نظریه گروه : نمایش گروه و کاربرد آن برای مولکول‌ها و بلورها

همانطور که در جلسات پیش گفتیم نوشتن معادله شرودینگر برای حالت مدارات و دیگر سامانه‌های مادی چنان کار پیش پا افتاده‌ای است، اما حل آن بجز در موارد استثنایی، امکان پذیر نیست. لذا باید تقریب بزنیم. کار مهم ما در عمل اینست که ببینیم این تقریب‌ها در چه اندازه‌ای اعتبار دارند.

مسئله یکی از راه حل‌های دستیابی به ساختار الکترونی سامانه‌ها استفاده از نظریه تابعی چگالی است. در این نظریه، چگالی ذرات نقش مهمی بازی می‌کنند ولی تابعی انرژی تبادلی-همبستگی کاملاً شناخته شده نیست و آن را بطور تقریبی حدس می‌زنیم. یا تقریب بورن-اوپنهایمر که تابع موج الکترونی را از تابع موج یونها جدا می‌کنند. در هر یک از این موارد باید پرسید که حوزه اعتبار این تقریب‌ها چیست.

کار دیگرمان اینست که بپرسیم تقارن‌های یک سامانه کدامند. با اطلاع از تقارن‌ها می‌توان به نکات مهمی پی برد. مثلاً یاد خواهیم گرفت که چگونه در اثر میدان بلوری تبهگنی‌ها می‌شکنند و می‌توانیم به اطلاعات کلی درباره **ساختار ترازهای** انرژی دست یابیم.

ابتدا گروه تقارن را تعریف می‌کنیم.

تعریف گروه $\mathcal{G}$

مجموعه ای از عناصر متعلق به $\mathcal{G}$ ($x \in \mathcal{G}$) با خواص زیر:

۱- ضرب بین دو عنصر متعلق به گروه تعریف شده باشد.

۲- Closure Property: هرگاه $x \in \mathcal{G}$, $y \in \mathcal{G}$ باشد

آنگاه $x \otimes y \in \mathcal{G}$ خواهد بود.

۳- Identity element: این عنصر را با E نشان دهیم

$E \in \mathcal{G}$ است.

$$x \in \mathcal{G} \Longrightarrow E \otimes x = x$$

۴- خاصیت انجمن

$$x, y, z \in \mathcal{G}$$

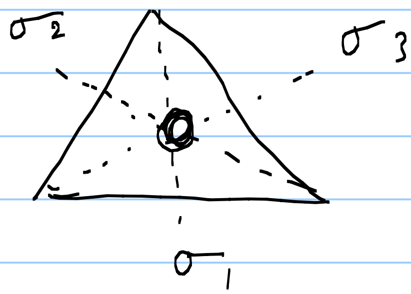
$$x \otimes (y \otimes z) = (x \otimes y) \otimes z$$

۵- For any $R \in \mathcal{G}$ $\exists$ $R^{-1} \in \mathcal{G}$ such that

$$R \otimes R^{-1} = R^{-1} \otimes R = E$$

مثال: به مولکول ازون نگاه کنیم: O_3

این مولکول به شکل مثلث متساوی الاضلاع است



گروه تقارن آن شش عنصر دارد

$$E, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, C_1, C_2$$

C_1، C_2 چرخش حول محور عمود بر صفحه مثلث است (به اندازه 120° و 240°).

σ_3، σ_2، σ_1 چرخش حول محورهای تقارن نشان داده شده در صفحه مثلث است (به اندازه 180°).

E عضوی از گروه G است که روی مثلث هیچ کاری انجام نمی‌دهد.

نام E identity element است.

جدول ضرب گروه G به صورت زیر است:

E	σ_1	σ_2	σ_3	C_1	C_2
σ_1	E	C_1	C_2	σ_2	σ_3
σ_2	C_2	E	C_1	σ_3	σ_1
σ_3	C_1	C_2	E	σ_1	σ_2
C_1	σ_3	σ_1	σ_2	C_2	E
C_2	σ_2	σ_3	σ_1	σ_1	C_1

نمایش یک گروه:

مجموعه‌ای از عناصر ریاضی که نسبت به گروه اصلی holomorphic هستند. مثلاً مجموعه‌ای از ماتریس‌ها با جدول ضرب گروه اصلی. در اینجا لازم نیست که هر عنصر گروه به یک ماتریس متمایز از دیگر ماتریس‌ها مربوط باشد.

اینک باز می‌گردیم به مثال اول (D_3)

$$D(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad D(\sigma_2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & +1/2 \end{pmatrix} \quad D(\sigma_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{3}/2 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$D(C_1) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{3}/2 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -1/2 \end{pmatrix} \quad D(C_2) = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

۱ـ توجه کنید که وقتی اتم‌های متفاوتی در هر یک از گوشه‌های مثلث می‌نشینند گروه تقارن عوض می‌شود و دستگاه تقارنی دیگری خواهد داشت.

۲ـ کلیه عناصر هر ردیف و یا هر ستون متمایزند. یعنی در هر ستون یا ردیف هر عنصر فقط یکبار ظاهر می‌شود.

۳ـ دو گروه با یک جدول ضرب را isomorphic می‌نامند. به عبارت دیگر وقتی رابطه یک به یک بین کلیه عناصر جدول‌ها شان برقرار باشد.

۴ - گروه دوره ای (Cyclic group)

$X, X^2, X^3, X^4, \cdots X^n = E$

گروه دوره ای از مرتبه n ام

Cyclic group of order n.

