Институт Физики Микроструктур РАН

Применение методов теории групп в физике твердого тела. Общие свойства электронных спектров кристаллов со структурой алмаза

Докладчик: *Ляхов Федор Александрович*

Научный руководитель: д.ф.-м.н. *Шастин Валерий Николаевич*

Нижний Новгород
2009 год

Определения

- Множество G называется *группой*, если
    1. Определена операция умножения $G \times G \to G$: $\forall(g,h \in G)\exists(f \in G)\, f = gh$.
    2. Ассоциативность умножения $(gh)f = g(hf)$.
    3. Существование единичного элемента $\exists(e \in G)\forall(g \in G)\, ge = g$.
    4. Существование обратного элемента $\forall(g \in G)\exists(g^{-1} \in G)\, gg^{-1} = e$.
- Множество $H \subset G$ называется *подгруппой* группы G, если оно само является группой с той же групповой операцией.
- Левосторонним *смежным классом* по подгруппе H называется множество

$$\forall(g \in G)\, L_g = gH = \{gh; h \in H\}.$$

- Группу G можно разложить в прямую сумму левосторонних смежных классов:

$$G = \sum_{i=1}^{j} \oplus L_i;\ \ L_i \cap L_k = \varnothing,\ i \neq k.$$

- Число классов j называется индексом подгруппы H в группе G. Из разложения следует Теорема Лагранжа: $|G| = j\,|H|$.
- H называется *инвариантной подгруппой* (*нормальным делителем*) группы G, если порождаемое ей разбиение на левосторонние смежные классы совпадает с разбиением на правосторонние.

Определения

- Элементы $g, f \in G$ называются *сопряженными*, $g \sim f$, если $\exists (h \in G)\, f = hgh^{-1}$.

Отношение сопряженности является отношением эквивалентности:

1. Рефлексивность $g \sim g$,
2. Симметричность $(g \sim f) \Rightarrow (f \sim g)$.
3. Транзитивность $(g \sim f, f \sim h) \Rightarrow (g \sim h)$.

- Группу G можно разбить на классы сопряженных элементов $K(g_0) = \{g; g \sim g_0\}$.

Справедлива теорема: подгруппа H является нормальным делителем группы G, если

$$\forall (h \in H) K(h) \subset H.$$

- Группы G и G' называются *изоморфными*, $G \approx G'$, если

1. Существует взаимно-однозначное отображение $G \leftrightarrow G'$,
2. Отображение сохраняет групповую операцию: $(g \to g', f \to f') \Rightarrow (fg \to f'g')$.

- Группа G' *гомоморфна группе* G, если

1. Существует однозначное отображение G на G',
2. Отображение сохраняет групповую операцию.

Определения

- Пусть K – линейное пространство размерности n, группа $T = \{A; A: K \to K\}$ состоит из линейных операторов над K. Гомоморфизм группы G на T называют *представлением* группы G. $(g \to T_g, f \to T_f) \Rightarrow (gf \to T_{gf} = T_g T_f)$.
- Базис в пространстве K: $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^{n}$, матрицы операторов в этом базисе $D_g = \|T_g\|_e$ образуют группу D. Группы D и T изоморфны, поэтому гомоморфизм G на D так же является представлением.
- Представления D и $\tilde{D}$ называются *эквивалентными*, если существует невырожденная n-мерная матрица P, что $\tilde{D}_g = P^{-1} D_g P$.
- Пусть K – унитарное пространство над комплексным полем, со скалярным произведением $(\cdot,\cdot)$. Для любого представления D существует эквивалентное ему унитарное представление.
- Подпространство $H \subset K$ *инвариантно* для T_g, если $\forall(\mathbf{x} \in H) T_g \mathbf{x} \in H$.
- Представление T *приводимо* в K, если существует подпространство $H \subset K, H \neq \{\mathbf{0}\}$, инвариантное для всех операторов T_g. Представление *неприводимо*, если такого инвариантного подпространства не существует.
- *Характером* представления D называется функция комплексная функция на группе, $\chi: G \to \mathbf{C}$, $\chi_g = \mathrm{Tr}\, D_g$. Из свойств следа вытекает, что характеры эквивалентных представлений и характеры сопряженных элементов совпадают.

Определения

- Характеры неэквивалентных неприводимых представлений взаимно-ортогональны:

$$(\chi^{(i)},\chi^{(j)})_G = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\chi_g^{(i)}\chi_g^{(j)} = \delta_{ij}.$$

- Пусть группа G имеет q неприводимых неэквивалентных представлений $\{D^{(i)}\}_{i=1}^{q}$.

