, \quad D_{3d} \rightarrow C_2, \\ C_{3h} \rightarrow C_s, \quad D_{3h} \rightarrow C_s, \quad C_{6h} \rightarrow C_{2h}, \quad C_{6v} \rightarrow C_2, \quad D_6 \rightarrow D_2, \quad D_{6h} \rightarrow D_{2h}.$$

Аналогичным образом легко найти систему, тип решетки и кристаллический класс деформированного кристалла при произвольной малой деформации, так как в линейном по деформации приближении любая деформация может быть представлена в виде последовательного применения отдельных простых деформаций.

Таким образом, в каждом случае можно определить пространственную группу G' деформированного кристалла, так как каждый из остающихся в новой группе F' поворотных элементов имеет относительно новых векторов решетки Браве (28.3) такие же нетривиальные трансляции, какие он имел в пространственной группе G недеформированного кристалла.

Классификация состояний элементарных возбуждений в деформированном кристалле должна производиться по неприводимым представлениям пространственной группы G' .

Поскольку деформация в общем случае приводит к понижению симметрии кристалла, то она вызывает частичное или полное снятие вырождения энергетического спектра возбуждений в твердом теле. В этом случае, однако, нельзя непосредственно применять результаты § 15, где рассматривается расщепление термов при понижении симметрии, поскольку пространственные группы G и G' являются различными, так как они имеют различные решетки Браве, и группа G' не является подгруппой G *). Чтобы обойти эту трудность, произведем «математическую деформацию» координат деформированного кристалла, вводя координаты x'

$$x' = (1 + \varepsilon)^{-1} x = 1 - \varepsilon x \quad (28.5)$$

с тем, чтобы в новых координатах решетка Браве деформированного кристалла совпадала с решеткой Браве недеформированного кристалла в старой системе координат. Это не означает, конечно, полного тождества кристаллических решеток, так как в кристаллах, имеющих более одного атома в элементарной ячейке, расположение атомов в деформированном кристалле в координатах x' (28.5) не совпадает с расположением атомов в недеформированном кристалле в системе координат x .

В новых координатах (28.5) группа G' является подгруппой группы G и задача определения расщепления термов при приложении нагрузки сводится к задаче о разложении неприводимого представления группы G на неприводимые представления ее подгруппы G' . Как было показано в § 12, каждое неприводимое представление $\mathcal{D}_v^{(k)}$ пространственной группы G характеризуется неприводимой звездой $\{k\}$, которая определяется заданием одного из лучей звезды $\{k\}$ и индексом v , характеризующим неприводимое представление группы волнового вектора G_k или, соответственно, проективное представление группы направления $\mathcal{D}_v(r)$. В деформированном кристалле представления характеризуются звездой $\{k'\}$ и индексом v' . При деформации точка k переходит в точку $k' = (1 - \varepsilon)k$. В новых координатах x' (28.5) зоны Бриллюэна недеформированного и деформированного кристалла совпадают, при этом точка k' «возвращается» на свое место k .

Полная кратность вырождения состояния в кристалле равна произведению размерности проективного представления $\mathcal{D}^k(r)$ на число лучей в звезде $\{k\}$.

*) Аналогичная трудность возникает в § 29 при построении оператора возмущения, связанного с деформацией, изменяющей пространственную периодичность кристалла.

При деформации в общем случае, во-первых, неприводимая в группе G звезда $\{k\}$ становится приводимой в группе G' , а, во-вторых, происходит снятие вырождения в точке k . Поэтому разложение представления $\mathcal{D}_v^{(k)}$ может быть проведено в два этапа. Сначала нужно разложить звезду $\{k\}$ на неприводимые звезды в группе G' и затем разложить проективное представление $\mathcal{D}_v^k(r)$ группы F_k на неприводимые проективные представления $\mathcal{D}_\mu^k(r)$ группы F'_k .

Разложение звезды $\{k\}$ на неприводимые звезды $\{k_i\}$ в группе G'

$$\{k\} = \{k_1\} + \{k_2\} + \dots \quad (28.6)$$

может быть легко произведено способом, указанным в § 12. Если зона в точке k не вырождена, то разложение (28.6) и определяет расщепление спектра при деформации, так как различным неприводимым звездам $\{k_i\}$ соответствуют состояния с различной энергией.

Разложение неприводимого проективного представления $\mathcal{D}_v^k(r)$ группы F на неприводимые представления $\mathcal{D}_\mu^k(r)$ группы F'_k описывает расщепление зоны в точке k .

Каждое из получаемых в результате разложения представлений $\mathcal{D}_\mu^k(r)$ группы F' является проективным представлением группы F'_k с фактор-системой, совпадающей с фактор-системой представления $\mathcal{D}_v^k(r)$ на элементах группы F'_k . Эта фактор-система принадлежит к одному из классов фактор-систем группы F'_k . Поэтому при фактическом разложении представления на неприводимые следует сначала найти фактор-систему $\omega(r_1, r_2)$ группы F'_k , в которую переходит фактор-система представления $\mathcal{D}_v^k(r)$ группы F_k , а затем, пользуясь характеристиками неприводимых проективных представлений группы F_k , соответствующих данной фактор-системе, по (13.38) разложить представление $\mathcal{D}_v^k(r)$ на неприводимые представления \mathcal{D}_μ^k .

Исходя из результатов § 14, в общем случае можно установить соотношения между классами фактор-систем точечной группы F и ее подгруппы F' .

Очевидно, что все векторные представления, т. е. представления класса K_0 группы F , переходят в векторные представления ее подгруппы F' . Для векторных представлений эта задача сводится к соответствующей задаче для обычных представлений точечных групп. Поэтому ниже мы рассмотрим соответствие между другими классами фактор-системы группы F и ее подгруппы F' для точечных групп, соответствующих схеме подчинения систем.

При переходе от кубической системы к тетрагональной кристаллический класс O_h переходит в класс D_{4h} . Согласно (3.13)

образующие элементы $a = c_4$, $s = s_6$ группы O_h удовлетворяют соотношениям $a^4 = e$, $s^6 = e$, $as^3 = s^3a$, $sa^3s = a$. Образующими элементами группы D_{4h} могут быть выбраны $a = c_4$, $b = u$ — ось второго порядка ($u = s^4as^4$) и c — плоскость отражения σ_h ($c = a^2s^3$); они удовлетворяют определяющим соотношениям (3.5)

$$a^4 = e, \quad b^2 = e, \quad c^2 = e, \quad ba = a^3b, \quad ac = ca, \quad bc = cb,$$

которые могут быть получены непосредственно из определяющих соотношений (3.13) для группы O_h

Матрицы проективных представлений $A = \mathcal{D}(a)$, $B = \mathcal{D}(s)$ группы O_h согласно (14.74) удовлетворяют соотношениям

$$A^4 = \alpha I, \quad B^6 = I, \quad AB^3 = \beta B^3A, \quad BA^3B = A, \quad \text{где } \alpha, \beta = \pm 1. \quad (28.7)$$

Из (28.7) следует, что матрицы $A = \mathcal{D}(a)$, $U = \mathcal{D}(u)$, $C = \mathcal{D}(c)$ проективных представлений для образующих элементов группы D_{4h} удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} A^4 = \alpha I, \quad U^2 = \alpha\beta I, \quad C^2 = \alpha I, \quad UA = \alpha\beta A^3U, \\ AC = \beta CA, \quad UC = \alpha\beta CU. \end{aligned} \quad (28.8)$$

Сопоставляя (28.8) с (14.37), получим, что классы K_1, K_2, K_3 фактор-системы группы O_h переходят в классы фактор-систем D_{4h} следующим образом:

$$K_1(O_h) \rightarrow K_7(D_{4h}), \quad K_2(O_h) \rightarrow K_4(D_{4h}), \quad K_3(O_h) \rightarrow K_6(D_{4h}).$$

Аналогичное рассмотрение показывает, что между классами фактор-систем групп $O \rightarrow D_4$, $T_d \rightarrow D_{2d}$, $T_h \rightarrow D_{2h}$ и $T \rightarrow D_2$ имеется следующее соответствие:

$$\begin{aligned} K_1(O) \rightarrow K_1(D_4), \quad K_1(T_d) \rightarrow K_1(D_{2d}), \quad K_1(T) \rightarrow K_1(D_2), \\ K_1(T_h) \rightarrow K_7(D_{2h}). \end{aligned}$$

При переходе от кубической системы к ромбоэдрической D_{3d} следует рассмотреть только соответствие между классами фактор-систем групп $O_h \rightarrow D_{3d}$, так как для остальных подгрупп D_{3d} все проективные представления p -эквивалентны векторным и поэтому все классы фактор-систем группы O_h переходят в класс K_0 этих подгрупп, что означает снятие принудительного вырождения зоны.

Отметим, что если при понижении симметрии фактор-система переходит в класс K_0 , то это еще не означает, что она становится единичной.

Рассмотрение, аналогичное проведенному для групп O_h и D_{4h} , показывает, что

$$K_1(O_h) \rightarrow K_0(D_{3d}), \quad K_2(O_h), \quad K_3(O_h) \rightarrow K_1(D_{3d}).$$

При переходе от кристаллических классов тетрагональной системы к ортогональному соответствию классов фактор-систем

имеет вид

$$K_1(C_{4v}) \rightarrow K_1(C_{2v}), \quad K_1(D_4) \rightarrow K_1(D_2), \quad K_1(C_{4h}) \rightarrow K_1(C_{2h}),$$

$$K_1(D_{2d}) \rightarrow K_1(D_2), \quad K_i(D_{4h}) \rightarrow K_i(D_{2h}) \quad (i = 1, \dots, 7).$$

При переходе от ромбической системы к моноклинной между классами фактор-систем групп D_{2h} и C_{2h} имеется соответствие классов фактор-систем:

$$K_1(D_{2h}), \quad K_2(D_{2h}), \quad K_7(D_{2h}) \rightarrow K_0(C_{2h}),$$

$$K_3(D_{2h}), \quad K_4(D_{2h}), \quad K_5(D_{2h}), \quad K_6(D_{2h}) \rightarrow K_1(C_{2h}).$$

При переходе от моноклинной системы к триклинной все классы фактор-систем соответствуют классам K_0 триклинной системы.

Полученное соответствие классов сразу указывает на возможность снятия принудительного вырождения зон при понижении симметрии. Учет влияния инверсии времени на энергетический спектр электронов в деформированном кристалле производится так же, как и в недеформированном. При этом в ряде случаев дополнительное вырождение зоны, связанное с инверсией времени, может сниматься при деформации.

§ 29. ИЗМЕНЕНИЕ СПЕКТРА ПРИ ДЕФОРМАЦИИ

Для построения матрицы $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$, определяющей различные эффекты, связанные с деформацией, необходимо прежде всего найти оператор, описывающий изменение спектра при однородной деформации. Оператор Шредингера для электрона в деформированном кристалле имеет вид

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{p^2}{2m} + V_\varepsilon(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V_\varepsilon [\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\sigma}]), \quad (29.1)$$

где $V_\varepsilon(\mathbf{x})$ — потенциал в деформированном кристалле, и отличается от гамильтониана недеформированного кристалла

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V_0 [\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\sigma}]) \quad (29.2)$$

заменой $V_0(\mathbf{x})$ на $V_\varepsilon(\mathbf{x})$.

При малой деформации ее влияние можно рассматривать как возмущение; при этом можно ограничиться членами, линейными по деформации, т. е. пропорциональными компонентам тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$. Однако при однородной статической деформации непосредственно рассматривать разность $V_\varepsilon - V_0$ как оператор возмущения \mathcal{H}' нельзя, так как эта разность, вообще говоря, не мала. Действительно, если закрепить, например, узел решетки Браве \mathbf{a}_0 , находящийся в начале координат ($m_1 = m_2 = m_3 = 0$), то узел $m(m_1, m_2, m_3)$, положение которого в недеформированной решетке \mathbf{a}_m^0 определяется формулой (5.1), при деформации

перейдет в точку

$$\mathbf{a}_m = (1 + \varepsilon) \mathbf{a}_m^0. \quad (29.3)$$

Здесь $\varepsilon \mathbf{a}$ — вектор с компонентами

$$(\varepsilon \mathbf{a})_i = \sum_j \varepsilon_{ij} a_j. \quad (29.4)$$

Поэтому на достаточном удалении от узла \mathbf{a}_0 относительное смещение $\Delta \mathbf{a}_m = \mathbf{a}_m - \mathbf{a}_m^0 = \varepsilon \mathbf{a}_m^0$ при сколь угодно малой деформации станет сравнимым с постоянной решетки и соответственно разность $V_\varepsilon(\mathbf{x}) - V_0(\mathbf{x})$ будет порядка $V(\mathbf{x})$ независимо от величины деформации.

Конечно, всегда можно рассматривать достаточно малый объем вблизи несмещенной ячейки, однако и в этом случае нельзя непосредственно использовать обычную теорию возмущений.

Дело в том, что в теории возмущений волновая функция возмущенного гамильтониана всегда представляется как суперпозиция волновых функций невозмущенного оператора \mathcal{H}_0 (29.2), удовлетворяющих тем же граничным условиям. В кристалле роль граничных условий играют условия периодичности, а из (29.3) видно, что периоды потенциалов $V_0(\mathbf{x})$ и $V_\varepsilon(\mathbf{x})$ не совпадают, а следовательно, периоды блоховских модулирующих функций $u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x})$ для уравнений (29.1) и (29.2) также различны. Для того чтобы избежать этих затруднений, проведем в (29.3) преобразование координат, подобное (28.5), с тем, чтобы положение узлов решетки Браве в новой системе координат \mathbf{a}'_m совпадало с их положением в недеформированной решетке в старой системе координат. Для этого положим

$$\mathbf{x}' = (1 + \varepsilon)^{-1} \mathbf{x} \approx (1 - \varepsilon) \mathbf{x} \quad \text{или} \quad \mathbf{x} = (1 + \varepsilon) \mathbf{x}'. \quad (29.5)$$

При преобразовании (29.5) оператор $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ перейдет в

$$\mathbf{p} = (1 - \varepsilon) \mathbf{p}', \quad \text{где} \quad p'_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_i}, \quad (29.6)$$

p^2 перейдет в

$$p^2 \approx p'^2 - 2 \sum_{ij} p'_i \varepsilon_{ij} p'_j = p'^2 - 2(\mathbf{p}' \varepsilon \mathbf{p}'), \quad (29.7)$$

а $V_\varepsilon(\mathbf{x})$ — в $V_\varepsilon[(1 + \varepsilon) \mathbf{x}']$.

Если теперь переобозначить \mathbf{x}' через \mathbf{x} , то периоды потенциала $V_\varepsilon[(1 + \varepsilon) \mathbf{x}]$ будут совпадать с периодами $V_0(\mathbf{x})$, и их разность можно разложить в ряд по ε , записав

$$V_\varepsilon[(1 + \varepsilon) \mathbf{x}] - V_0(\mathbf{x}) = \sum_{ij} V_{ij}(\mathbf{x}) \varepsilon_{ij} \equiv (\mathbf{V} \varepsilon), \quad (29.8)$$

где

$$V_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2 - \delta_{ij}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V_\varepsilon[(1 + \varepsilon) \mathbf{x}] - V_0(\mathbf{x})}{\varepsilon_{ij}}. \quad (29.9)$$

Численный коэффициент в (29.9) учитывает, что при заданном ε_{ij} при $i \neq j$ в (29.8) входят два одинаковых слагаемых $V_{ij}\varepsilon_{ij}$ и $V_{ji}\varepsilon_{ji}$. Следовательно, в результате преобразования (29.5) мы получили гамильтониан

$$\mathcal{H}'(\varepsilon) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_\varepsilon + \mathcal{H}_{\varepsilon\text{co}}, \quad (29.10)$$

где

$$\mathcal{H}_\varepsilon = -\frac{(\mathbf{p}\varepsilon\mathbf{p})}{m} + (\mathbf{V}\varepsilon), \quad (29.11)$$

$$\mathcal{H}_{\varepsilon\text{co}} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \{[(\varepsilon\nabla V_0)[\sigma\mathbf{p}]] - (\nabla(\varepsilon\mathbf{V}_0) \cdot [\sigma\mathbf{p}]) - [(\sigma\nabla V_0)(\varepsilon\mathbf{p})]\}. \quad (29.12)$$

Первый член в (29.12) связан с тем, что при преобразовании (29.5) оператор ∇ переходит в $(1 - \varepsilon)\nabla$. Гамильтониан $\mathcal{H}'(\varepsilon)$ в новых координатах имеет ту же периодичность, что и гамильтониан \mathcal{H}_0 .

При преобразовании (29.5) собственная функция $\mathcal{H}(\varepsilon)$ (29.1) $\psi_{\varepsilon\mathbf{k}'} = u_{\varepsilon\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}$, соответствующая энергии $E(\varepsilon, \mathbf{k}')$ и волновому вектору \mathbf{k}' в деформированном кристалле, переходит в функцию

$$\psi'_\mathbf{k} = u'_{\varepsilon\mathbf{k}'}[(1 + \varepsilon)\mathbf{x}'] e^{i\mathbf{k}'(1+\varepsilon)\mathbf{x}'} = u'_\mathbf{k}[(1 + \varepsilon)\mathbf{x}'] e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}'},$$

где

$$\mathbf{k} = (1 + \varepsilon)\mathbf{k}'.$$

Эта функция имеет ту же периодичность, что и функции $\psi_{n\mathbf{k}}$ или $\varphi_{n\mathbf{k}}$ с тем же волновым вектором \mathbf{k} , и может быть разложена по этим функциям:

$$\psi'_\mathbf{k} = \sum_n c_{n\mathbf{k}} \varphi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V'}} \sum_n c_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}; \quad (29.13)$$

здесь $\psi_{n\mathbf{k}_0}$ — собственные функции $\mathcal{H}_0(\mathbf{x})$ в точке \mathbf{k}_0 . При этом в (29.13) \mathbf{k} отсчитывается от точки \mathbf{k}_0 .

Используя теорию возмущений, найдем изменение энергии при деформации:

$$\delta E(\varepsilon) = E(\varepsilon, (1 - \varepsilon)\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}), \quad (29.14)$$

где $E(\varepsilon, (1 - \varepsilon)\mathbf{k})$ — энергия в деформированном кристалле в точке $\mathbf{k}' = (1 - \varepsilon)\mathbf{k}$, куда переходит точка \mathbf{k} при деформации. Для этого подставим (29.13) в (29.10), умножим слева на $\varphi_{n'\mathbf{k}'}$, проинтегрируем по \mathbf{x} . Тогда получим систему уравнений, подобную (21.6):

$$\sum_n \left[(E_{n\mathbf{k}_0} - E) \delta_{nn'} + \mathcal{H}'_{n'n} \right] c_n = 0, \quad (29.15)$$

где

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_\mathbf{k} + \mathcal{H}_\varepsilon + \mathcal{H}_{\varepsilon\text{co}} + \mathcal{H}_{\varepsilon\mathbf{k}}. \quad (29.16)$$

Здесь \mathcal{H}_ε и $\mathcal{H}_{\varepsilon_0}$ определяются уравнениями (29.11) и (29.12), а \mathcal{H}_k в соответствии с (21.9), (17.33) равно

$$\mathcal{H}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar k \pi}{m}, \quad \text{где } \pi = p + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\sigma \nabla V_0]. \quad (29.17)$$

Возмущение $\mathcal{H}_{\varepsilon k}$ содержит слагаемые, пропорциональные произведениям компонент ε и k . В нерелятивистском приближении

$$\mathcal{H}_{\varepsilon k} = -2 \frac{(\rho \varepsilon k)}{m}. \quad (29.18)$$

В соответствии с общей теорией возмущений для вырожденного спектра, изложенной в § 15, для определения энергии $E_m(\varepsilon, k)$ в деформированном кристалле в окрестности точки k_0 в зоне m надо в (29.15) с помощью преобразования (15.33) устранить междузонные члены \mathcal{H}'_{mn} , после чего получим систему уравнений

$$\sum_m (\mathcal{H}_{m'm} - E \delta_{m'm}) \bar{c}_m = 0,$$

включающую лишь коэффициенты \bar{c}_m , относящиеся к одной зоне. Энергия $E(\varepsilon, k)$, которая отсчитывается здесь от точки $E_{m k_0}$, определяется решением секулярного уравнения:

$$|\mathcal{H}_{m'm} - E \delta_{mm'}| = 0. \quad (29.19)$$

В нерелятивистском приближении в соответствии с (15.47), (29.17), (29.18) матричные элементы $\mathcal{H}_{m'm}$ включают следующие слагаемые:

$$\mathcal{H}_{m'm}^k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{mm'} + \frac{\hbar}{m} k \rho_{m'm} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_s \frac{(k \rho_{m's})(k \rho_{sm})}{E_m - E_s}, \quad (29.20)$$

$$\mathcal{H}_{m'm}^\varepsilon = \sum_{ij} \left(-\frac{(\rho_i \rho_j)_{m'm}}{m} + V_{m'm}^{ij} \right) \varepsilon_{ij} = \sum_{ij} D_{m'm}^{ij} \varepsilon_{ij}, \quad (29.21)$$

$$\mathcal{H}_{m'm}^{\varepsilon k} = -2 \frac{(\rho_{m'm} \varepsilon k)}{m} + \frac{\hbar}{m} \sum_s \frac{(k \rho_{m's}) \mathcal{H}_{sm}^\varepsilon + \mathcal{H}_{m's}^\varepsilon (k \rho_{sm})}{E_m - E_s}, \quad (29.22)$$

где

$$D_{m'm}^{ij} = -\frac{(\rho_i \rho_j)_{m'm}}{m} + V_{m'm}^{ij}.$$

Первое слагаемое в (29.22) произошло за счет возмущения $\mathcal{H}_{k\varepsilon}$, (29.18), а второе слагаемое, которое обычно играет большую роль, чем первое, появляется во втором приближении теории возмущений за счет \mathcal{H}_ε и \mathcal{H}_k . В точке экстремума первое слагаемое всегда равно нулю, а второе может быть отлично от нуля. Если группа волнового вектора содержит инверсию и элемент $(i|\tau)$ коммутирует со всеми элементами группы, то и эти

слагаемые равны нулю, так как на функциях одинаковой четности $P_{ms} = 0$, а на функциях разной четности $\mathcal{H}_{ms}^e = 0$.

Релятивистский член $\mathcal{H}_{\epsilon 0}$, описывающий спин-орбитальное взаимодействие в точке \mathbf{k}_0 , можно, как и в § 21, либо сразу включить в \mathcal{H}_0 , либо рассматривать как возмущение. При этом в последнем случае при расчете релятивистских поправок, пропорциональных ϵ , надо учесть не только вклад от члена $\mathcal{H}_{\epsilon 0}$, появляющийся в первом приближении теории возмущений, но и перекрестные члены от \mathcal{H}_ϵ и $\mathcal{H}_{\epsilon 0}$, появляющиеся во втором приближении, причем, как правило, эти вторые слагаемые больше первых.

Мы не будем здесь выписывать явно все эти слагаемые, тем более, что их гораздо проще учесть методом инвариантов.

Подчеркнем, что все матричные элементы в (29.20) — (29.22) вычисляются на волновых функциях $\psi_{n\mathbf{k}_0}$ недеформированного кристалла и правила отбора определяются группой волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$ в недеформированном кристалле. При этом в соответствии с (29.14) определяется спектр в точке \mathbf{k}'_0 деформированного кристалла, соответствующей точке \mathbf{k}_0 недеформированной обратной ячейки и связанной с ней соотношением $\mathbf{k}'_0 = (1 - \epsilon)\mathbf{k}_0$. Изменение энергии в одной и той же точке \mathbf{k} $\Delta E(\epsilon) = E(\epsilon, \mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k})$ согласно (29.14) и (29.16) определяется оператором

$$\mathcal{H}''(\epsilon, \mathbf{k}) = \mathcal{H}'(\epsilon, (1 + \epsilon)\mathbf{k}). \quad (29.16a)$$

Для конкретного расчета матрицы $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \epsilon)$ в данной точке \mathbf{k}_0 необходимо вычислить матричные элементы оператора \mathcal{H}_ϵ на собственных функциях оператора \mathcal{H}_0 , преобразующихся по заданному представлению группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$. Эти матричные элементы имеют размерность энергии и называются константами деформационного потенциала.

Для определения отличных от нуля компонент $\mathcal{H}_{m'm}^e$ в соответствии с правилами отбора, изложенными в § 19, необходимо знать, как преобразуются компоненты V_{ij} .

Из условия инвариантности гамильтониана \mathcal{H}_ϵ к преобразованию координат следует, что

$$\sum_{ij} V'_{ij} \epsilon'_{ij} = \sum_{ij} V_{ij} \epsilon_{ij}, \quad (29.23)$$

где $V'_{ij}(\mathbf{x}) = V_{ij}(g^{-1}\mathbf{x})$ и ϵ'_{ij} — значения компонент V_{ij} и ϵ_{ij} в новой системе координат. Используя (29.23), легко показать, что при всех операциях g , входящих в пространственную группу кристалла G , компоненты $V'_{ij}(\mathbf{x})$ преобразуются по тому же представлению \mathcal{D}_ϵ , что и компоненты ϵ_{ij} , т. е. так же, как произведения $\rho_i \rho_j$ или $x_i x_j$, и поэтому наличие или отсутствие этих слагаемых в (29.11) никак не сказывается на правилах отбора.

Подчеркнем, что указанное правило преобразования компонент V_{ij} справедливо лишь при $g \in G_{k_0}$, тогда как для компонент ε_{ij} , $\rho_i \rho_j$ аналогичное преобразование справедливо при любых преобразованиях координат. Очевидно, что множители, стоящие при ε_{ij} в $\mathcal{H}_{\varepsilon_{\text{со}}}$, преобразуются так же, как и V_{ij} .

Что касается определения явного вида $V_{ij}(\mathbf{x})$, то эта задача еще более сложна, чем определение невозмущенного потенциала $V_0(\mathbf{x})$, так как для этого требуется точное решение самосогласованной задачи в деформированном кристалле, позволяющее найти отличие $V_\varepsilon(\mathbf{x})$ от $V_0(\mathbf{x})$ при малых деформациях.

В первоначальных вариантах теории рассеяния, в которую, как мы увидим ниже, входят те же величины V_{ij} , делались определенные предположения о связи между $V_0(\mathbf{x})$ и $V_\varepsilon(\mathbf{x})$. Хотя, как показано выше, явный вид $V_{ij}(\mathbf{x})$ никак не сказывается на правилах отбора и поэтому он может быть существенен лишь при определении численной величины соответствующих интегралов, мы ниже коротко остановимся на этих моделях.

В первой из этих моделей, предложенной Блохом и называемой приближением деформируемых ионов, предполагалось, что если при деформации решетки точка \mathbf{x} переходит в \mathbf{x}' , то потенциал $V_\varepsilon(\mathbf{x}')$ равен потенциалу $V_0(\mathbf{x})$ в недеформированной решетке, т. е. при однородной деформации, когда $\mathbf{x}' = (1 + \varepsilon)\mathbf{x}$,

$$V_\varepsilon[(1 + \varepsilon)\mathbf{x}] = V_0(\mathbf{x}).$$

В соответствии с (29.9) это означает, что в приближении деформируемых ионов $V_{ij}(\mathbf{x}) = 0$ и

$$\mathcal{H}_{m'm}^\varepsilon = - \sum_{ij} \frac{\varepsilon_{ij}(\rho_i \rho_j)_{m'm}}{m}. \quad (29.24)$$

Во второй модели, предложенной Нордгеймом и называемой приближением жестких ионов, предполагалось, что потенциал $V(\mathbf{x})$ равен сумме потенциалов отдельных ионов и деформация решетки приводит лишь к смещению центров этих ионов \mathbf{R}_n , не искажая потенциалов каждого из них. В атомных полупроводниках для электрона и дырки в этой модели следует считать, что $V(\mathbf{x})$ равен сумме потенциалов отдельных атомов V_a .

Если в элементарной ячейке содержится один атом, то в модели жестких ионов

$$V_0(\mathbf{x}) = \sum_n V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n), \quad V_\varepsilon(\mathbf{x}) = \sum_n V_a(\mathbf{x} - (1 + \varepsilon)\mathbf{R}_n),$$

так как смещение иона $\delta\mathbf{R}_n = \varepsilon\mathbf{R}_n$. Отсюда

$$\begin{aligned} V_\varepsilon[(1 + \varepsilon)\mathbf{x}] - V_0(\mathbf{x}) &= \sum_n V_a[(1 + \varepsilon)(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)] - V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n) = \\ &= \sum_n \sum_{ij} \frac{\partial V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)}{\partial x_i} \varepsilon_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)_j \end{aligned}$$

и, следовательно, в соответствии с (29.9)

$$V_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{\partial V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)}{\partial x_i} (\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)_j + \frac{\partial V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)}{\partial x_j} (\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)_i \right\}. \quad (29.25)$$

Если элементарная ячейка содержит больше одного атома, то при деформации кристалла может происходить смещение одной подрешетки относительно другой. Это смещение $\mathbf{u}^{lm} = \mathbf{u}_l - \mathbf{u}_m$ определяется тензором третьего ранга Γ , симметричным по последним двум индексам:

$$u_k^{lm} = \sum_{ij} \Gamma_{kij}^{lm} \varepsilon_{ij}. \quad (29.26)$$

Отличные от нуля компоненты этого тензора можно определить по правилам, изложенным в § 20. Представления, по которым преобразуются компоненты u_k^{lm} , совпадают с представлением, соответствующим оптическим колебаниям при $\mathbf{q} = 0$, и их можно определить по общим правилам, изложенным в § 15. Их можно также легко определить, учитывая, что при всех операциях группы, не меняющих местами подрешетки, компоненты u_k^{lm} преобразуются как компоненты обычного вектора; если группа содержит операции, при которых подрешетки меняются местами, то при этих операциях u^{lm} дополнительно меняют знак. Например, для решетки типа Ge, где эти компоненты преобразуются по представлению F_2^+ , т. е. как xy , xz и yz , тензор Γ имеет одну отличную от нуля независимую компоненту $\Gamma_{xyz} = \Gamma_{xzy} = \Gamma_{zxy}$.

Для решетки, содержащей в элементарной ячейке два одинаковых атома, находящихся в узлах \mathbf{R}_n и \mathbf{R}'_n , в модели жестких ионов

$$V_0(\mathbf{x}) = \sum_n [V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n) + V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}'_n)],$$

$$V_\varepsilon(\mathbf{x}) = \sum_n [V_a(\mathbf{x} - (1 + \varepsilon)\mathbf{R}_n) + V_a(\mathbf{x} - (1 + \varepsilon)\mathbf{R}'_n - \Gamma\varepsilon)].$$

Отсюда следует, что

$$V_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} [V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n) + V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}'_n)] (\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)_j + \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial x_j} [V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n) + V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}'_n)] (\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)_i \right\} + \sum_{kn} \Gamma_{kij} \frac{\partial V_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}'_n)}{\partial x_k}. \quad (29.27)$$

Количественные расчеты, проведенные для кремния [24.1], показали, что обе модели, «деформируемых ионов» и «жестких ионов», приводят к значениям констант деформационного потенциала, существенно отличающимся от экспериментальных значений. Поэтому для численных расчетов требуются более сложные

модели. Надо, однако, еще раз подчеркнуть, что число отличных от нуля линейно независимых компонент $D_{m'm}^{ij}$ никак не зависит от выбранной модели и определяется только группой волнового вектора и тем представлением, по которому преобразуются волновые функции в точке экстремума.

Для невырожденных зон, т. е. для одномерных представлений, отличны от нуля лишь матричные элементы тех компонент $D_{ij} = -p_i p_j / m + V_{ij}$, которые преобразуются по единичному представлению, т. е. в соответствии с (21.14), (21.15) в $E(\mathbf{e}, \mathbf{k})$ могут входить лишь компоненты ϵ_{ij} или их комбинации, инвариантные к преобразованиям группы волнового вектора. Для произвольной точки зоны Бриллюэна, где группа волнового вектора $G_{\mathbf{k}_0}$ не содержит никаких элементов, кроме единичного и, возможно, инверсию, у тензора констант деформированного потенциала в принципе отличны от нуля все компоненты. Аналогично тензору эффективной массы \mathbf{m}^{*-1} этот тензор можно привести к главным осям, и в соответствующей системе координат

$$E(\mathbf{e}) = D_{xx}\epsilon_{xx} + D_{yy}\epsilon_{yy} + D_{zz}\epsilon_{zz}. \quad (29.28)$$

При этом главные оси тензоров \mathbf{m}^{*-1} и \mathbf{D} в общем случае не совпадают. В тех случаях, когда направление главных осей определяется осями симметрии, то эти оси для обоих тензоров естественно совпадают. Так, если группа волнового вектора содержит оси выше второго порядка, то $D_{xx} = D_{yy} = D_{\perp}$, $D_{zz} = D_{\parallel}$ и

$$E(\mathbf{e}) = D_{\perp}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + D_{\parallel}\epsilon_{zz}. \quad (29.29)$$

Часто вместо компонент D_{\perp} и D_{\parallel} вводят компоненты $\Xi_d = D_{\perp}$, $\Xi_u = D_{\parallel} - D_{\perp}$. Если экстремумы зон расположены в точках \mathbf{k}_α , находящихся на различных лучах звезды $\{\mathbf{k}_0\}$, как это имеет место, например, в зоне проводимости Ge и Si, то формулы (29.28) или (29.29) справедливы для каждого из экстремумов в системе его главных осей, которые, конечно, для различных экстремумов не совпадают, что и приводит к сдвигу неэквивалентных экстремумов, полученному в предыдущем параграфе из общих групповых соображений.

Обычно деформация задается в главных осях кристалла, тогда как симметрия тензора \mathbf{D} определяется расположением осей симметрии для данного экстремума. Поэтому для определения его сдвига необходимо найти компоненты тензора деформации в системе осей симметрии данного экстремума. Эти компоненты ϵ_{ij}^α связаны с соответствующими компонентами $\epsilon_{i'j'}$ в системе главных осей кристалла:

$$\epsilon_{ij}^\alpha = \sum_{i'j'} \cos(i'i) \cos(j'j) \epsilon_{i'j'}, \quad (29.30)$$

где $\cos(i'i)$ — косинус угла между осями i и i' . Если направление этих осей задано кристаллографическими индексами i, k, l и

i', k', l' , соответственно, то для кубических систем

$$\cos(i, k, l; i', k', l') = \frac{ii' + kk' + ll'}{[(i^2 + k^2 + l^2)(i'^2 + k'^2 + l'^2)]^{1/2}}. \quad (29.31)$$

Используя симметрию тензора ϵ , удобно перейти от двухкомпонентной записи ϵ_{ij} к однокомпонентной ϵ_j в соответствии с [15.4], обозначив $\epsilon_{xx} = \epsilon_1$, $\epsilon_{yy} = \epsilon_2$, $\epsilon_{zz} = \epsilon_3$, $2\epsilon_{xy} = \epsilon_6$, $2\epsilon_{xz} = \epsilon_5$, $2\epsilon_{yz} = \epsilon_4$. Тогда последнюю формулу можно переписать в виде

$$\epsilon_j^\alpha = \sum_{j'} \Theta_{jj'}^\alpha \epsilon_{j'}, \quad (29.32)$$

где

$$\Theta_{11} = \cos^2(xx'), \quad \Theta_{16} = \cos(xx') \cos(xy'), \quad \Theta_{61} = 2\Theta_{16}, \\ \Theta_{66} = \cos^2(xy') + \cos^2(yy') \text{ и т. п.}$$

Так как при заданной деформации компоненты ϵ_j' для разных экстремумов будут различны, то и сдвиг этих экстремумов может быть различным.

Для кубических групп волнового вектора все три компоненты тензора одинаковы, $D_{ii} = C$, и соответственно

$$E(\epsilon) = C\epsilon = C \sum_i \epsilon_{ii}. \quad (29.33)$$

Входящая сюда константа деформационного потенциала, согласно (29.11), равна

$$C = \frac{1}{3\mathcal{V}} \left\{ \frac{\hbar^2}{m} \int \psi_{\mathbf{k}_0}^* \nabla^2 \psi_{\mathbf{k}_0} d\mathbf{x} + \int \psi_{\mathbf{k}_0}^* \text{Sp} V \psi_{\mathbf{k}_0} d\mathbf{x} \right\}, \quad (29.34)$$

где $\text{Sp} V = \sum_i V_{ii}(\mathbf{x})$.

В приближении деформируемых ионов, когда в соответствии с (29.24) второе слагаемое в (29.34) обращается в нуль, константа деформационного потенциала в точке $\mathbf{k} = 0$ определяется выражением

$$C = -\frac{1}{3\Omega} \frac{\hbar^2}{m} \int_{\Omega} |\nabla u_0|^2 d\mathbf{x}. \quad (29.35)$$

Здесь мы использовали формулу Грина, согласно которой для произвольных функций φ и ψ

$$\int \psi \nabla^2 \varphi d\mathbf{x} + \int \nabla \psi \nabla \varphi d\mathbf{x} = \oint \psi \frac{\partial \varphi}{\partial n} ds = \oint \psi (\nabla \varphi ds). \quad (29.36)$$

При этом в силу периодичности блоховского множителя $u_0(\mathbf{x})$ интеграл по поверхности элементарной ячейки s обращается в нуль.

В приближении жестких ионов в соответствии с (29.25) в точке $\mathbf{k} = 0$

$$C = -\frac{1}{3\Omega} \left[\frac{\hbar^2}{m} \int_{\Omega} |\nabla u_0|^2 d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\mathbf{x} \nabla V_0) |u_0|^2 d\mathbf{x} \right]. \quad (29.37)$$

При этом пренебрегается полем остальных атомов, кроме атома, находящегося в центре данной элементарной ячейки, т. е. принимается, что $V_0(\mathbf{x}) = V_a(\mathbf{x})$. Хотя последнее предположение, по-видимому, мало обоснованно, оно обычно принимается в этой модели. Путем несложных, хотя и довольно громоздких преобразований выражение (29.37) можно переписать в виде [28.7]

$$C = -\frac{1}{3\Omega} \oint \mathbf{x}_n (E - V_0) |u_0|^2 ds, \quad (29.37a)$$

где \mathbf{x}_n — составляющая радиуса-вектора, нормальная к поверхности.

В случае вырожденных зон деформация приводит не только к смещению зоны как целого, но может вызывать и расщепление зон в результате частичного или полного снятия вырождения при понижении симметрии. Поэтому характер изменения спектра при деформации оказывается более сложным. В качестве примера в следующем параграфе мы рассмотрим влияние деформации на спектр валентной зоны в германии и кремнии и соединениях A_3B_5 .

Наряду со слагаемыми, пропорциональными ϵ , k^2 и ϵk , гамильтониан $\mathcal{H}(\epsilon, \mathbf{k})$ может содержать члены, пропорциональные ϵk^2 . Эти слагаемые, описывающие изменение эффективных масс при деформации, появляются в третьем приближении теории возмущений.

В соответствии с общей формулой (15.48) в случае невырожденной зоны с учетом (29.16a)

$$\begin{aligned} \Delta E_m^{\epsilon k^2} = & -\mathcal{H}_{mm}^{\epsilon} \sum_s \frac{\mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{sm}^k}{(E_s - E_m)^2} + \\ & + \sum_{ss'} \frac{\mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{ss'}^k \mathcal{H}_{s'm}^{\epsilon} + \mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{ss'}^{\epsilon} \mathcal{H}_{s'm}^k + \mathcal{H}_{ms}^{\epsilon} \mathcal{H}_{ss'}^k \mathcal{H}_{s'm}^k}{(E_s - E_m)(E_{s'} - E_m)} - \\ & - \sum_s \frac{\mathcal{H}_{ms}^{\epsilon k} \mathcal{H}_{sm}^k + \mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{sm}^{\epsilon k}}{E_s - E_m} + 2 \operatorname{Re} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_s \frac{(k p_{ms})(k p_{sm})}{E_m - E_s}. \end{aligned} \quad (29.38)$$

Как правило, изучение эффектов, связанных с изменением эффективных масс, представляет интерес, лишь если относительное изменение массы существенно превышает саму величину относительной деформации ϵ . Последние слагаемые в (29.38) не приводят к таким эффектам, а первые могут привести, если энергетический знаменатель $E_s - E_m$ для одной или нескольких зон мал по сравнению со значением соответствующей константы деформационного потенциала, т. е. в том случае, когда ближайшие зоны расположены достаточно близко и между соответствующими состояниями s и m отличен от нуля либо матричный элемент импульса, либо матричный элемент оператора \mathcal{H}_{ϵ} , либо и тот и другой, что возможно, когда функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ и $\psi_{m\mathbf{k}_0}$ не об-

ладают определенной четностью. Если между ближайшими зонами отличен от нуля лишь матричный элемент импульса, то

$$\Delta E_m^{e k^2} = \sum_s (\mathcal{H}_{ss}^e - \mathcal{H}_{mm}^e) \frac{\mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{sm}^k}{(E_s - E_m)^2} + \sum_{s' \neq s} \frac{\mathcal{H}_{ms}^k \mathcal{H}_{s'm}^k \mathcal{H}_{ss'}^e}{(E_s - E_m)(E_{s'} - E_m)}. \quad (29.39)$$

В том случае, когда существенно лишь взаимодействие двух ближайших зон и эти зоны не вырождены, изменение эффективных масс пропорционально изменению ширины запрещенной зоны ΔE_g ,

$$\Delta E_g = \mathcal{H}_{ss}^e - \mathcal{H}_{mm}^e = \sum_{ij} (D_{ij}^s - D_{ij}^m) \varepsilon_{ij}; \quad (29.40)$$

в этом случае

$$\Delta E_m = \frac{\delta E_g(\varepsilon)}{E_g^2} \frac{\hbar^2}{m^2} (\mathbf{k}\mathbf{p})_{ms} (\mathbf{k}\mathbf{p})_{sm},$$

т. е.

$$\Delta \frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{\delta E_g(\varepsilon)}{E_g} \frac{1}{m_{ij}^{sm}}, \quad (29.41)$$

где

$$\frac{1}{m_{ij}^{sm}} = \frac{1}{m^2 E_g} p_{ms}^i p_{sm}^j$$

— вклад в эффективную массу, обусловленный взаимодействием зон m и s . Поэтому в указанном случае существенные изменения испытывают лишь те массы, в которые основной вклад дает взаимодействие ближайших зон. При этом деформация не меняет симметрию поверхностей постоянной энергии, т. е. равные массы изменяются при деформации одинаковым образом.

Если же состояние s в (29.39) вырождено, то, как будет показано в следующем параграфе, симметрия спектра может измениться. Аналогичное явление может иметь место и в том случае, когда оператор \mathcal{H}_e имеет отличный от нуля матричный элемент между ближайшими зонами. В соответствии с (29.38), если эти зоны не вырождены, то в указанном случае

$$\Delta E_m^{e k^2} = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{1}{E_s - E_m} 2\text{Re} \left\{ \mathcal{H}_{sm}^e \sum_{s'} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p})_{ms'} (\mathbf{k}\mathbf{p})_{s's}}{E_{s'} - E_m} \right\}. \quad (29.42)$$

Формула (29.41) непосредственно применима для кристаллов PbS, PbSe, PbTe, где экстремумы зон расположены в точках L на краю зоны Бриллюэна. При этом в нерелятивистском приближении взаимодействие этих зон определяет только поперечную массу m_{\perp} . При учете релятивистских эффектов, которые в этих кристаллах существенны, так как у них спин-орбитальное расщепление сравнимо с кристаллическим и с шириной запрещенной зоны, взаимодействие ближайших зон определяет обе массы.

Примером кристалла, где существенен второй эффект, определяемый уравнением (29.42), является Si. Экстремумы зоны проводимости Si расположены на осях [100] в точке k_0 , находящейся на расстоянии $0,15(2\pi/a_0)$ от края зоны, т. е. от точки X, и соответствуют представлению Δ_1 . В точке X две ветви спектра Δ_1 и Δ'_2 сливаются, образуя представление X_1 или X_3 , поэтому их расщепление в точке k_0 сравнительно невелико и составляет около 0,5 эв.

В соответствии с правилами отбора матричный элемент оператора $\mathcal{H}^e \mathcal{H}_{yz}^e = \mathcal{H}_{zy}^e = C'$ между состояниями Δ_1 и Δ'_2 отличен от нуля, так как, как видно из табл. 11.1 (стр. 100), компоненты y, z преобразуются по представлению $B_2 = \Delta_1^* \times \Delta'_2$ группы C_{4v} , являющейся группой направлений для точек Δ .

Единственные представления Δ_s , для которых отличны от нуля матричные элементы p_{s1} и $p_{s2'}$ одновременно, это представления Δ_5 , по которым преобразуются функции Y_l и Z_l . Не равные нулю матричные элементы: $\langle 1 | p_y | Y_l \rangle = \langle 1 | p_z | Z_l \rangle$ и $\langle X | p_z | Y_l \rangle = \langle X | p_y | Z_l \rangle$.

Так как все эти представления вещественны и $k_0 \neq -k_0$, то согласно (19.7)

$$p_{\alpha\beta}^{k_0} = -p_{\beta\alpha}^{-k_0} \quad \text{и} \quad \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{ek_0} = \mathcal{H}_{\beta\alpha}^{e, -k_0}.$$

Поэтому ΔE_{ek^2} для точки k_0 в соответствии с формулой (29.42) равно

$$\Delta E_{ek^2} = \frac{2\hbar^2 C' e_{yz} k_y k_z}{m' \Delta}, \quad (29.43)$$

где

$$C' = \langle X | \mathcal{H}_{yz}^e | 1 \rangle, \quad \Delta = E_{\Delta'_2 k_0} - E_{\Delta_1 k_0},$$

$$\frac{1}{m'} = \frac{2}{m^2} \sum_l \frac{\langle 1 | p_y | Y_l \rangle \langle Y_l | p_z | X \rangle}{E_{\Delta_1 k_0} - E_{\Delta_1 k_0}}. \quad (29.44)$$

Если теперь перейти к системе осей x' [100], y' [011], z' [0 $\bar{1}$ 1], то спектр $E(\varepsilon, \mathbf{k})$ с учетом (29.43) запишется

$$E(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{\perp}} \left(1 + \frac{2m_{\perp} C' e_{yz}}{m' \Delta} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\perp}} \left(1 - \frac{2m_{\perp} C' e_{yz}}{m' \Delta} \right). \quad (29.45)$$

Заметим, что если бы поправки к спектру порядка εk^2 вычислялись методом инвариантов, то наряду со слагаемым $\varepsilon_{yz} k_y k_z$ в ΔE_{ek^2} вошли бы и другие инварианты группы C_{4v} , т. е., как видно из табл. 11.1 и 26.1, слагаемые $(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})(k_y^2 - k_z^2)$, εk^2 , $\varepsilon_{xx} k^2$, εk_x^2 , $\varepsilon_{xx} k_x^2$. Как будет показано в следующем параграфе, преимущественный вклад именно слагаемого $\varepsilon_{yz} k_y k_z$ связан с особенностями спектра в точке X, находящейся вблизи экстремума k_0 .

§ 30. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ВЫРОЖДЕННЫЕ ЗОНЫ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Рассмотрим, как изменяется спектр в точках нулевого наклона для вырожденных зон. Такими точками без учета спина для всех кубических кристаллов, например, является точка Γ , где имеются шесть (для T_d — три) представлений, вырожденных без учета спина: Γ_{12} , Γ'_{12} , Γ_{15} , Γ'_{15} , Γ_{25} , Γ'_{25} . В результате спин-орбитального взаимодействия трехмерные представления Γ_{15} , Γ'_{15} и Γ_{25} , Γ'_{25} расщепляются на двумерное (с учетом спина) представление Γ_6^+ , Γ_6^- или Γ_7^+ , Γ_7^- и четырехкратно вырожденное Γ_8^+ , Γ_8^- . Представления Γ_{12} , Γ'_{12} при учете спина также переходят в Γ_8^+ , Γ_8^- .

В Ge, Si и большинстве соединений A_3B_5 вершине валентной зоны как раз соответствует представление Γ_8^+ или Γ_8 , произошедшее в результате расщепления представлений Γ'_{25} или Γ_{25} . При этом в кристаллах класса T_d , например в решетках типа ZnS, оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ для представления Γ_8 включает релятивистские линейные по \mathbf{k} члены, роль которых мы рассмотрим ниже. В кристаллах классов O_h , группа которых содержит инверсию, таких членов нет. В кристаллах типа алмаза (O_h^f) точками нулевого наклона для вырожденных представлений являются также точки X и L .

Рассмотрим сперва точку Γ . Базисные функции представлений Γ_{15} и Γ'_{15} преобразуются при всех операциях группы как x , y , z или J_x , J_y , J_z соответственно, а базисные функции представлений Γ'_{25} и Γ_{25} — как yz , zx , xy или xz^2y^2 , yz^2x^2 , zx^2y^2 . Будем для краткости обозначать и те и другие функции как X , Y , Z , так как для операторов \mathcal{H}_k и \mathcal{H}_e правила отбора для внутрizonных матричных элементов для всех этих представлений одинаковы.

Поскольку оператор D в (29.1) является четным и его компоненты D_{ij} , как и компоненты e_{ij} , согласно табл. 26.2 (стр. 318) преобразуются по представлениям Γ_1 , Γ_{12} , Γ'_{25} , то в данном случае, т. е. случае a_1 , в соответствии с формулой (19.45) имеются три отличных от нуля линейно независимых матричных элемента оператора:

$$l = D_{xx}^{XX}, \quad m = D_{yy}^{XX}, \quad n = D_{xy}^{XY}, \quad (30.1)$$

и соответственно матрица $\mathcal{H}(\varepsilon)$ в базисе X, Y, Z имеет вид, подобный (24.5):

$$\mathcal{H}(\varepsilon) = \begin{vmatrix} l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{xz} \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} \\ n\varepsilon_{xz} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \end{vmatrix}. \quad (30.2)$$

Как указывалось выше, спин-орбитальное взаимодействие расщепляет шестикратно вырожденные с учетом спина представления Γ_{15} , Γ'_{15} , Γ_{25} , Γ'_{25} на Γ_6^+ , Γ_6^- или Γ_7^+ , Γ_7^- и Γ_8^+ , Γ_8^- . Базисные функции для этих представлений приведены выше (уравнение (23.2)). Используя (30.2), легко проверить, что в указанном базисе для представлений Γ_8 матрица $\mathcal{H}(\varepsilon)$ имеет вид, подобный (24.12):

$$\mathcal{H}(\varepsilon) = \begin{vmatrix} f & h & j & 0 \\ h^* & g & 0 & j \\ j^* & 0 & g & -h \\ 0 & j^* & -h^* & f \end{vmatrix}, \quad (30.3)$$

где

$$f = \frac{l+m}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + m\varepsilon_{zz}, \quad g = \frac{1}{3} [f + 2[m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + l\varepsilon_{zz}]], \quad (30.4)$$

$$h = -\frac{1}{\sqrt{3}} n(i\varepsilon_{xz} + \varepsilon_{yz}), \quad j = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\frac{1}{2} (l-m)(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - i n \varepsilon_{xy} \right].$$

Поэтому определитель $|\mathcal{H}(k) + \mathcal{H}(\varepsilon) - IE|$ по форме совпадает с определителем (24.12) для недеформированного кристалла, отличаясь от него лишь заменой F на $\bar{F} = F + f$ и т. д. Как показано в § 24, общее решение соответствующего секулярного уравнения (24.12) имеет вид (24.13).

Подставив в (24.13) значения соответствующих элементов из (24.12) и (30.4), найдем спектр электронов в деформированном кристалле:

$$E_{1,2} = Ak^2 + a\varepsilon \pm [\mathcal{E}_k + \mathcal{E}_{\varepsilon k} + \mathcal{E}_\varepsilon]^{1/2}, \quad (30.5)$$

где

$$\mathcal{E}_k = B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2), \quad (30.6)$$

$$\mathcal{E}_{\varepsilon k} = Bb [3(k_x^2 \varepsilon_{xx} + k_y^2 \varepsilon_{yy} + k_z^2 \varepsilon_{zz}) - k^2 \varepsilon] + 2Dd (k_x k_y \varepsilon_{xy} + k_x k_z \varepsilon_{xz} + k_y k_z \varepsilon_{yz}), \quad (30.7)$$

$$\mathcal{E}_\varepsilon = \frac{b^2}{2} [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})^2] + d^2 (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2). \quad (30.8)$$

Здесь

$$a = \frac{l+2m}{3}, \quad b = \frac{l-m}{3}, \quad d = \frac{n}{\sqrt{3}}, \quad C^2 = D^2 - 3B^2.$$

Оператор $\mathcal{H}(\varepsilon)$ можно получить и методом инвариантов, аналогично тому, как в § 26 был получен оператор $\mathcal{H}(k)$. Для представления Γ_8^\pm этот оператор $\mathcal{H}(\varepsilon)$ включает компоненты $\varepsilon_{\alpha\beta}$, преобразующиеся по представлениям $[\Gamma_8^\pm]^2 = \Gamma_1 + \Gamma_{12} + \Gamma'_{25}$, и так как эти компоненты преобразуются так же, как произведения $k_\alpha k_\beta$, он имеет вид, подобный (26.12), (24.12):

$$\mathcal{H}(\varepsilon) = \left(a + \frac{5}{4} b \right) \varepsilon - b \sum_i J_i^2 \varepsilon_{ii} - \frac{1}{\sqrt{3}} d \sum_{i,j} [J_i J_j] \varepsilon_{ij}. \quad (30.9)$$

В случае, если представление Γ_8^+ , Γ_8^- произошло от представления Γ_{12} , Γ'_{12} , то в нерелятивистском приближении $\mathcal{H}(\varepsilon)$ содержит лишь компоненты ε_{ij} , преобразующиеся по представлениям $[\Gamma_{12}^2] = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_{12}$, т. е. не содержит компонент ε_{ij} с $i \neq j$, и аналогично (26.16) константа $d = 0$.

Из формулы (30.5) видно, что в соответствии с теоретико-групповым рассмотрением зоны легких и тяжелых дырок при деформации за счет инверсии времени остаются двукратно вырожденными. При этом изотропная деформация вызывает смещение зон как целого, равное

$$\Delta E = a\varepsilon, \quad (30.10)$$

а анизотропная деформация расщепляет зоны в точке $\mathbf{k} = 0$ на величину

$$\delta E_{1,2} = E_1 - E_2 = 2\mathcal{E}'_{\varepsilon}{}^{1/2}. \quad (30.11)$$

Растяжение по оси [001] приводит к расщеплению

$$\delta E_{1,2} = 2|b\varepsilon'_{zz}|, \quad (30.12)$$

где $\varepsilon'_{zz} = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy}$ — относительная деформация по оси [001]. При растяжении кристалла по оси [111], когда в соответствии с (29.30) $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon'_{111}/3$, где ε'_{111} — относительное удлинение по этой оси, $\varepsilon'_{111} = \varepsilon_{111} - \varepsilon_{1\bar{1}0} = \varepsilon_{111} - \varepsilon_{11\bar{2}}$,

$$\delta E_{1,2} = \frac{2}{\sqrt{3}}|d\varepsilon'_{111}|. \quad (30.13)$$

Отсюда видно, что константа b определяет расщепление при растяжении по осям [100], [010], [001], а константа d — при растяжении по [111], $[\bar{1}\bar{1}1]$ и т. д.

Рассмотрим спектр при малых кинетических энергиях $E_k \ll \delta E_{1,2}$ и больших энергиях $E_k \gg \delta E_{1,2}$ по отдельности, так как характер спектра в этих областях существенно различен.

Малые энергии. Для того чтобы определить спектр вблизи экстремума при анизотропной деформации, надо разложить выражение (30.5) в ряд по степеням $\mathcal{E}_{\varepsilon k}/\mathcal{E}_{\varepsilon}$, опустив слагаемое \mathcal{E}_k . Тогда в первом приближении получим

$$E_{1,2}(\varepsilon, \mathbf{k}) = a\varepsilon \pm \mathcal{E}'_{\varepsilon}{}^{1/2} + \left(A \mp \frac{Bb\varepsilon}{2\mathcal{E}'_{\varepsilon}{}^{1/2}} \right) k^2 \pm \left\{ \frac{3Bb}{2\mathcal{E}'_{\varepsilon}{}^{1/2}} (k_x^2 \varepsilon_{xx} + k_y^2 \varepsilon_{yy} + k_z^2 \varepsilon_{zz}) + \frac{Dd}{\mathcal{E}'_{\varepsilon}{}^{1/2}} (k_x k_y \varepsilon_{xy} + k_x k_z \varepsilon_{xz} + k_y k_z \varepsilon_{yz}) \right\}. \quad (30.14)$$

Видно, что поверхности постоянной энергии вблизи экстремума в деформированном кристалле являются эллипсоидами,

главные оси которых являются главными осями приведенного тензора деформации с компонентами

$$\epsilon'_{ij} = \begin{cases} \epsilon_{ij} & \text{при } i = j, \\ (Dd/3Bb)\epsilon_{ij} & \text{при } i \neq j. \end{cases} \quad (30.15)$$

Направление этих осей и компоненты тензора ϵ'_{ij} в главных осях можно определить, решая секулярное уравнение

$$|\epsilon'_{ij} - \epsilon''\delta_{ij}| = 0. \quad (30.16)$$

Три корня этого кубического уравнения определяют три компоненты ϵ''_{ii} в главных осях. Согласно (30.14) в этой системе координат

$$E_{1,2}(k) = a\epsilon \pm \mathcal{E}_\epsilon^{1/2} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{k^2}{m_{ii}^*}, \quad (30.17)$$

где

$$\frac{\hbar^2}{2m_{ii}^*} = A \pm \frac{Bb}{2\mathcal{E}_\epsilon^{1/2}} (3\epsilon''_{ii} - \epsilon). \quad (30.18)$$

Например, при растяжении по осям [100], [010] или [001] (рис. 30) для верхней из расщепившихся зон

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} &= A \pm B, \\ \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} &= A \mp \frac{B}{2}. \end{aligned} \quad (30.19)$$

Здесь верхний знак соответствует $b\epsilon'_{zz} > 0$, а нижний — $b\epsilon'_{zz} < 0$. Для нижней из зон знаки меняются на обратные.

При растяжении по оси [111] для верхней из зон

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} = A \pm \frac{D}{\sqrt{3}}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} = A \mp \frac{D}{2\sqrt{3}}, \quad (30.20)$$

где верхний знак соответствует $d\epsilon'_{111} > 0$, а нижний — $d\epsilon'_{111} < 0$. Здесь ось z' направлена по [111], а x' и y' — по перпендикулярным ей осям, например, по $[11\bar{0}]$ и $[11\bar{2}]$;

$$k_{z'} = \frac{1}{\sqrt{3}}(k_x + k_y + k_z), \quad k_{x'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-k_x + k_y),$$

$$k_{y'} = \frac{1}{\sqrt{6}}(k_x + k_y - 2k_z), \quad (30.20a)$$

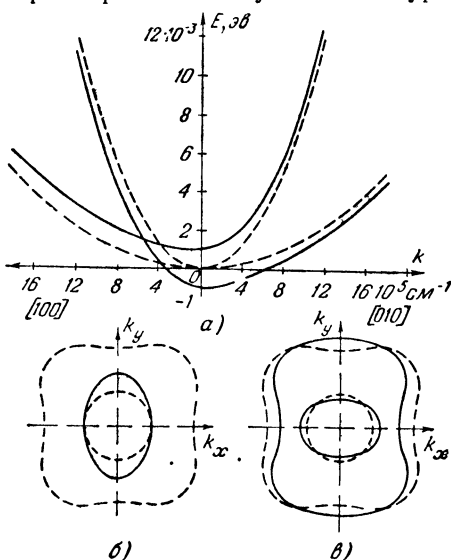


Рис. 30. Зависимость $E(k)$ (а) и вид поверхностей постоянной энергии в p -Ge при деформации по направлению [100]; б) область малых энергий, в) область больших энергий. Пунктирными линиями показан вид $E(k)$ и поверхности постоянной энергии в недеформированном кристалле.

откуда

$$2(k_x k_y + k_x k_z + k_y k_z) = 3k_z^2 - k^2 = 2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2.$$

Выражения (30.14), (30.17) — (30.20) справедливы для верхней из расщепившихся электронных зон до тех пор, пока кинетическая энергия $E(\mathbf{k})$ в этой зоне мала по сравнению с расстоянием до отщепившейся зоны $\delta E_{1,2}$, определяемым выражениями (30.11) — (30.13). При этом сами эффективные массы, как это отмечалось в § 28, не зависят от абсолютной величины деформации, а определяются только ее направлением. От величины деформации зависит лишь та энергия электронов, для которой справедливо разложение (30.14).

Раскладывая выражение (30.5) до членов порядка k^4 , можно учесть непараболичность зоны в деформированном кристалле вблизи экстремума. В этом приближении

$$E_{1,2} = Ak^2 + ae \pm \left\{ \mathcal{E}_e^{1/2} + \frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{\epsilon k}}{\mathcal{E}_e^{1/2}} - \frac{1}{8} \frac{\mathcal{E}_{\epsilon k}^2}{\mathcal{E}_e^{3/2}} + \frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_k}{\mathcal{E}_e^{1/2}} \right\}. \quad (30.21)$$

При больших деформациях в кристаллах с малым спин-орбитальным расщеплением надо также учитывать поправки за счет отщепившейся зоны, так как величина расщепления, создаваемого деформацией, может составить заметную долю спин-орбитального расщепления. Матрица $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ для обеих зон в представлении $(Y_m^{3/2}, Y_m^{1/2})$ приведена в (24.10). Матрицу $\mathcal{H}(\epsilon)$ в этом же представлении легко получить из (30.2). Она имеет вид, подобный (24.10), отличаясь от нее заменой F на f , I на j , H на h и G на g .

Для того чтобы получить поправки к $E(\epsilon, \mathbf{k})$, связанные с отщепившейся зоной, надо частично диагонализировать матрицу $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \epsilon)$, исключив междузонные члены. Как показано в § 15 (уравнение (15.49а)), при такой диагонализации матрица \mathcal{H}_{II} с компонентами $\mathcal{H}_{m'm}$ ($m, m' = 1, 2, 3, 4$) переходит в

$$\tilde{\mathcal{H}}_{II} = \mathcal{H}_{II} + \frac{1}{\Delta} \mathcal{H}_{I\parallel} \mathcal{H}_{II}, \quad (30.22)$$

где $\mathcal{H}_{I\parallel}$ — «недиагональная матрица» с компонентами \mathcal{H}_{ms} ($m = 1, 2, 3, 4, s = 5, 6$), а Δ — спин-орбитальное расщепление: $\Delta = E_I - E_{II}$. Аналогично (24.20) при преобразовании (30.22) матричные элементы $\bar{F} = F + f$, $\bar{G} = G + g$, $\bar{H} = H + h$, $\bar{I} = I + j$ переходят соответственно в

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \tilde{F} + \frac{1}{2\Delta} (|\tilde{H}|^2 + 4|\tilde{I}|^2), & \bar{G} &= \tilde{G} + \frac{1}{2\Delta} [(\tilde{F} - \tilde{G})^2 + 3|\tilde{H}|^2], \\ \bar{H} &= \tilde{H} - \frac{1}{2\Delta} [\tilde{H}(\tilde{F} - \tilde{G}) + 2\sqrt{3}\tilde{I}\tilde{H}^*], & & \\ \bar{I} &= \tilde{I} + \frac{1}{2\Delta} [2\tilde{I}(\tilde{F} - \tilde{G}) - \sqrt{3}\tilde{H}^2]. & & \end{aligned} \quad (30.23)$$

Подставив эти значения \bar{F} , \bar{G} , \bar{H} и \bar{I} в (24.13) и оставляя добавочные слагаемые порядка ϵ^2/Δ и $\epsilon k^2/\Delta$, получим

$$E(\epsilon, \mathbf{k}) = E_0(\epsilon, \mathbf{k}) + \frac{1}{\Delta} \left(\mathcal{E}_\epsilon \pm \frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{\epsilon^3}}{\mathcal{E}_\epsilon^{1/2}} \right) + \frac{1}{\Delta} \left[\mathcal{E}_{\epsilon k} \pm \frac{1}{2\mathcal{E}_\epsilon^{1/2}} \left(\mathcal{E}_{\epsilon^2 k^2} - \frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{\epsilon^3} \mathcal{E}_{\epsilon k}}{\mathcal{E}_\epsilon} \right) \right], \quad (30.24)$$

где $E_0(\epsilon, \mathbf{k})$ определяется формулой (30.14), $\mathcal{E}_{\epsilon k}$ и \mathcal{E}_ϵ — формулами (30.7) и (30.8),

$$\mathcal{E}_{\epsilon^3} = -b^3 [(e - 3\epsilon_{xx})(e - 3\epsilon_{yy})(e - 3\epsilon_{zz})] + 6\sqrt{3} d^3 \epsilon_{xy} \epsilon_{xz} \epsilon_{yz} + 3bd^2 [(e - 3\epsilon_{xx})\epsilon_{yz}^2 + (e - 3\epsilon_{yy})\epsilon_{xz}^2 + (e - 3\epsilon_{zz})\epsilon_{xy}^2], \quad (30.25)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\epsilon^2 k^2} = & -Bb^2 [(k^2 - 3k_x^2)(e - 3\epsilon_{yy})(e - 3\epsilon_{zz}) + \\ & + (k^2 - 3k_y^2)(e - 3\epsilon_{xx})(e - 3\epsilon_{zz}) + (k^2 - 3k_z^2)(e - 3\epsilon_{xx})(e - 3\epsilon_{yy})] + \\ & + 6\sqrt{3} Dd^2 [k_x k_y \epsilon_{xz} \epsilon_{yz} + k_x k_z \epsilon_{xy} \epsilon_{yz} + k_y k_z \epsilon_{xy} \epsilon_{xz}] + \\ & + 3Bd^2 [(k^2 - 3k_x^2)\epsilon_{yz}^2 + (k^2 - 3k_y^2)\epsilon_{xz}^2 + (k^2 - 3k_z^2)\epsilon_{xy}^2] + \\ & + 6Dbd [k_y k_z \epsilon_{yz}(e - 3\epsilon_{xx}) + k_x k_z \epsilon_{xz}(e - 3\epsilon_{yy}) + k_x k_y \epsilon_{xy}(e - 3\epsilon_{zz})]. \end{aligned} \quad (30.26)$$

Из формулы (30.24) видно, что влияние отщепившейся зоны приводит к двум эффектам: во-первых, к нелинейной зависимости расщепления вырожденной зоны при деформации. С учетом отщепившейся зоны

$$\delta E_{1,2} = E_1 - E_2 = 2\mathcal{E}_\epsilon^{1/2} + \frac{\mathcal{E}_{\epsilon^3}}{\Delta \mathcal{E}_\epsilon^{1/2}}. \quad (30.27)$$

Так, при деформации по оси [001]

$$\delta E_{1,2} = 2 |b\epsilon'_{zz}| \left(1 + \frac{b\epsilon'_{zz}}{\Delta} \right), \quad (30.28)$$

а при деформации по [111]

$$\delta E_{1,2} = \frac{2}{\sqrt{3}} |d\epsilon'_{111}| \left(1 + \frac{d\epsilon'_{111}}{\sqrt{3}\Delta} \right). \quad (30.29)$$

Видно, что знак квадратичной по ϵ поправки определяется знаком $b\epsilon'$ или $d\epsilon'$ соответственно. Поэтому этот эффект дает возможность определить знак констант b и d .

Вторым эффектом, который также позволяет определить знак и величину этих констант, является изменение эффективных масс в сильно деформированном кристалле, описываемое последним слагаемым в (30.24).

Согласно этой формуле, при деформации по [001] для верхней из расщепившихся зон*)

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} = A \pm B \left(1 + 2 \frac{|be'_{zz}| + be'_{zz}}{\Delta} \right),$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} = A \mp \frac{B}{2} \left(1 + 2 \frac{|be'_{zz}| + be'_{zz}}{\Delta} \right). \quad (30.30)$$

Видно, что при $be'_{zz} < 0$ для этой зоны эффект отсутствует, а при $be'_{zz} > 0$ изменение обратных масс равно

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} \right) = 4B \frac{be'_{zz}}{\Delta},$$

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} \right) = -2B \frac{be'_{zz}}{\Delta}. \quad (30.30a)$$

Точно так же при деформации по оси [111] при $de'_{111} < 0$ эффект отсутствует для верхней из расщепившихся зон, а при $de'_{111} > 0$ — для нижней. При $de'_{111} > 0$ для верхней зоны

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^*} \right) = \frac{4}{3} D \frac{de'_{111}}{\Delta},$$

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*} \right) = -\frac{2}{3} D \frac{de'_{111}}{\Delta}. \quad (30.31)$$

Отсутствие эффекта для одной из зон в зависимости от знака деформации не является общей особенностью уравнения (30.27), а имеет место лишь для направлений [100] и [111]. В других случаях эффект имеет место при обоих знаках. Например, при растяжении по оси [110] (рис. 31), если только $\epsilon_{110} = -\epsilon_{110} = \epsilon_{xy} \neq 0$, для верхней из зон

$$\frac{\hbar^2}{2m_{z'z'}} = A, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{x'x'}} = A \pm \frac{D}{2}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{y'y'}} = A \mp \frac{D}{2}. \quad (30.32)$$

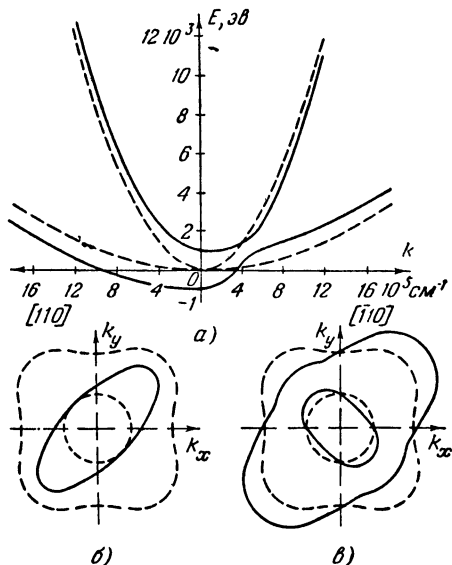


Рис. 31. Зависимость $E(k)$ (а) и вид поверхностей постоянной энергии в Ge при деформации по направлению [110]; б) область малых энергий, в) область больших энергий.

*) Здесь везде E — энергия электрона, поэтому нижнему уровню дырок соответствует наибольшее значение E .

Здесь верхний знак соответствует $d\epsilon_{110} > 0$, нижний — $d\epsilon_{110} < 0$. Поправки к эффективным массам, пропорциональные деформации, определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m_{z'z'}}^*\right) &= \mp 3B \frac{|d\epsilon_{110}|}{\Delta}, \\ \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m_{x'x'}}^*\right) &= \frac{1}{\Delta} \left(D d\epsilon_{110} \pm \frac{3}{2} B |d\epsilon_{110}| \right), \\ \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m_{y'y'}}^*\right) &= \frac{1}{\Delta} \left(D d\epsilon_{110} \pm \frac{3}{2} B |d\epsilon_{110}| \right) \end{aligned} \quad (30.32a)$$

(верхний знак — для верхней из зон, нижний — для нижней). Здесь ось x' направлена по $[110]$, y' — по $[1\bar{1}0]$, z' — по $[001]^*$. Из (30.31), (30.32) и (30.32a) видно, что во всех случаях

$$\delta\left(\frac{1}{m_{xx}^*} + \frac{1}{m_{yy}^*} + \frac{1}{m_{zz}^*}\right) = 0.$$

В приведенном выше выводе спин-орбитальное расщепление Δ предполагается независимым от деформации. Точный гамильтониан $\mathcal{H}(\epsilon)$ для обеих валентных зон Γ_7 и Γ_9 , учитывающий изменение спин-орбитального расщепления и смешивание состояний Γ_7 и Γ_9 , при деформации имеет вид, подобный (26.15) ($j = 1$):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\epsilon) &= (a + 2b)\epsilon - 3b \sum_i J_i^2 \epsilon_{ii} - 2\sqrt{3}d \sum_{i>j} [J_i J_j] \epsilon_{ij} + \\ &+ \frac{1}{3} \Delta (J\sigma) + \left(\alpha + \frac{1}{2}\beta\right) (J\sigma) \epsilon - \frac{3}{2}\beta \sum_i J_i \sigma_i \epsilon_{ii} - \sqrt{3} \delta \sum_{i>j} [J_i \sigma_j] \epsilon_{ij}. \end{aligned} \quad (30.33)$$

Константы β и δ имеют тот же порядок величины, что и спин-орбитальное расщепление Δ , и поэтому относительный вклад последних трех членов в (30.33) невелик. При их учете поправки к a , b и d в (30.3) — (30.8) соответственно равны α , β и δ .

Большие энергии. При больших энергиях, когда $\mathcal{E}_k \gg \mathcal{E}_{\epsilon k} \gg \mathcal{E}_\epsilon$, влияние деформации можно рассматривать как возмущение

*) При анализе экспериментальных данных в этом случае надо иметь в виду, что когда напряжение P приложено по направлению $[110]$, сжатие по осям $[1\bar{1}0]$ и $[001]$ не одинаково, т. е. наряду с относительным растяжением по $[110]$, равным

$$\epsilon'_{110} = \epsilon_{110} - \frac{1}{2}(\epsilon_{1\bar{1}0} + \epsilon_{001}) = \frac{P}{4}(S_{11} - S_{12} + S_{44}),$$

имеет место растяжение по $[001]$:

$$\epsilon_{001} - \epsilon_{1\bar{1}0} = \frac{P}{2}(2S_{44} - S_{11} + S_{12}).$$

Выражения для эффективных масс в этом случае легко получить из общих формул (30.14) и (30.27).

ние. Соответственно в общей формуле (30.5) можно опустить слагаемое \mathcal{E}_z и разложить подкоренное выражение в ряд по степеням $\mathcal{E}_{ek}/\mathcal{E}_k$. Тогда получим

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = E_{0,1,2}(\mathbf{k}) + \Delta E_{1,2} = \\ = E_{0,1,2}(\mathbf{k}) + a\varepsilon \pm \frac{1}{2\mathcal{E}_k^{1/2}} \{Bb [3(k_x^2\varepsilon_{xx} + k_y^2\varepsilon_{yy} + k_z^2\varepsilon_{zz}) - k^2\varepsilon] + \\ + 2Dd [k_x k_y \varepsilon_{xy} + k_x k_z \varepsilon_{xz} + k_y k_z \varepsilon_{yz}]\}, \quad (30.34)$$

где $E_{0,1,2} = Ak^2 \pm \mathcal{E}_k^{1/2}$ — энергия в недеформированном кристалле (24.13а). Ход $E(\mathbf{k})$ и вид поверхностей постоянной энергии при больших энергиях был показан на рис. 30, 31.

Из (30.34) видно, что добавка к энергии $\Delta E_{1,2}$, связанная с деформацией, удовлетворяет условию

$$\frac{1}{4\pi} \int \Delta E_{1,2}(\mathbf{k}) d\Omega = a\varepsilon. \quad (30.35)$$

Здесь интеграл берется по телесному углу Ω при фиксированном значении $|\mathbf{k}|$. Действительно, из-за кубической симметрии \mathcal{E}_k

$$\int \frac{k_x^2}{\mathcal{E}_k^{1/2}} d\Omega = \int \frac{k_y^2}{\mathcal{E}_k^{1/2}} d\Omega = \int \frac{k_z^2}{\mathcal{E}_k^{1/2}} d\Omega; \quad \text{отсюда} \quad \int \frac{k^2 - 3k_i^2}{\mathcal{E}_k^{1/2}} d\Omega = 0.$$

Аналогично при $i \neq k$

$$\int \frac{k_i k_k}{\mathcal{E}_k^{1/2}} d\Omega = 0.$$

Условие (30.35) означает, что отношение концентрации легких и тяжелых дырок, равное

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\int \exp \{-(E_1^0 + \Delta E_1)/kT\} k^2 dk d\Omega}{\int \exp \{-(E_2^0 + \Delta E_2)/kT\} k^2 dk d\Omega},$$

в линейном по ε приближении не меняется при деформации.

Характерно, что поправка к энергии $\Delta E_{1,2}$, связанная с деформацией, не зависит от величины \mathbf{k} и определяется при заданной деформации только его направлением. Так, при деформации по [001]

$$\Delta E_{1,2}(\mathbf{k}) = a\varepsilon \pm \frac{Bb}{2\mathcal{E}_k^{1/2}} (3k_z^2 - k^2) \varepsilon'_{zz}, \quad (30.36)$$

где ε'_{zz} — относительное удлинение по оси [001]. При деформации по оси [111]

$$\Delta E_{1,2}(\mathbf{k}) = a\varepsilon \pm \frac{Dd}{6\mathcal{E}_k^{1/2}} (3k_z^2 - k^2) \varepsilon'_{111}, \quad (30.37)$$

где, как и в (30.20а), ось z' направлена по [111], а ε'_{111} — относительное удлинение по этой оси.

Как будет показано в § 34, именно эта особенность изменения спектра при деформации приводит к относительно большим изменениям проводимости и других кинетических коэффициентов при деформации. Выражения (30.34)—(30.37) справедливы также для полупроводников с решеткой цинковой обманки, например InSb, СаAs и т. д., так как линейные по k члены, появляющиеся в такой решетке из-за отсутствия центра инверсии, обычно несущественны при достаточно высоких температурах, при которых эти формулы применимы. Однако в области малых энергий эти члены могут быть существенны.

Спектр в деформированных кристаллах типа InSb при низких энергиях. Как показано в § 26, в кристаллах типа InSb гамильтониан $\mathcal{H}(k)$ включает матрицу \mathcal{H}' (26.17)

$$\mathcal{H}' = \frac{4}{\sqrt{3}} k(Vk), \quad (30.38)$$

содержащую линейные по k члены и определяемую уравнением (26.17а). В недеформированном кристалле эти линейные члены приводят к снятию вырождения и смещению экстремума из точки $k = 0$ в точки, лежащие на оси [111] и эквивалентных ей. В деформированном кристалле линейные члены приводят к расщеплению каждой из двух зон, образовавшихся в результате деформации, и к смещению экстремума. Если изменение энергии, связанное с линейными по k членами, т. е. разность между энергией в точке $k = 0$ и энергией в экстремуме k_0 , намного меньше расстояния между расщепившимися в результате деформации зонами, то матрицу \mathcal{H}' можно рассматривать как возмущение и найти соответствующие поправки к энергии, вычислив матричные элементы \mathcal{H}' на собственных функциях F_i^l , диагонализующих гамильтониан $\mathcal{H}(e, k)$, определяемый уравнениями (30.3) и (24.12), и соответствующих одной из расщепившихся зон. Эти функции определяются формулой, подобной (24.19), отличающейся лишь заменой E, F, G, I, H на E_i, F, G, H, I , которые включают как члены, квадратичные по k , так и линейные по деформации и определяются выражениями (24.11), (30.4), (30.5). При этом в первом приближении теории возмущений можно учитывать лишь нижнюю из расщепившихся зон. Спектр $E(e, k)$ с учетом линейных по k членов определяется секулярным уравнением

$$|IE_i + \mathcal{H}'_i - IE| = 0, \quad (30.39)$$

где \mathcal{H}'_i — матрица оператора (30.38) в представлении (24.19). При расчете величины δE_i в сильно деформированном кристалле надо учитывать лишь члены, пропорциональные компонентам тензора деформации, т. е. положить $F = f$ и т. д., где коэффициенты f, g, h, j определяются выражениями (30.4). Учет членов, пропорциональных k^2 , привел бы к поправкам, пропорцио-

нальным k^3 . В этом приближении поправка к энергии, связанная с линейными по k членами,

$$\delta E = \pm \frac{|k|}{\mathcal{E}_e^{1/2}} \left\{ \sum_{i>j} \alpha_{ij} k_i k_j \right\}^{1/2}, \quad (30.40)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{xx} &= 3b^2(\epsilon_{yy} - \epsilon_{zz})^2 + 4d(\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2), \\ \alpha_{xy} &= \mp 4\sqrt{3}d\mathcal{E}_e^{1/2}\epsilon_{xy} + 4d^2\epsilon_{xz}\epsilon_{yz} \end{aligned} \quad (30.41)$$

и т. д. Верхний знак в выражении для α_{xy} соответствует верхней зоне, а нижний — нижней зоне.