۵- زیرگروه (subgroup)

$\mathcal{G} = E, S_2, \cdots S_{\bar{g}}$

را زیرگروه هایی از گروه بزرگتر $\mathcal{G}$ با مرتبه h می نامیم اگر کلیه عناصر متعلق به g به $\mathcal{G}$ نیز تعلق داشته باشند

مثال E , (E, C_1, C_2) , $(E, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ زیرگروه (E, σ_1), (E, σ_2), (E, σ_3) های مثلث O_3 هستند

۶ - مجموعه عناصر

$XE, XS_2, \cdots XS_{\bar{g}}$

را left coset گروه g می نامیم، به شرط آنکه $X \notin g$

این ها coset زیرگروه نیستند.

بهمین ترتیب right coset ها به مجموعه عناصر

$EX, S_2X \cdots S_{\bar{g}}$

گفته می شود به شرط آنکه $X \notin g$.

قضیه: ⑥

فرض کنید g با مرتبه m یکی از زیر گروه‌های گروه G با مرتبه n باشد

در آن صورت n بر m بخش پذیر است.

۷- گروه جایگشت‌ها (permutation group)

به صورت

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \cdots & \alpha_n \end{pmatrix}$$

تعریف می‌شود و α_i ها یکی از جایگشت‌ها را مشخص می‌کند

مثال گروه جایگشت‌ها از مرتبه 3

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} , \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} , \qquad D = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} , \quad F = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

جدول ضرب این گروه مثل جدول ضرب گروه مثلثی است که دیدیم

E مانند المان identity عمل می‌کند

المان‌های A, B, C مانند σ_1, σ_2, σ_3 عمل می‌کنند

المان‌های D و F مانند C_1, C_2 عمل می‌کنند

به عبارت دیگر رابطه یک به یک بین المان‌های دو گروه برقرار است

لذا دو گروه ایزومورف هستند.

7

از گروه جایگشت ها در مکانیک کوانتمی استفاده مهمی می شود.

۷ - المان های $A \in G$ و $B \in G$ را همیوغ گوییم اگر گاه

$$A = X^{-1} B X \quad , \quad B = X A X^{-1}$$

و $X \in G$ باشد.

Conjugate ≡ همیوغ

۸ - هرگاه A، B همیوغ C باشند در آنصورت A و B نیز همیوغ خواهند بود

$$B = X A X^{-1} \quad , \quad C = Y A Y^{-1} \Rightarrow A = Y^{-1} C Y$$

$$B = X Y^{-1} C Y X^{-1} \Rightarrow B = Z C Z^{-1} \quad , \quad Z = X Y^{-1}$$

۹ - مجموعه عناصری که دو بدو همیوغ یکدیگر باشند به عناصر یک کلاس

class of elements

موسومند. به عبارت دیگر تیک کلاس تشکیل می دهند

به این ترتیب هر گروهی به چند کلاس تقسیم می شود.

لازم نیست تک تک عناصر را چک کنیم و ببینیم کلاسهای یک

گروه کدامند. ما می توانیم به گروه تقارن دستگاه فیزیکی مان نگاه کنیم و بپرسیم

کدامیک از عناصر تقارنی گروه کار مشابهی انجام می دهند. مثلاً مولکول O_3

دیدیم. آنگاه می توان دید که E و $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ و (C_1, C_2)

سه کلاس گروه مثلث است.

۱۰ - فرض کنید $A_1, A_2 \cdots A_h \in \mathcal{G}$

$A'_1, A'_2 \cdots \in \mathcal{G}'$

و فرض کنید که $A_1 \longleftrightarrow A'_1, A'_2 \ldots$ مربوط شود

به عبارت دیگر رابطه یک عضر از $\mathcal{G}$ به چند عضر از $\mathcal{G}'$

برقرار باشد. اگر رابطه $AB = C$ در بین عناصر متعلق به $\mathcal{G}$

برقرار باشد آنگاه رابطه $A'B' = C'$ در $\mathcal{G}'$

برقرار است. در آن صورت می‌گوییم که

دو گروه هومومورفیک homomorphic هستند

۱۱ - دو کلاس R و K را در نظر بگیرید.

$R = K$ به معنی آنست که اگر $x \in R$ باشد آنگاه

$x \in K$ خواهد بود.

وقتی فرض کنید کلاس $\mathcal{C}$ یکی از کلاسهای گروه $\mathcal{G}$

باشد در آن صورت $x^{-1} \mathcal{C} x = \mathcal{C}$

۱۲ - ضرب کلاسها

$$\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j = x^{-1} \mathcal{C}_i x \, x^{-1} \mathcal{C}_j x = x^{-1} \mathcal{C}_i \mathcal{C}_j x$$

از اینجا نتیجه می‌شود که $\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j = \sum c_{ijk} \mathcal{C}_k$

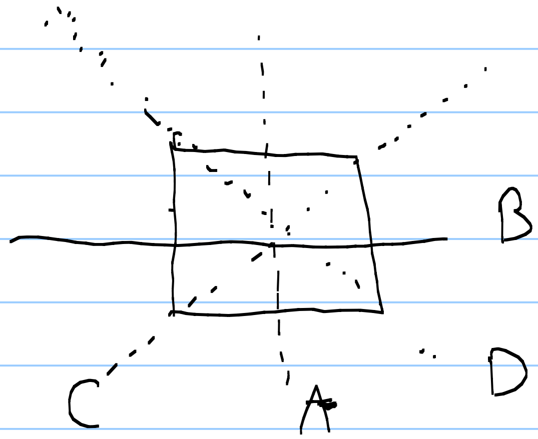
باز می‌گردیم به گروه شکل (مولکول O_3)؛ سه کلاس این گروه عبارتند از

$$\mathcal{C}_1 = E \qquad \mathcal{C}_2 = \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \;, \quad \mathcal{C}_3 = C_1, C_2$$

$$\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 = \mathcal{C}_2$$
$$\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_3$$
$$\mathcal{C}_2 \mathcal{C}_3 = 3\mathcal{C}_1 + 3\mathcal{C}_3$$

HW#4

گروه تقارنی مربع را در نظر بگیرید



عناصر گروه:

۱- چرخش 180° حول محورهای A، B، C و D که در صفحه مربع قرار دارند

۲- چرخش حول محور عمود بر صفحه مربع که از مرکز آن می‌گذرد
چرخش‌های $\frac{\pi}{2}$، π و $\frac{3\pi}{2}$

۳- عنصر E: چرخش حول محور عمود بر صفحه مربع به اندازه 0 یا 2π.