Рассмотрим произвольное представление D. Справедливо разложение:

$$\chi_g = \sum_{i=1}^{q} p_i\chi_g^{(i)}, \quad p_i = (\chi_g,\chi_g^{(i)})_G.$$

- Критерий неприводимости:

$$(\chi_g,\chi_g)_G = \sum_{i,j=1}^{q} p_i p_j (\chi_g^{(i)},\chi_g^{(j)})_G = \sum_{i=1}^{q} p_i^2 = 1.$$

- Первая теорема Бернсайда: сумма квадратов размерностей неприводимых неэквивалентных представлений равна порядку группы:

$$\sum_{i=1}^{q} n_i^2 = |G|.$$

- Вторая теорема Бернсайда: число неэквивалентных неприводимых представлений равно числу классов сопряженных элементов.

Применение в квантовой механике

- Три основные задачи, решаемые с применением теории групп:
  1. Классификация собственных чисел (энергий) и собственных функций гамильтониана с помощью неприводимых представлений его группы симметрии
  2. Исследование расщепления вырожденных состояний под влиянием малых возмущений
  3. Установление правил отбора
- Пусть квантовая система описывается гамильтонианом $H(\mathbf{r})$, $\mathbf{r} \in V$, $\psi(\mathbf{r}) \in L(V)$,

$$H\psi = E\psi.$$

- Группа симметрии гамильтониана: $G = \{g; H(g\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})\}$.

Введем операторы, действующие в гильбертовом пространстве $L(V)$: $T_g\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$. Эти операторы коммутируют с гамильтонианом: $HT_g = T_gH$.

- Пусть гамильтониан имеет набор собственных значений $\{E_p\}_{p=1}^{\infty}$, каждому значению соответствует подпространство $U_{E_p} = U_p = \{\psi_p; H\psi_p = E_p\psi_p\} \subseteq L(V)$, $\dim U_p = d_p$. Из условия коммутации следует, что подпространства U_p являются инвариантными относительно операторов T_g; в итоге $g \to T_g$ образуют представления группы симметрии гамильтониана в собственных подпространствах.

Применение в квантовой механике

- Собственные функции гамильтониана можно характеризовать тройкой индексов:
  1. $q = 1..Q$ – номер неприводимого представления, к которому принадлежит $\psi_{qm\chi}$
  2. $m = 1..\infty$ – номер собственного подпространства (среди всех, соответствующих неприводимому представлению с номером q)
  3. $\chi = 1..d_q$ – номер строки представления D_q.

- Пример: свободная частица в одномерном потенциальном ящике

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(x), \quad V(x) = \begin{cases} 0, |x| \le a, \\ \infty, |x| > a. \end{cases}$$

- Группа симметрии гамильтониана $G = \{\varepsilon, i\}$ имеет два одномерных неприводимых представления:

$$T_e\psi(x) = \psi(x),$$
$$T_i\psi(x) = \psi(-x).$$

	ε	i
D_+	1	1
D_-	1	-1

$$D_+ : T_i\psi_{+,m}(x) = \psi_{+,m}(x) = \psi_{+,m}(-x),$$
$$\psi_{+,m}(x) = \cos\frac{\pi}{2a}(2m-1)x,$$
$$E_{+,m}(x) = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m_0a^2}(2m-1)^2,$$

$$D_- : T_i\psi_{-,m}(x) = -\psi_{-,m}(x) = \psi_{-,m}(-x).$$
$$\psi_{-,m}(x) = \sin\frac{\pi}{a}mx,$$
$$E_{-,m}(x) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}m^2.$$

Структура алмаза

- Пространственная группа структуры алмаза $G = O_h^7$:
  1. Кристаллическая система – кубическая, решетка Браве – г.ц.к. с элементарными векторами $\mathbf{a}_1 = a(0,1,1),\ \mathbf{a}_2 = a(1,0,1),\ \mathbf{a}_3 = a(1,1,0)$; Ячейка Вигнера-Зейтца – ромбододекаэдр, голоэдрия – O_h.
  2. Точечная группа $G_0 = O_h = T_d \times C_i,\ |O_h| = 48$.
  3. Неэлементарные трансляции: базис $\boldsymbol{\tau}_1 = 0,\ \boldsymbol{\tau}_2 = \frac{a}{2}(1,1,1) = \boldsymbol{\tau}$,

$$\mathbf{v}_\alpha(x) = \begin{cases} 0, \alpha \in T_d, \\ \boldsymbol{\tau}, \alpha \notin T_d. \end{cases}$$

- Гамильтониан Фока электронной задачи: $H = T + V(\mathbf{r})$.