Из (30.19) и (30.40) следует, что при деформации по оси [100] для верхней из зон спектр вблизи экстремума определяется выражением

$$E^\pm(\mathbf{k}) = (A \pm B)k_z^2 + \left(A \mp \frac{B}{2}\right)(k_\perp - k_\perp^0)^2, \quad (30.42)$$

где

$$k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad k_\perp^0 = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{|k|}{A \mp \frac{B}{2}}.$$

Здесь, как и в (30.19), верхний знак при B соответствует $b\epsilon_{zz} > 0$, а нижний — $b\epsilon_{zz} < 0$.

За счет линейных по k членов происходит полное снятие вырождения и экстремум смещается из точки $\mathbf{k} = 0$ на кольцо $k_\perp = k_\perp^0$. При этом поверхности постоянной энергии вблизи экстремума имеют форму тора.

Такой же вид имеет спектр и при деформации вдоль оси [111] при $d\epsilon'_{111} > 0$, когда согласно (30.20) и (30.40)

$$E^\pm = \left(A + \frac{D}{\sqrt{3}}\right)k_z'^2 + \left(A - \frac{D}{2\sqrt{3}}\right)(k_\perp - k_\perp^0)^2, \quad (30.43)$$

где

$$k_\perp^0 = \frac{\sqrt{2}k}{A - (D/2)\sqrt{3}}.$$

При $d\epsilon'_{111} < 0$ экстремумы смещаются по оси z' на расстояние $\pm k_{z'}^0$ от точки $\mathbf{k} = 0$ и поверхностями постоянной энергии являются два смещенных эллипсоида:

$$E^\pm = \left(A - \frac{D}{\sqrt{3}}\right)(k_{z'} \pm k_{z'}^0)^2 + \left(A + \frac{D}{2\sqrt{3}}\right)k_\perp^2, \quad (30.44)$$

где

$$k_{z'}^0 = \frac{\sqrt{2}|k|}{A - (D/\sqrt{3})}.$$

В формулах (30.42) — (30.44) энергия отсчитывается от новой точки экстремума. Как отмечалось выше, эти выражения справедливы при таких деформациях, когда расщепление зон $\delta E_{1,2}$,

равное соответственно $2|be'_{zz}|$ или $(2/\sqrt{3})|de'_{111}|$, существенно превышает разность энергий при $\mathbf{k} = 0$ и в новой точке экстремума \mathbf{k}_0 , которая при деформации по оси [001] равна $\frac{3}{4}k^2/(A \mp \frac{B}{2})$, а при деформации по [111] $2k^2/(A - \frac{D}{2\sqrt{3}})$ при $de_{111} > 0$ и $2k^2/(A - \frac{D}{\sqrt{3}})$ при $de_{111} < 0$. При этом, конечно, энергия $E(\mathbf{k})$ также должна быть значительно меньше $\delta E_{1,2}$.

Поправки к эффективной массе за счет взаимодействия с вырожденной зоной. Как указывалось в предыдущем параграфе, взаимодействие с вырожденной зоной может привести к изменению симметрии спектра в невырожденной зоне при деформации кристалла. Например, изменение спектра для представления Γ_1^\pm или Γ_2^\pm вследствие взаимодействия с представлением Γ_{15}^\mp или Γ_{25}^\mp соответственно согласно уравнению (29.39) определяется выражением

$$\Delta E(\mathbf{e}, \mathbf{k}) = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m^2} |p|^2 k^2 (C - a) \left(\frac{1}{(E_g + \Delta)^2} + \frac{2}{E_g^2} \right) \mathbf{e} + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m^2} |p|^2 \mathcal{E}_{\mathbf{e}\mathbf{k}} \left(\frac{2}{E_g(E_g + \Delta)} + \frac{\Delta}{E_g^2} \right) + C\mathbf{e}, \quad (30.45)$$

где $\mathcal{E}_{\mathbf{e}\mathbf{k}}$ определяется формулой (30.7). Здесь первый член, связанный с первым слагаемым в (29.39), описывает изотропное изменение эффективной массы, подобное (29.41), (29.42), а второй приводит к тому, что поверхность постоянной энергии при анизотропной деформации становится слегка несферической.

При выводе этой формулы мы учли, что матричные элементы оператора $\mathcal{H}(\mathbf{e})$, определяемые уравнением (30.33), подобным (24.10), имеют отличные от нуля как «внутризонные» элементы между функциями представления Γ_8^\pm , так и «междузонные» между функциями представлений Γ_8^\pm и Γ_6^\pm или Γ_7^\pm . Оператор $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ в соответствии с (24.34) имеет отличные от нуля матричные элементы $\langle S|p_x|X \rangle = \langle S|p_y|Y \rangle = \langle S|p_z|Z \rangle = p$ (или $\langle XYZ|p_z|XY \rangle, \dots$), а спектр в недеформированном кристалле определяется выражением

$$E^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 |p|^2}{m^2} k^2 \left(\frac{1}{E_g + \Delta} + \frac{2}{E_g} \right). \quad (30.46)$$

Изменение спектра в кристаллах Sn и HgTe при деформации. В последнее время установлено, что у кристаллов серого олова, имеющих структуру решетки алмаза, а также у кристаллов HgTe со структурой цинковой обманки зоны Γ_8 и $\Gamma_6(\Gamma_7)$ в точке $\mathbf{k} = 0$ имеют обратный порядок по сравнению с Ge или InSb, а именно зона Γ_6 (или Γ_7^-), являющаяся зоной проводимости в InSb и Ge, лежит ниже зоны Γ_8 (или Γ_8^+), между этой зоной и зоной Γ_7 (Γ_7^+), отщепившейся от Γ_8 (Γ_8^+) вследствие спин-

орбитального взаимодействия*). Так как кривизна одной из ветвей зоны Γ_8 (зоны, образующей зону легких дырок в Ge) и зоны Γ_6 определяется в основном их kp -взаимодействием, то и кривизна этих зон в Sn и HgTe оказывается обратной по сравнению с Ge и InSb (рис. 32). Поэтому зона Γ_6 (Γ_7^-) оказывается полностью заполненной, т. е. образует нижнюю из валентных зон, а в зоне Γ_8 (Γ_8^+) ветвь, соответствующая тяжелым дыркам, также заполнена, а ветвь, соответствующая в Ge легким дыркам, пустая, т. е. является в Sn и HgTe зоной проводимости. Так как

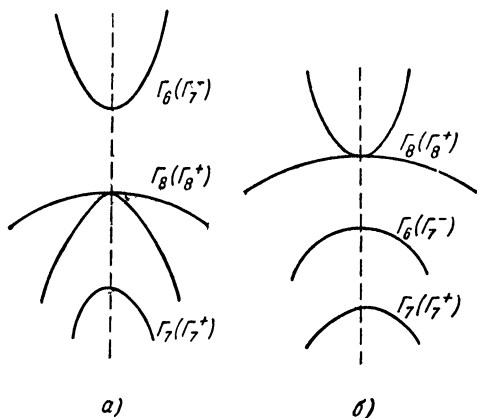


Рис. 32. Расположение зон в кристаллах Ge и InSb (а), HgTe и серого олова (б).

обе ветви зоны Γ_8 смыкаются в точке $k = 0$, то эти кристаллы являются полуметаллами, т. е. у них запрещенная зона отсутствует.

Спектр в трех зонах Γ_8 (Γ_8^+), Γ_7 (Γ_7^+) и Γ_6 (Γ_7^-) в этих кристаллах по-прежнему описывается системой уравн. табл. 24.1, но величину E_g для них надо заменить на $-E_g$. При этом $E_g < \Delta_{co}$. Спектр вблизи экстремума смыкающихся зон описывается уравнениями (24.12), (24.13). При этом надо иметь в виду, что в данном случае, в отличие от Ge и Si, константа A положительна, а $|B| > A$, так как зона тяжелых дырок, как и в Ge, идет вниз. Наиболее интересной особенностью деформационных эффектов в таких кристаллах является то, что у них одноосная деформация, расщепляя зону Γ_8 (Γ_8^+), превращает их из полуметаллов в полупроводники. При этом ширина запрещенной зоны пропорциональна деформации и определяется формулами (30.11)—(30.13). Характер спектра в обеих зонах определяется формулами (30.5)—(30.8), в предельном случае малых

*) См., например, [27.10 — 27.12], где приведены ссылки на более ранние публикации.

энергий — уравнениями (30.14) — (30.21), а в случае больших энергий — (30.34) (подчеркнем, что для этих кристаллов $A > 0$ и $|B| > A$ и $|D|/\sqrt{3} > A$). Так как ближайшей зоной к Γ_8 (Γ_8^+) здесь является зона Γ_6 (или Γ_7^-), то и непараболичность зоны Γ_8 , и характер изменения ширины запрещенной зоны и эффективных масс при больших деформациях здесь, как и в InSb, определяется взаимодействием зон Γ_8 (Γ_8^+) и Γ_6 (Γ_7^-), тогда как влияние зоны Γ_7 (Γ_7^+), которая в Ge и Si играет основную роль, здесь менее существенно.

Изменение спектра в точке X в решетке O_h . Как указывалось в § 24, в решетке типа алмаза точка X является точкой нулевого наклона для представлений X_1 и X_3 . Для определения спектра в этой точке удобнее всего использовать метод инвариантов. Согласно (25.36) в $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ в этом случае должны входить четные функции от \mathbf{k} и $\boldsymbol{\varepsilon}$, преобразующиеся по представлениям $A_1^+ + B_1^- + B_2^+$, и нечетные функции от \mathbf{k} , преобразующиеся по представлению A_2^- . Эти функции приведены в табл. 26.1. Выбирая матрицы, преобразующиеся по этим представлениям, в таком же виде, как и в уравнении (26.6), запишем $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ (без учета релятивистски малых членов):

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \lambda \mathbf{I} + \sigma_z (A_3 k_y k_z + D_3 \varepsilon_{yz}), \quad (30.47)$$

где

$$\lambda = A_1 k_x^2 + A_2 (k_y^2 + k_z^2) + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}). \quad (30.48)$$

Отсюда

$$E(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \lambda \pm (A_3 k_y k_z + D_3 \varepsilon_{yz}). \quad (30.49)$$

Видно, что здесь расщепление зоны в точке экстремума вызывает только сдвиговая деформация ε_{yz} , при этом поверхности постоянной энергии вблизи экстремума — трехосные эллипсоиды:

$$E(\mathbf{k}) = A_1 k_x'^2 + \left(A_2 \pm \frac{A_3}{2} \right) k_y'^2 + \left(A_2 \mp \frac{A_3}{2} \right) k_z'^2, \quad (30.50)$$

где оси y' и z' направлены по $[011]$ и $[0\bar{1}1]$ соответственно.

Деформация по главным осям кристалла $[100]$, $[010]$ или $[001]$ не вызывает расщепления, но приводит к относительному смещению разных экстремумов по отношению друг к другу.

Для представлений X_2 и X_4 точка X не является точкой нулевого наклона. В этом случае в $\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{k})$ входят нечетные функции, преобразующиеся по представлению B_2^- , и четные, преобразующиеся по $A_1^+ + A_1^- + B_2^+$. Функции от \mathbf{k} и $\boldsymbol{\varepsilon}$, преобразующиеся по этим представлениям, приведены в табл. 26.1, а соответствующие матрицы можно выбрать в виде σ_z , \mathbf{I} , σ_x , σ_y . В согласии с (26.3)

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{k}) = \lambda \mathbf{I} + \sigma_x (A_3 k_y k_z + D_3 \varepsilon_{yz}) + A_4 \sigma_z k_z. \quad (30.51)$$

Отсюда

$$E(\mathbf{\epsilon}, \mathbf{k}) = \lambda \pm [A_4^2 k_z^2 + (D_3 \epsilon_{yz} + A_3 k_y k_z)^2]^{1/2}, \quad (30.52)$$

где λ определяется уравнением (30.48).

Как указывалось выше, в Si экстремум зоны проводимости соответствует представлению Δ_1 и находится вблизи точки X , где это представление вместе с Δ_2 переходит в X_2 или X_4 .

Если считать, что разложение (30.52) справедливо вплоть до точки экстремума \mathbf{k}_0 , то, зная положение этой точки, можно определить константу A_4 :

$$|A_4| = 2A_1 k_0.$$

Раскладывая корень в (30.52), получим спектр вблизи этой точки:

$$E(\mathbf{\epsilon}, \mathbf{k}) = A_1 (k_x - k_0)^2 + A_2 (k_y^2 + k_z^2) - \frac{D_3 A_3 \epsilon_{yz}}{|A_4| k_0} k_y k_z + D_1 \epsilon_{xx} + D_2 (\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}). \quad (30.53)$$

Последнее слагаемое в (30.53) совпадает с (29.43). В указанном приближении расщепление зоны в точке $k_x = k_0$ равно $\Delta = 2|A_4|k_0$, а матричный элемент оператора $\mathcal{H}_{yz}^{\epsilon}$ между функциями 1 и X в точке k_0 и точке X одинаков, т. е. $C_1 = D_3$. Следовательно, $\hbar^2/m' = A_3$. Отсюда видно, что деформация ϵ_{yz} именно потому приводит к сравнительно большому изменению массы в точке k_0 , что только такая деформация расщепляет зону X_2 или X_4 в близлежащей точке X .

§ 31. СПЕКТР В КРИСТАЛЛАХ С РЕШЕТКОЙ ТИПА ВЮРЦИТА И ЕГО ИЗМЕНЕНИЕ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ

Как указывалось в § 23, решетку вюрцита (пространственная группа C_{6v}^4) имеют многие полупроводники группы A_2B_6 : BeO, MgTe, ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe *). Для этой структуры группы волнового вектора в точках, находящихся на оси (точки Δ) и ребре (точки P) зоны Бриллюэна, имеют наибольшую симметрию. Как показано в § 23, представления этих групп проективно эквивалентны векторным или спинорным и отличаются от соответствующих представлений точечных групп C_{6v} (для точек Δ) и C_{3v} (для точек P), приведенных в §§ 11, 16, лишь множителем $e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}$, где \mathbf{k}_0 — положение точки, а $\boldsymbol{\tau}$ — трансляция, соответствующая данному поворотному элементу.

В табл. 31.1 и 31.2 приведены характеры обычных и спинорных представлений для этих точек. Ниже указано, на какие спи-

*) Некоторые из этих соединений кристаллизуются также в решетке типа цинковой обманки и NaCl.

норные представления расщепляются обычные представления при учете спин-орбитального взаимодействия.

Таблица 31.1

Представления для точки Λ

Число элементов	Элемент класса	Характеры представлений								
		Δ_1	Δ_2	Δ_3	Δ_4	Δ_5	Δ_6	Δ_7	Δ_8	Δ_9
1	$(e 0)$	1	1	1	1	2	2	2	2	2
1	$(c_6 t_0/2)$	η_k	η_k	$-\eta_k$	$-\eta_k$	η_k	$-\eta_k$	$\sqrt{3} \eta_k$	$-\sqrt{3} \eta_k$	0
1	$(c_6^5 t_0/2)$							$-\sqrt{3} \eta_k$	$\sqrt{3} \eta_k$	0
1	$(c_3 0)$	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-2
1	$(c_3^2 0)$							-1	-1	2
1	$(c_2 t_0/2)$	η_k	η_k	$-\eta_k$	$-\eta_k$	$-2\eta_k$	$2\eta_k$	0	0	0
3	$(\sigma 0)$	1	-1	-1	1	0	0	0	0	0
3	$(\sigma' t_0/2)$	η_k	$-\eta_k$	η_k	$-\eta_k$	0	0	0	0	0

$\eta_k = e^{-ikt_0/2}$. Для точек Γ и K $\eta_k = 1$, для точек A и H $\eta_k = -i$.

Таблица 31.2

Представления для точки P

Число элементов	Элемент класса	Характеры представлений					
		P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
1	$(e 0)$	1	1	2	1	1	2
1	$(c_3 0)$	1	1	-1	-1	-1	1
1	$(c_3^2 0)$				1	1	-1
3	$(\sigma' t_0/2)$	η_k	$-\eta_k$	0	$i\eta_k$	$-i\eta_k$	0

\mathcal{D}_i	Δ_1	Δ_2	Δ_3	Δ_4	Δ_5	Δ_6	P_1	P_2	P_3
$\mathcal{D}_i \times \mathcal{D}_{1/2}$	Δ_7	Δ_7	Δ_8	Δ_8	$\Delta_7 + \Delta_9$	$\Delta_8 + \Delta_9$	P_6	P_6	$P_4 + P_5 + P_6$

Распределение представлений по их свойствам относительно инверсии времени и представления, объединяющиеся вследствие

инвариантности к инверсии времени, указаны в § 23 и также приведены в табл. 31.3.

Таблица 31.3

Свойства представлений относительно инверсии времени

Случай	Представления
a_1	$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5, \Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8, \Gamma_9$
a_2	$K_1, K_2, K_3, K_4, K_5, K_6, H_3, H_6$
b_1	$A_1 - A_4, A_2 - A_3, A_5 - A_6, A_7 - A_8$
b_2	$H_1 - H_2, H_4 - H_5$
b_3	$\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4, \Delta_5, \Delta_6, \Delta_7, \Delta_8, \Delta_9, P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6$
c_1	$A_9 - A_9$

Для построения спектра в точках на осях Δ и P методом инвариантов нам необходимо знать, по каким представлениям групп направлений C_{6v} и C_{3v} преобразуются функции от компонент $k_i, \epsilon_{ij}, \sigma_i$ и J_i . Используя базисные функции, приведенные в табл. 11.1 (стр. 99) можно сразу установить распределение этих компонент по представлениям, которое приведено в табл. 31.4*).

Зная характеры представлений групп волнового вектора и представления, по которым преобразуются компоненты k_i , можно, используя формулы, приведенные в § 21, определить, для каких представлений рассмотренные точки являются точками нулевого наклона и какие из компонент k_i могут входить в гамильтониан $\mathcal{H}(k)$ для разных представлений. Эти данные приведены в табл. 31.5. В скобках указаны компоненты, которые отсутствуют в исходных обычных представлениях и появляются в произошедших из них спинорных представлениях. Как правило, коэффициенты при этих компонентах малы. Гамильтониан $\mathcal{H}(k, \epsilon)$ для всех представлений можно сразу построить, используя методы, указанные в § 26, так как все эти представления одномерные или двумерные.

*) При построении инвариантов удобно, чтобы все функции одного представления преобразовывались по тождественно совпадающим представлениям. Поэтому в отличие от § 26 операторы σ_+ и σ_- , а также J_+ и J_- , в табл. 31.4 выбраны в виде

$$\sigma_{\pm} = \pm \frac{i}{2} (\sigma_x \pm i\sigma_y), \quad J_{\pm} = \pm \frac{i}{\sqrt{2}} (J_x \pm iJ_y),$$

с тем, чтобы при всех операциях группы C_{6v} они преобразовывались как $k_+ = k_x + ik_y$ и $k_- = k_x - ik_y$ соответственно. Унитарным преобразованием базисных функций эти матрицы σ_{\pm} можно привести к обычной форме (26.3). В таком же виде в этом случае удобно выбирать и компоненты H_+ и H_- при включении в \mathcal{H} магнитного поля.

Распределение компонент k , e , σ и J и функций от них по представлениям групп направлений C_{6v} и C_{3v}

Представления		Функции		Базисные матрицы
C_{3v}	C_{6v}	нечетные (относительно инверсии времени)	четные (относительно инверсии времени)	
A_1K_1	Γ_1A_1	k_z	$k_z^2; k_\perp^2; e_{zz}; e_\perp;$ $\sigma_+k_- + \sigma_-k_+$	J_z^2, I
	Γ_3B_2	—	—	—
A_2K_2	Γ_2A_2	σ_z	$\sigma_zk_z; \sigma_+k_- - \sigma_-k_+$	J_z
	Γ_4B_1	—	—	—
EK_3	Γ_5E_1	$\sigma_+, \sigma_-; k_+, k_-$	$k_+k_z, k_-k_z, e_{+z}, e_{-z};$ $\sigma_+k_z, \sigma_-k_z; \sigma_zk_+, \sigma_zk_-$	J_+, J_- $[J_+J_z], [J_-J_z]$
	Γ_6E_2		$k_+^2, k_-^2; e_+, e_-;$ σ_+k_+, σ_-k_-	J_+^2, J_-^2

$k_\pm = k_x \pm ik_y, \sigma_\pm = \frac{1}{2}(\pm i\sigma_x - \sigma_y), J_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm iJ_x - J_y), k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2,$
 $e_{\pm z} = e_{xz} \pm ie_{yz}, e_\pm = e_{xx} - e_{yy} \pm 2ie_{xy}, e_\perp = e_{xx} + e_{yy}.$

Таблица 31.5

Отличные от нуля компоненты k_l , входящие в $E(k)$, для разных представлений

<u>$\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4$</u>	<u>Δ_5, Δ_6</u>	<u>Δ_7, Δ_8</u>	<u>Δ_9</u>	<u>P_1, P_2</u>	P_3	<u>P_4, P_5</u>	<u>P_6</u>
k_z	k_z	$k_z(k_\perp)$	k_z	k_z	k_z, k_\perp	k_z	$k_z(k_\perp)$
<u>$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$</u>	<u>Γ_5, Γ_6</u>	<u>Γ_7, Γ_8</u>	<u>Γ_9</u>	K_1, K_2	K_3	<u>K_4, K_5</u>	<u>K_6</u>
—	—	(k_\perp)	—	—	k_\perp	—	(k_\perp)
$A_1 - A_4, A_2 - A_3$	$A_5 - A_6$	$A_7 - A_8$	$A_9 - A_9$	$H_1 - H_2$	<u>H_3</u>	<u>$H_4 - H_5$</u>	H_6
k_z	k_z	$k_z(k_\perp)$	k_z	k_z	—	(k_z)	—

Подчеркнуты возможные точки нулевого наклона. В скобках указаны компоненты k_l , коэффициенты при которых являются релятивистски малыми.

Точка Δ . Для одномерных представлений $\Delta_1 - \Delta_4$ в $\mathcal{H}(\mathbf{\varepsilon}, \mathbf{k})$ в соответствии с (25.14) входят все функции от \mathbf{k} , $\mathbf{\varepsilon}$ и σ , преобразующиеся по единичному представлению группы направлений Γ_1 . Поэтому без учета релятивистских членов каждый из этих термов двукратно вырожден по спину и поверхности постоянной энергии — эллипсоиды вращения. С учетом линейных по k релятивистских членов оператор $\mathcal{H}(\mathbf{\varepsilon}, \mathbf{k})$ для представления $\Delta_1 - \Delta_4$ имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{\varepsilon}, \mathbf{k}) = A_0 k_z + \lambda + \alpha_1 (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+); \quad (31.1)$$

здесь

$$\lambda = A_1 k_z^2 + A_2 k_\perp^2 + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 \varepsilon_\perp,$$

$$k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad \varepsilon_\perp = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}.$$

При этом k_z отсчитывается от значения k_{z0} в точке Δ . Константы A_i, D_i в (31.1) должны быть вещественными, с тем, чтобы гамильтониан был эрмитов (учитывая, что при эрмитовом сопряжении k_+, σ_+, J_+ переходят в k_-, σ_-, J_-).

Из (31.1) найдем спектр. В точке нулевого наклона, где $A_0 = 0$,

$$E_{1,2}(\mathbf{k}, \mathbf{\varepsilon}) = A_1 k_z^2 + A_2 (k_\perp \pm k_\perp^0)^2 + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 \varepsilon_\perp, \quad (31.2)$$

где $k_\perp^0 = \alpha_1 / 2A_2$. Здесь энергия отсчитывается от минимума. Видно, что при учете релятивистских членов минимум осуществляется на окружности: $k_z = 0, k_\perp = k_\perp^0$, а поверхности постоянной энергии вблизи экстремума имеют форму тора. При этом вырождение полностью снимается везде, кроме точки на оси Δ .

При больших k линейные члены становятся несущественны и поверхностями постоянной энергии являются два слегка деформированных эллипсоида.

Формулу (31.1) можно также получить, строя $\mathcal{H}(\mathbf{\varepsilon}, \mathbf{k})$ для представлений Δ_7 или Δ_8 , учитывая, что в этом случае в $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \mathbf{\varepsilon})$ надо включать все функции от \mathbf{k} и $\mathbf{\varepsilon}$, преобразующиеся по представлениям, входящим

$$\Delta_7 \times \Delta_7^* = \Delta_8 \times \Delta_8^* = A_1 + A_2 + E_1.$$

Матрицы X_i , преобразующиеся по этим представлениям, можно в соответствии с (26.3), (26.31) выбрать в виде

$$I(A_1), \quad \rho_z = \sigma_z(A_2), \quad \rho_+ = \sigma_+ \quad \text{и} \quad \rho_- = \sigma_-(E_1).$$

При таком построении автоматически учитываются квадратичные по k и линейные по ε релятивистские члены, в результате чего $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \mathbf{\varepsilon})$ имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}, \mathbf{\varepsilon}) = & A_0 k_z + \lambda + \alpha_1 (\rho_+ k_- + \rho_- k_+) + \\ & + \alpha_2 k_z (\rho_+ k_- + \rho_- k_+) + d (\rho_+ \varepsilon_{-z} + \rho_- \varepsilon_{+z}). \end{aligned} \quad (31.1a)$$

Последний член в (31.1a) показывает, что при деформациях ε_{zz}

и ε_{yz} происходит полное снятие вырождения и зоны расщепляются на величину $2d(\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2)^{1/2}$.

Для представления Δ_9 в $\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k})$ входят функции от ε и \mathbf{k} , преобразующиеся по представлениям, входящим в $\Delta_9 \times \Delta_9^* = A_1 + A_2 + B_2 + B_1$, и

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}, \varepsilon) = A_0 k_z + \lambda; \quad (31.3)$$

следовательно, $E(\varepsilon, \mathbf{k})$ отличается от (31.2) отсутствием линейного по k_z члена, и с точностью до членов более высокого порядка по k и ε зона Δ_9 остается вырожденной во всех точках, а поверхностями постоянной энергии являются эллипсоиды.

Представление Δ_9 произошло за счет расщепления представлений Δ_5 или Δ_6 . Для того чтобы построить оператор $\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k})$ сразу для обоих представлений $\Delta_7 + \Delta_9$ или $\Delta_8 + \Delta_9$, произошедших соответственно от Δ_5 или Δ_6 , в $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ в соответствии с (25.14) надо включить все функции от \mathbf{k} , ε и σ , преобразующиеся по представлениям, входящим в

$$\Delta_5 \times \Delta_5^* = \Delta_6 \times \Delta_6^* = A_1 + A_2 + E_2.$$

Матрицы X_i , преобразующиеся по этим представлениям, согласно (26.3) и (26.31) можно выбрать в виде $I(A_1)$, $\rho_z(A_2)$, ρ_+ , $\rho_-(E_2)$. Тогда оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ запишется:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k}) = & A_0 k_z + \lambda + \Delta_2 \rho_z \sigma_z + A_5 (\rho_+ k_-^2 + \rho_- k_+^2) + \\ & + D_5 (\rho_+ \varepsilon_- + \rho_- \varepsilon_+) + \alpha_1 (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+) + \alpha_2 (\rho_+ \sigma_- k_- + \rho_- \sigma_+ k_+) + \\ & + \alpha_6 \rho_z \sigma_z k_z + i \alpha_7 \rho_z (\sigma_+ k_- - \sigma_- k_+). \end{aligned} \quad (31.4)$$

Нумерация констант здесь выбрана такой, чтобы они совпадали с константами в (31.8).

В матричной форме гамильтониан (31.4) запишется:

$$\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \begin{vmatrix} F & j^* & \ell^* & 0 \\ j & G & l^* & \ell^* \\ \ell & l & G & h^* \\ 0 & \ell & h & F \end{vmatrix}, \quad (31.5)$$

где

$$\begin{aligned} F &= \lambda + A_0 k_z + \Delta_2 + \alpha_6 k_z, & l &= \alpha_2 k_+, \\ G &= \lambda + A_0 k_z - \Delta_2 - \alpha_6 k_z, & j &= (\alpha_1 - i \alpha_7) k_+, \\ \ell &= A_5 k_+^2 + D_5 \varepsilon_+, & h &= (\alpha_1 + i \alpha_7) k_+. \end{aligned}$$

В общем случае секулярное уравнение $|\mathcal{H} - IE| = 0$ является уравнением четвертого порядка. Если пренебречь в (31.5) линейными по k релятивистскими членами, то его корни становятся попарно вырожденными, так как именно эти слагаемые опреде-

ляют расщепление каждой из зон. В этом приближении в точке нулевого наклона

$$E_{1,2}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \lambda \pm \left\{ \Delta_2^2 + A_5^2 k_{\perp}^4 + D_5^2 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2] + \right. \\ \left. + 2A_5 D_5 [(k_x^2 - k_y^2)(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + 4\varepsilon_{xy} k_x k_y] \right\}^{1/2}. \quad (31.6)$$

При энергиях $E(\mathbf{k}) \gg \Delta_2$, когда спин-орбитальным расщеплением можно пренебречь, поверхностями постоянной энергии являются два эллипсоида

$$E(\mathbf{k}) = A_1 k_z^2 + (A_2 \pm A_5) k_{\perp}^2, \quad (31.7a)$$

а деформация приводит к их смещению и искажению.

Если кинетическая энергия, а также расщепление, создаваемое деформацией, малы по сравнению со спин-орбитальным расщеплением, то $E(\varepsilon, \mathbf{k})$ вблизи экстремумов $E_1^0 = \Delta_2$ и $E_2^0 = -\Delta_2$ определяется формулой

$$E_{1,2}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \pm \Delta_2 + \lambda \pm \frac{1}{2\Delta_2} \left\{ A_5^2 k_{\perp}^4 + D_5^2 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2] + \right. \\ \left. + 2A_5 D_5 [(k_x^2 - k_y^2)(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + 4\varepsilon_{xy} k_x k_y] \right\}. \quad (31.7b)$$

Видно, что для обоих экстремумов эффективные массы m_{\parallel}^* и m_{\perp}^* в недеформированном кристалле совпадают; при этом $\hbar^2/2m_{\parallel}^* = A_1$, $\hbar^2/2m_{\perp}^* = A_2$, а деформация $\varepsilon_{xx} \neq \varepsilon_{yy}$ и ε_{xy} приводит к сравнительно большой анизотропии поперечных эффективных масс порядка $D_5 \varepsilon / \Delta_2$.

Точка Г. Точка Г отличается от точек Δ тем, что в ней $\mathbf{k}_0 = -\mathbf{k}_0$ и все представления в этой точке относятся к случаю α_1 . Поэтому, в отличие от точки Δ , для представлений $\Gamma_1 - \Gamma_4$ в \mathcal{H} согласно (25.36) входят лишь четные по отношению к инверсии времени функции от \mathbf{k} , ε и σ , преобразующиеся по представлению A_1 , т. е. для точки Г в (31.1) константа $A_0 = 0$. Для представлений Γ_7 и Γ_8 в $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ входят четные функции, преобразующиеся по $\{\Gamma_7^2\} = \{\Gamma_8^2\} = A_1$, и нечетные, преобразующиеся по $[\Gamma_7^2] = [\Gamma_8^2] = A_2 + E_1$. Следовательно, в (31.2) для точки Г надо положить $A_0 = 0$ и $\alpha_2 = d = 0$. Для представлений Γ_9 в $\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k})$ входят четные функции, преобразующиеся по $\{\Gamma_9^2\} = A_1$, и нечетные, преобразующиеся по $[\Gamma_9^2] = A_2 + B_2 + B_1$, т. е. $\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k})$ будет таким же, как и для представления Δ_9 (31.3). Для представления Γ_5 или Γ_6 в $\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k})$ войдут четные функции, преобразующиеся по $[\Gamma_5^2] = [\Gamma_6^2] = A_1 + E_2$, и нечетные, преобразующиеся по $\{\Gamma_5^2\} = \{\Gamma_6^2\} = A_2$, т. е. в (31.4) для точки Г $A_0 = 0$ и $\alpha_6 = \alpha_7 = 0$.

Экспериментальные данные и численные расчеты зонной структуры показывают, что в таких соединениях группы $A_2 B_6$, как CdS, CdSe, ZnS, ZnO, экстремумы валентной зоны и зоны проводимости расположены в точке Г; при этом зоне проводи-

мости соответствует представление Γ_7 , произошедшее из Γ_1 , а валентная зона состоит из трех близко расположенных зон, соответствующих представлениям Γ_9 , Γ_7 и Γ_7 , отделенных сравнительно большим интервалом от других зон (рис. 33). Причина этого заключается в том, что положение атомов первой координационной сферы во всех этих кристаллах близко к тому, какое они должны занимать в кубической решетке, где они располагаются по вершинам тетраэдра. Так, отношение базисного вектора t_0 , направленного по оси z , к перпендикулярному ему базисному вектору t_1 в этих кристаллах равно 1,60—1,64, тогда как при тетраэдрическом расположении атомов оно должно быть равно $2\sqrt{2}/3 = 1,632$. При этом направление вектора t_0 соответствует направлению $[111]$ кубического кристалла *).

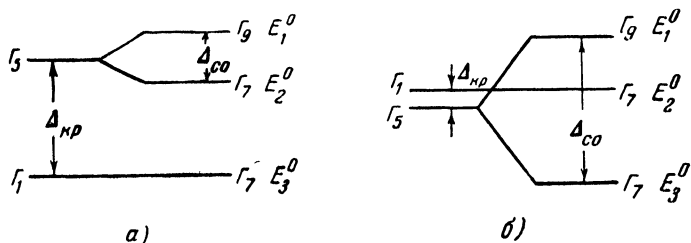


Рис. 33. Генезис валентных зон в точке Γ в кристаллах с решеткой вюрцита. а) $\Delta_{кр} > \Delta_{со}$; б) $\Delta_{кр} < \Delta_{со}$.

Из-за сравнительно малого отступления от кубической симметрии в этих кристаллах расстояние между термами Γ_1 и Γ_5 , которые в кубической решетке объединяются в один терм Γ_{15} , оказывается сравнимым со спин-орбитальным расщеплением терма Γ_5 . Поэтому во многих задачах все три валентные зоны Γ_9 , Γ_7 , Γ_7 надо рассматривать совместно. Гамильтониан $\mathcal{H}(\epsilon, k)$ для эти трех зон, соответствующих представлениям Γ_1 и Γ_5 , можно построить, используя правила, изложенные в § 26.

Согласно (25.36) в $\mathcal{H}(\epsilon, k)$ в случае a_1 должны входить четные функции (по отношению к инверсии времени), преобразующиеся по $\{(\Gamma_1 + \Gamma_5)^2\} = 2A_1 + E_1 + E_2$, и нечетные, преобразующиеся по $\{(\Gamma_1 + \Gamma_5)^2\} = A_2 + E_1$. В качестве матриц X_i^x в этом случае можно взять матрицы J_i и их произведения в представлении Y_1^1, Y_0^1, Y_{-1}^1 , так как представления Γ_1 и Γ_5 можно построить из базисных функций представления \mathcal{D}_1 . Распределение этих матриц по представлениям группы C_{6v} приведено выше в табл. 31.4, а сами матрицы в указанном представлении — в табл. 31.7 в конце параграфа.

*) Надо, однако, иметь в виду, что положения атомов в следующих координационных сферах в решетках вюрцита и цинковой обманки существенно различны, поэтому в соответствии со схемой подчинения систем, приведенной в § 5, одну решетку нельзя никакой деформацией перевести в другую.

Если включить в $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$, как и в (31.4), из релятивистских членов лишь линейные по \mathbf{k} , то оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ запишется*):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}) = & \Delta_1 J_z^2 + \Delta_2 J_z \sigma_z + \sqrt{2} \Delta_3 (J_+ \sigma_- + J_- \sigma_+) + (A_1 + A_3 J_z^2) k_z^2 + \\ & + (A_2 + A_4 J_z^2) k_\perp^2 - A_5 (J_+^2 k_-^2 + J_-^2 k_+^2) - 2i A_6 k_z ([J_z J_+] k_- - [J_z J_-] k_+) + \\ & + A_7 (k_- J_+ + k_+ J_-) + (\alpha_1 + \alpha_3 J_z^2) (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+) + \\ & + \alpha_2 (J_+^2 k_- \sigma_- + J_-^2 k_+ \sigma_+) + 2\alpha_4 \sigma_z ([J_z J_+] k_- + [J_z J_-] k_+) + \\ & + 2i\alpha_5 k_z ([J_z J_+] \sigma_- - [J_z J_-] \sigma_+) + (D_1 + D_3 J_z^2) \varepsilon_{zz} + (D_2 + D_4 J_z^2) \varepsilon_\perp - \\ & - D_5 (J_+^2 \varepsilon_- + J_-^2 \varepsilon_+) - 2i D_6 ([J_z J_+] \varepsilon_{-z} - [J_z J_-] \varepsilon_{+z}). \quad (31.8) \end{aligned}$$

Подчеркнем, что этот оператор, написанный лишь на основании требований симметрии, справедлив независимо от механизма происхождения уровней Γ_9 , Γ_7 и Γ_7 . Однако, если расщепление между этими уровнями сравнимо с расстоянием E_g до других зон, то в (31.8) надо учесть также релятивистские члены, квадратичные по \mathbf{k} и линейные по $\boldsymbol{\varepsilon}$, так как коэффициенты при этих членах могут иметь порядок $\Delta_{2,3}/E_g$ и в последнем случае окажутся сравнимыми с коэффициентами при нерелятивистских членах.

Представляет интерес установить связь между коэффициентами в гамильтониане (31.8) в «кубическом» приближении. Для этого надо переписать гамильтониан $\mathcal{H}_{T_d}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$, построенный для представления $\Gamma_{15}(\Gamma_{25})$ группы T_d в системе координат, в которой ось z' направлена по [111], а x' и y' — по $[11\bar{2}]$ и $[\bar{1}10]$ соответственно. В кубических осях этот гамильтониан имеет вид, подобный (26.15), (30.33)**):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{T_d}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}) = & A'_1 k^2 + \frac{1}{3} \Delta(\sigma \mathbf{J}) + A'_2 (\mathbf{J} \mathbf{k})^2 + (A'_3 - A'_2) \sum_{ij} [J_i J_j] k_i k_j + \\ & + D'_1 \boldsymbol{\varepsilon} + D'_2 \sum_i J_i^2 \varepsilon_{ii} + D'_3 \sum_{ij} [J_i J_j] \varepsilon_{ij}. \quad (31.9) \end{aligned}$$

*) Здесь мы обозначили константы деформационного потенциала D_i вместо C_i и ввели $2A_6$ вместо B_6 , $2D_6$ вместо C_6 , $2\alpha_4$ и $2\alpha_5$ вместо β_4 и β_5 в оригинальной работе [26.1] для того, чтобы упростить коэффициенты в матрице (31.14). Кроме того, нумерация представлений Γ_5 и Γ_6 принята в соответствии с обозначениями большинства работ (т. е. изменена по сравнению с [14.2], [14.3] и [26.1] — Γ_5 вместо Γ_6 и наоборот). Множитель $\sqrt{2}$ в третьем члене введен в связи с тем, что мы для упрощения вида матриц везде определяем $\sigma_\pm = \pm (i/2) (\sigma_x \pm i\sigma_y)$, тогда как $J_\pm = \pm (i/\sqrt{2}) (J_x \pm iJ_y)$.

**) При этом мы не включили в (31.9) линейные по \mathbf{k} релятивистские члены, которые для представлений Γ_{15} и Γ_{25} группы T_d имеют вид

$$\mathcal{H}_{T_d, \text{co}} = \alpha'_1 \sum_i J_i^2 (\sigma_{i+1} k_{i+1} - \sigma_{i+2} k_{i+2}) + 2\alpha'_2 \sum_{i>j} [J_i J_j] (\sigma_i k_j - \sigma_j k_i), \quad (31.9a)$$

и квадратичные по \mathbf{k} релятивистские слагаемые, имевшиеся в (26.15).

Константы A'_i и D'_i связаны с константами в (24.5), (24.14) и (30.2), (30.33) соотношениями

$$A'_1 = L = A + 2B, \quad A'_2 = M - L = -3B, \quad A'_3 = -N = -\sqrt{3}D, \quad (31.10)$$

$$D'_1 = l = a + 2b, \quad D'_2 = m - l = -3b, \quad D'_3 = -n = -\sqrt{3}d.$$

Для того чтобы записать (31.9) в новой системе координат, надо заменить компоненты x, y, z на

$$x = \frac{x'}{\sqrt{6}} - \frac{y'}{\sqrt{2}} + \frac{z'}{\sqrt{3}}, \quad y = \frac{x'}{\sqrt{6}} + \frac{y'}{\sqrt{2}} + \frac{z'}{\sqrt{3}}, \quad (31.10a)$$

$$z = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}x' + \frac{z'}{\sqrt{3}}.$$

Тогда в новой системе координат оператор (31.9) запишется:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{T_d}(\mathbf{k}, \varepsilon) = & \frac{1}{3}\Delta(\sigma\mathbf{J}) + \left(A'_1 + \frac{2}{3}(A'_2 - A'_3)\right)k_z^2 + \left(A'_1 + \frac{1}{3}(2A'_2 + A'_3)\right)k_{\perp}^2 + \\ & + A'_3 J_z^2 k_z^2 - \frac{1}{2}A'_3 J_z^2 k_{\perp}^2 - \frac{1}{6}(A'_2 + 2A'_3)(J_+^2 k_-^2 + J_-^2 k_+^2) - \\ & - i\frac{\sqrt{2}}{3}(2A'_2 + A'_3)([J_z J_+]k_z k_- - [J_z J_-]k_z k_+) + \\ & + \frac{\sqrt{2}}{3}(A'_2 - A'_3)(J_+^2 k_+ k_z + J_-^2 k_- k_z) + \\ & + \frac{i}{3}(A'_2 - A'_3)([J_z J_+]k_+^2 - [J_z J_-]k_-^2) + \left(D'_1 + \frac{2}{3}(D'_2 - D'_3)\right)\varepsilon_{zz} + \\ & + \left(D'_1 + \frac{1}{3}(2D'_2 + D'_3)\right)\varepsilon_{\perp} + D'_3 J_z^2 \varepsilon_{zz} - \frac{1}{2}D'_3 J_z^2 \varepsilon_{\perp}^2 - \\ & - \frac{1}{6}(D'_2 + 2D'_3)(J_+^2 \varepsilon_- + J_-^2 \varepsilon_+) - \\ & - i\frac{\sqrt{2}}{3}(2D'_2 + D'_3)([J_z J_+] \varepsilon_{z-} - [J_z J_-] \varepsilon_{z+}) + \\ & + \frac{\sqrt{2}}{3}(D'_2 - D'_3)(J_+^2 \varepsilon_{z+} + J_-^2 \varepsilon_{z-}) + \frac{i}{3}(D'_2 - D'_3)([J_z J_+] \varepsilon_+ - [J_z J_-] \varepsilon_-). \end{aligned} \quad (31.11)$$

Прежде всего видно, что этот оператор содержит дополнительные слагаемые, которых нет в (31.8). Это объясняется тем, что группа C_{3v} не является подгруппой кубических групп T_d или O_h и поэтому некоторые инварианты кубической группы не являются инвариантами группы C_{3v} . Оператор $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ для группы C_{3v} , являющейся подгруппой группы T_d , содержит все эти инварианты. В рассматриваемом случае a_1 он должен включать все четные по отношению к инверсии времени функции, преобразующиеся по $[(K_1 + K_3)^2] = 2A_1 + 2E$, и нечетные, преобразующиеся

по $\{(K_1 + K_3)^2\} = A_2 + E$. Поэтому $\mathcal{H}(k, \epsilon)$ для группы C_{3v} будет отличаться от (31.8) дополнительными слагаемыми:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{C_{3v}} = & \mathcal{H}_{C_{6v}} + A_8(J_+^2 k_+ + J_-^2 k_-) k_z + 2i A_9([J_+ J_z] k_+^2 - \\ & - [J_- J_z] k_-^2) + D_8(J_+^2 \epsilon_{+z} + J_-^2 \epsilon_{-z}) + 2i D_9([J_+ J_z] \epsilon_+ - [J_- J_z] \epsilon_-) + \\ & + \alpha_6(J_+^2 \sigma_+ + J_-^2 \sigma_-) k_z + i \alpha_7(J_+^2 k_+ - J_-^2 k_-) \sigma_z + \\ & + 2i \alpha_8([J_+ J_z] \sigma_+ k_+ - [J_- J_z] \sigma_- k_-). \end{aligned} \quad (31.12)$$

Сравнивая (31.8) и (31.12) с (31.11), можно установить соотношения для констант, которые должны выполняться в кубическом приближении*):

$$\begin{aligned} \Delta_2 = \Delta_3 = \frac{1}{3} \Delta, \quad A_6 = \frac{1}{3\sqrt{2}}(2A'_2 + A'_3), \quad D_3 = D'_3, \\ A_1 = A'_1 + \frac{2}{3}(A'_2 - A'_3), \quad A_7 = 0, \quad D_1 = -\frac{1}{2} D'_3, \\ A_2 = A'_1 + \frac{1}{3}(2A'_2 + A'_3), \quad A_8 = \frac{\sqrt{2}}{3}(A'_2 - A'_3), \quad D_5 = \frac{1}{6}(D'_2 + 2D'_3), \\ A_3 = A'_3, \quad A_9 = \frac{1}{6}(A'_2 - A'_3), \quad D_6 = \frac{1}{3\sqrt{2}}(2D'_2 + D'_3), \\ A_4 = -\frac{1}{2} A'_3, \quad D_1 = D'_1 + \frac{2}{3}(D'_2 - D'_3), \quad D_8 = \frac{\sqrt{2}}{3}(D'_2 - D'_3), \\ A_5 = \frac{1}{6}(A'_2 + 2A'_3), \quad D_2 = D'_1 + \frac{1}{3}(2D'_2 + D'_3), \quad D_9 = \frac{1}{6}(D'_2 - D'_3). \end{aligned}$$

Это означает, что в кубическом приближении константы Δ_i , A_i и D_i должны быть связаны соотношениями

$$\begin{aligned} \Delta_2 = \Delta_3, \quad 4A_5 - \sqrt{2} A_6 = -A_3, \quad 2D_1 = -D_3 = D_1 - D_2, \\ 2A_4 = -A_3 = A_1 - A_2, \quad A_7 = 0, \quad 4D_5 - \sqrt{2} D_6 = -D_3. \end{aligned} \quad (31.13)$$

Соотношение $\Delta_2 = \Delta_3$, по-видимому, в большинстве указанных выше кристаллов выполняется с большой точностью: согласно теоретическим расчетам [25.11] величина $(\Delta_2 - \Delta_3)/\Delta_2$ для CdS, CdSe, ZnS, ZnSe не превышает $2 \cdot 10^{-2}$. Согласно последним экспериментальным данным это отношение равно $1 \cdot 10^{-2}$ для CdS, $9 \cdot 10^{-2}$ для CdSe. Константа A_7 также очень мала, поскольку связанный с ней коэффициент при линейном по k члене в (31.23) (см. ниже) по данным [25.9] также не превышает 10^{-9} эв/см.

Запишем теперь гамильтониан (31.8) в матричной форме и найдем вид спектра вблизи экстремумов каждой из трех зон. Чтобы избежать громоздких выражений, мы будем учитывать только нерелятивистские слагаемые, включая линейный по k член с коэффициентом A_7 . Учет остальных линейных членов сказался

*) Точно так же все релятивистские константы $\alpha_1 - \alpha_8$ в кубическом приближении должны выражаться через две константы α'_1 и α'_2 в (31.9а).

бы лишь на выражениях для коэффициентов при линейном члене в (31.23).

В указанном приближении матрица $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{vmatrix} F & 0 & -H^* & 0 & \kappa^* & 0 \\ 0 & G & \Delta & -H^* & 0 & \kappa^* \\ -H & \Delta & \lambda & 0 & I^* & 0 \\ 0 & -H & 0 & \lambda & \Delta & I^* \\ \kappa & 0 & I & \Delta & G & 0 \\ 0 & \kappa & 0 & I & 0 & F \end{vmatrix}, \quad (31.14)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta &= \sqrt{2} \Delta_3, & H &= i(A_6 k_z k_+ + D_6 \varepsilon_{z+} + A_7 k_+), \\ F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, & I &= i(A_6 k_z k_+ + D_6 \varepsilon_{z+} - A_7 k_+), \\ G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta, & \lambda &= A_1 k_z^2 + A_2 k_{\perp}^2 + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 \varepsilon_{\perp}, \\ \kappa &= A_5 k_+^2 + D_5 \varepsilon_+, & \theta &= A_3 k_z^2 + A_4 k_{\perp}^2 + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 \varepsilon_{\perp}. \end{aligned}$$

Если оставить в \mathcal{H} только матричные элементы F , G , λ и Δ , содержащие не зависящие от \mathbf{k} и $\boldsymbol{\varepsilon}$ члены, то корни получившегося определителя $|\mathcal{H}_1 - \mathbf{I}E| = 0$ имеют вид

$$E_1^1 = F, \quad E_{2,3}^1 = \frac{G + \lambda}{2} \pm \left[\left(\frac{G - \lambda}{2} \right)^2 + \Delta^2 \right]^{1/2}. \quad (31.15)$$

Формула (31.15) определяет $E(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ с точностью до членов первого порядка по $\boldsymbol{\varepsilon}$ и k^2 (при $A_7 = 0$).

Согласно (31.15) положение термов в точке $\mathbf{k} = 0$ в недеформированном кристалле

$$E_1^0 = \Delta_1 + \Delta_2, \quad E_{2,3}^0 = \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} \pm \left[\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} \right)^2 + 2\Delta_3^2 \right]^{1/2} \quad (31.16)$$

и расстояние между первым уровнем и уровнями E_2^0 и E_3^0 равно:

$$E_1^0 - E_{2,3}^0 = \frac{1}{2} [(\Delta_1 + 3\Delta_2) \mp [(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 8\Delta_3^2]^{1/2}]. \quad (31.16a)$$

При отсутствии спин-орбитального расщепления, т. е. при $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$, $E_1^0 = E_2^0$, а $E_{1,2}^0 - E_3^0 = \Delta_1$. При $\Delta_1 = 0$ и $\Delta_2 = \Delta_3$ также $E_1^0 = E_2^0$, а $E_{1,2}^0 - E_3^0 = 3\Delta_2$. Поэтому величину Δ_1 называют кристаллическим расщеплением $\Delta_{\text{кр}}$, а величину $3\Delta_2$ обычно полагают равной $3\Delta_3$ и называют спин-орбитальным расщеплением $\Delta_{\text{со}}$:

$$\Delta_1 = \Delta_{\text{кр}}, \quad \Delta_2 = \Delta_3 = \frac{1}{3} \Delta_{\text{со}}. \quad (31.17)$$

В обозначениях (31.17) формула (31.16a) имеет вид

$$E_1^0 - E_{2,3}^0 = \frac{1}{2} \left\{ (\Delta_{\text{кр}} + \Delta_{\text{со}}) \mp \left[(\Delta_{\text{кр}} + \Delta_{\text{со}})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{\text{кр}} \Delta_{\text{со}} \right]^{1/2} \right\}. \quad (31.16б)$$

Зная расстояние между термами, можно определить значения $\Delta_{кр}$ и $\Delta_{со}$ (если принять, что $\Delta_2 = \Delta_3$). Однако, так как обе эти величины входят в (31.16б) совершенно симметрично, то для того, чтобы определить, какое значение надо приписать $\Delta_{кр}$ и какое $\Delta_{со}$, надо привлекать дополнительные соображения. В частности, как видно из приведенных ниже формул (31.24), это можно установить, изучая относительный сдвиг зон при деформации. Значения $\Delta_{кр}$ и $\Delta_{со}$ для ряда кристаллов приведены в табл. 31.9 в конце параграфа.

Для определения спектра в каждой из зон удобно записать матрицу (31.14) в базисе собственных функций гамильтониана \mathcal{H}_1 , собственные значения которого определяются уравнением (31.15). Эти собственные функции можно выбрать в виде

$$F_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad F_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (31.18)$$

$$F_{3,5} = B_{2,3} \begin{pmatrix} 0 \\ -\Delta \\ G - E_{2,3}^1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad F_{4,6} = B_{2,3} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ G - E_{2,3}^1 \\ -\Delta \\ 0 \end{pmatrix},$$

где

$$B_{2,3} = [(G - E_{2,3}^1)^2 + \Delta^2]^{-1/2}.$$

Записав гамильтониан $\mathcal{H}(k, \varepsilon)$ в представлении (31.18),

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1^1 & 0 & \gamma^* & \delta^* & \sigma^* & \rho^* \\ 0 & E_1^1 & \delta & \kappa & \rho & \xi \\ \gamma & \delta^* & E_2^1 & \alpha^* & 0 & \eta^* \\ \delta & \kappa^* & \alpha & E_2^1 & \vartheta & 0 \\ \sigma & \rho^* & 0 & \vartheta^* & E_3^1 & \beta^* \\ \rho & \xi^* & \eta & 0 & \beta & E_3^1 \end{pmatrix}, \quad (31.19)$$

где

$$\begin{aligned}
 \delta &= -B_2 \Delta k, & \xi &= B_3 (G - E_3^1) I, \\
 \rho &= -B_3 \Delta k, & \eta &= B_2 B_3 [(G - E_3^1) H - (G - E_2^1) I] \Delta, \\
 \gamma &= -B_2 (G - E_2^1) H, & \theta &= B_1 B_3 [(G - E_2^1) H - (G - E_3^1) I] \Delta, \\
 \sigma &= -B_3 (G - E_3^1) H, & \alpha &= B_2^2 \Delta (G - E_2^1) (H - I), \\
 \kappa &= B_2 (G - E_2^1) I, & \beta &= B_3^2 \Delta (G - E_3^1) (H - I),
 \end{aligned}$$

можно затем учесть междузонные члены с помощью теории возмущений, изложенной в § 15. Согласно (15.47) во втором приближении матричные элементы \mathcal{H}'_{ik} при $E_i = E_k$ равны

$$\mathcal{H}'_{ik} = \mathcal{H}_{ik} + \sum_l \frac{\mathcal{H}_{il} \mathcal{H}_{lk}}{E_i - E_l}. \quad (31.20)$$

Ограничиваясь членами второго порядка, мы учитываем слагаемые порядка k^4 , εk^2 и ε^2 . Поэтому в недиагональных членах в (31.19) в коэффициентах достаточно сохранить лишь независящие от k и ε члены, заменив E_i^1 и E_i^0 и G на $\Delta_1 - \Delta_2$. В этом приближении

$$E_2^0 + E_3^0 = \Delta_1 - \Delta_2, \quad E_2^0 E_3^0 = -\Delta^2 = -2\Delta_3^2 \quad (31.21)$$

и соответственно

$$\begin{aligned}
 G - E_2^0 = E_3^0, \quad G - E_3^0 = E_2^0, \quad B_2^{-2} = E_3^0 (E_3^0 - E_2^0), \\
 B_3^{-2} = E_2^0 (E_2^0 - E_3^0).
 \end{aligned} \quad (31.21a)$$

Мы также не будем учитывать малый вклад в квадратичные по k члены за счет слагаемых, пропорциональных A_7 . В этом приближении

$$I = H, \quad \gamma = -\kappa, \quad \sigma = -\xi, \quad \eta = -\theta; \quad (31.22)$$

слагаемые, содержащие A_7 , надо учитывать лишь в матричных элементах α и β , пропорциональных $H - I = 2iA_7 k_+$.

В этом приближении энергия в каждой из зон определяется выражениями

$$\begin{aligned}
 E_{1\pm}^{(2)} &= E_1^1 + \frac{(E_1^0 - E_2^0 - E_3^0) |H|^2 + E_1^0 |k|^2}{(E_1^0 - E_3^0)(E_1^0 - E_2^0)}, \\
 E_{2\pm}^{(2)} &= E_2^1 + \frac{(E_1^0 - E_2^0 + E_3^0) |H|^2 - E_2^0 |k|^2}{(E_1^0 - E_2^0)(E_2^0 - E_3^0)} \pm \frac{2\Delta A_7}{E_2^0 - E_3^0} k_{\perp}, \\
 E_{3\pm}^{(2)} &= E_3^1 + \frac{(E_1^0 + E_2^0 - E_3^0) |H|^2 - E_3^0 |k|^2}{(E_1^0 - E_3^0)(E_3^0 - E_2^0)} \pm \frac{2\Delta A_7}{E_2^0 - E_3^0} k_{\perp}.
 \end{aligned} \quad (31.23)$$

Формулы (31.23) определяют смещение термов при деформации. Эти формулы справедливы при произвольной деформации

всестороннего сжатия и растяжения по оси z (конечно, с точностью до членов порядка $D_i \varepsilon / E'_g$, где E'_g — расстояние до других зон) и при таких деформациях $\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}$, ε_{xy} , ε_{xz} и ε_{yz} , при которых смещение каждого из термов мало по сравнению с расстоянием между ними. Если в выражениях для E_i^1 также ограничиться членами порядка ε^2 , то из (31.23) получим следующие формулы, определяющие смещение каждого из термов при $\mathbf{k} = 0$:

$$E_1 - E_1^0 = (D_1 + D_3) \varepsilon_{zz} + (D_2 + D_4) \varepsilon_{\perp} + \frac{D_6^2 (E_1^0 - E_2^0 - E_3^0) (\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) + D_5^2 E_1^0 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2]}{(E_1^0 - E_2^0)(E_1^0 - E_3^0)}, \quad (31.24a)$$

$$E_2 - E_2^0 = \left(D_1 + D_3 \frac{E_2^0}{E_2^0 - E_3^0} \right) \varepsilon_{zz} + \left(D_2 + D_4 \frac{E_2^0}{E_2^0 - E_3^0} \right) \varepsilon_{\perp} - \frac{E_2^0 E_3^0}{(E_2^0 - E_3^0)^3} (D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 \varepsilon_{\perp})^2 + \frac{D_6^2 (E_1^0 - E_2^0 + E_3^0) (\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) - D_5^2 E_2^0 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2]}{(E_1^0 - E_2^0)(E_2^0 - E_3^0)}, \quad (31.24б)$$

$$E_3 - E_3^0 = \left(D_1 - D_3 \frac{E_3^0}{E_2^0 - E_3^0} \right) \varepsilon_{zz} + \left(D_2 - D_4 \frac{E_3^0}{E_2^0 - E_3^0} \right) \varepsilon_{\perp} + \frac{E_2^0 E_3^0}{(E_2^0 - E_3^0)^3} (D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 \varepsilon_{\perp})^2 - \frac{D_6^2 (E_1^0 + E_2^0 - E_3^0) (\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) - D_5^2 E_3^0 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2]}{(E_2^0 - E_3^0)(E_1^0 - E_3^0)}. \quad (31.24в)$$

Спектр в каждой из подзон в недеформированном кристалле определяется выражениями, отличающимися от (31.24) заменой ε_i на $k_i k_i$ и D_i на A_i . Кроме этого, конечно, в $E(\mathbf{k})$ войдут линейные по k члены из (31.23).

Отсюда видно, что эффективные массы в каждой из подзон выражаются через константы $A_1 - A_4$:

	Зона 1	Зона 2	Зона 3	
$\hbar^2/2m_{\parallel}$	$A_1 + A_3$	$A_1 + A_3 \frac{E_2^0}{E_2^0 - E_3^0}$	$A_1 - A_3 \frac{E_3^0}{E_2^0 - E_3^0}$	(31.25)
$\hbar^2/2m_{\perp}$	$A_2 + A_4$	$A_2 + A_4 \frac{E_2^0}{E_2^0 - E_3^0}$	$A_2 - A_4 \frac{E_3^0}{E_2^0 - E_3^0}$	

Поэтому в рассмотренной модели компоненты m_{\parallel} и m_{\perp} для трех подзон должны быть связаны соотношением

$$\frac{1}{m_{i1}} - \frac{E_2^0}{E_2^0 + E_3^0} \frac{1}{m_{i2}} - \frac{E_3^0}{E_2^0 + E_3^0} \frac{1}{m_{i3}} = 0 \quad (i = \parallel, \perp). \quad (31.26)$$

Это соотношение можно использовать для проверки того, насколько эти три зоны можно рассматривать изолированно от других зон. Аналогичное соотношение, как видно из (31.24), должно выполняться и для констант деформационного потенциала этих трех зон.

Перекрестные члены $E_{\epsilon k^2}$, пропорциональные ϵk^2 , определяют изменение эффективных масс при деформации. Согласно (31.23)

$$E_{\epsilon k^2, 1} = [(E_1^0 - E_3^0)(E_1^0 - E_2^0)]^{-1} \{2(E_1^0 - E_2^0 - E_3^0) D_6 A_6 k_z (\epsilon_{xz} k_x + \epsilon_{yz} k_y) + 2E_1^0 D_5 A_5 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) (k_x^2 - k_y^2) + 4\epsilon_{xy} k_x k_y]\}, \quad (31.27a)$$

$$E_{\epsilon k^2, 2} = -(E_2^0 - E_3^0)^{-3} \{2E_2^0 E_3^0 (A_3 k_z^2 + A_4 k_{\perp}^2) (D_3 \epsilon_{zz} + D_4 \epsilon_{\perp})\} + [(E_1^0 - E_2^0)(E_2^0 - E_3^0)]^{-1} \{2(E_1^0 - E_2^0 + E_3^0) D_6 A_6 k_z (\epsilon_{xz} k_x + \epsilon_{yz} k_y) - 2E_2^0 D_5 A_5 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 (k_x^2 - k_y^2) + 4\epsilon_{xy} k_x k_y]\}, \quad (31.27б)$$

$$E_{\epsilon k^2, 3} = 2(E_2^0 - E_3^0)^{-3} \{E_2^0 E_3^0 (A_3 k_z^2 + A_4 k_{\perp}^2) (D_3 \epsilon_{zz} + D_4 \epsilon_{\perp})\} - [(E_2^0 - E_3^0)(E_1^0 - E_3^0)]^{-1} \{2(E_1^0 + E_2^0 - E_3^0) D_6 A_6 k_z (\epsilon_{xz} k_x + \epsilon_{yz} k_y) - 2E_3^0 D_5 A_5 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) (k_x^2 - k_y^2) + 4\epsilon_{xy} k_x k_y]\}. \quad (31.27в)$$

В предельном случае, когда кристаллическое расщепление Δ_1 намного превышает спин-орбитальные Δ_2 и Δ_3 , энергии $E_{1,2}^0 = \Delta_1 \pm \Delta_2$, $E_3^0 = 0$ и выражения (31.23) — (31.27) для уровней E_1 и E_2 переходят в (31.7).

В табл. 40 З в конце книги приведены известные к настоящему времени значения эффективных масс и констант деформационного потенциала D_i для некоторых кристаллов группы $A_2 B_6$.

Используя собственные функции (31.18), можно также определить относительные вероятности перехода электрона из одной из трех валентных зон в зону проводимости при поглощении света. Матричные элементы для этих переходов при данном направлении электрического поля пропорциональны коэффициентам при соответствующих компонентах k_i в междузонном операторе \mathcal{H}_{vc} . Этот оператор можно построить, используя матрицы компонент полярного вектора \mathbf{R} , которые как раз преобразуются по представлениям $\Gamma_1 \times (\Gamma_1 + \Gamma_5) = A_1 + E_1$. Оператор \mathcal{H}_{vc} должен включать инвариантные произведения этих компонент на

функции от \mathbf{k} и σ , преобразующиеся по представлениям A_1 и E_1 :

$$\mathcal{H}_{vc} = P_1 R_z k_z + \frac{1}{\sqrt{2}} P_2 (R_+ k_- + R_- k_+) + \pi_1 R_z (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+) + \\ + \sqrt{2} \pi_2 k_z (R_+ \sigma_- + R_- \sigma_+) - \frac{i}{\sqrt{2}} \pi_3 \sigma_z (R_+ k_- - R_- k_+). \quad (31.28)$$

Матрицы R_i , построенные в том же представлении, что и матрицы таблицы 31.7, приведены в табл. 31.8. Входящие в (31.28) пять констант P_1 , π_i определяют интенсивность пяти различных переходов (переход $\Gamma_9 - \Gamma_7$ при $\mathcal{E} \parallel C$ запрещен). Если три валентные зоны находятся достаточно далеко от других зон, то релятивистские константы π_1 , π_2 и π_3 должны быть малы. Если опустить соответствующие члены, то матрица \mathcal{H}_{vc} в представлении (31.18) будет иметь вид

$$\left\| \begin{array}{cccccc} -\frac{P_2 k_+}{\sqrt{2}} & 0 & B_2 (G - E'_2) P_1 k_z & -\frac{B_2}{\sqrt{2}} \Delta P_2 k_- & B_3 (G - E'_3) P_1 k_z & -\frac{B_3}{\sqrt{2}} \Delta P_2 k_- \\ 0 & \frac{P_2 k_-}{\sqrt{2}} & -\frac{B_2}{\sqrt{2}} \Delta P_2 k_+ & B_2 (G - E'_2) P_1 k_z & \frac{B_3}{\sqrt{2}} \Delta P_2 k_+ & B_3 (G - E'_3) P_1 k_z \end{array} \right\|. \quad (31.29)$$

Отсюда, учитывая (31.21a) для относительных интенсивностей перехода, получим выражения, приведенные в табл. 31.6.

Таблица 31.6

Относительные интенсивности переходов между валентными зонами и зоной проводимости

Номер валентной зоны	Поляризация света	
	$\mathcal{E} \parallel C$	$\mathcal{E} \perp C$
1 (Γ_9)	0	$ P_2 ^2$
2 (Γ_7)	$\frac{2E_3}{E_3 - E_2} P_1 ^2$	$\frac{E_2}{E_2 - E_3} P_2 ^2$
3 (Γ_7)	$\frac{2E_2}{E_2 - E_3} P_1 ^2$	$\frac{E_3}{E_3 - E_2} P_2 ^2$

$$E_{2,3} = \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} \pm \left[\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} \right)^2 + 2\Delta_3^2 \right]^{1/2}.$$

В кубическом приближении $\Delta_1 = \Delta_{кр}$, $\Delta_2 = \Delta_3 = \frac{1}{3} \Delta_{со}$, $P_1 = P_2$.

В кубическом приближении, когда

$$\mathcal{H}_{vc} = P(R\mathbf{k}) + \pi(\sigma[R\mathbf{k}]), \quad (31.30)$$

между константами P_i и π_i в (31.28) должны выполняться соотношения

$$P_1 = P_2 = P, \quad \pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = \pi. \quad (31.31)$$

Выполнение соотношений для сил осцилляторов, приведенных в табл. 31.6, может служить указанием на справедливость трехзонной модели, а также кубического приближения.

Точка А. В точке A все представления относятся к случаю b_1 или c_1 и объединяются попарно. Эта точка не является точкой нулевого наклона ни для каких представлений.

Точка Р. Точки P являются возможными точками нулевого наклона для представлений P_1 и P_2 . Для этих представлений в $\mathcal{H}(k, \varepsilon)$ входят все функции от k, ε и σ , преобразующиеся по единичному представлению группы направлений C_{3v} , т. е. по K_1 , и

$$\mathcal{H}(k, \varepsilon) = \lambda I + IA_0 k_z + \alpha_1 (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+), \quad (31.32)$$

где, как и выше, $\lambda = A_1 k_z^2 + A_2 k_\perp^2 + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 \varepsilon_\perp$. Отсюда при $A_0 = 0$

$$E(k, \varepsilon) = \lambda \pm \alpha_1 k_\perp, \quad (31.33)$$

т. е. спектр $E(k, \varepsilon)$ для этих представлений, как и для представлений $\Delta_1 - \Delta_4$, определяется формулой, подобной (31.2).

Для представлений P_3 точки P не являются возможными точками нулевого наклона, однако для представлений P_4, P_5 и P_6 , получившихся в результате спин-орбитального расщепления представления P_3 , в этих точках могут обращаться в нуль коэффициенты при всех линейных по k нерелятивистских членах.

Точка К. В точке K имеется операция R , например $(c_2 | t_0/2)$, превращающая k_0 в $-k_0$, и представления K_1, K_2 и K_3 в этой точке относятся к случаю a_2 .

В соответствии с формулой (25.36) для представлений K_1 и K_2 в $\mathcal{H}(k, \varepsilon)$ входят четные по отношению к инверсии времени функции, преобразующиеся по представлению A_1 группы C_{6v} , и нечетные функции, преобразующиеся по B_1 . Поэтому для точки K константа A_0 в (31.32), (31.33) равна нулю.

Для представления K_3 при отсутствии спин-орбитального расщепления эта точка не является точкой нулевого наклона. Но для произошедших из него представлений K_4 и K_5 точка K является точкой нулевого наклона, а для представлений K_6 $E(k)$ может содержать лишь релятивистские линейные по k_\perp члены.

Точка Н. В точке H представления H_1 и H_2 относятся к случаю b_2 и объединяются вместе.

В соответствии с правилами, изложенными в § 26, в диагональные подматрицы входят функции от k, σ и ε , преобразующиеся по представлению $H \times H^* = A_1$ группы C_{3v} . При этом функции, четные по отношению к операции $RK = c_2 K$, входят с единичной матрицей, а нечетные — с матрицей ρ_z . В недиагональные подматрицы согласно (25.16) должны входить четные

по отношению к инверсии времени функции, преобразующиеся по представлению B_2 группы $C_{3v} \times C_2 = C_{6v}$, и нечетные, преобразующиеся по A_2 . Матрицы, преобразующиеся по этим представлениям, можно выбрать в виде ρ_x и ρ_y . Тогда

$$\mathcal{H}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \lambda \mathbf{I} + A_3 \mathbf{I} (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+) + A_0 \rho_z k_z + \Delta \rho_y \sigma_z. \quad (31.34)$$

Соответственно спектр

$$E_{1-4}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \lambda \pm \{\Delta^2 + A_0^2 k_z^2 + A_3^2 k_{\perp}^2 \pm 2A_0 A_3 k_{\perp} k_z\}^{1/2} \approx \\ \approx \lambda \pm \Delta^2 + \frac{1}{2\Delta} (A_0^2 k_z^2 + A_3^2 k_{\perp}^2 \pm 2A_0 A_3 k_{\perp} k_z). \quad (31.35)$$

Таким образом, в этом случае уровни двукратно вырождены при

Таблица 31.7

Матрицы компонент аксиального вектора J_z, J_+, J_- и их произведений в представлении Y_1^1, Y_1^0, Y_{-1}^1

$J_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$J_+ = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$J_- = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$
$J_z^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$J_+^2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$J_-^2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$
$2[J_+ J_-] = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$2[J_z J_+] = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$2[J_z J_-] = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$
$2[J_i J_k] = J_i J_k + J_k J_i.$		

Таблица 31.8

Матрицы компонент полярного вектора R в представлении $Y_0^{0+}, Y_1^{1-}, Y_0^{1-}, Y_{-1}^{1-}$

$R_z = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$R_+ = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$R_- = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$
$R'_z = \begin{vmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$R'_+ = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$	$R'_- = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$

$k = 0$. Эти уровни соответствуют представлениям H_6 , относящимся к случаю a_2 . Для этих представлений, в отличие от представлений $H_1 - H_2$, точка H является точкой нулевого наклона.

Для представления H_3 , относящегося к случаю a_2 , в $\mathcal{H}(k, \varepsilon)$ согласно (25.17) входят четные по отношению к инверсии времени функции, преобразующиеся по A_1, B_2, E_2 , и нечетные, преобразующиеся по A_2, B_1, E_1 , и соответственно матрица $\mathcal{H}(k, \varepsilon)$ имеет вид

$$\mathcal{H}(k, \varepsilon) = \Delta_1 \rho_z \sigma_z + \alpha_1 (\sigma_+ k_- + \sigma_- k_+) + \rho_+ H^* + \rho_- H, \quad (31.36)$$

где $H = A_3 k_+ k_z + i \alpha_2 \sigma_z k_+ + \alpha_3 \sigma_+ k_z + D_3 \varepsilon_{+z}$.

Каждый из термов в точке $k = 0$ в этом случае двукратно вырожден, так как представления H_4 и H_5 относятся к случаю b_2 и объединяются вместе. Соответственно, если не учитывать линейных по k релятивистских членов,

$$E(\varepsilon, k) = \lambda \pm \left\{ \Delta_1^2 + A_3 k_+^2 k_z^2 + 2 A_3 D_3 (\varepsilon_{xz} k_x k_z + \varepsilon_{yz} k_y k_z) + D_3^2 (\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) \right\}^{1/2}. \quad (31.37)$$

Видно, что в этом случае можно ожидать сравнительно большого изменения эффективной массы при деформациях ε_{xz} и ε_{yz} .

§ 32. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С КОЛЕБАНИЯМИ РЕШЕТКИ И ДЕФОРМАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Теория взаимодействия электронов и фононов в полупроводниках непосредственно связана с теорией деформационных эффектов.

Так как масса электрона намного меньше массы атома, то потенциальная энергия электрона практически зависит только от мгновенного положения атомов решетки, а не от их скорости. В этом приближении, называемом адиабатическим, поле, действующее на электроны в точке x , можно представить в виде периодического потенциала идеальной решетки $V_0(x)$ и возмущения $\delta V(x) = V(x) - V_0(x)$, определяемого смещением атомов из положения равновесия. При малых смещениях $\delta V(x)$ можно разложить в ряд по смещениям атомов:

$$\delta V(x) = \sum_{fx} V_{fx}(x) u_{fx}.$$

Здесь $V_{fx}(x) u_{fx}$ — возмущение, создаваемое в точке x при смещении атома fx , находящегося в узле x элементарной ячейки f , положение которой определяется соответствующим узлом решетки Браве X_f , на величину u_{fx} . В силу периодичности кристалла поле, создаваемое в точке x при смещении атома fx , будет равно полю, создаваемому в точке $x - X_f$ при смещении на ту же величину атома x , находящегося в решетке Браве, узел которой X_0 принимается за начало координат. Следовательно, $V_{fx}(x) = V_{0x}(x - X_f)$, т. е. $V_{fx}(x)$ зависит только от раз-

ности $\mathbf{x} - \mathbf{X}_f$. Поэтому выражение для $\delta V(\mathbf{x})$ можно записать в виде

$$\delta V(\mathbf{x}) = \sum_{f\kappa} \mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) u_{f\kappa}. \quad (32.1)$$

Так как при смещении всей решетки на величину \mathbf{u}

$$\delta V(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}) - V_0(\mathbf{x}) = -\mathbf{u} \nabla V_0,$$

то

$$\sum_{f\kappa} \mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) = -\nabla V_0(\mathbf{x}). \quad (32.2)$$

При длинноволновых колебаниях, когда длина волны $\lambda = 2\pi/q$ намного превышает постоянную решетки, удобно ввести величину

$$\bar{\mathbf{u}}_f = \sum_{\kappa} M_\kappa \mathbf{u}_{f\kappa} / \sum_{\kappa} M_\kappa,$$

определяющую смещение центра тяжести ячейки \mathbf{X}_f , и величины $\mathbf{u}_{f\kappa\kappa'} = \mathbf{u}_{f\kappa} - \mathbf{u}_{f\kappa'}$, определяющие относительное смещение атомов κ и κ' в элементарной ячейке f . Тогда (32.1) можно переписать в виде

$$\delta V(\mathbf{x}) = \sum_f \bar{\mathbf{u}}_f \bar{\mathbf{V}}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) + \frac{1}{2} \sum_f \sum_{\kappa\kappa'} \mathbf{u}_{f\kappa\kappa'} \mathbf{V}_{\kappa\kappa'}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f). \quad (32.3)$$

Здесь

$$\bar{\mathbf{V}}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) = \sum_{\kappa} \mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f),$$

$$\mathbf{V}_{\kappa\kappa'}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) = \frac{1}{M_0} (\mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) M_{\kappa'} - \mathbf{V}_{\kappa'}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) M_\kappa),$$

а $M_0 = \sum_{\kappa} M_\kappa$ — масса элементарной ячейки.

Для длинноволновых колебаний, т. е. при $\lambda \gg a$, где a — постоянная решетки, потенциал $\delta V(\mathbf{x})$ можно разбить на две части: одну $\delta V_\kappa(\mathbf{x})$, связанную с короткодействующей составляющей потенциала $\mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)$ и определяемую смещением ближайших к точке \mathbf{x} атомов, и вторую $\delta V_d(\mathbf{x}) = -e\varphi(\mathbf{x})$, связанную с далекодействующей составляющей $\mathbf{V}_\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)$. В эту часть основной вклад дают смещения атомов, находящихся далеко от точки \mathbf{x} — на расстояниях, существенно превышающих постоянную решетки и сравнимых с длиной волны фонона λ . Так как в короткодействующую часть потенциала $V(\mathbf{x})$ в точке \mathbf{x} основной вклад дают атомы, находящиеся на расстояниях $|\mathbf{x} - \mathbf{X}_f| \ll \lambda$, то в соответствующей сумме смещения $\bar{\mathbf{u}}_f$ мало отличаются от среднего смещения $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ в точке \mathbf{x} и их можно разложить в ряд по $|\mathbf{x} - \mathbf{X}_f|$, ограничившись первыми двумя членами:

$$\bar{u}_{fi} = u_i(\mathbf{x}) + \sum_j \frac{\partial u_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} (\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)_j. \quad (32.4)$$

Относительные смещения атомов $u_{\kappa\kappa'}$ при длинноволновых акустических колебаниях пропорциональны волновому вектору q , т. е. производным от смещения в данной точке, так как в пределе при $q \rightarrow 0$, т. е. при $\lambda \rightarrow \infty$, при таких колебаниях ячейки смещаются как целое и $u_{\kappa\kappa'} \rightarrow 0$. Следовательно,

$$u_{\kappa\kappa', l} = \sum_{ik} \Gamma_{lij}^{\kappa\kappa'} \varepsilon_{ij}. \quad (32.5)$$

Тензор $\Gamma_{lij}^{\kappa\kappa'}$ определяется пространственной группой кристалла. При всех преобразованиях пространственной группы, не меняющих местами атомы элементарной ячейки, т. е. не содержащих нетривиальных трансляций, тензор $\Gamma_{lij}^{\kappa\kappa'}$ не меняет верхних индексов и преобразуется по нижним индексам как обычный тензор. При преобразованиях, меняющих атомы κ и κ' местами, он дополнительно меняет знак. Остальные преобразования связывают между собой компоненты $\Gamma_{lij}^{\kappa\kappa'}$ с разными параметрами κ, κ' (при числе одинаковых атомов больше двух). Число линейно независимых компонент этого тензора можно определить по формулам § 15, определив представления, по которым преобразуются компоненты ε_{ij} и смещения $u_{\kappa\kappa'}$. Так как при числе атомов в элементарной ячейке N_κ , большем двух, не все компоненты $u_{\kappa\kappa'}$ линейно независимы, то в последнем случае удобно ввести $3(N_\kappa - 1)$ линейно независимых компонент u_{ls}^0 , соответствующих ветви оптических колебаний l при $q \rightarrow 0$. Согласно (15.27) характер представления, по которому преобразуются эти компоненты (или величины $u_{\kappa\kappa', s}$ при $N_\kappa = 2$), равен

$$\chi(c_\varphi) = (N_c - 1)(1 + 2 \cos \varphi), \quad \chi(s_\varphi) = (N_c - 1)(-1 + 2 \cos \varphi),$$

где N_c — число атомов, остающихся на месте или смещающихся на один из векторов решетки Браве при данном преобразовании. (Например, для кубических кристаллов O_h^7 смещения $u_{1,2}$ преобразуются по представлению Γ_{15}^+ и тензор Γ , как указывалось в § 29, имеет одну линейно независимую компоненту Γ_{xyz} .) Поэтому в соответствии с (32.2) — (32.5) вклад от короткодействующих сил, связанный с акустическими колебаниями, равен *):

$$V_{\text{ак}}(\mathbf{x}) = -\bar{u} \nabla V_0(\mathbf{x}) + \sum_{ij} V_{ij}(\mathbf{x}) \varepsilon_{ij}, \quad (32.6)$$

*) Так как однородное вращение вокруг точки \mathbf{x} не меняет потенциал в этой точке, то антисимметричные компоненты тензора V_{ij} равны нулю. Легко также убедиться, что этот тензор совпадает с введенным ранее в § 29. Действительно, если деформация однородна, то, проведя преобразование координат (29.5), мы устраним в новой координатной системе первый член в (32.6) и, следовательно, оставшееся второе слагаемое в (32.6) совпадает со вторым членом в (29.11).