الف- جدول ضرب گروه را بدست آورید

ب- کلاس‌های آن را پیدا کنید

ج- زیرگروه‌های آن را پیدا کنید

د- ضرایب C_{ijk} را حساب کنید.

نظریه نمایش گروه ها

در اینجا ما سعی می کنیم مجموعه ای از موجودات ریاضی (mathematical entities) بیابیم که با گروه اولیه مان holomorph باشد تاکنون نمونه ای از این موجودات ریاضی را دیده ایم. گروه مثلثی با شش عضو آن وقتی که هر یک از عناصر آن را با یک ماتریس 2×2 نشان دادیم. از آنجا که ضرب ماتریس ها از رابطه $\Gamma(AB)=\Gamma(A)\Gamma(B)$ تبعیت می کنند. بین گروه ماتریس های 2×2 و عناصر گروه مثلثی یک رابطه یک به یک برقرار است و جدول ضرب گروه مثلثی و گروه ماتریس های 2×2 یکی است. به عبارت دیگر این دو گروه ایزومورف یکدیگرند.

در ترمینال این ماتریسها هم نمایش دیگری از گروه مثلثی است و این دو گروه هومومورفیک هستند.

ما در اینجا گروه های تقارنی را با ماتریس های مربعی نمایش می دهیم

۱- تعداد ردیف ها یا ستون های این ماتریس ها را "بعد نمایش" می نامند

Dimensionality of representation

۲- اگر کلیه ماتریسها متفاوت باشند می گوییم "نمایش واقعی"

true representation

داریم

۳ - در صورتی نمایش همومورفیک باشد، کلیه عناصری که به unit matrix مربوط می‌شوند را
invariant subgroup of the full group
می‌نامند

۴ - توجه داشته باشید ماتریس‌های معرفی شده 2x2
تنها نمایش گروه مثلث نیست. به عبارت دیگر این نمایش را
similarity transformation
تحت یک تبدیل تشابهی S
می‌توان بر دست آورد

$$\Gamma'(A) = S^{-1}\Gamma(A)S$$

نیز نمایش دیگری از گروه مثلث خواهد بود.

$$\Gamma'(A)\Gamma'(B) = S^{-1}\Gamma(A)SS^{-1}\Gamma(B)S$$
$$= S^{-1}\Gamma(A)\Gamma(B) \quad = S^{-1}\Gamma(AB)S$$
$$= \Gamma'(AB)$$

لذا جدول ضرب یکسانی دارند

این نمایش‌ها در حقیقت نمایش گروه در دستگاه‌های
مختلف است. بنابراین هم ارزند (equivalent)

۵ - نمایش‌های کاهش ناپذیر (irreducible representations)
" " " پذیر (reducible ")

واضح است که از نمایش ماتریس‌های 2X2، نمایش ماتریس‌های

1×1 یعنی دترمینان‌ها را می‌توان نمایش جدیدی به صورت

$$\begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(A) & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(A) \end{pmatrix}$$

ساخت. چنین نمایش را کاهش پذیر می‌نامند. اما این کاهش پذیری می‌تواند توسط یک تبدیل تشابهی از نظر پنهان بماند. بنابراین معیار کاهش پذیری این است که بشود به هر طریق ممکن ماتریس‌های نمایش گروه را به صورت block ها، مثل مثال بالا در آورد. اگر چنین کاری امکان پذیر نباشد، این نمایش را کاهش ناپذیر می‌خوانیم. خواهیم دید که بعد نمایش‌های کاهش ناپذیر به مجموعه توابع ویژه تبهگن مربوط می‌شوند. تبهگنی‌ای برابر با بعد نمایش مربوطه و تعداد نمایش‌های کاهش ناپذیر برابر است با تعداد سطوح انرژی متمایز

مثال دیگری از نمایش گروه های تقارنی

فرض کنید f_i ها مجموعه کاملی از توابع ویژه یک عملگر تقارنی باشد

$$R f_i = \sum_j D_{ji}(R) f_j$$

ماتریس های $D(R)$ برای المان های تقارنی گروه g $(R \in g)$ نمایش برای آن گروه خواهند بود. باید نشان دهیم ضرب این ماتریس ها رابطه یک به یکی با ضرب این المان ها دارند:

$$R_1 f_i = \sum_j D_{ji}(R_1) f_j$$

$$R_2 f_i = \sum_l D_{li}(R_2) f_l$$

$$R_1 \circledast R_2 f_i = R_1 \sum_j D_{ji} f_j$$

$$= \sum D_{ji}(R_2) D_{lj}(R_1) f_l = \sum D_{li}(R_3) f_l$$

$$D(R_1) D(R_2) = D(R_3)$$

$$R_1 \circledast R_2 = R_3$$

۶- نمایش های هم ارز (equivalent)

$$D'(R) = U D(R) U^{\dagger}$$

اگر یک ماتریس unitary باشد، آنگاه D' هم از D است

۷- نمایش تحویل ناپذیر: در صورتی که هیچ تبدیل یگانه ای وجود نداشته باشد که بیشتر این نمایش کلیه عناصر یک گروه را به صورت بلوک درآورد، در آن صورت نمایش تحویل ناپذیر خواهد بود.