- *Орбитой O* нормального делителя H относительно группы G называется максимальная совокупность неэквивалентных неприводимых сопряженных представлений группы H: $\forall a \in G, b \in H : D_a(b) = D(a^{-1}ba)$.

- *Индуцированное представление* группы G по представлению D подгруппы H:

$$G = \sum_i a_i H, \quad \forall a \in G, b \in H : \sigma_{ij}(a,b) = \begin{cases} 1, \text{если } a_i b a_j = a, \\ 0, \text{если } a_i b a_j \neq a. \end{cases}$$

$$D^{(J)}(a) = \sum_{b \in H} \sigma(a,b) \otimes D(b).$$

Структура алмаза

- Пространственная группа структуры алмаза $G = O_h^7$:
  1. Кристаллическая система – кубическая, решетка Браве – г.ц.к. с элементарными векторами $\mathbf{a}_1 = a(0,1,1)$, $\mathbf{a}_2 = a(1,0,1)$, $\mathbf{a}_3 = a(1,1,0)$; Ячейка Вигнера-Зейтца – ромбододекаэдр, голоэдрия – O_h.
  2. Точечная группа $G_0 = O_h = T_d \times C_i$, $|O_h| = 48$.
  3. Неэлементарные трансляции: базис $\boldsymbol{\tau}_1 = 0$, $\boldsymbol{\tau}_2 = \frac{a}{2}(1,1,1) = \boldsymbol{\tau}$,

$$\mathbf{v}_\alpha(x) = \begin{cases} 0, \alpha \in T_d, \\ \boldsymbol{\tau}, \alpha \notin T_d. \end{cases}$$

- Гамильтониан Фока электронной задачи: $H = T + V(\mathbf{r})$.

- *Орбитой O* нормального делителя H относительно группы G называется максимальная совокупность неэквивалентных неприводимых сопряженных представлений группы H: $\forall a \in G, b \in H : D_a(b) = D(a^{-1}ba)$.

- *Индуцированное представление* группы G по представлению D подгруппы H:

$$G = \sum_i a_i H, \quad \forall a \in G, b \in H : \sigma_{ij}(a,b) = \begin{cases} 1, \text{если } a_i b a_j = a, \\ 0, \text{если } a_i b a_j \neq a. \end{cases}$$

$$D^{(J)}(a) = \sum_{b \in H} \sigma(a,b) \otimes D(b).$$

Структура алмаза

- *Малая группа* L относительно группы G, ее подгруппы H и неприводимого представления D: состоит из тех элементов группы G, которые дают эквивалентные представления D_a среди всех представлений, сопряженных к D.
- *Допустимым* неприводимым представлением малой группы L называется такое, что его ограничение на подгруппу H расщепляется на неприводимые, эквивалентные D (для этого достаточно, чтобы само D входило в разложение).

- Основная теорема. Пусть H – нормальный делитель группы G. Все неприводимые представления группы H распределим по орбитам относительно G. Пусть D – неприводимое представление группы H из орбиты O, L – малая группа, соответствующая G, H и D. Справедливы утверждения:
    1. Любое допустимое неприводимое представление малой группы индуцирует неприводимое представление группы G.
    2. Все неприводимые представления группы G получатся точно один раз, если из каждой орбиты H относительно G выбрать одно неприводимое представление, построить для него малую группу и из каждого допустимого неприводимого представления малой группы индуцировать также одно (по 1. – неприводимое) представление.

Структура алмаза

- Реализуем программу построения всех неприводимых представлений пространственной группы кристалла со структурой алмаза. Нормальным делителем пространственной группы является трансляционная группа $T = \{\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\};\mathbf{R}\in K\}, K = \left\{\sum_{i=1}^{3} n_i\mathbf{t}_i\right\}$.
- Условия Борна – фон Кармана: $\{\varepsilon\,|\,\mathbf{t}_i\}^N = \{\varepsilon\,|\,0\}$.