где

$$V_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_f [(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)_i V_j(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f) + (\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)_j V_i(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f)] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{fkk'l} \Gamma_{lij}^{kk'} V_{kk',l}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f). \quad (32.6a)$$

При оптических колебаниях в пределе при $q \rightarrow 0$ центр тяжести ячеек не смещается, т. е. $\bar{\mathbf{u}} = 0$, а смещения подрешеток во всех узлах одинаковы. Поэтому в потенциале $V_{\text{опт}}$, описывающем вклад от короткодействующих сил, вызываемых длинноволновыми оптическими колебаниями, можно ограничиться лишь слагаемыми, не зависящими от q :

$$V_{\text{опт}} = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \mathbf{u}_{kk'} \mathbf{V}_{\text{опт}}^{kk'}(\mathbf{x}), \quad (32.7)$$

где в соответствии с (32.3)

$$\mathbf{V}_{\text{опт}}^{kk'}(\mathbf{x}) = \sum_f \mathbf{V}_{kk'}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f). \quad (32.7a)$$

Дальнодействующие силы

Рассмотрим теперь вклад в потенциал $-e\varphi$, связанный с дальнодействующими силами. Так как основной вклад в $\varphi(\mathbf{x})$ в (32.1) дают члены с $|\mathbf{x} - \mathbf{X}_f| \gg a$, то $\varphi(\mathbf{x})$ в отличие от короткодействующих сил практически не изменяется в пределах одной элементарной ячейки. Поэтому этот потенциал удобно рассматривать феноменологически как потенциал, создаваемый поляризацией \mathbf{P} , т. е. электрическими диполями, возникающими при колебаниях решетки. Для этого будем рассматривать в качестве независимых переменных смещения атомов \mathbf{u}_{fk} и компоненты макроскопического поля $\mathcal{E} = -\nabla\varphi$, которые и определяют дальнодействующие силы. Тогда внутреннюю энергию U можно представить в виде суммы трех членов: квадратичного по смещению члена U_u , квадратичного по полю $U_{\mathcal{E}}$ и перекрестного члена $U_{u\mathcal{E}}$.

Согласно (15.17), (15.66) и (15.13), (15.166) первое слагаемое

$$U_u = \frac{1}{2} \sum_{ii' ll'} \Phi_{ii'}(ll') u_i(l) u_{i'}(l') = \\ = \frac{1}{2} M_0 N \sum_{qkk'ii'} D_{ii'kk'}(q) u_{ik}(-q) u_{i'k'}(q), \quad (32.8a)$$

где матрица \mathbf{D} определяется уравнениями (15.13), (15.66), а компоненты $u_{ik}(q)$ — уравнением (15.166).

Второе слагаемое

$$U_{\mathcal{E}} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \int \alpha_{ij}^{\infty} \mathcal{E}_i(\mathbf{x}) \mathcal{E}_j^*(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -\frac{\gamma}{2} \sum_{ijq} \alpha_{ij}^{\infty} \mathcal{E}_i(\mathbf{q}) \mathcal{E}_j(-\mathbf{q}). \quad (32.8б)$$

Здесь

$$\mathcal{E}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\gamma} \int \mathcal{E}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} d\mathbf{x},$$

причем $\mathcal{E}(-\mathbf{q}) = \mathcal{E}^*(\mathbf{q})$, а $\alpha_{ij}^{\infty} = \frac{1}{4\pi} (\kappa_{ij}^{\infty} - 1)$ — компоненты тензора поляризуемости при фиксированном положении атомов. Третье слагаемое можно записать в виде

$$U_{u\mathcal{E}} = -\frac{\gamma}{\Omega_0} \sum_{qijk} Q_{ij}^{\kappa}(\mathbf{q}) u_{ik}(\mathbf{q}) \mathcal{E}_j(-\mathbf{q}). \quad (32.8в)$$

Здесь Q_{ij}^{κ} — феноменологические константы, имеющие размерность заряда, Ω_0 — объем элементарной ячейки.

Если теперь перейти к представлению, в котором матрица $U_{\mathbf{a}}$ диагональна, введя согласно (15.16а) нормальные координаты a_{qv} , то в новом представлении внутренняя энергия U запишется в виде

$$U = 2M_0N \sum_{qv} \omega_{qv}^0 a_{qv} a_{-qv} - 2N \sum_{qvj} Q_{vj}(\mathbf{q}) a_{qv} \mathcal{E}_j(-\mathbf{q}) - \frac{\gamma}{2} \sum_{qij} \alpha_{ij}^{\infty} \mathcal{E}_i(\mathbf{q}) \mathcal{E}_j(-\mathbf{q}). \quad (32.9)$$

Здесь ω_{qv}^0 — собственные частоты колебаний решетки без учета дальнего действия,

$$\omega_{qv}^0 \delta_{vv'} = \sum_{ii'kk'} e_{\kappa i}^v(-\mathbf{q}) D_{ii'kk'}(\mathbf{q}) e_{\kappa' i'}^{v'}(\mathbf{q}), \quad (32.9а)$$

а

$$Q_{vj}(\mathbf{q}) = \sum_{ik} Q_{ij}^{\kappa}(\mathbf{q}) e_{\kappa i}^v(\mathbf{q}); \quad (32.9б)$$

компоненты $e_{ik}^v(\mathbf{q})$ определяются системой уравнений (15.15).

Если записать компоненты $Q_{vj}(\mathbf{q})$ в виде разложения по \mathbf{q} ,

$$Q_{vj}(\mathbf{q}) = Q_{vj}^0 + \sum_l Q_{vijl} q_l + \sum_{ll'} Q_{vijll'} q_l q_{l'}, \quad (32.9в)$$

то, используя указанные выше правила определения числа линейно независимых компонент тензоров и зная представления, по которым преобразуются нормальные координаты a_{qv} (или смещения $u_{ik}(\mathbf{q})$) и компоненты \mathcal{E}_j , можно установить число отличных от нуля компонент $Q_{vj}(\mathbf{q})$ (или $Q_{ij}^{\kappa}(\mathbf{q})$) и связь между

линейно зависимыми компонентами, а используя метод инвариантов, можно легко записать гамильтониан U (32.9).

Из уравнения (32.9) следует, что поляризация единицы объема \mathbf{P} равна:

$$P_j(\mathbf{q}) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial \mathcal{E}_j(-\mathbf{q})} = \frac{2}{\Omega_0} \sum_{\nu} Q_{\nu j}(\mathbf{q}) a_{q\nu} + \sum_i \alpha_{ij}^{\infty} \mathcal{E}_i(\mathbf{q}). \quad (32.10)$$

Уравнения движения (15.6)

$$-M_{\kappa} \omega^2 u_{f\kappa i} = \frac{\partial U}{\partial u_{f\kappa i}}$$

в новых переменных согласно (15.10) и (32.9) имеют вид

$$\omega^2 a_{q\nu} = \frac{1}{4M_0 N} \frac{\partial U}{\partial a_{-q\nu}} = \omega_{q\nu}^2 a_{q\nu} - \frac{1}{2M_0} \sum_{\nu} Q_{\nu j}(-\mathbf{q}) \mathcal{E}_j(\mathbf{q}). \quad (32.11)$$

Для того чтобы определить спектр колебаний решетки с учетом дальнедействующих сил, надо дополнить систему уравнений (32.10), (32.11) уравнениями Максвелла, которые для плоских волн записываются в виде

$$(\mathbf{q} \mathcal{D}_q) = 0, \quad (\mathbf{q} \mathbf{H}_q) = 0, \quad [\mathbf{q} \mathcal{E}_q] = \frac{\omega}{c} \mathbf{H}_q, \quad [\mathbf{q} \mathbf{H}_q] = -\frac{\omega}{c} \mathcal{D}_q \quad (32.12)$$

и сводятся к одному уравнению

$$\mathcal{D}_q = \mathcal{E}_q + 4\pi \mathbf{P}_q = -\frac{c^2}{\omega^2} [\mathbf{q} (\mathbf{q} \mathcal{E}_q) - \mathcal{E}_q q^2]. \quad (32.13)$$

Выразив $a_{q\nu}$ из (32.11) через \mathcal{E}_j и подставив в (32.10), найдем, что

$$\mathcal{D}_i(\mathbf{q}) = \sum \kappa_{ij}(\omega, \mathbf{q}) \mathcal{E}_j(\mathbf{q}), \quad (32.14)$$

где

$$\kappa_{ij}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{M_0 \Omega_0} \sum_{\nu} \frac{Q_{\nu j}(\mathbf{q}) Q_{\nu i}(-\mathbf{q})}{\omega_{q\nu}^2 - \omega^2} + \kappa_{ij}^{\infty}. \quad (32.14a)$$

Подставив (32.14) в (32.13), получим систему уравнений для компонент $\mathcal{E}_i(\mathbf{q})$, детерминант которой

$$\left| \kappa_{ij}^{\infty} - \frac{q^2 c^2}{\omega^2} \delta_{ij} + \frac{c^2}{\omega^2} q_i q_j \right| = 0 \quad (32.15)$$

определяет спектр $\omega(\mathbf{q})$ как для фотонов, так и для тех колебаний решетки, которые создают отличное от нуля электрическое поле.

При рассмотрении электрон-фононного взаимодействия запаздывание обычно можно не учитывать, так как для фононов с волновым вектором, близким к волновому вектору электронов, $q^2 c^2 / \omega^2 \gg 1$. В этом приближении поле \mathcal{E} , как видно из (32.12) или (32.13), продольно, и его легко определить, положив

$\mathcal{E}_q = -i q \Phi_q$, из уравнения $(q \mathcal{D}_q) = q \mathcal{E}_q + 4\pi (\mathbf{P}_q q) = 0$, подставив туда \mathbf{P}_q из (32.10). В результате найдем, что

$$\Phi_q = -4\pi i (q \mathbf{P}^u(q)) / \sum_{ij} \kappa_{ij}^\infty q_i q_j \quad (32.16)$$

и соответственно

$$\mathcal{E}(q) = -4\pi q (q \mathbf{P}^u(q)) / \sum_{ij} \kappa_{ij}^\infty q_i q_j, \quad (32.16a)$$

где $\mathbf{P}^u(q)$ — поляризация, создаваемая колебаниями решетки, которая согласно (32.10) и (32.8в) равна

$$P_i^u(q) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{ix} Q_{ix}^x(q) u_{ix}(q) = \frac{2}{\Omega_0} \sum_j Q_{vj}(q) a_{qv}. \quad (32.17)$$

Подставив (32.16a) и (32.17) в (32.11), получим систему уравнений

$$(\omega_{qv}^2 - \omega^2) a_{qv} + \sum_{v'} \Theta_v(-q) \Theta_{v'}(q) a_{qv'} = 0, \quad (32.18)$$

где

$$\Theta_v(q) = \left(\frac{4\pi}{M_0 \Omega_0 \sum_{ij} \kappa_{ij}^\infty q_i q_j} \right)^{1/2} \sum_i Q_{vi}(q) q_i. \quad (32.18a)$$

Приравнивая нулю определитель этой системы

$$\begin{aligned} & |(\omega_{qv}^2 - \omega^2) \delta_{vv'} + \Theta_v(-q) \Theta_{v'}(q)| = \\ & = \prod_v (\omega_{qv}^2 - \omega^2) \left[1 + \sum_{v'} \frac{\Theta_{v'}(q) \Theta_{v'}(-q)}{\omega_{qv'}^2 - \omega^2} \right] = 0, \end{aligned} \quad (32.18б)$$

найдем собственные частоты колебаний ω_{qv} с учетом дальнедействующих сил.

Из уравнения (32.18б) видно, что от каждого n_v -кратно вырожденного терма ω_v^0 при учете дальнего действия при $\Theta_v \neq 0$ отщепляется по одному терму. Частота этих смещенных термов определяется уравнением

$$\sum_{ij} \kappa_{ij}^\infty q_i q_j + \frac{4\pi}{M_0 \Omega_0} \sum_{vij} \frac{Q_{vi}(q) Q_{vj}(-q) q_i q_j}{\omega_{qv}^2 - \omega^2} = 0. \quad (32.18в)$$

Последнее уравнение можно получить сразу из условия

$$(q \mathcal{D}_q) = -i \sum_{ij} \kappa_{ij} q_i q_j \Phi_q = 0,$$

откуда при $\Phi_q \neq 0$ следует, что

$$\sum_{ij} \kappa_{ij} q_i q_j = 0. \quad (32.18г)$$

Подставив в (32.18г) значение κ_{ij} из (32.14а), получим (32.18в) *).

Определив собственные частоты ω_{qv} из уравнений (32.18б, в, г), используя уравнение (32.18), найдем смещения a_{qv}^μ , соответствующие частоте ω_{qv} :

$$a_{qv}^\mu = A \frac{Q_v(-q)}{\omega_{q\mu}^2 - \omega_{qv}^2}. \quad (32.19)$$

Константа $A = \sum_v \Theta_v(q) a_{qv}$ определяется условием нормировки:

$$\sum_v |a_{q\mu}^\mu|^2 = |\bar{a}_{q\mu}|^2 = \text{const},$$

где $|\bar{a}_{q\mu}|^2$ определяется уравнением (15.24). Подставив эти значения a_{qv}^μ в (32.17), найдем поляризацию $\mathbf{P}^\mu(q)$, а затем из (32.16а) и (32.16) определим поле $\mathcal{E}^\mu(q)$ и потенциал Φ_q^μ , создаваемый данным колебанием $q\mu$ с частотой $\omega_{q\mu}$.

Поляризация, пропорциональная смещению, т. е. не обращающаяся в нуль при $q = 0$, может возникать лишь при оптических колебаниях в полярных кристаллах, т. е. кристаллах, состоящих из атомов разных элементов, либо в кристаллах, имеющих более двух одинаковых атомов в элементарной ячейке.

В кубических кристаллах, содержащих два атома с массами M_1 и M_2 в элементарной ячейке, для трех ветвей оптических колебаний векторы поляризации $e_{\chi i}^{j \text{опт}}$ можно выбрать в виде

$$e_{i i}^{j \text{опт}} = \sqrt{M_2/M_1} \delta_{ij}, \quad e_{i i}^{j \text{опт}} = -\sqrt{M_1/M_2} \delta_{ij}; \quad (32.20а)$$

соответственно нормальные координаты $a_i^{\text{опт}}$ равны

$$a_i^{\text{опт}} = \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{2(M_1 + M_2)} (u_{1i} - u_{2i}) \quad (32.20б)$$

и преобразуются как i -компоненты координаты. Эффективный заряд имеет отличными от нуля лишь диагональные компоненты:

$$Q_{i, j}^{\text{опт}}(0) = Q \delta_{ij} \quad (32.20в)$$

*) Дополнительное расщепление термов для длинноволновых колебаний, обусловленное дальнедействием, на первый взгляд противоречит выводам теории групп. Однако надо иметь в виду, что это расщепление имеет место фактически не при $q = 0$, а при $q \sim 1/L$, где L — размер кристалла. Вследствие конечного вклада поверхности в энергию колебаний полярного кристалла положение термов при $q = 0$ определяется не только симметрией кристаллической решетки, но и симметрией самого образца. Поэтому при $q \sim 1/L$ спектр резко меняется и при $q \gg 1/L$ уже от формы образца не зависит, но зато в принципе зависит от направления q . При этом расщепление термов вследствие дальнедействия, как правило, меньше допускаемого симметрией группы волнового вектора G_q .

Дополнительное расщепление, связанное с короткодействующими силами, пропорционально qa , где a — постоянная решетки, т. е. сказывается при значительно больших q . При расчете дисперсии фононов эти члены необходимо учитывать.

— 11111
11111
11111

и, следовательно, в соответствии с (32.16)

$$\varphi_q^{\text{опт}} = - \frac{8\pi i Q (q a^{\text{опт}})}{\Omega_0 q^2}, \quad (32.21)$$

т. е. поле $\varphi^{\text{опт}}$ в нулевом приближении по q возникает только при продольных оптических колебаниях, когда вектор $a^{\text{опт}}$ с компонентами $a_i^{\text{опт}}$ параллелен q . Частота этих колебаний в соответствии с уравнением (32.18в) равна

$$\omega_l^2 = \omega_t^2 + \frac{4\pi Q^2}{M_0 \Omega_0 \kappa^\infty}, \quad (32.21a)$$

где $\omega_l = \omega^0$ — частота поперечных колебаний.

Так как для этого случая согласно (32.14a)

$$\kappa(\omega) = \kappa^\infty + \frac{4\pi Q^2}{M_0 \Omega_0 (\omega_t^2 - \omega^2)}, \quad (32.21б)$$

то эффективный заряд Q можно выразить через разность диэлектрических проницаемостей на высокой частоте κ^∞ (при $\omega \gg \omega^0$) и на низкой κ^0 (при $\omega \ll \omega^0$):

$$Q^2 = \frac{\kappa^0 - \kappa^\infty}{4\pi} M_0 \Omega_0 \omega_t^2. \quad (32.21в)$$

Из (32.21a) и (32.21в) следует известное соотношение:

$$\frac{\omega_l^0}{\omega_t^2} = \frac{\kappa^0}{\kappa^\infty}. \quad (32.21г)$$

Для неполярных кристаллов разложение (32.9в) начинается с линейных по q членов. Эти же слагаемые определяют и дипольный момент, создаваемый поперечными оптическими колебаниями в кубических полярных кристаллах с двумя атомами в ячейке.

В решетке типа алмаза тензор Q , как и тензор Γ , в (32.5) имеет одну линейно независимую компоненту $Q_{xyz}^0 = Q_{xzy}^0 = Q$ и соответственно

$$\varphi_q^{\text{опт}} = - \frac{8\pi i}{\kappa q^2} Q (q_x q_y a_z^{\text{опт}} + q_x q_z a_y^{\text{опт}} + q_y q_z a_x^{\text{опт}}), \quad (32.22)$$

где согласно (32.20б) $a_i^{\text{опт}} = \frac{1}{4} (u_{1i} - u_{2i})$.

Для акустических колебаний разложение (32.9в) также начинается с линейных по q членов, так как смещение кристалла как целого не создает электрического поля. Так как поворот кристалла также не создает такого поля, то дипольный момент, создаваемый акустическими колебаниями, может быть лишь пропорционален деформации:

$$P_i^{\mu}(\mathbf{q}) = -i \sum_{ij} \beta_{ij} \epsilon_{ij}(\mathbf{q}), \quad (32.23)$$

где

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} d\mathbf{x} = \frac{i}{2} (q_i u_{qj} + q_j u_{qi}). \quad (32.23a)$$

Кристаллы, у которых тензор β отличен от нуля, называются пьезоэлектриками.

В кубических кристаллах классов T и T_d тензор β имеет одну линейно независимую компоненту $\beta_{xyz} = \beta_{xzy} = \beta$ и соответственно

$$\Phi_q^{\text{ак}} = -\frac{8\pi i \beta}{\kappa^0 q^2} (q_x \varepsilon_{yz}(\mathbf{q}) + q_y \varepsilon_{xz}(\mathbf{q}) + q_z \varepsilon_{xy}(\mathbf{q})). \quad (32.23б)$$

В кубических кристаллах класса O , а также во всех кристаллах, имеющих центр инверсии $\beta = 0$, и акустические колебания создают дипольный момент, пропорциональный вторым производным от средних смещений, которые и являются нормальными координатами для акустических колебаний при $\mathbf{q} = 0$, т. е. разложение (32.9в) начинается с членов второго порядка по q :

$$P_j^\mu(\mathbf{q}) = -\sum_{ikl} \gamma_{ijkl} u_{qi} q_k q_l. \quad (32.24)$$

Тензор γ симметричен к перестановке последней пары индексов. Легко проверить по формуле (20.10), что в кубическом кристалле он имеет три отличные от нуля линейно независимые компоненты

$$\gamma_{11} = \gamma_{xxxx}, \quad \gamma_{12} = \gamma_{xxyy}, \quad \gamma_{44} = \gamma_{yzyz}.$$

Однако величина

$$\Phi_q^{\text{ак}} = -\frac{4\pi i}{\kappa^0 q^2} (\mathbf{q} P_q^\mu) = \frac{4\pi i}{\kappa^0 q^2} \sum_{ijkl} \gamma_{ijkl} q_j q_k q_l u_{qi} \quad (32.25)$$

определяется в кубическом кристалле лишь двумя независимыми константами: γ_{11} и $\gamma_{12} + 2\gamma_{44}$, так как

$$\sum_{i \neq j} \varepsilon_{ij}(\mathbf{q}) q_i q_j = i \sum_{i \neq j} u_{qi} q_j q_i q_j = \sum_{i \neq j} \varepsilon_{ii}(\mathbf{q}) q_j^2 = \varepsilon_q \cdot q^2 - \sum_i \varepsilon_{ii}(\mathbf{q}) q_i^2.$$

Поэтому

$$\Phi_q^{\text{ак}} = \frac{4\pi i}{q^2 \kappa^0} \left[(\gamma_{12} + 2\gamma_{44}) \varepsilon_q q^2 + (\gamma_{11} - \gamma_{12} - 2\gamma_{44}) \sum_i \varepsilon_{ii}(\mathbf{q}) q_i^2 \right], \quad (32.25a)$$

где $\varepsilon_q = \sum_i \varepsilon_{ii}(\mathbf{q})$. В изотропной среде $\gamma_{11} - \gamma_{12} = 2\gamma_{44}$ и

$$\Phi_q^{\text{ак}} = \frac{4\pi i}{\kappa^0 q^2} (\gamma_{12} + 2\gamma_{44}) \varepsilon_q q^2. \quad (32.25б)$$

Производные от относительных смещений $u^{xx'}$ в случае акустических колебаний не надо отдельно учитывать в (32.23) и (32.24), так как эти смещения в соответствии с (32.5) сами выражаются через du_i/dx_j . Однако при непосредственном расчете самих констант β или γ их надо иметь в виду. Например,

в пьезоэлектрических кристаллах в соответствии с (32.8), (32.5) и (32.23) они дадут вклад в β , равный

$$\beta'_{ij} = \frac{1}{2\Omega_0} \sum_{kxx'} \Theta_{lk}^{xx'} \Gamma_{kij}^{xx'}$$

а в непьезоэлектрических кристаллах их вклад в γ согласно (32.22), (32.5) и (32.24) можно записать в виде

$$\gamma'_{ijkl} = \frac{1}{2} \sum_{mxx'} \Phi_{iml}^{xx'} \Gamma_{mkl}^{xx'}$$

Например, в решетке T_d^2 соответствующий вклад в β_{xyz} равен $\beta'_{xyz} = \Theta_{xx} \Gamma_{xyz}$, в решетке типа алмаза O_h^7 смещения $u_{1,2}$ дают вклад в γ_{44} :

$$\gamma'_{xyxy} = \Phi_{xzy} \Gamma_{zxy}$$

Как указывалось в § 22, движение электрона в достаточно плавных внешних полях можно описывать, используя приближение эффективной массы, т. е. вместо точного уравнения Шредингера для блоховских функций использовать уравнения для плавных огибающих функций $\mathcal{F}(\mathbf{x}, t)$. Рассеяние носителей тока в полупроводниках можно рассматривать в этом же приближении. Потенциал $\varphi(\mathbf{x})$, связанный с дальнедействующими силами, является плавным и поэтому он сразу может быть включен в потенциал $U(\mathbf{x})$, входящий в оператор \mathcal{H} (22.15), (22.16).

Короткодействующие силы

Потенциал $\delta V_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, связанный с короткодействующими силами, в отличие от $\varphi(\mathbf{x})$ быстро меняется в пределах одной элементарной ячейки. Однако при малых q этот потенциал, как видно из (32.6) и (32.7), почти периодический, так как $\nabla V_0(\mathbf{x})$, $V_{ij}(\mathbf{x})$ и $V_0^{xx'}(\mathbf{x})$ являются периодическими функциями, с тем же периодом, что и $V_0(\mathbf{x})$, что и дает возможность описать взаимодействие электронов с решеткой, используя лишь плавные функции $\mathcal{F}(\mathbf{x}, t)$. Для того чтобы получить оператор $\mathcal{H}_{\text{эф}}$, действующий на эти функции и определяющий взаимодействие электронов и фононов, запишем сперва оператор $\delta V(\mathbf{x})$ в (\mathbf{k}, n) -представлении, для чего, как и в § 22, представим функцию Ψ в виде произведения (22.2), а затем разложим медленную функцию $\mathcal{F}_n(\mathbf{x}, t)$ в ряд Фурье (22.3). Для того чтобы получить уравнение, определяющее коэффициенты $c_{n\mathbf{k}}$ в (22.3), (22.4), надо, как и в § 22, вычислить матричные элементы оператора $\delta V(\mathbf{x})$ на функциях $\varphi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \psi_{n\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$. Для этого разложим периодическую функцию $\psi_{n\mathbf{k}_0}^* \nabla V_0 \psi_{n\mathbf{k}_0}$ в ряд Фурье:

$$\psi_{n\mathbf{k}_0}^* \nabla V_0 \psi_{n\mathbf{k}_0} = \mathcal{V} \sum_M e^{-i\mathbf{b}M\mathbf{x}} \mathbf{R}_M, \text{ где } \mathcal{V} \mathbf{R}_M = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \psi_{n\mathbf{k}_0}^* \nabla V_0 \psi_{n\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{b}M\mathbf{x}} d\mathbf{x},$$

а \mathbf{b}_M — векторы обратной решетки. Тогда матричные элементы оператора $\mathcal{H}'' = -\mathbf{u}\nabla V_0$ можно представить в виде

$$\mathcal{H}''_{n'k', nk} = -\langle \varphi_{n'k'} \mathbf{u} \nabla V_0 \varphi_{nk} \rangle = -\sum_M \mathbf{R}_M \int \mathbf{u}(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{b}_M)\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}.$$

Если \mathbf{k} и \mathbf{k}' достаточно малы, так что $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ лежит в пределах зоны Бриллюэна, то из всех слагаемых останется лишь член с $\mathbf{b}_M = 0$, и тогда

$$\mathcal{H}''_{n'k', nk} = -\langle \varphi_{n'k'} \mathbf{u} \nabla V_0 \varphi_{nk} \rangle = -\mathbf{u}_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} (1/\mathcal{V}^0) \langle \psi_{n'k'_0} \nabla V_0 \psi_{nk_0} \rangle. \quad (32.26)$$

Точно так же можно разложить в ряд Фурье периодические функции $\psi_{n'k'_0}^* V_{ij} \psi_{nk_0}$ и $\psi_{n'k'_0}^* V_0^{\chi\chi'} \psi_{nk_0}$ и тогда с помощью аналогичных преобразований найдем матричные элементы операторов $\mathcal{H}' = (\varepsilon V)$ и $\mathcal{H}''' = \frac{1}{2} \sum_{\chi\chi'} V_0^{\chi\chi'} \mathbf{u}_{\chi\chi'}$:

$$\mathcal{H}'_{n'k', nk} = \langle \varphi_{n'k'} (\varepsilon V) \varphi_{nk} \rangle = (1/\mathcal{V}^0) \sum_{ij} \varepsilon_{q, ij} \langle \psi_{n'k'_0} V_{ij} \psi_{nk_0} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{k}}, \quad (32.27)$$

$$\mathcal{H}'''_{n'k', nk} = \frac{1}{2} \sum_{\chi\chi'} \langle \varphi_{n'k'} V_0^{\chi\chi'} \mathbf{u}_{\chi\chi'} \varphi_{nk} \rangle = \frac{1}{2\mathcal{V}^0} \sum_{\chi\chi'} \mathbf{u}_{\mathbf{q}}^{\chi\chi'} \langle \psi_{n'k'_0} V_0^{\chi\chi'} \psi_{nk_0} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{k}}. \quad (32.28)$$

В результате получим систему уравнений для коэффициентов c_{nk} , подобную (22.11):

$$\sum_{nk} \{ [\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}' + \mathcal{H}''' + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}'']_{n'k', nk} + E_n \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \} c_{nk} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n'k'}, \quad (32.29)$$

где \mathcal{H}_1 и \mathcal{H}_2 — операторы, введенные в (22.10) при построении спектра $k\rho$ -методом:

$$\mathcal{H}_2_{n'k', nk} = \frac{1}{m} \hbar \mathbf{k} \rho_{n'n} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}, \quad \mathcal{H}_1_{n'k', nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (32.30)$$

Для того чтобы от точной системы уравнений (32.29) перейти к системе уравнений, содержащей лишь коэффициенты c_{nk} , относящиеся к одной зоне, надо, как и в §§ 21, 22, устранить междузонные матричные элементы операторов \mathcal{H}_2 и \mathcal{H}'' . Оператор \mathcal{H}_2 в точке нулевого наклона не содержит внутризонных матричных элементов. Используя соотношение

$$(\nabla V_0) \psi = \nabla (\mathcal{H}_0 \psi) - \mathcal{H}_0 \nabla \psi = \{\nabla \mathcal{H}_0\} \psi = \frac{i}{\hbar} \{\rho \mathcal{H}_0\} \psi,$$

матричные элементы оператора $\nabla V_0 = (i/\hbar) \{\rho \mathcal{H}_0\}$ можно представить в виде (21.35):

$$(1/\mathcal{V}^0) \langle \psi_{n'k'} \nabla V_0 \psi_{nk_0} \rangle = \frac{i}{\hbar} \sum_m (\rho_{n'm} \mathcal{H}_{0mn} - \mathcal{H}_{0n'm} \rho_{mn}) = -i \omega_{n'n} \rho_{n'n}, \quad (32.31)$$

где $\omega_{n'n} = (E_{n'} - E_n)/\hbar$.

Отсюда видно, что оператор \mathcal{H}' также имеет лишь междузонные матричные элементы. Хотя операторы \mathcal{H}' и \mathcal{H}'' имеют и междузонные матричные элементы, но, устранив их, мы получили бы в \mathcal{H} члены либо квадратичные по смещению, либо содержащие вторые производные от смещения u и первые производные от u^{xx} . Поскольку члены такого же порядка опущены в (32.6) и (32.7), то их не надо учитывать и здесь и надо сохранить лишь внутризонные элементы этих операторов.

Так как смещения u зависят от времени, то при устранении междузонных матричных элементов \mathcal{H}_2 вследствие явной зависимости матрицы преобразования S (15.33) от t в \mathcal{H} появятся добавочные слагаемые. Однако, как показано в § 22, эти члены в ω/ω_n раз меньше основных. Так как частоты колебаний решетки $\omega \ll E_g/\hbar$, то эти добавочные члены можно опустить. В результате получим систему уравнений, подобную (22.12):

$$\sum_{mk} \mathcal{H}_{m'k', mk} \overset{=}{c_{mk}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \overset{=}{c_{m'k'}}, \quad (32.32)$$

где в соответствии с (15.47) $\mathcal{H}_{m'k', mk}$ наряду со слагаемым, определяемым уравнением (21.19), содержит члены

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m'k', mk} &= \mathcal{H}'_{m'k', mk} + \mathcal{H}''_{m'k', mk} + \\ &+ \sum_{sk} \frac{\mathcal{H}_{2m'k', sk} \mathcal{H}''_{sk'', mk} + \mathcal{H}'_{m'k', sk} \mathcal{H}_{2sk'', mk}}{E_m - E_s}. \end{aligned} \quad (32.33)$$

Члены второго порядка по \mathcal{H}'' , т. е. квадратичные по смещению, учитывать не надо. Используя формулы (32.26), (32.30) и (32.31) для матричных элементов операторов \mathcal{H}_2 и \mathcal{H}'' , последний член в (32.33) можно переписать в виде

$$\frac{i}{m} \sum_{s \neq m, m'} \sum_{l, j} (u_{k'-k, i} k_j - u_{k'-k, j} k'_i) p_{m's}^i p_{sm}^j,$$

после чего можно выполнить суммирование по s , учитывая, что система функций φ_{nk} является полной, а матричный элемент $p_{mm'}$ в точке экстремума равен нулю и потому суммирование можно распространить на все s , включая совпадающие с m, m', \dots В результате получим

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{\gamma^2} \frac{i\hbar^2}{m} \sum_{ij} (u_{k'-k, i} k_j - u_{k'-k, j} k'_i) \left\langle \psi_{m'k_0} \left| \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right| \psi_{mk_0} \right\rangle = \\ & = \frac{i\hbar^2}{m} \sum_{ij} u_{qi} q_j \left\langle m' \left| \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right| m \right\rangle = \frac{\hbar^2}{m} \sum_{ij} \epsilon_{q, ij} \left\langle m' \left| \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right| m \right\rangle. \end{aligned}$$

Здесь мы обозначили $q = k' - k$. При этом использована симметрия матричного элемента

$$\left\langle m' \left| \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right| m \right\rangle$$

к перестановке индексов i и j . Объединяя это слагаемое с первым членом в (32.33), получим выражение для оператора $\mathcal{H}^{\text{ак}}$, определяющего взаимодействие с акустическими колебаниями:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{q, m'm}^{\text{ак}} &= \sum_{ij} \varepsilon_{q, ij} D_{m'm}^{ij} = \\ &= \sum_{ij} \varepsilon_{q, ij} \left(\frac{\hbar^2}{m} \left\langle m' \left| \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right| m \right\rangle + \langle m' | V_{ij} | m \rangle \right). \end{aligned} \quad (32.34)$$

Второе слагаемое в (32.33) дает оператор $\mathcal{H}^{\text{опт}}$, определяющий взаимодействие с оптическими колебаниями:

$$\mathcal{H}_{q, m'm}^{\text{опт}} = \frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} u_q^{\kappa\kappa'} V_{m'm}^{\text{опт}} = \frac{1}{2} \sum_{\kappa, \kappa'} u_q^{\kappa\kappa'} \langle m' | V_{\text{опт}}^{\kappa\kappa'} | m \rangle. \quad (32.35)$$

Если теперь перейти в (32.32) к \mathbf{x} -представлению, т. е. умножить правые и левые части на $e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}$ и выполнить суммирование по \mathbf{k}' и \mathbf{k} , аналогично тому, как это сделано в § 22 (уравнение (22.14а)), то получим систему уравнений для функций \mathcal{F}_m :

$$\sum_m (\mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{k}) + \mathcal{H}_{m'm}^{\text{ак}} + \mathcal{H}_{m'm}^{\text{опт}} - E_m) \mathcal{F}_m = i\hbar \frac{\partial \mathcal{F}_m}{\partial t}, \quad (32.36)$$

где

$$\mathcal{H}_{m'm}^{\text{ак}}(\varepsilon) = \sum_{ij} \varepsilon_{ij} D_{m'm}^{ij}, \quad (32.36a)$$

$$\mathcal{H}_{m'm}^{\text{опт}}(u^{\text{опт}}) = \frac{1}{2} \sum_{\kappa\kappa'} u^{\kappa\kappa'} V_{m'm}^{\text{опт}\kappa\kappa'}. \quad (32.36b)$$

Из (32.36a) и (29.21) видно, что оператор $\mathcal{H}^{\text{ак}}$ совпадает с оператором $\mathcal{H}^{\varepsilon}$, который определяет изменение спектра при однородной деформации. Эффективный потенциал, создаваемый колебаниями решетки, определяемый уравнением (32.36), называется деформационным потенциалом, а входящие в $\mathcal{H}^{\text{ак}}$ константы D , которые одновременно определяют и изменение спектра при однородной деформации, являются введенными ранее константами деформационного потенциала. Матрицу $\mathcal{H}^{\text{ак}}$ и матрицу $\mathcal{H}^{\text{опт}}$, описывающую взаимодействие с оптическими колебаниями, связанное с короткодействующими силами, можно также построить, используя изложенный выше метод инвариантов. Для этого надо записать $\mathcal{H}^{\text{опт}}$ в виде суммы произведений матриц X , преобразующихся по неприводимым представлениям, на комбинации смещений $u_i^{\kappa\kappa'}$, преобразующихся по сопряженным представлениям. Эти комбинации $u^{\kappa\kappa'}$ являются нормальными колебаниями, соответствующими предельным оптическим частотам.

С помощью метода инвариантов можно при необходимости легко найти релятивистские поправки к константам деформационного потенциала. Однако обычно спин-орбитальное

взаимодействие достаточно учесть лишь в нулевом приближении по k и ϵ , для чего в качестве базисных функций матрицы \mathcal{H} надо выбрать собственные функции оператора \mathcal{H}_0 , включающего \mathcal{H}_{co} .

Для учета дальнедействующих сил в (32.36) надо включить матрицу $\mathcal{H}_{d, m'm} = -e\varphi\delta_{m'm}$, где φ — потенциал, создаваемый соответствующими колебаниями и определяемый уравнениями (32.16), (32.21), (32.22), (32.23б) и (32.25). Из сравнения (32.36б) и (32.22) видно, что в неполярных кристаллах короткодействующие и дальнедействующие силы, связанные с оптическими колебаниями, дают вклад в \mathcal{H} одного и того же, т. е. нулевого, порядка по q , тогда как в полярных кристаллах вклад дальнедействующих сил, как видно из (32.21), более низкого порядка: $\delta V_d \sim q^{-1}$. Точно так же пьезоэлектрические акустические колебания приводят к потенциалу (32.23б) нулевого порядка по q , тогда как короткодействующие силы, как и дальнедействующие силы в непьезоэлектрических кристаллах, в соответствии с (32.36а) и (32.25) первого порядка по q .

Что касается соотношения этих сил в непьезоэлектрических кристаллах, то в настоящее время нет никаких экспериментальных данных, показывающих, что дальнедействующие силы играют существенную роль при рассеянии на акустических колебаниях, а также при рассеянии на оптических колебаниях в неполярных кристаллах. Поэтому мы ниже нигде не учитываем их вклада в рассеяние. Надо, однако, подчеркнуть, что, с другой стороны, нет никаких теоретических расчетов, показывающих, что потенциал $\varphi(\mathbf{x})$ в таких кристаллах должен быть мал по сравнению с деформационным потенциалом.

Вероятности перехода

Для того чтобы рассчитать вероятность перехода электрона из одного состояния в другое под действием возмущений \mathcal{H}^{ak} и \mathcal{H}^{opt} в (32.36), надо прежде всего найти собственные функции оператора $\mathcal{H}(\mathbf{k})$. В случае вырожденных зон одному и тому же значению \mathbf{k} соответствуют разные значения $E_l(\mathbf{k})$ ($l = 1, 2, \dots$). При этом в кристаллах с центром инверсии, как указывалось выше, каждое из состояний $\mathbf{k}l$ двукратно вырождено с учетом спина, т. е. данному значению $E_l(\mathbf{k})$ соответствуют две функции $\mathcal{F}_{il\mathbf{k}}$ ($t = 1, 2$). Каждая из этих функций может быть записана в виде столбца с элементами $\mathcal{F}_{il\mathbf{k}}^s$. Число строк этой матрицы определяется размерностью представления. Например, для представления Γ_8 для решетки Ge и Si эти функции определяются формулами (24.19). Далее по формуле (15.25) разложим смещение каждого из атомов в ряд Фурье. Соответственно разложение для деформации $\epsilon_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$, создаваемой

длинноволновыми акустическими колебаниями, имеет вид

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{q, \nu=1, 2, 3} a_{q\nu} \varepsilon'_{q\nu, ij} e^{iqx} + a_{q\nu}^+ \varepsilon'^*_{q\nu, ij} e^{-iqx}, \quad (32.37)$$

где

$$\varepsilon'_{q\nu, ij} = \frac{i}{2} (e_i^\nu(\mathbf{q}) q_j + e_j^\nu(\mathbf{q}) q_i). \quad (32.38)$$

При этом в соответствии с (15.14)

$$e^\nu e^{\nu'*} = \delta_{\nu\nu'}, \quad e^\nu e^{\nu'} = 0 \text{ при } \nu \neq \nu'. \quad (32.39)$$

Полная волновая функция системы представляет произведение электронных функций \mathcal{F} и фононных функций. Правила отбора для операторов a и a^+ на фононных функциях определяются выражениями (15.26). В результате окончательное выражение для вероятности перехода из состояния kl в состояние $k'l't'$ с поглощением акустического фонона ν примет вид

$$P_{il, k}^{l'l', k+q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar n_{q\nu}}{2\rho\omega_{q\nu} \mathcal{V}} \right) |\langle l't', \mathbf{k} + \mathbf{q} | \mathcal{H}(\varepsilon_{q\nu}) | ltk \rangle|^2 \times \\ \times \delta(E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega_{q\nu}), \quad (32.40)$$

где

$$\langle l't'k' | \mathcal{H} | ltk \rangle = \sum_{sr} \mathcal{F}_{l't'k'}^{s*} \mathcal{H}_{sr} \mathcal{F}_{lk}^r,$$

а матрица $\mathcal{H}(\varepsilon_{q\nu})$ определяется формулой (32.36а). Чтобы получить полную вероятность перехода электрона из состояния с энергией $E_l(\mathbf{k})$ в состояние $E_{l'}(\mathbf{k}')$, надо просуммировать (32.40) по конечным состояниям t' и усреднить по начальным состояниям t , а также усреднить по начальным состояниям фононов, что сводится к замене чисел заполнения $n_{q\nu}$ их средним значением $\bar{n}_{q\nu}$, определяемым уравнением (15.24). Эта вероятность

$$P_{il, k}^{\text{ак} l'l', k+q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar \bar{n}_{q\nu}}{2\rho\omega_{q\nu} \mathcal{V}} \right) W_{l, k}^{\text{ак} l'l', k+q}(\varepsilon'_{q\nu}) \delta(E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega_{q\nu}), \quad (32.41a)$$

где

$$W_{l, k}^{\text{ак} l'l', k+q}(\varepsilon'_{q\nu}) = \frac{1}{2} \sum_{it'} \left| \mathcal{H}(\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, \nu})_{l'l', k+q}^{it'} \right|^2. \quad (32.42)$$

Аналогично полная вероятность перехода из состояния с энергией $E_l(\mathbf{k})$ в состояние $E_{l'}(\mathbf{k}')$ с испусканием акустического фонона равна

$$P_{il, k}^{\text{ак} l'l', k-q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar (\bar{n}_{q\nu} + 1)}{2\rho\omega_{q\nu} \mathcal{V}} \right) W_{l, k}^{\text{ак} l'l', k-q}(\varepsilon'_{q\nu}) \delta(E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega_{q\nu}). \quad (32.41б)$$

Таким же образом для полной вероятности переходов с поглощением и испусканием оптических фононов получим

$$P_{l, \mathbf{k}}^{\text{опт}}{}_{l', \mathbf{k}+q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar n_{\nu}^{\text{опт}}}{2\rho\omega_{\nu}^{\text{опт}} \gamma^{\nu}} \right) W_{l, \mathbf{k}}^{\text{опт}}{}_{l', \mathbf{k}+q} (e_{\text{опт}}^{\nu}(\mathbf{q})) \times \\ \times \delta(E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega_{\nu}^{\text{опт}}), \quad (32.43a)$$

$$P_{l, \mathbf{k}}^{\text{опт}}{}_{l', \mathbf{k}-q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar (\bar{n}_{\nu}^{\text{опт}} + 1)}{2\rho\omega_{\nu}^{\text{опт}} \gamma^{\nu}} \right) W_{l, \mathbf{k}}^{\text{опт}}{}_{l', \mathbf{k}-q} (e_{\text{опт}}^{\nu}(\mathbf{q})) \times \\ \times \delta(E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega_{\nu}^{\text{опт}}), \quad (32.43б)$$

где $\omega_{\nu}^{\text{опт}}$ — предельная частота для ν -й ветви оптических колебаний,

$$W_{l, \mathbf{k}}^{\text{опт}}{}_{l', \mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{l' l''} \left| \mathcal{H}^{\text{опт}}(e_{\text{опт}}^{\nu})_{l' l''}{}_{l, \mathbf{k}} \right|^2, \quad (32.44)$$

а $\mathcal{H}^{\text{опт}}(e_{\text{опт}}^{\nu})$ — матрица, матричные элементы которой в соответствии с (32.36б) равны

$$\mathcal{H}^{\text{опт}}(e_{\text{опт}}^{\nu})_{m' m} = \frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} (e_{\kappa q}^{\nu} - e_{\kappa' q}^{\nu}) V_{m' m}^{\kappa \kappa'}{}_{\text{опт}}. \quad (32.45)$$

В случае, когда зона в точке \mathbf{k}_0 вырождена лишь по спину, в соответствии с (29.28)

$$W_{\mathbf{k} \pm q, \mathbf{k}}^{\text{ак}} = [D_{xx}(e_{qx}^{\nu} q_x) + D_{yy}(e_{qy}^{\nu} q_y) + D_{zz}(e_{qz}^{\nu} q_z)]^2, \quad (32.46)$$

т. е. $W_{\mathbf{k}' \mathbf{k}}^{\text{ак}}$ зависит только от разности $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q}$.

В кубических кристаллах в приближении упругого континуума акустические колебания можно разделить на одну чисто продольную моду с $e_{qL} = \mathbf{q}/q$ и две чисто поперечные, для которых $e_{\mathbf{q}}$ можно выбрать в виде

$$e_{qT_1} = \frac{1}{(q_x^2 + q_y^2)^{1/2}} \begin{cases} q_y \\ -q_x \\ 0 \end{cases}, \quad e_{qT_2} = \frac{1}{q(q_x^2 + q_y^2)^{1/2}} \begin{cases} q_x q_z \\ q_y q_z \\ -(q_x^2 + q_y^2) \end{cases}. \quad (32.47)$$

Соответственно для продольных колебаний

$$W_{L, \mathbf{k} \pm q, \mathbf{k}}^{\text{ак}} = q^2 [D_{zz} + (D_{xx} - D_{zz}) \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + \\ + (D_{yy} - D_{zz}) \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi]^2, \quad (32.48a)$$

где ϑ и φ — полярные углы, определяющие направление вектора \mathbf{q} . При этом за полярную ось выбрана главная ось эллипсоида Oz . Суммарное значение $W_{T, \mathbf{k} \pm q}$ для обеих поперечных мод равно

$$W_{T, \mathbf{k} \pm q, \mathbf{k}}^{\text{ак}} = \frac{1}{4} q^2 [(D_{xx} - D_{yy})^2 \sin^4 \vartheta \sin^2 2\varphi + \\ + (D_{xx} - D_{zz})^2 \sin^2 2\vartheta \cos^2 \varphi + (D_{yy} - D_{zz})^2 \sin^2 2\vartheta \sin^2 \varphi]. \quad (32.48б)$$

Для групп G_{k_0} , содержащих оси выше второго порядка, в соответствии с (29.29) $D_{xx} = D_{yy} = D_{\perp}$ и $D_{zz} = D_{\parallel}$ и

$$W_{L, k \pm q, k}^{\text{ак}} = q^2 [D_{\parallel} + (D_{\perp} - D_{\parallel}) \sin^2 \theta]^2, \quad (32.49a)$$

$$W_{T, k \pm q, k}^{\text{ак}} = \frac{1}{4} q^2 (D_{\parallel} - D_{\perp})^2 \sin^2 2\theta. \quad (32.49b)$$

Для кубических групп G_{k_0} согласно (29.33) $D_{\parallel} = D_{\perp} = c$, в этом случае при невырожденных зонах рассеяние происходит только на продольных акустических колебаниях:

$$W_{L, k \pm q, k} = C^2 q^2, \quad W_{T, k', k} = 0. \quad (32.50)$$

В кубических кристаллах оптические ветви в точке $q = 0$ трехкратно вырождены (если не учитывать дальнедействующих сил, возникающих в полярных кристаллах), т. е. соответствующие нормальные колебания преобразуются по одному из трехмерных представлений, тогда как в $\mathcal{H}^{\text{опт}}$ в случае невырожденных представлений могут входить лишь моды, преобразующиеся по единичному представлению. Поэтому для кубических групп G_{k_0} в случае невырожденных представлений рассеяние на оптических колебаниях, связанное с короткодействующими силами, отсутствует.

Если же группа G_{k_0} имеет более низкую симметрию, то в соответствующей группе направлений трехмерное представление, по которому преобразуются оптические колебания, является приводимым. Если среди неприводимых представлений, содержащихся в нем, окажется единичное, то оптические моды, преобразующиеся по этому представлению, будут входить в $\mathcal{H}^{\text{опт}}$, т. е. эти моды будут вызывать рассеяние электронов.

Например, в решетке типа алмаза предельным оптическим колебаниям, согласно табл. 23.4 (стр. 289), соответствует представление Γ'_{25} . В группе C_{4v} , являющейся группой направлений для точки Δ , это представление в соответствии с табл. 11.1 (стр. 100) переходит в $\Gamma'_{25} \rightarrow B_2^+ + E^+$. Следовательно, в Si, где экстремум зоны проводимости расположен в точке Δ , электроны не рассеиваются на оптических колебаниях. В группе $D_{3d} = C_{3v} \times C_2$, являющейся группой направлений для точки L , $\Gamma'_{25} = A_1^+ + E^+$. Это означает, что в Ge, где экстремум зоны проводимости расположен в точке L , электроны рассеиваются на оптических колебаниях при смещениях $u_{1z} = -u_{2z} = u_{0z}$, которые преобразуются по представлению A_1^+ , и

$$\mathcal{H}_{m'm}^{\text{опт}}(\mathbf{u}) = u_{0z} V^{\text{опт}} \delta_{mm'}, \quad \text{где } V^{\text{опт}} = 2V_{zmm}^{\text{опт}}. \quad (32.51)$$

Здесь ось z направлена по [111] или эквивалентному направлению. Следовательно,

$$\mathcal{H}^{\text{опт}}(\mathbf{e}_{\text{опт}}^v) = (e_{1z}^v - e_{2z}^v) V_{zmm}^{\text{опт}} = e_{1z}^v V^{\text{опт}},$$

так как при одинаковой массе обоих атомов решетки для предельных оптических колебаний $e_1 = -e_2$, причем $|e_1|^2 = |e_2|^2 = 1$.

Соответственно для продольных колебаний

$$W_{L, k \pm q, k}^{\text{опт}} = V_{\text{опт}}^2 \cos^2 \vartheta, \quad (32.52a)$$

а суммарное значение W_T для обеих поперечных мод

$$W_{T, k \pm q, k}^{\text{опт}} = V_{\text{опт}}^2 \sin^2 \vartheta, \quad (32.52b)$$

где ϑ — угол между направлением вектора q и осью z [111].

Так как частоты поперечных и продольных оптических колебаний в неполярных решетках совпадают, то здесь в (32.43) можно сразу просуммировать вероятности рассеяния по всем поляризациям, положив в соответствии с (32.44) $W_{k \pm q, k}^{\text{опт}} = V_{\text{опт}}^2$.

Из приведенных формул видно, что в случае невырожденных зон вероятность рассеяния из состояния k в k' (32.42), (32.44) зависит только от направления вектора $q = k - k'$. Сложнее обстоит дело в случае вырожденных зон. В качестве примера найдем вероятности рассеяния для дырок в Ge и Si. Функции F_{lk} и энергия $E_l(k)$ для дырок в Ge и Si определяются выражениями (24.19) и (24.13a), а матрица $\mathcal{H}(\epsilon)$ — формулами (30.3), (30.4). Оператор $V^{\text{опт}}$ имеет в данном случае один линейно независимый отличный от нуля матричный элемент

$$V_{zxy}^{\text{опт}} = \langle X | V_z^{\text{опт}} | Y \rangle = \frac{V_3}{2} d_{\text{опт}}. \quad (32.53)$$

Оператор $\mathcal{H}^{\text{опт}}(e_v^{\text{опт}})$ можно получить и методом инвариантов. Так как смещения $u_i^{1,2}$ преобразуются по представлению F_2^+ группы $O_h = T_d \times C_i$, этот оператор имеет вид

$$\mathcal{H}^{\text{опт}}(u) = \frac{2}{V_3} d_{\text{опт}} (u_x^{\text{опт}} [J_x J_z] + u_y^{\text{опт}} [J_x J_z] + u_z^{\text{опт}} [J_x J_y]). \quad (32.54)$$

При этом учтено, что $u^{\text{опт}} = \frac{1}{2}(u_1 - u_2) = u_1 = -u_2$, т. е.

$\mathcal{H}^{\text{опт}}(e_v)$ имеет вид, подобный (30.3), с

$$f^{\text{опт}} = g^{\text{опт}} = 0, \quad h^{\text{опт}} = -d_{\text{опт}} (ie_y^v + e_x^v), \quad j = -d_{\text{опт}} ie_z^v, \quad (32.55)$$

где

$$e^v = e_1^v = -e_2^v.$$

Для расчета величины $W_{l'k', lk}^{\text{ак}}$, определяющей вероятность рассеяния на акустических колебаниях, надо в соответствии с (32.40) перемножить матрицы $\mathcal{F}_{l'k'}^+$, $\mathcal{H}(\epsilon)$, \mathcal{F}_{lk} и просуммировать по вырожденным состояниям. В результате после довольно громоздких вычислений эту величину можно представить в виде

$$W_{mk'}^{\text{ак}}(\epsilon') = \delta E_l(\epsilon', k) \delta E_m(\epsilon', k') - \delta E_1^0(\epsilon') \delta E_2^0(\epsilon') \Psi_{k'k}^{ml}. \quad (32.56)$$

Здесь $l, m = 1$ означает легкие дырки, а $l, m = 2$ — тяжелые; $\delta E_l(\mathbf{e}, \mathbf{k})$ — изменения энергии соответствующих дырок при деформации \mathbf{e} при больших энергиях, определяемые выражением (30.34), а $\delta E_l^0(\mathbf{e})$ — изменения энергии дырок в точке $\mathbf{k} = 0$. Согласно (30.5), (30.8) $\delta E_{1,2}^0(\mathbf{e}) = a\mathbf{e} \pm \mathcal{E}_\mathbf{e}^{1/2}$ и

$$\delta E_1^0(\mathbf{e}) \delta E_2^0(\mathbf{e}) = (a^2 - b^2) \sum_i \varepsilon_{ii}^2 + \left(a^2 + \frac{b^2}{2}\right) \sum_{i \neq j} \varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj} - \frac{d^2}{2} \sum_{i \neq j} \varepsilon_{ij}^2. \quad (32.57)$$

Функция $\Psi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{ml}$ в (32.56) определяется выражением

$$\Psi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{ml} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{1}{2(\mathcal{E}_\mathbf{k} \mathcal{E}_{\mathbf{k}'})^{1/2}} \left[D^2 (\mathbf{k}\mathbf{k}')^2 - B^2 k^2 k'^2 + (3B^2 - D^2) \sum_i k_i^2 k'_i{}^2 \right] \right\}, \quad (32.58)$$

где согласно (30.6)

$$\mathcal{E}_\mathbf{k} = B^2 k^4 + \frac{1}{2} (D^2 - 3B^2) \sum_{i \neq j} k_i^2 k_j^2.$$

Знак плюс в (32.58) соответствует внутрizonным переходам, т. е. $l = m$, а минус — междוזонным, т. е. $l \neq m$.

Видно, что в этом случае и $\Psi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{ml}$, и $W_{\mathbf{m}\mathbf{k}', \mathbf{l}\mathbf{k}}^{\text{ак}}$ зависят от направления векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' в отдельности. Величина $W_{\mathbf{m}\mathbf{k}', \mathbf{l}\mathbf{k}}^{\text{опт}}$, определяющая вероятность рассеяния на оптических колебаниях, имеет вид, подобный (32.56):

$$W_{\mathbf{m}\mathbf{k}', \mathbf{l}\mathbf{k}}^{\text{опт}}(\mathbf{e}_\nu) = \delta E_l(\mathbf{e}_\nu, \mathbf{k}) \delta E_m(\mathbf{e}_\nu, \mathbf{k}') - \delta E_1^0(\mathbf{e}_\nu) \delta E_2^0(\mathbf{e}_\nu) \Psi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{ml}. \quad (32.59)$$

Здесь $\delta E_l(\mathbf{u}^{\text{опт}}, \mathbf{k})$ — изменение энергии дырок при смещении каждой из подрешеток на величину $\mathbf{u}^{\text{опт}} = \mathbf{u}_1 = -\mathbf{u}_2$, при энергиях, значительно превышающих расщепление зоны в точке $\mathbf{k} = 0$, которое равно $\delta E_1^0(\mathbf{u}) - \delta E_2^0(\mathbf{u})$.

Аналогично (30.34)

$$\delta E_l(\mathbf{u}^{\text{опт}}, \mathbf{k}) = \pm \frac{D d_{\text{опт}}}{2 \mathcal{E}_\mathbf{k}^{1/2}} (k_x k_y u_z^{\text{опт}} + k_y k_z u_x^{\text{опт}} + k_x k_z u_y^{\text{опт}}), \quad (32.60)$$

$$\delta E_1^0(\mathbf{u}^{\text{опт}}) \delta E_2^0(\mathbf{u}^{\text{опт}}) = -d_{\text{опт}}^2 u_{\text{опт}}^2. \quad (32.61)$$

Напомним, что константа $d_{\text{опт}}$ в (32.54) имеет размерность энергия/единица длины и величины $\delta E_l(\mathbf{e}_\nu, \mathbf{k})$ и $\delta E_l^0(\mathbf{e}_\nu)$, в отличие от $\delta E_l(\mathbf{u}^{\text{опт}}, \mathbf{k})$ и $\delta E^0(\mathbf{u}^{\text{опт}})$, имеют ту же размерность, что и $d_{\text{опт}}$.

Междуминимумное рассеяние

В том случае, когда имеется несколько эквивалентных экстремумов, электроны при рассеянии могут перебрасываться из экстремума, находящегося вблизи точки \mathbf{k}_{01} , в экстремум \mathbf{k}_{02} .

Для расчета вероятности таких переходов воспользуемся общей формулой (32.1). Используя (15.25), разложим смещения по нормальным колебаниям a_{qv} и перепишем выражение (32.1) в виде

$$\delta V(\mathbf{x}) = \sum_{qv} [V_{qv}^*(\mathbf{x}) a_{qv} + V_{qv} a_{qv}^+], \quad (32.62)$$

где

$$V_{qv}^* = \sum_{f\kappa} V_{\kappa}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_f^{\kappa}) e_{\kappa}^v(\mathbf{q}) e^{-iq\mathbf{X}_f^{\kappa}}. \quad (32.63)$$

Из (32.62) и (15.26) следует, что вероятность перехода электрона из состояния \mathbf{k}_1 в состояние \mathbf{k}_2 с поглощением фонона qv равна

$$P_{\mathbf{k}_1+q, \mathbf{k}_2} = \\ = 2\pi \left(\frac{n_{qv}}{2\rho\omega_{qv}} \right) \frac{1}{\gamma^2} |\langle \psi_{\mathbf{k}_2} | V_{qv}^* | \psi_{\mathbf{k}_1} \rangle|^2 \delta_{\mathbf{k}_1+q, \mathbf{k}_2} \delta(E_{\mathbf{k}_1} + \hbar\omega_q - E_{\mathbf{k}_2}). \quad (32.64)$$

Для перехода с испусканием фонона в соответствии с (15.26) \tilde{n}_{qv} заменяется на $\tilde{n}_{qv} + 1$, а V_{qv}^* — на V_{qv} . Правила отбора для матричного элемента $V_{\mathbf{k}_1+q, \mathbf{k}_2} = \frac{1}{\gamma} \langle \psi_{\mathbf{k}_2} | V_{qv}^* | \psi_{\mathbf{k}_1} \rangle$ определяются законом преобразования оператора V_{qv} . Из условия инвариантности гамильтониана (32.62) к операциям пространственной группы следует, что если компоненты a_{qv} при операциях $g \in G_q$ преобразуются по представлению \mathcal{D} группы G_q , то компоненты V_{qv}^* преобразуются по комплексно сопряженному представлению \mathcal{D}^* . При других операциях пространственной группы, переводящих вектор q в неэквивалентную точку gq , компонента a_{qv} переходит в a_{gqv} или в комбинацию компонент $a_{gqv'}$, аналогично тому, как это имело место для блоховских функций. Из определения V_{qv} (уравнение (32.63)) видно, что в последнем случае V_{qv} также переходит в V_{gqv} . Следовательно, компоненты $V_{qv}(\mathbf{x})$ преобразуются по тем же представлениям, что и нормальные колебания a_{qv} .

Зная эти представления, можно, используя формулы § 19, установить, разрешены или запрещены переходы из состояния \mathbf{k}_1 в \mathbf{k}_2 и какие фононы могут вызывать такие переходы. Для произвольных точек \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 такие переходы всегда разрешены, однако, если эти точки находятся вблизи экстремумов \mathbf{k}_{01} и \mathbf{k}_{02} , симметрия которых достаточно высока, то вероятность переходов из \mathbf{k}_1 в \mathbf{k}_2 мала, если переходы из \mathbf{k}_{01} в \mathbf{k}_{02} запрещены. Поэтому правила отбора необходимо определять именно для экстремальных точек \mathbf{k}_0 .

Ниже мы рассмотрим правила отбора для междуминимумных переходов между точками звезд X , Δ и L в кубических кри-

сталлах типа Ge, InSb и PbS. Переходы между точками звезд X и L вызываются фононами звезды X . Например, для звезды X

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{0x} - \mathbf{k}_{0y} &= \frac{2\pi}{a} (100) - \frac{2\pi}{a} (010) = \frac{2\pi}{a} (1\bar{1}0) = \\ &= \frac{2\pi}{a} (001) + \frac{2\pi}{a} (1\bar{1}\bar{1}) = \mathbf{k}_{0z} - \mathbf{b}_3. \end{aligned}$$

Переходы между точками Δ ($\mathbf{k} = (00k_0)$) вызываются фононами Σ ; при $k_0 = \frac{3}{2} \frac{\pi}{a_0}$ точка Σ с $\mathbf{k} = (k_0 k_0 0)$ переходит в точку K или эквивалентную ей точку K' с $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a_0} \left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} 1 \right)$, а при $k_0 > \frac{3}{2} \frac{\pi}{a_0}$ — в точку Σ' с $\mathbf{k} = \left(k'_0 k'_0 \frac{2\pi}{a_0} \right)$, где $k'_0 = \frac{2\pi}{a_0} - k_0 < \frac{3\pi}{2a_0}$.

Все эти точки X , Δ и L относятся к случаю a_2 , и правила отбора в этих точках определяются формулой (19.41), согласно которой число отличных от нуля матричных элементов для перехода из состояния $\Psi_{k_0}^\mu$ в $\Psi_{-g_s k_0}^\mu$ с излучением фонона ветви ν с волновым вектором $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 + g_s \mathbf{k}_0$ равно

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{2h_0} \left\{ \sum_{g_0} \chi_\nu^q(g_0) \chi_\mu^{k_0}(g_0) \chi_\mu^{k_0}(g_s^{-1} g_0 g_s) + \right. \\ &\quad \left. + K^2 \sum_{g_r} \chi_\nu^q(g_r g_s^{-1}) \chi_\mu^{k_0}((g_r g_s^{-1})^2) \right\}. \quad (32.65) \end{aligned}$$

Здесь g_0 — элемент группы G_0 , являющейся пересечением групп G_{k_0} , $G_{-g_s k_0}$ и G_q , а h_0 — число элементов этой группы. При этом элемент, входящий в пересечение двух из этих групп, всегда входит и в третью. Во второй сумме отличны от нуля лишь характеры тех элементов $(g_r g_s^{-1})^2$, которые входят в G_{k_0} . При этом $g_r g_s^{-1} \in G_q$; и наоборот, если $g_r g_s^{-1} \in G_q$, то $(g_r g_s^{-1})^2 \in G_{k_0}$. Во всех рассмотренных случаях такие элементы имеются (если таких элементов нет, то согласно (19.42) в (32.65) $2h_0$ заменяется на h_0). При переходах между точками звезды X , когда фононы также принадлежат звезде X ,

$$\chi_\nu^q(g_0) = \chi_\nu^{k_0}(g_l^{-1} g_0 g_l),$$

где g_l — элемент, переводящий \mathbf{k}_0 в \mathbf{q} . При этом надо иметь в виду, что элементы $g_l^{-1} g_0 g_l$, так же как и $g_s^{-1} g_0 g_s$ и $(g_r g_s^{-1})^2$ в (32.65), могут содержать и тривиальные трансляции, что существенно при определении правил отбора для переходов между точками L и X для кристалла типа Ge.

Результаты расчетов приведены в табл. 32.1, где указано, какие фононы могут вызывать переходы между соответствующими состояниями электронов. Из этой таблицы видно, что в кристаллах типа PbS междуминимумные переходы между

$$= -\frac{e}{\mu} \vec{F} \cdot \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} = \dots \quad 447$$

Правила отбора для междуминимумных переходов

Тип кристалла	Ge			InSb					PbS				
	Δ	X	L	Δ	X	L	Δ	X	L				
Положение экстремумов													
Представление	Δ_{1-4}	X_{1-4}	$L_{1,2}, L'_{1,2}$	L_3, L'_3	Δ_{1-4}	X_1, X_3	X_2, X_4	X_5	$L_{1,2}$	L_3	Δ_{1-4}	X_{1-5}^{\pm}	L_{1-3}, L'_{1-3}
Разрешены переходы с фононами представлений	Σ_1 (или K_1, Σ'_1)	X_2, X_3	X_1	$2X_2, X_3$	Σ_1 или K_1, Σ'_1	X_1	X_4	X_1, X_4, X_5	X_1, X_4	$2X_1, X_4, X_5$	Σ_1 (или K_1, Σ'_1)	—	—

точками звезд X и L с участием фононов X запрещены, так как в точке X фононы преобразуются по нечетным представлениям X^- , тогда как произведение электронных функций соответствует только четным представлениям. В остальных случаях междуминимумные переходы разрешены. При этом инвариантность к инверсии времени запрещает часть из возможных переходов, например, переходы между точками звезд X и L в Ge с поглощением или излучением фононов X_1 .

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА СВОБОДНЫЕ НОСИТЕЛИ

§ 33. ЦИКЛОТРОННЫЙ И КОМБИНИРОВАННЫЕ РЕЗОНАНСЫ
В ДЕФОРМИРОВАННЫХ ГЕРМАНИИ И КРЕМНИИ

В предыдущей главе мы выяснили, как изменяется спектр носителей тока — электронов и дырок — при деформации. В настоящей и следующей главах будут рассмотрены физические эффекты, связанные с этим изменением спектра

Циклотронный резонанс, т. е. резонансное поглощение СВЧ, связанное с переходами электронов между уровнями Ландау, является наиболее прямым методом, позволяющим непосредственно определить, как изменяется спектр при деформации. Резонансная частота, называемая обычно циклотронной частотой, определяется спектром носителей в магнитном поле. Для того чтобы найти этот спектр, надо решить уравнение Шредингера в магнитном поле:

$$(\mathcal{H}(\mathbf{K}) + \mathcal{H}_s - E)F = 0, \quad (33.1)$$

где $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \frac{e}{c\hbar} \mathcal{A}$ — обобщенный импульс, $\mathbf{H} = \text{rot } \mathcal{A}$, а F — волновая функция в приближении эффективной массы.

Рассмотрим сперва циклотронный резонанс в деформированных кристаллах с валентной зоной типа германия. Для германия, кремния оператор $\mathcal{H}(\mathbf{K})$ для одной из расщепившихся в результате деформации валентных зон в квадратичном по k приближении определяется уравнениями (30.14) — (30.20). Что касается оператора \mathcal{H}_s , описывающего спиновое расщепление, то для его определения надо записать спиновый гамильтониан в недеформированном кристалле, определяемый уравнением (26.14), в представлении (24.19), диагонализующем гамильтониан $\mathcal{H}(\mathbf{e}, \mathbf{k})$ в деформированном кристалле, аналогично тому, как это делалось при определении линейных по k членов в § 30 (уравнение (30.40)). В результате для верхней из отщепившихся зон получим

$$\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_{11}\sigma_z + \mathcal{H}_{12}\sigma_+ + \mathcal{H}_{12}^*\sigma_-; \quad (33.2)$$

здесь

$$\mathcal{H}_{11} = \mu_0 g |c_1|^2 \left\{ \frac{1}{2} H_z [3(|h|^2 - |j|^2) + (E_1 - f)^2] + \frac{i\sqrt{3}}{2} (E_1 - f)(h^* H_- - h H_+) \right\}, \quad (33.3)$$

$$\mathcal{H}_{12} = \mu_0 g c_1^* c_2 \{ 3H_z j h^* - i\sqrt{3}(E_1 - f)jH_+ + i(E_1 - f)^2 H_- \},$$

где

$$H_{\pm} = H_x \pm iH_y, \quad |c_{1,2}|^2 = (E_{1,2} - f)(E_{1,2} - E_{2,1}),$$

f, h, j определяются уравнением (30.4), а $g = g_0 k$ (при $q = 0$). Спиновое расщепление $\Delta E_s = \hbar\omega_s$ при произвольной деформации определяется выражением

$$\hbar\omega_s = \mu_0 \left\{ \sum_{i,j} g_{ij}^2 H_i H_j \right\}^{1/2}, \quad (33.4)$$

где

$$g_{xx}^2 = \frac{g^2}{\mathcal{E}_e} \{ [\mathcal{E}_e^{1/2} + b(\epsilon - 3\epsilon_{xx})]^2 + 3d^2(\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2) \},$$

$$g_{xy}^2 = \frac{g^2 \sqrt{3} d}{\mathcal{E}_e} \{ \sqrt{3} d \epsilon_{xz} \epsilon_{yz} - \epsilon_{xy} [2\mathcal{E}_e^{1/2} - b(\epsilon - 3\epsilon_{zz})] \}; \quad (33.5)$$

\mathcal{E}_e определяется выражением (30.8). (Остальные компоненты получаются циклической перестановкой $x \rightarrow y \rightarrow z$.) В частности, при деформации по главным осям [001] или [111]

$$\hbar\omega_s = \mu_0 (g_{\parallel}^2 H_z^2 + g_{\perp}^2 H_{\perp}^2)^{1/2}, \quad (33.6)$$

где $H_{\perp}^2 = H_x^2 + H_y^2$; при этом ось z направлена по [001] или [111] соответственно, а

$$g_{\parallel}^2 = g^2 (1 \pm 2)^2, \quad g_{\perp}^2 = g^2 (1 \pm 1)^2. \quad (33.7)$$

Здесь верхний знак соответствует $b\epsilon' > 0$ или $d\epsilon' > 0$, а нижний — $b\epsilon' < 0$ или $d\epsilon' < 0$.

Классический циклотронный резонанс

Если ограничиться в $\mathcal{H}(K)$ в (33.1) квадратичными по K членами, то в том же приближении нет необходимости учитывать зависимость g -фактора от K . Так как циклотронные переходы происходят без изменения спина, то в этом приближении, когда циклотронная частота одинакова для всех электронов, вообще нет необходимости явно учитывать спин, и уравнение (33.1) в главных осях тензора эффективной массы сводится к такому:

$$\left(\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} K_i^2 - E \right) F = 0. \quad (33.8)$$

Переходя к переменным

$$x'_i = x_i (m_i/m)^{1/2}, \quad \text{где } m = (m_{xx} m_{yy} m_{zz})^{1/3}, \quad (33.9)$$

и соответственно

$$k'_i = k_i (m/m_i)^{1/2}, \quad \mathcal{A}'_i = \mathcal{A}_i (m/m_i)^{1/2}, \quad H'_i = H_i (m_i/m)^{1/2}, \quad (33.10)$$

можно привести $\mathcal{H}(k)$ в (33.8) к сферическому виду. Если теперь направить ось z'' по направлению поля H' , равного по величине

$$H' = \left(\sum_i (m_i/m) H_i^2 \right)^{1/2}, \quad (33.11)$$

и выбрать $\mathcal{A}'_{x''} = -\mathcal{H}' y''$, $\mathcal{A}'_{y''} = 0$, $\mathcal{A}'_{z''} = 0$, то уравнение (33.8) запишется

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(k_x + \frac{eH'}{\hbar c} y \right)^2 + k_y^2 + k_z^2 \right] - E \right\} F = 0. \quad (33.12)$$

Здесь опущены штрихи у k_i и x_i . Как известно [1.7], решение этого уравнения имеет вид

$$F_n = e^{i(k_x x + k_z z)} \Phi_n(y + y_0), \quad (33.13)$$

где

$$y_0 = s^2 k_x, \quad s^2 = \hbar c / eH', \quad (33.14)$$

а $\Phi_n(y + y_0)$ — функции гармонического осциллятора, т. е. собственные функции оператора

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[s^{-4} (y + y_0)^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]. \quad (33.15)$$

Введем операторы

$$a = \frac{s}{\sqrt{2}} (K_x + iK_y), \quad a^+ = \frac{s}{\sqrt{2}} (K_x - iK_y), \quad (33.16)$$

которые согласно (22.19) удовлетворяют соотношению

$$\{aa^+\} = 1. \quad (33.17)$$

Тогда оператор $K_x^2 + K_y^2$ запишется в виде

$$K_x^2 + K_y^2 = s^{-2} (aa^+ + a^+a) = 2s^{-2} \left(a^+a + \frac{1}{2} \right). \quad (33.18)$$

Функции F_n удовлетворяют соотношениям

$$aF_n = \sqrt{n} F_{n-1}, \quad a^+F_n = \sqrt{n+1} F_{n+1}, \quad (33.19)$$

откуда

$$a^+aF_n = nF_n. \quad (33.20)$$

Из (33.12), (33.18), (33.20) следует, что

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2 s^{-2}}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (33.21)$$

где циклотронная частота

$$\omega_c = \frac{\hbar s^{-2}}{m} = \frac{eH'}{mc}. \quad (33.21a)$$

При наличии переменного электрического поля $\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E} \sin \omega t$ в гамильтониане (33.1) в \mathcal{A} надо включить $\mathcal{A}(t) = 2\mathcal{E} \frac{c}{\omega} \cos \omega t$, что приведет в линейном по полю приближении к появлению в (33.8) добавочного слагаемого

$$\mathcal{H}_g = 2 \frac{e\hbar}{\omega} \sum_i \frac{1}{m_{ii}} (k_i \mathcal{E}_i) \cos \omega t. \quad (33.22)$$

При преобразовании (33.9) \mathcal{E}_i переходит в $\mathcal{E}'_i = \mathcal{E}_i (m/m_i)^{1/2}$, а $\sum_i \frac{1}{m_{ii}} (K_i \mathcal{E}_i) \rightarrow \frac{1}{m} (K' \mathcal{E}')$, и оператор \mathcal{H}_g в переменных (33.16) запишется:

$$\mathcal{H}_g = \frac{2e\hbar s^{-1}}{\omega m} (a\mathcal{E}'_- + a^+ \mathcal{E}'_+ + sk_z \mathcal{E}'_z). \quad (33.23)$$

Здесь $\mathcal{E}'_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{E}'_x \pm i\mathcal{E}'_y)$, а $\mathcal{E}'_x, \mathcal{E}'_y, \mathcal{E}'_z$ — проекции вектора \mathcal{E}' на оси x'', y'', z'' . В соответствии с (33.19) \mathcal{H}_g имеет отличные от нуля матричные элементы между состояниями n и $n \pm 1$, если поле \mathcal{E}' имеет составляющие \mathcal{E}'_x и \mathcal{E}'_y . Следовательно, переменное электрическое поле \mathcal{E}' вызывает циклотронные переходы, если оно имеет компоненты, перпендикулярные \mathbf{H}' . Это, однако, не означает, что переходы всегда запрещены, если поле \mathcal{E} параллельно \mathbf{H} , так как если \mathcal{E} и \mathbf{H} не направлены по одной из главных осей эллипсоида, то при $\mathcal{E} \parallel \mathbf{H}$ поле \mathcal{E}' не параллельно \mathbf{H}' .

Переходя в (33.21а) к исходным переменным (33.10), (33.11), найдем зависимость ω_c от ориентации магнитного поля относительно главных осей эллипсоида x, y и z :

$$\omega_c = \frac{eH}{m_c c}, \quad \text{где} \quad \frac{1}{m_c^2} = \frac{\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{m_{xx} m_{zz}} + \frac{\sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{m_{yy} m_{zz}} + \frac{\cos^2 \vartheta}{m_{xx} m_{yy}}. \quad (33.24)$$

Здесь ϑ — угол между направлением магнитного поля \mathbf{H} и осью z , а φ — угол между плоскостями $z\mathbf{H}$ и zx . В частности, при деформации вдоль главных осей [001] или [111], когда поверхности постоянной энергии — эллипсоиды вращения, циклотронная масса m_c зависит только от угла ϑ между направлением магнитного поля и направлением деформации:

$$\frac{1}{m_c^2} = \frac{\sin^2 \vartheta}{m_{\parallel} m_{\perp}} + \frac{\cos^2 \vartheta}{m_{\perp}^2}, \quad (33.25)$$

где m_{\parallel} и m_{\perp} определяются выражениями (30.19) или (30.20) соответственно.

Измерение циклотронного резонанса на деформированном p -Si проводилось Хенселом и Фехером [29.1]. На рис. 34 видно,

что при увеличении деформации резонансные линии легких и тяжелых дырок исчезают и появляется новая линия, соответствующая дыркам в верхней из расщепившихся валентных зон. Кроме того, видно изменение интенсивностей электронных линий, вызываемое перетеканием электронов из экстремумов,

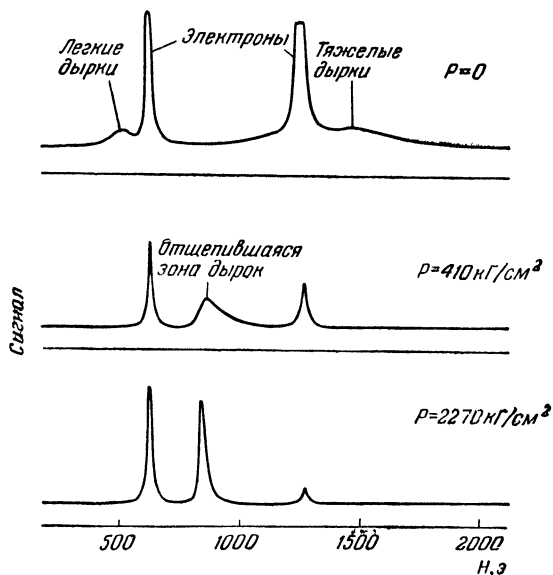


Рис. 34. Циклотронный резонанс на деформированном p -Si [29. 1]. По оси абсцисс — магнитное поле в эрстедах. $\nu \approx 8900$ МГц.

расположенных на осях [100] и [010], в экстремум [001], который при деформации смещается вниз.

Как видно из рис. 35, для отщепившейся дырочной зоны зависимость циклотронной массы от угла ϕ хорошо описывается уравнением (33.25). Из кривых $m_c(\phi)$ можно определить значения m_{\parallel} и m_{\perp} и по формулам (30.19) или (30.20) найти значения констант A , B и D *).

Такие измерения дают возможность определить знак произведений bV или dD , но не позволяют найти знак B и D в отдельности, так как знак в выражениях (30.19) и (30.20) для m_{\parallel} и m_{\perp} зависит от знака констант деформационного потенциала b и d .

Как было показано в [29.3], знак и величину этих констант можно определить, измеряя зависимость эффективных масс от

*) При этом надо иметь в виду, что все приведенные выше формулы написаны для электронов. Если носителями тока являются дырки, то надо \mathcal{H} заменить на $-\mathcal{H}$ и e на $-e$, что эквивалентно изменению знака эффективных масс и магнитного поля.

деформации. В кремнии, где величина спин-орбитального расщепления невелика ($\Delta_{co} = 0,0441$ эв), удается надежно измерять изменение эффективных масс, связанное с влиянием отщепившейся зоны, определяемое выражениями (30.24) — (30.26), а при деформации по [001] и [111] — формулами (30.30) и (30.31).

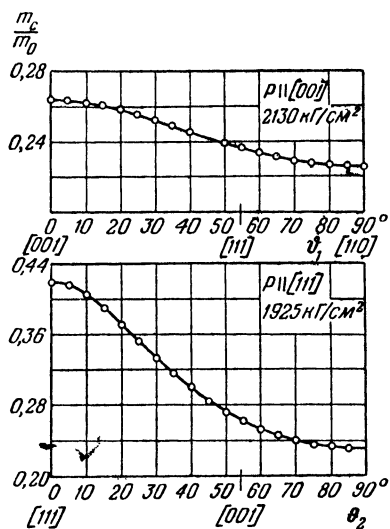


Рис. 35. Зависимость циклотронной массы в *p*-Si от угла между направлением магнитного поля и направлением деформации [29. 1]. ϕ_1 — угол между магнитным полем и осью [001] в плоскости (110) (в градусах); ϕ_2 — угол между магнитным полем и осью [111] в плоскости (110).