۸- سرشت یا کاراکتر (Character)

$$\chi(R)=\sum D_{ii}(R) = \text{trace}\, D(R)$$

جمع درایه های قطری ماتریس نمایش یک عنصر گروه را کاراکتر آن عنصر می نامند

۹- تبدیل های یکانی مقدار کاراکتر را تغییر نمی دهند

۱۰- ماتریس های هم ارز همگی یک کاراکتر دارند.

۱۱- کاراکتر کلیه عناصر یک کلاس یکی است.

چون عناصر یک کلاس همیوغند

$$Tr(XAX^{-1}) = Tr(AX^{-1}X) = Tr(A)$$

رابطه نمایش گروه تقارن با پایه‌ها

قبلا دیدیم که اگر f_i ها مجموعه کاملی را تشکیل دهند و
میتوان از آنها به عنوان بردارهای پایه یاد کرد

$$Rf_i = \sum D_{ji}(R) f_j$$

ماتریس های D نمایشی از گروه تقارن خواهند بود

مثال

$$\mathcal{H} f_i = \sum H_{ji} f_j$$

H_{ji} ها عناصر ماتریس هامیلتونی را نشان می دهند

فرض کنید هامیلتونی تحت اثر عناصر گروه تقارنی ناوردا باشد. در آن صورت

$$R(Hf_i) = H(Rf_i) \Rightarrow R\sum_j H_{ji} f_i = H\sum_j D_{ji}(R) f_j$$

$$\sum H_{ji} D_{\ell j}(R) f_\ell = \sum D_{ji}(R) H_{\ell j} f_\ell$$

$$DH = HD$$

بنابراین نمایش ماتریسی گروه با هامیلتونی جابجا می‌شود

اگر f_i ها اختیاری انتخاب شده بودند تعداد زیادی f در این جمع ظاهر می‌شدند. اما اگر f_i ها ویژه توابع هامیلتونی می‌بودند در آن صورت ماتریس هامیلتونی قطری می‌شد و بدلیل جابجا شدن H و D ماتریس D نیز قطری می‌شد. به عبارت دیگر

هر عمل تقارنی می‌باید هر f_i ای را بخودش برگرداند و یا به مجموعه ای از حالت های ویژه ی تبهگن با آن.

یعنی این عبارت است که بعد نمایش یک عنصر تقارن توسط f_ℓ ها مشخص می‌شود و می‌باید از تبهگنی آن بیشتر باشد. اگر نمایش تحویل‌ناپذیر باشد بعد نمایش و تبهگنی یکی است. چرا که مجموعه حالات تبهگن مستقل خطی اند و تعدادشان باید با بعد نمایش تحویل‌ناپذیر یکی شود.

۱ - اگر حالتی از طریق یک نمایش تحویل‌ناپذیر یک بعدی تبدیل یابد
این حالت شود که باید این حالت ناتبهگن باشد.

البته امکان دارد هامیلتونی حالتهای ویژه‌ای داشته باشد که به تقارنی متفاوت از عناصر تقارنی مربوط باشند. این حالتهای ویژه نیز تبهگن خواهند بود چنین حالتهایی به شکل هامیلتونی بستگی دارند و گفته می‌شود که هامیلتونی accidental degeneracy دارد. مثال اتم هیدروژن است که می‌باید جداگانه از آن صحبت کرد.

۲ - تعداد نمایش‌های تحویل‌ناپذیر = تعداد کلاسها

۳ - $h = \sum l_i^2$

l_i ها بعد نمایش‌های تحویل‌ناپذیرند

۴ - گاهی به نحو منحصر بفردی می‌توان این نمایش‌ها را تشخیص داد.

در گروه متقارن D_3، از آنجا که $6 = 2^2 + 1^2 + 1^2$ است. بنابراین تنها نمایش‌های تحویل‌ناپذیر ما یکی باید دو بعدی باشد و دوتای دیگر یک بعدی. ما این نمایش‌ها را هم اکنون می‌شناسیم.

این نمایش‌ها را با Λ_1 Λ_2 Λ_3 نشان می‌دهیم

	E	σ_1	σ_2	σ_3	C_1	C_2
Λ_1	1	1	1	1	1	1
Λ_2	1	-1	-1	-1	1	1
Λ_3	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$

این ۳ نمایش ها نمایش های تحویل ناپذیر گروه مثلث هستند
و هر نمایش تحویل ناپذیر دیگر را می توان با یک تبدیل تشابه
به یکی از اینها تبدیل نمود.

جدول کاراکتر

	E	σ	C
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	-1	1
Λ_3	2	0	-1

The great orthogonality theorem

قضیه پر اهمیت تعامد

$$\sum_R D^{(i)}_{\alpha\beta}{}^*(R)\, D^{(j)}_{\alpha'\beta'}(R) = \frac{h}{l_i}\,\delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}\,\delta_{ij}$$

$h =$ تعداد عناصر گروه تقارن

$l_i =$ بعد نمایش تحویل ناپذیر i ام

با استفاده از این قضیه می توان نشان داد که

۱- $\sum l_i^2 = h$

۲- $$\sum N_\rho\, \chi^{(i)*}(\rho)\, \chi^{(j)}(\rho) = h\,\delta_{ij}$$

جمع روی کلاسها

$N_\rho =$ تعداد المان های کلاس ρ

این رابطه ضرب ردیف ها را مشخص می کند

۳- $$\sum \chi^{(i)*}(\rho_k)\, \chi^{(i)}(\rho_l) = \frac{h}{N_\rho}\,\delta_{kl}$$

این رابطه ضرب ستون ها را می دهد.