Трансляционная группа представляется в виде $\tilde{T} = T_1 \times T_2 \times T_3$, где T_i – циклическая группа с образующим элементом $\{\varepsilon\,|\,\mathbf{t}_i\}$. Представления циклической группы одномерны и имеют вид:

$$D^{(p_i)}(\{\varepsilon\,|\,\mathbf{t}_i\}) = \exp\frac{2\pi i p_i}{N}, p_i = 1..N$$

- Введем вектор $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i\mathbf{b}_i \in K_{-1}, k_i = -\frac{p_i}{N}$. Представления группы $\tilde{T}$ запишутся в виде

$$D^{(\mathbf{k})}(\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\}) = e^{-i(\mathbf{k},\mathbf{R})}.$$

- Распределим представления группы T по орбитам относительно G.

$$D^{(\mathbf{k}')}(\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\}) = D^{(\mathbf{k})}(\{\alpha\,|\,\mathbf{a}\}^{-1}\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\}\{\alpha\,|\,\mathbf{a}\}).$$

$$\text{Зв}(\mathbf{k}) = \{\mathbf{k}';\mathbf{k}' = \alpha\mathbf{k} + \mathbf{K}, \alpha\in G_0, \mathbf{k},\mathbf{k}'\in \text{З.Б.}, \mathbf{K}\in K_{-1}\}.$$

- Построим малую группу $L = G_{\mathbf{k}}$, соответствующую $D^{(\mathbf{k})}$, T и G:

$$G_{\mathbf{k}} = \{\{\alpha\,|\,\mathbf{a}\};\alpha\mathbf{k} = \alpha\mathbf{k} + \mathbf{K}, \alpha\in G_0, \alpha\mathbf{k},\mathbf{k}\in \text{З.Б.}, \mathbf{K}\in K_{-1}\}.$$

Структура алмаза

- Допустимое неприводимое представление малой группы $G_{\mathbf{k}}$:

$$D_{\mathbf{k}}^{(e)}(\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\}) = e^{-i(\mathbf{k},\mathbf{R})} I.$$

- Чтобы построить индуцированное представление, разложим группу G в сумму левосторонних смежных классов по $G_{\mathbf{k}}$:

$$G = \sum_{i=1}^{s} a_i G_{\mathbf{k}}.$$

- Построение всех неприводимых представлений пространственной группы сводится к построению неприводимых представлений группы $G_{\mathbf{k}}$, если $\mathbf{k} \in \operatorname{int}$ *З.Б.* или группа $G_{\mathbf{k}}$ – симморфная, то эти представления легко получаются из представлений точечной группы $G_{0\mathbf{k}} = \{\alpha_i; \{\alpha_i\,|\,\mathbf{R}\} \in G_{\mathbf{k}}\}$:

$$D_{\mathbf{k}}^{(e)}(\{\alpha\,|\,\mathbf{R}\}) = e^{-i(\mathbf{k},\mathbf{R})} D_{\mathbf{k}}^{0}(\alpha).$$

- Звезда общего типа: $|\text{Зв}(\mathbf{k})| = |G_0|,\ G_{\mathbf{k}} = T.$ Существует единственное допустимое неприводимое представление малой группы, оно одномерно. Следовательно, размерность индуцированного представления равна порядку точечной группы (порядку звезды):

$$(D_{\mathbf{k}}^{(J)}(\{\varepsilon\,|\,\mathbf{R}\}))_{ii} = e^{-i(\mathbf{k}_i,\mathbf{R})},$$

$$(D_{\mathbf{k}}^{(J)}(\{\alpha\,|\,\mathbf{R}\}))_{ij} = \exp(-i(\mathbf{k}_i, \mathbf{R} + \alpha\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_i)).$$

Структура алмаза

- Γ-точка: $G_{0\mathbf{k}} = O_h$, $D_{\mathbf{k}}^{(e)}(\{\alpha|\mathbf{R}\}) = e^{-i(\mathbf{k},\mathbf{R})} D_{\mathbf{k}}^{0}(\alpha)$.

O	ε	$3\delta_2$	$6\delta_4$	$6\delta_2$	$8\delta_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	-1
Γ'_{15}	3	-1	1	-1	0
Γ'_{25}	3	-1	-1	1	0

Зонная структура спектра

- Пронумеруем собственные функции гамильтониана Фока следующим образом: каждому лучу $\mathbf{k}$ соответствует бесконечное множество собственных подпространств, звезды которых содержат данный луч. Упорядочим эти пространства по возрастанию энергии и пронумеруем пространства индексом ν. Можно показать, что энергия $E_{\mathbf{k}\nu}$ является непрерывной функцией $\mathbf{k}$ в зоне Бриллюэна; энергия имеет симметрию точечной группы G_0: $E_{\mathbf{k}\nu} = E_{\alpha\mathbf{k}\nu}$. При фиксированном ν функция энергии образует гиперповерхность в пространстве $(E, \mathbf{k})$, которая называется энергетической зоной.

Спасибо за внимание