Увеличение эффективной массы за счет членов $\sim k^4$ также обратно пропорционально деформации, тогда как согласно формулам (30.24) — (30.26) δm^* пропорционально ϵ'_{zz} . Общий ход $m_c(\epsilon)$ хорошо аппроксимируется зависимостью

$$\frac{1}{m_c(\epsilon)} = \frac{1}{m_c^0} + \frac{\gamma}{\epsilon'_{zz}} + \alpha \epsilon'_{zz}$$

При этом константа α для деформаций по [100] или [111] определяется уравнениями (30.30) и (30.31). Определив из экспериментальных данных значения γ и α , можно найти константы b и d , входящие в (30.30) и (30.31), и далее, зная их знак и знак произведений bB и dD , опреде-

ления зоны, определяемое выражениями (30.24) — (30.26), а при деформации по [001] и [111] — формулами (30.30) и (30.31).

На рис. 36 показана зависимость m_c от нагрузки P (при $H \parallel P$). Видно, что δm^* линейно зависит от ϵ лишь при больших деформациях. Нелинейный ход δm^* при малых ϵ связан с непараболичностью зон при малом расщеплении Δ_ϵ . В условиях, когда отношение kT/Δ_ϵ не очень мало, становятся существенными слагаемые четвертого и более высокого порядка по k , определяемые уравнениями (30.5) и (30.21). При учете этих слагаемых циклотронная частота сама зависит от номера уровня n , что приводит к сдвигу линии с повышением температуры или уменьшением нагрузки, а зависимость ω_c от k_z^2 вызывает так называемое k_z -уширение линии, которое увеличивается с уменьшением ϵ .

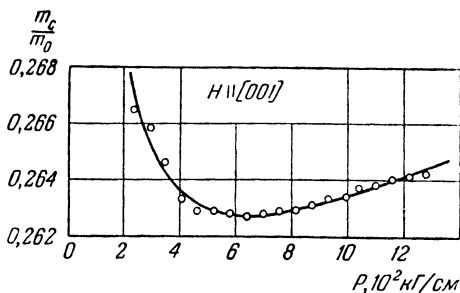


Рис. 36. Зависимость циклотронной массы в *p*-Si от величины деформации [29.1].

лечь знак B и D . Значение отношения b/d определялось независимо из аналогичных измерений при деформации по оси [110]. В табл. 40.2 (стр. 572) приведены значения констант A , B , D , b и d^*), определенные указанным образом.

Заметим, что при обратном знаке деформации, когда кристалл подвергался не сжатию, а растяжению, никаких заметных изменений циклотронной массы при больших деформациях не наблюдалось [30.1]. Как указывалось в § 30, при деформации по главным осям [100] или [111] при $be' < 0$ или $de' < 0$ этот эффект действительно должен отсутствовать.

Квантовый циклотронный резонанс

В p -Ge из-за большого спин-орбитального расщепления указанный метод измерения констант деформационного потенциала непригоден, так как вклад отщепившейся зоны оказывается сравнимым с вкладом других близлежащих зон, например, зоны проводимости. Однако для Ge оказался пригодным другой метод — квантовый циклотронный резонанс в деформированном кристалле. Как отмечалось выше, вследствие непараболичности расщепившихся при деформации зон циклотронная частота $\omega_{n+1, n} = (E_{n+1} - E_n)/\hbar$, пропорциональная разности энергий $\Delta E_{n+1, n}$ уровней $n + 1$ и n , уменьшается по мере увеличения n . В сильных магнитных полях и при низких температурах и не очень больших деформациях удастся разрешать отдельные линии, соответствующие разным n , и измерять их смещение при деформации. Для расчета положения этих линий при больших n достаточно включить в $\mathcal{H}(K)$ члены $\sim K^4$, определяемые уравнением (30.21). Однако в условиях квантового циклотронного резонанса, когда $\hbar\omega_c$ порядка kT , существенны уровни с малыми n и эта формула становится неприменимой, так как в этом случае уже надо учитывать некоммутативность операторов K_i в магнитном поле. Для того чтобы определить гамильтониан $\mathcal{H}(K)$ в магнитном поле в деформированном кристалле в более высоком приближении по K , надо сперва, используя функции, подобные (24.19), перейти к представлению, в котором матрица $\mathcal{H}(\epsilon)$ диагональна. В этом представлении подматрицы $\mathcal{H}_{II}(K, \epsilon)$ и $\mathcal{H}_{III}(K, \epsilon)$ диагональны:

$$\mathcal{H}_{II} = IE_1(K, \epsilon), \quad \mathcal{H}_{III} = IE_2(K, \epsilon).$$

Здесь $E_{1,2}(K, \epsilon)$ определяется уравнением (30.14), а I — единичная матрица 2×2 . Далее, используя формулу (15.49), надо исключить недиагональные члены $\mathcal{H}_{I II}$ и $\mathcal{H}_{II I}$, учитывая при этом некоммутативность операторов K . При этом надо иметь

*) В обозначениях [29.3, 40.3] $a = -\frac{2}{3} D_a^v$, $b = -\frac{2}{3} D_u$, $d = -\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u$.

в виду, что исходная матрица $\mathcal{H}(\mathbf{K})$ включает в соответствии с (22.20) симметризованные произведения $[K_\alpha K_\beta]$, и коммутатор от этих произведений равен

$$\begin{aligned} & \{[K_\alpha K_\beta][K_\gamma K_\delta]\} = \\ & = \frac{1}{2}([K_\alpha K_\gamma]\{K_\beta K_\delta\} + [K_\beta K_\delta]\{K_\alpha K_\gamma\} + [K_\alpha K_\delta]\{K_\beta K_\gamma\} + [K_\beta K_\gamma]\{K_\alpha K_\delta\}). \end{aligned}$$

Наряду с этим надо учесть зависимость g -факторов от волнового вектора \mathbf{K} , для чего при преобразовании \mathcal{H}_s , подобном (33.2), надо заменить f, g, h, j на $F + f, \mathcal{G} + g, H + h$ и $J + j$, где F, \mathcal{G}, H и J определяются выражениями (24.11). Если деформация и магнитное поле направлены по главным осям [001] или [111], нет необходимости применять указанный выше общий метод, пригодный при любом направлении деформации и магнитного поля, так как в этих случаях можно сразу использовать представление, в котором матрицы $\mathcal{H}(\mathbf{e})$ и $\mathcal{H}_s = \mu_0 g_0 \mathcal{K}(\mathbf{JH})$ диагональны, т.е. тем самым исключаются два из указанных преобразований. Для первого случая это представление (24.12), (26.12), (30.3), (30.9). Для второго случая соответствующий оператор $\mathcal{H}(\mathbf{K}, \mathbf{e})$ можно получить из (26.12) и (30.9), переходя к системе координат с осями z' [111], x' [11 $\bar{2}$], y' [$\bar{1}$ 10], аналогично тому, как это сделано в § 31 при переходе от (31.9) к (31.11).

Согласно (31.10а) гамильтониан $\mathcal{H}(\mathbf{K}, \mathbf{e})$, определяемый уравнениями (26.12), (26.14), (30.9), (27.62) в новых осях имеет вид (для дырок при $\varphi = 0$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{K}, \mathbf{e}, \mathbf{H}) = & \left(\gamma_1 - \frac{5}{4} \gamma_3 \right) K^2 + \frac{15}{4} \gamma_3 K_z^2 + \gamma_3 J_z^2 K^2 - 3\gamma_3 J_z^2 K_z^2 + \\ & + \frac{1}{3} (\gamma_2 + 2\gamma_3) (J_+^2 K_-^2 + J_-^2 K_+^2) + \\ & + \frac{i2\sqrt{2}}{3} (2\gamma_2 + \gamma_3) ([J_z J_+] K_z K_- - [J_z J_-] K_z K_+) - \\ & - \frac{2\sqrt{2}}{3} (\gamma_2 - \gamma_3) (J_+^2 K_+ K_z + J_-^2 K_- K_z) - \\ & - \frac{i2}{3} (\gamma_2 - \gamma_3) ([J_z J_+] K_+^2 - [J_z J_-] K_-^2) + \left(D_1 - \frac{5}{4} D_3 \right) \mathbf{e} + \\ & + \frac{15}{4} D_3 \mathbf{e}_{zz} + D_3 J_z^2 \mathbf{e} - 3D_3 J_z^2 \mathbf{e}_{zz} + \frac{1}{3} (D_2 + 2D_3) (J_+^2 \mathbf{e}_- + J_-^2 \mathbf{e}_+) + \\ & + \frac{i2\sqrt{2}}{3} (2D_2 + D_3) ([J_z J_+] \mathbf{e}_{z-} - [J_z J_-] \mathbf{e}_{z+}) - \\ & - \frac{2\sqrt{2}}{3} (D_2 - D_3) (J_+^2 \mathbf{e}_{z+} + J_-^2 \mathbf{e}_{z-}) - \\ & - \frac{i2}{3} (D_2 - D_3) ([J_z J_+] \mathbf{e}_+ - [J_z J_-] \mathbf{e}_- + g_0 \mu_0 \mathcal{K}(\mathbf{JH})), \quad (33.26) \end{aligned}$$

где $D_1 = -a$, $D_2 = -\frac{1}{2}b$, $D_3 = -\frac{d}{2\sqrt{3}}$. Остальные обозначения согласно табл. 31.4 (стр. 410).

В случае, когда и деформация и магнитное поле направлены по оси [111], т. е. когда в (33.26) отличны от нуля лишь компоненты ϵ_{zz} и H_z , матрица $\mathcal{H}(K, \epsilon, H)$ имеет вид

$$\mathcal{H}_{II} = -\left(a - \frac{d}{\sqrt{3}}\right)\epsilon_{zz} + (\gamma_1 + \gamma_3)(2a^+a + 1)s^{-2} + (\gamma_1 - 2\gamma_3)k_z^2 + \frac{3}{2}\mu_0g_0\kappa H\sigma_z, \quad (33.27a)$$

$$\mathcal{H}_{III} = -\left(a + \frac{d}{\sqrt{3}}\right)\epsilon_{zz} + (\gamma_1 - \gamma_3)(2a^+a + 1)s^{-2} + (\gamma_1 + 2\gamma_3)k_z^2 + \frac{1}{2}\mu_0g_0\kappa H\sigma_z, \quad (33.27б)$$

$$\mathcal{H}_{I II} = \begin{vmatrix} h_{13} & h_{14} \\ h_{14}^+ & -h_{13}^+ \end{vmatrix}, \quad (33.27в)$$

где

$$h_{13} = -2\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} [(\gamma_3 - \gamma_2)a^{+2}s^{-2} + (\gamma_3 + 2\gamma_2)as^{-1}k_z],$$

$$h_{14} = -2\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} [(\gamma_2 + 2\gamma_3)a^2s^{-2} + 2(\gamma_3 - \gamma_2)a^+s^{-1}k_z].$$

При этом мы сразу ввели операторы a и a^+ , заменив в соответствии с (33.16) K_+ на $\sqrt{2}s^{-1}a$ и K_- на $\sqrt{2}s^{-1}a^+$. Далее, исключая недиагональные члены, найдем

$$\tilde{\mathcal{H}}_{II} = \mathcal{H}_{II} + \frac{\mathcal{H}_{I II}\mathcal{H}_{III}}{\Delta_e}, \quad \tilde{\mathcal{H}}_{III} = \mathcal{H}_{III} - \frac{\mathcal{H}_{II}\mathcal{H}_{I II}}{\Delta_e}. \quad (33.28)$$

Здесь $\Delta_e = (2/\sqrt{3})d\epsilon'_{zz}$ и в отличие от (30.13) может быть положительной и отрицательной. Матрица $\mathcal{H}_{I II}\mathcal{H}_{III}$ включает наряду с диагональными членами четвертого порядка по k или a , которые можно сразу определить из формулы (30.21), также и члены второго порядка по k или a , связанные с некоммутативностью операторов a, a^+ .

Подставив (33.27) в (33.28), получим

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{II} = & \frac{1}{2}\Delta_e + 2(\gamma_1 + \gamma_3)s^{-2}[a^+a] + (\gamma_1 - 2\gamma_3)k_z^2 + \\ & + \frac{4}{\Delta_e} [(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)s^{-4}[a^{+2}a^2] + 2(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)s^{-1}k_z(a^3 + a^{+3}) + \\ & + 2(\gamma_3^2 + 2\gamma_2^2)s^{-2}k_z^2[a^+a]] + \sigma_z \left\{ \frac{3}{2}\mu_0g_0\kappa H + \right. \\ & + \frac{8}{3\Delta_e} [(\gamma_2 + 2\gamma_3)^2 - 2(\gamma_3 - \gamma_2)^2]s^{-4}[a^+a] + \\ & + \frac{4}{3\Delta_e} [(\gamma_3 + 2\gamma_2)^2 - 2(\gamma_3 - \gamma_2)^2]s^{-2}k_z^2 \left. \right\} + \\ & + \sigma_x \left\{ \frac{8\sqrt{2}}{3\Delta_e} (\gamma_2 - \gamma_3)[2(\gamma_2 + 2\gamma_3)s^{-4}[a^+a] - (\gamma_3 + 2\gamma_2)s^{-2}k_z^2] \right\}, \end{aligned} \quad (33.29)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{III} = & -\frac{1}{2}\Delta_\varepsilon + 2(\gamma_1 - \gamma_3)s^{-2}[a^+a] + (\gamma_1 + 2\gamma_3)k_z^2 - \\
& -\frac{4}{\Delta_\varepsilon}[(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)s^{-4}[a^{+2}a^2] + 2(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)s^{-1}k_z(a^3 + a^{+3}) + \\
& + 2(\gamma_3^2 + 2\gamma_2^2)s^{-2}k_z^2[a^+a]] + \sigma_z \left\{ \frac{1}{2}\mu_0 g_0 \mathcal{H} - \right. \\
& \left. -\frac{8}{\Delta_\varepsilon}[(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)s^{-4}[a^+a] + \frac{4}{\Delta_\varepsilon}(2\gamma_2^2 + \gamma_3^2)s^{-2}k_z^2] \right\} + \\
& + \frac{1}{\Delta_\varepsilon} 24\sqrt{2}\gamma_2\gamma_3s^{-3}k_z(\sigma_+a + \sigma_-a^+). \quad (33.30)
\end{aligned}$$

Решение системы уравнений Шредингера с гамильтонианом (33.29) или (33.30) можно искать в виде $F_n = \begin{vmatrix} c_1 F_n \\ c_2 F_n \end{vmatrix}$, где F_n — функции, определяемые уравнением (33.13). При этом слагаемые, содержащиеся в знаменателе Δ_ε , можно рассматривать как возмущение. При $kT \ll \hbar\omega_c$ в этих слагаемых можно опустить члены, содержащие k_z , так как $\hbar^2 k_z^2 / 2m_{zz}^* \approx kT$. В этом приближении функция F_n является точным решением соответствующего гамильтониана, так как в соответствии с (33.20) и (33.17)

$$[a^{+2}a^2]F_n = ((a^+a)^2 + (a^+a) + 1)F_n = (n^2 + n + 1)F_n. \quad (33.31)$$

Далее удобно выразить константы γ_1 , γ_2 и γ_3 в единицах $\hbar^2/2m$, где m — масса свободного электрона, т. е. перейти к безразмерным константам [20.1], имея в виду, что

$$\frac{\hbar^2 s^{-2}}{m} = \frac{e\hbar H}{mc} = \hbar\omega_0, \quad \mu_0 g_0 H = \frac{e\hbar H}{mc} = \hbar\omega_0. \quad (33.32)$$

Если опустить слагаемые, содержащие k_z , то спектр дырок в этих обозначениях будет иметь вид

$$\begin{aligned}
E_\pm^I = & \frac{\Delta_\varepsilon}{2} + \hbar\omega_0(\gamma_1 + \gamma_3)\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_\varepsilon}[(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)(n^2 + n + 1)] \pm \\
& \pm \left\{ \frac{3}{2}\hbar\omega_0 \mathcal{H} + \frac{2}{3}\frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_\varepsilon}[(\gamma_2 + 2\gamma_3)^2 - 2(\gamma_3 - \gamma_2)^2]\left[n + \frac{1}{2}\right] \right\}, \quad (33.33)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_\pm^{II} = & -\frac{\Delta_\varepsilon}{2} + \hbar\omega_0(\gamma_1 - \gamma_3)\left(n + \frac{1}{2}\right) - \\
& - \frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_\varepsilon}[(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)(n^2 + n + 1)] \pm \\
& \pm \left\{ \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \mathcal{H} - 2\frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_\varepsilon}(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)\left(n + \frac{1}{2}\right) \right\}. \quad (33.34)
\end{aligned}$$

Вклад в E^{II} недиагональных членов в (33.30) учитывать не надо, так как он порядка $(\hbar\omega_0)^3/\Delta_\varepsilon^2$, а члены такого порядка опускались в разложении (33.28).

Из (33.32) следует, что для серии уровней E_{\pm}^{II} , которые при $\Delta_{\varepsilon} = 2d\varepsilon_{zz}/\sqrt{3} > 0$ являются нижними уровнями дырок, циклотронные частоты для переходов $n+1 \rightarrow n$

$$\hbar\omega_{n+1, n}^{\pm} = E_{n+1}^{\pm} - E_n^{\pm}$$

определяются выражениями

$$\frac{\omega_{n+1, n}}{\omega_0} = \gamma_1 - \gamma_3 - \frac{2\hbar\omega_0}{\Delta_{\varepsilon}} (\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)(n+1 \pm 1), \quad (33.35)$$

т. е. изменение циклотронной частоты с деформацией для верхнего из спиновых уровней

$$\frac{\Delta\omega_{n+1, n}^{\text{II}+}}{\omega_0} = -\frac{2\hbar\omega_0}{\Delta_{\varepsilon}} (\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)(n+2), \quad (33.36a)$$

а для нижнего спинового уровня

$$\frac{\Delta\omega_{n+1, n}^{\text{II}-}}{\omega_0} = -\frac{2\hbar\omega_0}{\Delta_{\varepsilon}} (\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2)n. \quad (33.36b)$$

Из формул (33.36) видно, что для перехода $1^- \rightarrow 0^-$ частота не зависит от деформации, тогда как для остальных переходов ω_c падает, а следовательно, m_c растет по мере уменьшения деформации.

Для серии уровней E_{\pm}^{I} , которые являются нижними уровнями для дырок при $d\varepsilon < 0$,

$$\frac{\omega_{n+1, n}^{\text{I}\pm}}{\omega_0} = \gamma_1 + \gamma_3 + \frac{2\hbar\omega_0}{\Delta_{\varepsilon}} \left[(\gamma_2^2 + 2\gamma_3^2) \left(n+1 \pm \frac{1}{3} \right) \mp \frac{2}{3} (\gamma_3 - \gamma_2)^2 \right], \quad (33.37)$$

т. е. при $d\varepsilon < 0$ для всех уровней ω_c падает с уменьшением деформации.

Из (33.35), (33.37) видно, что при больших n изменение циклотронной частоты для обоих спиновых уровней одинаково, а для термов E_{I} и E_{II} отличается лишь знаком, что сразу видно и из формулы (30.21).

Экспериментально циклотронный резонанс на деформированном германии при низких температурах наблюдался Хенселом [30.2]. На рис. 37 показана зависимость отношения $\omega_0/\omega_{n+1, n}^{\pm}$ от ε для переходов между различными уровнями, показанными на схеме вверху. Сплошные линии — теоретические кривые, результат решения на ЭВМ системы уравнений (33.27), определяющих спектр при произвольной деформации. Параметр d подбирался из условия лучшего совпадения теоретических и

экспериментальных кривых и оказался равным $d = -4,4 \pm 0,3$ эв, а значение $\gamma_1 - \gamma_3 = -A + D/2\sqrt{3}$, определенное из положения

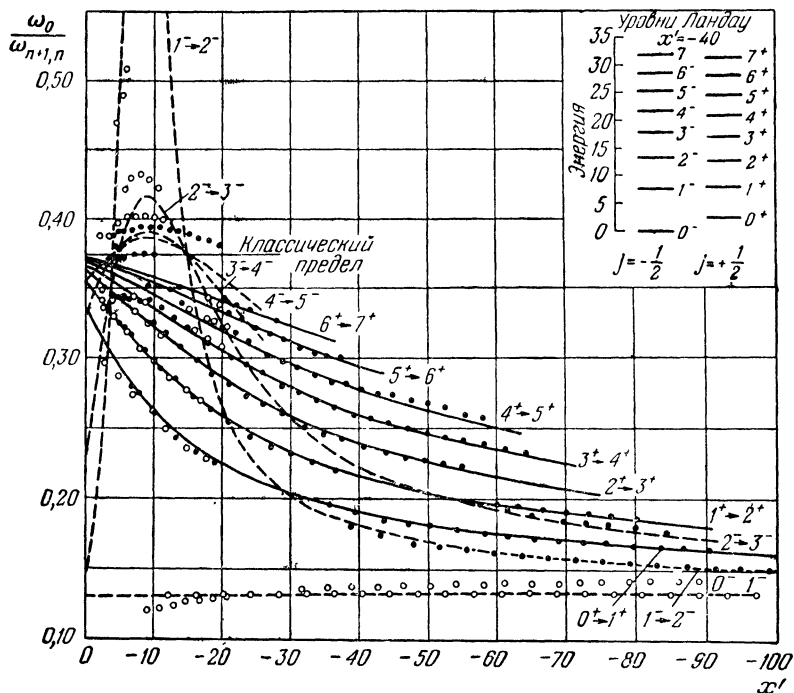


Рис. 37. Зависимость циклотронной частоты в p -Ge от величины деформации [30. 2]. На рис. 37 и 38 по оси абсцисс отложена относительная деформация $x' = \frac{\epsilon'}{\hbar e H / mc}$. Энергия на шкале уровней дана в единицах $\hbar e H / mc$.

несмещенной линии, в единицах $\hbar^2/2m_0$, равно $7,745 \pm 0,012$, что хорошо согласуется с другими данными, приведенными в табл. 40.2 (стр. 572).

Комбинированный резонанс

Недиагональные матричные элементы в (33.29), (33.30) не дают вклада в спектр в рассмотренном приближении, но за счет этих членов оказываются возможными переходы с изменением спина в переменном электрическом поле. В отличие от обычного парамагнитного резонанса, когда такие переходы вызываются магнитным полем, этот эффект, предсказанный впервые Э. И. Рашба [31.1], называется комбинированным резонансом.

Как указывалось выше, вероятность переходов в переменном электрическом поле определяется оператором $\mathcal{H}_\epsilon = (e/\hbar c) \times \times [V_k \mathcal{H}(k) \mathcal{A}]$. Если исходная матрица $\mathcal{H}(k)$ содержит только

квадратичные по k члены, то матрица \mathcal{H}_g , аналогичная (33.23), получается из $\mathcal{H}(k)$ заменой:

$$a \text{ на } a + s \frac{e\mathcal{E}_+(t)}{\hbar\omega}, \quad a^+ \text{ на } a^+ + s \frac{e\mathcal{E}_-(t)}{\hbar\omega}, \quad k_z \text{ на } k_z + s^{-2} \frac{e\mathcal{E}_z(t)}{\hbar\omega}.$$

Отсюда следует, что недиагональные элементы матрицы \mathcal{H}_g^I , определяющие вероятность перехода между состояниями E_+^I и E_-^I в соответствии с (33.29), равны

$$\mathcal{H}_{g\pm}^I = \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_g} \frac{e}{\hbar\omega} (\gamma_2 - \gamma_3) [(\gamma_2 + 2\gamma_3) s (a^+ \mathcal{E}_+ + a \mathcal{E}_-) - s^2 (\gamma_3 + 2\gamma_2) k_z \mathcal{E}_z] \sigma_x. \quad (33.38)$$

Здесь, как и в (33.33), (33.34), константы γ_1 и γ_3 выражены в единицах $\hbar^2/2m_0$. Видно, что поле $\mathcal{E} \parallel \mathbf{H}$ вызывает переходы между спиновыми состояниями, относящимися к одному уровню Ландау, тогда как поле $\mathcal{E} \perp \mathbf{H}$ — переходы с одновременным изменением n на единицу: \mathcal{E}_- — с уменьшением, а \mathcal{E}_+ — с увеличением.

Недиагональные элементы матрицы \mathcal{H}_g^{II} , определяющие вероятность перехода между состояниями E_+^{II} и E_-^{II} , согласно (33.30) равны

$$\mathcal{H}_{g\pm}^{II} = 6\sqrt{2} \frac{(\hbar\omega_0)^2}{\Delta_g} \frac{e}{\hbar\omega} \gamma_2 \gamma_3 [s^2 k_z (\sigma_+ \mathcal{E}_+ + \sigma_- \mathcal{E}_-) + s \mathcal{E}_z (\sigma_+ a + \sigma_- a^+)]. \quad (33.39)$$

Видно, что в этом случае поле $\mathcal{E} \perp \mathbf{H}$, наоборот, вызывает переходы с изменением только спина, тогда как поле $\mathcal{E} \parallel \mathbf{H}$ вызывает переходы между разными спиновыми уровнями, относящимися к соседним уровням Ландау. Из сравнения (33.38) и (33.39) с (33.23) видно, что интенсивность таких комбинированных переходов примерно в $(\hbar\omega_0/\Delta_g)^2$ меньше, чем циклотронных, но она обычно намного выше интенсивности парамагнитного резонанса, который на свободных дырках еще не наблюдался.

На рис. 38 показаны результаты экспериментального изучения комбинированного резонанса на деформированном германии [31.3]. Стрелками указаны переходы, наблюдаемые при сжатии по [111] ($d\epsilon > 0$), $\mathbf{H} \parallel [111]$ и $\mathcal{E} \parallel \mathbf{H}$. В соответствии с (33.39) в этих условиях наблюдаются только переходы $(n, +) \rightarrow (n+1, -)$. Показана зависимость $\omega_0/\omega_{n+1, n}$ от ϵ ; здесь $\omega_{n+1, n}$ — частота соответствующего перехода: $\hbar\omega_{n+1, n} = E_{n+1}^- - E_n^+$. Сплошные линии — теоретические кривые, полученные решением на ЭВМ системы уравнений (33.27). Параметры d и κ определялись так, чтобы обеспечить лучшее совпадение экспе-

риментальных и теоретических кривых, и оказались равными: $d = -4,5 \pm 0,3$ эв, $k = -3,60 \pm 0,04$. Последующие измерения парамагнитного резонанса на свободных носителях в деформированном p -Ge [31.4] позволили уточнить значение константы k ,

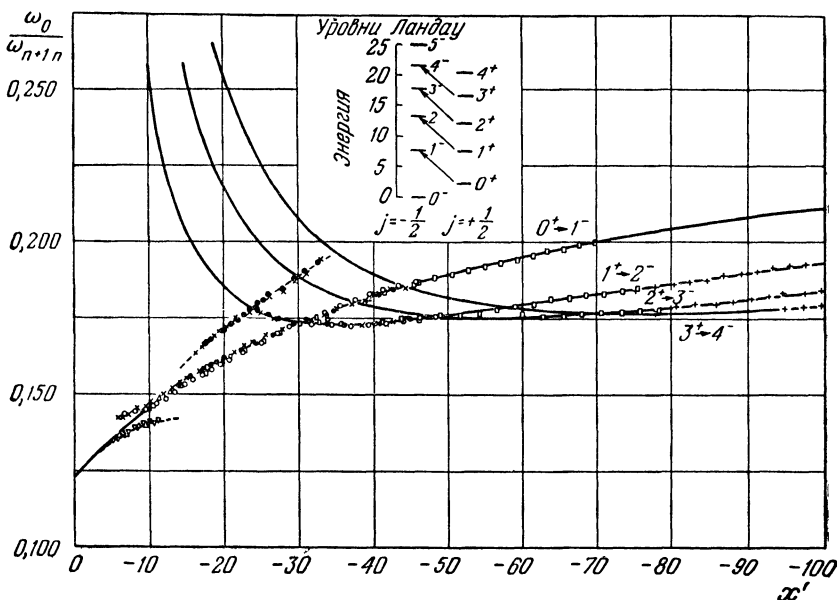


Рис. 38. Комбинированный резонанс в деформированном p -Ge [31.3].

которая оказалась равной $-3,41 \pm 0,03$, и определить значение $g = -0,06 \pm 0,01$ *) (см. (26.14)).

Изменение эффективных масс в невырожденных зонах

С помощью циклотронного резонанса удалось наблюдать не только «большие» изменения эффективных масс в полупроводниках с вырожденными зонами, но и «малые» эффекты, связанные с влиянием соседних зон на эффективные массы в невырожденных зонах. Как указывалось в §§ 29 и 30, в n -Si при деформациях сдвига поперечные массы $1/m_{y'y'}$ и $1/m_{z'z'}$ должны различаться на величину $4 \frac{m_{\perp} C' e_{yz}}{m' \Delta}$ (уравнение (29.45)).

Если магнитное поле направлено перпендикулярно главной оси x , то в недеформированном кристалле циклотронная масса m_c в соответствии с (33.25) равна $m_c^0 = (m_{\perp} m_{\parallel})^{1/2}$ и не зависит от ориентации магнитного поля в плоскости $y'z'$. При деформации эта масса, согласно (29.45) и (33.25), изменяется при

*) В этой же работе уточнены значения констант γ , приведенные в [31.3].

изменении угла φ между \mathbf{H} и осью y' (т. е. осью [011]) по закону

$$m_c^2 = m_{\perp} m_{\parallel} \left(1 + \frac{2m_{\perp}}{m'} \frac{C' e_{yz}}{\Delta} \cos 2\varphi \right)^{-1}, \quad (33.40)$$

откуда

$$m_c(\varepsilon) = m_c(0) \left(1 - \frac{m_{\perp}}{m'} \frac{C' e_{yz}}{\Delta} \cos 2\varphi \right). \quad (33.41)$$

На рис. 39 показана зависимость m_c/m_0 от угла φ , снятая на деформированном и недеформированном кристалле [29.7]. Сплошной линией показана кривая

$$\frac{m_c}{m_0} = a - b \cos 2\varphi$$

при

$$a = 1,4 \cdot 10^{-3},$$

$$b = (9,1 \pm 0,4) \cdot 10^{-3}.$$

Постоянная составляющая a , которой нет в (33.41), связана с влиянием других зон. Указанному значению b соответствует значение

$$\alpha = \frac{m_{\perp}}{m'} \frac{C'}{\Delta} = 8,3.$$

Расстояние Δ до близлежащей зоны в точке \mathbf{k}_0 равно примерно 0,5 эв, а отношение m'/m_{\perp} согласно теоретическим оценкам [29.7] равно 1,32, откуда для константы C' получается значение 5,6 эв.

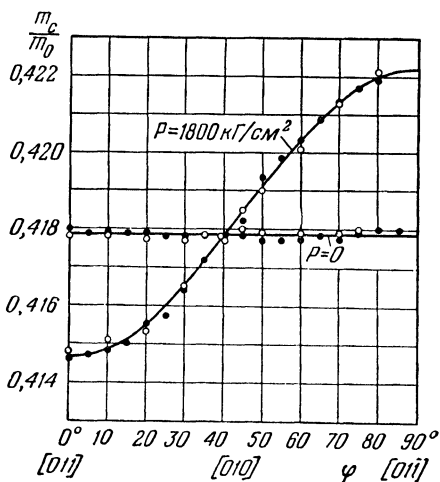


Рис. 39. Зависимость циклотронной массы для n -Si от угла φ между магнитным полем и осью [011] (деформация по [001]) [29.7].

§ 34. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ

В этом параграфе рассматривается изменение электропроводности полупроводников при анизотропной деформации — эффект пьезосопротивления. Открытый Смитом в 1954 г. на Ge и Si [32.1], он явился началом исследования влияния одноосных деформаций на физические свойства полупроводников.

Феноменологическое описание эффекта пьезосопротивления

При приложении деформации к кристаллу происходит изменение тензора электропроводности $\Delta\sigma_{\alpha\beta}$, которое в линейном по деформации приближении можно записать в виде

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\bar{\sigma}} = \sum_{\gamma\delta} m_{\alpha\beta, \gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta}, \quad (34.1)$$

где $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ — безразмерный тензор четвертого ранга, симметричный по перестановке индексов внутри каждой пары:

$$m_{\alpha\beta, \gamma\delta} = m_{\beta\alpha, \gamma\delta} = m_{\beta\alpha, \delta\gamma} = m_{\alpha\beta, \delta\gamma}, \quad (34.2)$$

а $\bar{\sigma}$ — средняя электропроводность кристалла:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{3} \text{Sp } \sigma = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3}.$$

Тензор $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ называется тензором эластосопротивления. Его вид и число независимых компонент определяются симметрией кристалла и симметрией (34.2) относительно перестановки индексов. Согласно (20.18) число независимых компонент

$$N = \frac{1}{4h} \sum_{g \in F} [\chi_1^2(g)]^2, \quad (34.3)$$

где χ_1 — характер векторного представления, h — число элементов группы F , характеризующей кристаллический класс. Из (34.3) следует, например, что в кубическом кристалле отличны от нуля три компоненты тензора эластосопротивления. Это компоненты $m_{zz, zz}$, $m_{xx, yy}$ и $m_{xy, xy}$.

Экспериментально обычно измеряют эдс при заданном токе, т. е. определяют изменение при деформации тензора сопротивления $\rho = \sigma^{-1}$.

Изменение сопротивления при деформации $\Delta\rho_{\alpha\beta}/\bar{\rho}$ описывается аналогично (34.1) тензором четвертого ранга $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{(\rho)}$ обладающим такой же симметрией, как и тензор $m^{(\sigma)}$. В кубическом кристалле $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{(\sigma)} = -m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{(\rho)}$, однако в кристаллах более низкой симметрии связь между компонентами $m^{(\sigma)}$ и $m^{(\rho)}$ включает в себя и отношения компонент тензора проводимости (или тензора сопротивления) недеформированного кристалла.

Поскольку все компоненты тензоров m , σ и ε определяются только парой индексов $\alpha\beta$, то удобно перейти к сокращенной записи, обозначая каждую пару индексов одним номером. При этом компоненты тензора деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}$ характеризуются одним индексом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} \rightarrow \varepsilon_1, \quad \varepsilon_{yy} \rightarrow \varepsilon_2, \quad \varepsilon_{zz} \rightarrow \varepsilon_3, \quad 2\varepsilon_{yz} \rightarrow \varepsilon_4, \quad 2\varepsilon_{xz} \rightarrow \varepsilon_5, \quad 2\varepsilon_{xy} \rightarrow \varepsilon_6; \\ \sigma_{xx} \rightarrow \sigma_1, \quad \sigma_{yy} \rightarrow \sigma_2, \quad \sigma_{zz} \rightarrow \sigma_3, \quad \sigma_{yz} \rightarrow \sigma_4, \quad \sigma_{xz} \rightarrow \sigma_5, \quad \sigma_{xy} \rightarrow \sigma_6, \end{aligned}$$

а тензор $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ записывается в виде матрицы 6×6 . Таким образом, вместо 81 компоненты, симметричный по перестановкам внутри каждой пары индексов тензор $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ определяется в общем случае 36 величинами m_{ij} .

Соотношение (34.1) может быть записано в матричном виде:

$$\frac{\Delta\sigma_i}{\bar{\sigma}} = \sum_j m_{ij} \varepsilon_j. \quad (34.4)$$

В кубическом кристалле при выборе осей x, y, z вдоль осей четвертого порядка матрица эластосопротивления имеет вид

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{12} & 0 & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{11} & m_{12} & 0 & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{12} & m_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_{44} \end{pmatrix} \quad (34.5)$$

и характеризуется тремя независимыми константами:

$$m_{11} = m_{xx, xx}, \quad m_{12} = m_{xx, yy}, \quad m_{44} = m_{xy, xy}.$$

Эти константы легко могут быть определены из эксперимента при различных ориентациях тока, напряжения и деформации. При различной взаимной ориентации деформации, поля и тока в принципе можно определить все компоненты тензора эластосопротивления.

Всякая малая деформация может быть разложена на деформацию, не изменяющую симметрию кристалла, и деформацию, понижающую симметрию кристалла. Примером деформации, не изменяющей симметрию кристалла, является всесторонняя деформация, когда $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \frac{1}{3} \frac{\Delta \mathcal{V}}{\mathcal{V}}$, где $\frac{\Delta \mathcal{V}}{\mathcal{V}}$ — относительное изменение объема.

В некубических кристаллах кроме всесторонней деформации существуют и другие типы деформации, не меняющие симметрию. Так, в одноосных кристаллах это деформация вдоль оси симметрии. Поэтому вместо самих коэффициентов m_{ij} удобно использовать их линейные комбинации, соответствующие деформации, не изменяющей симметрию кристалла, которые называются объемными коэффициентами эластосопротивления, и комбинации m_{ij} , которые определяются только деформациями, понижающими симметрию кристалла. Они называются сдвиговыми коэффициентами эластосопротивления. Такое разделение коэффициентов на «объемные», не связанные с изменением симметрии, и сдвиговые коэффициенты физически оправдано тем, что, как будет показано ниже, в общем случае они определяются различными механизмами.

Для кубических кристаллов объемным коэффициентом является изменение проводимости при всесторонней деформации:

$$\frac{\Delta \sigma}{\sigma_0 (\Delta \mathcal{V} / \mathcal{V})} = \frac{m_{11} + 2m_{12}}{3}. \quad (34.6)$$

Сдвиговыми коэффициентами в кубических кристаллах являются коэффициенты $(m_{11} - m_{12})/2$, описывающие изменение проводимости вдоль оси x при деформации $\epsilon_{xx} = -\epsilon_{yy}$, и

коэффициент m_{44} , определяющий компоненту $\Delta\sigma_{xy}$ при деформации ϵ_{xy} , изменяющей угол между осями x и y .

Введенные выше коэффициенты эластосопротивления являются безразмерными коэффициентами и определяют относительное изменение проводимости на единицу деформации при определенном типе деформации, они являются более удобными при теоретической интерпретации эффектов пьезосопротивления.

Практически, однако, к кристаллу прикладывается напряжение и измеряется относительное изменение проводимости на единицу нагрузки при заданном ее направлении.

Относительное изменение проводимости, пропорциональное нагрузке, определяется аналогично (34.1) тензором четвертого ранга $\pi_{\alpha\beta, \gamma\delta}$:

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\bar{\sigma}} = \sum_{\gamma\delta} \pi_{\alpha\beta, \gamma\delta} P_{\gamma\delta}, \quad (34.7)$$

где $P_{\gamma\delta}$ — компоненты тензора напряжения. Тензор $\pi_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ называется тензором пьезосопротивления, он имеет размерность $см^2/дин$ и обладает такими же свойствами симметрии, как и тензор $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$.

Переходя к обозначениям

$$P_{xx} = P_1, \quad P_{yy} = P_2, \quad P_{zz} = P_3, \quad P_{yz} = P_4, \\ \pi_{xx, xx} = \pi_{11}, \quad 2\pi_{xy, xy} = \pi_{66} \quad \text{и т. д.},$$

соотношение (34.7) запишем в виде

$$\frac{\Delta\sigma_i}{\bar{\sigma}} = \sum_j \pi_{ij} P_j. \quad (34.8)$$

Матрица пьезосопротивления π_{ij} аналогична матрице m_{ij} и для кубического кристалла имеет вид (34.5).

Коэффициенты $(\pi_{11} + 2\pi_{12})/3$ описывают изменение проводимости при всестороннем давлении, а $(\pi_{11} - \pi_{12})/2$ и π_{44} — изменение проводимости при сдвиговых напряжениях.

Связь между напряжением $P_{\alpha\beta}$ и компонентами тензора деформации определяется тензором модулей упругости $C_{\alpha\beta, \gamma\delta}$, который является обратным тензору $S_{\alpha\beta, \gamma\delta}$. Эту связь можно записать в матричном виде:

$$P = C\epsilon, \quad (34.9)$$

где $C_{ij} \rightarrow C_{\alpha\beta, \gamma\delta}$, $i = (\alpha\beta)$, $j = (\gamma\delta)$.

Матрица C аналогично матрице m или π определяется тремя константами $C_{11} = C_{xx, xx}$, $C_{12} = C_{xx, yy}$, $C_{44} = C_{yz, yz}$.

Из (34.9) следует связь между матрицами m и π :

$$m = \pi C, \quad (34.10)$$

откуда следуют соотношения между коэффициентами эластосопротивления и пьезосопротивления для кубических кристаллов:

$$\begin{aligned} \frac{m_{11} + 2m_{12}}{3} &= \frac{\pi_{11} + 2\pi_{12}}{3} (C_{11} + 2C_{12}), \\ \frac{m_{11} - m_{12}}{2} &= \frac{\pi_{11} - \pi_{12}}{2} (C_{11} - C_{12}), \\ m_{44} &= \pi_{44} C_{44}, \end{aligned} \quad (34.11)$$

которые позволяют определить коэффициенты эластосопротивления по измеряемым на эксперименте коэффициентам пьезосопротивления.

Феноменологическое описание эффектов пьезосопротивления дает возможность определить из соображений симметрии вид матрицы эластосопротивления и позволяет найти взаимную ориентацию электрического поля, тока и напряжения, необходимых для экспериментального определения полного тензора эластосопротивления.

Объемные эффекты пьезосопротивления

Тензор электропроводности кристалла $\sigma_{\alpha\beta}$ есть сумма электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}^i$ носителей вблизи каждого экстремума:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^i. \quad (34.12)$$

Если зона в точке экстремума k_0 вырождена и имеется несколько ветвей энергетического спектра, каждой из которых соответствует свой сорт носителей тока, то электропроводность (34.12) является суммой электропроводностей различных сортов носителей тока. Если же в полупроводнике имеются электроны и дырки, то электропроводность полупроводника складывается из электропроводности электронов и дырок.

В общем случае тензор электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}^i$ для носителей сорта i в случае невырожденной статистики можно записать в виде

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{e^2}{kT} \int f_0 \tau_{\alpha\beta}^i v_{\alpha}^i v_{\beta}^i d^3k, \quad (34.13)$$

где f_0 — равновесная функция распределения $f_0 = e^{(\zeta - E_i)/kT}$, ζ — химический потенциал, v_{α}^i — групповая скорость носителей тока

$$v_{\alpha}^i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_i}{\partial k_{\alpha}},$$

$\tau_{\alpha\beta}^i$ — время релаксации, которое в общем случае зависит от k , а также от направления тока и электрического поля. Оно определяется как рассеянием носителей тока на фонах и

примесях внутри зоны i , так и переходами между различными ветвями спектра.

При деформации изменяется энергетический спектр E_i , что приводит к изменению функции распределения f_0 в заданной точке \mathbf{k} -пространства и групповой скорости, а также время релаксации τ^i .

Характер изменения энергетического спектра, как показано в §§ 29 и 30, существенным образом связан со структурой зоны в недеформированном кристалле.

В случае невырожденной зоны деформация приводит к смещению экстремума на величину ΔE_i , пропорциональную деформации, и к изменению эффективных масс эллипсоида. Поправка к энергии за счет изменения эффективных масс $\Delta E \sim D\varepsilon \frac{\hbar^2 k^2}{2m^* E_g}$

значительно меньше, чем $\Delta E_i \sim D\varepsilon$, поэтому мы сперва не будем учитывать изменение эффективных масс при деформации. В этом приближении в случае невырожденной зоны изменение групповой скорости равно нулю.

Как показано в § 30, изменение спектра в вырожденной зоне при деформации, снимающей вырождение, имеет более сложный характер: спектр меняется радикально вблизи точки вырождения, где кинетическая энергия носителей, отсчитанная от точки экстремума, сравнима с деформационным расщеплением зоны или меньше его, а в областях \mathbf{k} -пространства, достаточно удаленных от точки экстремума, поправка к энергии ΔE_i пропорциональна деформации, но зависит от направления вектора \mathbf{k} .

При деформации, не меняющей симметрию кристалла, каждый экстремум смещается на одинаковую величину ΔE_c и не происходит снятия вырождения и изменения времени релаксации τ_i носителей тока.

В примесном полупроводнике в области истощения примесей концентрация носителей тока при деформации не меняется. В таком полупроводнике все объемные коэффициенты пьезосопротивления малы.

Большие объемные коэффициенты пьезосопротивления в примесных полупроводниках могут быть при наличии нескольких сортов носителей тока одного знака, т. е. в тех полупроводниках, в которых имеются близко расположенные неэквивалентные экстремумы. В этом случае изотропная деформация вызывает перераспределение носителей между экстремумами, что приводит к изменению проводимости.

Большие объемные коэффициенты пьезосопротивления могут быть в области собственной проводимости, когда проводимость осуществляется электронами и дырками. Тензор электропроводности в этом случае равен:

$$\sigma_{\alpha\beta} = en\mu_{\alpha\beta}^n + ep\mu_{\alpha\beta}^p, \quad (34.14)$$

где n и p — полные концентрации электронов и дырок, а $\mu_{\alpha\beta}^n$ и $\mu_{\alpha\beta}^p$ — их подвижности, усредненные по всем экстремумам. Концентрации электронов и дырок удовлетворяют условию нейтральности:

$$p - n = N_a - N_d \equiv N, \quad (34.15)$$

где N_a и N_d — концентрации акцепторов и доноров, которые мы будем предполагать полностью ионизованными. В невырожденном полупроводнике

$$pn = n_0^2 = N_c N_v e^{-E_g/kT}, \quad (34.16)$$

где n_0 — собственная концентрация носителей, которая была бы в беспримесном полупроводнике при данной температуре, N_c , N_v — эффективные плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне, а E_g — ширина запрещенной зоны.

Из (34.15) и (34.16) легко найти концентрации p и n *):

$$p = \frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_0^2}}{2} = \frac{N}{2}(R + 1), \quad n = \frac{\sqrt{N^2 + 4n_0^2} - N}{2} = \frac{N}{2}(R - 1), \quad (34.17)$$

где

$$R = \sqrt{1 + 4n_0^2/N^2}.$$

При деформации, не изменяющей симметрии кристалла, происходит смещение дна зоны проводимости ΔE_c и валентной зоны ΔE_v , в результате чего изменяется ширина запрещенной зоны на величину $\Delta E_g = \Delta E_c - \Delta E_v$ и, согласно (34.16), величина собственной концентрации n_0 . Согласно (34.15) и (34.16), если не учитывать изменения эффективных масс при деформации, т. е. при $\Delta N_c = \Delta N_v = 0$,

$$\Delta p = \Delta n = - \frac{\Delta E_g}{kT} \frac{n_0}{p + n} = - \frac{\Delta E_g}{kT} \frac{n_0^2}{NR}. \quad (34.18)$$

Так как подвижности $\mu_{\alpha\beta}^n$ и $\mu_{\alpha\beta}^p$ не изменяются при деформации, то относительное изменение $\Delta\sigma_{\alpha\beta}/\bar{\sigma}$ равно:

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\bar{\sigma}} = - \frac{\Delta E_g}{2kT} \frac{R^2 - 1}{R} \frac{\mu_{\alpha\beta}^n + \mu_{\alpha\beta}^p}{(R - 1)\bar{\mu}^n + (R + 1)\bar{\mu}^p}, \quad (34.19)$$

где $\bar{\sigma} = en\bar{\mu}^n + ep\bar{\mu}^p$ — средняя электропроводность недеформированного кристалла, а $\bar{\mu}^n = \frac{1}{3} \text{Sp} \mu^n$ и $\bar{\mu}^p = \frac{1}{3} \text{Sp} \mu^p$ — средние подвижности электронов и дырок. Для кубических кристаллов, где $\bar{\mu}_{\alpha\beta}^n = \mu^n \delta_{\alpha\beta}$, $\bar{\mu}_{\alpha\beta}^p = \mu^p \delta_{\alpha\beta}$, формула (34.19) дает:

$$\frac{m_{11} + 2m_{12}}{3} = - \frac{E_{1g}}{2kT} \frac{R^2 - 1}{R} \frac{1 + b}{R - 1 + (R + 1)b}, \quad (34.20)$$

*) Для определенности рассматривается случай $N_a - N_d = N > 0$.

где $b = \mu^n / \mu^p$, а E_{1g} — константа деформационного потенциала, определяющая изменение ширины зоны E_g при всесторонней деформации: $\Delta E_g = E_{1g} \text{Sp } \epsilon$.

При низких температурах, когда $n_0 \ll N$, т. е. в области примесной проводимости, $R \approx 1$ и объемные коэффициенты малы, в согласии с полученным выше результатом. С повышением

температуры n_0 экспоненциально растет, при этом растет и величина эффекта пьезосопротивления. При высоких температурах, когда $R \gg 1$, $\Delta \sigma_{\alpha\beta} / \bar{\sigma} \sim \Delta E_g / 2kT$ и падает при дальнейшем повышении температуры как $1/T$.

Объемный коэффициент достигает максимума при температуре T_0 , вблизи которой сравниваются собственная n_0 и примесная N концентрации. Величина $(m_{11} + 2m_{12})/3$ в максимуме порядка $E_{1g}/2kT_0$. Поскольку E_{1g} порядка 5—10 эв, то для достаточно чистых образцов величина $(m_{11} + 2m_{12})/3$ в максимуме может быть порядка сотен.

Таким образом, объемные эффекты пьезосопротивления могут быть велики в области собственной проводимости для полупроводников с узкой шириной запрещенной зоны.

На рис. 40 показана температурная зависимость объемного коэффициента пьезосопротивления

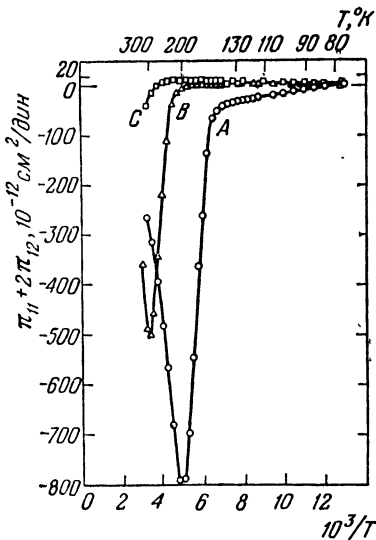
Рис. 40. Температурная зависимость объемного коэффициента пьезосопротивления в InSb [33.2]. Для образцов А, В, С концентрация $N_a - N_d$ составляет соответственно $3 \cdot 10^{15}$, $6,3 \cdot 10^{16}$ и $6,6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

в InSb [33.2]. Как видно из рисунка, температурная и концентрационная зависимость объемного эффекта пьезосопротивления хорошо описывается формулой (34.20).

Сдвиговые коэффициенты пьезосопротивления в многодолинных полупроводниках

В этом случае каждый экстремум смещается на величину ΔE_i , различную для различных экстремумов, что приводит к снятию многодолинного вырождения спектра. Поскольку ΔE_i , если не учитывать изменения эффективной массы, не зависит от k , то изменение групповой скорости равно нулю.

Рассеяние электронов в многодолинном полупроводнике происходит как за счет переходов внутри одного эллипсоида, так и за счет переходов между различными экстремумами. Внутри-



долинное рассеяние не изменяется при деформации, но междолинное рассеяние в общем случае может изменяться. Однако в обычных условиях междолинное рассеяние вносит небольшой вклад во время релаксации электронов проводимости, определяющее электропроводность, поэтому мы будем пренебрегать им и считать, что время релаксации электронов (а следовательно и их подвижность) не изменяется при деформации*).

В главных осях эллипсоида тензор подвижности μ_{st} диагонален:

$$\mu_{st} = \mu_s \delta_{st},$$

где μ_s — главные значения тензора подвижности, одинаковые для всех эллипсоидов.

Электропроводность $\sigma_{\alpha\beta}^i$ носителей в i -м эллипсоиде в осях кристалла равна

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = e n_i \mu_{\alpha\beta}^i, \quad n_i = N_i e^{(\zeta - E_i)/kT}, \quad (34.21)$$

где n_i — концентрация носителей в одном эллипсоиде, одинаковая для всех эллипсоидов в недеформированном кристалле, $\mu_{\alpha\beta}^i$ — тензор подвижности носителей i -го эллипсоида в осях кристалла. Из (34.12) и (34.21) получим изменение электропроводности при деформации:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta} = \sum_i \Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = e \sum_i \Delta n_i \mu_{\alpha\beta}^i = -\frac{e n_i}{kT} \sum_i (\Delta E_i - \Delta\zeta) \mu_{\alpha\beta}^i.$$

Из условия постоянства концентрации найдем, что

$$\Delta n = -\frac{n_i}{kT} \sum_i (\Delta E_i - \Delta\zeta) = 0; \quad \Delta\zeta = \frac{1}{N_0} \sum_i \Delta E_i = \Delta E_c,$$

где N_0 — число экстремумов. Тогда для относительного изменения электропроводности $\Delta\sigma_{\alpha\beta}/\bar{\sigma}$ получим

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\bar{\sigma}} = -\frac{1}{kT} \left(\frac{1}{N_0} \sum_i \frac{\Delta E_i}{\bar{\mu}} \mu_{\alpha\beta}^i - \Delta E_c \frac{\mu_{\alpha\beta}}{\bar{\mu}} \right), \quad (34.22)$$

где $\bar{\mu} = \frac{1}{3} \text{Sp} \mu_{\alpha\beta}^i$ — средняя подвижность носителей тока вблизи одного из эллипсоидов, одинаковая для всех эллипсоидов и совпадающая, таким образом, со средним значением подвижности в кристалле, $\mu_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_0} \sum_i \mu_{\alpha\beta}^i$ — тензор подвижности в недеформированном кристалле. В невырожденной зоне ΔE_i равно:

$$\Delta E_i = \sum_{\gamma\delta} D_{\gamma\delta}^i \varepsilon_{\gamma\delta}, \quad (34.23)$$

*) Вклад в эффекты пьезосопротивления за счет изменения междолинного рассеяния при деформации рассматривался в [32.2].

где $\varepsilon_{\gamma\delta}$ — компоненты тензора деформации в осях кристалла, а $D_{\gamma\delta}$ — тензор констант деформационного потенциала i -го эллипсоида в осях кристалла. Подставляя (34.23) в (34.22), получим выражение для тензора $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$:

$$m_{\alpha\beta, \gamma\delta} = -\frac{1}{kT} \left(\frac{1}{N_0} \sum_i \frac{\mu_{\alpha\beta}^i D_{\gamma\delta}^i}{\bar{\mu}} - \frac{\mu_{\alpha\beta}}{\bar{\mu}} \frac{1}{N_0} \sum_i D_{\gamma\delta}^i \right). \quad (34.24)$$

Выражение для $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ (34.24), записанное через компоненты подвижности и констант деформационного потенциала в осях кристалла, иногда удобнее переписать через главные значения подвижностей μ_s ($s=1, 2, 3$) и констант деформационного потенциала D_t ($t=1, 2, 3$) в главных осях каждого эллипсоида, x_t^i ($t=1, 2, 3$), так как эти величины одинаковы для всех эллипсоидов. Поскольку

$$\begin{aligned} \mu_{\alpha\beta}^i &= \sum_s \mu_s \cos(x_\alpha, x_s^i) \cos(x_\beta, x_s^i), \\ D_{\gamma\delta}^i &= \sum_t D_t \cos(x_\gamma, x_t^i) \cos(x_\delta, x_t^i), \end{aligned} \quad (34.25)$$

то из (34.24) для $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ получим

$$m_{\alpha\beta, \gamma\delta} = -\frac{1}{kT} \sum_{st} \frac{\mu_s D_t}{\bar{\mu}} (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} - R_{\alpha\beta}^s R_{\gamma\delta}^t), \quad (34.26)$$

где

$$\begin{aligned} R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} &= \frac{1}{N_0} \sum_i \cos(x_\alpha, x_s^i) \cos(x_\beta, x_s^i) \cos(x_\gamma, x_t^i) \cos(x_\delta, x_t^i), \\ R_{\alpha\beta}^s &= \frac{1}{N_0} \sum_i \cos(x_\alpha, x_s^i) \cos(x_\beta, x_s^i). \end{aligned} \quad (34.27)$$

Поскольку $R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st}$ и $R_{\alpha\beta}^s$ симметричны по перестановке внутри пары индексов, то и $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ (34.26) обладает требуемой симметрией (34.2) по перестановке индексов.

Величины $R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st}$ и $R_{\alpha\beta}^s$ удовлетворяют соотношениям

$$\sum_t R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} = R_{\alpha\beta}^s \delta_{\gamma\delta}, \quad \sum_s R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} = \delta_{\alpha\beta} R_{\gamma\delta}^t, \quad \sum_t R_{\gamma\delta}^t = \delta_{\gamma\delta}. \quad (34.28)$$

Формула (34.26) выражает компоненты тензора эластосопротивления через главные значения тензоров подвижности и констант деформационного потенциала в одном из экстремумов и через положения экстремумов в k -пространстве. Она упрощается в случае, когда эллипсоиды энергии являются эллипсоидами вращения.

Если за x_1 выбрать ось вращения эллипсоида, то $\mu_1 = \mu_{\parallel}$, $\mu_2 = \mu_3 = \mu_{\perp}$, $D_1 = D_{\parallel}$, $D_2 = D_3 = D_{\perp}$; используя соотношения (34.28), получим

$$m_{\alpha\beta, \gamma\delta} = -\frac{\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}}{\bar{\mu}} \left(\frac{D_{\parallel} - D_{\perp}}{kT} \right) (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{11} - R_{\alpha\beta}^1 R_{\gamma\delta}^1). \quad (34.29)$$

Как следует из (34.29), сдвиговые коэффициенты эластосопротивления пропорциональны анизотропии подвижности носителей в каждом экстремуме $(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp})/\bar{\mu}$ и константе деформационного потенциала $\Xi_u = D_{\parallel} - D_{\perp}$, которая определяет относительное смещение экстремумов при сдвиговой деформации.

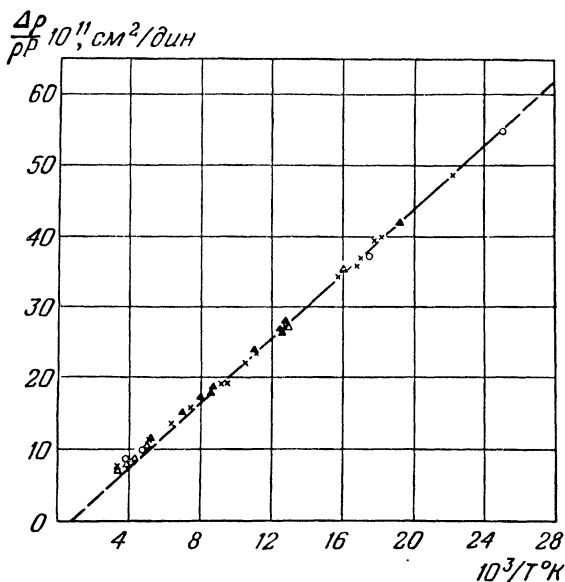


Рис. 41. Температурная зависимость пьезосопротивления в *n*-Ge при деформации по направлению [110] [32.2].

Для случая кубического кристалла при расположении экстремумов на осях [100] и [111] из (34.29) получим

$$\frac{m_{11} - m_{12}}{2} = -\frac{1}{2} \frac{1-K}{1+2K} \frac{\Xi_u}{kT}, \quad m_{44} = 0 \text{ — экстремумы на [100],} \quad (34.30)$$

$$\frac{m_{11} - m_{12}}{2} = 0, \quad m_{44} = -\frac{1}{3} \frac{1-K}{1+2K} \frac{\Xi_u}{kT} \text{ — экстремумы на [111],}$$

где $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ — анизотропия подвижности носителей тока в каждом экстремуме.

Таким образом, величина сдвиговых эффектов пьезосопротивления существенным образом определяется расположением экстремумов в *k*-пространстве.

Эти эффекты связаны с тем, что при деформации кристалла, нарушающей эквивалентность экстремумов, часть электронов «перетекает» из одного экстремума в другой (при сохранении их полной концентрации), и результирующая подвижность в деформированном кристалле становится анизотропной.

Определение экстремумов, эквивалентность которых нарушается при деформации, с точки зрения теории групп означает разложение неприводимой звезды вектора $\{\mathbf{k}\}$ в группе F на неприводимые звезды $\{\mathbf{k}\}$ в группе F' , в которую переходит группа F при деформации.

Эффекты пьезосопротивления, связанные с «перетеканием» носителей, имеют характерную температурную зависимость, которая определяется главным образом больцмановским множителем и, кроме того, температурной зависимостью анизотропии подвижности $(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp})/\bar{\mu}$. Величина эффектов пьезосопротивления порядка Ξ_u/kT , где Ξ_u — константа деформационного потенциала, обычно около 1—10 эв. Поэтому при не очень высоких температурах сдвиговые эффекты пьезосопротивления, связанные с «перетеканием» носителей, могут иметь значения 10^2 — 10^3 .

Как видно из рис. 41, где показано относительное изменение сопротивления n -Ge при деформации по оси [100], коэффициент пьезосопротивления π_{11} в n -Ge растет пропорционально $1/T$ в широком интервале температур и практически не зависит от концентрации носителей. Небольшое отступление от линейности при высоких температурах объясняется вкладом междолинного рассеяния.

Эффекты пьезосопротивления в полупроводниках с вырожденными зонами

Большие эффекты пьезосопротивления возникают и в случае вырожденных зон при деформациях, снимающих вырождение.

Рассмотрим вырожденную зону, имеющую s ветвей спектра $E_i(\mathbf{k})$ ($i=1, 2, \dots, s$). Если температура достаточно высока, то основная часть носителей тока находится в области, достаточно удаленной от точки вырождения, где поправки к энергии линейны по деформации. В этом случае изменение проводимости также пропорционально деформации.

Изменение электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}^i$ каждого сорта носителей в случае вырожденной зоны происходит как из-за изменения функции распределения f_0 , так и из-за изменения групповой скорости $\Delta v_{\alpha}^i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_i}{\partial k_{\alpha}}$, а также и вследствие изменения времени релаксации τ^i .

Как отмечалось в § 32, теория рассеяния носителей тока в вырожденной зоне является более сложной, чем в случае невырожденной зоны, так как при рассеянии возможны переходы как внутри, так и между различными ветвями спектра, при этом вероятности перехода имеют сложную угловую зависимость. Определение изменения времени релаксации $\Delta\tau$ является еще более сложной задачей, так как при деформации τ изме-

няется не только за счет изменения энергетического спектра носителей в начальном и конечном состоянии, но и за счет изменения матричного элемента рассеяния, связанного с изменением волновых функций при деформации.

Если вероятности перехода изотропны, то можно показать, что время релаксации также изотропно, зависит только от энергии и его изменение равно

$$\Delta\tau_i = \frac{\partial\tau_i}{\partial E} \Delta E_i. \quad (34.31)$$

В случае анизотропного рассеяния равенство (34.31), строго говоря, не справедливо, однако можно надеяться, что оно учитывает основную часть изменения времени релаксации при деформации, и мы будем использовать его при расчете эффекта пьезосопротивления в вырожденной зоне.

При расчете сдвиговых коэффициентов пьезосопротивления будем считать, что отличны от нуля только сдвиговые компоненты тензора деформации, а компоненты ϵ_{ij} , преобразующиеся по единичному представлению и определяющие сдвиг зоны как целого, равны нулю.

Покажем, что в этом случае

$$\sum_i \Delta E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}) = 0 \quad \text{и} \quad \int \Delta E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}) d\Omega_{\mathbf{k}} = 0, \quad (34.32)$$

где $d\Omega_{\mathbf{k}}$ — элемент телесного угла в \mathbf{k} -пространстве.

Действительно, поскольку $E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon})$ есть решение уравнения $|\mathcal{H}(\mathbf{k}) + \mathcal{H}(\boldsymbol{\epsilon}) - \mathbf{I}E(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon})| = 0$, где $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ и $\mathcal{H}(\boldsymbol{\epsilon})$ — матрицы, определяющие спектр в недеформированном кристалле и расщепление дна зоны при деформации, то

$$\sum_i E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}) = \text{Sp } \mathcal{H}(\mathbf{k}) + \text{Sp } \mathcal{H}(\boldsymbol{\epsilon}).$$

Разлагая $E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon})$ в ряд по $\boldsymbol{\epsilon}$, получим

$$\sum_i \Delta E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}) = \text{Sp } \mathcal{H}(\boldsymbol{\epsilon}) = 0.$$

Второе равенство (34.32) следует из того, что $\int \Delta E_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}) d\Omega_{\mathbf{k}}$ является инвариантной комбинацией компонент тензора деформации и, таким образом, пропорционально тем компонентам тензора деформации, которые мы положили равными нулю.

Из (34.32) следует, что

$$\Delta n = \sum_i \Delta n_i = \frac{\Delta\zeta}{kT} \sum_i n_i = n \frac{\Delta\zeta}{kT}.$$

В примесном полупроводнике в области истощения примеси $\Delta n = 0$ и, таким образом, $\Delta\zeta = 0$.

Используя (34.13), (34.31), получим изменение тензора электропроводности $\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i$ носителей i -й зоны:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{e^2}{kT} \left\{ \int \frac{\partial}{\partial E_i} (f_0 \tau_i) v_\alpha^i v_\beta^i \Delta E_i d\mathbf{k} + \frac{1}{\hbar} \int f_0 \tau_i \left(\frac{\partial \Delta E_i}{\partial k_\alpha} v_\beta^i + \frac{\partial \Delta E_i}{\partial k_\beta} v_\alpha^i \right) d\mathbf{k} \right\}.$$

Интегрируя по частям, найдем

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = - \frac{e^2}{kT} \left\{ \int \frac{\partial}{\partial E_i} (f_0 \tau_i) v_\alpha^i v_\beta^i \Delta E_i d\mathbf{k} + \frac{2}{\hbar^2} \int f_0 \tau_i \frac{\partial^2 E_i}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Delta E_i d\mathbf{k} \right\}. \quad (34.33)$$

Перейдем от переменных k_x, k_y, k_z к энергии E_i и углам θ, φ . Запишем E_i, v_α^i и $\frac{\partial^2 E_i}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$ в виде *)

$$E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*(\theta, \varphi)}, \quad v_\alpha^i = \frac{\hbar k}{m_i^*} \Lambda_\alpha^i(\theta, \varphi) = \frac{(2E_i)^{1/2}}{m_i^{*1/2}} \Lambda_\alpha^i(\theta, \varphi),$$

$$\frac{\partial^2 E_i}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{\hbar^2}{m_i^*(\theta, \varphi)} B_{\alpha\beta}^i(\theta, \varphi). \quad (34.34)$$

В квадратичном по k приближении m^*, Λ_α и $B_{\alpha\beta}$ зависят только от углов θ и φ . Из (34.34) следует, что

$$d\mathbf{k} = \frac{1}{2} dE_i E_i^{1/2} d\Omega_k \frac{(2m_i^*)^{3/2}}{\hbar^3},$$

и в (34.33) разделяется интегрирование по энергии E_i и по углам θ и φ :

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{e^2}{kT} \frac{2^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\infty f_0 \tau_i E_i^{1/2} dE_i \int d\Omega_k \left(\frac{3}{2} \Lambda_\alpha^i \Lambda_\beta^i \Delta E_i - B_{\alpha\beta}^i \Delta E_i \right). \quad (34.35)$$

Для $\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i/\bar{\sigma}$ получим

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i}{\bar{\sigma}} = \sum_i \frac{\langle \tau_i \rangle}{\langle \tau_i E_i \rangle} \frac{\bar{\sigma}_i}{\bar{\sigma}} \Gamma_{\alpha\beta}^i, \quad (34.36)$$

где

$$\langle \tau_i \rangle = \frac{\int_0^\infty f_0 \tau_i E_i^{1/2} dE_i}{\int_0^\infty f_0 E_i^{1/2} dE_i}$$

) В (34.34) эффективная масса $m^(\theta, \varphi)$ как для электронов, так и для дырок считается положительной. Это означает, что для валентной зоны в (34.33)–(34.35) E_i и ΔE_i означают энергию дырок, которая противоположна по знаку энергии электронов в валентной зоне.

— максвелловское среднее τ_i , а $\bar{\sigma}_i$ — средняя электропроводность носителей i -й зоны,

$$\bar{\sigma}_i = \frac{2}{3} \frac{e^2}{kT} \frac{\langle \tau_i E_i \rangle}{\bar{m}_i}; \quad (34.37)$$

$$\frac{1}{\bar{m}_i} = \frac{\int d\Omega_{\mathbf{k}} (\Lambda_{xi}^2 + \Lambda_{yi}^2 + \Lambda_{zi}^2) m_i^{*1/2}}{\int m_i^{*3/2} d\Omega_{\mathbf{k}}}; \quad (34.38)$$

$\bar{\sigma}$ — средняя электропроводность кристалла, $\bar{\sigma} = \sum_i \bar{\sigma}_i$. Величины $\Gamma_{\alpha\beta}^i$ пропорциональны константам деформационного потенциала:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^i = \frac{3 \int d\Omega_{\mathbf{k}} \Delta E_i m_i^{*1/2} ({}^{3/2} \Lambda_{\alpha}^i \Lambda_{\beta}^i - B_{\alpha\beta}^i)}{\int d\Omega_{\mathbf{k}} (\Lambda_{xi}^2 + \Lambda_{yi}^2 + \Lambda_{zi}^2) m_i^{*1/2}}. \quad (34.39)$$

Величина $\frac{\langle \tau \rangle}{\langle \tau E \rangle}$ определяется зависимостью $\tau(E)$. Если $\tau(E) \sim E^n$, то

$$\frac{\langle \tau \rangle}{\langle \tau E \rangle} = \frac{1}{kT} \frac{1}{n + 3/2}.$$

Сдвиговые коэффициенты пьезосопротивления в вырожденной зоне, как и в многодолинных полупроводниках, порядка D/kT , где D — константы деформационного потенциала.

Температурная зависимость эффектов пьезосопротивления в вырожденной зоне является более сложной. Она определяется как бoльцмановским множителем D/kT , так и температурным изменением механизмов проводимости, которые определяют средние $\frac{\langle \tau_i \rangle}{\langle E_i \tau_i \rangle}$, а также температурным изменением вклада носителей разного сорта в проводимость $\bar{\sigma}_i/\bar{\sigma}$.

Для дальнейших вычислений коэффициентов эластосопротивления $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ нужно определить коэффициенты $\Gamma_{\alpha\beta}^i$, что может быть сделано только в каждом конкретном случае, так как согласно (34.39) они зависят от вида спектра в недеформированном кристалле и от вида ΔE_i .

В общем случае, однако, можно утверждать, что большие коэффициенты пьезосопротивления в случае вырождения зон будут для тех сдвиговых деформаций, которые приводят к снятию вырождения зоны в точке экстремума, так как только для таких сдвиговых деформаций $\Delta E_i \neq 0$.

Из проведенного рассмотрения эффектов пьезосопротивления в многодолинных полупроводниках и в полупроводниках с вырожденными зонами следует, что большие сдвиговые коэффициенты эластосопротивления будут для тех деформаций, которые приводят к полному или частичному снятию вырождения

зонной структуры. С точки зрения теории групп это деформации, понижающие симметрию кристалла до такой, в которой представление $\mathcal{D}_V^{(k_0)}$ пространственной группы недеформированного кристалла, соответствующее звезде $\{k_0\}$ расположения экстремумов, становится приводимым в группе симметрии деформированного кристалла.

Рассмотрим эффекты пьезосопротивления в вырожденной зоне Γ_8 типа валентной зоны p -Ge и p -Si.

Для зоны Γ_8 интегралы по углам (34.39) в явном виде не вычисляются, в этом случае необходимы расчеты на электронно-вычислительных машинах. Расчеты могут быть проведены до конца, если поверхности постоянной энергии $E_{1,2}(\mathbf{k})$ тяжелых и легких дырок (24.13а) аппроксимировать некоторыми средними сферами:

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{1,2}^*}, \quad \text{где} \quad \frac{\hbar^2}{2m_{1,2}^*} = |A \pm \bar{B}|, \quad \bar{B} = \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}. \quad (34.40)$$

В этом приближении $\Lambda_\alpha = k_\alpha/k$, $B_{\alpha\beta}^{(1,2)} = \delta_{\alpha\beta}/m_{1,2}$, и из (34.35) и (30.34) для $\Delta E_{1,2}(\mathbf{k})$ получим сдвиговые коэффициенты пьезосопротивления для зоны Γ_8 :

$$\begin{aligned} \frac{m_{11} - m_{12}}{2} &= -\frac{9}{20} \frac{Bb}{\bar{B}} \left[\frac{\langle \tau_1 \rangle}{\langle \tau_1 E \rangle} \frac{\sigma_1}{\sigma_1 + \sigma_2} - \frac{\sigma_2}{\sigma_1 + \sigma_2} \frac{\langle \tau_2 \rangle}{\langle E \tau_2 \rangle} \right], \\ m_{44} &= -\frac{3}{20} \frac{Dd}{\bar{B}} \left[\frac{\langle \tau_1 \rangle}{\langle E \tau_1 \rangle} \frac{\sigma_1}{\sigma_1 + \sigma_2} - \frac{\sigma_2}{\sigma_1 + \sigma_2} \frac{\langle \tau_2 \rangle}{\langle E \tau_2 \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (34.41)$$

В (34.41) индексы 1 и 2 относятся к тяжелым и легким дыркам соответственно. Из (34.41) следует, что в зоне Γ_8 отличны от нуля обе сдвиговые компоненты $(m_{11} - m_{12})/2$ и m_{44} пьезосопротивления, причем из данных по эффектам пьезосопротивления можно определить знак только произведений Bb и Dd , но не самих констант деформационного потенциала b и d .

На рис. 42 показано изменение сопротивления в p -Ge при деформации по осям $[100]$ и $[111]$. Из рисунка видно, что хотя коэффициент пьезосопротивления существенно возрастает с понижением температуры, но температурный ход, в отличие от n -Ge и n -Si, заметно отличается от $1/T$. При этом величина π_{11} существенно зависит от концентрации носителей.

Как видно из рис. 43, подобная зависимость еще более заметно проявляется в p -Si, где коэффициент $m_{11} - m_{12}$ при понижении температуры меняет знак и проходит через минимум, причем при повышении концентрации положение точки, где $m_{11} - m_{12} = 0$, смещается в сторону более высоких температур. Такой ход объясняется изменением относительного вклада легких и тяжелых дырок, а также сложной температурной зависимостью величин $\frac{\langle \tau \rangle}{\langle \tau E \rangle}$ при наличии нескольких механизмов рассеяния. При этом для p -Si весьма существенную роль играет

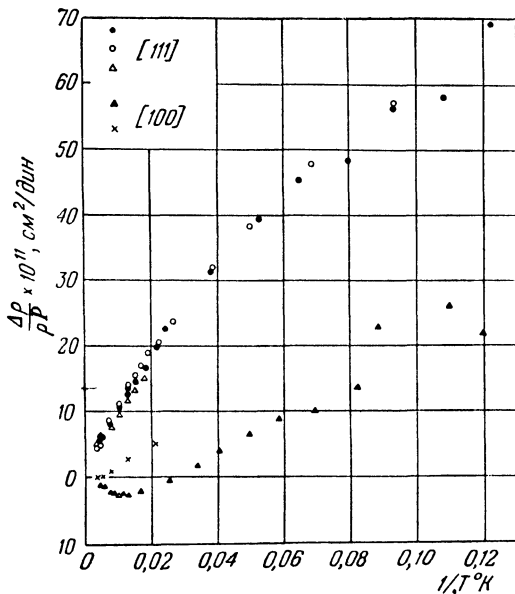


Рис. 42. Температурная зависимость пьезосопротивления в *p*-Ge [32.2].

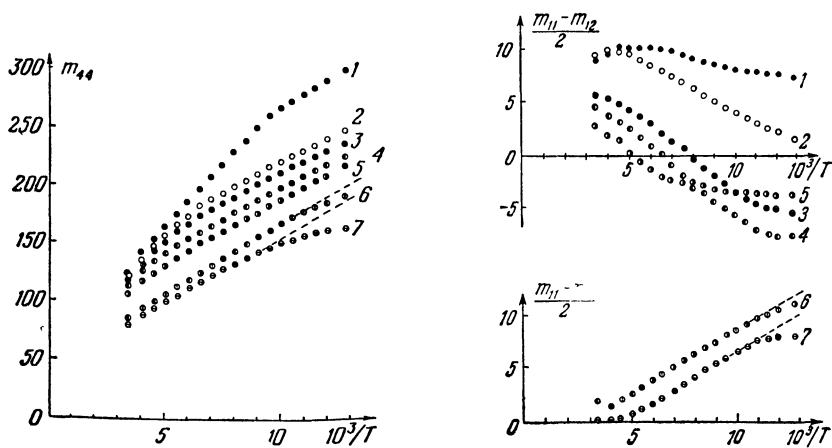


Рис. 43. Температурная зависимость коэффициентов пьезосопротивления в *p*-Si для образцов с различной концентрацией примесей [32.6]. Порядок номеров соответствует росту концентрации.

несферичность зоны, повышающая вклад легких дырок в коэффициент $m_{11} - m_{12}$ и понижающая их вклад в m_{44} .

Поскольку легкие дырки сильнее рассеиваются на примесях, чем тяжелые, то их вклад в электропроводность повышается при повышении температуры и уменьшении концентрации примеси, что и объясняет изменение знака коэффициента $m_{11} - m_{12}$ при повышении температуры [32.6]. При еще более высоких температурах существенный вклад вносит относительно большое изменение эффективной массы, определяемое уравнением (24.21), которое, как указано ниже, приводит к независимым от температуры деформационным эффектам.

Выше мы считали, что электронный (или дырочный) газ не вырожден. Нетрудно получить выражения для коэффициентов пьезосопротивления при учете фермиевского вырождения.

Учет фермиевского вырождения

В случае фермиевского вырождения электропроводность носителей тока для каждого эллипсоида или для каждого сорта носителей в вырожденной зоне равна:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau_{\alpha\beta} v_\alpha v_\beta d\mathbf{k}, \quad (34.42)$$

где f_0 — равновесная функция распределения Ферми

$$f_0 = \frac{1}{1 + e^{(E-\zeta)/kT}}, \quad (34.43)$$

а ζ — химический потенциал.

Выражение (34.13) отличается от (34.42) заменой $\partial f_0/\partial E$ на $-f_0/kT$. Повторяя все выкладки, приведшие к формуле (34.26), легко убедиться, что в случае произвольного вырождения электронов по-прежнему справедливы все полученные формулы для эффектов пьезосопротивления в многодолинных полупроводниках, если в соответствующих формулах (34.24) — (34.30) заменить $\mu_s/\bar{\mu}$ на произведение $(\mu_s/\bar{\mu})\lambda_s$, где $\mu_s/\bar{\mu}$ — отношение подвижностей при наличии вырождения:

$$\frac{\mu_s}{\bar{\mu}} = \frac{\int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_s^2 \tau_s d\mathbf{k}}{\frac{1}{3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \sum_{\alpha} v_\alpha^2 \tau_\alpha d\mathbf{k}}, \quad (34.44)$$

а λ_s равно

$$\lambda_s = - \frac{kT \int_0^\infty \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} \tau_s v_s^2 d\mathbf{k}}{\int_0^\infty \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau_s v_s^2 d\mathbf{k}}. \quad (34.45)$$

Если $\tau_s(E) = \tau_s^0 E^n$, то

$$\lambda_s = - \frac{kT \int_0^{\infty} \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} E^{n+3/2} dE}{\int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial E} E^{n+3/2} dE}.$$

Интегрируя это выражение по частям и считая, что $n > -3/2$, как это имеет место в полупроводниках для известных механизмов рассеяния, получим:

$$\lambda = \begin{cases} \frac{1}{(1 + e^{-\zeta^*}) \ln(1 + e^{\zeta^*})} & \text{при } n = -1/2, \\ \frac{F_{n-1/2}(\zeta^*)}{F_{n+1/2}(\zeta^*)} & \text{при } n > -1/2. \end{cases} \quad (34.46)$$

В (34.46) $\zeta^* = \zeta/kT$ — приведенный химический потенциал, а

$$F_n(\zeta^*) = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{1 + e^{x-\zeta^*}}. \quad (34.47)$$

В случае невырожденной статистики, когда $e^{-\zeta^*} \gg 1$, имеем $F_n(\zeta^*) = e^{\zeta^*}$, $\lambda = 1$ и не зависит от характера зависимости времени релаксации от энергии. В случае сильного вырождения, когда $e^{\zeta^*} \gg 1$, коэффициенты эластосопротивления имеют порядок величины D/ζ , где D — сдвиговая константа деформационного потенциала, а ζ — величина химического потенциала. Таким образом, для вырожденного электронного газа величина эффектов пьезосопротивления уменьшается, существенно ослабляется и их температурная зависимость.