با توجه به این ها می توانیم جدول کاراکتر ها را مشخص کنیم بدون آنکه دقیقاً ماتریس های 2×2 در نمایش A_3 گروه شکلش را بشناسیم

	E	3σ	$2C$
A_1	1	1	1
A_2	1	a	b
A_3	2	c	d

ضرب ردیفهای اول و دوم

$1 + 3 \times 1 \times a + 2 \times 1 \times b = 0$

ضرب ردیف دوم درخودش

$1 + 3a^2 + 2b^2 = 6$

$$\begin{cases} 1 + 3a + 2b = 0 \\ 1 + 3a^2 + 2b^2 = 6 \end{cases} \Rightarrow \quad \begin{aligned} a &= -1 \\ b &= +1 \end{aligned}$$

ضرب ردیف های اول وسوم

$2 + 3c + 2d = 0$

ضرب ردیف سوم درخودش

$4 + 3c^2 + 2d^2 = 6$

$c = 0 \ , \quad d = -1$

	E	3σ	$2C$
A_1	1	1	1
A_2	1	-1	$+1$
A_3	2	0	-1

جلسه سوم

در جلسه پیش با تعاریفی چون گروه تقارن، نمایش ماتریسی گروه، نمایش های هم ارز، نمایش های تحویل پذیر و نمایش های تحویل ناپذیر، سرشت نمایش های تحویل ناپذیر عناصر یک گروه، قضیه تعامدی و چند قاعده مشخص که از آن نتیجه می شود، جدول سرشت نمایش های تحویل ناپذیر گروه تقارن

جدول سرشت ها از آن جهت مهم بود که بعد نمایش های تحویل ناپذیر مشخص کننده تبهگنی حالت های کوانتومی یک سامانه با گروه تقارن داده شده است.

برای روشن شدن این مطلب یکبار دیگر به تشریح این مطلب می پردازیم

نمایش ماتریسی گروه تقارن معادله شرودینگر

دیدیم که منظور ما از گروه تقارن مجموعه ای از عملگرهاست که هامیلتونی یک سامانه را ناوردا باقی می گذارند. هر یک از این عملگرها را می توان توسط یک تبدیل مختصات متعامد

orthogonal coordinate transformation

مشخص کرد. $x' = R\,x$

به یاد بیاورید که ما این کار را برای عملگرهای مثلثی O_3 انجام دادیم. در اینجا ترتیب ماتریس های 2×2 را داشتیم.

$$x'_i = \sum_j R_{ij} x_j$$

R می توانند چرخش، انعکاس یا وارونی این مختصات و یا ترکیب آنها باشند.

R یک ماتریس حقیقی و متعامد است. بنابراین

$$R^{-1} = R^{T} = \tilde{R}$$

ترانهاده transpose

$$x_i = \sum_j R^{-1}_{ij} x'_j = \sum_j R_{ji} x'_j .$$

چنان که می‌دانیم این ماتریس‌ها یک گروه تشکیل می‌دهند. گرچه این بحث به زبان تبدیل‌های متعامد ارائه شد، ولی عملگرهای تقارنی می‌توانند جایگشت مختصات دستگاه‌های بس ذره‌ای را نیز شامل شوند.

اینک گروه ایزومورف با این گروه را معرفی می‌کنیم.

عناصر این گروه عملگرهای تبدیلی هستند که روی توابع عمل می کنند (نه روی مختصات).
این نوع عملگرها را با P_R نشان می دهیم. P_R متناظر با R است.

$$P_R f(\vec{x}) = f(R^{-1}\vec{x})$$

$$P_R f(R\vec{x}) = f(R^{-1}R\vec{x}) = f(\vec{x})$$

یعنی عملگر P_R شکل تابع $f(x)$ را چنان تغییر می دهد که مختصات بر چرخش (؟) آن توسط R جبران شود. به عنوان مثال فرض کنید R محورهای مختصات را حول محور x به اندازه $\frac{\pi}{2}$ بچرخاند.

$$x' = x \quad , \quad y' = z \quad , \quad z' = -y$$

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R^{-1} = \tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R^{-1}x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -z \\ y \end{pmatrix}$$

$$P_R f(x) = f(R^{-1}x) = f(x, -z, y)$$

اوربیتال های sp اتمی را در نظر بگیرید

$$f_1 = x\varphi(r) \quad , \quad f_2 = y\varphi(r) \quad f_3 = z\varphi(r)$$

$$P_R(f_1) = x\varphi(r), \ P_R(f_2) = -z\varphi(r), \ P_R(f_3) = +y\varphi(r)$$

توجه: r تحت اثر عملگر چرخش ناوردا است.

توجه ۲: پس این توابع نسبت به محور x در جهت عقربه های ساعت چرخیده اند حال آنکه محورها در خلاف جهت عقربه های ساعت چرخیده اند.

می توان نشان داد که عملگرهای P_R با گروه تبدیل مختصات $\{R\}$ ایزومورف هستند. ابتدا نشان دهیم که

$$P_S P_R = P_{SR}$$

R و S دو تبدیل مختصات هستند.

$$P_R f(x) = f(R^{-1}x) = g(x)$$

$$P_S g(x) = g(S^{-1}x) = f(R^{-1}(S^{-1}x))$$

$$P_S P_R f(x) = f((SR)^{-1}x) = P_{SR} f(x)$$

اینک به گروه تقارن معادله شرودینگر می نگریم. از آنجا که عملگر P_R هامیلتونین H را ناوردا باقی می گذارد

$$P_R H \psi = H P_R \psi$$

لذا H با عملگر P_R جابجا می شود.

مجموعه عملگرهایی که با هامیلتونی H جابجا می شوند گروهی تشکیل می دهند به نام **گروه تقارن معادله شرودینگر**

اینکه این عناصر گروه تشکیل می دهند بدیهی است. دو عملگر را در نظر بگیرید که با H جابجا می شوند، در آن صورت حاصلضرب این عملگرها نیز با H جابجا خواهد شد.

به روابط زیر می‌نگریم

$$P_R H \Psi_n = P_R E_n \Psi_n = E_n P_R \Psi_n$$
$$H(P_R \Psi_n) = E_n (P_R \Psi_n).$$

از این رابطه نتیجه می‌شود که هر تابع $P_R \Psi_n$ که از طریق اعمال عملگر تقارنی P_R بر Ψ_n بدست آمده باشد نیز ویژه تابع هامیلتونی با همان ویژه مقدار E_n خواهد بود. لذا از طریق اعمال عملگرهای گروه تقارنی معادله شرودینگر ویژه توابع تبهگن ساخته می‌شوند. وقتی با این دستورالعمل بتوانیم کلیه توابع تبهگن را ترکیب کنیم می‌گوییم **تبهگنی نرمال است.**

گاهی پیش می‌آید که از این طریق به کلیه توابع تبهگن نمی‌توان دست یافت. در آن صورت می‌گوییم **تبهگنی تصادفی (accidental degeneracy) داریم.**

در این گونه موارد معلوم می‌شود که سامانه دارای تبهگنی پنهانی بوده است که به آن توجه نشده است. (hidden symmetry)

Fock نشان داده است گروه تقارنی معادله شرودینگر اتم هیدروژن از تقارن چرخشی چهاربعدی در فضای تکانه حاصل می‌شود

اینک فرض کنید هامیلتونی یک سامانه در حالت ویژه E_n تبهگنی l_n داشته باشد. می‌گوییم

l_n تابع تبهگن بردارهای پایه یک فضای برداری l_n بعدی را تشکیل می‌دهند.

این فضا زیرفضایی از فضای هیلبرت توابع ویژه هامیلتونی H هستند.
و این زیرفضا تحت عمل کلیه عملگرهای تقارن معادله شرودینگر ناوردا است. به این معنی که اثر هر عملگری از گروه تقارنی بر یکی از این توابع ویژه، جمع خطی از توابع ویژه تبهگن را می‌دهد:

$$P_R \Psi_\nu^{(n)} = \sum_{k=1}^{l_n} \Psi_k^{(n)} D^{(n)}(R)_{k\nu}$$

جمع روی l_n ویژه تابع تبهگن $\Psi_k^{(n)}$ با ویژه انرژی E_n صورت می‌گیرد.

به این ترتیب ماتریس‌های l_n-بعدی $D^{(n)}$ نمایش l_n-بعدی گروه تقارنی معادله شرودینگر است. چنین نمایشی را برای هر یک از مجموعه توابع تبهگن می‌توانیم بنویسیم.

این نمایش‌ها تحویل‌ناپذیرند، چراکه همیشه عملگری متعلق به گروه تقارنی وجود دارد که هر یک از این توابع را به توابعی دیگر که با آن تبهگن‌اند ببرد و ماتریس‌های کوچکتری که بتوانند کل این تبدیل را

به ما به هیچ وجه وجود ندارد

اثبات این که این ماتریس ها گروه تشکیل می دهند و جدول ضرب آن با جدول ضرب گروه تقارن معادله شرودینگر یکی است بیان اثباتی است که قبلاً ارائه شده است.

$$D(SR) = D(S)\,D(R)$$

به عبارت دیگر ماتریس های D نمایشی از گروه تقارن را نشان می دهند، نتیجه این که:

مجموعه ρ_n توابع همگن $\psi_\nu^{(n)}$ با انرژی E_n توابع پایه نمایش تحویل ناپذیر ρ_n - بعدی $D^{(n)}$، گروه تقارن معادله شرودینگر را تشکیل می دهند.

به راحتی نشان داده می شود که اگر توابع پایه بهنجار و متعامد باشند این نمایش یکانی خواهد بود.

حال فرض کنید مجموعه مستقل خطی متفاوتی را انتخاب کرده باشیم بطوری که هر یک از آن ها را بتوان به صورت مجموعه خطی ای از دسته نخست

$$\psi'_\mu = \sum_{\nu=1}^{\rho} \psi_\nu \, \alpha_{\nu\mu}$$

$$\psi_k = \sum_{\lambda=1} \psi'_\lambda \, \alpha^{-1}_{\lambda\mu}$$

$$P_R \psi'_\mu = P_R \sum \psi_\nu \, \alpha_{\nu\mu} = \sum \psi_k D(R)_{k\nu} \alpha_{\nu\mu}$$

$$= \sum \psi'_\lambda \, \alpha^{-1}_{\lambda k} \, D(R)_{k\nu} \, \alpha_{\nu\mu}$$

$$= \sum \psi'_\lambda \left[\alpha^{-1} D \alpha\right]_{\lambda\mu} \quad , \quad D'(R) = \alpha^{-1} D \alpha$$

به عبارت دیگر اگر مجموعه پایه دیگری آنها ب شده باشد، تنها به نمایش هم ارز با نمایش اولیه دست می یابیم. بنابراین

در محدوده تبدیل های مشابه (similarity transformation) تنها یک نمایش منحصر بفرد برای گروه تقارنی معادله شرودینگر وجود دارد که به هر یک از ویژه مقدارهای هامیلتونی مربوط است.

در اینجا بوضوح دیده می شود که تبهگنی مربوطه مساوی است با بعد نمایش مربوط به آن، بنابراین از طریق پیدا کردن بعد نمایش های تحویل ناپذیر گروه معادله شرودینگر ما قادر خواهیم بود بدون حل صریح ابعاد درجه تبهگنی مسئله را بیابیم. با توجه به این نکته می توان نتیجه گرفت که یک اختلال در صورتی تبهگنی را می شکند (یا از میان برمی دارد) که تقارن گروه به ترتیبی کاهش یابد و در نتیجه نمایش های کاهش ناپذیر با تبهگنی معین به نمایش های کاهش ناپذیر با ابعاد کوچکتر تبدیل شوند.