Повторяя соответствующие выкладки для случая вырожденных зон, легко убедиться, что для $\Delta\sigma_{\alpha\beta}/\bar{\sigma}$ справедлива формула (34.36), в которой отношение $\frac{\langle \tau_i \rangle}{\langle \tau_i E \rangle}$ заменяется на

$$\frac{\int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau E^{1/2} dE}{\int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau E^{3/2} dE} = \begin{cases} \frac{1}{kT} \frac{1}{(1 + e^{-\zeta^*}) \ln(1 + e^{\zeta^*})}, & n = -1/2, \\ \frac{1}{kT} \frac{1}{n + 3/2} \frac{F_{n-1/2}(\zeta^*)}{F_{n+1/2}(\zeta^*)}, & n > -1/2, \end{cases} \quad (34.48)$$

если $\tau \sim E^n$.

Как и в случае многодолинных полупроводников, при сильном вырождении коэффициенты эластосопротивления в вырожденной зоне имеют величину порядка D/ζ .

Уменьшение коэффициента пьезосопротивления и ослабление температурного хода с увеличением степени вырождения отчетливо видно из рис. 44, где показан температурный ход π_{44}

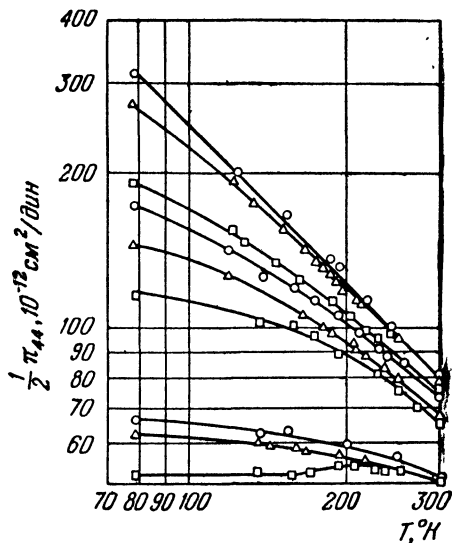


Рис. 44. Температурная зависимость пьезосопротивления в сильнолегированном n -Ge [32.10].

для образцов с разной концентрацией. Поскольку значение ζ при данной концентрации зависит от плотности состояний, т. е. от числа эквивалентных экстремумов N , то изменение π_{44} с концентрацией, как видно из рис. 45, должно быть различным для

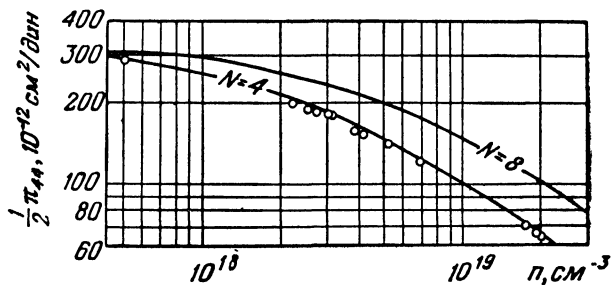


Рис. 45. Пьезосопротивление в сильнолегированном n -Ge, зависимость от концентрации носителей [32.10].

точки L , где $N=4$, и точки Λ , где $N=8$. Совпадение экспериментальных точек с кривой, рассчитанной для $N=4$, явилось одним из доказательств того, что в n -Ge экстремумы находятся на краю зоны Бриллюэна.

Нелинейные эффекты

Полученные выше выражения для сдвиговых коэффициентов пьезосопротивления, описывающие линейное по деформации изменение проводимости, справедливы при условии $\Xi_{\alpha\beta} \epsilon / kT \ll 1$ или $\Xi_{\alpha\beta} \epsilon / \zeta \ll 1$ (при $\zeta > kT$). Если деформация достаточно велика и эти условия не выполняются, то становятся существенными нелинейные по деформации эффекты. В случае многодолинных полупроводников нелинейные эффекты имеют простую природу. Когда энергетический зазор между различными эллипсоидами становится сравнимым с kT , для изменения концентрации носителей в каждой из долин уже не справедливо линейное приближение $\Delta n_i = n_i (\Delta \zeta - \Delta E_i) / kT$, на котором была основана линейная теория эффектов пьезосопротивления в многодолинных полупроводниках.

В случае произвольной по величине деформации для электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$ деформированного кристалла из (34.21) имеем для бoльцмановской статистики:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) = e \sum_i \mu_{\alpha\beta}^i n_i(\epsilon) = e e^{\zeta(\epsilon)/kT} \sum_i \mu_{\alpha\beta}^i e^{-\Delta E_i/kT}.$$

Химический потенциал в деформированном кристалле $\zeta(\epsilon)$ определяется из условия постоянства полной концентрации электронов

$$\sum_i n_i(\epsilon) = N n_0,$$

откуда

$$e^{\zeta(\epsilon)/kT} = \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_i e^{-\Delta E_i/kT}},$$

и для $\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$ получим

$$\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) = \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_i e^{-\Delta E_i/kT}} \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^i e^{-\Delta E_i/kT}, \quad (34.49)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}^i = en \mu_{\alpha\beta}^i$ — электропроводность носителей i -го эллипсоида.

Из (34.49) следует, что средняя электропроводность деформированного кристалла $\bar{\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{3} \text{Sp } \sigma(\epsilon)$ не зависит от деформации и равна электропроводности недеформированного кристалла $\bar{\sigma}(0) = \frac{1}{3} \text{Sp } \sigma(0)$.

Рассмотрим зависимость электропроводности от деформации в кубических полупроводниках с экстремумами на осях четвертого и третьего порядка, т.е. в полупроводниках с зонной структурой типа n -Si и n -Ge.

В случае n -Si при деформации по оси z^*)

$$\Delta E_1 = \Delta E_2 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \varepsilon - \frac{1}{3} \Xi_u \varepsilon'_{zz},$$

$$\Delta E_3 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \varepsilon + \frac{2}{3} \Xi_u \varepsilon'_{zz},$$

где $\varepsilon = \text{Sp } \varepsilon$, $\varepsilon'_{zz} = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}$.

В n -Ge, где имеются четыре долины в точке L , при деформации по направлению $[111]$, когда $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon'_{111}/3$, где $\varepsilon'_{111} = \varepsilon_{111} - \varepsilon_{110}$,

$$\Delta E_1 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \varepsilon + \frac{2}{3} \Xi_u \varepsilon'_{111},$$

$$\Delta E_2 = \Delta E_3 = \Delta E_4 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \varepsilon - \frac{2}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111}$$

(индекс 1 относится к экстремуму на оси $[111]$).

Из (34.49) для случая n -Si и n -Ge получим

$$\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp} = \frac{3\sigma_0}{1+2K} (1-K) \frac{n_1 - n_2}{n}, \quad \frac{\sigma_{\parallel} + 2\sigma_{\perp}}{3} = \sigma_0, \quad (34.50)$$

где σ_0 — электропроводность недеформированного кристалла, K — отношение подвижностей, $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$, а $(n_1 - n_2)/n$ — относительное изменение концентрации носителей тока в первом и втором эллипсоиде, n — полная концентрация носителей тока:

$$\frac{n_1 - n_2}{n} = \frac{e^{-\Delta E/kT} - 1}{2 + e^{-\Delta E/kT}}, \quad \Delta E = \Xi_u \varepsilon'_{zz} \quad (\text{экстремумы в точке } \Delta), \quad (34.51)$$

$$\frac{n_1 - n_2}{n} = \frac{e^{-\Delta E/kT} - 1}{3 + e^{-\Delta E/kT}}, \quad \Delta E = \frac{8}{3} \Xi_u \varepsilon_{111} \quad (\text{экстремумы в точке } L).$$

При малых деформациях, когда $|\Delta E/kT| \ll 1$, из (34.50) и (34.51) следует (34.30).

В случае больших деформаций, когда происходит полное опустошение одной из групп эллипсоидов, при $\Delta E/kT \gg 1$ для экстремумов в точке Δ отношение $(n_1 - n_2)/n = -1/2$; для экстремумов в точке L $(n_1 - n_2)/n = -1/3$; при $-\Delta E/kT \gg 1$ в обоих случаях $(n_1 - n_2)/n = 1$, т. е. все электроны собираются в первый эллипсоид. Предельные значения электропроводности

*) В n -Si имеется шесть эквивалентных экстремумов в точке Δ , но поскольку долины в точках k_0 и $-k_0$ одинаковым образом смещаются при деформации, можно рассматривать только три экстремума, расположенные на осях k_z , k_x и k_y соответственно.

в случае больших деформаций соответственно равны:

$$\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp} = -\frac{3\sigma_0(1-K)}{2(1+2K)} \quad \left(\text{при } \frac{\Delta E}{kT} \gg 1\right),$$

$$\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp} = \frac{3\sigma_0(1-K)}{1+2K} \quad \left(\text{при } -\frac{\Delta E}{kT} \gg 1\right) \text{ (точка } \Delta);$$
(34.52a)

$$\sigma_{\parallel}^{\uparrow} - \sigma_{\perp} = -\frac{\sigma_0(1-K)}{1+2K} \quad \left(\text{при } \frac{\Delta E}{kT} \gg 1\right),$$

$$\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp} = \frac{3\sigma_0(1-K)}{1+2K} \quad \left(\text{при } -\frac{\Delta E}{kT} \gg 1\right) \text{ (точка } L).$$
(34.52б)

Изменение сопротивления n -Ge при больших деформациях и низких температурах показано на рис. 46. Из кривых отчетливо видно, что при больших деформациях, когда все электроны перетекают в нижний из расщепившихся экстремумов, сопротивление перестает зависеть от деформации. Согласно формуле (34.52) предельное значение

$$\rho_0/\rho_{\text{насыщ}} = (\rho_0/\rho_{\parallel})_{\epsilon \rightarrow \infty}$$

равно $3/(1+2K)$; для n -Ge $m_{\parallel}/m_{\perp} = 20$ и при рассеянии на колебаниях решетки, когда $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp} = 1,24$, $(\rho_0/\rho_{\parallel})_{\epsilon \rightarrow \infty} = 0,09$, а при рас-

сеянии на ионизованных примесях $(\rho_0/\rho_{\parallel})_{\epsilon \rightarrow \infty} = 0,3$. Экспериментальное значение ρ_0/ρ_{\parallel} согласно рис. 46 равно 0,35—0,37, что указывает на преобладающую роль примесного рассеяния в этих условиях.

Нелинейные по деформации эффекты в вырожденной зоне имеют более сложную природу, так как в вырожденной зоне при больших деформациях происходит также и перестройка энергетического спектра вблизи точки вырождения зоны.

При таких деформациях, когда расщепление зоны, определяемое для зоны Γ_8 выражением (30.11), превышает среднюю энергию носителей тока, вклад в электропроводность дают носители только в нижней дырочной зоне из расщепившихся зон. При этом поверхности постоянной энергии в этой зоне для основной массы носителей являются эллипсоидами. Поэтому электропроводность в случае больших деформаций не зависит от величины деформации, а только от ее направления и знака

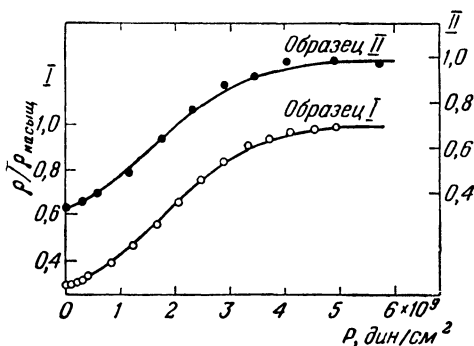


Рис. 46. Насыщение пьезосопротивления в n -Ge при большой деформации [32.9].

и определяется величиной эффективных масс эллипсоидов (определяемых соотношением (30.18) для зоны Γ_8) и механизмом рассеяния носителей тока.

На рис. 47 показано изменение подвижностей μ_{\parallel} и μ_{\perp} в p -Ge при растяжении по осям [100] и [111] при больших деформациях и низких температурах. Согласно этим данным, значение $K = (\sigma_{\perp}/\sigma_{\parallel})_{\epsilon \rightarrow \infty}$ равно соответственно 0,62 и 0,33, тогда как отношение эффективных масс m_{\parallel}/m_{\perp} для нижней из дырочных зон при растяжении по осям [100] и [111] и $bB > 0$ и $Dd > 0$ согласно (30.19), (30.20) равно соответственно 0,23 и 0,13. Следовательно, анизотропия времен релаксации $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}$ в данных условиях равна в обоих случаях 0,4, что указывает на существенную роль примесного рассеяния.

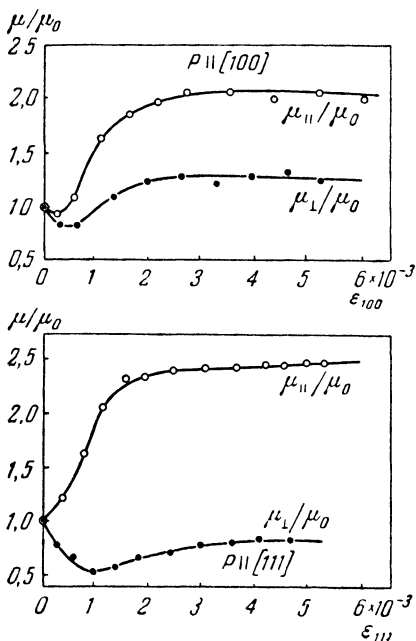


Рис. 47. Насыщение холловской подвижности в p -Ge при больших деформациях по направлениям [100] и [111] [32.4]. $T = 6,19^\circ \text{K}$.

деформированном кристалле (аналогичных константам A , B и D для зоны Γ_8), так и появление в матрице $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \mathbf{e})$ новых членов порядка ϵk^2 , отсутствующих в недеформированном кристалле. Относительное изменение при деформации эффективных масс и зонных констант, как показано в § 29, имеет порядок $D\epsilon/\bar{E}$, где D — константа деформационного потенциала, а \bar{E} — расстояние до ближайшей зоны, которая вносит вклад в соответствующую составляющую тензора эффективной массы или зонную константу. В соответствии с этим изменение эффективных масс и зонных констант дает вклад в эффекты пьезосопротивления порядка D/\bar{E} , что обычно значительно меньше сдвига-

Рассмотрим кратко вклад в эффекты пьезосопротивления, связанный с изменением эффективных масс при деформации.

Как обсуждалось в § 29, в случае невырожденной зоны при деформации в общем случае происходит изменение отличных от нуля компонент тензора эффективной массы, а также появление новых компонент тензора эффективной массы, равных нулю в недеформированном кристалле. В вырожденной зоне при деформации происходит как изменение констант, определяющих зону в не-

деформированном кристалле (аналогичных константам A , B и D для зоны Γ_8), так и появление в матрице $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \mathbf{e})$ новых членов порядка ϵk^2 , отсутствующих в недеформированном кристалле. Относительное изменение при деформации эффективных масс и зонных констант, как показано в § 29, имеет порядок $D\epsilon/\bar{E}$, где D — константа деформационного потенциала, а \bar{E} — расстояние до ближайшей зоны, которая вносит вклад в соответствующую составляющую тензора эффективной массы или зонную константу. В соответствии с этим изменение эффективных масс и зонных констант дает вклад в эффекты пьезосопротивления порядка D/\bar{E} , что обычно значительно меньше сдвига-

вых коэффициентов пьезосопротивления, которые имеют порядок D/kT .

Коэффициенты эластосопротивления, связанные с изменением эффективных масс при деформации, имеют, таким образом, меньшую величину и гораздо более слабую температурную зависимость, которая определяется главным образом изменением механизмов рассеяния. Изменение эффективных масс при деформации в общем случае дает вклад во все компоненты тензора эластосопротивления m_{ij} , которые для рассматриваемого кристалла отличны от нуля из-за соображений симметрии; в частности, они дают вклад и в объемные коэффициенты эластосопротивления.

Таким образом, коэффициенты пьезосопротивления, связанные с изменением эффективных масс при деформации, в общем случае нечувствительны к характеру зонной структуры.

В тех случаях, однако, когда в полупроводнике имеются близко расположенные зоны, например в случае полупроводников с малой шириной запрещенной зоны, в которых экстремумы расположены в одной точке зоны Бриллюэна (как в InSb), или при наличии близко расположенных спин-орбитально расщепившихся зон (как, например, в случае p -Si или в кристаллах типа PbSe, PbTe [34.6]), константы пьезосопротивления, связанные с изменением эффективных масс, могут быть значительны, достигая значений 10—20.

При этом такими относительно большими будут не все коэффициенты эластосопротивления, а только те из них, которые связаны со взаимодействием близко расположенных зон. Поэтому из экспериментальных данных по эффектам пьезосопротивления, связанным с изменением эффективных масс, можно в определенных случаях получить информацию о симметрии близко расположенных зон [34.6].

В заключение заметим, что поправки такого же порядка возникают и к большим коэффициентам пьезосопротивления при учете непараболичности зоны. Действительно, изменение эффективной массы с энергией вследствие непараболичности зоны для невырожденной статистики порядка

$$\frac{\delta m^*(E)}{m^*} \sim \frac{kT}{E},$$

что приводит к поправкам к большим эффектам пьезосопротивления порядка

$$\frac{D}{kT} \frac{kT}{E} \sim \frac{D}{E}.$$

Поэтому при учете таких поправок к большим эффектам пьезосопротивления нужно одновременно учитывать как изменение эффективных масс (или зонных параметров) при деформации, так и непараболичность зоны.

Наряду с изучением эффектов пьезосопротивления в ряде работ проводились теоретические и экспериментальные исследования влияния одноосной деформации на другие кинетические эффекты: эффект Холла [32.3], магнетосопротивление [32.3, 36.1], термоэдс [36.2, 36.3] и термомагнитные эффекты [36.5, 36.6, 36.7]. Эти тензоэффекты имеют такую же природу, как и эффект пьезосопротивления, и связаны с перетеканием носителей в случае многодолинного полупроводника или с изменением спектра в случае вырожденной зоны.

Изменение всех этих кинетических коэффициентов при деформации — того же порядка $D\varepsilon/kT$ (или $D\varepsilon/\zeta$ для вырожденного полупроводника), что и изменение электропроводности при деформации.

§ 35. ПОГЛОЩЕНИЕ И ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Одним из эффективных методов исследования полупроводников является изучение их оптических свойств. Оптические свойства кристалла описываются заданием комплексной проводимости $\tilde{\sigma}$. Вещественная часть $\tilde{\sigma}$ связана с коэффициентом поглощения света α .

В кубических кристаллах

$$\alpha = \frac{4\pi \operatorname{Re} \tilde{\sigma}(\omega)}{cn}, \quad (35.1)$$

где c — скорость света, n — показатель преломления. Мнимая часть $\tilde{\sigma}$ определяет вклад носителей тока в диэлектрическую проницаемость κ^e :

$$\kappa_{ik}^e = -\frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{ik}(\omega). \quad (35.2)$$

Диэлектрическая проницаемость $\kappa(\omega)$ определяет коэффициент преломления n . Если тензор κ анизотропен, то n зависит от направления распространения света, что приводит к явлению двойного лучепреломления света.

В области прозрачности кристалла этот эффект позволяет измерять весьма малую анизотропию диэлектрической проницаемости: с его помощью можно обнаружить анизотропию $\Delta\kappa \sim \lambda\alpha$, где λ — длина волны света.

В кубических кристаллах тензор κ изотропен: $\kappa_{ij} = \kappa_0 \delta_{ij}$. Деформация кристалла приводит к появлению анизотропной добавки $\Delta\kappa_{ij}$, что можно обнаружить по появлению двойного лучепреломления.

В линейном по деформации приближении изменение $\kappa_{\alpha\beta}$ определяется тензором четвертого ранга $\mathcal{P}_{\alpha\beta, \gamma\delta}$, подобным тензору m , определяющему изменение статической проводимости при

деформации (34.1), (34.2):

$$\Delta \kappa_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} \mathcal{P}_{\alpha\beta, \gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta}. \quad (35.3)$$

Из кинетического уравнения следует, что

$$\bar{\sigma}_{\alpha\beta}(\omega) = -e^2 \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_\alpha v_\beta \frac{\tau}{1 + i\omega\tau} dk. \quad (35.4)$$

При $\omega\tau \ll 1$ (35.4) переходит в выражение (34.42), определяющее статическую электропроводность $\sigma_{\alpha\beta}$. В оптической области, т. е. при $\omega\tau \gg 1$, для невырожденного полупроводника проводимость

$$\sigma_{\alpha\beta}^\infty = \frac{e^2}{kT\omega^2} \int \frac{f_0 v_\alpha v_\beta}{\tau} dk, \quad (35.5)$$

а вклад свободных носителей в диэлектрическую проницаемость $\kappa_{\alpha\beta}^e$, согласно (35.2) и (35.4), равен:

$$\kappa_{\alpha\beta}^e = -\frac{4\pi e^2}{\omega^2 kT} \int f_0 v_\alpha v_\beta dk. \quad (35.6)$$

Формула (35.5) справедлива при не очень больших частотах ω , меньших kT/\hbar . При $\hbar\omega > kT$ необходим квантовомеханический расчет коэффициента поглощения α , при этом нужно одновременно учитывать процессы поглощения и спонтанного и вынужденного излучения фотонов и рассеяние на фононах при примесях.

Для невырожденных зон формула (35.6), определяющая диэлектрическую проницаемость $\kappa_{\alpha\beta}^e$, справедлива при $\hbar\omega/E_g \ll 1$. При $\hbar\omega$, сравнимом с расстоянием между зонами E_g в точке экстремума k_0 , нужно учитывать вклад междузонных виртуальных переходов, что приводит к квантовым поправкам к κ порядка $(\hbar\omega/E_g)^2$ *). Для вырожденных зон при $\hbar\omega \geq kT$ становятся существенными виртуальные переходы между ветвями спектра, поэтому в этом случае надо учитывать междузонные компоненты оператора скорости. Таким образом, для вырожденных зон формула (35.6), как и (35.5), применима при $\hbar\omega \ll kT$.

Из формул (35.5) и (35.6) видно, что электропроводность $\sigma_{\alpha\beta}^\infty$ определяется видом энергетического спектра и характером релаксации носителей тока, а вклад электронов в диэлектрическую проницаемость κ^e определяется только их спектром.

Рассмотрим, как и в § 34, изменение σ^∞ и κ^e при деформации в двух случаях: при многодолинной зонной структуре и в случае вырожденной зоны.

*) Так, в случае простой двухзонной модели [39.10] при $\hbar\omega < E_g$

$$\kappa_{\text{кв}} = \frac{\kappa_{\text{кл}}}{1 - (\hbar\omega/E_g)^2},$$

где $\kappa_{\text{кл}}$ определяется выражением (35.7).

Многодолинная зонная структура

В многодолинном полупроводнике тензоры σ^∞ и κ^e есть суммы соответствующих тензоров по всем экстремумам. Основным эффектом, определяющим изменение σ^∞ и κ^e при деформации, является перетекание носителей между различными экстремумами. Как указывалось в § 34, изменения групповой скорости и времени релаксации при деформации, связанные с изменением эффективных масс и междолинного рассеяния, приводят в обычных условиях к гораздо меньшим изменениям σ^∞ и κ^e , и мы их учитывать не будем.

Согласно (35.5) и (35.6) для каждого эллипсоида компоненты σ^∞ и κ^e в главных осях эллипсоида определяются формулами

$$\begin{aligned}\sigma_s^\infty &= en_1\mu_s^\infty, \\ \kappa_s^e &= -\frac{4\pi e^2 n_1}{\omega^2 m_s},\end{aligned}\quad (35.7)$$

где n_1 — концентрация электронов в каждом эллипсоиде, μ_s^∞ и m_s — главные значения подвижности при $\omega\tau \gg 1$ и эффективной массы. Если учитывать только эффекты перетекания носителей, то для компонент тензоров $m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^\infty$ и $\mathcal{P}_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ справедливы формулы, подобные (34.24) и (34.26):

$$\begin{aligned}m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^\infty &= -\frac{1}{kT} \sum_{st} \frac{\mu_s^\infty D_t}{\bar{\mu}^\infty} (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} - R_{\alpha\beta}^s R_{\gamma\delta}^t), \\ \mathcal{P}_{\alpha\beta, \gamma\delta} &= \frac{4\pi e^2 n}{kT\omega^2 \bar{m}} \sum_{st} \frac{\bar{m} D_t}{m_s} (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st} - R_{\alpha\beta}^s R_{\gamma\delta}^t),\end{aligned}\quad (35.8)$$

где

$$\frac{1}{\bar{m}} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right),$$

$n = n_1 N_0$ — полная концентрация носителей тока, а $R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{st}$ и $R_{\alpha\beta}^s$ — коэффициенты, зависящие от положения экстремумов в k -пространстве и определяемые (34.27).

Если поверхности постоянной энергии вблизи каждого экстремума являются эллипсоидами вращения, то (35.8) переходят в формулы, аналогичные (34.29):

$$\begin{aligned}m_{\alpha\beta, \gamma\delta}^\infty &= -3 \frac{1 - K^\infty}{1 + 2K^\infty} \frac{\Xi_u}{kT} (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{11} - R_{\alpha\beta}^1 R_{\gamma\delta}^1), \\ K^\infty &= \frac{\mu_\perp^\infty}{\mu_\parallel^\infty}, \\ \mathcal{P}_{\alpha\beta, \gamma\delta} &= \frac{4\pi e^2 n}{\omega^2} \frac{m_\perp - m_\parallel}{m_\perp m_\parallel} \frac{\Xi_u}{kT} (R_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{11} - R_{\alpha\beta}^1 R_{\gamma\delta}^1).\end{aligned}\quad (35.9)$$

Для n -Si, у которого экстремумы находятся на осях [100],

$$\begin{aligned} \frac{m_{11}^{\infty} - m_{12}^{\infty}}{2} &= \frac{1}{2} \frac{1 - K^{\infty}}{1 + 2K^{\infty}} \frac{\Xi_u}{kT}, & m_{44}^{\infty} &= 0, \\ \frac{\mathcal{P}_{11} - \mathcal{P}_{12}}{2} &= \frac{2}{3} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \frac{m_{\perp} - m_{\parallel}}{m_{\perp} m_{\parallel}} \frac{\Xi_u}{kT}, & \mathcal{P}_{44} &= 0. \end{aligned} \quad (35.10)$$

Для n -Ge, у которого минимумы зоны проводимости находятся на осях [111],

$$\begin{aligned} m_{44}^{\infty} &= \frac{1}{3} \frac{1 - K^{\infty}}{1 + 2K^{\infty}} \frac{\Xi_u}{kT}, & \frac{m_{11}^{\infty} - m_{12}^{\infty}}{2} &= 0, \\ \mathcal{P}_{44} &= \frac{4}{9} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{m_{\perp} - m_{\parallel}}{m_{\perp} m_{\parallel}} \right) \frac{\Xi_u}{kT}, & \frac{\mathcal{P}_{11} - \mathcal{P}_{12}}{2} &= 0. \end{aligned} \quad (35.11)$$

Поскольку m , m^{∞} и \mathcal{P} определяются различными комбинациями величин m_i^* и τ_i , то одновременное измерение этих величин дает возможность определить по отдельности относительные эффективных масс и времен релаксации. Так, величина компонент тензора m зависит от анизотропии низкочастотной подвижности $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$, которая в случае, когда τ является тензором, равна отношению $m_{\parallel} \tau_{\perp} / m_{\perp} \tau_{\parallel}$. В компоненты m^{∞} входит отношение $K^{\infty} = \mu_{\perp}^{\infty} / \mu_{\parallel}^{\infty} = m_{\parallel} \tau_{\parallel} / m_{\perp} \tau_{\perp}$, а величина компонент тензора \mathcal{P} зависит только от анизотропии эффективных масс. Отметим, что в случае многоэллипсоидной модели феноменологические формулы (35.8) — (35.11) справедливы при любом соотношении $\hbar\omega$ и kT , но при $\hbar\omega > kT$ классическая формула для K^{∞} уже несправедлива.

Вырожденные зоны

Расчеты компонент тензоров m^{∞} и \mathcal{P} в случае вырожденной зоны не отличаются от соответствующих расчетов компонент тензора m , проведенных в § 34. Если, как и в § 34, предполагать, что время релаксации зависит только от энергии и его изменение при деформации описывается выражением (34.31), то $\Delta\sigma_{\alpha\beta}^{\infty} / \bar{\sigma}^{\infty}$ определяется формулой, подобной (34.36):

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}^{\infty}}{\bar{\sigma}^{\infty}} = \sum_i \frac{\langle 1/\tau_i \rangle}{\langle E/\tau_i \rangle} \frac{\bar{\sigma}_i}{\bar{\sigma}^{\infty}} \Gamma_{\alpha\beta}^i, \quad (35.12)$$

где $\Gamma_{\alpha\beta}^i$ определяется (34.39), $\bar{\sigma}_i^{\infty}$ — средняя проводимость носителей i -го сорта, а $\bar{\sigma}^{\infty} = \sum_i \bar{\sigma}_i^{\infty}$. Изменение диэлектрической проницаемости $\Delta\chi_{\alpha\beta}^{ei}$, которое зависит только от изменения

спектра при деформации, определяется формулой

$$\Delta \chi_{\alpha\beta}^e = - \frac{8\pi e^2}{3\omega^2 kT} \sum_i \frac{n_i}{\bar{m}_i} \Gamma_{\alpha\beta}^i, \quad (35.13)$$

где

$$\frac{1}{\bar{m}_i} = \frac{\int m_i^{*1/2}(\theta, \varphi) (\Lambda_{xi}^2 + \Lambda_{yi}^2 + \Lambda_{zi}^2) d\Omega_k}{\int m_i^{*3/2}(\theta, \varphi) d\Omega_k}; \quad (35.14)$$

Λ_{α} и $m_i^*(\theta, \varphi)$ определяются формулами (34.34).

Для зоны Γ_8 в кубических кристаллах в сферическом приближении (34.40) компоненты тензоров m^∞ и \mathcal{P} определяются формулами, подобными (34.41):

$$\frac{m_{11}^\infty - m_{12}^\infty}{2} = - \frac{9}{20} \frac{Bb}{\bar{B}} \left[\frac{\langle 1/\tau_1 \rangle}{\langle E/\tau_1 \rangle} \frac{\sigma_1^\infty}{(\sigma_1^\infty + \sigma_2^\infty)} - \frac{\langle 1/\tau_2 \rangle \sigma_2^\infty}{\langle E/\tau_2 \rangle (\sigma_1^\infty + \sigma_2^\infty)} \right],$$

$$m_{44}^\infty = - \frac{3}{20} \frac{Dd}{\bar{B}} \left[\frac{\langle 1/\tau_1 \rangle}{\langle E/\tau_1 \rangle} \frac{\sigma_1^\infty}{(\sigma_1^\infty + \sigma_2^\infty)} - \frac{\langle 1/\tau_2 \rangle}{\langle E/\tau_2 \rangle} \frac{\sigma_2^\infty}{(\sigma_1^\infty + \sigma_2^\infty)} \right], \quad (35.15)$$

$$\frac{\mathcal{P}_{11} - \mathcal{P}_{12}}{2} = \frac{6}{5} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \frac{m_1^{1/2} - m_2^{1/2}}{m_1^{3/2} + m_2^{3/2}} \frac{Bb}{\bar{B}kT},$$

$$\mathcal{P}_{44} = \frac{2}{5} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \frac{m_1^{1/2} - m_2^{1/2}}{m_1^{3/2} + m_2^{3/2}} \frac{Dd}{\bar{B}kT}. \quad (35.16)$$

В (35.15) и (35.16) индексы 1, 2 относятся к тяжелым и легким дыркам соответственно.

Выражения (35.8) — (35.16), определяющие изменение действительной и мнимой части диэлектрической проницаемости при деформации, получены для невырожденного электронного газа. При учете фермиевского вырождения, как и в случае эффектов пьезосопротивления, соответствующие формулы отличаются дополнительными множителями. Эти множители для многодолинной и вырожденной зоны определяются формулами (34.46) и (34.48) соответственно. При этом для высокочастотной проводимости в (34.46) и (34.48) n следует заменить на $-n$, поскольку в выражение для высокочастотной проводимости входит τ^{-1} . Для мнимой части диэлектрической проницаемости соответственно n следует положить равным нулю.

Нелинейные эффекты

Полученные формулы для изменения действительной и мнимой части высокочастотной проводимости, как и выражения для констант пьезосопротивления (34.24) и (34.36), справедливы при условии $\Xi_{u\varepsilon}/kT \ll 1$ (или $\Xi_{u\varepsilon} < \zeta$). При достаточно больших деформациях, когда эти условия перестают выполняться,

зависимость σ^∞ и κ^e от деформации становится нелинейной. В случае многодолинных полупроводников выражения для σ^∞ и κ^e могут быть получены при любом отношении $E_u e/kT$ по формуле, аналогичной (34.49).

Так, для n -Si и n -Ge $\sigma^\infty(\epsilon)$ и $\kappa^e(\epsilon)$ определяются формулами (34.50), в которых σ_0 и K следует заменить на σ_0^∞ и K^∞ для σ^∞ и на $-4\pi e^2 n/\omega^2 \bar{m}$ и $m_{||}/m_{\perp}$ для κ^e . Для κ^e получим таким образом при расположении экстремумов на осях [100] и [111]:

$$\Delta \kappa^e = \kappa_{||}^e - \kappa_{\perp}^e = -\frac{4\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{1}{m_{||}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right) \left(\frac{n_1 - n_2}{n} \right), \quad (35.17)$$

где $(n_1 - n_2)/n$ дается формулой (34.51).

В предельном случае больших деформаций $|\Delta E/kT| \gg 1$, когда все электроны собираются на нижних экстремумах, из (35.17) и (34.51) получим:

экстремумы в точке Δ :

$$\begin{aligned} \Delta \kappa^e &= \frac{2\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{1}{m_{||}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right) \quad \left(\text{при } \frac{\Delta E}{kT} \gg 1 \right), \\ \Delta \kappa^e &= -\frac{4\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{1}{m_{||}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right) \quad \left(\text{при } -\frac{\Delta E}{kT} \gg 1 \right); \end{aligned} \quad (35.18)$$

экстремумы в точке L :

$$\begin{aligned} \Delta \kappa^e &= \frac{4}{3} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{1}{m_{||}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right) \quad \left(\text{при } \frac{\Delta E}{kT} \gg 1 \right), \\ \Delta \kappa^e &= -\frac{4\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{1}{m_{||}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right) \quad \left(\text{при } -\frac{\Delta E}{kT} \gg 1 \right). \end{aligned} \quad (35.19)$$

Формулы (35.18) и (35.19) справедливы и в случае фермиевского вырождения при $\Delta E/\zeta \gg 1$.

В случае вырожденных зон нелинейные эффекты имеют более сложную природу. Мы рассмотрим здесь нелинейные эффекты для вырожденных зон типа валентной зоны Ge и Si. При этом мы ограничимся рассмотрением влияния деформации на диэлектрическую проницаемость, так как этот эффект не зависит от механизмов рассеяния и позволяет поэтому получить непосредственные сведения о зонной структуре.

Используя формулу (35.6) и общее выражение (30.5) для $E(\mathbf{k}, \epsilon)$ в деформированном кристалле, в принципе можно найти зависимость $\kappa^e(\epsilon)$ при произвольной величине деформации. Однако этот расчет может быть выполнен только численными методами. Поэтому мы ограничимся рассмотрением двух предельных случаев, когда можно получить явные выражения для зависимости $\kappa^e(\epsilon)$: случай малых деформаций $\Delta_e/kT \ll 1$, для которого мы найдем квадратичные по Δ_e/kT поправки к κ^e , и случай больших деформаций $|\Delta_e/kT| \gg 1$. В последнем случае

мы определим предельные значения при деформациях по направлениям [100] и [111] при $|\Delta_\varepsilon/kT| \rightarrow \infty$ и поправки к ним порядка kT/Δ_ε . Здесь $\Delta_\varepsilon = \delta E_{1,2}$ — расщепление зон при $k = 0$ (см. (30.11)).

Квадратичные эффекты. Из формулы (35.6) следует, что для расчета квадратичных по деформации эффектов надо учитывать как квадратичные по ε поправки к энергии $\Delta E^{(2)}(\varepsilon)$, так и квадраты линейной по ε поправки $\Delta E(\mathbf{k}, \varepsilon)$, определяемой соотношением (30.34). Кроме того, следует учитывать изменение химического потенциала $\Delta\zeta$, которое квадратично по деформации. Для квадратичной по деформации поправки $\Delta\chi_{\alpha\beta}^{(2)}$ таким образом будем иметь

$$\begin{aligned} \Delta\chi_{\alpha\beta}^{(2)} = & -\frac{4\pi e^2}{\omega^2 kT} \left\{ \int f_0 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta E}{kT} \right)^2 v_\alpha v_\beta - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left(\frac{\Delta E}{kT} \right) (v_\alpha \Delta v_\beta + v_\beta \Delta v_\alpha) + \Delta v_\alpha \Delta v_\beta \right] d\mathbf{k} + \right. \\ & \left. + \int f_0 \left(-\frac{\Delta E^{(2)}}{kT} v_\alpha v_\beta + \Delta v_\beta^{(2)} v_\alpha + \Delta v_\alpha^{(2)} v_\beta \right) d\mathbf{k} + \right. \\ & \left. + \frac{\Delta\zeta}{kT} \int f_0 v_\alpha v_\beta d\mathbf{k} \right\}, \quad (35.20) \end{aligned}$$

где

$$\Delta v_\alpha^{(2)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \Delta E^{(2)}}{\partial k_\alpha}.$$

Согласно (30.5)

$$\Delta E^{(2)} = \pm \left(\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_\varepsilon}{\sqrt{\mathcal{E}_k}} - \frac{1}{8} \frac{\mathcal{E}_{\varepsilon k}^2}{\mathcal{E}_k^{3/2}} \right). \quad (35.21)$$

Учитывая, что

$$\Delta E \Delta v_\alpha = \frac{1}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial k_\alpha} (\Delta E)^2,$$

интегрированием по частям выражение (35.20) приведем к виду

$$\begin{aligned} \Delta\chi_{\alpha\beta}^{(2)} = & -\frac{4\pi e^2}{\omega^2 kT} \left\{ -\frac{1}{2(kT)^2} \int f_0 (\Delta E)^2 v_\alpha v_\beta d\mathbf{k} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\hbar^2 kT} \int (\Delta E)^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} f_0 d\mathbf{k} + \int f_0 \Delta v_\alpha \Delta v_\beta d\mathbf{k} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{kT} \int f_0 \Delta E^{(2)} v_\alpha v_\beta d\mathbf{k} - \frac{2}{\hbar^2} \int f_0 \Delta E^{(2)} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} d\mathbf{k} + \frac{\Delta\zeta}{kT} \int f_0 v_\alpha v_\beta d\mathbf{k} \right\}. \quad (35.22) \end{aligned}$$

При расчете $\Delta\chi_{\alpha\beta}^{(2)}$, как и при вычислении линейных поправок, будем использовать сферическое приближение (34.40). В этом случае $\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \sim \delta_{\alpha\beta}$ и поэтому соответствующие слагаемые в (35.22) не приводят к анизотропии $\Delta\chi_{\alpha\beta}^{(2)}$. Первое слагаемое в $\Delta E^{(2)}$ в (35.21), как и член, пропорциональный $\Delta\zeta/kT$ в (35.22),

всегда дают изотропный вклад в $\Delta\kappa_{\text{эф}}^2$, поэтому при расчете анизотропных эффектов эти члены учитывать не надо.

Поскольку $\Delta E_1 = -\Delta E_2$, то слагаемые, пропорциональные $(\Delta E)^2$, дают в анизотропную составляющую вклад одинакового знака от легких и тяжелых дырок, а вклад от членов, пропорциональных $\Delta E^{(2)}$, имеет противоположный знак.

Для деформации по оси [001]

$$\mathcal{E}_e = b^2 e'_{zz}{}^2, \quad \mathcal{E}_{ek} = Bb(3k_z^2 - k^2) e'_{zz},$$

и в этом случае

$$\begin{aligned} \Delta\kappa_{\parallel}^{(2)} - \Delta\kappa_{\perp}^{(2)} &= \Delta\kappa_{zz}^{(2)} - \Delta\kappa_{xx}^{(2)} = \\ &= -\frac{48}{35} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2 (m_1^{3/2} + m_2^{3/2})} \left(\frac{bB e'_{zz}}{BkT} \right)^2 \left\{ m_1^{1/2} + m_2^{1/2} + \frac{\hbar^2}{12B} \left(\frac{1}{m_1^{1/2}} - \frac{1}{m_2^{1/2}} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (35.23)$$

Согласно (34.40) в сферическом приближении

$$\frac{\hbar^2}{B} = \frac{4m_1 m_2}{m_1 - m_2}.$$

Согласно (35.16) и (35.23) анизотропная составляющая диэлектрической проницаемости $\Delta\kappa = \Delta\kappa_{\parallel} - \Delta\kappa_{\perp}$ при малых деформациях с учетом линейных и квадратичных членов может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \Delta\kappa &= \Delta\kappa_{\parallel} - \Delta\kappa_{\perp} = \\ &= \frac{12}{5} \frac{\pi e^2 n}{\omega^2} \left(\frac{Bb e'_{zz}}{BkT} \right) \left(\frac{m_1^{1/2} - m_2^{1/2}}{m_1^{3/2} + m_2^{3/2}} \right) \left\{ 1 - \frac{4}{7} \frac{m_1 + m_2 + \frac{5}{3} m_1^{1/2} m_2^{1/2}}{m_1 - m_2} \left(\frac{Bb e'_{zz}}{BkT} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (35.24)$$

В (35.23) и (35.24) m_1 и m_2 — эффективные массы тяжелых и легких дырок соответственно.

При деформации по направлению [111] согласно (30.14) и (30.37)

$$\mathcal{E}_e = \frac{1}{3} d^2 e'_{z'z'}{}^2, \quad \mathcal{E}_{ek} = \frac{1}{3} Dd(3k_{z'}^2 - k^2) e'_{z'z'},$$

где ось z' направлена по [111]. Поэтому выражение для $\Delta\kappa$ в случае деформации по направлению [111] отличается от (35.24) заменой $Bb e'_{zz}$ на $\frac{1}{3} Dd e'_{z'z'}$.

Большие деформации. В предельном случае больших деформаций $\Delta_e/kT \gg 1$ поверхности постоянной энергии, как указано в § 30, являются эллипсоидами. Поэтому тензор $\kappa_{\text{эф}}^e$ в главных осях эллипсоида при $\Delta_e/kT \rightarrow \infty$ определяется формулой (35.7)

$$\kappa_s^e = -\frac{4\pi e^2 n}{\omega^2} \frac{1}{m_s}. \quad (35.25)$$

Эффективные массы m_s зависят от направления деформации и определяются выражениями (30.18). Для вычисления поправок к κ^e порядка kT/Δ_e нужно учесть в разложении $E(\mathbf{k}, \varepsilon)$ (30.21) члены δE порядка $k^4/\sqrt{\mathcal{E}_e}$, описывающие непараболичность образовавшейся при деформации зоны. Вклад в κ_s , связанный с этими членами, в соответствии с (35.6) равен:

$$\delta\kappa_s = -\frac{4\pi e^2}{\omega^2 kT} \left\{ -\int f_0 \left(\frac{\delta E - \Delta \zeta}{kT} \right) v_s^2 d\mathbf{k} + 2 \int f_0 v_s \Delta v_s d\mathbf{k} \right\}. \quad (35.26)$$

При не зависящей от деформации концентрации носителей $n = \int f_0 d\mathbf{k}$ изменение химического потенциала

$$\Delta \zeta = \frac{1}{n} \int f_0 \delta E d\mathbf{k}.$$

Интегрируя второе слагаемое в (35.26) по частям и учитывая, что для эллипсоидальной поверхности постоянной энергии

$$\int f_0 v_s^2 d\mathbf{k} = (n/m_s)kT,$$

получим

$$\delta\kappa_s = -\frac{4\pi e^2}{kT\omega^2} \left\{ \int f_0 v_s^2 \frac{\delta E}{kT} d\mathbf{k} - \frac{1}{m_s} \int f_0 \delta E d\mathbf{k} \right\}. \quad (35.27)$$

Согласно (30.21), (30.5) при деформации по направлению [100] имеем для нижней зоны дырок:

$$\delta E = -\frac{1}{8|be'_{zz}|} \left\{ 3B^2(k_x^4 + k_y^4) + 2(2D^2 - 3B^2)k_x^2 k_y^2 + \right. \\ \left. + 4D^2(k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2) \right\}. \quad (35.28)$$

Вычисление $\delta\kappa_s$ для δE , определяемого выражением, подобным (35.28), сводится к вычислению интегралов

$$I^{\alpha\beta\gamma} = \int f_0 k_x^\alpha k_y^\beta k_z^\gamma d\mathbf{k} = \\ = nm_1^{\alpha/2} m_2^{\beta/2} m_3^{\gamma/3} \left(\frac{2kT}{\hbar^2} \right)^{(\alpha+\beta+\gamma)/2} \frac{\Gamma\left(\frac{\alpha+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\beta+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\gamma+1}{2}\right)}{\Gamma^3(1/2)}, \quad (35.29)$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция. В результате расчета получим

$$\delta\kappa_{\parallel} = \frac{8\pi e^2 n m_{\perp}}{\omega^2 \hbar^4} \frac{kTD^2}{|be'_{zz}|}, \\ \delta\kappa_{\perp} = \frac{4\pi e^2 n}{\omega^2 \hbar^4} \frac{kT}{|be'_{zz}|} \left\{ (D^2 + 3B^2) m_{\perp} + D^2 m_{\parallel} \right\}. \quad (35.30)$$

Отсюда, учитывая (35.25) и (30.19), для анизотропной части диэлектрической проницаемости $\kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e$ при $|be'_{zz}| > kT$ получим

$$\Delta\kappa^e = \kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e = \frac{6\pi e^2 n}{\omega^2 m} \gamma |B_0| \left\{ 1 + \frac{kT}{6mbB_0 e'_{zz}} [m_{\perp} (D_0^2 - 3B_0^2) - D_0^2 m_{\parallel}] \right\}, \quad (35.31)$$

где

$$\gamma = \frac{Bbe'_{zz}}{|Bbe'_{zz}|},$$

а B_0 , D_0 — безразмерные величины:

$$B = \frac{\hbar^2}{2m} B_0, \quad D = \frac{\hbar^2}{2m} D_0.$$

При деформации по оси [111] поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения с осью вращения по [111]. В системе координат (30.20а), связанной с главными осями эллипсоида, когда ось z направлена по [111], δE при деформации по [111] равно:

$$\delta E = \frac{-V\sqrt{3}}{8|de'_{z'z'}|} \left\{ (k_x^2 + k_y^2)^2 \left(B^2 + \frac{2}{3} D^2 \right) + 4k_z^2 (k_x^2 + k_y^2) \left(2B^2 + \frac{D^2}{3} \right) - 4\sqrt{2} k_z k_y \left(k_x^2 - \frac{1}{3} k_y^2 \right) (D^2 - 3B^2) \right\}. \quad (35.32)$$

Отметим, что последнее слагаемое в (35.32), зависящее от выбора осей k_x и k_y , не дает вклада в $\delta\kappa$, так как содержит нечетные степени k . В результате расчета получим

$$\begin{aligned} \delta\kappa_{\parallel} &= \frac{8\sqrt{3}\pi e^2 n}{\omega^2 |de'_{zz}|} m_{\perp} \frac{kT}{\hbar^4} \left(2B^2 + \frac{D^2}{3} \right), \\ \delta\kappa_{\perp} &= \frac{4\pi e^2 n \sqrt{3}}{|de'_{zz}| \omega^2} \frac{kT}{\hbar^4} \left\{ 2m_{\perp} \left(B^2 + \frac{2}{3} D^2 \right) + m_{\parallel} \left(2B^2 + \frac{D^2}{3} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (35.33)$$

откуда, учитывая (30.20), получим следующую формулу для анизотропной части диэлектрической проницаемости $\kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e$ при деформации по направлению [111]:

$$\begin{aligned} \Delta\kappa^e &= \kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e = \\ &= \frac{2\sqrt{3}\pi e^2 n |D_0| \gamma}{\omega^2 m_0} \left\{ 1 - \frac{kT}{2m_0 D_0 de'_{z'z'}} \left[m_{\parallel} \left(2B_0^2 + \frac{D_0^2}{3} \right) + 2m_{\perp} \left(\frac{D_0^2}{3} - B_0^2 \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (35.34)$$

где $\gamma = \frac{D de'_{zz}}{|D de'_{zz}|}$.

Подчеркнем, что расчет κ^e в случае больших деформаций выполнен без предположения о сферичности зоны в недеформи-

рованном кристалле. В сферическом приближении, т. е. при $D = \sqrt{3}B$, формулы (35.32) и (35.34) дают одинаковое значение $\Delta\kappa^e$ при одинаковом расщеплении зоны

$$\Delta_e = 2be'_{zz} = \frac{2d}{\sqrt{3}} e'_{z'z'}.$$

В полупроводниках с малой величиной спин-орбитального расщепления Δ (например, в *p*-Si) надо учитывать вклад в κ^e порядка Δ_e/Δ . При больших деформациях соответствующий вклад связан с изменением эффективных масс, определяемых формулами (30.24), (30.30) — (30.32а). С учетом этих поправок выражение для $\Delta\kappa^e$ при $\Delta_e \gg kT, \zeta$ имеет вид:

при деформации по [100] и $be'_{zz} > 0$

$$\Delta\kappa^e = \kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e = \frac{6\pi e^2 n |B_0| \gamma}{\omega^2 m} \left(1 + \frac{4}{\Delta} be'_{zz} \right); \quad (35.35)$$

при деформации по [111] и $de'_{111} > 0$

$$\Delta\kappa^e = \kappa_{\parallel}^e - \kappa_{\perp}^e = \frac{6\pi e^2 n |D_0| \gamma}{\omega^2 m \sqrt{3}} \left(1 + \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{de'_{111}}{\Delta} \right). \quad (35.36)$$

При $be'_{zz} < 0$ или $de'_{111} < 0$ линейные по ε поправки отсутствуют.

Влияние деформации на поглощение света и двойное лучепреломление наиболее подробно исследовались на *n*-Ge и *n*-Si. При анализе экспериментальных данных следует иметь в виду, что эти эффекты могут вызываться не только свободными электронами, но и решеткой и примесями, а также междузонными переходами электронов.

Так как коэффициент поглощения, связанный со свободными электронами α^e , в соответствии с (35.5) пропорционален λ^2 , то его можно определить, вычитая из экспериментально измеренного $\alpha(\lambda)$ предельное значение $\alpha(\lambda \rightarrow 0)$, которое можно определить, экстраполируя к нулю прямую $\alpha = f(\lambda^2)$.

На рис. 48 показан ход $\alpha^e(\varepsilon)/\alpha^e(0)$ для *n*-Ge, подвергнутого сжатию по направлению [111]. Свет распространялся вдоль этой же оси. Согласно (34.50) при таких условиях

$$\frac{\alpha^e(\varepsilon)}{\alpha^e(0)} = \frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_0} = 1 - \frac{1 - K^{\infty}}{1 + 2K^{\infty}} \frac{n_1 - n_2}{n}. \quad (35.37)$$

Теоретические кривые $\alpha^e(\varepsilon)/\alpha^e(0)$, построенные по этой формуле при $E_u = 18 \text{ эВ}$ и $K^{\infty} = 8$ и $K^{\infty} = \infty$, показаны на том же рисунке. Видно, что кривая, соответствующая $K^{\infty} = 8$, близка к экспериментальной. Так как для *n*-Ge отношение $m_{\parallel}/m_{\perp} = 20$, то этому значению K^{∞} соответствует $\tau_{\parallel}^{\infty}/\tau_{\perp}^{\infty} = 0,4$, тогда как отношение низкочастотных времен релаксации $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}$ равно 1,24 при рассеянии на колебаниях решетки и 4,5 при рассеянии на примесях. Причина такого расхождения в значениях анизотропии времен релаксации объясняется, по-видимому, тем, что при

частотах света ω , используемых в [37.1], условие применимости классической теории $\hbar\omega < \zeta$ не выполняется.

Как указывалось выше, измерение пьезопоглощения не дает возможности непосредственно определить константы деформационного потенциала, и в этом отношении более удобным является измерение двойного лучепреломления, вызываемого деформацией. Из этих экспериментов можно непосредственно определить тензор пьезооптических констант Q , связывающий изменение диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon$ с приложенным напряжением:

$$\Delta\kappa_{\alpha\beta} = \frac{\lambda n_0}{\pi} \sum_{\gamma\delta} Q_{\alpha\beta\gamma\delta} P_{\gamma\delta} \quad (35.38)$$

или

$$\Delta\kappa = \frac{\lambda n_0}{\pi} \mathbf{Q} \mathbf{P}. \quad (35.39)$$

Здесь λ — длина волны света в вакууме, $n_0 = n_0^{(1/2)}$ — показатель преломления в недеформированном кристалле.

Тензор Q связан с введенным ранее в (35.3) тензором \mathcal{P} , компоненты которого можно назвать эластооптическими константами, соотношением, подобным (34.10):

$$\mathcal{P} = \frac{\lambda n_0}{\pi} \mathbf{Q} \mathbf{C},$$

где \mathbf{C} — матрица упругих постоянных.

Если, как и в § 34, ввести двухкомпонентную запись для тензоров \mathcal{P} и Q , обозначив

$$\begin{aligned} \kappa_{xx} = \kappa_1, \quad \kappa_{xy} = \kappa_6, \quad \dots, \quad \mathcal{P}_{xxxx} = \mathcal{P}_1, \quad \mathcal{P}_{xy, xy} = \mathcal{P}_{66}, \dots, \\ Q_{xxxx} = Q_{11}, \quad 2Q_{xy, xy} = Q_{66}, \dots, \end{aligned}$$

то из последнего соотношения для кубических кристаллов получим выражения, подобные (34.11):

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{P}_{11} + 2\mathcal{P}_{12}}{3} &= \frac{\lambda n_0}{\pi} \frac{Q_{11} + 2Q_{12}}{3} (C_{11} + 2C_{12}), \\ \frac{\mathcal{P}_{11} - \mathcal{P}_{12}}{2} &= \frac{\lambda n_0}{\pi} \frac{Q_{11} - Q_{12}}{2} (C_{11} - C_{12}), \\ \mathcal{P}_{44} &= \frac{\lambda n_0}{\pi} Q_{44} C_{44}. \end{aligned} \quad (35.40)$$

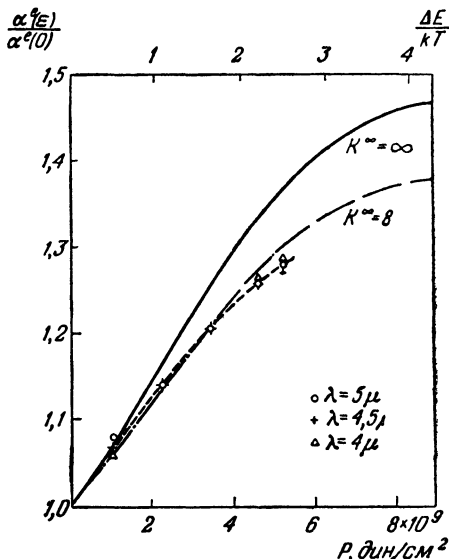


Рис. 48. Поглощение света свободными электронами в деформированном Ge [37.1]. Сплошная кривая — теоретическая.

Тензор Q обычно определяется по разности фаз двух пучков света, поляризованных в направлении, параллельном и перпендикулярном деформации. В кубических кристаллах при деформации по оси $[100]$ эта разность фаз, отнесенная к длине образца d , равна

$$\Delta\varphi/d = (Q_{11} - Q_{12}) P_{100}. \quad (35.41)$$

Аналогично при деформации по $[111]$

$$\Delta\varphi/d = Q_{44} P_{111}. \quad (35.42)$$

Для измерения разности фаз $\Delta\varphi$ обычно используется следующий метод: на образец направляется свет, линейно поляризованный под углом 45° к направлению деформации. На выходе ставится анализатор, пропускающий свет, поляризованный в плоскости, повернутой на 90° по отношению к плоскости поляризации падающего света. Тогда интенсивность света на выходе меняется с изменением сдвига фаз $\Delta\varphi$ по закону

$$I = I_0 \sin^2 (\Delta\varphi/2), \quad (35.43)$$

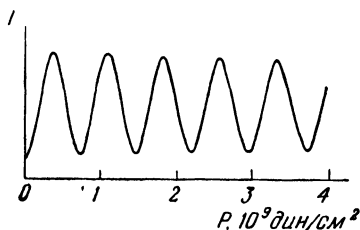


Рис. 49. Модуляция света при деформации Ge вследствие изменения диэлектрической проницаемости [38.3]. I — интенсивность света в произвольных единицах; $P \parallel [111]$, $T = 4,2^\circ \text{K}$, $\lambda = 2,1\mu$.

где I_0 — интенсивность падающего пучка.

На рис. 49 показано, как изменяется интенсивность пучка света, прошедшего через образец n -Ge, по мере его деформации.

Обычно вклад в $\Delta\chi$, связанный со свободными носителями χ^e , сравним с вкладом χ^M , связанным с междузонными переходами. Последний можно определить независимо, проводя измерения на чистых образцах. Однако наличие большой концентрации примесей может несколько изменить вероятности междузонных переходов. Поэтому междузонный вклад надежнее выделять, проводя измерение при больших деформациях, когда χ^e достигает насыщения.

На рис. 50 и 51 показан определенный таким образом ход $\frac{\Delta\varphi^e}{\lambda \, dn}$ от напряжения P , полученный при различных длинах волн λ и различной концентрации носителей n . Видно, что в соответствии с теорией $\Delta\varphi^e$ пропорционально концентрации примесей и растет линейно с увеличением λ .

Для определения из этих данных констант деформационного потенциала нужно достаточно точно знать концентрацию носителей. Эту концентрацию можно определять из значения $\Delta\chi^\infty$. Для Ge и Si, где значения эффективных масс хорошо известны, этот способ оказался более точным, чем эффект Холла. При

этом константы деформационного потенциала наиболее удобно определять по значению нагрузки P_0 , соответствующей пересечению прямой, являющейся продолжением начального

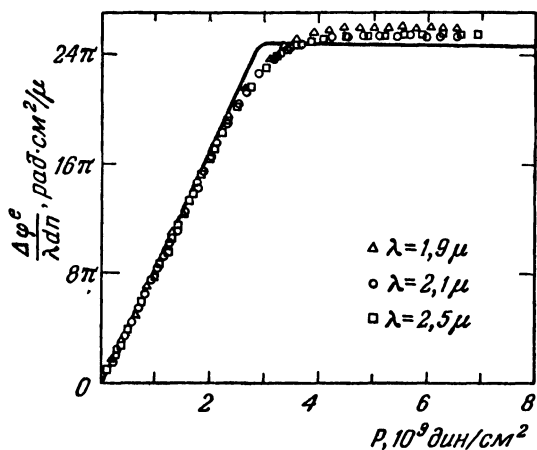


Рис. 50. Зависимость коэффициента двойного лучепреломления в n -Ge от деформации при различных длинах волн [38.3]. $n = 3,12 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (As), $T = 1,4^\circ \text{ K}$, $P \parallel [111]$.

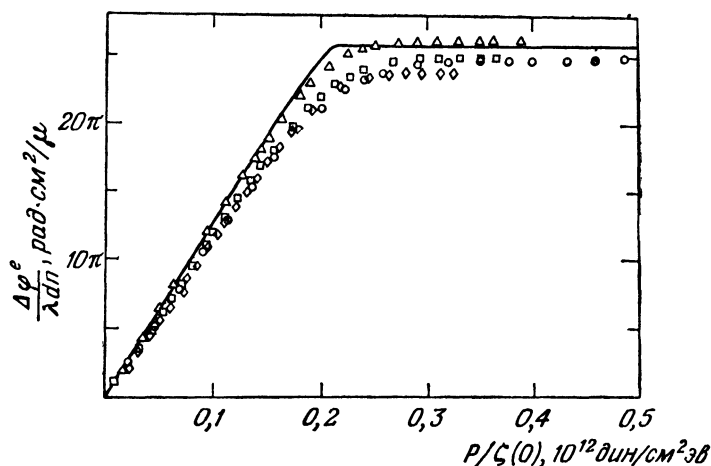


Рис. 51. Зависимость коэффициента двойного лучепреломления в n -Ge при различных концентрациях примеси [38.3]. $\zeta(0)$ — энергия Ферми при $P = 0$. Обозначения: кружки — $n = 1,24 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (As); квадраты — $n = 3,67 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (As); ромбы — $n = 7,14 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (As), треугольники — $n = 4,66 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (Sb).

линейного участка, и конечной прямой, соответствующей насыщению электронной части κ^e (рис. 52 и 53).

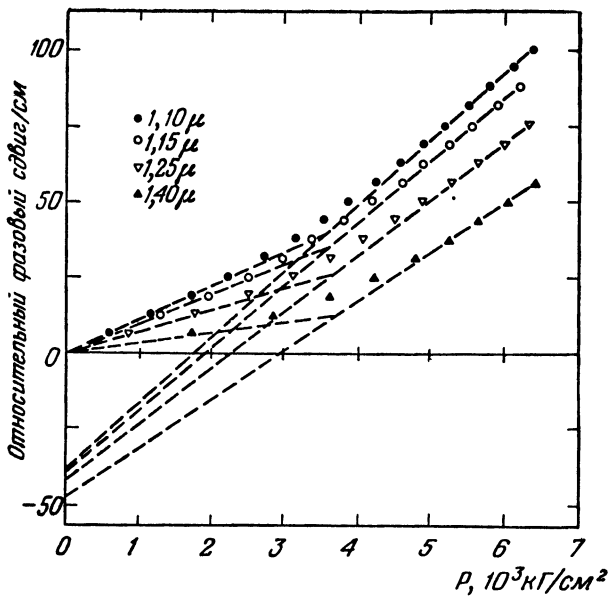


Рис. 52. Зависимость коэффициента двойного лучепреломления в *n*-Si ($\rho = 0,01 \text{ ом} \cdot \text{см}$) от деформации. $P \parallel [100]$, $T = 77^\circ \text{ К}$ [38.4].

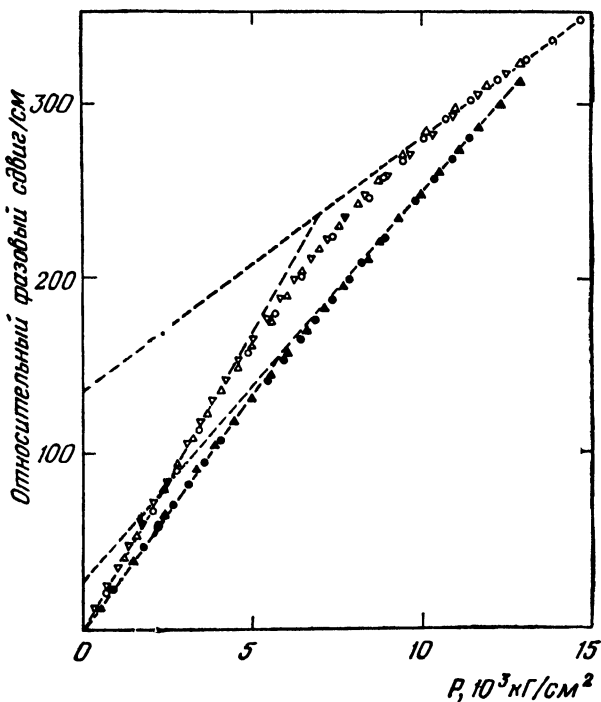


Рис. 53. Зависимость коэффициента двойного лучепреломления в *p*-Si ($\rho = 0,006 \text{ ом} \cdot \text{см}$) от деформации [38.4]. $P \parallel [111]$, $T = 77^\circ \text{ К}$, $\lambda = 1,15 \mu$.

Согласно (35.10), (35.11), (35.31) условие пересечения этих прямых имеет вид для n -Si при сжатии по [100]:

$$-\frac{3kT}{(S_{11} - S_{12})P_0\Xi_u} \frac{F_{1/2}}{F_{-1/2}} = 1. \quad (35.44)$$

Для n -Ge при сжатии по направлению [111]

$$-\frac{9kT}{S_{44}P_0\Xi_u} \frac{F_{1/2}}{F_{-1/2}} = 1. \quad (35.45)$$

Зная P_0 , из (35.44) и (35.45) можно определить Ξ_u . При таком методе концентрация необходима лишь для определения величины ζ в недеформированном кристалле, входящей в интегралы $F_{1/2}$ и $F_{-1/2}$. Этот метод удобен тем, что при его использовании нет необходимости непосредственно исключать междузонный вклад, так как положение точки P_0 не зависит от наличия линейного по деформации междузонного вклада.

Указанным способом определены значения констант деформационного потенциала: для германия $\Xi_u = 18,0 \pm 0,5$ эв, для кремния $\Xi_u = 8,5 \pm 0,4$ эв.

Двойное лучепреломление, возникающее при деформации, наблюдалось и на Ge и Si p -типа [38.4], [39.4]. Как видно из рис. 53, и в этом случае имеется начальный линейный участок, определяемый свободными носителями и междузонными переходами, и линейный участок, соответствующий большим ϵ , который в данном случае может вызываться не только междузонными переходами, но и изменением κ^e , связанным со сравнительно большими изменениями эффективных масс. Этот вклад определяется формулой (35.35) или (35.36). Согласно (35.35) и (35.36) отношение величин $\kappa_{(\epsilon \rightarrow \infty)}^e$ при деформациях [111] и [100] равно $D/\sqrt{3}B$.

Из-за большой анизотропии зонных констант и малой величины спин-орбитального расщепления для расчета начального линейного участка и нелинейной области для Si требуется учитывать несферичность зон и их непараболичность.

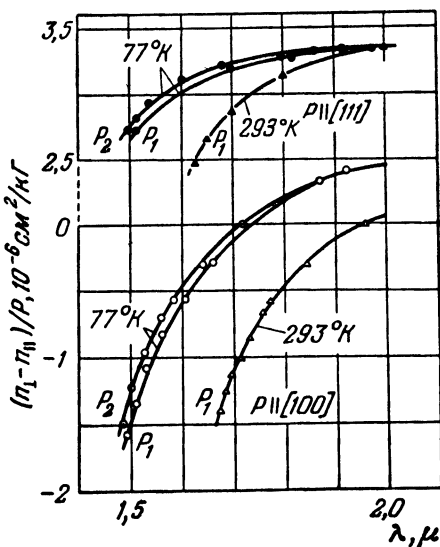


Рис. 54. Зависимость эластооптических постоянных в Ge [39.4] от длины волны света.

$$P_1 = 3000 \text{ кг/см}^2, P_2 = 6000 \text{ кг/см}^2.$$

§ 36. ПОГЛОЩЕНИЕ И ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ПРИ МЕЖДУЗОННЫХ ПЕРЕХОДАХ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Как указывалось в § 35, оптические свойства вещества полностью определяются тензором комплексной проводимости $\tilde{\sigma}$ или соответственно двумя вещественными тензорами: тензором проводимости $\sigma = \text{Re } \tilde{\sigma}$ и тензором диэлектрической проницаемости $\kappa = - (4\pi/\omega) \text{Im } \tilde{\sigma}$. Вклад в эти тензоры, связанный с междузональными переходами (а также с переходами между локальными уровнями), с учетом пространственной дисперсии определяется выражениями [39.1] *):

$$\sigma_{\alpha\beta}^m(\omega, \mathbf{q}) = - \frac{\pi}{\hbar\omega\mathcal{V}} \sum_{m, n \neq m} F_m^0 \{ j_{mn}^\alpha(-\mathbf{q}) j_{nm}^\beta(\mathbf{q}) \delta(\omega - \omega_{mn}) - j_{nm}^\alpha(-\mathbf{q}) j_{mn}^\beta(\mathbf{q}) \delta(\omega + \omega_{mn}) \}, \quad (36.1a)$$

$$\kappa_{\alpha\beta}^m(\omega, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{\hbar\omega^2\mathcal{V}} \mathcal{P} \sum_{m, n \neq m} F_m^0 \left\{ \frac{j_{mn}^\alpha(-\mathbf{q}) j_{nm}^\beta(\mathbf{q})}{\omega - \omega_{mn}} - \frac{j_{nm}^\alpha(-\mathbf{q}) j_{mn}^\beta(\mathbf{q})}{\omega + \omega_{mn}} + \frac{j_{mn}^\alpha(0) j_{nm}^\beta(0) + j_{nm}^\alpha(0) j_{mn}^\beta(0)}{\omega_{mn}} \right\}. \quad (36.1б)$$

Здесь суммирование ведется по всем квантовым состояниям m и n . Для блоховских электронов эти индексы включают номер зоны, спиновые состояния и совокупность волновых чисел \mathbf{k} . В (36.1) F_m^0 — функция распределения:

$$F_m^0 = (e^{(-\zeta + E_m)/kT} + 1)^{-1},$$

ω — частота света, а \mathbf{q} — его волновой вектор, $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$. В (36.1б) \mathcal{P} означает главное значение интеграла.

Оператор тока \mathbf{j} с учетом спин-орбитального взаимодействия имеет вид **)

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}) = \frac{e}{2m} (\pi e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}\pi) - \frac{e^2}{cm} \mathcal{A}, \quad \mathbf{j}(0) = \frac{e\pi}{m} - \frac{e^2}{cm} \mathcal{A}, \quad (36.2)$$

где согласно (17.15)

$$\pi = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} [\sigma \nabla V].$$

*) При этом $\tilde{\sigma}(\omega, \mathbf{q})$ определено как отношение полного тока $\mathbf{j}(\omega, \mathbf{q})$, включающего ток намагничивания $\mathbf{j} = \text{rot } \mathbf{M}$, к полю электромагнитной волны $\mathcal{E} = \sqrt{\mu/\kappa} H$. Поэтому формулы (36.1) несправедливы при $\omega = 0$, когда надо отдельно вводить $\tilde{\sigma}$ и магнитную восприимчивость $\mu = 1 + 4\pi M/cH$ [39.1].

**) Учет пространственной дисперсии означает учет вклада в σ и κ квадрупольных и магнитодипольных переходов. Для междузональных переходов этими эффектами обычно можно пренебречь, так как даже если дипольные переходы в точке экстремума \mathbf{k}_0 запрещены, они становятся разрешенными при учете членов более высокого порядка по $\mathbf{k} = \mathbf{K} - \mathbf{k}_0$.

В многозонной модели, в которой оператор энергии имеет вид матрицы $\mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{k})$ (22.27), матрица оператора тока в этом же представлении равна

$$\mathbf{j}_{m'k, mk}(0) = e v_{m'k, mk} = \frac{e}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{m'm}(\mathbf{k}) \delta_{kk'}, \quad (36.3)$$

т. е., согласно (22.27),

$$j_{m'k, mk}^{\alpha} = \frac{e \pi_{m'm}^{\alpha}}{m} + \frac{e \hbar}{2m^2} \sum_{s\beta} k_{\beta} (\pi_{m's}^{\alpha} \pi_{sm}^{\beta} + \pi_{m's}^{\beta} \pi_{sm}^{\alpha}) \times \\ \times \left(\frac{1}{E_m - E_s} + \frac{1}{E_{m'} - E_s} \right). \quad (36.3a)$$

Как указывалось в § 22, эта формула справедлива при частотах $\hbar\omega$, малых по сравнению с расстояниями до других зон, не включенных в $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, так как при ее выводе пренебрегалось производными $\partial S/\partial t$. Поэтому для вырожденных зон ее можно использовать при $\hbar\omega \ll E_g$, а для многозонной модели — если $\hbar\omega$ намного меньше расстояния до других зон E_s , т. е. $\hbar\omega \ll \ll E_m - E_s, E_{m'} - E_s$. Так как для междузонных переходов $\hbar\omega \geq \gg E_g$, то это означает, что формула (36.3a) применима при $E_m - E_s \gg E_g$, когда $E_m - E_s \approx E_{m'} - E_s$. Если же это условие не выполняется, то вместо (36.3a) надо использовать точное выражение, которое можно получить из общей формулы (15.51), подставив туда $\mathcal{H}' = \hbar \mathbf{k} \pi / m$:

$$j_{m'k, mk}^{\alpha} = \frac{e \pi_{m'm}^{\alpha}}{m} + \frac{e \hbar}{m^2} \sum_{s\beta} k_{\beta} \left(\frac{\pi_{m's}^{\alpha} \pi_{sm}^{\beta}}{E_m - E_s} + \frac{\pi_{m's}^{\beta} \pi_{sm}^{\alpha}}{E_{m'} - E_s} \right). \quad (36.3b)$$

Видно, что первые члены в (36.3a) и (36.3b) одинаковы, тогда как вторые совпадают лишь при $E_g \ll E_s - E_m$. Формула (36.3b) применима при таких частотах, когда $|\hbar\omega - E_g| \ll \ll |E_g - E_m|$. В простейшем случае двухзонной сферической модели в соответствии с (26.34) и (26.35)

$$j^{\alpha} = e s \rho_y \sigma_{\alpha} + \frac{e \hbar}{m^*} \theta \rho_x (\sigma_{\alpha+1} k_{\alpha+2} + \sigma_{\alpha+2} k_{\alpha+1}), \quad (36.4)$$

где $\theta = A_1 m^* / \hbar^2$ — безразмерная константа. Аналогично для двухзонной эллипсоидальной модели

$$j^{\alpha} = e s_{\alpha} \rho_y \sigma_{\alpha} + \frac{e \hbar}{m^*} \rho_x (\theta_{\alpha+1} \sigma_{\alpha+1} k_{\alpha+2} + \theta_{\alpha+2} \sigma_{\alpha+2} k_{\alpha+1}). \quad (36.5)$$

Для двусосных эллипсоидов две из констант s_{α} и θ_{α} совпадают; например, при $m_{xx}^* = m_{yy}^*$ $s_x = s_y$ и $\theta_x = \theta_y$.

Если соответствующая группа волнового вектора содержит инверсию, то одна из констант s или θ обращается в нуль в зависимости от четности представлений, соответствующих обеим зонам; при отсутствии инверсии, например в кристаллах класса T_d , обе константы могут одновременно быть отличными от нуля.

При расчете влияния деформации на оптические явления надо учитывать, что деформация приводит к изменению σ и κ как вследствие изменения спектра, так и в результате изменения матричных элементов оператора тока j или скорости v .

Невырожденные зоны

Для невырожденных зон вблизи края поглощения, т. е. при $|\hbar\omega - E_g| \ll E_g$, основную роль играет сдвиг дна зон, тогда как изменение матричных элементов, так же как и изменение эффективных масс, можно не учитывать. Лишь в тех случаях, когда согласно правилам отбора дипольный переход в точке экстремума в недеформированном кристалле запрещен, а в деформированном кристалле вследствие понижения симметрии он становится разрешенным, необходимо учитывать изменение матричного элемента при деформации.

Если $|\hbar\omega - E_g|$ намного меньше, чем E_g и расстояния до других зон, то при расчете σ и κ можно не учитывать непараболичность зон, а также пренебречь вкладом всех других зон в κ .

Если переходы происходят между двумя невырожденными зонами, экстремумы которых находятся в одной точке k -пространства и главные оси эллипсоидов у них совпадают, то компоненты σ_{ss}^i и κ_{ss} для каждого из экстремумов в его главных осях согласно (36.1) и (36.2) определяются выражениями:

$$\sigma_{ss}^i = \frac{e^2 (\bar{m}_1 \bar{m}_2 \bar{m}_3)^{1/2}}{4\pi m^2 \hbar^3 \omega} P_s \times \begin{cases} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} & \text{при } \hbar\omega > E_g, \\ 0 & \text{при } \hbar\omega < E_g; \end{cases} \quad (36.6)$$

$$\kappa_{ss}^i = \frac{e^2 (\bar{m}_1 \bar{m}_2 \bar{m}_3)^{1/2}}{\hbar^3 \omega^2 m^2} P_s \times \left[2E_g^{1/2} - (\hbar\omega + E_g)^{1/2} - \begin{cases} 0 & \text{при } \hbar\omega > E_g \\ (E_g - \hbar\omega)^{1/2} & \text{при } \hbar\omega < E_g \end{cases} \right], \quad (36.7)$$

где

$$\frac{2}{\bar{m}_i} = \frac{1}{m_{ci}} + \frac{1}{m_{vi}}, \quad P_s = \sum_{\alpha_c, \alpha_v} |p_{s\alpha_c \alpha_v}|^2.$$

Здесь α_v и α_c означают совокупность спиновых состояний валентной зоны и зоны проводимости. При этом валентная зона предполагается полностью заполненной, а зона проводимости — пустой. Изменение σ_{ss}^i и κ_{ss}^i при деформации определяется изменением ширины запрещенной зоны E_g в точке k_0 : согласно (29.28)

$$\delta E_g^i = \sum_i E_{1i} e_{tt}, \quad (36.8)$$

где ϵ_{tt} — компоненты тензора деформации в главных осях экстремума, а $E_{1t} = D_{tc} - D_{tv}$ и соответственно

$$\delta\sigma_{ss}^i = -\frac{1}{2} \sigma_{ss}^i \frac{\delta E_g^i}{(\hbar\omega - E_g)^{1/2}}. \quad (36.9)$$

Аналогично (34.1), (35.3) введем тензоры $m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$ и $\mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$, определяющие изменение σ^M и χ^M при деформации:

$$\frac{\delta\sigma_{\alpha\beta}^M}{\sigma_0^M} = \sum_{\gamma\delta} m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M \epsilon_{\gamma\delta}, \quad \delta\chi_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} \mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta}^M \epsilon_{\gamma\delta}, \quad (36.10)$$

где

$$\sigma_0^M = \frac{1}{3} N_0 \text{Sp} \sigma_{ss}^i = \frac{N_0 e^2 (\bar{m}_1 \bar{m}_2 \bar{m}_3)^{1/2}}{4\pi m^2 \hbar^3 \omega} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} \bar{P}, \quad (36.11)$$

N_0 — число экстремумов, а $\bar{P} = \frac{1}{3} \sum_s P_s$. Компоненты $m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$ и $\mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$ определяются выражениями, подобными (35.9). Однако в отличие от (35.9) здесь не будет второго слагаемого, связанного в (35.9) с условием постоянства концентрации свободных носителей. Поэтому здесь будут отличны от нуля не только сдвиговые, но и объемный коэффициенты. Общие выражения для $m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$ и $\mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta}^M$ имеют вид

$$m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M = -\frac{1}{2(\hbar\omega - E_g)} \sum_{st} E_{1t} \frac{P_s}{\bar{P}} R_{\alpha\beta\gamma\delta}^{st}, \quad (36.12)$$

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta}^M = -\frac{e^2 (\bar{m}_1 \bar{m}_2 \bar{m}_3)^{1/2}}{2\hbar^3 \omega^2 m^2 (E_g - \hbar\omega)^{1/2}} \sum_{st} E_{1t} P_s R_{\alpha\beta\gamma\delta}^{st}. \quad (36.13)$$

Для кубических кристаллов объемные коэффициенты равны:

$$\frac{m_{11}^M + 2m_{12}^M}{3} = -\frac{E_{1g}}{2(\hbar\omega - E_g)} \quad (\hbar\omega > E_g) \quad (36.14)$$

$$\frac{\mathcal{P}_{11}^M + 2\mathcal{P}_{12}^M}{3} = -N_0 \frac{e^2 (\bar{m}_1 \bar{m}_2 \bar{m}_3)^{1/2} \bar{P}}{2\hbar^3 \omega^2 m^2} \frac{E_{1g}}{(E_g - \hbar\omega)^{1/2}} \quad (\hbar\omega < E_g), \quad (36.15)$$

где

$$E_{1g} = \frac{1}{3} \sum_t E_{1t}.$$

Если экстремум расположен в точке $\mathbf{k} = 0$, то сдвиговые коэффициенты в указанном приближении равны нулю: эти коэффициенты определяются только изменением эффективных масс и матричных элементов и в $\left| \frac{\hbar\omega - E_g}{E_g} \right|$ раз меньше объемного.

Сдвиговые коэффициенты для кристаллов, у которых экстремумы расположены в точке L (111) (например PbS, PbSe, PbTe), определяются выражениями, подобными (34.30):

$$m_{11}^M - m_{12}^M = 0, \quad m_{44}^M = -\frac{1}{6} \frac{P_{\parallel} - P_{\perp}}{P_{\parallel} + 2P_{\perp}} \frac{\Xi_u^c - \Xi_u^v}{(\hbar\omega - E_g)}, \quad (36.16)$$

$$\mathcal{P}_{11}^M - \mathcal{P}_{12}^M = 0, \quad \mathcal{P}_{44}^M = -\frac{1}{18} \frac{e^2 (\tilde{m}_{\parallel} \tilde{m}_{\perp}^2)^{1/2}}{\hbar^3 \omega^2 m^2} \frac{P_{\parallel} - P_{\perp}}{(E_g - \hbar\omega)^{1/2}} (\Xi_u^c - \Xi_u^v). \quad (36.17)$$

Аналогично при расположении экстремумов в точке X (100) для невырожденных зон

$$m_{44}^M = 0, \quad \frac{m_{11}^M - m_{12}^M}{2} = -\frac{1}{4} \frac{P_{\parallel} - P_{\perp}}{P_{\parallel} + 2P_{\perp}} \frac{\Xi_u^c - \Xi_u^v}{(\hbar\omega - E_g)}, \quad (36.18)$$

$$\mathcal{P}_{44}^M = 0, \quad \frac{\mathcal{P}_{11}^M - \mathcal{P}_{12}^M}{2} = -\frac{1}{12} \frac{e^2 (\tilde{m}_{\parallel} \tilde{m}_{\perp}^2)^{1/2}}{\hbar^3 \omega^2 m^2} \frac{P_{\parallel} - P_{\perp}}{(E_g - \hbar\omega)^{1/2}} (\Xi_u^c - \Xi_u^v). \quad (36.19)$$

В тех случаях, когда правила отбора запрещают дипольные переходы в точке экстремума при всех поляризациях и вероятность этих переходов пропорциональна k^2 , проводимость $\sigma_s \sim (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$. В этом случае изменение σ при деформации $\delta\sigma$, так же как и δk , не имеет особенности при $\hbar\omega \rightarrow E_g$ и

$$m_{\alpha\beta\gamma\delta}^M = -\frac{3}{2} \frac{1}{\hbar\omega - E_g} \sum_{st} E_{1t} \frac{\sigma_{ss}}{\bar{\sigma}_{ss}} R_{\alpha\beta\gamma\delta}^{st}, \quad \text{где } \bar{\sigma}_{ss} = \frac{1}{3} \sum_s \sigma_{ss}. \quad (36.20)$$

Если экстремум в кубическом кристалле расположен в точке $k = 0$ и зоны не вырождены, то, как указано выше, сдвиговые коэффициенты обуславливаются сравнительно малыми изменениями эффективных масс и матричных элементов, определяющих вероятность перехода. Однако если зона в точке $k = 0$ вырождена, то сдвиговые эффекты будут также большими.

Вырожденные зоны

В качестве примера рассмотрим зонную структуру, имеющуюся у большинства кристаллов III—V групп, а также у Ge, у которых валентная зона в точке Γ четырехкратно вырождена с учетом спина и соответствует представлению Γ_8 (или Γ_8^{\pm}), а зона проводимости в точке Γ вырождена лишь по спину и соответствует представлениям Γ_6 или Γ_7 (или Γ_6^{\mp} , Γ_7^{\mp}). Двухзонный гамильтониан $\mathcal{H}(k, e)$ для этих зон определяется таблицей 24.1 *) (стр. 303).

*) При $|\hbar\omega - E_g|$, превышающем или сравнимом со спин-орбитальным расщеплением Δ_{so} , надо учитывать как переходы из отщепившейся зоны, так и непараболичность валентной зоны. В этом случае вместо (36.21) надо использовать полный гамильтониан, построенный для всех трех зон, определяемый таблицей 24.1.

Следовательно, междузонные матричные элементы оператора скорости в этом случае равны (в базисе $Y_{1/2}^{1/2}$, $Y_{-1/2}^{1/2}$ и $Y_{3/2}^{3/2}$, $Y_{1/2}^{3/2}$, $Y_{-1/2}^{3/2}$, $Y_{-3/2}^{3/2}$)

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{\partial \mathcal{H}^M}{\partial p_x} = \frac{s}{2} \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 & -\sqrt{3} \\ i\sqrt{3} & 0 & i & 0 \end{vmatrix}, \\ v_y &= \frac{\partial \mathcal{H}^M}{\partial p_y} = \frac{s}{2} \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & i\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \\ v_z &= \frac{\partial \mathcal{H}^M}{\partial p_z} = \frac{s}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 2i & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (36.21)$$

где

$$s = \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Y_0^0 | \frac{p_z}{m} | Y_0^1 \rangle.$$

В приближении Кейне, когда учитывается взаимодействие только двух ближайших зон, $2m_n^* s^2 = E_g$, где m_n^* — эффективная масса электронов и легких дырок. В этом приближении согласно (24.6), (24.34)

$$A = B = \frac{D}{\sqrt{3}} = -\frac{\hbar^2}{2m_n^*}. \quad (36.22)$$

Для расчета σ и κ по формулам (36.1а) и (32.1б) надо перейти в представление (24.19), в котором внутризонная матрица (30.3), (24.12) диагональна. Далее можно просуммировать произведение $v_{mn}^\alpha v_{nm}^\beta$ по обоим состояниям зоны проводимости n и двум состояниям валентной зоны m , соответствующим легким или тяжелым дыркам с энергией $E_l(\mathbf{e}, \mathbf{k})$ ($l = 1, 2$). В результате найдем величины $\Theta_{\alpha\beta}^l = \sum_{mn} v_{mn}^\alpha v_{nm}^\beta$ при $\alpha = \beta$

$$\Theta_{\alpha\alpha}^l = \frac{s^2}{E_l - E_{l'}} \{ 2E_l - (L + M)k^2 + (L - M)k_\alpha^2 - (l + m)\varepsilon + (l - m)\varepsilon_{\alpha\alpha} \}; \quad (36.23a)$$

при $\alpha \neq \beta$

$$\Theta_{\alpha\beta}^l = \frac{3s^2}{E_l - E_{l'}} (Nk_\alpha k_\beta + n\varepsilon_{\alpha\beta}). \quad (36.23b)$$

Здесь $l \neq l'$. Из (36.23) следует, что в обозначениях (24.14) и (30.8)

$$\frac{1}{3} \text{Sp } \Theta^l = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \Theta_{\alpha\alpha}^l = s^2, \quad (36.24a)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha}^l - \Theta_{\beta\beta}^l = \frac{3s^2}{E_l - E_{l'}} [B(k_\alpha^2 - k_\beta^2) + b(\varepsilon_{\alpha\alpha} - \varepsilon_{\beta\beta})], \quad (36.24b)$$

$$\Theta_{\alpha\beta}^l = \frac{\sqrt{3}s^2}{E_l - E_{l'}} (Dk_\alpha k_\beta + d\varepsilon_{\alpha\beta}). \quad (36.24b)$$

Подставив (36.24а) в (36.1), найдем, что в недеформированном кристалле

$$\sigma_0^M = \frac{e^2 s^2}{4\pi\omega\hbar^3} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} (\tilde{m}_1^{3/2} + \tilde{m}_2^{3/2}), \quad (36.25)$$

$$\begin{aligned} \kappa_0^M &= \frac{e^2 s^2 (\tilde{m}_1^{3/2} + \tilde{m}_2^{3/2})}{\hbar^3 \omega^2} \times \\ &\times \begin{cases} 2E_g^{1/2} - (E_g + \hbar\omega)^{1/2} & \text{при } \hbar\omega > E_g, \\ 2E_g^{1/2} - (E_g + \hbar\omega)^{1/2} - (E_g - \hbar\omega)^{1/2} & \text{при } \hbar\omega < E_g, \end{cases} \end{aligned} \quad (36.26)$$

где

$$\tilde{m}_{1,2}^r = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \tilde{m}_{1,2}^r(\theta, \varphi), \quad (36.27a)$$

$$\frac{2}{\tilde{m}_{2,1}(\theta, \varphi)} = \frac{1}{m} + \frac{2}{\hbar^2} (|A| \pm \bar{B}(\theta, \varphi)), \quad (36.27b)$$

$$\bar{B}(\theta, \varphi) = \left(B^2 + C^2 \frac{k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2}{k^4} \right)^{1/2}. \quad (36.27b)$$

Изменение σ^M и κ^M при всесторонней деформации определяется только изменением ширины запрещенной зоны: в этом случае в формулах (36.25) и (36.26) E_g надо заменить на $E_g + E_{1g} \epsilon$. Подставив (36.24б, в) в (36.1), найдем сдвиговые константы m^M и \mathcal{P}^M , описывающие изменение σ^M и κ^M при анизотропной деформации в линейном по ϵ приближении:

$$m_{11}^M - m_{12}^M = \frac{\sigma_{xx}^M - \sigma_{yy}^M}{\sigma_0^M \epsilon'_{xx}} = \frac{3}{2} \frac{b}{\hbar\omega - E_g} \frac{\Phi_1}{\tilde{m}_1^{3/2} + \tilde{m}_2^{3/2}} \quad (\text{при } \hbar\omega > E_g), \quad (36.28)$$

$$m_{44}^M = \frac{\sigma_{xy}^M}{2\sigma_0^M \epsilon_{xy}} = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{d}{\hbar\omega - E_g} \frac{\Phi_2}{\tilde{m}_1^{3/2} + \tilde{m}_2^{3/2}}, \quad (36.29)$$

$$\mathcal{P}_{11}^M - \mathcal{P}_{12}^M = \frac{\kappa_{xx}^M - \kappa_{yy}^M}{\epsilon'_{xx}} = \frac{3}{2} \frac{e^2 s^2 b}{\hbar^3 \omega^2 (\hbar\omega - E_g)^{1/2}} \Phi_1, \quad (36.30)$$

$$\mathcal{P}_{44}^M = \frac{\kappa_{xy}^M}{2\epsilon_{xy}} = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{e^2 s^2 d}{\hbar^3 \omega^2 (\hbar\omega - E_g)^{1/2}} \Phi_2, \quad (36.31)$$

где

$$\Phi_1 = \frac{\hbar^2}{4\pi} \left\{ \int d\Omega \left[\frac{\bar{m}_1^{1/2}(\theta, \varphi) - \bar{m}_2^{1/2}(\theta, \varphi)}{\bar{B}(\theta, \varphi)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{2} \frac{B^2 k_x^2 (k_x^2 - k_y^2)}{\bar{B}^3(\theta, \varphi) k^4} (\bar{m}_2^{1/2}(\theta, \varphi) - \bar{m}_1^{1/2}(\theta, \varphi)) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{4} \frac{B^2 k_x^2 (k_x^2 - k_y^2)}{\hbar^2 \bar{B}^2(\theta, \varphi) k^4} (\bar{m}_2^{3/2}(\theta, \varphi) + \bar{m}_1^{3/2}(\theta, \varphi)) \right] \right\}, \quad (36.32)$$

$$\Phi_2 = \frac{\hbar^2}{4\pi} \left\{ \int d\Omega \left[\frac{\bar{m}_1^{1/2}(\theta, \varphi) - \bar{m}_2^{1/2}(\theta, \varphi)}{\bar{B}(\theta, \varphi)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{D^2 k_x^2 k_y^2}{\bar{B}^3(\theta, \varphi) k^4} (\bar{m}_2^{1/2}(\theta, \varphi) - \bar{m}_1^{1/2}(\theta, \varphi)) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} \frac{D^2 k_x^2 k_y^2}{\hbar^2 \bar{B}^2(\theta, \varphi) k^4} (\bar{m}_2^{3/2}(\theta, \varphi) + \bar{m}_1^{3/2}(\theta, \varphi)) \right] \right\}.$$

В сферическом приближении, когда константа $\bar{B}(\theta, \varphi)$ заменяется на независящую от углов константу

$$\bar{B} = \left[\frac{1}{5} (2B^2 + 3D^2) \right]^{1/2} = \frac{\hbar^2 (\bar{m}_1 - \bar{m}_2)}{4\bar{m}_1 \bar{m}_2},$$

эффективные массы \bar{m}_1 и \bar{m}_2 также не зависят от углов, а константы Φ_1 и Φ_2 равны:

$$\Phi_1 = \frac{2\bar{m}_1 \bar{m}_2}{\bar{m}_2^{1/2} + \bar{m}_1^{1/2}} \left(1 - \frac{1}{5} \frac{B^2}{\bar{B}^2} \right) + \frac{1}{10} \frac{B^2}{\bar{B}^2} (\bar{m}_1^{3/2} + \bar{m}_2^{3/2}), \\ \Phi_2 = \frac{2\bar{m}_1 \bar{m}_2}{\bar{m}_2^{1/2} + \bar{m}_1^{1/2}} \left(1 - \frac{1}{15} \frac{D^2}{\bar{B}^2} \right) + \frac{1}{30} \frac{D^2}{\bar{B}^2} (\bar{m}_1^{3/2} + \bar{m}_2^{3/2}). \quad (36.33)$$

В приближении Кейне, когда $\bar{m}_1 = 2m_c$, $\bar{m}_2 = m_c$ и $B = D/\sqrt{3} = \bar{B}$,

$$\Phi_1 = \Phi_2 = 1,7 m_c^{3/2}, \quad m_{11}^M - m_{12}^M = \frac{2\sqrt{3}b}{d} m_{44}^M = \frac{0,67b}{\hbar\omega - E_g}.$$

Приведенные выше формулы справедливы при таких частотах, когда $|\hbar\omega - E_g|$ существенно превышает расщепление зон, вызываемое деформацией*), с другой стороны, $|\hbar\omega - E_g|$ должно быть намного меньше E_g и Δ_{co} .

При достаточно больших деформациях вблизи края зоны при $|\hbar\omega - E_g| < \Delta_e$ справедливо обратное приближение — боль-

*) Разность $|\hbar\omega - E_g|$ должна также превышать энергию связи экситона, так как при выводе этих формул не учитывалось взаимодействие возбуждаемых светом электрона и дырки. Влияние деформаций на экситонный спектр будет рассмотрено в следующей главе.

ших деформаций. В этом случае согласно (36.24б, в) для верхней из расщепившихся p -зон при деформации ϵ_{xx}

$$\Theta_{xx} - \Theta_{yy} = \frac{3}{2} s^2 \gamma, \quad \text{где } \gamma = \frac{b\epsilon_{xx}}{|b\epsilon_{xx}|}; \quad (36.34)$$

при деформации ϵ_{xy}

$$\Theta_{xy} = \frac{\sqrt{3}}{2} s^2 \gamma, \quad \text{где } \gamma = \frac{d\epsilon_{xy}}{|d\epsilon_{xy}|}. \quad (36.35)$$

Подставив эти значения в (36.1), найдем, что в этом случае при деформации ϵ_{xx}

$$\sigma_{xx} - \sigma_{yy} = \frac{3e^2 (\bar{m}_{\parallel} \bar{m}_{\perp}^2)^{1/3} s^2}{8\pi\omega \hbar^3} \gamma (\hbar\omega - E_g(\epsilon))^{1/2}, \quad (36.36a)$$

при деформации ϵ_{xy}

$$\sigma_{xy} = \frac{\sqrt{3} e^2 (\bar{m}_{\parallel} \bar{m}_{\perp}^2)^{1/3} s^2}{2\pi\omega \hbar^3} \gamma (\hbar\omega - E_g(\epsilon))^{1/2}. \quad (36.36б)$$

Аналогично при $\Lambda_e > E_g - \hbar\omega > 0$ при деформации ϵ_{xx}

$$\kappa_{xx}^m - \kappa_{yy}^m = \frac{3}{2} \frac{e^2 (\bar{m}_{\parallel} \bar{m}_{\perp}^2)^{1/2} s^2 \gamma}{\hbar^3 \omega^2} \times \\ \times \{2E_g^{1/2}(\epsilon) - (\hbar\omega + E_g(\epsilon))^{1/2} - (E_g(\epsilon) - \hbar\omega)^{1/2}\}, \quad (36.37a)$$

при деформации ϵ_{xy}

$$\kappa_{xy}^m = \frac{\sqrt{3} e^2 (\bar{m}_{\parallel} \bar{m}_{\perp}^2)^{1/2} s^2 \gamma}{2\hbar^3 \omega^2} \times \\ \times \{2E_g^{1/2}(\epsilon) - (\hbar\omega + E_g(\epsilon))^{1/2} - (E_g(\epsilon) - \hbar\omega)^{1/2}\}. \quad (36.37б)$$

Здесь

$$\frac{2}{\bar{m}_l} = \frac{1}{m_{cl}} + \frac{1}{m_{vl}}.$$

Эффективные массы дырок вблизи края зоны, которые зависят от знака $bB\epsilon$ или $dD\epsilon$, приведены в § 30 (уравнения (30.18) — (30.20)); $E_g(\epsilon)$ — ширина запрещенной зоны с учетом ее изменения при деформации: $E_g(\epsilon) = E_g^0 + E_{1g}\epsilon - \mathcal{E}_g^{1/2}$.

Из приведенных выше формул видно, что знак эффекта как при малых, так и при больших деформациях определяется только знаком констант b и d (и знаком деформации), в отличие от эффектов, связанных со свободными носителями, знак которых определяется знаком произведений $bB\epsilon$ или $dD\epsilon$.

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ И ЭКСИТОНЫ

§ 37. СПЕКТР ПРИМЕСНОГО ЦЕНТРА В ДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ

В § 27 было показано, что в приближении эффективной массы уровни энергии и волновые функции мелкого примесного центра определяются уравнением (27.1), вид которого зависит от структуры зоны в точке экстремума. При деформации происходит изменение зонной структуры, что приводит к изменению энергии и волновых функций основного и возбужденных состояний мелкого примесного центра. В этом параграфе будет рассмотрено изменение при деформации состояний мелкого примесного центра в случаях различной зонной структуры: для невырожденной зоны, зоны со многими долинами и зоны, вырожденной в точке экстремума.

Невырожденные зоны

В невырожденной зоне при деформации происходит сдвиг края зоны ΔE и изменение эффективных масс. Поэтому в уравнении (27.1) для мелкого примесного центра появляются члены порядка ϵk^2 , описывающие изменение эффективной массы зонных носителей.

Сдвиг края зоны ΔE приводит лишь к соответствующему сдвигу энергии для всех состояний примесного центра и не изменяет, таким образом, энергии ионизации, отсчитываемой от края зоны. Изменение энергии ионизации E_i в этом случае связано только с изменением эффективных масс при деформации, оно порядка $\delta E_i/E_i \sim \Delta m^*/m^* \sim D\epsilon/E_g$. При анизотропной деформации, когда изменение эффективных масс анизотропно, может происходить снятие вырождения возбужденных состояний. Расщепление вырожденного уровня с энергией E_n , связанное с изменением эффективных масс, также порядка $E_n D\epsilon/E_g$.

Характер расщепления может быть определен обычным образом из соображений симметрии.

Зоны со многими экстремумами

Рассмотрим зону с несколькими экстремумами, в каждом из которых зона не вырождена. Как показано в § 27, в приближении эффективной массы основное состояние примесного центра

В этом случае вырождено с кратностью вырождения, равной числу экстремумов, а волновые функции являются произвольными комбинациями функций примесного центра $\Psi_l = \psi_{k_l} f^l$, соответствующих состояниям вблизи l -го экстремума. Здесь ψ_{k_l} — блоховская функция в l -м экстремуме, а $f^l(x)$ — плавная функция, удовлетворяющая уравнению (27.1).

Если не учитывать перекрытия (в k -пространстве) волновых функций, относящихся к разным экстремумам, то однородная деформация не приводит к перемешиванию состояний, относящихся к различным экстремумам, а только к сдвигу энергии состояния в каждом экстремуме на величину δE_l , которая, если не учитывать изменения эффективных масс при деформации, равна сдвигу зоны ΔE_l в точке экстремума. Поскольку разные экстремумы при деформации смещаются в общем случае по-разному, то деформация приводит к снятию многодолинного вырождения основного состояния примесного центра в той же мере, в какой она вызывает снятие вырождения дна зоны при деформации.

Рассмотрим в качестве примера донорные уровни в Si и в Ge. В Si в приближении эффективной массы основное состояние мелкого донорного центра шестикратно вырождено. При деформации по оси z , когда $\epsilon'_{zz} \neq 0$, уровни примесного центра, соответствующие экстремумам на оси k_z , сместятся на величину $\Delta E_3 = \frac{2}{3} \Xi_u \epsilon'_{zz}$, а для экстремумов на осях k_x и k_y — на величину $\Delta E_2 = -\frac{1}{3} \Xi_u \epsilon'_{zz}$. Таким образом, шестикратно вырожденное состояние расщепится на четырехкратно и двукратно вырожденные состояния, разделенные на величину $\Xi_u \epsilon'_{zz}$, равную расщеплению дна зоны проводимости при деформации.

В n -Ge, где основное состояние примесного центра четырехкратно вырождено, при деформации по направлению [111] состояние примесного центра, соответствующее экстремуму на оси [111], сместится на величину $\Delta E_1 = \frac{2}{3} \Xi_u \epsilon'_{111}$, а остальные три состояния сместятся на величину $\Delta E_2 = \Delta E_3 = \Delta E_4 = -\frac{2}{9} \Xi_u \epsilon'_{111}$ *), т. е. произойдет расщепление основного состояния на однократно и трехкратно вырожденные состояния с величиной расщепления, равной $\frac{8}{9} \Xi_u \epsilon'_{111}$. Такой характер расщепления примесного центра в многоэллипсоидной зоне имеет место только в приближении эффективной массы, когда не учитывается расщепление состояния примесного центра в недеформированном кристалле, связанное с отступлением от метода эффективной

*) Здесь и дальше мы опускаем член $(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u) \text{Sp } \epsilon$, который описывает одинаковое смещение всех уровней примесного центра.

массы. Как указывалось в § 27, учет этих поправок приводит к снятию многодолинного вырождения, характерного для метода эффективной массы.

Если эти поправки малы по сравнению с энергией ионизации, то соответствующие волновые функции могут быть получены на основании теоретико-групповых соображений в виде линейных комбинаций функций примесного центра, соответствующих каждой долине. В § 27 указаны такие правильные линейные комбинации функций для мелких доноров в Ge и Si (уравнения (27.20), (27.22)).

Для определения энергии основного состояния и волновых функций примесного центра в деформированном кристалле нужно диагонализировать матрицу возмущения, состоящего из деформации и поправок к методу эффективной массы, для всех состояний, вырожденных в приближении эффективной массы. При этом в базисе правильных функций, полученных при учете поправок к методу эффективной массы, матрица деформации уже не будет диагональной. Если расщепление дна зоны при деформации мало по сравнению с величиной химического сдвига, то можно отдельно рассматривать расщепление при деформации каждого из вырожденных уровней.

В представлении функций Ψ_l , в котором матрица деформации диагональна, матрица химического сдвига имеет недиагональные матричные элементы. Так, в случае n -Ge, согласно (27.22), матрица возмущения в представлении функций Ψ_l имеет вид *)

$$\begin{pmatrix} \Delta E_1 - \Delta/4 & -\Delta/4 & -\Delta/4 & -\Delta/4 \\ -\Delta/4 & \Delta E_2 - \Delta/4 & -\Delta/4 & -\Delta/4 \\ -\Delta/4 & -\Delta/4 & \Delta E_3 - \Delta/4 & -\Delta/4 \\ -\Delta/4 & -\Delta/4 & -\Delta/4 & \Delta E_4 - \Delta/4 \end{pmatrix}, \quad (37.1)$$

где $\Delta E_l(\epsilon)$ ($l = 1, 2, 3, 4$) — сдвиг зоны в l -м экстремуме, Δ — величина расщепления между триплетным и синглетным состояниями в недеформированном кристалле; при этом энергия отсчитывается от энергии триплетного состояния в недеформированном кристалле. Согласно (37.1) энергия E в деформированном кристалле определяется уравнением

$$\begin{aligned} & (\Delta E_1 - E)(\Delta E_2 - E)(\Delta E_3 - E)(\Delta E_4 - E) - \\ & - \frac{\Delta}{4} \{ (\Delta E_1 - E)(\Delta E_2 - E)(\Delta E_3 - E) + (\Delta E_1 - E)(\Delta E_2 - E)(\Delta E_4 - E) + \\ & + (\Delta E_1 - E)(\Delta E_3 - E)(\Delta E_4 - E) + (\Delta E_2 - E)(\Delta E_3 - E)(\Delta E_4 - E) \} = 0. \end{aligned} \quad (37.2)$$

*) За счет отступления от метода эффективной массы возникнет еще диагональная добавка к энергии, которая сдвигает все уровни на величину Λ . Ее мы здесь учитывать не будем.

В случае деформации по направлению [111]

$$\Delta E_1 = \frac{2}{3} \Xi_u \varepsilon'_{111}, \quad \Delta E_2 = \Delta E_3 = \Delta E_4 = -\frac{2}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111},$$

и из уравнения (37.2) получим

$$E_3 = E_4 = -\frac{2}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111} = -\frac{\Delta}{4} x, \quad (37.3)$$

$$E_{1,2} = \frac{\Delta}{2} \left\{ -1 + \frac{x}{2} \mp \sqrt{1 + x^2 + x} \right\}, \quad (37.4)$$

где

$$x = \frac{8}{9} \frac{\Xi_u \varepsilon'_{111}}{\Delta}.$$

На рис. 55 показана зависимость энергии примесного центра в n -Ge от величины x при различном знаке деформации.

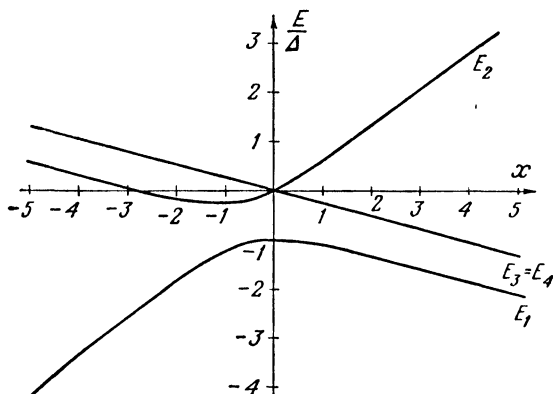


Рис. 55. Расщепление основного состояния донорного центра в Ge при деформации.

Из (37.4) следует, что при деформации происходит расщепление вырожденного состояния, при этом вырождение снимается не полностью.

При $\varepsilon'_{111} = 0$ термы E_2, E_3, E_4 совпадают, т. е. они соответствуют трехкратно вырожденному состоянию, а $E_1 = -\Delta$ соответствует синглетному состоянию примесного центра. При малых деформациях, когда $\left| \frac{8}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111} \right| \ll \Delta$,

$$E_1 = -\Delta, \quad E_2 = \frac{4}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111}. \quad (37.5)$$

При больших деформациях, когда вызываемое ими расщепление превосходит величину химического сдвига, $\left| \frac{8}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111} \right| \gg \Delta$, т. е. при $|x| \gg 1$,

$$E_{1,2} = -\frac{\Delta}{4} (2 \pm \gamma) + \frac{2}{9} \Xi_u \frac{\varepsilon'_{111}}{3} (1 \mp 2\gamma), \quad (37.6)$$

где

$$\gamma = \frac{x}{|x|} = \frac{\Xi_u e'_{111}}{|\Xi_u e'_{111}|}.$$

При $\gamma = 1$

$$E_1 = -\frac{3}{4}\Delta - \frac{2\Xi_u e'_{111}}{9}, \quad E_2 = -\frac{\Delta}{4} + \frac{2}{3}\Xi_u e'_{111}; \quad (37.7a)$$

при $\gamma = -1$

$$E_1 = -\frac{\Delta}{4} + \frac{2}{3}\Xi_u e'_{111}, \quad E_2 = -\frac{3}{4}\Delta - \frac{2}{9}\Xi_u e'_{111}. \quad (37.7б)$$

Используя матрицу (37.1), легко найти и волновые функции, соответствующие собственным значениям E_i , которые определяются коэффициентами разложения по функциям примесного центра вблизи каждого экстремума.

Для вырожденных состояний с энергией $E_3 = E_4$ две волновые функции могут быть выбраны в виде

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(010\bar{1}), \quad \Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}(01\bar{2}\bar{1})$$

или в виде любой их линейной комбинации. В качестве такой линейной комбинации иногда удобно выбрать функции

$$\Psi'_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_3 - i\Psi_4), \quad \Psi'_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_3 + i\Psi_4),$$

которые при повороте вокруг оси [111] на угол $2\pi/3$ умножаются на $e^{\pm 2\pi i/3}$ соответственно.

Для состояний с энергией E_1 и E_2 волновые функции равны

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3+\alpha^2}}(\alpha 111), \quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3+\beta^2}}(\beta 111), \quad (37.8)$$

где

$$\alpha = -1 - 2x + 2\sqrt{1+x+x^2}, \quad \alpha\beta = -3. \quad (37.8a)$$

При деформации по направлению [110]

$$\Delta E_1 = \Delta E_2 = \frac{1}{3}\Xi_u e'_{110}, \quad \Delta E_3 = \Delta E_4 = -\frac{1}{3}\Xi_u e'_{110},$$

$$e'_{110} = \varepsilon_{110} - \varepsilon_{1\bar{1}0} = 2\varepsilon_{xy},$$

где индексы 1, 2, 3 и 4 относятся к экстремумам на осях [111], [11 $\bar{1}$], [$\bar{1}$ 11] и [$\bar{1}$ 1 $\bar{1}$] соответственно, и из уравнения (37.2) получим

$$E_1 = \frac{1}{3}\Xi_u e'_{110}, \quad E_2 = -\frac{1}{3}\Xi_u e'_{110}, \quad (37.9)$$

$$E_{3,4} = -\frac{\Delta}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + \left(\frac{2}{3}\Xi_u e'_{110}\right)^2}.$$

При $\epsilon'_{110} = 0$ термы E_1, E_2, E_3 совпадают и соответствуют триплетному состоянию, а E_4 — синглетному.

Волновые функции примесного центра в деформированном кристалле при деформации по направлению [110] имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1\bar{1}00), & \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (001\bar{1}), \\ \Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\alpha^2)}} (\bar{\alpha}\bar{\alpha}11), & \Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\beta^2)}} (\beta\beta11), \end{aligned} \quad (37.10)$$

где

$$\alpha = x + \sqrt{1+x^2}, \quad \beta = \sqrt{1+x^2} - x, \quad x = \frac{2\Xi_u \epsilon'_{110}}{3}, \quad \alpha\beta = 1. \quad (37.11)$$

Рассмотрим теперь влияние деформации на основное состояние донорного центра в кремнии.

Будем отсчитывать уровни энергии в недеформированном кристалле от нижнего — синглетного состояния. Обозначим через Δ_1 и Δ_2 энергии триплетного и дублетного состояний. Тогда в представлении функций (27.20) матрица взаимодействия с деформацией имеет вид

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{3}(\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3) & \frac{1}{\sqrt{6}}(\Delta E_1 - \Delta E_2) & -\frac{1}{3\sqrt{2}}(2\Delta E_3 - \Delta E_1 - \Delta E_2) & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(\Delta E_1 - \Delta E_2) & \frac{\Delta E_1 + \Delta E_2}{2} + \Delta_1 & \frac{1}{2\sqrt{3}}(\Delta E_1 - \Delta E_2) & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3\sqrt{2}}(2\Delta E_3 - \Delta E_1 - \Delta E_2) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(\Delta E_1 - \Delta E_2) & \frac{\Delta E_1 + \Delta E_2}{6} + \frac{2}{3}\Delta E_3 + \Delta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta E_1 + \Delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta E_2 + \Delta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta E_3 + \Delta_1 \end{vmatrix} \quad (37.12)$$

Из (37.12) следует, что при деформации триплетные состояния смещаются на $\Delta E_1, \Delta E_2$ и ΔE_3 , что приводит в общем случае к снятию вырождения; правильные волновые функции триплетного уровня в деформированном кристалле определяются по-прежнему (27.20). При деформации по направлению [001] $\Delta E_1 = \Delta E_2 = -\frac{1}{3}\Xi_u \epsilon'_{zz}$, $\Delta E_3 = \frac{2}{3}\Xi_u \epsilon'_{zz}$, и из уравнения (37.12) получим для энергии состояний, происходящих из дублетных и синглетных уровней в недеформированном кристалле:

$$\begin{aligned} E_1 &= \Delta_2 - \frac{1}{3}\Xi_u \epsilon'_{zz}, \\ E_{2,3} &= \frac{\Xi_u \epsilon'_{zz}}{6} + \frac{\Delta_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Xi_u \epsilon'_{zz})^2 + \Delta_2^2 + \frac{2}{3}\Delta_2 \Xi_u \epsilon'_{zz}}. \end{aligned} \quad (37.13)$$

Состояния с энергией E_1, E_2 соответствуют дублетным, а состояние с энергией E_3 — синглетному состоянию недеформированного кристалла (при $\Delta_2 > 0$).

Состоянию с энергией E_1 соответствует волновая функция $\frac{1}{2}(11\bar{1}\bar{1}00)$, а состояниям с энергией E_2 и E_3 — функции

$$\begin{aligned}\Psi'_2 &= \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} (\alpha\Psi_1 + \Psi_3), \\ \Psi'_3 &= \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} (\Psi_1 - \alpha\Psi_3),\end{aligned}\tag{37.14}$$

где

$$\alpha = \frac{-2\sqrt{2}x/3}{1 + \frac{x}{3} + \sqrt{1 + x^2 + \frac{2}{3}x}}, \quad x = \frac{\Xi_u e'_{zz}}{\Delta_2},\tag{37.14a}$$

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(111111), \quad \Psi_3 = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\bar{1}\bar{1}\bar{1}\bar{1}22).$$

В случае деформации по оси $[110]$ отличны от нуля компоненты тензора деформации $e_{xx} = e_{yy}$, e_{zz} , e_{xy} , и поскольку сдвиговая деформация e_{xy} не влияет на положение экстремумов в Si, то для деформации по направлению $[110]$ справедливы формулы (37.13), (37.14), где $e'_{zz} = e_{zz} - e_{xx}$.

Возбужденные состояния мелкого примесного центра имеют значительно больший радиус, чем основное состояние, поэтому, как отмечалось в § 27, можно ожидать, что химический сдвиг для возбужденных состояний мал.

Если не учитывать химический сдвиг, то расщепление при деформации возбужденных состояний мелкого примесного центра совпадает с расщеплением дна зоны.

Вырожденные зоны

Для определения энергии и волновых функций примесного центра в вырожденной зоне нужно решать систему уравнений (27.1), в которой к оператору $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ (21.19) нужно добавить оператор $\mathcal{H}(\mathbf{e})$, определяющий расщепление дна зоны. Поэтому при деформации спектр и волновые функции примесного центра определяются системой уравнений

$$\sum_s \mathcal{H}_{is} f_s = E_i f_i, \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{k}) + V(r) + \mathcal{H}(\mathbf{e}).\tag{37.15}$$

В отличие от невырожденной зоны в этом случае при деформации существенно меняется спектр электронов в зоне вблизи экстремума, что приводит к значительной перестройке спектра примесного центра и волновых функций при больших деформациях, когда расщепление валентной зоны Δ_v становится сравнимым с энергией ионизации примеси E_i .

Точное решение уравнений (37.15) в случае вырожденной зоны при наличии деформации обычно нельзя получить в явном

виде при произвольной величине деформации. Поэтому ниже мы рассмотрим два предельных случая: малых деформаций $\Delta_e \ll E_i$ и больших деформаций, когда $\Delta_e \gg E_i$.

В случае малых деформаций оператор $\mathcal{H}(\epsilon)$ можно рассматривать как возмущение, поэтому расщепление вырожденного состояния примесного центра определяется матрицей возмущения $\mathcal{H}'(\epsilon)$ с матричными элементами

$$\mathcal{H}'_{ij}(\epsilon) = \sum_{st} \int f_s^{i*} \mathcal{H}_{st}(\epsilon) f_t^j dx = \sum_{st} \mathcal{H}(\epsilon)_{st} \int f_s^{i*} f_t^j dx, \quad (37.16)$$

вычисленными на медленных функциях примесного центра f^i с компонентами f_s^i (см. § 27).

Для основного состояния примесного центра, имеющего симметрию дна зоны, матрица $\mathcal{H}'(\epsilon)$ имеет такой же вид, как и матрица $\mathcal{H}(\epsilon)$ для зоны, отличаясь от нее лишь значением констант деформационного потенциала. Эти константы b' и d' в общем случае отличаются от b и d , они зависят от вида волновых функций и могут быть выражены через зонные константы b и d при помощи (37.16).

Рассмотрим константы деформационного потенциала для акцепторных состояний в Ge и Si.

Если в качестве f^i использовать вариационные функции (27.24) или (27.25), соответствующие приближению $\Delta \rightarrow \infty$ или $\Delta = 0$, где Δ — величина спин-орбитального расщепления валентной зоны, то для b' и d' получим (при $c_4 = 0$)

$$\begin{aligned} \Delta = 0: \quad b' &= \left(1 - \frac{3}{2} c_3^2\right) b, & d' &= \left(1 - \frac{c_3^2}{2}\right) d; \\ \Delta = \infty: \quad b' &= (c_1^2 - c_3^2) b, & d' &= \left(c_1^2 - c_2^2 - \frac{c_3^2}{3}\right) d. \end{aligned} \quad (37.17)$$

При указанных в табл. 27.3 и 27.5 (стр. 351 и 352) значениях констант, определяющих волновые функции для Ge и Si в (27.25) и (27.23), получим для b'/b и d'/d :

Таблица 37.1

		b'/b	d'/d
$\Delta = \infty$	Ge	0,56	0,61
	Si	0,77	0,82
$\Delta = 0$	Si, $B < 0$	0,84	0,93
	Si, $B > 0$	0,73	0,75

Как видно из таблицы, сдвиговые константы деформационного потенциала для примесного центра b' и d' могут существенно отличаться от констант b и d , совпадая с ними лишь

в том случае, когда в (27.23) $c_2 = c_3 = 0$. Константа деформационного потенциала a' всегда равна a , если не учитывать в матрице $\mathcal{H}(\epsilon, \mathbf{k})$ членов порядка ϵk^2 . В общем случае это справедливо для всех констант деформационного потенциала, которые не приводят к расщеплению зоны в точке экстремума.

Следует отметить, что отношение констант деформационного потенциала для зоны и примесного центра существенно зависит от вида функций, поэтому трудно оценить точность оценок b'/b и d'/d , приведенных в табл. 37.1.

Таким образом, расщепление примесного уровня при деформации определяется такой же формулой, как и расщепление дна зоны, если в ней заменить зонные константы деформационного потенциала на соответствующие константы примесного центра. Волновые функции примесного центра в деформированном кристалле являются линейными комбинациями функций основного состояния, диагонализующими матрицу $\mathcal{H}'(\epsilon)$. Так, для p -Ge и p -Si эти линейные комбинации определяются формулами (24.19), если в них заменить $k_\alpha k_\beta$ на $\epsilon_{\alpha\beta}$ и $B \rightarrow b'$, $D \rightarrow d'$.

В случае больших деформаций, когда расщепление дна зоны при деформации Δ_ϵ больше, чем энергия ионизации E_i примесного центра, для определения спектра примесного центра следует сначала диагонализировать матрицу $\mathcal{H}(\epsilon)$ в уравнении (37.15). В новом представлении матрица $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ переходит в $\mathcal{H}'(\mathbf{k})$, определяющую спектр в деформированном кристалле в области вблизи точки вырождения. Таким образом, в случае больших деформаций $\Delta_\epsilon \gg E_i$ энергия и волновые функции примесного центра в деформированном кристалле снова определяются уравнением (27.1), в котором $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ определяет спектр носителей в деформированном кристалле.

В вырожденной зоне типа валентной зоны Ge и Si при деформации поверхности постоянной энергии становятся эллипсоидами, поэтому для Ge и Si в предельном случае больших деформаций задача определения энергии и волновых функций основного состояния примесного центра сводится к решению соответствующей задачи для простой зоны, которая была рассмотрена в § 27.

При деформации по осям [001] или [111], когда поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения с массами, определяемыми (30.19), (30.20), можно использовать вариационную функцию (27.17), приводящую к формулам (27.18), (27.19) для энергии ионизации.

При больших, но конечных деформациях к энергии ионизации будут поправки порядка E_i/Δ_ϵ , связанные с непараболическостью отщепившейся зоны.

Если в уравнении (27.1) перейти к представлению, осуществляемому функциями дна зоны в деформированном кристалле, которые диагонализуют матрицу $\mathcal{H}(\epsilon)$, то уравнение (27.15)

В этом представлении можно записать в виде

$$\left\| \begin{array}{cc} I \left(E_1(k) - \frac{e^2}{\kappa r} \right) & \mathcal{H}_{I \Pi} \\ \mathcal{H}_{I \Pi}^+ & I \left(E_2(k) - \frac{e^2}{\kappa r} \right) \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \end{array} \right\| = E \left\| \begin{array}{c} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \end{array} \right\|, \quad (37.18)$$

где I — единичная двумерная матрица, $\mathcal{H}_{I \Pi}$, $\mathcal{H}_{I \Pi}^+$ — двумерные матрицы, квадратичные по k и зависящие от направления деформации, а $E_1(k)$ и $E_2(k)$ определяются формулами (30.14) — (30.17).

Для расчета поправок к энергии в первом приближении по E_i/Δ_ε можно использовать преобразование гамильтониана (15.49а)*). В результате получим преобразованный гамильтониан для верхнего из отщепившихся уровней:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{I \Pi} = I \left(E_1(k) - \frac{e^2}{\kappa r} \right) - \frac{\mathcal{H}_{I \Pi} \mathcal{H}_{I \Pi}^+}{2\Delta_\varepsilon}. \quad (37.19)$$

С другой стороны, оператор $\Delta\mathcal{H} = -\mathcal{H}_{I \Pi} \mathcal{H}_{I \Pi}^+ / 2\Delta_\varepsilon$ определяет поправки к энергии порядка k^4/Δ_ε и согласно (30.21) равен:

$$\Delta\mathcal{H} = I \Delta_4 E = I \left(\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_k}{\mathcal{E}^{1/2}} - \frac{1}{8} \frac{\mathcal{E}_{\varepsilon k}^2}{\mathcal{E}^{3/2}} \right), \quad (37.20)$$

где \mathcal{E}_k , $\mathcal{E}_{\varepsilon k}$, \mathcal{E}_ε определяются уравнениями (30.6) — (30.8).

Поправки к энергии ионизации равны

$$\delta E_i = \int \hat{f}^* \Delta_4 E \hat{f} dx, \quad (37.21)$$

где \hat{f} — медленная функция основного состояния, определяемая уравнением (27.17).

В случае деформации по направлению [001] согласно (37.20)

$$\Delta_4 E = \left\{ \frac{3}{4} B^2 (k^4 + 2k^2 k_z^2 - 3k_z^4) + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2) \right\} / \Delta_\varepsilon. \quad (37.22)$$

Для вариационной функции

$$\hat{f} = (\pi a_x a_y a_z)^{-1/2} \exp \left\{ - \left(\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2} \right)^{1/2} \right\}$$

интегралы, определяющие поправку к энергии δE_i , равны:

$$\int \hat{f}^* k_x^4 \hat{f} dx = \frac{1}{a_x^4}; \quad \int \hat{f}^* k_x^2 k_y^2 \hat{f} dx = \frac{1}{3} \frac{1}{a_x^2 a_y^2}. \quad (37.23)$$

*) Заметим, что для учета поправок к энергии более высокого порядка по E_i/Δ_ε гамильтониан $\Delta\mathcal{H}$ уже нельзя получить простым разложением $E(\varepsilon, \mathbf{k})$ по более высоким степеням k^2/Δ_ε , что связано с некоммутативностью операторов $\mathbf{k} = -i\nabla$ и $V(\mathbf{x})$.

Поэтому для деформации по направлению [001]

$$\delta E_i = \frac{\Xi_0}{2 |b \epsilon'_{001}|}, \quad \text{где } \Xi_0 = B^2 a_{\perp}^{-4} + \frac{D^2}{3} \frac{1}{a_{\perp}^2} \left(\frac{1}{a_{\perp}^2} + \frac{2}{a_{\parallel}^2} \right). \quad (37.24)$$

При деформации по направлению [111] аналогичные вычисления дают

$$\delta E_i = \frac{\Xi_0}{2 |d \epsilon'_{111} / \sqrt{3}|},$$

$$\Xi_0 = \frac{2}{3} B^2 \frac{1}{a_{\perp}^2} \left(\frac{1}{a_{\perp}^2} + \frac{2}{a_{\parallel}^2} \right) + \frac{2}{9} \frac{D^2}{a_{\perp}^2} \left(\frac{2}{a_{\perp}^2} + \frac{1}{a_{\parallel}^2} \right). \quad (37.25)$$

Экспериментально зависимость энергии ионизации примесей в области больших деформаций исследовалась в работе [32.4]. Изменение энергии ионизации определялось по изменению концентрации дырок в области низких температур, т. е. при $kT \ll \ll \Delta_e$.

Полученная зависимость $E_i(\epsilon)$ для случая деформации по направлениям [100] и [111] показана на рис. 56. Из рис. 56 видно,

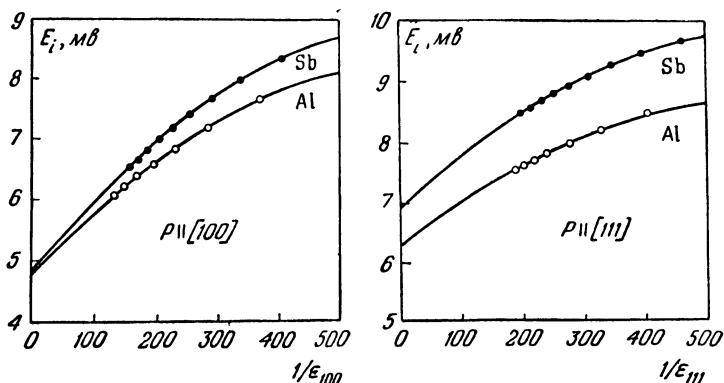


Рис. 56. Изменение энергии ионизации акцепторов (Sb и Al) в p -Ge при деформации по направлениям [100] и [111] [32.4].

что энергия ионизации зависит от сорта примесей, что связано с химическим сдвигом.

Как видно из рис. 56, при максимальной достигнутой на опыте деформации величина $E_i(\epsilon)$ еще не выходила на насыщение, поэтому авторы аппроксимировали $E_i(\epsilon)$ выражением

$$E_i(\epsilon) = E_{i\infty} + \frac{W_1}{\epsilon} + \frac{W_2}{\epsilon^2}; \quad (37.26)$$

при этом константы $E_{i\infty}$, W_1 и W_2 подбирались так, чтобы обеспечить наилучшее согласие с экспериментом.

§ 38. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ

В этом параграфе мы рассмотрим оптические переходы между основным и возбужденными состояниями мелкого примесного центра в деформированных кристаллах.

Сначала рассмотрим случай многоэллипсоидной зонной структуры, в которой поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения, как это имеет место в зоне проводимости Ge и Si.

Оператором возмущения, вызывающим оптические дипольные переходы, является оператор

$$\mathcal{H}_{\text{вз}} = 2e(\mathcal{E}\mathbf{x}) \cos \omega t, \quad (38.1)$$

где \mathcal{E} — электрическое поле световой волны, e — заряд электрона, ω — частота света. Волновая функция примесного центра является произведением функций дна зоны на медленные функции метода эффективной массы.

Поскольку в приближении эффективной массы переходы могут происходить только между состояниями, соответствующими одному экстремуму, то правила отбора определяются матричными элементами координаты, вычисленными на медленных функциях основного и возбужденного состояний мелкого примесного центра. При этом переходы могут происходить только между состояниями с различной четностью.

Рассмотрим более подробно переходы между различными уровнями основного $1s$ состояния и ближайшими возбужденными состояниями p_0 и p_{\pm} .

Если начальное состояние Ψ_s является суперпозицией состояний, соответствующих различным экстремумам,

$$\Psi_s = \sum_j C_{jfs} \psi_{k_j},$$

а переход происходит в возбужденное состояние

$$\Psi_{p_l} = f_p^l \psi_{k_l},$$

соответствующее экстремуму l , то вероятность перехода пропорциональна

$$|\langle \Psi_s | (\mathcal{E}\mathbf{x}) | \Psi_{p_l} \rangle|^2 = |C_{jfs}^s|^2 |\langle f_0^l | (\mathcal{E}\mathbf{x}) | f_p^l \rangle|^2.$$

Скалярное произведение $(\mathcal{E}\mathbf{x})$ можно записать в виде

$$(\mathcal{E}\mathbf{x}) = \mathcal{E}_{z_l} z_l + \mathcal{E}_{+}^l x_-^l + \mathcal{E}_{-}^l x_+^l,$$

где

$$x_{\pm}^l = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_l \pm iy_l), \quad \mathcal{E}_{\pm}^l = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{E}_{x_l} \pm i\mathcal{E}_{y_l}),$$

а оси x_l , y_l , z_l выбраны вдоль главных осей эллипсоида l .

Волновые функции p -состояния в этих осях преобразуются: $f_{p_0}^l$ — как z_l , а $f_{p_{\pm}}^l$ — как x_{\pm}^l . Поэтому вероятность перехода пропорциональна: в состоянии p_0

$$|\langle \Psi_s | (\mathcal{E}x) | \Psi_{p_0} \rangle|^2 = |C_l^s|^2 A_{\parallel}^2 \mathcal{E}^2 \cos^2 \varphi_l; \quad (38.2a)$$

в состоянии p_{\pm}

$$|\langle \Psi_s | (\mathcal{E}x) | \Psi_{p_{\pm}l} \rangle|^2 = \frac{1}{2} |C_l^s|^2 A_{\perp}^2 \mathcal{E}^2 \sin^2 \varphi_l. \quad (38.2b)$$

Здесь φ_l — угол между направлением \mathcal{E} и осью z_l данного экстремума,

$$A_{\parallel} = \int f_0^l z_l f_{p_0}^l dr, \quad A_{\perp} = \int f_0^l x_{\pm}^l f_{p_{\pm}}^l dr.$$

Если переход происходит в вырожденное состояние, то вероятность перехода, как обычно, надо просуммировать по всем конечным состояниям.

В недеформированном кубическом кристалле полная вероятность переходов, естественно, не зависит от направления электрического поля.

При деформации происходит расщепление вырожденных основных и возбужденных состояний мелкого примесного центра, что приводит к расщеплению оптических линий и к возникновению зависимости коэффициента поглощения от направления электрического поля волны относительно осей кристалла.

Невырожденные зоны

Рассмотрим переходы между основным и возбужденными состояниями в n -Ge при деформации по [111] направлению. На рис. 57, 58 показаны схемы расщепления основного и ближайших возбужденных состояний в деформированном кристалле Ge при $\delta = \frac{2}{3} \Xi_u \epsilon'_{111} < 0$ в случае малых ($|\delta| \ll \Delta$) и больших ($|\delta| \gg \Delta$) деформаций. Здесь Δ — долин-орбитальное расщепление основного состояния.

Вероятности перехода в возбужденные состояния p_0 и p_{\pm} для поля \mathcal{E} , направленного под углом φ к направлению деформации, приведены в табл. 38.1.

На рис. 57 и 58 пунктирными стрелками показаны разрешенные переходы в продольном электрическом поле, а сплошными стрелками — переходы в перпендикулярном поле. Цифры в скобках указывают на кратность вырождения состояния.

Рассмотрим сначала случай малых деформаций. В этом случае линия, соответствующая переходу $A_1 \rightarrow p_0$ в недеформированном кристалле, при деформации расщепляется на две линии, смещенные на величину $-\frac{2}{9} \Xi_u \epsilon'_{111} = -\frac{\delta}{3}$ (переход $A_1 \rightarrow p_0(3)$) и на δ (переход $A_1 \rightarrow p_0(1)$).

При этом в случае $\mathcal{E} \perp [111]$ наблюдается только переход $A_1 \rightarrow p_0(3)$, а при $\mathcal{E} \parallel [111]$ наблюдаются обе расщепленные компоненты. Линия, соответствующая переходу $A_1 \rightarrow p_{\pm}$, при деформации также расщепляется на две компоненты, смещенные на

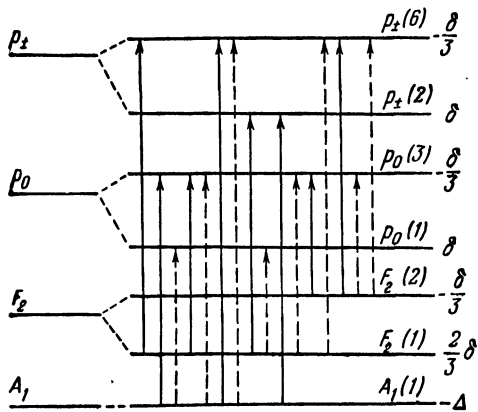


Рис. 57. Схема расщепления основного и возбужденных состояний донорного центра при $\delta = \frac{2}{3} \mathcal{E}_u \varepsilon'_{111} < 0$. Германий, малые деформации, $|\delta/\Delta| \ll 1$.

На рисунке указаны смещения уровней при деформации.

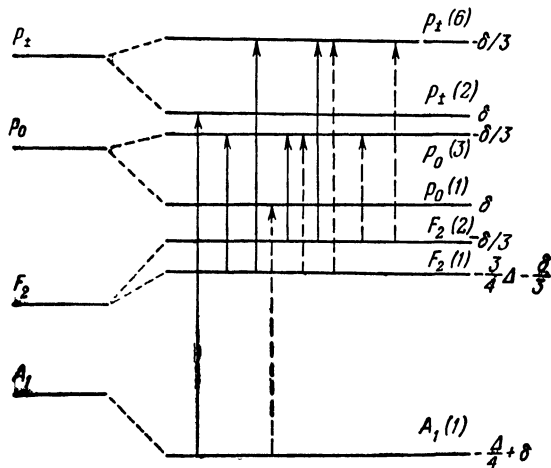


Рис. 58. То же для Ge, большие деформации, $|\delta/\Delta| \gg 1$.

$-\frac{\delta}{3}$ (переход $A_1 \rightarrow p_{\pm}(6)$) и на δ (переход $A_1 \rightarrow p_{\pm}(2)$). При $\mathcal{E} \parallel [111]$ наблюдается только переход $A_1 \rightarrow p_{\pm}(6)$, а при $\mathcal{E} \perp [111]$ разрешены оба перехода. Линии, соответствующие переходам $F_2 \rightarrow p_0$ и $F_2 \rightarrow p_{\pm}$ в недеформированном кристалле, расщепляются при деформации на три компоненты: одна из них не

смещена и соответствует положению линии в недеформированном кристалле — переходы $F_2(2) \rightarrow p_0(3)$, $F_2(2) \rightarrow p_{\pm}(6)$, а две другие смещены на $-\delta$ и $\frac{\delta}{3}$ (переходы $F_2(1) \rightarrow p_0(3)$, $F_2(1) \rightarrow p_{\pm}(6)$ и $F_2(1) \rightarrow p_0(1)$, $p_{\pm}(2)$ соответственно). При этом в случае $\mathcal{E} \parallel [111]$ наблюдаются все три линии для переходов $F_2 \rightarrow p_0$ и две линии перехода $F_2 \rightarrow p_{\pm}$, а именно $F_2(1)$, $F_2(2) \rightarrow p_{\pm}(6)$. При $\mathcal{E} \perp [111]$ наблюдаются все три линии перехода $F_2 \rightarrow p_{\pm}$ и две линии переходов $F_2 \rightarrow p_0$: $F_2(1)$, $F_2(2) \rightarrow p_0(3)$.

Таблица 38.1

	$p_0(1)$	$p_0(3)$	$p_{\pm}(2)$	$p_{\pm}(6)$
$A_1(1)$	$\frac{\alpha^2}{3 + \alpha^2} A_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi$	$\frac{A_{\parallel}^2}{3 + \alpha^2} \times$ $\times \left(\frac{1}{3} + \sin^2 \varphi \right)$	$\frac{\alpha^2}{3 + \alpha^2} A_{\perp}^2 \sin^2 \varphi$	$\frac{A_{\perp}^2}{3 + \alpha^2} \times$ $\times \left(\frac{5}{3} + \cos^2 \varphi \right)$
$F_2(1)$	$\frac{3A_{\parallel}^2}{3 + \alpha^2} \cos^2 \varphi$	$\frac{\alpha^2 A_{\parallel}^2}{3(3 + \alpha^2)} \times$ $\times \left(\frac{1}{3} + \sin^2 \varphi \right)$	$\frac{3A_{\perp}^2}{3 + \alpha^2} \sin^2 \varphi$	$\frac{\alpha^2 A_{\perp}^2}{3(3 + \alpha^2)} \times$ $\times \left(\frac{5}{3} + \cos^2 \varphi \right)$
$F_2(2)$	0	$\frac{2}{3} A_{\parallel}^2 \times$ $\times \left(\frac{1}{3} + \sin^2 \varphi \right)$	0	$\frac{2}{3} A_{\perp}^2 \times$ $\times \left(\frac{5}{3} + \cos^2 \varphi \right)$

φ — угол между полем \mathcal{E} и направлением деформации $[111]$;
 α определяется уравнением (37.14а).

В случае сильной деформации $|\delta| \gg \Delta$ основное состояние изменяется существенным образом, при этом сильно изменяется и картина оптических переходов из основного состояния в возбужденные. При $\mathcal{E} \parallel [111]$ из состояния A_1 возможен переход только в $p_0(1)$ (см. рис. 58, на котором показаны все разрешенные переходы для случая больших деформаций), который смещен от своего положения в недеформированном кристалле на величину $\Delta/4$. Из состояния F_2 возможны переходы $F_2(1) \rightarrow p_0(3)$, $p_{\pm}(6)$, смещенные на $\frac{3}{4} \Delta$ относительно своего положения в недеформированном кристалле, и переходы $F_2(2) \rightarrow p_0(3)$, $p_{\pm}(6)$, которые не смещаются. В перпендикулярной ориентации $\mathcal{E} \perp [111]$ переход $A_1 \rightarrow p_{\pm}(2)$ смещен на $\Delta/4$, переходы

$F_2 \rightarrow p_0(3)$, $F_2 \rightarrow p_{\pm}(6)$ на $\frac{3}{4}\Delta$, а положения линий, соответствующих переходам $F_2(2) \rightarrow p_0(3)$, $p_{\pm}(6)$, совпадают с положениями в недеформированном кристалле.

Рассмотрим теперь оптические переходы в n -Si при деформации по направлению $[001]$. На рис. 59 показана схема расщепления основного и возбужденных p -состояний для мелких донорных центров в Si для малых деформаций. На рисунке указаны кратности вырождения примесного состояния и величина сдвига энергии при $\delta = \frac{2}{3}\Xi_u \epsilon'_{zz} < 0$. Из (37.13) следует, что при

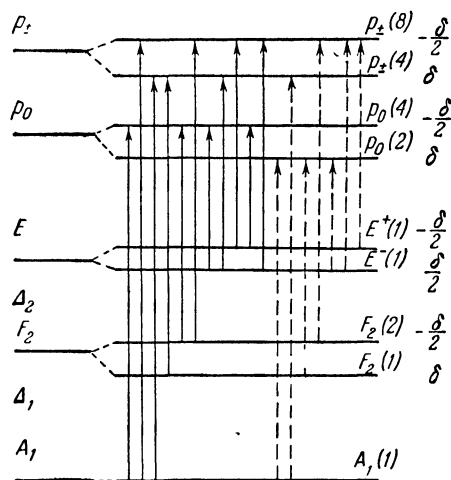


Рис. 59. То же для Si, малые деформации, $|\delta/\Delta| \ll 1$; $\delta = \frac{2}{3}\Xi_u \epsilon'_{zz} < 0$.

такой деформации все уровни, кроме уровня A_1 , расщепляются на два. Аналогично тому, как это делалось для случая n -Ge, легко получить правила отбора для оптических переходов между основным и возбужденными p_0 , p_{\pm} состояниями. Из табл. 38.2 и рис. 59 следует, что линия, соответствующая переходу $A_1 \rightarrow p_0$ в недеформированном кристалле, расщепляется на две компоненты, смещенные на δ и $-\delta/2$; при этом первая линия наблюдается при $\mathcal{E} \parallel [001]$, вторая компонента — при $\mathcal{E} \perp [001]$. Из переходов $F_2 \rightarrow p_0$ в деформированном кристалле при $\mathcal{E} \parallel [001]$ разрешен только переход $F_2(1) \rightarrow p_0(2)$, а при $\mathcal{E} \perp [001]$ — переход $F_2(2) \rightarrow p_0(4)$; обоим переходам соответствует несмещенная линия. Все переходы $F_2(2) \rightarrow p_{\pm}(8)$ при $\mathcal{E} \parallel [001]$ и $F_2(1) \rightarrow p_{\pm}(4)$, $F_2(2) \rightarrow p_{\pm}(8)$ при $\mathcal{E} \perp [001]$ между состояниями $F_2 \rightarrow p_{\pm}$ в деформированном кристалле соответствуют положению линии в недеформированном кристалле.

Линия, соответствующая переходу $E \rightarrow p_0$, при деформации расщепляется на две компоненты. В параллельном поле $\mathcal{E} \parallel [001]$ разрешен переход $E^-(1) \rightarrow p_0(2)^*$, ему соответствует линия, смещенная на $\delta/2$, а при $\mathcal{E} \perp [001]$ разрешены переходы $E^+(1) \rightarrow p_0(4)$ и $E^- \rightarrow p_0(4)$, которым соответствуют несмещенная линия и линия, смещенная на $-\delta$.

*) Через $E^{\pm}(1)$ обозначены уровни состояния E , энергия которых увеличивается (уменьшается) при деформации. При $\delta < 0$ уровню $E^+(1)$ соответствует решение E_2 уравнения (37.13).

	$\rho_0^{(2)}$	$\rho_0^{(4)}$	$\rho_{\pm}^{(4)}$	$\rho_{\pm}^{(6)}$
$A_1(1)$	$\frac{(\alpha - \sqrt{2})^2}{3(1 + \alpha^2)} A_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi$	$\frac{(\sqrt{2}\alpha + 1)^2}{6(1 + \alpha^2)} A_{\parallel}^2 \sin^2 \varphi$	$\frac{(\alpha - \sqrt{2})^2}{3(1 + \alpha^2)} A_{\perp}^2 \sin^2 \varphi$	$\frac{(\sqrt{2}\alpha + 1)^2}{6(1 + \alpha^2)} A_{\perp}^2 (1 + \cos^2 \varphi)$
$F_2(2)$	0	$A_{\parallel}^2 \sin^2 \varphi$	0	$A_{\perp}^2 (1 + \cos^2 \varphi)$
$F_2(1)$	$A_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi$	0	$A_{\perp}^2 \sin^2 \varphi$	0
$E^+(1)$	0	$\frac{A_{\parallel}^2}{2} \sin^2 \varphi$	0	$\frac{A_{\perp}^2}{2} (1 + \cos^2 \varphi)$
$E^-(1)$	$\frac{(\sqrt{2}\alpha + 1)^2}{3(1 + \alpha^2)} A_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi$	$\frac{(\sqrt{2} - \alpha)^2}{6(1 + \alpha^2)} A_{\parallel}^2 \sin^2 \varphi$	$\frac{(\sqrt{2}\alpha + 1)^2}{3(1 + \alpha^2)} A_{\perp}^2 \sin^2 \varphi$	$\frac{(\sqrt{2} - \alpha)^2}{6(1 + \alpha^2)} A_{\perp}^2 (1 + \cos^2 \varphi)$

φ — угол между электрическим полем \mathcal{E} и направлением деформации [001], α определяется уравнением (37.14а).

Линия, соответствующая переходу $E \rightarrow p_{\pm}$, при деформации расщепляется на три компоненты. Одна из них совпадает с положением линии в недеформированном кристалле и наблюдается при обеих ориентациях поля световой волны (переход $E^+(1) \rightarrow p_{\pm}(8)$), другая смещена на величину $-\delta$ (переход $E^-(1) \rightarrow p_{\pm}(8)$), а третья смещена на $\delta/2$ (переход $E^-(1) \rightarrow p_{\pm}(4)$) при $\mathcal{E} \perp [001]$.

Полученные выше правила отбора и характер расщепления линий при деформации по направлению $[001]$ справедливы и для переходов из основного состояния в любые возбужденные pr_0 и pr_{\pm} состояния.

Аналогичная зависимость правил отбора от поляризации имеет место и в случае деформации по направлению $[110]$, если в табл. 38.2 по-прежнему угол φ отсчитывать от направления $[001]$, которое теперь перпендикулярно деформации.

Оптические переходы из основного в возбужденные p_0 и p_{\pm} состояния на мелких донорных центрах в Ge и Si исследовались в ряде работ. Положение линий и поляризационные зависимости интенсивности линий хорошо согласуются с теорией.

Как указывалось в § 27, при учете поправок к методу эффективной массы волновые функции примесных центров в Ge и Si классифицируются по представлениям группы локальной симметрии T_d (а не O_h) и не обладают определенной четностью. Поэтому с точки зрения теории групп разрешены переходы между состояниями $A_1 \rightarrow F_2$ (а также $E \rightarrow F_2$), причем интенсивность таких переходов, запрещенных в приближении эффективной массы, должна быть больше для более глубоких центров.

Переходы $A_1 \rightarrow F_2$ на Bi в Si наблюдались в [41.10]. При этом была измерена величина спин-орбитального расщепления между состояниями E'_2 и G' , на которые, как указывалось в § 27, расщепляется состояние F_2 .

Характер деформационного расщепления уровня F_2 при деформациях, меньших или сравнимых со спин-орбитальным расщеплением, имеет более сложную картину, чем указано в § 37, и определяется уравнением, подобным (30.33).

Вырожденная зона

Рассмотрим случай вырожденной зоны типа валентной зоны Ge и Si. В этом случае возбужденные состояния акцепторного центра классифицируются по представлениям полной кубической группы $O_h = T_d \times C_i$, т. е. они могут иметь симметрию E'_1^{\pm} , E'_2^{\pm} и G'^{\pm} . В приближении эффективной массы оптические переходы могут происходить только между состояниями с различной четностью, т. е. из основного состояния G'^{\pm} могут быть переходы в состояния E'_1^{-} , E'_2^{-} и G'^{-} . Вероятность переходов в «четные» состояния, разрешенные с точки зрения теории групп, для мелких примесных центров мала.

В недеформированном кристалле интенсивности таких переходов не зависят от направления вектора электрического поля волны. При деформации уровни G'^{\pm} смещаются на величину $a\varepsilon$ и расщепляются на два уровня. Величина расщепления, равная Δ_ε , определяется выражением (30.11), в котором b и d нужно заменить на соответствующие константы деформационного потенциала данного уровня b' и d' , которые различны для разных уровней. Так как крамерсовы дублеты E'_1 и E'_2 при деформации смещаются также на величину $a\varepsilon$, то в приближении эффективной массы всесторонняя деформация не влияет на положение линии оптического перехода.

При произвольной деформации происходит расщепление линий оптических переходов из основного состояния в возбужденное, при этом линии, соответствующие переходам $G'^+ \rightarrow E'_1^-$, E'_2^- , расщепляются на две компоненты, смещенные на величину $\pm \Delta_\varepsilon/2$ относительно положения в недеформированном кристалле. Линия, соответствующая переходу $G'^+ \rightarrow G'^-$, в общем случае расщепляется на четыре компоненты, смещенные на величины

$$\pm \frac{1}{2}(\Delta_\varepsilon^1 + \Delta_\varepsilon^2), \quad \pm \frac{1}{2}(\Delta_\varepsilon^1 - \Delta_\varepsilon^2),$$

где Δ_ε^1 и Δ_ε^2 — расщепление первого и второго уровней.

На основании теоретико-групповых соображений легко определить правила отбора для оптических переходов в деформированных кристаллах.

Рассмотрим деформации по направлениям $[001]$ и $[111]$. При деформации по направлению $[001]$ группа симметрии $O_h = T_d \times C_i$ понижается до D_{4h} . При этом представления E'_1^- , E'_2^- , G'^{\pm} соответственно переходят в следующие представления группы $D_{4h} = D_{2d} \times C_i$:

$$E'_1^- \rightarrow E'_2^-, \quad E'_2^- \rightarrow E'_1^-, \quad G'^{\pm} \rightarrow E'_1^{\pm} + E'_2^{\pm}. \quad (38.3)$$

При этом из теории групп нельзя сказать, конечно, какой уровень из представлений E'_1^{\pm} или E'_2^{\pm} , на которые расщепляется G'^{\pm} , будет нижним, это определяется знаком констант деформационного потенциала и знаком деформации.

Из таблицы характеров следует, что

$$\begin{aligned} E'_1^- \times E'_1^+ &= E'_2^- \times E'_2^+ = A_1^- + A_2^- + E^-, \\ E'_1^+ + E'_2^- &= B_1^- + B_2^- + E^-, \end{aligned} \quad (38.4)$$

где A_1^- , A_2^- , B_1^- , B_2^- , E^- — соответствующие нечетные однозначные представления группы D_{4h} (табл. 11.1). Поскольку z преобразуется по представлению A_2^- , а x , y — по E^- , то из (38.3) и (38.4) следует, что в продольной ориентации для переходов $G'^+ \rightarrow E'_1^-$, E'_2^- разрешены переходы только из одного из

расщепившихся состояний; при этом для переходов $G'^+ \rightarrow E_1'^-$, $G' \rightarrow E_2'^-$ соответствующие линии смещены в разные стороны относительно положения линии в недеформированном кристалле. В перпендикулярном поле разрешены оба перехода.

Из переходов $G'^+ \rightarrow G'^-$ в продольном поле разрешены только переходы $E_1'^- \rightarrow E_1'^+$ и $E_2'^- \rightarrow E_2'^+$, им соответствуют две линии, смещенные относительно положения в недеформированном кристалле на величину $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^1 - \Delta_e^2)$, если знаки констант деформационного потенциала b_1' и b_2' для уровней G'^+ и G'^- совпадают, и на величину $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^1 + \Delta_e^2)$ в случае различного

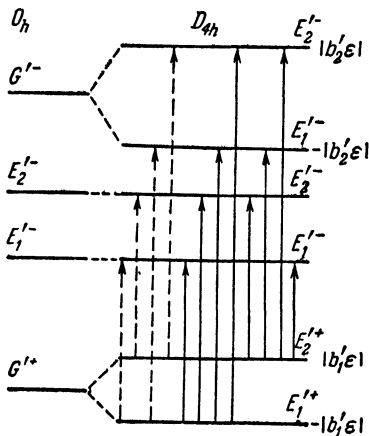


Рис. 60. Схема расщепления уровней акцепторного центра при деформации по оси [001].

знака констант деформационного потенциала.

В случае поперечного электрического поля согласно (38.3) разрешены все четыре перехода.

На рис. 60 показана схема уровней примесного центра при деформации по оси [001] в случае одинакового знака констант деформационного потенциала b_1' и b_2' при деформации, когда нижним из расщепившихся уровней является состояние E_1' , и показаны разрешенные переходы в продольном и поперечном электрическом поле.

При деформации по направлению [111] симметрия O_h понижается до $D_{3d} = D_3 \times C_i$, а представления группы $O_h = T_d \times C_i$

$E_1'^-, E_2'^-, G'^{\pm}$ переходят в двузначные представления группы $D_{3d} = D_3 \times C_i$:

$$E_1'^- \rightarrow E'^-, E_2'^- \rightarrow E^-, G'^{\pm} = E_1'^{\pm} + E_2'^{\pm} + E'^{\pm}, \quad (38.5)$$

где E'^{\pm} — двумерное двузначное представление группы D_{3d} , а $E_1'^{\pm}$ и $E_2'^{\pm}$ — одномерные представления с комплексно сопряженными характерами.

Как и в случае деформации по направлению [001], уровень G'^{\pm} расщепляется на два крамерсово сопряженных дублета — представление E' и представления $E_1' + E_2'$, разделенные на величину $\Delta_e = (2d'/\sqrt{3})e'_{111}$, поэтому в общем случае линии поглощения, соответствующие переходам $G'^+ \rightarrow E_1'^-, E_2'^-$, расщепляются на две компоненты, а линия, соответствующая переходу $G'^+ \rightarrow G'^-$, — на четыре компоненты.

Из таблицы характеров следует, что

$$\begin{aligned} E'^- \times E'^+ &= A_1^- + A_2^- + E^-, & E^- \times (E_1'^+ + E_2'^+) &= 2E^-, \\ (E_2'^+ + E_1'^+)(E_1'^- + E_2'^-) &= 2(A_1^- + A_2^-). \end{aligned} \quad (38.6)$$

Поскольку параллельная деформации координата x_{11} преобразуется по представлению A_2^- , а перпендикулярные компоненты — по E , то из (38.6) получим правила отбора для переходов между состояниями G'^+ и $E_1'^-$, $E_2'^-$, G'^- при деформации по направлению [111]. Для переходов $G^+ \rightarrow E_1^-, E_2^-$ в параллельной ориентации наблюдается одна линия, соответствующая переходу $E'^+ \rightarrow E'^-$, а в перпендикулярной ориентации — обе расщепленные линии.

Для перехода $G'^+ \rightarrow G'^-$ в деформированном кристалле при продольном по отношению к деформации электрическом поле волны разрешены переходы $E'^- \rightarrow E'^+$ и $E_1'^+ + E_2'^+ \rightarrow E_1'^- + E_2'^-$, которые соответствуют линиям, смещенным на величину $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^2 - \Delta_e^1)$ от положения линии в недеформированном кристалле при $d_2'/d_1' > 0$ (или на $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^2 + \Delta_e^1)$ при $d_2'/d_1' < 0$), а в перпендикулярной ориентации могут наблюдаться три линии, соответствующие переходам $E'^+ \rightarrow E'^-$, $E'^+ \rightarrow E_1'^- + E_2'^-$ и $E_1'^+ + E_2'^+ \rightarrow E'^-$, которые при $d_2'/d_1' > 0$ смещены на величину $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^2 + \Delta_e^1)$ и $\frac{1}{2}(\Delta_e^2 - \Delta_e^1)$ (при $d_2'/d_1' < 0$ смещения линий равны $\pm \frac{1}{2}(\Delta_e^2 - \Delta_e^1)$ и $\frac{1}{2}(\Delta_e^2 + \Delta_e^1)$).

На рис. 61 показана схема расщепления акцепторных уровней при деформации по направлению [111] при $d_1'/d_2' > 0$ и показаны разрешенные переходы при продольной и поперечной ориентации электрического поля.

Приведенные выше выражения для характера расщепления линий и для вероятностей оптических переходов получены в предположении малой деформации, когда величина деформационного расщепления и сдвига уровней мала по сравнению с расстоянием между ближайшими возбужденными состояниями.

В Ge, где имеются близко расположенные возбужденные состояния акцепторных центров, это приближение не всегда справедливо.

В случае близко расположенных уровней, когда деформационное расщепление уровней сравнимо или больше расстояния между ними, следует рассматривать всю группу близко расположенных уровней вместе, применяя теорию возмущений для вырожденного состояния. В этом случае энергия и волновые функции в деформированном кристалле определяются из решения характеристического уравнения, порядок которого равен числу близко расположенных уровней.

Экспериментальные исследования оптических переходов между основным и возбужденными уровнями мелких акцепторных центров в Ge и Si в деформированных кристаллах проводились в работах [41.1—41.9]. Исследуя характер расщепления линий

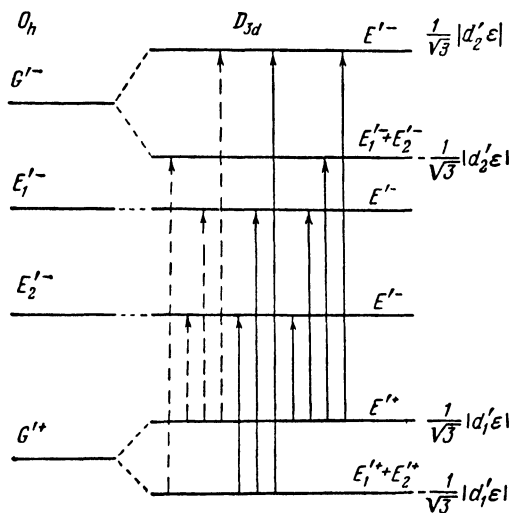


Рис. 61. Схема расщепления уровней акцепторного центра при деформации по оси [111].

при деформации и поляризационную зависимость интенсивности, удалось отождествить большинство линий с переходами из основного в возбужденные состояния, рассмотренные Шехтером [21.4], Мендельсоном и Джеймсом [21.5].

§ 39. ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС НА МЕЛКИХ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРАХ

В этом параграфе будет рассмотрено зеемановское расщепление мелких примесных центров в полупроводниках с многодолинной зонной структурой и с вырожденной зоной и его изменение при деформации.

Зоны со многими минимумами

В полупроводнике, у которого поверхности постоянной энергии вблизи экстремума являются эллипсоидами вращения, уровни энергии и волновые функции примесного центра в однородном магнитном поле \mathbf{H} определяются уравнением (33.1), (22.21):

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}} - \frac{e^2 Z}{\kappa r} + \frac{1}{2} (g_0 \mu_0 \sigma + 2L) \mathbf{H} \right\} f = E f, \quad (39.1)$$

где μ_0 — магнетон Бора, $\mu_0 = e\hbar/2mc$. В невырожденной зоне f_i

является двухкомпонентной величиной, соответствующей двум крамерсово сопряженным функциям дна зоны. Матрица L , как показано в § 22 (см. (22.22)), определяет поправку к g -фактору зонных носителей за счет вклада других зон. Если расщепление уровней, связанное с магнитным полем, мало по сравнению с энергией ионизации примесей — случай, который мы и будем только рассматривать, — внешнее магнитное поле можно рассматривать как возмущение. Если вектор-потенциал выбрать в виде $\mathcal{A} = \frac{1}{2} [Hx]$, то оператор возмущения \mathcal{H}_H

$$\mathcal{H}_H = \frac{1}{2} \mu_0 (g_0 \sigma + 2L) H - \frac{ie\hbar}{m_{\perp} c} \left(\mathcal{A}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathcal{A}_y \frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{ie\hbar}{m_{\parallel} c} \mathcal{A}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

примет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_H = & \frac{1}{2} \mu_0 (g_0 \sigma + 2L) H + \mu_0 \frac{m}{m_{\perp}} (\mathcal{L}H) + \\ & + \mu_0 \left(H_{+x} \frac{\partial}{\partial z} - H_{-x} \frac{\partial}{\partial z} \right) m \left(\frac{1}{m_{\parallel}} - \frac{1}{m_{\perp}} \right), \quad (39.2) \end{aligned}$$

где $H_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (H_x \pm iH_y)$, $x_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy)$, \mathcal{L} — оператор орбитального момента, $\mathcal{L}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ и т. д.

В (39.2) первое слагаемое описывает расщепление уровней в магнитном поле, связанное с волновыми функциями дна зоны, а второе и третье слагаемые дают вклад в это расщепление, связанный с орбитальным движением электрона примесного центра. Для определения расщепления уровней примесного центра в магнитном поле нужно найти матричные элементы оператора \mathcal{H}_H между медленными функциями основного состояния примесного центра. Легко видеть, что из-за соображений симметрии для основного состояния вклад от двух последних слагаемых (39.2) обращается в нуль и, следовательно, зеемановское расщепление основного состояния примесного центра в невырожденной зоне совпадает с зеемановским расщеплением зонных носителей вблизи экстремума.