در ذیل به ذکر چند مثال می پردازیم

مثال ۱ - گروه آبلی. هر یک از عناصر یک گروه آبلی یک کلاس تشکیل می دهند.

تعداد کلاس‌ها = تعداد عناصر گروه = تعداد نمایش‌های تحویل ناپذیر

از آنجا که $\sum l_i^2 = h$ است می‌توان به این نتیجه رسید که کلیه نمایش‌ها می‌باید یک بعدی باشند.

$$\underbrace{1^2+1^2+1^2+\dots+1^2}_{h \text{ دفعه}} = h$$

بنابراین اگر گروه تقارن معادله شرودینگر آبلی باشد کلیه حالتها می‌باید ناتبهگن باشند.

مثال ۲: گروه‌های دوره‌ای (cyclic group)

یک گروه دوره‌ای یک گروه آبلی است.

$$A_1 = A, \quad A_2 = A^2, \quad \dots \quad A_n = A^n = E$$

چون کلیه نمایش‌ها یک بعدی هستند، فرض می‌کنیم عددی که به کلاس A مربوط می‌شود r باشد $D(A) = r$

$$D(A_n) = [D(A)]^n = r^n, \quad D(E) = 1$$

$$(D(A))^h = r^h = 1 \Rightarrow r = e^{2\pi i p/h}$$

$$p = 1, 2, \dots h$$

این اعداد ریشه‌های عدد 1 هستند. به این ترتیب h نمایش تحویل ناپذیر ناتبهگن پیدا کرده‌ایم.

جدول کاراکترها دوتا از زیرگروه های از گروه مثلثی
که قبلاً معرفی شده است

زیرگروه ها (E, C_1, C_2) و $(E, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

	E	C_1	C_2
L_1	1	1	1
L_2	1	$e^{2\pi i/3}$	$e^{4\pi i/3}$
L_3	1	$e^{4\pi i/3}$	$e^{8\pi i/3} = e^{2\pi i/3}$

	E	σ_1	σ_2	σ_3
L_1	1	1	1	1
L_2	1	$e^{\pi i/2}$	$e^{\pi i}$	$e^{2\pi i/2}$
L_3	1	$e^{\pi i/2}$	1	$e^{\pi i}$
L_4	1	$e^{3\pi i/2}$	$e^{\pi i}$	$e^{\pi i/2}$

برمی گردیم به مسئله مولکول مثلثی D_3. فرض کنید حالا میدان مغناطیسی یکنواختی عمود بر صفحه مولکول اعمال شده باشد. اینک می خواهیم تقارن های مسئله را با حضور میدان مغناطیسی بررسی کنیم. انعکاس جهت میدان مغناطیسی را عوض می کند و اگر هامیلتونی حاوی میدان مغناطیسی باشد، باید انتظار داشته باشیم. لذا

انعکاس جزء عناصر گروه تقارنی سامانه قرار نمی‌گیرد.

البته چرخش‌های حول محوری موازی میدان مغناطیسی جزء عناصر تقارنی قرار دارند. این گروه تقارنی

$$(E, C_1, C_2)$$

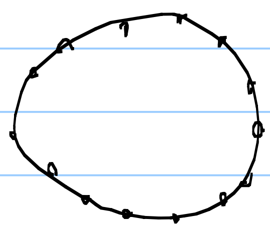
است. ما جدول کاراکتر این گروه را قبلاً پیدا کردیم.

اگر جدول کاراکتر گروه مثلث را با جدول زیر گروه (E, C_1, C_2) مقایسه کنیم می‌بینیم نمایش A_3 در گروه مثلث با تبهگنی دوگانه به نمایش‌های L_2 و L_3 می زیرگروه (E, C_1, C_2) (O_3 در حضور میدان مغناطیسی می‌شکند).

مثال ۳:

زنجیره‌ای از اتم‌ها با فاصله شبکه‌ای a و پتانسیل تناوبی و دوره تناوبی h در یک حلقه را در نظر بگیرید.

گروه تقارنی هامیلتونی این دستگاه یک گروه دوره‌ای با رتبه h است.



المان تقارنی در اینجا عبارت است از انتقال به اندازه یک فاصله شبکه‌ای a

بنابراین $P_a \psi(x) = \psi(x+a)$

نمایش‌ها یک بعدی اند زیرا بطور ترایع مربع مانند ماتریس‌های یک بعدی است که در نمایش گروه دوران‌ها ظاهر می‌شوند

$$\psi_p(x+a) = P_A\psi(x) = e^{2\pi i p/h}\,\psi_p(x)\ ,\quad L = ha$$

$$\psi_p(x+a) = e^{2\pi i p a/L}\,\psi_p(x)$$

$$\psi_k(x+a) = e^{i k\cdot x}\,\psi_k(x)\ ,\quad k = \frac{2\pi p}{L}\ ,\quad p = 1,\dots h$$

این قضیه بلاخ است که در کتاب‌های متعارف نیز یک حالت خاصه از آن نام می‌برند.

مثال‌ها: گروه چرخش دو بعدی: کلیه چرخش‌ها حول یک محور معین این گروه بینهایت عنصر دارد.

$$D(\varphi_1)\,D(\varphi_2) = D(\varphi_1+\varphi_2) \Rightarrow D^{(m)}(\varphi) = e^{im\varphi}$$

$$D^{(m)}(2\pi) = D^{(m)}(E) = 1\ ,\quad m = 0, \pm 1, \dots$$

$$\psi_m(r,\theta,\varphi) = f(r,\theta)\,e^{im\varphi}$$

کم شدن تبهگن

منظور از کم شدن تبهگن یک دستگاه به معنی کاهش یافتن تعداد عملگرهای تبهگن دستگاه است.