Для l -го экстремума спиновый гамильтониан можно записать в виде

$$\mathcal{H}_H = \frac{1}{2} \mu_0 \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}^l \sigma_{\alpha} H_{\beta}, \quad \text{где } g_{\alpha\beta}^l = g_0 \delta_{\alpha\beta} + \text{Sp} (L_{\beta}^{(l)} \sigma_{\alpha}); \quad (39.3)$$

здесь $g_{\alpha\beta}^l$ — компоненты g -фактора свободных носителей l -го экстремума. Симметрия g -фактора определяется группой волнового вектора G_{k_l} и аналогична симметрии тензора эффективной массы. Если поверхности постоянной энергии являются эллипсоидами вращения, то и g -фактор определяется двумя компонентами g_{\parallel} и g_{\perp} .

Зеemanовское взаимодействие примесного центра (39.3) записано в осях l -го эллипсоида. Часто удобно перейти к системе координат, связанной с главными осями кристалла. В этих координатах оператор зеemanовского взаимодействия также имеет вид (39.3), но $g'_{\alpha\beta}$ в осях кристалла выражается через главные компоненты тензора g_s по формуле

$$g'_{\alpha\beta} = \sum_s g_s \cos(x'_s, x_\alpha) \cos(x'_s, x_\beta), \quad (39.4)$$

где $\cos(x'_s, x_\alpha)$ — направляющие косинусы главных осей l -го эллипсоида энергии по отношению к главным осям кристалла x_α .

Если не учитывать расщепление многодолинного вырождения примесного центра, связанное с химическим сдвигом, то из (39.3) и (39.4) следует, что в общем случае должен наблюдаться ряд линий парамагнитного резонанса, связанных с каждым экстремумом и определяемых g -фактором (39.4); эти линии могут совпадать при определенных направлениях магнитного поля. Если, однако, величина химического сдвига значительно превосходит величину зеemanовского расщепления, что обычно и имеет место, то следует рассматривать парамагнитный резонанс на каждом из уровней, образовавшихся в результате химического сдвига. Каждое такое состояние, как указано в (27.10), описывается коэффициентами c_l , которые определяют разложение функции примесного центра по состояниям примесного центра вблизи экстремума k_l . Если рассматриваемое состояние является m -кратно вырожденным, то имеется соответственно m столбцов c_l^s ($s = 1, 2, \dots, m$) таких коэффициентов.

Для однократно вырожденного состояния матрица зеemanовского взаимодействия имеет вид (39.3), а эффективный g -фактор равен

$$g_{\alpha\beta} = \sum_l |c_l|^2 g'_{\alpha\beta}. \quad (39.5)$$

В (39.5) суммирование ведется по всем экстремумам. Если рассматриваемое состояние является вырожденным, то \mathcal{H}_H является матрицей с матричными элементами

$$\mathcal{H}_H^{ss'} = \frac{\mu_0}{2} \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}^{ss'} \sigma_\alpha H_\beta, \quad (39.6)$$

где

$$g_{\alpha\beta}^{ss'} = \sum_l c_l^{*s} c_l^{s'} g'_{\alpha\beta}. \quad (39.7)$$

Рассмотрим g -фактор для донорных центров в Si. Для синглетного состояния A из (39.5) и (27.20) следует, что g -фактор изотропен:

$$g_{\alpha\beta}^A = \frac{1}{3} (g_{\parallel} + 2g_{\perp}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (39.8)$$

как и должно быть для симметричного состояния в кубическом кристалле. Для дублетного состояния E в базисе функций (27.20) матрица \mathcal{H}_H имеет вид

$$\left\| \begin{array}{cc} \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} (\sigma_H) + \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{6} ((\sigma_H) - 3\sigma_z H_z) & \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{2\sqrt{3}} (\sigma_x H_x - \sigma_y H_y) \\ \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{2\sqrt{3}} (\sigma_x H_x - \sigma_y H_y) & \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} (\sigma_H) - \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{6} ((\sigma_H) - 3\sigma_z H_z) \end{array} \right\|, \quad (39.9)$$

где σ_i — соответствующие матрицы Паули. При $g_{\parallel} \neq g_{\perp}$ зеемановское расщепление зависит от направления магнитного поля.

Матрица \mathcal{H}_H для трехкратно вырожденного (без учета спина) уровня F_2 в базисе функций $\Psi_{F_2}^1, \Psi_{F_2}^2, \Psi_{F_2}^3$ (27.20) имеет вид

$$\left\| \begin{array}{ccc} g_{\perp} (\sigma_H) + (g_{\parallel} - g_{\perp}) \sigma_x H_x & 0 & 0 \\ 0 & g_{\perp} (\sigma_H) + (g_{\parallel} - g_{\perp}) \sigma_y H_y & 0 \\ 0 & 0 & g_{\perp} (\sigma_H) + (g_{\parallel} - g_{\perp}) \sigma_z H_z \end{array} \right\|. \quad (39.10)$$

Таким образом, зеемановское расщепление уровня F_2 в осях кристалла, как и зонных носителей, определяется тремя анизотропными g -факторами.

Рассмотрим теперь g -фактор для различных уровней основного состояния мелких доноров в Si при деформации по направлению [001] в случае, когда деформационное расщепление значительно превосходит зеемановское расщепление. В этом случае можно рассматривать g -фактор для каждого из расщепившихся уровней.

Используя (39.5) и (37.14), получим, что для основного состояния в деформированном кристалле g -фактор становится анизотропным и имеет две компоненты g_{\parallel}^* и g_{\perp}^* относительно направления деформации:

$$g_{\parallel}^* = \frac{1}{3(1 + \alpha^2)} \left\{ 2g_{\perp} \left(1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \right)^2 + g_{\parallel} (1 + \alpha\sqrt{2})^2 \right\}, \quad (39.11)$$

$$g_{\perp}^* = \frac{1}{3(1 + \alpha^2)} \left\{ g_{\perp} \left[\left(1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \right)^2 + (1 + \alpha\sqrt{2})^2 \right] + g_{\parallel} \left(1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \right)^2 \right\},$$

где α определяется уравнением (37.14). В случае больших деформаций $x \gg 1$ $\alpha \rightarrow -1/\sqrt{2}$, а при $x \ll -1$ $\alpha \rightarrow \sqrt{2}$, и из (39.11) получим

$$\begin{aligned} g_{\parallel}^* &\rightarrow g_{\perp}, & g_{\perp}^* &\rightarrow \frac{g_{\parallel} + g_{\perp}}{2} & (x \gg 1), \\ g_{\parallel}^* &\rightarrow g_{\parallel}, & g_{\perp}^* &\rightarrow g_{\perp} & (x \ll -1). \end{aligned} \quad (39.12)$$

Для состояния с энергией E_2 (37.13) g -фактор получается из (39.11) заменой α на $-1/\alpha$. Для второго дублетного уровня E_1 (37.13) g -фактор не зависит от деформации и равен:

$$g_{\parallel}^* = g_{\perp}, \quad g_{\perp}^* = \frac{g_{\parallel} + g_{\perp}}{2}. \quad (39.13)$$

Для триплетного уровня при деформации по направлению [001] зеемановское расщепление по-прежнему определяется выражениями (39.10). Аналогичные выражения для g -факторов имеют место и в случае деформации по направлению [110], если в выражении для α в (37.14) x заменить на $\Xi_u \frac{e_{zz} - e_{xx}}{\Delta_2}$.

Рассмотрим теперь мелкие доноры в германии. Для синглетного состояния g -фактор также изотропен,

$$g^* = \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3}.$$

Для триплетного состояния в базисе функций $\Psi_{F_2}^1, \Psi_{F_2}^2, \Psi_{F_2}^3$ (27.22) матрица зеемановского расщепления имеет вид

$$\left\| \begin{array}{ccc} \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} (\sigma H) & \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (\sigma_z H_y + \sigma_y H_z) & \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (H_x \sigma_z + H_z \sigma_x) \\ \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (\sigma_z H_y + \sigma_y H_z) & \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} (\sigma H) & \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (H_x \sigma_y + \sigma_x H_y) \\ \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (H_x \sigma_z + H_z \sigma_x) & \frac{g_{\parallel} - g_{\perp}}{3} (H_x \sigma_y + \sigma_x H_y) & \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} (\sigma H) \end{array} \right\| \quad (39.14)$$

Как указывалось выше, при деформации по направлению [111] триплетное состояние расщепляется на однократное состояние E_2 (37.4) и на двукратно вырожденное состояние с энергией $E_3 = E_4$ (37.3), а к синглетному состоянию с энергией E_1 примешивается состояние с энергией E_2 .

Для синглетного и однократно вырожденного состояний g -фактор имеет две составляющие g_{\parallel}^* и g_{\perp}^* относительно направления деформации:

$$\left. \begin{array}{l} g_{\parallel}^* = \frac{4}{3 + \alpha^2} \left(\frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} \right) + \frac{\alpha^2 - 1}{3 + \alpha^2} g_{\parallel}, \\ g_{\perp}^* = \frac{4}{3 + \alpha^2} \left(\frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{3} \right) + \frac{\alpha^2 - 1}{3 + \alpha^2} g_{\perp}; \end{array} \right\} \text{(синглетное состояние } E_1) \quad (39.15)$$

$$\left. \begin{array}{l} g_{\parallel}^* = \frac{4\alpha^2}{3 + \alpha^2} \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{9} + \frac{9 - \alpha^2}{3(3 + \alpha^2)} g_{\parallel}, \\ g_{\perp}^* = \frac{4\alpha^2}{3 + \alpha^2} \frac{g_{\parallel} + 2g_{\perp}}{9} + \frac{9 - \alpha^2}{3(3 + \alpha^2)} g_{\perp}, \end{array} \right\} \text{(состояние } E_2)$$

а α зависит от деформации по (37.8). При нулевой деформации $\alpha = 1$, при большой деформации, когда $x \rightarrow -\infty$, $\alpha \rightarrow \infty$,

при $x \rightarrow \infty$ $\alpha \rightarrow 0$. В этом случае для синглетного состояния получим

$$g_{\parallel}^* = g_{\parallel}, \quad g_{\perp}^* = g_{\perp} \quad (x \rightarrow -\infty), \quad (39.16)$$

$$g_{\parallel}^* = \frac{1}{9}(g_{\parallel} + 8g_{\perp}), \quad g_{\perp}^* = \frac{4g_{\parallel} + 5g_{\perp}}{9} \quad (x \rightarrow \infty).$$

Соответствующие выражения для g -фактора уровня E_2 можно получить из (39.16) при замене знака деформации.

Вырожденные зоны

Для определения зеемановского расщепления уровней акцепторного центра в вырожденной зоне нужно в матрице кинетической энергии $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ заменить $k_{\alpha}k_{\beta}$ на симметризованное произведение $[K_{\alpha}K_{\beta}]$ и, кроме того, согласно (26.14) следует включить в \mathcal{H} слагаемое

$$g_0\mu_0 \left(\kappa(\mathbf{JH}) + \varphi \sum_i J_i^3 H_i \right). \quad (39.17)$$

Поэтому матрица взаимодействия в линейном по магнитному полю приближении для вырожденной зоны Γ_8 имеет вид

$$\mathcal{H}_H = \mu_0 g_0 \left(\kappa(\mathbf{JH}) + \varphi \sum_i J_i^3 H_i \right) + \mu_0 \mathcal{H}'_H, \quad (39.18)$$

где оператор \mathcal{H}'_H получается из оператора $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, определяющего спектр дырок в идеальном кристалле, заменой $k_{\alpha}k_{\beta} \rightarrow -i(A_{\alpha}\nabla_{\beta} + A_{\beta}\nabla_{\alpha})$. В невырожденной зоне в случае эллипсоидальной изоэнергетической поверхности \mathcal{H}'_H соответствует второму и третьему слагаемым в (39.2).

Для определения зеемановского расщепления примесного уровня нужно вычислить матрицу оператора \mathcal{H}_H на волновых функциях примесного центра. Из соображений симметрии следует, что полученная матрица возмущения \mathcal{H}_H^n может быть записана в виде, аналогичном (39.17):

$$\mathcal{H}_H^n = \mu_0 \left(g_1(\mathbf{JH}) + g_2 \sum_i J_i^3 H_i \right). \quad (39.19)$$

При этом константы g_1 и g_2 могут быть выражены через κ , φ и зонные параметры A , B и D .

Отметим здесь два обстоятельства.

Во-первых, для зонных дырок константа φ имеет релятивистскую природу и должна быть мала [20.1]. Однако константа g_2 в (39.19) не имеет релятивистской малости и отлична от нуля и при $\varphi = 0$.

Во-вторых, константы зеемановского расщепления g_1 и g_2 зависят также и от орбитальных параметров A , B и D , так что они не равны нулю и при $\kappa = \varphi = 0$. В этом смысле ситуация

для акцепторного центра аналогична случаю свободных дырок, для которых g -фактор существенным образом определяется зонными параметрами A , B и D . Константы g_1 и g_2 для Ge и Si вычислялись в работах [42.9, 42.10]. Расчеты показывают, что при использовании вариационных функций основного состояния примесного центра [21.4] для Ge

$$g_1 = -8,49, \quad g_2 = 0,6, \quad (39.20)$$

тогда как $g_0^k = -6,82$, $g_0^q = -0,12$. При этом отличие g_1 и g_2 от k и q (как и d' , b' от b и d) связано с наличием угловой зависимости в волновых функциях акцепторного центра, так что, если положить в (27.23) $c_2 = c_3 = 0$, то $g_1 = g_0^k$ и $g_2 = g_0^q$. Поскольку, однако, как показали Мендельсон и Джеймс [21.5], угловая зависимость пробной функции существенно зависит от способа ее вычисления, трудно оценить ошибку в определении g_1 и g_2 при использовании приближенной волновой функции.

Диагонализуя матрицу (39.19), получим энергию расщепления акцепторного центра в магнитном поле:

$$E_{1,2} = \pm \mu_0 \left\{ \frac{H^2}{8} \left[9 \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)^2 + \left(g_1 + \frac{g_2}{4} \right)^2 \right] + \left(g_1 + \frac{7}{4} g_2 \right) \left[\left(g_1 + \frac{13}{4} g_2 \right)^2 H^4 - 9g_2 \left(g_1 + \frac{5}{2} g_2 \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left(H_x^2 H_y^2 + H_x^2 H_z^2 + H_y^2 H_z^2 \right) \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (39.21a)$$

$$E_{3,4} = \pm \mu_0 \left\{ \frac{H^2}{8} \left[9 \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)^2 + \left(g_1 + \frac{g_2}{4} \right)^2 \right] - \left(g_1 + \frac{7}{4} g_2 \right) \left[\left(g_1 + \frac{13}{4} g_2 \right)^2 H^4 - 9g_2 \left(g_1 + \frac{5}{2} g_2 \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left(H_x^2 H_y^2 + H_x^2 H_z^2 + H_y^2 H_z^2 \right) \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (39.21b)$$

При $g_2 = 0$ энергии $E_{1,2} = \pm \frac{3}{2} |g_1| \mu_0 H$ соответствуют состояниям с $m = \pm 3/2$, а энергии $E_{3,4} = \pm \frac{|g_1|}{2} \mu_0 H$ — состояниям с $m = \pm 1/2$ и не зависят от направления \mathbf{H} .

Зеемановское расщепление акцепторного центра при $g_2 \neq 0$ зависит от направления магнитного поля H :

при направлении \mathbf{H} по [001]

$$E_{1,2} = \pm \frac{3}{2} \mu_0 H \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right), \quad E_{3,4} = \pm \frac{\mu_0 H}{2} \left(g_1 + \frac{g_2}{4} \right); \quad (39.22)$$

при направлении \mathbf{H} по [111]

$$E_{1,2} = \pm \frac{\mu_0 H}{2} \sqrt{6 \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)^2 + 3 \left(g_1 + \frac{5}{4} g_2 \right)^2}, \\ E_{3,4} = \pm \frac{\mu_0 H}{2} (g_1 + 3g_2) \quad (39.23)$$

В общем случае при $g_2 \neq 0$ и произвольном направлении магнитного поля \mathbf{H} разрешены парамагнитные переходы между всеми расщепленными уровнями. При этом вероятности переходов с правилами отбора $\Delta m = \pm 1$, т. е. переходов $E_1 \rightarrow E_3$, $E_3 \rightarrow E_4$, $E_4 \rightarrow E_2$, пропорциональны g_1^2 , для других переходов эти вероятности пропорциональны g_2^2 , поэтому при $|g_2| \ll |g_1|$ эти линии имеют значительно меньшую интенсивность.

Отметим, что до сих пор не удавалось наблюдать парамагнитный резонанс на вырожденных примесных центрах в недеформированных кристаллах, что, по-видимому, объясняется малым временем жизни вследствие сильного взаимодействия с акустическими колебаниями решетки и большим уширением линии, вызываемым деформациями, создаваемыми дислокациями и другими дефектами, а также электрическим полем заряженных примесей.

При наличии внешней деформации к оператору \mathcal{H}_H (39.18) следует добавить оператор взаимодействия примесного центра с деформацией $\mathcal{H}'(\epsilon)$, подобный (30.9). Тогда, учитывая (27.62), найдем, что в деформированном кристалле расщепление уровней акцепторного центра определяется оператором:

$$\mathcal{H}' = \mu_0 \left(g_1 (\mathbf{JH}) + g_2 \sum_i J_i^3 H_i \right) - a\epsilon I + b' \sum_i \left(J_i^2 - \frac{5}{4} \right) \epsilon_{ii} + \frac{d'}{\sqrt{3}} \sum_{i \neq j} [J_i J_j] \epsilon_{ij}. \quad (39.24)$$

Сначала мы рассмотрим случай небольших деформаций, когда расщепление уровня при деформации больше спинового: $2\Delta_\epsilon \gg \hbar\omega_s$, но $2\Delta_\epsilon \ll E_i$. В этом случае четырехкратно вырожденное состояние акцепторного центра расщепится на два крамерсовых дублета. В магнитном поле каждый из крамерсовых дублетов расщепляется на два уровня (см. рис. 62, б).

Для определения зеемановского расщепления каждого из отщепившихся крамерсовых дублетов в нулевом по $\hbar\omega_s/\Delta_\epsilon$ приближении нужно вычислить оператор \mathcal{H}_H (39.19) в новом представлении, диагонализующем $\mathcal{H}'(\epsilon)$. В результате расчета

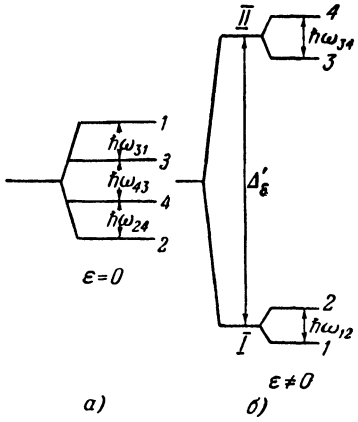


Рис. 62. Расщепление основного состояния акцепторного центра в магнитном поле: а) в недеформированном кристалле, б) при больших деформациях.

получим для величины зеемановского расщепления $\Delta E_{1,2}$ в деформированном кристалле [40.4]:

$$\Delta E_{1,2} = \mu_0 \sum_{\alpha\beta} (H_\alpha g_{\alpha\beta}^{1,2} H_\beta)^{1/2}, \quad (39.25)$$

где

$$g_{xx}^{1,2} = \frac{1}{\mathcal{E}_e} \left\{ \left[\pm \sqrt{\mathcal{E}_e} \left(g_1 + \frac{13}{4} g_2 \right) + b' (\text{Sp } \varepsilon - 3\varepsilon_{xx}) \left(g_1 + \frac{7}{4} g_2 \right) \right]^2 + 3d'^2 (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2) \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right) \left(g_1 + \frac{1}{4} g_2 \right) \right\}, \quad (39.26a)$$

$$g_{xy}^{1,2} = \frac{\sqrt{3}d'}{\mathcal{E}_e} \left\{ \sqrt{3}d' \varepsilon_{xz} \varepsilon_{yz} \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)^2 + \varepsilon_{xy} \left(g_1 + \frac{7}{4} g_2 \right) \left[\mp 2\sqrt{\mathcal{E}_e} \left(g_1 + \frac{7}{4} g_2 \right) + b' (\text{Sp } \varepsilon - 3\varepsilon_{zz}) \left(g_1 + \frac{13}{4} g_2 \right) \right] \right\}. \quad (39.26б)$$

Остальные компоненты $g_{\alpha\beta}^{1,2}$ получаются из (39.26) циклической перестановкой индексов x, y, z . В (39.25) и (39.26) индексы 1, 2 относятся к состояниям с энергией дырок $\mp \sqrt{\mathcal{E}_e}$ соответственно.

Как следует из (39.26), в деформированном кристалле g -фактор каждого из отщепившихся уровней является анизотропным и существенным образом зависит от направления и знака деформации. При деформации по направлениям [001] и [111] g -фактор имеет две компоненты g_{\parallel} и g_{\perp} относительно направления деформации; их значения для нижнего из дырочных уровней (уровня 1) при различных знаках деформации приведены в табл. 39.1. Значения g -фактора для верхнего уровня получаются из приведенных значений переменной знака деформации.

Таблица 39.1

	[001]		[111]	
	$b' \varepsilon'_{zz} > 0$	$b' \varepsilon'_{zz} < 0$	$d' \varepsilon'_{111} > 0$	$d' \varepsilon'_{111} < 0$
g_{\parallel}	$g_1 + \frac{1}{2} g_2$	$3 \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)$	$g_1 + \frac{13}{4} g_2$	$3 \left(g_1^2 + \frac{23}{6} g_1 g_2 + \frac{187}{48} g_2^2 \right)^{1/2}$
g_{\perp}	$2g_1 + 5g_2$	$\frac{3}{2} g_2$	$2g_1 + \frac{7}{4} g_2$	0

Используя волновые функции акцепторного центра в деформированном кристалле, можно получить квадрат модуля матричного элемента парамагнитного перехода под влиянием

высокочастотного поля $\mathbf{h}(t) = \mathbf{h} \cos \omega t$. Оператор возмущения имеет вид

$$\mathcal{H}_h = \mu_0 \cos \omega t \left[g_1 (\mathbf{Jh}) + g_2 \sum_i J_i^3 h_i \right]. \quad (39.27)$$

Матричный элемент, определяющий вероятность перехода, равен:

$$|\mathcal{H}_{h, 12}|^2 = \frac{\mu_0^2}{4} \frac{(H_\alpha g_{\alpha\beta}^{1,2} H_\beta) (h_\alpha g_{\alpha\beta}^{1,2} h_\beta) - (H_\alpha g_{\alpha\beta}^{1,2} h_\beta)^2}{(H_\alpha g_{\alpha\beta}^{1,2} H_\beta)^2}. \quad (39.28)$$

Вероятности перехода имеют довольно сложную угловую зависимость, которая определяется ориентацией постоянного и высокочастотного магнитного поля относительно осей кристалла. В случае деформации вдоль главных осей (39.28) принимает вид

$$|\mathcal{H}_{h, 12}|^2 = \mu_0^2 \frac{(g_{\parallel}^{1,2})^2 [\mathbf{H} \times \mathbf{h}]_{\perp}^2 + (g_{\perp}^{1,2})^2 [\mathbf{H} \times \mathbf{h}]_{\parallel}^2}{(g_{\parallel}^{1,2})^2 H_{\parallel}^2 + (g_{\perp}^{1,2})^2 H_{\perp}^2} (g_{\perp}^{1,2})^2. \quad (39.29)$$

Из (39.29) следует, что при $g_{\perp} = 0$ вероятность перехода обращается в нуль, что будет, например, при деформации по направлению [111] при $d'e'_{111} < 0$.

Весьма существенным является то обстоятельство, что условия наблюдения парамагнитного резонанса в деформированном кристалле являются значительно более благоприятными, чем в недеформированном, так как при деформации значительно ослабляются указанные выше механизмы уширения линий. Поскольку деформация и электрическое поле сами по себе не могут вызвать расщепление крамерсовых уровней, их влияние может сказываться только за счет учета другого отщепившегося уровня, что приводит к уменьшению неоднородного уширения линий в $\Delta_e/\hbar\omega$ раз [40.4].

Парамагнитный резонанс на акцепторных уровнях в Si в деформированном кристалле впервые наблюдался в работе [42.1] при деформации сжатия по направлению [001]. На рис. 63 показано появление линии парамагнитного резонанса при наложении деформации. Экспериментальная угловая зависимость положения линии для различных акцепторов, показанная на рис. 64, хорошо описывается двумя компонентами g -фактора: g_{\parallel} и g_{\perp} . Для определения g_2 и g_1 по (39.25) — (39.26) с использованием экспериментальных данных требуется знание знака константы b' и знака отношения g_{\parallel}/g_{\perp} . В зависимости от этих знаков по известным значениям $|g_{\parallel}|$ и $|g_{\perp}|$ получаются четыре системы значений для g_1 и g_2 .

Если бы были известны значения g_{\parallel} и g_{\perp} для деформации по направлению [111], то возможно было бы однозначное определение g_1 и g_2 . Такие данные не приведены в работе [42.1],

но там указано, что при деформации по направлению $[111]$ g_{\parallel} и g_{\perp} близки к g_{\parallel} и g_{\perp} при деформации по направлению $[001]$. Из табл. 39.1 следует, что такая ситуация может быть, только если $b' < 0$, $d' < 0$, $g_{\perp}/g_{\parallel} > 0$ и $|g_2| \ll |g_1|$. Эти условия находятся в согласии с теоретическими оценками, так как, согласно табл. 37.1, знаки b' , d' совпадают со знаками b и d , а из других опытов известно, что в Si $b < 0$ и $d < 0$. Нера-

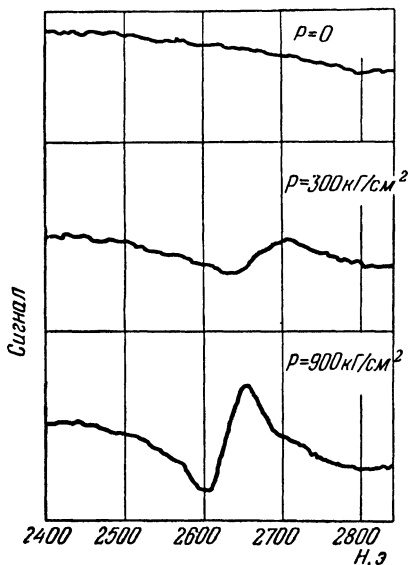


Рис. 63. Парамагнитный резонанс на акцепторных центрах в деформированном Si [42.1]. $T = 1,3^{\circ}\text{K}$, $\nu = 9065 \text{ Мгц}$.

ходятся в согласии с теоретическими оценками, так как, согласно табл. 37.1, знаки b' , d' совпадают со знаками b и d , а из других опытов известно, что в Si $b < 0$ и $d < 0$. Нера-

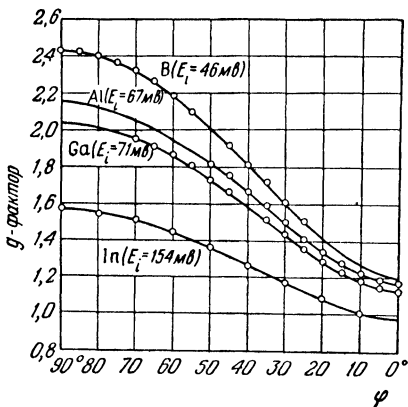


Рис. 64. Зависимость g -фактора акцепторных центров в деформированном Si от угла φ между магнитным полем и направлением деформации [42.1]. $T = 1,3^{\circ}\text{K}$, $\nu \approx 9000 \text{ Мгц}$.

венство $|g_2| \ll |g_1|$ следует, как указывалось выше, и из теоретических оценок при использовании вариационных функций.

Таблица 39.2

	B	Al	Ga	In
g_1	-1,21	-1,19	-1,14	-1,00
g_2	0,002	0,047	0,051	0,087

Вычисленные на основании экспериментальных данных [42.1] значения g_1 и g_2 для различных акцепторов в Si приведены в табл. 39.2. Знак g_1 не может быть определен из экспериментальных данных, но можно ожидать, что знак g_1 совпадает со знаком k ; согласно [20.1] в кремнии $k < 0$. Из таблицы следует, что по мере увеличения энергии ионизации акцепторов $|g_1|$ уменьшается, а $|g_2|$ возрастает.

В случае больших деформаций, когда $\Delta_e \gg E_i$, уровни энергии акцепторного центра, как указывалось в § 26, соответствуют простой эллипсоидальной зоне, а g -фактор для таких уровней определяется формулами (39.26) с заменой g_1 на $g_{0\beta}$ и g_2 на $g_{0\gamma}$.

§ 40. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭКСИТОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Одним из наиболее эффективных методов исследования экситонов является изучение оптических эффектов, связанных с их возбуждением. С методической точки зрения измерение коэффициента поглощения или отражения в области экситонных переходов имеет ряд преимуществ по сравнению с прямым наблюдением междузонных переходов. В то же время изучение этих оптических эффектов в случае мелких экситонов дает возможность получить практически те же сведения о зонной структуре, что и исследование переходов из зоны в зону.

Так как исходное состояние кристалла без экситона является полностью симметричным, то в соответствии с общими правилами отбора для прямых экситонов дипольные оптические переходы разрешены лишь в такие экситонные состояния, которые преобразуются так же, как компоненты вектора \mathbf{p} (или \mathcal{E}), т. е. в состояния, соответствующие представлению \mathcal{D}_1^- в кубических группах или представлениям, произошедшим из \mathcal{D}_1^- в результате его расщепления в группах низкой симметрии. Точно так же магнитодипольные переходы разрешены в состояния, которые преобразуются как компоненты псевдовектора $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$ или \mathbf{H} , т. е. соответствующие представлениям, произошедшим из $\{\mathcal{D}_1^- \times \mathcal{D}_1^-\} = \mathcal{D}_1^+$. Квадрупольные переходы разрешены в состояния, преобразующиеся как симметризованные произведения $[\mathbf{r}\alpha\mathbf{p}\beta]$, т. е. в представления, произошедшие из представлений $[\mathcal{D}_1^- \times \mathcal{D}_1^-] = \mathcal{D}_0^+ + \mathcal{D}_2^+$. В случае мелких экситонов вероятность перехода в разрешенное состояние существенно зависит от того, разрешен ли переход между соответствующими зонами в точке экстремума: если такой переход разрешен, то линия будет относительно интенсивной. Поэтому квадрупольные и магнитодипольные переходы, интенсивность которых значительно ниже, чем дипольных, по-видимому, могут наблюдаться лишь в том случае, когда разрешены соответствующие междузонные переходы *).

Если переход зона — зона в точке экстремума запрещен, то матричный элемент перехода между состояниями с $k \neq 0$ пропорционален первой (или более высокой) степени k (см.

*) В настоящее время квадрупольные переходы наблюдались лишь на одном кристалле — закиси меди [43.1, 43.2].

уравнение (36.3)). Так как экситонные состояния есть суперпозиция состояний с $k \approx (2m^*E_0/\hbar^2)^{1/2}$, где E_0 — энергия связи экситона, то интенсивность перехода в этом случае будет пропорциональна первой (или более высокой) степени отношения E_0/E'_g , где E'_g — расстояние до ближайшей зоны, в которую разрешен переход и из зоны проводимости, и из валентной зоны. В этом случае возбуждение экситона можно рассматривать как виртуальный переход через одну (или несколько) промежуточных зон.

Коэффициент поглощения или соответствующий тензор проводимости σ , связанный с возбуждением экситонов, можно рассчитать по общей формуле (36.1a).

В приближении эффективной массы, когда экситонная функция представляется как суперпозиция дырочных состояний валентной зоны (n, \mathbf{k}_2) и электронных состояний зоны проводимости (m, \mathbf{k}_1), матричный элемент оператора тока для перехода из основного состояния кристалла в данное экситонное состояние l может быть представлен как соответствующая суперпозиция матричных элементов для перехода электрона из состояния $K(n, \mathbf{k}_2)$ в состояние (m, \mathbf{k}_1), так как образование дырки в состоянии (n, \mathbf{k}_2), как указывалось в § 27, есть возбуждение электрона из состояния $K\psi_{n\mathbf{k}_2} = \psi_{K(n\mathbf{k}_2)}$. Как показано в приложении к настоящему параграфу,

$$j_l(\mathbf{q}) = \sum_{mn\mathbf{k}_1} C_{m\mathbf{k}_1, n, \mathbf{q}-\mathbf{k}_1}^{*l} j_{mKn}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}). \quad (40.1)$$

Здесь

$$j_{mKn}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = j_{m\mathbf{k}, K(n, \mathbf{q}-\mathbf{k})} = \frac{1}{\mathcal{V}^0} \langle \psi_{m\mathbf{k}} j(\mathbf{q}) K \psi_{n, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \rangle.$$

Здесь учтено, что междузонный матричный элемент оператора тока в соответствии с уравнениями (36.3), (36.4) отличен от нуля лишь при $\mathbf{k}_2 = \mathbf{q} - \mathbf{k}_1$, т. е. тогда, когда суммарный импульс образовавшихся электрона и дырки $\mathcal{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}$.

В соответствии с (27.51) коэффициенты $C_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}$ есть коэффициенты разложения экситонной функции $F_{mn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ приближения эффективной массы:

$$F_{\mathcal{K}, mn}^l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} e^{i\mathcal{K}\mathcal{R}} f_{\mathcal{K}, mn}^l(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}^0} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} C_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}^l e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + \mathcal{K}\mathcal{R})} \quad (40.2)$$

и, следовательно,

$$f_{0, mn}^l(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}^0}} \sum_{\mathbf{k}} C_{m\mathbf{k}, n-\mathbf{k}}^l e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (40.3)$$

Согласно (36.1a)

$$\sigma_{\alpha\beta}^s(\omega) = \frac{\pi}{\hbar\omega\mathcal{V}} \sum_l j_{\alpha}^l(-\mathbf{q}) j_{\beta}^{*l}(\mathbf{q}) \delta(\omega - \omega_l). \quad (40.4)$$

Здесь суммирование ведется по всем экситонным состояниям с данной энергией $\hbar\omega_l = E_g - E_l$.

В случае невырожденных зон, когда система уравнений (27.63), если пренебречь обменным взаимодействием, сводится к одному уравнению для одной функции $f(\mathbf{r})$, коэффициенты $C_{m\mathbf{k}_l, n\mathbf{k}'_l}$ не зависят от индексов m и n и в качестве каждого экситонного состояния l можно выбрать состояние, соответствующее определенной паре m, n , а суммирование по l можно заменить суммированием по m и n , что в данном случае эквивалентно суммированию по m и n :

$$\sigma_{\alpha\beta}^3(\omega) = \frac{\pi}{\hbar\omega\gamma^0} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}}^* \sum_{mn} j_{mn}^\alpha(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) j_{nm}^\beta(\mathbf{k}', \mathbf{q}) \delta(\omega - \omega_l). \quad (40.5)$$

В том случае, когда междузонные переходы в точке экстремума разрешены, матричные элементы j_{mn} в первом приближении можно считать константами, не зависящими от \mathbf{k} , и тогда

$$\sigma_{\alpha\beta}^3(\omega) = \frac{\pi}{\hbar\omega} |f^0(0)|^2 \sum_{mn} j_{mn}^\alpha(-\mathbf{q}) j_{nm}^\beta(\mathbf{q}) \delta(\omega - \omega_l), \quad (40.6)$$

так как согласно (40.3)

$$\frac{1}{\gamma^0} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}'}^* C_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}} = f^0(0) f^{0*}(0).$$

Для дипольных переходов в соответствии с (36.36)

$$j_{mn}^\alpha = e\pi_{mn}^\alpha/m.$$

В случае сферических зон согласно (36.4) $j^\alpha = es\rho_y\sigma_\alpha$ и

$$\sigma_{\alpha\beta}^3(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar\omega} e^2 s^2 |f(0)|^2 \delta_{\alpha\beta} \delta(\omega - \omega_l), \quad (40.7)$$

так как

$$\sum_{mn} \sigma_{mn}^\alpha \sigma_{nm}^\beta = \text{Sp}(\sigma_\alpha \sigma_\beta) = 2\delta_{\alpha\beta}. \quad (40.8)$$

В этом приближении могут возбуждаться лишь экситоны в s -состоянии, так как лишь для них $f(0)$ не равно нулю. Для этих состояний

$$|f_n(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3 n^3}, \quad \text{где } a_0 = \frac{\hbar^2 \kappa}{m e^2}, \quad (40.9)$$

и, следовательно,

$$\sigma_{\alpha\beta}^n(\omega) = \frac{2e^2 s^2}{a_0^3 n^3 \hbar} \delta_{\alpha\beta} \delta(\omega - \omega_n). \quad (40.10)$$

Если поверхности постоянной энергии — соосные эллипсоиды, то тензор $\sigma_{\alpha\beta}^n$ в главных осях эллипсоидов также имеет лишь диагональные компоненты, при этом для каждой из компонент

константу s в (40.7) в соответствии с (36.5) надо заменить на s_α .

Рассмотрим теперь случай, когда разрешены переходы лишь между состояниями с $k \neq 0$ и матричный элемент перехода пропорционален k :

$$j_{\alpha mn}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha'} R_{mn}^{\alpha\alpha'} k_{\alpha'}, \quad (40.11)$$

где, согласно (36.3б),

$$R_{mn}^{\alpha\alpha'} = \frac{e\hbar}{m^2} \sum_s \frac{\pi_{ms}^\alpha \pi_{sn}^{\alpha'}}{E_m - E_s} + \frac{\pi_{ms}^{\alpha'} \pi_{sn}^\alpha}{E_n - E_s}. \quad (40.11a)$$

Подставив (40.11) в (40.5), найдем

$$\sigma_{\alpha\beta}^3(\omega) = \frac{\pi}{\hbar\omega} \sum_{\alpha'\beta'} \frac{\partial f^*(0)}{\partial x_{\alpha'}} \frac{\partial f(0)}{\partial x_{\beta'}} \sum_{mn} R_{mn}^{\alpha\alpha'} R_{nm}^{\beta\beta'} \delta(\omega - \omega_l), \quad (40.12)$$

так как в соответствии с (40.3)

$$\frac{1}{\gamma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'}^* \cdot {}_{-\mathbf{k}'} k'_\alpha C_{\mathbf{k}} \cdot {}_{-\mathbf{k}} k_\beta = \left(\frac{\partial f^*}{\partial x_\alpha} \right)_{x=0} \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right)_{x=0}.$$

В случае сферических зон, когда согласно (36.4)

$$j_\alpha = \frac{e\hbar}{m^*} \theta \rho_x (\sigma_{\alpha+1} k_{\alpha+2} + \sigma_{\alpha+2} k_{\alpha+1}),$$

учитывая (40.8), найдем

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^3 = & \frac{2\pi e^2 \hbar^2 \theta^2}{\hbar \omega m^{*2}} \left[\delta_{\alpha\beta} \left(\left| \frac{\partial f(0)}{\partial x_{\alpha+1}} \right|^2 + \left| \frac{\partial f(0)}{\partial x_{\alpha+2}} \right|^2 \right) + \right. \\ & \left. + \delta_{\alpha+1, \beta} \frac{\partial f^*(0)}{\partial x_\alpha} \frac{\partial f(0)}{\partial x_{\alpha+1}} + \delta_{\alpha+2, \beta} \frac{\partial f^*(0)}{\partial x_\alpha} \frac{\partial f(0)}{\partial x_{\alpha+2}} \right] \delta(\omega - \omega_l). \end{aligned} \quad (40.13)$$

Для водородоподобных функций производная $\frac{\partial f(0)}{\partial x_\alpha}$ отлична от нуля лишь для p -функций, причем для каждой из трех функций X , Y , Z отлична от нуля лишь одна производная: по x , y и z соответственно. При этом

$$|\nabla f_n(0)|^2 = \left| \frac{\partial X_n}{\partial x} \right|_{x \rightarrow 0}^2 = \frac{n^2 - 1}{3\pi a_0^5 n^5}. \quad (40.14)$$

Поэтому в каждую из диагональных компонент $\sigma_{\alpha\alpha}$ дадут вклад лишь переходы в две из трех p -функций, а именно: $X_{\alpha+1}$ и $X_{\alpha+2}$, а недиагональные компоненты $\sigma_{\alpha\beta} = 0$. Следовательно, суммируя (40.13) по всем p -состояниям, окончательно получим

$$\sigma_{\alpha\beta}^3 = \frac{4\pi e^2 \hbar^2 \theta^2}{\hbar \omega m^{*2}} \delta_{\alpha\beta} |\nabla f(0)|^2 \delta(\omega - \omega_l) \quad (40.15)$$

или, учитывая (40.14),

$$\sigma_{\alpha\beta}^3 = \frac{4}{3} \frac{e^2 \hbar^2 \theta^2}{\omega m^{*2}} \frac{n^2 - 1}{a_0^5 n^5} \delta_{\alpha\beta} \delta(\omega - \omega_n). \quad (40.15a)$$

Если поверхности постоянной энергии — эллипсоиды вращения, то p -состояние расщепляется на X -, Y - и Z -состояния. При этом компонента σ_{zz} отлична от нуля только для переходов в X - и Y -состояния и определяется формулой, отличающейся от (40.15) заменой θ^2 на $\theta_y^2 = \theta_x^2$ (см. уравнение (36.5)), а компоненты σ_{xx} и σ_{yy} отличны от нуля для переходов в Y - или X - и в Z -состояние и определяются выражениями, отличающимися от (40.15) заменой $2\theta^2$ на $\theta_z^2 + \theta_x^2$.

Если матричный элемент перехода пропорционален k^2 , то будут возбуждаться лишь экситоны в d -состоянии, для которых отлична от нуля вторая производная $\frac{\partial^2 f(0)}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}$.

Рассмотрим теперь, как изменяется спектр экситонов при деформации и как это сказывается на оптических эффектах. Мы не будем сначала учитывать обменное расщепление, так как оно, как будет видно из дальнейшего, проявляется лишь в особых условиях.

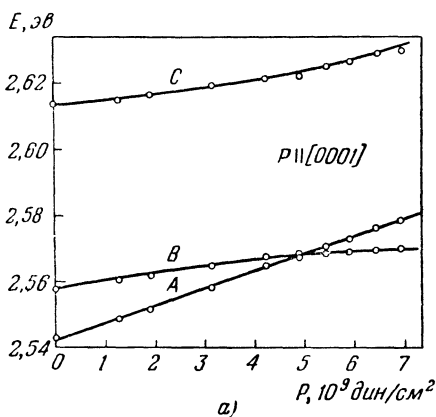
Невырожденные зоны

В случае невырожденных зон сдвиг экситонных линий соответствует изменению ширины запрещенной зоны, так как сравнительно малое изменение эффективной массы практически не сказывается на энергии активации экситона *).

В качестве примера на рис. 65 показано, как изменяется энергия активации экситонов в CdS при деформации по различным направлениям [43.7]. Три линии A , B и C соответствуют трем экситонам, образованным электроном и дыркой, находящейся в одной из трех валентных зон. Если пренебречь изменением энергий связи экситонов при деформации, то ход этих линий соответствует относительному изменению расстояний между зоной проводимости и тремя валентными зонами и описывается уравнениями (31.23), (31.24) и (31.15). В этих формулах точно учтены члены, пропорциональные ϵ_{zz} и $\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}$, а слагаемые,

*) В тех случаях, когда энергия связи экситона сравнима с расстояниями между ближайшими зонами, как это имеет место, например, в ряде кристаллов с решеткой вюрцита, экситонное состояние представляет суперпозицию состояний разных зон. В этом случае изменение расстояния между зонами может привести к существенному изменению их вклада в данное состояние, а следовательно, и к изменению энергии ионизации. При таких малых расстояниях между зонами изменение эффективных масс при деформации также может быть значительным. Однако, так как в этих кристаллах энергия связи экситона, как правило, определяется эффективной массой электрона, которая намного меньше эффективных масс дырок, то и для этих кристаллов можно обычно не учитывать изменение энергии ионизации. Что касается рассмотренных ниже поляризационных зависимостей, то вклад нескольких ближайших зон в экситонное состояние не может привести к разрешению запрещенных переходов, так как эти запреты определяются только симметрией экситонного состояния, однако отношение интенсивностей для разрешенных поляризаций может при этом измениться.

пропорциональные $\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}$, ϵ_{xy} , ϵ_{xz} и ϵ_{yz} , учтены с точностью до ϵ^2 . Если расстояние между двумя нижними уровнями $E_A^0 - E_B^0$ намного меньше, чем расстояние до третьего уровня



$E_A^0 - E_C^0$, что, согласно (31.16), (31.17), имеет место при

$$\frac{2\Delta_{кр}\Delta_{со}}{3(\Delta_{кр} + \Delta_{со})^2} \ll 1, \quad (40.16)$$

то для этих нижних уровней можно получить и более точное выражение, справедливое при всех деформациях, при которых смещение этих уровней остается малым по сравнению с расстоянием до третьего уровня.

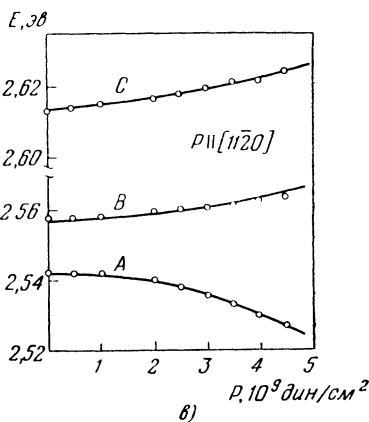
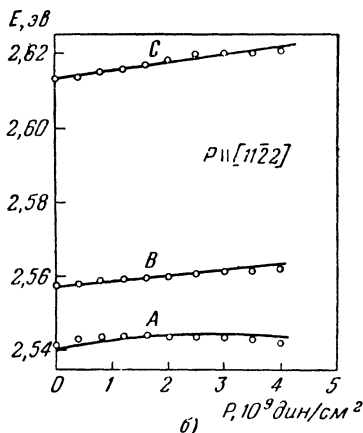


Рис. 65. Зависимость энергии возбуждения экситонов в CdS от деформации при различных направлениях деформации [43.7]. $T = 77^\circ \text{K}$.

Если опустить в (31.19) матричные элементы, связанные с третьим уровнем, то собственные значения $E_{1,2}$ будут определяться формулой, подобной (24.13):

$$E_{1,2} = \frac{E_1^1 + E_2^1}{2} \pm \left\{ \left(\frac{E_1^1 - E_2^1}{2} \right)^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 \right\}^{1/2}. \quad (40.17)$$

Из этой формулы видно, что пересечение уровней 1 и 2, подобное тому, которое имеет место на кривой рис. 65, а, может происходить лишь при деформациях $\epsilon_{zz} \neq 0$ или $\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} \neq 0$,

когда значения E_1^1 и E_2^1 , определяемые формулами (31.15), (31.14), могут сравняться. Наоборот, при деформациях, соответствующих кривым рис. 65, б и в, когда отличны от нуля компоненты $\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}$, ϵ_{xy} , ϵ_{xz} или ϵ_{yz} , входящие в (40.17) константы

$$|\gamma|^2 = \frac{(G - E_2^1)^2 D_6^2 (\epsilon_{xz}^2 + \epsilon_{yz}^2)}{(G - E_2^1)^2 + \Delta^2}, \quad |\delta|^2 = \frac{\Delta D_5^2 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + 4\epsilon_{xy}^2]}{(G - E_2^1)^2 + \Delta^2} \quad (40.18)$$

не равны нулю и термы не могут пересекаться.

Из кривых рис. 65 можно определить константы деформационного потенциала для CdS. При этом, однако, надо иметь в виду, что в области, где расстояние между зонами сравнимо с обменным расщеплением, при расчете деформационных эффектов следует учитывать обменное взаимодействие. Соответствующие данные в табл. 40.3 получены в [43.17] с учетом этого взаимодействия.

При деформации наряду со смещением линий происходит и изменение интенсивностей перехода для различных поляризацій. Как видно из формулы (40.6), поляризационная зависимость σ^{α} определяется поляризационной зависимостью переходов зона — зона.

В линейном по ϵ приближении матричный элемент оператора тока \tilde{j}_{mn}^{α} , определяющий вероятность перехода из состояния n валентной зоны в состояние m зоны проводимости в деформированном кристалле, в соответствии с общей формулой (15.51) равен

$$\tilde{j}_{mn}^{\alpha} = j_{mn}^{\alpha} + \sum_{n'} \frac{j_{mn'n}^{\alpha} \mathcal{H}_{n'n}(\epsilon)}{E_n - E_{n'}}, \quad (40.19)$$

где j_{mn}^{α} — матричный элемент в недеформированном кристалле, который согласно (36.3) равен

$$j_{mn}^{\alpha} = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} \mathcal{H}_{mn}(\mathbf{k}).$$

Здесь $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ — «междузонная» матрица, определяемая (31.29), а $\mathcal{H}_{n'n}(\epsilon)$ в (40.19) — матричные элементы внутризонной матрицы (31.19). Так, например, при деформациях, нарушающих симметрию решетки, становится возможным возбуждение экситона, связанного с верхней валентной зоной (A), соответствующей представлению Γ_9 , и при продольной поляризации, т. е. при $\mathcal{E} \parallel C$. В недеформированном кристалле, как видно из табл. 31.6, такие переходы запрещены. Подставив в (40.6) и (40.19) матричные элементы из (31.19) и (31.29) и используя

(31.21a), найдем, что относительная интенсивность таких переходов в деформированном кристалле равна:

$$\frac{\sigma_{zz}^3}{\sigma_{xx}^3} = \frac{2P_1^2}{P_2^2} \frac{D_6^2 (E_1^0 - E_2^0 - E_3^0)^2 (\epsilon_{xz}^2 + \epsilon_{yz}^2) + D_5^2 \Delta^2 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + 4\epsilon_{xy}^2]}{[(E_1^0 - E_2^0)(E_1^0 - E_3^0)]^2}. \quad (40.20)$$

Здесь E_i^0 — положение экстремумов в недеформированном кристалле, определяемое формулами (31.16).

Вырожденные зоны

В случае вырожденных зон для определения спектра экситонов в деформированных кристаллах надо решать систему уравнений (27.63) с включением в \mathcal{H} членов, пропорциональных ϵ , аналогично тому, как это делалось для примесного центра в § 37. Как и для примесного центра, здесь надо различать два случая. При малых деформациях расщепление вырожденных экситонных состояний не совпадает с расщеплением зон и определяется матрицей $\mathcal{H}(\epsilon)$, подобной (37.16).

Если для основного состояния прямого экситона в Ge воспользоваться вариационными функциями вида (27.23), то связь констант b' и d' , определяющих расщепление этого состояния при малых деформациях, с зонными константами b и d описывается формулами, подобными (37.17) (при $\Delta \rightarrow \infty$, $c_4 = 0$):

$$b' = b(c_1^2 - c_3^2), \quad d' = d\left(c_1^2 - c_2^2 - \frac{c_3^2}{3}\right). \quad (40.21)$$

Константа a' , определяющая смещение экситонного уровня при изотропной деформации, равна сумме констант $-a + c$, определяющих изменение ширины запрещенной зоны.

В случае больших деформаций, когда расщепление зон превышает энергию связи экситона, каждой из расщепившихся зон соответствуют свои экситонные уровни, смещающиеся вместе с зоной. Энергия связи каждого из них определяется эффективной массой данной зоны и поэтому, вообще говоря, энергии связи основного состояния для расщепившихся экситонов различны и отличаются от энергии связи в недеформированном кристалле. Если анизотропия тензора приведенных масс (27.85) невелика, что имеет место в Ge из-за малости эффективной массы электрона по сравнению с массами дырок, то эти энергии близки. Так, для вариационной функции вида (27.17) из формул (27.18), (27.19) следует, что при малой анизотропии

$$x = \frac{\bar{m}_{\parallel} - \bar{m}_{\perp}}{\bar{m}} = \left(\frac{1}{\bar{m}}\right)^{-1} \left(\frac{1}{\bar{m}_{\perp}} - \frac{1}{\bar{m}_{\parallel}}\right)$$

энергия связи экситона

$$E_0 = E_0(\bar{m}) \left(1 - \frac{x^2}{10}\right) = E_0\left(\frac{1}{\bar{m}}\right) \left(1 + \frac{x^2}{10}\right). \quad (40.22)$$

Здесь $E_0(\bar{m})$ и $E_0\left(\frac{1}{\bar{m}}\right)$ — энергия связи «изотропного экситона» $e^4 m / 2\kappa^2 \hbar^2$ при $m = \bar{m}$ и $m = \left(\frac{1}{\bar{m}}\right)^{-1}$ соответственно,

$$\bar{m} = \frac{1}{3}(\bar{m}_{\parallel} + 2\bar{m}_{\perp}), \quad \left(\frac{1}{\bar{m}}\right) = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{\bar{m}_{\parallel}} + \frac{2}{\bar{m}_{\perp}}\right)^*.$$

Так как в деформированном Ge средняя обратная масса дырок $(1/\bar{m}_n)$ в обеих расщепившихся зонах, как видно из уравнения (30.18), при всех деформациях равна $(2/\hbar^2)|A|$, то во всех случаях

$$\left(\frac{1}{\bar{m}}\right) = \frac{1}{m_e^*} + \frac{2}{\hbar^2}|A|$$

и при имеющейся анизотропии $\chi \leq 0,5$ энергии связи в обеих расщепившихся зонах отличаются не более чем на 2—3%. Поэтому прямые, показывающие ход экситонных уровней с деформацией, как видно из рис. 66 [43.8], практически пересекаются в одной точке $\epsilon = 0$, и экспериментальные точки ложатся на одну прямую как при сжатии, так и при растяжении, что не имело бы места при существенном изменении приведенных эффективных масс.

Для непрямых экситонов в Ge и Si необходимо наряду с расщеплением валентной зоны учитывать также и различие в смещениях различных экстремумов зоны проводимости. Поэтому при произвольной деформации основное состояние в Ge расщепится на восемь, а в Si — на шесть уровней. При деформации по главным осям, когда все или часть экстремумов смещаются одинаково, число расщепленных уровней меньше. При достаточно больших деформациях каждой из пар отщепившихся зон соответствует свой экситон, смещение которого определяется смещением соответствующих зон.

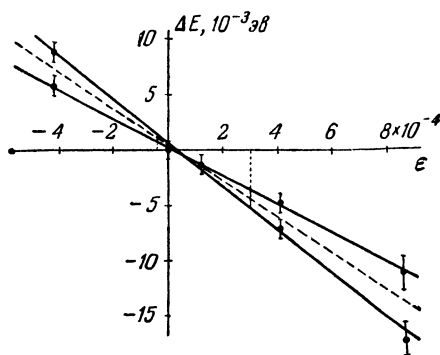


Рис. 66. Расщепление основного состояния прямого экситона в Ge при деформации по направлению [111] [43.8].

*) Если диэлектрическая постоянная также анизотропна, как это имеет место, например, в кристаллах структуры вюрцита, то в (40.22) надо принять

$$\left(\frac{1}{\bar{m}}\right) = \frac{1}{3}\left(\frac{2}{\bar{m}_{\perp}} + \frac{\chi_{\perp}}{\chi_{\parallel}} \frac{1}{\bar{m}_{\parallel}}\right), \quad \bar{\chi} = (\chi_{\parallel}\chi_{\perp}^2)^{1/3}, \quad \chi = \left(\frac{1}{\bar{m}}\right)^{-1} \left(\frac{1}{\bar{m}_{\perp}} - \frac{\chi_{\perp}}{\chi_{\parallel}} \frac{1}{\bar{m}_{\parallel}}\right). \quad (40.22a)$$

Так, например, для Ge при деформации по оси [100], когда зона проводимости не расщепляется, имеются два уровня, расщепление которых определяется валентной зоной:

$$\Delta E_{1,2} = E_{1g}\varepsilon \pm b\varepsilon'_{zz}. \quad (40.23)$$

При деформации по [111] зона проводимости расщепляется: три

$\Delta E \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$

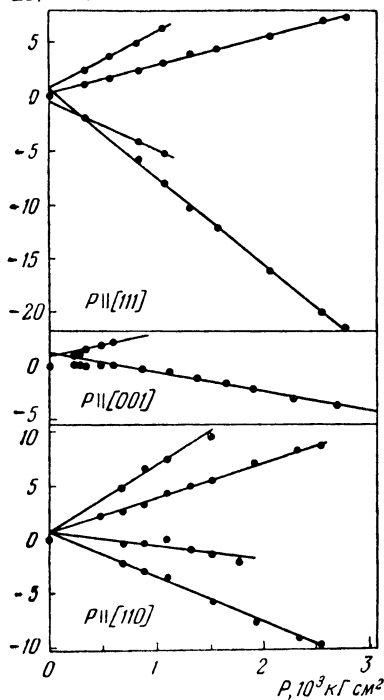


Рис. 67. Расщепление основного состояния непрямого экситона в Ge при деформации по направлениям [111], [001] и [110] [43.10]. $T = 80^\circ \text{ К}$, $E_g - E_0 = 0,761 \text{ эВ}$

$\Delta E \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$

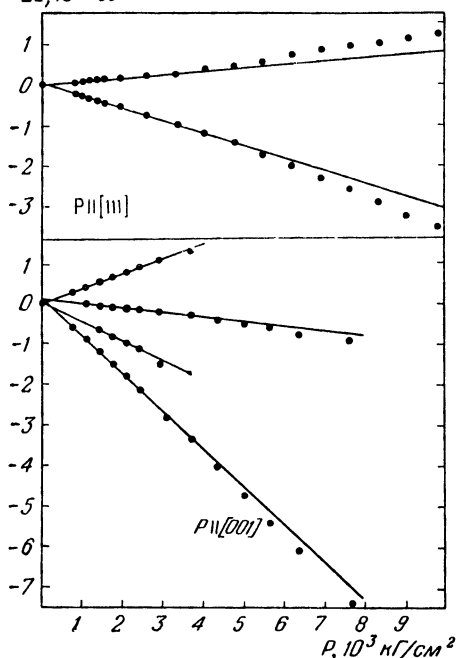


Рис. 68. Расщепление основного состояния непрямого экситона в Si при деформации по направлениям [111] и [001] [43.10]. $T = 80^\circ \text{ К}$, $E_g - E_0 = 1,210 \text{ эВ}$.

экстремума смещаются в одну сторону и один — в другую. Соответственно наблюдаются четыре линии с

$$\Delta E_{1-4} = E_{1g}\varepsilon \pm \frac{d}{\sqrt{3}} \varepsilon'_{111} + \frac{2}{9} \Xi_u \varepsilon'_{111} (1 \pm 2). \quad (40.24)$$

Аналогичная картина наблюдается при деформации по оси [110], когда два экстремума зоны проводимости смещаются вниз и два — вверх (рис. 67) [43.10].

Для Si, наоборот, при деформации по [111] экситонный уровень расщепляется на два (рис. 68) [43.10]. При этом

$$\Delta E_{1,2} = E_{1g}\varepsilon \pm \frac{d}{\sqrt{3}} \varepsilon'_{111}, \quad (40.25)$$

а при деформации по [100] образуются четыре уровня со сдвигами

$$\Delta E_{1-4} = E_{1g}\varepsilon \pm b\varepsilon'_{zz} + \frac{1}{6} \Xi_u \varepsilon'_{zz} (1 \pm 3). \quad (40.26)$$

При деформации по [110] экситонный уровень, так же как и в Ge, расщепится на четыре.

Подчеркнем, что формулы (40.23) — (40.26) справедливы при таких деформациях, когда расщепление зон существенно превышает энергию связи экситона. При этом энергия связи экситонов, соответствующих разным зонам, может несколько отличаться.

Таблица 40.1

Материал		Si				Ge			
Положение минимумов		[001], [00 $\bar{1}$]		[100], [010] [$\bar{1}00$], [0 $\bar{1}0$]		[111]		[$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$], [$\bar{1}\bar{1}1$], [$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$]	
Форма эллипсоидов валентной зоны		Вытян.	Сжат.	Вытян.	Сжат.	Вытян.	Сжат.	Вытян.	Сжат.
Деформация по направлению [001]	E_0 , мэв	12,3	12,0	12,4	12,1	2,6	2,5	2,6	2,5
	ΔE_0 , мэв	-0,4	-0,7	-0,3	-0,6	-0,4	-0,5	-0,4	-0,5
Деформация по направлению [111]	E_0 , мэв	12,5	12,0	12,5	12,0	3,4	2,5	2,5	2,7
	ΔE_0 , мэв	-0,2	-0,7	-0,2	-0,7	+0,4	-0,5	-0,5	-0,3

В табл. 40.1 приведены энергии E_0 связи экситонов для разных экстремумов зоны проводимости и двух валентных подзон, рассчитанные по формулам (27.18). При этом в случаях различия всех трех масс две ближайшие из них считались равными и заменялись средним значением $\frac{1}{m} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$. Там же указано, насколько эти энергии отличаются от значений, рассчитанных по водородоподобной формуле (27.14) с изотропной массой $\frac{1}{m} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_{\parallel}^e} + \frac{2}{m_{\perp}^e} + \frac{3}{m^h} \right)$, где $\frac{1}{m^h} = \frac{2}{\hbar^2} |A|$. Видно, что в

некоторых случаях отношение $\Delta E_0/E_0$ может составлять до 20%. Поэтому формулы (40.23) — (40.26) определяют наклон каждой из прямых рис. 67 и 68, а не расстояние между разными линиями, которое включает и разность энергий связи. Различие этих энергий и приводит к тому, что эти прямые пересекаются в разных точках и не при $\epsilon = 0$.

Из хода экситонных уровней при больших деформациях можно одновременно определить значения констант деформационного потенциала как для валентной зоны, так и для зоны проводимости. Значения этих констант по данным [43.8] и [43.10] приведены в табл. 40.2 в конце параграфа.

Характерной особенностью экситонных линий в случае вырожденных зон является сильная поляризационная зависимость для уровней, расщепившихся при деформации. Этот эффект должен наблюдаться как для прямых экситонов, так и для непрямых, когда возбуждение включает два этапа: «вертикальный» переход без изменения k с поглощением фотона и переход с передачей импульса примеси или фонону. В последнем случае поляризация существенно зависит не только от начального и конечного состояний электрона, но и от того, какое промежуточное состояние играет основную роль в таком переходе. Поэтому мы здесь ограничимся рассмотрением более простого случая — прямого экситона в Ge.

Согласно (40.6), (36.3) и (36.23) при достаточно больших деформациях, когда экситоны, связанные с каждой из расщепившихся зон, можно рассматривать независимо, проводимость определяется формулой

$$\sigma_{\alpha\beta}^s = \frac{\pi e^2}{\hbar\omega} |f^0(0)|^2 \Theta_{\alpha\beta} \delta(\omega - \omega_l), \quad (40.27)$$

где в соответствии с (36.24) в главных осях кристалла

$$\text{Sp } \Theta = 3s^2, \quad (40.28)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha} - \Theta_{\beta\beta} = \pm 3s^2 \frac{b(\epsilon_{\alpha\alpha} - \epsilon_{\beta\beta})}{\Delta_e}, \quad \Theta_{\alpha\beta} = \pm \sqrt{3} s^2 \frac{d\epsilon_{\alpha\beta}}{\Delta_e} \quad (\alpha \neq \beta).$$

Здесь верхний знак соответствует верхней валентной зоне, а нижний знак — нижней из расщепившихся зон, $\Delta_e = 2\mathcal{E}_e^{1/2}$.

При произвольном направлении напряжения P удобно определять поляризацию для трех направлений: по оси ξ , параллельной P , и по осям ζ и η , лежащим в плоскости, перпендикулярной P . При этом ось ζ лежит в плоскости $z\xi$, а ось η перпендикулярна этой плоскости. Угол между осями z и ξ обозначим θ , а угол между плоскостями zx и $z\xi$ обозначим φ . Компоненты тензора $\Theta_{\alpha\beta}$ в осях ξ, ζ, η , определяющие согласно (40.27)

поляризационную зависимость $\sigma'_{\alpha\beta}$ в этих осях, равны

$$\begin{aligned}\Theta_{\xi\xi} &= s^2 \pm \frac{s^2 P}{\Delta_e} \left\{ 2b(S_{11} - S_{12}) [1 - 3 \sin^2 \theta + 3 \sin^4 \theta (1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi)] + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{3} dS_{44} [\sin^2 \theta - \sin^4 \theta (1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi)] \right\}, \\ \Theta_{\zeta\zeta} &= s^2 \mp \frac{s^2 P}{\Delta_e} \left\{ b(S_{11} - S_{12}) [1 - 6 \sin^2 \theta \cos^2 \theta (1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi)] + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{3} dS_{44} \sin^2 \theta \cos^2 \theta (1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi) \right\}, \\ \Theta_{\eta\eta} &= s^2 \mp \frac{s^2 P}{\Delta_e} \left\{ b(S_{11} - S_{12}) (1 - 6 \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \varphi) + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{3} dS_{44} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \right\},\end{aligned}\quad (40.29)$$

Если напряжение P направлено по главным осям [100] или [111], то

$$\Theta_{\xi\xi} = s^2 (1 \pm \gamma), \quad \Theta_{\zeta\zeta} = \Theta_{\eta\eta} = s^2 \left(1 \mp \frac{\gamma}{2} \right). \quad (40.30)$$

где $\gamma = \frac{bP}{|bP|}$ или $\gamma = \frac{dP}{|dP|}$ соответственно. При этом положительным P соответствует растяжение, отрицательным — сжатие. Видно, что при $\gamma = -1$ для верхней зоны поглощение происходит, только когда электрическое поле волны \mathcal{E} перпендикулярно P , т. е. $\sigma_{\parallel} = 0$, а для нижней зоны отношение $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp}$ равно 4. При $\gamma = 1$ зоны меняются местами. Подобные соотношения имеют место и при произвольном направлении P в сферическом приближении, т. е. при $dS_{44} = 2\sqrt{3} b (S_{11} - S_{12})$. Если же это соотношение не выполняется, то при деформации по другим направлениям, кроме [100] и [111], поперечные компоненты $\sigma_{\zeta\zeta}$ и $\sigma_{\eta\eta}$ не одинаковы.

Обменное взаимодействие в полупроводниках с простыми зонами

Как указывалось в § 27, обменное взаимодействие приводит к дополнительному расщеплению экситонного состояния. При деформации, понижающей симметрию кристалла, происходит дальнейшее расщепление экситонных уровней. Характерной особенностью обменного взаимодействия является то, что это деформационное расщепление происходит и в том случае, когда экситон связан с невырожденными без учета спина зонами, которые сами при деформации расщепиться не могут. Впервые такой эффект наблюдался на закиси меди еще в 1960 г. [43.2] и тогда же был качественно объяснен обменным взаимодействием [22.5]. В закиси меди экстремумы зоны проводимости и нескольких близких валентных зон находятся в точке Γ ($k=0$), где группа волнового вектора есть группа O_h .

На рис. 69 показано расщепление основного экситонного состояния, связанного с невырожденными зонами Γ_6^+ и Γ_7^+ , при деформациях по [100] и [110]. Это состояние соответствует представлению $\Gamma_6^+ \times \Gamma_7^+ = \Gamma_2 + \Gamma_{25}'$, т. е. расщепляется на однократно и трехкратно вырожденные состояния. Базисные функции

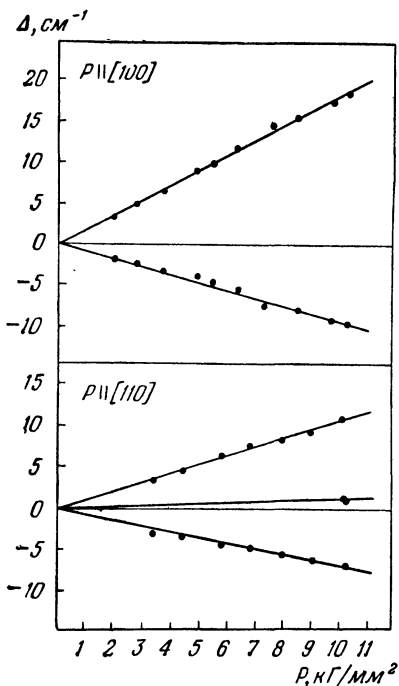


Рис. 69. Расщепление основного состояния экситона в закиси меди при деформации по направлениям [100] и [110] [43.2].

На рис. 70 показано расщепление линий экситонов A и B при сжатии в направлении, перпендикулярном главной оси C . При этом свет распространялся вдоль этой оси, а вектор поляризации был параллелен или перпендикулярен направлению деформации: при каждой поляризации наблюдалась одна из расщепленных линий.

Для точного расчета нелинейных по деформации эффектов надо построить матрицу обменного взаимодействия $\mathcal{H}^{\text{обм}}$ (27.77), (27.75) на зонных функциях с учётом их изменения при деформации. Мы не будем здесь приводить эти довольно громоздкие вычисления и ограничимся рассмотрением линейного случая; для построения $\mathcal{H}^{\text{обм}}(\epsilon)$ воспользуемся методом инвариантов, а затем оценим входящие в этот гамильтониан константы. Для экситона A , соответствующего представлению

состояния Γ_{25}' преобразуются как XY , XZ и YZ и его расщепление при деформации определяется матрицей, подобной (30.2): при деформации по оси [100] оно расщепляется на два терма, которым соответствуют функции XZ , YZ и XY ; при деформации по [110] вырождение снимается полностью: трем расщепившимся состояниям соответствуют функции $(1/\sqrt{2})(XZ + YZ)$, $(1/\sqrt{2})(XZ - YZ)$ и XY . Во все эти состояния разрешены квадрупольные переходы. При этом матричный элемент перехода в состояние XY пропорционален $\mathcal{E}_x q_y + \mathcal{E}_y q_x$ и т. д. В состоянии Γ_2 запрещены и дипольные и квадрупольные переходы и эта линия не наблюдается.

Позже расщепление экситонных состояний, связанных с невырожденными зонами, наблюдалось на ряде кристаллов структуры вюрцита [43.12—43.17]. В этих опытах смещение линий определялось по спектрам отражения.

$\Gamma_7 \times \Gamma_9 = \Gamma_5 + \Gamma_6$, обменное взаимодействие расщепляет основное состояние на два. При этом в $\mathcal{H}^{\text{обм}}(\epsilon)$ могут входить компоненты ϵ , преобразующиеся по представлениям $\Gamma_5 \times \Gamma_5 = \Gamma_6 \times$

$E, \text{эВ}$

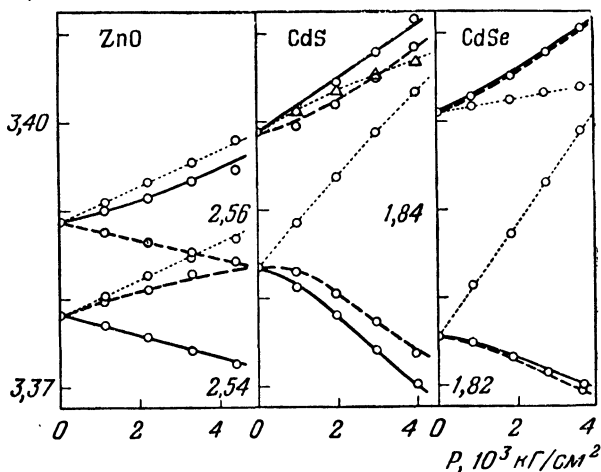


Рис. 70. Расщепление основного состояния экситона в гексагональных ZnO, CdS, CdSe при деформации, перпендикулярной главной оси [43.12]. Сплошные линии: $\epsilon \perp P, C$; $P \perp C$; пунктирные: $\epsilon \parallel P, P \perp C$; точки: $\epsilon \parallel C, P \parallel C$.

$\times \Gamma_6 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_6$ и $\Gamma_5 \times \Gamma_6 = \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_{15}$, и в базисе $Y_{\pm 1}^1 = (1/\sqrt{2})(X \pm iY)(\Gamma_5)$, $Y_{\pm 2}^2(\Gamma_6)$ $\mathcal{H}^{\text{обм}}(\epsilon)$ имеет вид

$$\mathcal{H}_A^{\text{обм}}(\epsilon) = \begin{vmatrix} E_0 + (\Delta/2) & c_1 \epsilon_- & c_3 \epsilon_{z+} & 0 \\ c_1 \epsilon_+ & E_0 + (\Delta/2) & 0 & c_3 \epsilon_{z-} \\ c_3 \epsilon_{z-} & 0 & E_0 - (\Delta/2) & 0 \\ 0 & c_3 \epsilon_{z+} & 0 & E_0 - (\Delta/2) \end{vmatrix} \quad (40.31)$$

Здесь E_0 — энергия экситона без учета обменного расщепления, включающая деформационное смещение, определяемое (31.23), (31.24), (31.15) или (40.17), Δ — обменное расщепление. Остальные обозначения см. табл. 31.4 (стр. 410).

Из двух расщепившихся состояний оптически активным является лишь состояние Γ_5 . Из (40.31) видно, что при деформациях $\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}$ или ϵ_{xy} оно расщепляется на два с энергиями

$$E_{1,2} = E_0 + \frac{\Delta}{2} \pm c_1 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + 4\epsilon_{xy}^2]^{1/2}, \quad (40.32)$$

которым соответствуют функции

$$\Phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} -\chi \\ 1 \end{vmatrix}, \quad \Phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \chi \\ 1 \end{vmatrix}, \quad \text{где } \chi = \frac{\epsilon_-}{|\epsilon_-|}. \quad (40.33)$$

При деформации $(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})$ это функции X и Y , а при ϵ_{xy} это $(X+Y)/\sqrt{2}$ и $(X-Y)/\sqrt{2}$. В этих случаях линии полностью поляризованы: при $\mathcal{E} \parallel P$ возбуждается один из уровней, а при $\mathcal{E} \perp P$ (и $\mathcal{E} \perp C$) — другой.

Для экситонов B и C , соответствующих представлениям $\Gamma_7 \times \Gamma_7 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_6$, основное состояние расщепляется обменным взаимодействием на три состояния, два из которых невырожденные (Γ_1 и Γ_2) и одно двукратно вырожденное (Γ_6). В $\mathcal{H}^{\text{обм}}(\epsilon)$ в этом случае могут входить компоненты ϵ , преобразующиеся по $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_5, \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_5$ и $\Gamma_5 \times \Gamma_5 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_6$. Если в качестве базисных функций, преобразующихся по представлениям Γ_2, Γ_1 и Γ_5 , выбрать соответственно функции Y_0^-, Y_0^- и $Y_{\pm 1}^-$, то в указанном базисе эта матрица имеет вид

$$\mathcal{H}_{B,C}^{\text{обм}}(\epsilon) = \begin{vmatrix} E_0 - \frac{\Delta}{2} + \Delta' & 0 & c_3 \epsilon_{z+} & -c_3 \epsilon_{z-} \\ 0 & E_0 - \frac{\Delta}{2} - \Delta' & c_2 \epsilon_{z+} & c_2 \epsilon_{z-} \\ c_3 \epsilon_{z-} & c_2 \epsilon_{z-} & E_0 + \frac{\Delta}{2} & c_1 \epsilon_- \\ -c_3 \epsilon_{z+} & c_2 \epsilon_{z+} & c_1 \epsilon_+ & E_0 + \frac{\Delta}{2} \end{vmatrix} \quad (40.34)$$

Здесь Δ и Δ' — обменные расщепления.

Из (40.34) видно, что при деформации $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy}$ и ϵ_{xy} состояние Γ_5 расщепляется аналогично тому, как это имело место в случае A . Если волновой вектор $q \parallel C$, то и здесь возбуждаются лишь состояния Γ_5 . Их расщепление и поляризация определяются формулами, аналогичными (40.32) и (40.33), т.е. при таких деформациях также при $\mathcal{E} \parallel P$ возбуждается один из уровней, а при $\mathcal{E} \perp P$ (и $\mathcal{E} \perp C$) — другой. Однако при поляризации $\mathcal{E} \parallel C$ должно возбуждаться и состояние Γ_1 . В (40.31) и (40.34) опущены диагональные члены, определяющие изменение констант Δ и Δ' при деформации, пропорциональные ϵ_{zz} и ϵ_{\perp} , которые не приводят к дополнительному расщеплению или смешиванию состояний.

В квазикубической модели, когда волновые функции трех зон Γ_9, Γ_7 и Γ_7 определяются формулами (31.18), константы Δ и Δ' для экситонов A, B и C в (40.31) и (40.34) связаны соотношениями:

$$\text{экситон } A: \Delta = -3\Delta_1,$$

$$\text{экситон } B: \Delta = 3\Delta_1 (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta), \quad \Delta' = 3\Delta_1 \sin^2 \theta, \quad (40.35)$$

$$\text{экситон } C: \Delta = 3\Delta_1 (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta), \quad \Delta' = 3\Delta_1 \cos^2 \theta,$$

где $\text{tg } \theta = (-E_3^0/E_2^0)^{1/2}$. Здесь E_2^0 и E_3^0 определяются (31.16). При $\Delta_{\text{co}} \gg \Delta_{\text{кр}}$ имеем $\text{tg } \theta = \sqrt{2}$. В этом случае для экситона C представления Γ_1 и Γ_5 объединяются.

Формулы (40.35) справедливы при условии, что вклад соседних зон в волновую функцию экситонов A , B и C несуществен и значение $|f(0)|^2$ для основных состояний этих экситонов одинаково, что имеет место при $m_e^* \ll m_h^*$. При этих условиях константа Δ_1 в (40.35) совпадает с Δ_1 в приведенной ниже формуле (40.37).

По данным [43.17] значение константы $3\Delta_1$ (в обозначениях [43.17] $3\Delta_1 = j$) равно 5,6 мэв для ZnO, 2,5 мэв для CdS и 0,4 мэв для CdSe.

Отметим, что в кристаллах без центра инверсии в обменное расщепление могут давать вклад линейные по k члены (и нечетные по k члены более высокой степени) в спектре электронов и дырок. Для экситона $\Gamma_7 \times \Gamma_7$, когда спектр электронов и дырок определяется формулой (31.12), соответствующий вклад в константу Δ' равен

$$\Delta' = 4(m_{\perp e} m_{\perp h})^{1/2} (m_{\perp e} + m_{\perp h})^{-1} (\Delta E_c \Delta E_v)^{1/2},$$

где $\Delta E_{c,v}$ — понижение экстремумов для электронов и дырок за счет линейных по k членов, которое согласно (31.2) равно $-E(0) = \alpha_1^2/4A_2$, а $m_{\perp e}$ и $m_{\perp h}$ — поперечные массы электронов и дырок: $m_{\perp}^{-1} = 2A_2/\hbar^2$.

Вклад в Δ для экситона $\Gamma_7 \times \Gamma_7$, как и для экситона $\Gamma_9 \times \Gamma_7$, за счет линейных по k членов равен нулю.

Для вкладов в Δ и Δ' , связанных с линейными по k членами, соотношение (40.35) уже не имеет места.

Константы c_i в (40.31) и (40.34) пропорциональны обменному расщеплению и по порядку величины равны

$$c_i \approx \frac{D_{12}}{E_1 - E_2} \Delta,$$

где D_{12} — недиагональная константа деформационного потенциала, определяющая изменение расстояния между данной зоной 1 и соседней зоной 2 при заданной деформации, т. е. в данном случае константа D_5 в (31.14), а $E_1 - E_2$ — расстояние между этими зонами.

Используя значения упругих постоянных из рис. 70, можно оценить значения констант c_1 : для ZnO ≈ 2 эв, для CdS ≈ 1 эв.

Формула (40.34) справедлива лишь при достаточно малых деформациях, когда $D_5|\epsilon_+|$ значительно меньше расстояния между валентными зонами и, следовательно, $2c_1|\epsilon_+| < \Delta$. При больших деформациях деформационное расщепление должно «насыщаться» и приближаться к величине порядка обменного расщепления.

В заключение заметим, что, как видно из (40.31) и (40.34), при сдвиговых деформациях ϵ_{xz} и ϵ_{yz} происходит перепутывание состояний, расщепившихся в результате обменного расщепления, что должно привести к возгоранию оптически неактивных состояний.

Обменное взаимодействие в полупроводниках с вырожденными зонами

В кубических кристаллах с четырехкратно вырожденной валентной зоной (Γ_8) и невырожденной зоной проводимости (Γ_6 или Γ_7) основное состояние прямого экситона, как указывалось в § 27, соответствует представлению $\mathcal{D}_8 = \Gamma_8 \times \Gamma_7$.

В том случае, когда одна из зон простая, волновая функция экситона может быть записана в виде

$$\Psi_{m\mu} = \sum_n \mathcal{F}_n^\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_m u_n = \varphi_m \psi_\mu, \quad \text{где} \quad \psi_\mu = \sum_{n=1}^4 \mathcal{F}_n^\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) u_n.$$

Плавные функции $\mathcal{F}_n^\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_{\mathcal{K}n}^\mu(\mathbf{r}) e^{i\mathcal{K}\mathbf{r}}$ не зависят от индекса функций зоны проводимости, так как оператор (27.63), определяющий эти функции, не зависит от этих индексов, если, конечно, в \mathcal{H}^{eh} не учитывается обменное взаимодействие. Для основного состояния экситона функции ψ_μ в точке $\mathbf{k}=0$ преобразуются по тому же представлению Γ_8 , что и функции дна зоны u_n . Поэтому среди медленных функций $f_n^\mu(\mathbf{r})$, соответствующих $\mathcal{K}=0$, имеются функции, преобразующиеся по всем представлениям, содержащимся в произведении $\Gamma_8 \times \Gamma_8 = A_1 + A_2 + E + 2F_1 + 2F_2$, т. е. среди них имеется одна функция, преобразующаяся по представлению A_1 и отличная от нуля при $\mathbf{r}=0$. Эту функцию мы будем обозначать индексом $f_1 = f_\mu^\mu$. При этом предполагается, что функция ψ_μ преобразуется так же, как функция дна зоны u_μ . Соответственно функцию $\Psi_{m\mu}$ при $\mathcal{K}=0$ можно записать в виде

$$\Psi_{0m\mu} = \varphi_m \psi_{0\mu} = \varphi_m \left[u_\mu f_1(\mathbf{r}) + \sum_{n \neq \mu} f_n^\mu(\mathbf{r}) u_n \right]. \quad (40.36)$$

Представление $\mathcal{D}_8 = \Gamma_8 \times \Gamma_7 = E + F_1 + F_2$ приводимо и обменное взаимодействие расщепляет его на три терма. Оператор $\mathcal{H}^{обм}$, определяющий это расщепление, должен содержать три константы, так как $\mathcal{D}_8 \times \mathcal{D}_8$ содержит единичное представление три раза и может быть записан в виде

$$\mathcal{H}^{обм} = \Delta_0 + \Delta_1 (\mathbf{J}\sigma) + \Delta_2 (J_x^3 \sigma_x + J_y^3 \sigma_y + J_z^3 \sigma_z). \quad (40.37)$$

При этом операторы J_i действуют на волновые функции ψ_μ , а операторы σ_i — на функции зоны проводимости φ_m . Если функции представления Γ_8 образованы только из функций одного представления F_2 или F_1 , то в этом приближении $\Delta_2 = 0$, а

$$\Delta_0 = -\frac{3}{2} \Delta_1 = \frac{1}{2} \mathcal{V} \int |f_1(0)|^2 \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) S^*(\mathbf{r}_1) S(\mathbf{r}_2) X(\mathbf{r}_1) X^*(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

где $X(\mathbf{r})$ — одна из функций, преобразующихся по представлению F_2 (или F_1), а $S(\mathbf{r})$ — функция, преобразующаяся по единичному

представлению. Очевидно, что в сферическом приближении гамильтониан (40.37) не содержит последнего слагаемого. При этом $\mathcal{D}_3 = \mathcal{D}_{1/2} \times \mathcal{D}_{3/2} = \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2$. При понижении симметрии до T_d представление \mathcal{D}_1^- переходит в Γ_2 (а \mathcal{D}_1^+ — в F_1) и \mathcal{D}_2^- расщепляется на $E + F_1$ (а \mathcal{D}_2^+ — на $E + F_2$). Оператор \mathcal{H}_e , описывающий расщепление экситонного уровня при малых деформациях, когда это расщепление намного меньше энергии связи экситона, как указано выше, определяется формулой, подобной (30.9), с заменой b и d на b' и d' (см. (40.21)). Поскольку в данном случае экситонный уровень расщепляется при деформации и в отсутствие обменного взаимодействия, здесь нет необходимости включать в гамильтониан малые слагаемые, описывающие изменение обменного расщепления при деформации.

Поскольку константа Δ_2 обращается в нуль в сферическом приближении, то можно ожидать, что она намного меньше константы Δ_1 . Поэтому мы положим $\Delta_2 = 0$, что позволит диагонализировать \mathcal{H}_e при произвольном направлении деформации. Качественные особенности спектров при $\Delta_2 \neq 0$ мы обсудим далее, используя теоретико-групповые соображения, и покажем, что приведенные ниже экспериментальные данные также свидетельствуют о малости этой константы Δ_2 .

Если ввести приведенный тензор деформации с компонентами

$$e'_{ij} = \begin{cases} e_{ij} & \text{при } i = j, \\ e_{ij} \frac{d}{\sqrt{3}b} & \text{при } i \neq j \end{cases}$$

и перейти к новой системе координат, в которой оси x' , y' , z' являются главными осями приведенного тензора деформации e'_{ij} , а главные значения тензора e' равны e_i ($i = 1, 2, 3$), то в этой системе координат оператор \mathcal{H}_e примет вид

$$\mathcal{H}_e = \mathcal{H}^{обм} + \mathcal{H}_e = b' \sum_i \left(J_i^2 - \frac{5}{4} \right) e_{ij} + \Delta_1 (J' \sigma'). \quad (40.38)$$

При этом мы включили величины Δ_0 и $E_{1g}e = (c - a)e$ в энергию E_0 , от которой далее отсчитывается энергия E .

Выберем в качестве базиса следующие функции $\Psi_i = \Psi_{m\mu} = \Phi_m \psi_\mu$:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \Phi_{1/2} \psi_{3/2}, & \Psi_2 &= \Phi_{-1/2} \psi_{-3/2}, & \Psi_3 &= \Phi_{-1/2} \psi_{1/2}, \\ \Psi_4 &= \Phi_{1/2} \psi_{-1/2}, & \Psi_5 &= \Phi_{-1/2} \psi_{3/2}, & \Psi_6 &= \Phi_{1/2} \psi_{1/2}, \\ \Psi_7 &= \Phi_{1/2} \psi_{-3/2}, & \Psi_8 &= \Phi_{-1/2} \psi_{-1/2}. \end{aligned} \quad (40.39)$$

Здесь Ψ_l — функции, преобразующиеся как $Y_l^{3/2}$, а Φ_m — как $Y_m^{1/2}$. В базисе (40.39) матрица (40.38) имеет вид

$$\mathcal{H}_s = \begin{vmatrix} \mathcal{H}_{II} & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{III} \end{vmatrix}; \quad (40.40)$$

$$\mathcal{H}_{II} = \begin{vmatrix} {}^{3/2}\Delta_1 - F & 0 & 0 & -I \\ 0 & {}^{3/2}\Delta_1 - F & -I & 0 \\ 0 & -I & -(\Delta_1/2) + F & 2i\Delta_1 \\ I & 0 & -2i\Delta_1 & -(\Delta_1/2) + F \end{vmatrix}, \quad (40.40a)$$

$$\mathcal{H}_{III} = \begin{vmatrix} -{}^{3/2}\Delta_1 - F & i\sqrt{3}\Delta_1 & 0 & -I \\ -i\sqrt{3}\Delta_1 & (\Delta_1/2) + F & -I & 0 \\ 0 & -I & -{}^{3/2}\Delta_1 - F & -i\sqrt{3}\Delta_1 \\ -I & 0 & i\sqrt{3}\Delta_1 & (\Delta_1/2) + F \end{vmatrix} \quad (40.40b)$$

Здесь $F = -\frac{b'}{2}(3\varepsilon_3 - \varepsilon)$, $I = \frac{\sqrt{3}}{2}b'(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$.

Решения уравнения $|\mathcal{H}_s - EI| = 0$ имеют вид

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= E_{\pm}^{(s)} = \frac{3}{2}\Delta_1 \pm \sqrt{\Delta_\varepsilon}, \\ E_{3,4} &= E_{\pm}^{(z)} = -\frac{\Delta_1}{2} \pm \sqrt{\Delta_\varepsilon + 4\Delta_1^2 + 2\Delta_1 b'(3\varepsilon_3 - \varepsilon)}, \\ E_{5,6} &= E_{\pm}^{(y)} = -\frac{\Delta_1}{2} \pm \sqrt{\Delta_\varepsilon + 4\Delta_1^2 + 2\Delta_1 b'(3\varepsilon_2 - \varepsilon)}, \\ E_{7,8} &= E_{\pm}^{(x)} = -\frac{\Delta_1}{2} \pm \sqrt{\Delta_\varepsilon + 4\Delta_1^2 + 2\Delta_1 b'(3\varepsilon_1 - \varepsilon)}, \end{aligned} \quad (40.41)$$

где

$$\Delta_\varepsilon = \frac{b'^2}{2} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)^2\}, \quad \varepsilon = \sum_i \varepsilon_{ii}.$$

Собственные функции гамильтониана (40.40) представляют суперпозицию функций (40.36), (40.39):

$$\Psi^v = \sum_l A_l^v \Psi_l = \sum_{m\mu n} A_{m\mu}^v f_n^\mu(\mathbf{r}) u_n \Phi_m. \quad (40.42)$$

Для состояний с $v = 1 - 4$

$$\begin{aligned} A_1^v &= -\frac{I}{{}^{3/2}\Delta_1 - F - E_v} A_4^v, \quad A_2^v = \pm i A_1^v, \quad A_3^v = \pm i A_4^v, \\ |A_4^v|^2 &= \frac{1}{2} \frac{{}^{3/2}\Delta_1 - F - E_v}{(1 \pm 2)\Delta_1 - 2E_v}. \end{aligned} \quad (40.42a)$$

Для состояний с $v = 5 - 8$

$$\begin{aligned} A_5^v &= \frac{-I \pm \sqrt{3}\Delta_1}{{}^{3/2}\Delta_1 + F + E} A_8^v, \quad A_6^v = \mp i A_8^v, \quad A_7^v = \mp i A_5^v, \\ |A_8^v|^2 &= \frac{1}{4} \frac{{}^{3/2}\Delta_1 + F + E_v}{(\Delta_1/2) + E_v}. \end{aligned} \quad (40.42b)$$

Верхний знак в (40.42а, б) соответствует $\nu=1, 2, 5, 6$, нижний $\nu=3, 4, 7, 8$.

Если разложить плавные функции $f_{mn}^\mu(\mathbf{r})$ в ряд Фурье (40.3), то функцию Ψ^ν в общем случае, когда обе зоны вырождены и $f(\mathbf{r})$ зависит от обоих индексов m и n , можно записать в виде

$$\Psi_0^\nu(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{mnl\mu} A_{mnl\mu}^\nu f_{mn}^\mu(\mathbf{r}) \varphi_m u_n = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{mnlk} C_{mkl, n, -k}^\nu e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \varphi_m u_n,$$

где

$$C_{mkl, n, -k}^\nu = \sum_{\mu} A_{mnl\mu}^\nu C_{mkl, n, -k}^\mu.$$

Следовательно, согласно (40.1), (40.36) матричный элемент оператора тока равен

$$\begin{aligned} j^\nu &= \sum_{mnlk} C_{mkl, n, -k}^{\nu*} j_{mKl} = \sum_{\mu mnlk} A_{mnl\mu}^{\nu*} C_{mkl, n, -k}^\mu j_{mKl} = \\ &= \sqrt{\mathcal{V}} \sum_{mnl\mu} A_{mnl\mu}^{\nu*} f_{mn}^{\mu*}(0) j_{mKl} = \sqrt{\mathcal{V}} \sum_{mn} f_{mn}^{\nu*}(0) j_{mKl}. \end{aligned} \quad (40.43)$$

Здесь

$$f_{mn}^\nu(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} A_{mnl\mu}^\nu f_{mn}^\mu(\mathbf{r}).$$

В случае простой зоны проводимости, когда при $\mathbf{r}=0$ отлична от нуля только функция $f_\mu^\mu = f_1$ и $f(\mathbf{r})$ не зависит от m ,

$$j^\nu = \sqrt{\mathcal{V}} f_1^*(0) \sum_{\mu m} A_{m\mu}^{\nu*} j_{mK\mu}. \quad (40.43а)$$

Оператор тока $j_{mK\mu} = e v_{mK\mu}$, где $v_{m\mu}$ — междузонная матрица оператора скорости, определяемая для данной зонной структуры формулами (36.21). Используя эту формулу и учитывая, что функции $K\varphi_\mu$ связаны с функциями φ_μ соотношениями

$$K\varphi_{3/2} = \varphi_{-3/2}, \quad K\varphi_{1/2} = -\varphi_{1/2}, \quad K\varphi_{-1/2} = \varphi_{1/2}, \quad K\varphi_{3/2} = -\varphi_{3/2},$$

найдем, что для состояний $\nu=1-8$, энергия которых определяется формулой (40.41), отличные от нуля компоненты комплексной диэлектрической проницаемости $\tilde{\kappa}_{ij} = -(4\pi/\omega) \tilde{\sigma}_{ij}$ в соответствии с (36.1) определяются выражениями *)

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_{zz} &= -4\pi \frac{e^2 s^2}{\hbar \omega^2} |f_1(0)|^2 \sum_{\nu=3, 4} \frac{B_\nu^z}{\omega - \omega_\nu}, \\ \tilde{\kappa}_{yy} &= -4\pi \frac{e^2 s^2}{\hbar \omega^2} |f_1(0)|^2 \sum_{\nu=5, 6} \frac{B_\nu^y}{\omega - \omega_\nu}, \\ \tilde{\kappa}_{xx} &= -4\pi \frac{e^2 s^2}{\hbar \omega^2} |f_1(0)|^2 \sum_{\nu=7, 8} \frac{B_\nu^x}{\omega - \omega_\nu}, \end{aligned} \quad (40.44)$$

*) При этом мы пренебрегаем нерезонансными слагаемыми, содержащими в знаменателе $\omega + \omega_\nu$.

где

$$\begin{aligned}
 B_v^z &= 1 - \frac{2\Delta_1 + (b'/2)(3\epsilon_3 - \epsilon)}{E_v + (\Delta_1/2)} & (v = 3, 4), \\
 B_v^y &= 1 - \frac{2\Delta_1 + (b'/2)(3\epsilon_2 - \epsilon)}{E_v + (\Delta_1/2)} & (v = 5, 6), \\
 B_v^x &= 1 - \frac{2\Delta_1 + (b'/2)(3\epsilon_1 - \epsilon)}{E_v + (\Delta_1/2)} & (v = 7, 8).
 \end{aligned}
 \tag{40.45}$$

Здесь

$$\omega_v = (E_v/\hbar) + i\gamma_v.$$

Константа γ_v , определяющая ширину экситонных линий, в рассматриваемом приближении стремится к нулю. Так как мы ограничились только дипольными переходами, то компоненты $\tilde{\chi}_{ij}$ можно сразу вычислять в главных осях приведенного тензора деформации.

Из (40.41) видно, что в отсутствие деформации восемь уровней, определяемых уравнениями (40.41), сливаются в два, соответствующие указанным выше представлениям D_1 и D_2 , которые при $\Delta_2 \neq 0$ переходят в F_2 и $E + F_1$ (какие именно из уровней совпадают при $\epsilon=0$ — это зависит от знака константы Δ_1). При деформации по оси z , когда $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{xx}$, $\epsilon_3 = \epsilon_{zz}$, симметрия кристалла понижается с T_d до D_{2d} , эти представления расщепляются

$$E \rightarrow B_1 + A_1, \quad F_1 \rightarrow E + A_2, \quad F_2 \rightarrow E + B_2,$$

образуя шесть различных термов, два из которых двукратно вырождены.

В отсутствие деформации оптически активным является только уровень F_2 . В деформированном кристалле, как легко проверить из таблицы характеров представлений группы D_{2d} , оптически активными являются два двукратно вырожденных терма (при электрическом поле, перпендикулярном оси z , т. е. в σ -поляризации), которым соответствуют в (40.41) уровни $E_5 = E_7$ и $E_6 = E_8$, и терм B_2 (при $\mathcal{E} \parallel Oz$, т. е. в π -поляризации), которому соответствует один из уровней E_3 или E_4 . Две из этих линий происходят из оптически активного терма F_2 , а одна — из неактивного терма F_1 и поэтому ее интенсивность стремится к нулю при $\epsilon'_{zz} = \epsilon_{zz} - \epsilon_{xx} = 0$. При деформации по оси $[111]$ в системе координат $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$ и $[111]$, как и при деформации по $[001]$, $\epsilon_1 = \epsilon_2$. Поэтому выражения для E_v и B_v для этого случая отличаются от формул для $P \parallel [001]$ при одинаковой величине $\epsilon_1 - \epsilon_2$ лишь заменой b' на $d'/\sqrt{3}$. В обоих случаях, как видно из (40.41), $E_5 = E_7$ и $E_6 = E_8$, а один из уровней $E_{1,2}$ совпадает с одним из уровней $E_{3,4}$. Совпадение результатов для направлений $[001]$ и $[111]$ является следствием приближения $\Delta_2 = 0$.

Теоретико-групповой анализ дает возможность установить различие между этими случаями и качественно проанализиро-

вать роль членов с Δ_2 . При $P \parallel [111]$, когда симметрия понижается с T_d до C_{3v} , термы E , F_1 , F_2 расщепляются, переходя в представления группы C_{3v} :

$$E \rightarrow E, \quad F_1 \rightarrow E + A_2, \quad F_2 \rightarrow E + A_1.$$

Состояниям E группы C_{3v} , произошедшим из F_1 и F_2 , соответствуют уровни $E_{5,7}$ и $E_{6,8}$, а состоянию E , произошедшему из E группы T_d , соответствует пара совпадающих уровней из $E_{1,2}$ и $E_{3,4}$.

Состоянию A_2 соответствует невырожденный терм из пары $E_{1,2}$, а состоянию A_1 — невырожденный терм из пары $E_{3,4}$.

Согласно теории групп разрешены переходы в состояние A_1 в параллельном поле и в состоянии E в перпендикулярном поле. В отличие от случая $P \parallel [001]$ здесь вырождение уровней, произошедших из E (T_d), не снимается и при $\Delta_2 \neq 0$, причем в эти уровни разрешен переход в перпендикулярном поле, вероятность которого обращается в нуль и при $\Delta_2 \rightarrow 0$, и при $\epsilon \rightarrow 0$.

При деформации по оси $[011]$ в системе осей $[100]$, $[01\bar{1}]$ и $[011]$, где тензор ϵ диагонален и все три компоненты ϵ_1 , ϵ_2 и ϵ_3 различны, происходит полное снятие вырождения. При этом симметрия понижается до C_{2v} и представления группы T_d переходят в следующие представления группы C_{2v} :

$$E \rightarrow A_1 + A_2, \quad F_2 \rightarrow A_1 + B_1 + B_2, \quad F_1 \rightarrow A_2 + B_1 + B_2.$$

Согласно теории групп разрешены переходы: при x -поляризации — в B_1 , при y -поляризации — в B_2 , при z -поляризации — в A_1 .

Таким образом, представлениям A_1 соответствуют термы $E_{3,4}$, представлениям B_1 — термы $E_{7,8}$, представлениям B_2 — термы $E_{5,6}$, представлениям A_2 — термы $E_{1,2}$. Этот анализ показывает, что при деформации по направлению $[011]$ учет слагаемых с Δ_2 не приводит к каким-либо новым качественным особенностям спектра.

На рис. 71 и 72 показано изменение положения экситонных линий в кубическом кристалле ZnS при сжатии по осям $[001]$ и $[011]$. Положение линий определялось по положению точки перегиба на дисперсионной кривой отражения.

В соответствии с теоретическими расчетами при деформации по $[001]$ в спектре наблюдаются три поляризованные линии: интенсивная линия π и линии σ_1 и σ_2 . Интенсивность линии σ_1 несколько уменьшается с ростом деформации, линия σ_2 наблюдается лишь начиная с некоторых деформаций и ее интенсивность растет с увеличением деформации. При деформации линии π и σ_2 смещаются в длинноволновую сторону. Если бы обменное взаимодействие отсутствовало, эти линии бы сливались в одну линию, которой в формулах (40.30) при $\gamma = -1$ соответствует нижний знак. Линия σ_1 при деформации смещается в

коротковолновую сторону — этой линии в (40.30) при $\gamma = -1$ соответствует верхний знак и для нее $\sigma_{zz} \sim \Theta_{\zeta\zeta} = 0^*$).

При деформации по [011], когда уровни E_5, E_7 и E_6, E_8 не вырождены, в σ -поляризации при отражении от плоскости (100), когда $\mathcal{E} = \mathcal{E}_y$, наблюдаются линии E_5 и E_6 , а при отражении от $(01\bar{1})$, когда $\mathcal{E} = \mathcal{E}_x$, — линии E_7 и E_8 . В π -поляризации в обоих случаях наблюдается одна из линий E_3 или E_4 . Интенсивность другой из этих линий, как следует из (40.44), (40.45), в этом случае хотя и не равна нулю, как при $P \parallel [001]$

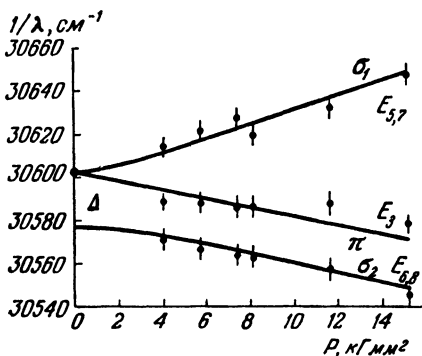


Рис. 71. Расщепление основного состояния экситона в кубическом ZnS при деформации по [001] и отражении света от плоскостей (100) и (011) [43.14].

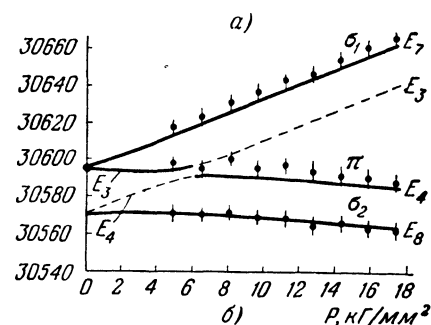
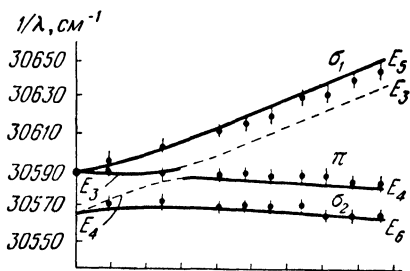


Рис. 72. Расщепление основного состояния экситона в кубическом ZnS при деформации по [011] и отражении света от плоскостей (100) (а) и $(01\bar{1})$ (б) [43.15].

и $P \parallel [111]$, но очень мала. Интенсивность этих линий, так же как и различие в положении линий σ_1 и σ_2 при отражении от неэквивалентных граней, определяется величиной фактора анизотропии

$$\Theta = \frac{d'}{\sqrt{3} b'} \frac{S_{44}}{2(S_{11} - S_{12})} - 1.$$

На рис. 71 и 72 сплошными линиями показаны теоретические кривые $E^v(\epsilon)$, рассчитанные для уровней $E_{5,6}, E_{7,8}$ и $E_{3,4}$ по формулам (40.41). При этом параметры Δ_1, b', d' и E_{1g} выбраны из

* Формулы (40.27)—(40.30) выведены для случая, когда деформационное расщепление Δ_ϵ больше энергии связи экситона E_0 . Однако они применимы и к обратному случаю $\Delta^{обм} \ll \Delta_\epsilon \ll E_0$ (с заменой b на b' и d на d'), так как для основного состояния экситона функции ψ_μ (40.36) преобразуются так же, как и функции у дна валентной зоны u_μ .

условия лучшего совпадения с экспериментальными точками. Их значения:

$$\Delta = 4\Delta_1 = -2,8 \cdot 10^{-3} \text{ эв}, \quad E_{1g} \simeq 4 \text{ эв}, \\ b' = -1,5 \text{ эв}, \quad d' = -4,5 \text{ эв}.$$

Во всех проведенных выше расчетах мы нигде не учитывали вклад в энергию экситона, связанный с аннигиляционным или резонансным взаимодействием, определяемым уравнением (27.69). Действительно, при использовании метода инвариантов мы не включали в гамильтониан слагаемые, зависящие от направления волнового вектора экситона \mathcal{K} , т. е. тем самым учитывали лишь слагаемые (27.77). Покажем, что спектр экситонов с учетом аннигиляционного взаимодействия совпадает со спектром возбуждений, получаемым из решения уравнений Максвелла в пренебрежении запаздыванием, если в них подставить диэлектрическую проницаемость, вычисленную без учета аннигиляционного взаимодействия. Спектр экситонов с учетом (27.69) определяется уравнением

$$|E_i \delta_{ij} + \mathcal{H}_{ij}^a - E \delta_{ij}| = 0. \quad (40.46)$$

При этом предполагается, что обменное взаимодействие (27.77) включено в гамильтониан \mathcal{H}^{eh} и собственные значения энергии и собственные функции определены с учетом этого взаимодействия. Так как матричные элементы (27.69) можно записать в виде

$$\mathcal{H}_{ij}^a = R_i^* R_j, \quad (40.47)$$

где

$$R_j = \frac{2\hbar}{mE_g} \frac{\sqrt{\pi} e}{\sqrt{\kappa} \mathcal{K}} \sum_{mna} f_{mn}^j(0) p_{Knm}^a \mathcal{K}^a, \quad (40.47a)$$

то определитель в (40.46) имеет вид, подобный (32.186), и (40.46) сводится к уравнению

$$\prod_i (E_i - E) \left[1 + \frac{4\pi e^2}{\kappa \mathcal{K}^2} \frac{\hbar^2}{m^2 E_g^2} \sum_v (E_v - E)^{-1} \times \right. \\ \left. \times \sum_{am'n'} f_{m'n'}^{*v}(0) p_{m'Kn}^a \mathcal{K}^a \sum_{\beta mn} f_{mn}^v(0) p_{Knm}^\beta \mathcal{K}^\beta \right] = 0. \quad (40.48)$$

Для оптически неактивных термов, для которых

$$\sum_{mn} f_{mn}^v(0) p_{Knm}^a = 0,$$

при всех α корни уравнения (40.48) $E_i = E_v$; точно так же для N -кратно вырожденных оптически активных термов $N - 1$

корней E_i , равны E_v . Остальные корни определяются уравнением

$$\kappa + \frac{4\pi e^2}{\mathcal{K}^2} \frac{\hbar^2}{m^2 E_g^2} \sum_v (E_v - E)^{-1} \times \\ \times \sum_{\alpha m' n'} f_{m' n'}^{*v}(0) p_{m' K n}^\alpha \mathcal{K}_\alpha \sum_{\beta m n} f_{m n}^v(0) p_{K n m}^\beta \mathcal{K}_\beta = 0. \quad (40.49)$$

Последнее уравнение, как и (32.18в), совпадает с феноменологическим уравнением (32.18г)

$$\sum_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \mathcal{K}_\alpha \mathcal{K}_\beta = 0, \quad (40.50)$$

которое следует из уравнений Максвелла в пренебрежении запаздыванием, если учесть вклад в диэлектрическую проницаемость κ , связанный с возбуждением экситонов; согласно (36.1) этот вклад можно записать в виде

$$\Delta \kappa_{\alpha\beta}^{\omega} = - \frac{4\pi}{\hbar \omega^2 \mathcal{V}} \sum_v \frac{j_v^\alpha j_v^{\beta*}}{\omega - \omega_v}. \quad (40.51)$$

Подставив в (40.51) значения матричных элементов оператора тока, которые согласно (40.43) в дипольном приближении равны

$$j_v^\alpha = \frac{\sqrt{\mathcal{V}} e}{m} \sum_{m n} f_{m n}^{v*}(0) p_{m K n}^\alpha, \quad (40.52)$$

получим из (40.50) — (40.52) уравнение, совпадающее с (40.49). Этот феноменологический подход показывает, что аннигиляционное взаимодействие определяется потенциалом $U(\mathbf{r})$ с диэлектрической проницаемостью $\kappa(\omega_v)$ (за вычетом вклада в κ , связанного с возбуждением данного экситона), т. е. практически оптической диэлектрической проницаемостью κ_∞ , тогда как прямое кулоновское взаимодействие для экситона большого радиуса определяется статической диэлектрической проницаемостью κ_0 .

Для анализа оптических данных следует рассчитать коэффициент отражения (или поглощения) с помощью уравнений Максвелла, используя приведенные выше значения тензора κ , вычисленные без учета аннигиляционного взаимодействия. Однако во всех рассмотренных выше экспериментальных ситуациях нагрузка P , волновой вектор света \mathbf{q} и электрическое поле \mathcal{E} были направлены по главным осям деформированного кристалла. В этих условиях возбуждаются только «поперечные» экситоны, для которых $\sum_\alpha j_v^\alpha q_\alpha = 0$, и поэтому положение линий поглощения или положение точек перегиба на дисперсионных кривых коэффициента отражения совпадает со значением $\omega_v = E_v/\hbar$, где E_v определяется по формулам, не учитывающим вклада дальнедействующих сил в энергию экситона.

Матричный элемент оператора тока для перехода в экситонное состояние (приложение к § 40)

Оператор тока в представлении вторичного квантования имеет вид

$$j = \sum_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} j_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} a_{m\mathbf{k}_1}^+ a_{n\mathbf{k}_2}. \quad (40.53)$$

Здесь $a_{m\mathbf{k}}^+$ и $a_{m\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в \mathbf{k} -представлении, связанные с соответствующими операторами в \mathbf{x} -представлении $\psi_m^+(\mathbf{r})$ и $\psi_m(\mathbf{r})$ соотношениями

$$\psi_m^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} a_{m\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \psi_m(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} a_{m\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (40.54)$$

Эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям, подобным (27.90):

$$\{a_{m\mathbf{k}}^+ a_{m'\mathbf{k}'}\} = \delta_{mm'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \{a_{m\mathbf{k}}^+ a_{m'\mathbf{k}'}^+\} = \{a_{m\mathbf{k}} a_{m'\mathbf{k}'}\} = 0, \quad (40.55)$$

а средние по вакууму равны:

$$\langle 0 | a_{m\mathbf{k}} a_{m'\mathbf{k}'}^+ | 0 \rangle = \delta_{mm'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \langle 0 | a_{m\mathbf{k}}^+ a_{m'\mathbf{k}'} | 0 \rangle = 0. \quad (40.56)$$

Используя (40.56), легко проверить, что матричный элемент оператора (40.53) между состояниями $\psi_{n\mathbf{k}_2} = a_{n\mathbf{k}_2}^+ | 0 \rangle$ и $\psi_{m\mathbf{k}_1} = a_{m\mathbf{k}_1}^+ | 0 \rangle$, т. е. $\langle \psi_{m\mathbf{k}_1}^+ | j | \psi_{n\mathbf{k}_2} \rangle$, действительно равен $j_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}$. При этом $\psi_{m\mathbf{k}}^+ = \langle 0 | a_{m\mathbf{k}}$.

Введем операторы рождения и уничтожения дырки $b_{n\mathbf{k}_2}^+$ и $b_{n\mathbf{k}_2}$, связанные с операторами $a_{n\mathbf{k}_2}$ и $a_{n\mathbf{k}_2}^+$ соотношениями, подобными (27.87):

$$b_{n\mathbf{k}_2}^+ = a_{K(n\mathbf{k}_2)}, \quad b_{n\mathbf{k}_2} = a_{K(n\mathbf{k}_2)}^+. \quad (40.57)$$

Эти операторы удовлетворяют соотношениям, аналогичным (40.55), (40.56), и связаны с операторами в \mathbf{x} -представлении $\varphi_n^+(\mathbf{r})$ и $\varphi_n(\mathbf{r})$ (27.92) соотношениями, подобными (40.54). Оператор j в новых обозначениях имеет вид

$$j = \sum_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} j_{m\mathbf{k}_1, K(n\mathbf{k}_2)} a_{m\mathbf{k}_1}^+ b_{n\mathbf{k}_2}^+. \quad (40.58)$$

Матричный элемент этого оператора между основным состоянием кристалла и состоянием $a_{m\mathbf{k}_1}^+ b_{n\mathbf{k}_2}^+ | 0 \rangle$, соответствующим рождению пары: электрона $m\mathbf{k}_1$ и дырки $n\mathbf{k}_2$, равен

$$j_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2, 0} = j_{m\mathbf{k}_1, K(n\mathbf{k}_2)} \quad (40.59)$$

Волновая функция экситона в \mathbf{k} -представлении имеет вид

$$\Psi_e = \sum_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} C_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}^e a_{m\mathbf{k}_1}^+ b_{n\mathbf{k}_2}^+ | 0 \rangle; \quad (40.60)$$

здесь коэффициенты $C_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}^e$ определяются уравнениями (40.2), (40.3). Вычислив матричный элемент оператора (40.57) между основным состоянием $| 0 \rangle$ и состоянием Ψ_e^+ , получим

$$j^e = \sum_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2} C_{m\mathbf{k}_1, n\mathbf{k}_2}^{*e} j_{m\mathbf{k}_1, K(n\mathbf{k}_2)}. \quad (40.61)$$

Эффективные массы и константы деформационного потенциала Ge, Si и некоторых соединений A_3B_5

Все эффективные массы — в единицах массы свободного электрона m_0 ; A , B и D — в единицах $\hbar^2/2m_0$; Δ_{co} и константы деформационного потенциала — в эв.

	Зона проводимости				Валентная зона		
	Положение нижнего экстремума	m_{Γ}^* (в точке Γ)	m_{\parallel}^* (в точке экстремума X , Δ или L)	m_{\perp}^*	Δ_{co}	Средние массы дырок	
						легких	тяжелых
Ge	L'	$0,041^c$	$1,588^c$	$0,0815^c$	$0,29^b$	$0,045^c$	$0,35^c$
Si	Δ	—	$0,9163^c$	$0,1905^c$	$0,044^b$	$0,12^c$	$0,44^c$
InSb	Γ	$0,014^d$ $0,0145^g$	—	—	$0,90^a$ $0,81^d$	$0,021^h$	$0,39^h$
InP	Γ	$0,067^d$ $0,073^h$	—	—	$0,21^d$	—	$0,4^h$
InAs	Γ	$0,022^d$ $0,026^g$	—	—	$0,41^a$ $0,43^d$	$0,025^h$	$0,41^h$
GaSb	Γ	$0,047^{d, g}$	—	—	$0,80^a$ $0,70^d$	$0,06^h$	$0,3^h$
GaP	X	$0,12^d$	$(m_{\parallel}^* m_{\perp}^{*2})^{1/3} = 0,35^d$		$0,13^d$	—	—
GaAs	Γ	$0,068^d$ $0,065^f$	—	—	$0,35^d$	$0,12^h$	$0,68^h$
AlSb	X	$0,09^d$	$(m_{\parallel}^* m_{\perp}^{*2})^{1/3} = \begin{cases} 0,39^d \\ 0,25^f \end{cases}$		$0,75^a$ $0,60^d$	—	$0,9^h$

Параметры валентной зоны

	A	B	D	k	g
Ge	$-13,2^l$ $-13,27^l$ $-13,38^m$	$-8,2^l$ $-8,63^j$ $-8,5^m$	$-19,5^l$ $-19,4^j$ $-19,8^m$	$-3,29^d$ $-3,60^l$ $-3,41^m$	$-0,06^m$
Si	$-4,22^e$ $-4,28^j$	$-1,00^e$ $-0,75^j$	$-4,78^e$ $-5,4^j$	—	—
InSb	-25^g	-21^g	-40^g	$-10-13^l$	—
CaSb	-11^g	-6^g	-15^g	—	—

Константы деформационного потенциала

	$E_{1g} = \Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u - a$	Ξ_u	b	d
Ge	2,9 ^q	16,0 ^q	-2,8 ^k -2,7 ^p -2,4 ^q	-5,7 ^k -4,5 ^l -4,7 ^p -3,5 ^q
Si	3,8 ^q	8,6 ^q	-1,4 ^l -2,4 ^q	-3,1 ^j -5,3 ^q
GaP	3,7 ⁿ	6,2 ⁿ	-1,3 ⁿ	-4,0 ⁿ

Источники

<i>a</i>	27.2	<i>e</i>	27.15	<i>i</i>	27.19	<i>m</i>	31.4
<i>b</i>	27.3	<i>f</i>	27.16	<i>j</i>	29.1	<i>n</i>	43.7
<i>c</i>	27.7	<i>g</i>	27.17	<i>k</i>	30.1	<i>p</i>	43.8
<i>d</i>	27.14	<i>h</i>	27.18	<i>l</i>	31.3	<i>q</i>	43.10

Т а б л и ц а 40.3

Кристаллическое и спин-орбитальное расщепление, эффективные массы, *g*-факторы и константы деформационного потенциала в гексагональных CdS, CdSe, ZnS ([27.4, 27.5, 27.13, 43.17])

	CdS	CdSe	ZnS
$\Delta_1, 10^{-3}$ эВ	28,4	68,8	55
$\Delta_2, 10^{-3}$ эВ	20,9	138,0	28 — 31
$\Delta_3, 10^{-3}$ эВ	20,7	150,7	28 — 31
$m_{e\parallel}^*$	0,205±0,01	0,13±0,01	0,28±0,03
$m_{e\perp}^*$	0,205±0,01	0,13±0,01	0,28±0,03
$m_{h\parallel}^*(\Gamma_9)$	5	1	1,4
$m_{h\perp}^*(\Gamma_9)$	0,7±0,1	0,45±0,09	0,49±0,06
$g_{e\parallel}$	1,78±0,05	0,6±0,1	1,9
$g_{e\perp}$	1,72±0,1	0,51±0,05	2,2±0,2
$g_{h\parallel}(\Gamma_9)$	1,15±0,5	—	1,5
$D_1 - D_{\parallel}$	-2,8	-0,76	—
$D_2 - D_{\perp}$	-4,5	-3,7	—
D_3	-1,3	-4,0	—
D_4	2,9	2,2	—
$ D_5 $	1,5	1,2	—
$ D_6 $	1,2	1,5	—

D_{\parallel} и D_{\perp} — константы деформационного потенциала для зоны проводимости (Γ_7).

I. Монографии по теории групп и ее применению в физике и справочные таблицы

- I. 1. Е. Вигнер, Теория групп и ее приложение к квантовомеханической теории атомных спектров, ИЛ, 1961.
- I. 2. Ф. Мурнаган, Теория представлений групп, ИЛ, 1950.
- I. 3. Г. Я. Любарский, Теория групп и ее применение в физике, Физматгиз, 1957.
- I. 4. Б. Л. Ван-дер-Варден, Метод теории групп в квантовой механике, Харьков, 1938.
- I. 5. М. Хамермеш, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, Изд. «Мир», 1966.
- I. 6. В. Хейне, Теория групп в квантовой механике, ИЛ, 1963.
- I. 7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, гл. XII, Физматгиз, 1963.
- I. 8. И. М. Гельфанд, Р. А. Минлос, З. Я. Шапиро, Представления группы вращений и группы Лоренца, Физматгиз, 1958.
- I. 9. М. И. Петрашень, Е. Д. Трифонов, Применение теории групп в квантовой механике, Изд. «Наука», 1967.
- I. 10. Б. Н. Делоне, Н. Н. Падуров, А. Д. Александров, Математические основы структурного анализа кристаллов, ГТТИ, 1934.
- I. 11. Г. Фробениус, Теория характеров и представлений групп, Харьков, 1937.
- I. 12. P. H. E. Meier, E. Bauer, Group Theory. The Application to Quantum Mechanics, Amsterdam, 1965.
- I. 13. M. Tinkham, Group Theory and Quantum Mechanics, New York, 1964.
- I. 14. Г. Джонс, Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах, Изд. «Мир», 1968.
- I. 15. Ч. Кэртис, И. Райнер, Теория представлений конечных групп и ассоциативных алгебр, Изд. «Наука», 1969.
- I. 16. J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, N. Y., 1964.
- I. 17. Р. Нокс, А. Голд, Симметрия в твердом теле, Изд. «Наука», 1970.
- I. 18. International Tables for X-ray Crystallography, Birmingham, 1952.
- I. 19. Landolt-Bornstein, 6. Auflage, Bd. I, Teil 4, Berlin, 1955.
- I. 20. Д. К. Фаддеев, Таблицы основных унитарных представлений федоровских групп, Изд. АН СССР, 1961.
- I. 21. О. В. Ковалев, Неприводимые представления пространственных групп, Изд. АН УССР, Киев, 1961.
- I. 22. Г. Штрайтвольф, Теория групп в физике твердого тела, Изд. «Мир», 1971.

II. Литература по темам

1. Представления точечных групп

- 1.1. H. V. McIntosh, J. Mol. Spectr. 5, 269 (1960).
- 1.2. G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, H. Statz, Properties of the 32 Point Groups, Massachusetts, 1963.

2. Матрично-алгебраическое описание пространственных групп

- 2.1. F. Seitz, Z. Kristallogr. **88**, 433 (1934); **90**, 289 (1935); **91**, 336 (1935); **94**, 100 (1936).

3. Метод Зейтца построения представлений пространственных групп

- 3.1. F. Seitz, Ann. Math. **37**, 17 (1936).

4. Проективные представления, общая теория

- 4.1. I. Schur, J. f. Math. **127**, 20 (1904); **132**, 85 (1907); **139**, 155 (1911).
См. также монографии: [I. 5], гл. XII; [I. 15].

5. Проективные представления 32 точечных групп

- 5.1. W. Döring, Z. Naturforsch. **142**, 343 (1959).
- 5.2. Н. В. Кудрявцева, В. А. Чалдышев, Изв. вузов, физика, **3**, 133 (1962); **4**, 98 (1962).
- 5.3. A. C. Hurley, Phil. Trans. Roy. Soc. A **1108**, **260**, 1 (1966).

6. Операторы проектирования для пространственных групп

- 6.1. W. Döring Z. Naturforsch. **142**, 343 (1959).
- 6.2. I. V. V. Raghavacharyulu, Can. J. Phys. **39**, 830 (1961).
- 6.3. М. С. Шур, Кристаллография **12**, 981 (1967).

7. Приложение теории групп к физике твердого тела. Обзоры

- 7.1. А. В. Соколов, В. П. Широковский, УФН **60**, 617 (1956); **71**, 485 (1960).
- 7.2. D. F. Johnston, Rep. Progr. Phys. **26**, 67 (1960).
- 7.3. A. Nussbaum, Sol. St. Phys. **18**, 165 (1966).
- 7.4. E. Brown, Sol. St. Phys. **22**, 313 (1968).
См. также монографии [I. 3], [I. 6], [I. 7], [I. 9], [I. 12], [I. 17], [I. 22].

8. Расщепление термов в кристаллическом поле

- 8.1. H. A. Bethe, Ann. Physik **3**, 133 (1929).
- 8.2. K. Hellwege, Ann. Physik **4**, 951 (1948).
- 8.3. P. Bell, Rev. Mod. Phys. **26**, 311 (1954).
- 8.4. P. H. E. Mejer, Phys. Rev. **95**, 1443 (1954).

9. Колебания молекул и кристаллов

Общая теория

- 9.1. М. Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.
- 9.2. А. Марадудин, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, Изд. «Мир», 1965.

Применение теории групп для классификации колебаний молекул

- 9.3. E. Wigner, Gött. Nachr., S. 133 (1930).
- 9.4. J. E. Rosental, G. M. Murphy, Rev. Mod. Phys. **8**, 317 (1936).

Применение теории групп для классификации колебательного спектра в твердом теле

- 9.5. S. Yanagawa, Progr. Theor. Phys. (Kyoto) **10**, 83 (1953).
- 9.6. G. D. Bell, Rev. Mod. Phys. **26**, 311 (1954).
- 9.7. H. Poulet, Ann. Phys. (Paris) **10**, 908 (1955).
- 9.8. I. V. V. Raghavacharyulu, Can. J. Phys. **39**, 1704 (1961).
- 9.9. R. Loudon, Advances Phys. **13**, 423 (1964).
- 9.10. S. H. Chen, Phys. Rev. **163**, 533 (1967).

10. Теория возмущений для вырожденного спектра

- 10.1. Н. Н. Боголюбов, Лекции по квантовой статистике, Киев, 1949
- 10.2. P. O. Lowdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- 10.3. P. Price, Proc. Phys. Soc. **A 63**, 25 (1950).

11. Спинорные представления

Спинорные представления точечных групп

- 11.1. Н. А. Bethe, Ann. Phys. **3**, 133 (1929).

Проективные представления двойных групп

- 11.2. И. П. Бурнейка, И. Б. Левинсон, Труды АН Лит. ССР, серия Б, **4** (27), **3** (1961).
- 11.3. A. Kitz, Phys. St. Sol. **8**, 813 (1965).

12. Аналитические свойства блоховских функций

- 12.1. E. I. Blount, Sol. St. Phys. **13**, 305 (1962).
- 12.2. Y. B. Krieger, Phys. Rev. **156**, 776 (1967).

13. Инверсия времени и теория копредставлений

- 13.1. E. Wigner, Gött. Nachr., **S**, 546 (1932).
- 13.2. C. Herring, Phys. Rev. **52**, 361, 365 (1937).
- 13.3. F. D. Johnston, Proc. Roy. Soc. **A 243**, 546 (1958).
- 13.4. В. А. Чалдышев, Н. В. Кудрявцева, Г. Ф. Караваев, Известия вузов, физика, **2**, 46 (1963).
См. также монографию [1], гл. 26.

14. Правила отбора для пространственных групп

- 14.1. И. Б. Левинсон, Труды АН Лит. ССР, серия Б, **2** (25), 67 (1961).
- 14.2. Э. И. Рашба, ФТТ **1**, 407 (1959).
- 14.3. В. И. Шека, ФТТ **2**, 1211 (1960).
- 14.4. R. J. Elliott, R. Loudon, Phys. Chem. Sol. **15**, 146 (1960).
- 14.5. M. Lax, J. Hopfield, Phys. Rev. **124**, 115 (1961).
- 14.6. C. L. Birman, Phys. Rev. **127**, 1093 (1962); **131**, 1489 (1963); **150**, 771 (1966); J. Phys. Chem. Sol. Suppl. **1**, 669 (1965).
- 14.7. J. Zak, J. Math. Phys. **3**, 1278 (1962).
- 14.8. Г. Ф. Караваев, ФТТ **6**, 3676 (1964).
- 14.9. M. Lax, Phys. Rev. **138 A**, 793 (1965).
- 14.10. J. Birman, M. Lax R. Loudon, Phys. Rev. **145**, 620 (1966).
- 14.11. C. J. Bradley, J. Math. Phys. **7**, 1145 (1966).

15. Применение теории групп для определения линейно независимых компонент тензоров

- 15.1. Н. А. Jahn, Z. Kristallogr. **98**, 191 (1937); Acta Cryst. **2**, 30 (1949).
- 15.2. F. G. Fumi, Nuovo Cimento **9**, 739 (1952).
- 15.3. R. Fieschi, F. G. Fumi, Nuovo Cimento **10**, 865 (1953).
- 15.4. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, ИЛ, 1960.

16. $k\rho$ -метод

- 16.1. L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, E. P. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).
- 16.2. F. C. von der Lage, H. A. Bethe, Phys. Rev. **71**, 612 (1947).
- 16.3. W. Shockley, Phys. Rev. **78**, 173 (1950).
- 16.4. R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 266 (1954); **96**, 280 (1954).
- 16.5. Г. Дрессельгауз, М. Дрессельгауз, сб. «Оптические свойства полупроводников», М., 1970, стр. 315—325.
Учет инверсии времени в $k\rho$ -методе см. [14.2], [14.3].

17. Метод эффективной массы

- 17.1. G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- 17.2. C. Kittel, A. H. Mitchell, Phys. Rev. **96**, 1488 (1954).
- 17.3. J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).

18. Представления пространственных групп в кубических и гексагональных кристаллах

- 18.1. W. Opechowski, Physica **7**, 552 (1940).
 - 18.2. C. Herring, J. Franklin Inst. **233**, 525 (1942).
 - 18.3. W. Döring, A. Lehrer, Ann. Phys. **6**, 215 (1953).
 - 18.4. R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 280 (1954).
 - 18.5. G. F. Koster, Sol. St. Phys. **5**, 173 (1957).
 - 18.6. R. H. Parmenter, Phys. Rev. **100**, 573 (1955).
 - 18.7. R. C. Casella, Phys. Rev. **114**, 1514 (1959).
- См. также [16.1], [14.2], [14.3] и монографии [I. 15], [I. 16], [I. 17].

19. Спектр электронов в кубических кристаллах

- 19.1. G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel, Phys. Rev. **98**, 368 (1955).
 - 19.2. G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
 - 19.3. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Sol. **1**, 82 (1957); **1**, 249 (1957).
 - 19.4. R. Brounstein, E. O. Kane, J. Phys. Chem. Sol. **23**, 1423 (1962).
 - 19.5. К. Д. Товстюк, М. В. Гарнавская, ФТТ **5**, 819 (1963).
- См. также [16.3], [16.4], [17.2], [17.3].

20. Метод инвариантов

- 20.1. J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- 20.2. Г. Е. Пикус, ЖЭТФ **41**, 1258, 1507 (1961).
- 20.3. G. F. Koster, H. Statz, Phys. Rev. **113**, 445 (1959); **115**, 1568 (1959).

21. Мелкие примесные центры

- 21.1. G. F. Koster, J. C. Slater, Phys. Rev. **94**, 1392 (1954).
- 21.2. W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **98**, 915 (1955).
- 21.3. W. Kohn, D. Shechter, Phys. Rev. **99**, 1903 (1955).
- 21.4. D. Shechter, J. Phys. Chem. Sol. **23**, 237 (1962).
- 21.5. K. S. Mendelson, H. M. James, J. Phys. Chem. Sol. **25**, 729 (1964).
- 21.6. W. Kohn, Sol. St. Phys. **5**, 257 (1957).
- 21.7. W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **97**, 883 (1955).
- 21.8. J. Appel, Phys. Rev. **133A**, 280 (1964).
- 21.9. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **45**, 365 (1963).
- 21.10. R. M. Keyes, IBM Journ. **5**, 65 (1961).
- 21.11. T. N. Morgan, Proc. X Int. Conf. Phys. Semicond., Cambridge, USA, 1970, p. 266.
- 21.12. K. Suzuki, M. Okazaki, H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Japan **19**, 930 (1964).
- 21.13. J. C. Phillips, Phys. Rev. **B2**, 1044 (1970).
- 21.14. Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов, ЖЭТФ **62**, 713 (1972).
- 21.15. В. И. Шека, ФТТ **7**, 1783 (1965).
- 21.16. В. И. Шека, Д. И. Шека, ЖЭТФ **51**, 1445 (1966).
- 21.17. K. S. Mendelson, D. R. Shultz, Phys. St. Sol. **31**, 59 (1969).
- 21.18. A. Baldereshi, Phys. Rev. **B1**, 12 (1970).
- 21.19. T. H. Ning, C. T. Sah, Sol. St. Comm. **8**, 1893 (1970).
- 21.20. Г. Л. Бир, ФТТ **13**, 460 (1971).

22. Экситоны Ванье — Мотта в полупроводниках со сложной зонной структурой

- 22.1. G. Dresselhaus, J. Phys. Chem. Sol. **1**, 14 (1955); Phys. Rev. **105**, 135 (1957).
- 22.2. R. J. Elliott, Phys. Rev. **108**, 1384 (1957);

- 22.3. R. J. Elliott, R. Loudon, J. Phys. Chem. Sol. **8**, 382 (1959).
 22.4. T. P. McLean, R. Loudon, J. Phys. Chem. Sol. **13**, 1 (1960).
 22.5. R. J. Elliott, Polarons and Excitons, Edinburgh — London, 1963; Phys. Rev. **124**, 340 (1961).
 22.6. Э. И. Рашба, ЖЭТФ **36**, 1701 (1959).
 22.7. Р. Нокс, Теория экситонов, Изд. «Мир», 1966.
 22.8. В. М. Агранович, Теория экситонов, «Наука», 1968.
 22.9. R. G. Weeler, J. O. Dimmock, Phys. Rev. **125**, 1805 (1962).
 22.10. J. J. Hopfield, D. G. Thomas, Phys. Rev. **122**, 35 (1961).
 22.11. J. O. Dimmock, Semicond. and Semimetals, v. 3, New York, 1967, p. 259.
 22.12. N. Lipary, A. Baldareschi, Phys. Rev. Lett. **25**, 373, 1660 (1970).
 22.13. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ЖЭТФ **60**, 195 (1971).
 22.14. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ЖЭТФ **62**, 324 (1972).
 В монографиях [22.7] и [22.8] и обзоре [22.11] приведена более обширная библиография.

23. Изменение спектра при деформации в кубических кристаллах

- 23.1. C. Herring, Bell System Techn. J. **34**, 237 (1955).
 23.2. E. N. Adams, Phys. Rev. **96**, 803 (1954).
 23.3. H. Brooks, Advances Electr. **7**, 85 (1955).
 23.4. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ФТТ **1**, 154, 1642 (1959).
 23.5. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, ФТТ **3**, 3050 (1961).
 23.6. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ФТТ **4**, 2090 (1962).
 23.7. M. Cardona, Sol. St. Comm. **5**, 223 (1967).
 23.8. I. Coroff, L. Kleiman, Phys. Rev. **132**, 1080 (1963).
 23.9. D. Brust, L. Lin, Sol. St. Comm. **4**, 193 (1966).
 23.10. F. H. Pollak, M. Cardona, Phys. Rev. **172**, 816 (1968).
 23.11. F. Kolodziejczak, S. Zukotinski, Phys. St. Sol. **14**, 471 (1966); **16**, K5 (1966).
 23.12. W. Kleiner, L. Roth, Phys. Rev. Lett. **2**, 334 (1959).

24. Расчет констант деформационного потенциала

- 24.1. S. Conroy, L. Kleiman, Phys. Rev. **132**, 1080 (1963).
 24.2. F. Bassani, D. Brust, Phys. Rev. **131**, 1524 (1963).
 24.3. L. G. Ferreira, Phys. Rev. **137A**, 1601 (1965).
 24.4. L. R. Saravia, D. Brust, Phys. Rev. **178**, 1240 (1969).
 24.5. J. A. Van Vechenn, Phys. Rev. **187**, 1007 (1969).

25. Спектр электронов в кристаллах с решеткой вюрцита

- 25.1. R. C. Gasella, Phys. Rev. Lett. **5**, 371 (1960).
 25.2. M. L. Glasser, J. Gallaway, J. Phys. Chem. Sol. **10**, 229 (1959).
 25.3. Э. И. Рашба, ФТТ **1**, 407 (1959); Э. И. Рашба, В. И. Шека, ФТТ, сборник № 2, 162 (1959).
 25.4. C. L. Birman, Phys. Rev. **115**, 1493 (1959).
 25.5. M. Balkanski, Des Cloizeau J. Phys. Radium **21**, 825 (1960).
 25.6. M. Cardona, J. Phys. Chem Sol. **24**, 1543 (1963).
 25.7. J. Hopfield, J. Phys. Chem Sol. **15**, 97 (1960).
 25.8. S. Adler, Phys. Rev. **126**, 118 (1962).
 25.9. D. Mahan, J. J. Hopfield, Phys. Rev. **135A**, 428 (1964).
 25.10. E. Gutsche, E. Jahue, II—VI Semicond. Comp. Int. Confer., New York, 1967, p. 825.
 25.11. T. C. Collins, R. N. Euwema, J. S. Dewitt, там же, p. 598.
 25.12. J. J. Hopfield, D. G. Thomas, Phys. Rev. **132**, 563 (1963).
 См. также [14.2], [14.3], [18.7].

26. Влияние деформации на спектр кристаллов с решеткой вюрцита

26.1. Г. Е. Пикус, ФТТ **6**, 324 (1964).

26.2. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Л. Г. Суслина, Д. Л. Федоров, Е. Б. Шадрин, ФТТ **13**, 3551 (1971).

См. также [20.2].

27. Сводные данные о зонной структуре различных полупроводников

27.1. G. C. Phillips, Phys. Rev. **125**, 1931 (1962) (Ge, Si); J. Phys. Chem. Sol. **8**, 369, 379 (1959) (Ge, Si).

27.2. M. L. Kohen, T. K. Bergstresser, Phys. Rev. **141**, 789 (1966) (Ge, Si, A_3B_5).

27.3. M. K. Chosh, Phys. Rev. **165**, 888 (1968).

27.4. J. O. Dimmock, II—VI Semicond. Comp. Int. Confer. New York, 1967, p. 277 (A_2B_6).

27.5. J. E. Rowe, M. Cardona, F. H. Pollak, там же, p. 112 (A_2B_6).

27.6. P. Y. Lin, L. K. Kleiman, Phys. Rev. **142**, 478 (1966) (A_2B_6).

27.7. M. Cardona, J. Phys. Chem. Sol. **24**, 1543 (1963) (A_3B_5).

27.8. F. H. Pollak, M. Cardona, Phys. Rev. **142**, 530 (1966) (Ge, Si).

27.9. F. H. Pollak, J. Phys. Chem. Sol. **27**, 423 (1966) (Ge, A_3B_5).

27.10. M. Rodot, Proc. IX Int. Confer. Phys. Semicond. Москва, 1968, стр. 639 (HgTe, серое олово).

27.11. L. N. Sosnowsky, там же, стр. 700 (HgTe, серое олово).

27.12. S. H. Groves, A. W. Ewald, R. J. Wagner, там же, стр. 43 (HgTe, серое олово).

27.13. M. Crynberg, Proc. VII Int. Confer. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 135 (A_2B_6).

27.14. C. Hilsu, там же, p. 1172; Semicond. and Semimetals, v. 1, New York, 1966, p. 3 (A_3B_5).

27.15. J. J. Sticker, H. J. Zeiger, G. S. Heller, Phys. Rev. **127**, 1077 (1962) (Ge).

27.16. F. H. Pollak, G. W. Higginbotham, M. Cardona, Proc. VIII Int. Confer. Phys. Semicond., Kyoto, 1966, p. 20 (A_3B_5).

27.17. F. H. Pollak, G. W. Higginbotham, M. Cardona, Proc. IX Int. Confer. Phys. Semicond., Москва, 1968, стр. 57 (A_3B_5).

27.18. M. Cardona, Semicond. and Semimetals, v. 3, New York, 1967, p. 125 (A_3B_5).

27.19. В. Лак, J. G. Mavroides, там же, стр. 321 (A_3B_5).

27.20. Ю. И. Равич, Б. А. Ефимова, И. А. Смирнов, Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца, Изд «Наука», 1968.

27.21. B. W. Levinger, D. R. Frankl, J. Phys. Chem. Sol. **20**, 281 (1961).

27.22. D. G. Reynolds, G. W. Litton, T. G. Collins, Phys. St. Sol. **6**, 645 (1965); **12**, 3 (1965) (A_2B_6).

27.23. J. E. Rowe, M. Cardona, F. H. Pollak, Sol. St. Comm. **6**, 239 (1968) (ZnO).

27.24. V. Rössler, Phys. Rev. **184**, 733 (1969) (A_2B_6).

28. Теория рассеяния

Метод деформационного потенциала

28.1. W. Shockley, J. Bardeen, Phys. Rev. **77**, 407 (1950); В. Шокли, Теория электронных полупроводников, ИЛ, 1953

28.2. С. И. Пекар, М. Ф. Дейген, ЖЭТФ **21**, 803 (1952).

28.3. W. Dumke, Phys. Rev. **101**, 531 (1956).

28.4. C. Herring, E. Vogt, Phys. Rev. **101**, 944 (1956).

28.5. H. Erenreih, A. Overchauser, Phys. Rev. **104**, 331, 649 (1956).

28.6 W Harrison, Phys. Rev. **104**, 1281 (1956).

28.7. Г. Е. Пикус, ЖТФ **28**, 2390 (1958).

28.8. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, ФТТ **2**, 2287 (1960).

28.9. C. D. Whitfield, Phys. Rev. Lett. 2, 204 (1959); Phys. Rev. 121, 720 (1961).

28.10. P. Lawaetz, Phys. Rev. 166, 763 (1968); 174, 864 (1968).

28.11. J. D. Wiley, Sol. St. Comm. 8, 1865 (1970).

Влияние дальнедействующих сил на колебания решетки

Монография [9.1].

28.12. И. Г. Ланг, У. С. Пашабекова, ФТТ 6, 3640 (1964).

28.13. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 56, 841 (1969).

28.14. Г. Е. Пикус, М. Г. Бреслер, ФТТ 13, 1734 (1971).

**Рассеяние на оптических колебаниях
в полярных кристаллах**

28.15. H. Fröhlich, Advances Phys. 3, 325 (1954) (обзор).

**Дальнедействующие силы в неполярных
полупроводниках**

28.16. К. Б. Толпыго, ФТТ 4, 1765 (1962).

28.17. Ш. М. Коган, ФТТ 5, 2829 (1963).

28.18. З. А. Демиденко, К. Б. Толпыго, ФТТ 6, 3321 (1964).

29. Циклотронный резонанс в деформированных кристаллах

29.1. J. C. Hensel, G. Feher, Phys. Rev. Lett. 5, 307 (1960); Phys. Rev. 129, 1041 (1963).

29.2. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, Phys. Rev. Lett. 6, 103 (1962); ФТТ 3, 1001 (1961).

29.3. H. Hasegawa, Phys. Rev. 129, 1029 (1963).

29.4. J. C. Hensel, Phys. Lett. 21, 284 (1966).

29.5. J. C. Hensel, H. Hasegawa, M. Nakayama, Phys. Rev. 138A, 225 (1965).

29.6. I. Balslev, P. Lawaetz, Phys. Lett. A 24, 586 (1967).

29.7. J. C. Hensel, K. Suzuki, Proc. X Int. Confer. Phys. Semicond., Cambridge, USA, 1970, p. 541.

29.8. F. Hiroshi, M. Kazuo, O. Eizo, J. Phys. Soc. Japan 29, 685 (1970).

29.9. J. Blinowski, M. Grynberg, Phys. Rev. 168, 882 (1968).

29.10. H. Fujiyansu, K. Murase, E. Otsuka, J. Phys. Soc. Japan 29, 685 (1970).

29.11. K. Murase, K. Enjouji, E. Otsuka, J. Phys. Soc. Japan 29, 1248 (1970).

29.12. Я. Г. Клява, О. Г. Кошелев, Т. Ю. Лисовская, А. Г. Казанский, ФТП 5, 428 (1971).

См. также [23.4], [23.5].

30. Квантовый циклотронный резонанс в деформированных кристаллах

30.1. E. Otsuka, K. Murase, F. Fujiyase, Phys. Lett. 21, 284 (1966).

30.2. J. C. Hensel, Sol. St. Comm. 4, 231 (1966).

**31. Парамагнитный и комбинированный резонанс на свободных
носителях в деформированных кристаллах**

31.1. Э. И. Рашба, ФТТ 3, 1224 (1960).

31.2. Г. Е. Гургенишвили, ФТТ 5, 2070 (1963); 6, 479 (1964).

31.3. J. C. Hensel, Phys. Rev. Lett. 21, 983 (1968).

31.4. J. C. Hensel, K. Sudzuki, Phys. Rev. Lett. 22, 838 (1969).

32. Влияние деформации на электропроводность германия и кремния

32.1. C. S. Smith, Phys. Rev. 94, 42 (1954).

32.2. F. J. Morin, T. H. Geballe, C. Herring, Phys. Rev. 105, 525 (1957).

32.3. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ФТТ 1, 1828 (1959).

- 32.4. J. J. Hall, Phys. Rev. **128**, 68 (1962).
 32.5. S. H. Koenig, Proc. VI Int. Confer. Phys. Semicond., Exeter, 1962, p. 5.
 32.6. Г. Л. Бир, А. И. Блум, Ю. В. Илизавский, Proc. VII Int. Conf. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 529.
 32.7. М. Аше, В. М. Бондарь, О. Г. Сарбей, ФТТ **8**, 1188 (1966).
 32.8. O. N. Tuffe, F. L. Stelzer, Phys. Rev. **133 A**, 1705 (1964).
 32.9. J. E. Aubrey, W. Gubler, T. Henningsen, S. H. Koenig, Phys. Rev. **30**, 1667 (1963).
 32.10. F. H. Pollak, Phys. Rev. **138**, 618 (1965).
 32.11. M. Guevas, H. Fritzsche, Phys. Rev. **139 A**, 1628 (1965); **137 A**, 1847 (1965).
 32.12. M. J. Katz, Phys. Rev. **140 A**, 1323 (1965).
 32.13. П. И. Баранский, В. В. Коломоец, Phys. St. Sol. (b) **45**, K55 (1971).
 32.14. Ю. В. Шмарцев, М. Мирзабаев, ФТП **5**, 2245 (1971).
 32.15. Ю. А. Астров, А. А. Кастаньский, ФТП **6**, 323 (1972).

33. Влияние деформации на электропроводность соединений A_3B_5

- 33.1. R. F. Potter, Phys. Rev. **108**, 652 (1957).
 33.2. A. Tuzzolino, Phys. Rev. **109**, 6 (1958).
 33.3. A. R. Hutson, A. Jayaraman, A. S. Corriel, Phys. Rev. **155**, 786 (1967).
 33.4. K. M. Chanekar, R. J. Cladek, Phys. Rev. **146**, 505 (1966).

34. Влияние деформации на электропроводность соединений $PbTe$, PbS , $PbSe$

- 34.1. Ю. В. Илизавский, ФТТ **3**, 1898, 3555 (1961); **4**, 918, 1975 (1962).
 34.2. J. R. Burke, Phys. Rev. **160**, 636 (1967).
 34.3. D. M. Finlayson, A. D. Steward, Brit. J. Appl. Phys. **17**, 737 (1966).
 34.4. Н. И. Акименко, З. В. Панкевич, П. М. Старик, Укр. физ. журнал **12**, 977 (1967).
 34.5. S. Kigaburo, T. Ryochi, J. Phys. Soc. Jap. **20**, 1172 (1965).
 34.6. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, ФТТ **4**, 2090, 2243 (1962).
 См. также [27.20].

35. Влияние деформации на электропроводность соединений A_2B_6

- 35.1. A. Sagar, M. Rubenstein, Phys. Rev. **143**, 2 (1966).
 35.2. A. Sagar, W. Lehmann, Phys. Rev. **140 A**, 923 (1965).
 35.3. B. A. Kulp, K. A. Gale, Phys. Rev. **156**, 877 (1967).

36. Влияние деформации на гальвано- и термомагнитные эффекты

- 36.1. P. Keyes, Phys. Rev. **103**, 1240 (1956).
 36.2. H. D'rable, J. Electr. Contr. **5**, 362 (1958).
 36.3. H. D'rable, R. Grover, Phys. Rev. Lett. **2**, 451 (1959).
 36.4. M. Grinberg, Phys. St. Sol. **13**, 277 (1966).
 36.5. В. С. Львов, Т. В. Смирнова, ФТТ **8**, 1365, 1617 (1966).
 36.6. А. Л. Липин, В. С. Львов, Т. В. Смирнова, ФТТ **9**, 3339 (1967).
 36.7. В. С. Львов, ФТТ **8**, 1351 (1966).
 36.8. Ю. В. Шмарцев, М. Мирзабаев, В. М. Тучкевич, ФТТ **7**, 3437 (1965).
 36.9. R. W. Keyes, Sol. St. Phys. **11**, 149 (1960) (обзор).
 36.10. В. С. Вязовкин, М. Мирзабаев, В. В. Рыжков, А. С. Саидов, В. М. Тучкевич, Ю. В. Шмарцев, ФТП **2**, 447 (1968).
 36.11. П. И. Баранский, В. В. Коломоец, Phys. St. Sol. **42**, K 113 (1970).
 36.12. А. Г. Самойлович, И. С. Буда, ФТП **3**, 400 (1969).
 36.13. П. И. Баранский, И. С. Буда, И. В. Даховский, В. В. Коломоец, ФТП **5**, 1614 (1971).
 36.14. Л. И. Атанчук, М. В. Нуцович, В. Б. Молер, ФТП **5**, 1845 (1971).
 36.15. М. Аше, Ю. Г. Завьялов, О. Г. Сарбей, ФТП **7**, 1305 (1971).

37. Изменение коэффициента поглощения, связанного со свободными носителями, при деформации

37.1. A. K. Walton, C. R. Everett, Sol. St. Comm. 5, 275 (1967).
37.2. A. K. Walton, G. R. Everett, Sol. St. Comm. 4, 211 (1966).

38. Двойное лучепреломление в деформированных кристаллах, связанное со свободными носителями

38.1. K. J. Schmidt-Tuedeman, Phys. Rev. Lett. 7, 372 (1961); Proc. VI Int. Confer. Phys. Semicond., Exeter, 1962, p. 191; J. Appl. Phys. 30, 2055 (1961).
38.2. J. K. Furduna, G. P. Soardo, Proc. VII Int. Confer. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 171.
38.3. A. Feldman, Phys. Rev. 150, 748 (1966).
38.4. S. Riskaer, Phys. Rev. 152, 845 (1966).
38.5. J. Blinowski, Phys. Rev. 147, 574 (1966).
38.6. А. Д. Ременюк, Ю. И. Уханов, В. М. Тучкевич, Ю. В. Шмарцев, ФТП 1, 1113 (1967).

39. Изменение коэффициента поглощения и отражения света и другие деформационные эффекты, связанные с междузонными переходами

39.1. О. В. Константинов, В. И. Перель, ЖЭТФ 37, 786 (1959).
39.2. M. Grinberg, Proc. VII Int. Confer. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 135.
39.3. G. S. Gobson, E. G. S. Paige, там же, стр. 143.
39.4. S. Riskaer, I. Balslev, Phys. Lett. 21, 16 (1966).
39.5. E. Erlbach, Phys. Rev. 150, 767 (1966).
39.6. W. E. Engeler, M. Garfinkel, J. Tieman, Phys. Rev. 155, 693 (1967).
39.7. U. Gerhard, Phys. Rev. Lett. 15, 401 (1965).
39.8. F. H. Pollak, M. Cardona, K. L. Shaklee, Phys. Rev. Lett. 16, 943 (1966).
39.9. А. Г. Аронов, Г. Е. Пикус, Д. Ш. Шехтер, ФТТ 10, 823 (1968).
39.10. E. O. Kane, Phys. Rev. 178, 1368 (1969).
39.11. F. H. Pollak, Proc. X Int. Confer. Phys. Semicond., Cambridge, USA, 1970, p. 407.
39.12. R. N. Bhargava, M. Y. Nathan, Phys. Rev. 161, 695 (1967).
39.13. L. Lande, M. Cardona, F. H. Pollak, Phys. Rev. B1, 1436 (1970).
39.14. D. D. Sell, E. O. Kane, Phys. Rev. 185, 1103 (1969).
39.15. B. Tell, J. M. Worlock, R. J. Martin, Appl. Phys. Lett. 6, 123 (1965).
39.16. F. H. Pollak, M. Cardona, Phys. Rev. 172, 816 (1968).
39.17. И. П. Акимченко, В. А. Вдовенков, ФТТ 11, 658 (1969).
39.18. В. И. Никитенко, Г. П. Мартыненко, ФТТ 7, 622 (1965).
39.19. К. К. Дубенский, А. А. Каплянский, И. Г. Лозовская, ФТТ 8, 2068 (1966).
39.20. C. W. Higginbotham, M. Cardona, F. H. Pollak, Phys. Rev. 184, 821 (1969).
39.21. A. Y. Shileika, M. Cardona, F. H. Pollak, Sol. St. Comm. 7, 1113 (1969).
39.22. R. N. Bhargava, M. J. Nathan, Phys. Rev. 161, 695 (1967).
39.23. А. Ф. Кравченко, Е. А. Макаров, А. С. Мардеисов, ФТП 2, 1783 (1967).
39.24. Ю. Каган, В. Сабакин, ФТТ 11, 1018 (1969).
39.25. F. H. Pollak, M. Cardona, Phys. Rev. 177, 1351 (1969).
39.26. A. Cavini, M. Cardona, Phys. Rev. B1, 672 (1970).
39.27. А. А. Кастальский, ФТП 1, 97 (1967).
39.28. А. А. Кастальский, Н. И. Саблина, ФТП 2, 1467, 1475 (1968).
39.29. P. T. Bailej, Phys. Rev. B1, 588 (1970).
39.30. C. Benoit a la Cuillaume, P. Lavallard, J. Phys. Chem. Sol. 31, 411 (1970).
39.31. А. С. Краузе, Ю. Г. Шретер, ФТП 5, 1912 (1971).
39.32. А. А. Кастальский, С. Б. Мальцев, Ю. Г. Шретер, ФТП 5, 1588 (1971).

40. Влияние деформации на спектр мелких примесных центров

- 40.1. P. J. Price, Phys. Rev. **104**, 1223 (1956).
- 40.2. H. Fritsche, Phys. Rev. **125**, 1552, 1560 (1962).
- 40.3. W. H. Kleiner, L. Roth, Phys. Rev. Lett. **2**, 334 (1959).
- 40.4. Г. Л. Бир, Е. И. Бутиков, Г. Е. Пикус, J. Phys. Chem. Sol. **24**, 1467, 1475 (1963).
- 40.5. E. B. Hall, T. G. Castner, Phys. Rev. **B1**, 4763 (1970).

41. Пьезооптика мелких примесных центров

- 41.1. G. Weinreich, Proc. V Int. Confer. Phys. Semicond., Praga, 1960, p. 360 (*n*-Ge).
- 41.2. R. L. Aggarwal, A. K. Ramdas, Proc. VII Int. Confer. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 797; Phys. Rev. **137**, 602 (1965) (*n*-Si).
- 41.3. J. H. Reuszer, P. Fisher, Phys. Rev. **135**, 1125 (1964); **140 A**, 245 (1965); **165**, 909 (1968) (*n*-Ge).
- 41.4. R. L. Aggarwal, P. Fisher, V. Mourzine, A. K. Ramdas, Phys. Rev. **138 A**, 882 (1965) (*n*-Si).
- 41.5. R. L. Jones, P. Fisher, Sol. St. Comm. **2**, 369 (1964) (*p*-Ge).
- 41.6. D. H. Dickey, J. O. Dimmok, J. Phys. Chem. Sol. **28**, 529 (1967).
- 41.7. P. Fisher, A. K. Ramdas, Phys. Lett. **16**, 26 (1965) (*p*-Si).
- 41.8. A. Onton, P. Fisher, A. K. Ramdas, Phys. Rev. **163**, 686 (1967) (*p*-Si).
- 41.9. П. П. Феофилов, А. А. Каплянский, УФН **76**, 201 (1962) (обзор).
- 41.10. W. E. Krag, W. H. Kleiner, H. J. Zeiger, Proc. X Int. Confer. Phys. Semicond., Cambridge, USA, 1970, p. 271.
- 41.11. W. H. Kleiner, W. E. Krag, Phys. Rev. Lett. **25**, 1490 (1970).
- 41.12. R. L. Jones, P. Fischer, Phys. Rev. **B 2**, 2016 (1970).
- 41.13. И. В. Кучеренко, ФТП **2**, 1069 (1968).
- 41.14. W. Paul, Proc. IX. Int. Confer. Phys. Semicond., Москва, 1968, стр. 16.
- 41.15. А. Я. Вуль, Г. Л. Бир, Ю. В. Шмарцев, ФТП **4**, 2331 (1970).
- 41.16. B. T. Alburn, A. K. Ramdas, Phys. Lett. **29A**, 135 (1969).
- 41.17. Ж. С. Алферов, Д. З. Гарбузов, О. А. Нинуа, В. Г. Трофим, ФТП **5**, 1400 (1971).

42. Влияние деформации на ЭПР мелких примесных центров

- 42.1. G. C. Hensel, G. Feher, E. A. Gere, Phys. Rev. Lett. **5**, 309 (1960).
- 42.2. D. K. Wilson, G. Feher, Phys. Rev. **124**, 1068 (1961).
- 42.3. D. K. Wilson, Phys. Rev. **134 A**, 265 (1964).
- 42.4. K. Morigaki, T. Mitsuma, J. Phys. Soc. Jap. **18**, 462 (1963); **20**, 491 (1965).
- 42.5. M. Nakayama, H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jap. **18**, 229 (1963).
- 42.6. G. D. Watkins, 4th Annual Sol. St. Conf., Manchester, 1967, p. 79.
- 42.7. Дж. Людвиг, Г. Вудбурн, Электронный спиновый резонанс в полупроводниках, Изд. «Мир», 1964.
- 42.8. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Proc. VII Int. Confer. Phys. Semicond., Paris, 1966, p. 789.
- 42.9. K. Suzuki, M. Okazaki, H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jap. **19**, 930 (1964).
- 42.10. Е. И. Бутиков, ФТП **10**, 3364 (1968).
- 42.11. Б. Г. Журкин, Н. А. Пенин, Н. Н. Сибельдин, ФТП **2**, 827 (1968).
- 42.12. P. I. Lin-Chung, R. F. Wallis, Proc. IX Int. Confer. Phys. Semicond., Москва, 1968, стр. 341.
- 42.13. T. Simizu, M. Nakayama, J. Phys. Soc. Japan **19**, 1829 (1964).
- 42.14. R. S. Till, I. B. M. Journal **7**, 68 (1963).

43. Пьезооптика экситонов

- 43.1. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянский, В. Т. Агемян, ФТТ **4**, 1009, 2170 (1963).
- 43.2. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянский, ФТТ **2**, 1676, 2968 (1960).
- 43.3. А. А. Каплянский, Л. Г. Суслина, ФТТ **7**, 2327 (1965).
- 43.4. А. И. Бобрышева, С. А. Москаленко, ФТТ **4**, 1994 (1962); ФТП **2**, 438 (1968).
- 43.5. D. G. Thomas, J. Appl. Phys. Suppl. **32**, 2298 (1961) (CdTe).
- 43.6. А. А. Каплянский, Оптика и спектроскопия **16**, 1031 (1964).
- 43.7. I. Balslev, Proc. VIII Int. Confer. Phys. Semicond., Kyoto, 1966, p. 101 (GaP).
- 43.8. A. M. Glass, Can. J. Phys. **43**, 12 (1963) (Ge).
- 43.9. В. Ю. Осипов, ФТТ **8**, 2280 (1966) (Ge).
- 43.10. I. Balslev, Phys. Rev. **143**, 636 (1966); Phys. Lett. A **24**, 113 (1967); Sol. St. Comm. **5**, 315 (1967).
- 43.11. E. A. Adler, E. Erlbach, Phys. Rev. Lett. **16**, 87, 927 (1966) (Ge).
- 43.12. T. Koda, D. W. Langer, Phys. Rev. Lett. **20**, 50 (1968); Proc. IX Confer. Phys. Semicond., Москва, 1968, p. 242 (ZnO, PbS, PbSe).
- 43.13. О. Акimoto, Н. Насегава, Phys. Rev. Lett. **20**, 915 (1968).
- 43.14. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Л. Г. Суслина, Д. Л. Федоров, ФТТ **12**, 1187 (1970) (ZnS).
- 43.15. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Л. Г. Суслина, Д. Л. Федоров, ФТТ **12**, 3218 (1970) (ZnS).
- 43.16. A. Cavini, M. Cardona, Phys. Rev. **B1**, 672 (1970).
- 43.17. D. W. Langer, R. N. Euwema, K. Era, T. Coda, Phys. Rev. **B2**, 4005 (1970).
- 43.18. Y. Onodera, Y. Toyozawa, J. Phys. Soc. Japan **22**, 813 (1967).
- 43.19. T. Skettrup, I. Balslev, Phys. St. Solidi **40**, 93 (1970).
- 43.20. M. A. Cileo, P. T. Bailey, D. F. Hill, J. Luminisc. **12**, 562 (1970).
- 43.21. J. W. Morgan, T. N. Morgan, Phys. Rev. **B1**, 739 (1970).
- 43.22. L. D. Lande, F. H. Pollak, M. Cardona, Phys. Rev. **B3**, 2623 (1971).
- 43.23. F. H. Pollak, R. L. Aggarwal, Phys. Rev. **B4**, 432 (1971).
- 43.24. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Л. Г. Суслина, Д. Л. Федоров, ФТТ **14**, 858 (1972).

См. также [26.2].