مثلاً در اثر فشار دستگاه تغییر شکل می‌دهد و یا در اثر اعمال یک عامل خارجی مانند میدان مغناطیسی این اتفاق لوقوع می‌پیوندد.

مجموعه عملگرهای تقارنی که حکم زیرگروهی از گروه بزرگتر هستند. ماتریس‌هایی که نمایش‌های تحویل‌ناپذیر گروه بزرگتر را می‌سازند نمایش برای این زیرگروه‌ها نیز خواهند بود (البته تنها آن عناصری را در نظر می‌گیریم که متعلق به زیرگروهند). اما این بار ماتریس‌های نمایش در گروه بزرگتر لزوماً نمایش تحویل‌ناپذیر برای زیرگروه‌ها نیستند و ممکن است نمایش‌های تحویل‌پذیر زیرگروه‌ها باشند. در این صورت تبهگنی گروه بزرگتر در اثر مثلاً تغییر شکل می‌شکند. از طریق این تحویل‌پذیری می‌توان نحوه شکسته شدن تقارن و شکسته شدن سطوح تبهگن به سطوحی با تبهگنی کمتر را مشخص کرد.

یک بار دیگر جدول کاراکتر زیرگروه (E, C_1, C_2) را بازنویسی می‌کنیم

	E	C_1	C_2
L_1	1	1	1
L_2	1	$e^{2\pi i/3}$	$e^{4\pi i/3}$
L_2	1	$e^{-2\pi i/3}$	$e^{-4\pi i/3}$

نمایش تحویل‌ناپذیر دوبعدی گروه مثلث

	E	C_1	C_2
Λ_3	2	-1	-1

را می‌توان به کمک ماتریس‌های دوبعدی $\begin{pmatrix} L_2^i & 0 \\ 0 & L_3^i \end{pmatrix}$ ساخت

می توانیم ببینیم که رابطه زیر برقرار است

$$\chi^{\Lambda_3}(R) = \chi^{L_1}(R) + \chi^{L_2}(R)$$

$$R \in \{E, C_1, C_2\}$$

به طور کلی می توان نشان داد که اگر $\chi(R)$ سرشت عنصر R در گروه بزرگتر باشد و $\chi^{i}(R)$ سرشت همان گروه در نمایش های تحویل ناپذیر زیرگروه باشند، آن گاه

$$\chi(R) = \sum a_i \chi^{(i)}(R)$$

$$a_i = \frac{1}{h}\sum_{j} \chi^{(j)*}(R)\,\chi(R) = \frac{1}{h}\sum_{\rho} N_\rho \chi^{(j)*}(\rho)\,\chi(\rho)$$

نمایش های تحویل ناپذیر   کلاس ها

به ببینیم بر حسب توابع موج چه می توان گفت.

نمایش بهم ریزی حالتهای دستگاه هیدروژنی بدون حضور میدان مغناطیسی با تبهگنی درجه ها نشان می دهد. به محض اعمال میدان مغناطیسی بینهایت کوچک، تقارن گروه کمتر شده و حالت تبهگنی درجه ها نه به در حالت ناتبهگن می شکنند. چرا که اتیک نمایش های زیرگروه نمایش های تک بعدی اند.

مثال دیگر: فرض کنید اتم آهن با پیکربندی

$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6\,3d^6\,4s^2$

را در بلوری قرار دهیم. این اتم در ابتدا ساختار کروی دارد

به این معنی که تقارن چرخش کامل و وارون دارد.

full rotation and inversion symmetry

می توانیم به طریقی که نشان دهیم که اگر بلور تقارن مکعبی داشته باشد حالت های d اتم آزاد با تبهگنی پنج گانه به تبهگنی های دوگانه و سه گانه بشکند. بحث در این باره مستلزم تعمیم گروه های گسسته و محدود به گروه پیوسته ولی محدود، یعنی گروه چرخش با تقارن کامل کروی است.

بحث درباره گروه چرخش را به بعد واگذار می کنیم. اگر بخواهیم نحوه شکسته شدن تبهگنی های گروه چرخش در بلور مکعبی را بیابیم باید ابتدا جدول کاراکتر گروه تقارنی مکعبی را بدست آوریم.

چون گروه مکعبی کاربرد فراوانی دارد جدول کاراکتر آن را در صفحه بعد ارائه می کنیم. این گروه ۴۸ عضو دارد اگر فقط چرخش ها را در نظر بگیریم (proper rotations) آنگاه این گروه 24 عضو دارد. البته می توان الان وارونی را براحتی وارد کرد و به این ترتیب به نکته تازه ای برنمی خوریم.

در صفحه ۷۳ کتاب Tinkham جدولی نشان داده شده است که در آن نحوه شکسته شدن سطوح اتمی در میدان بلوری آمده است. همچنین چگونگی شکسته شدن سطوح انرژی اتمی در اثر کشیده شدن در راستای یکی از محورها نیز نشان داده شده است.

سطوح اتمی	میدان مکعبی	میدان مکعبی + تغییر شکل در راستای یکی از محورهای بلور
$L=0$ — S	$\overset{(1)}{A}$	A_1
$L=1$ — $\overset{(3)}{P}$	$\overset{(3)}{T_1}$	$\overset{(1)}{A_1}$, $\overset{(2)}{E}$
$L=2$ — $\overset{(5)}{D}$	$\overset{(3)}{T_2}$	$\overset{(1)}{A_1}$, $\overset{(2)}{E}$
	$\overset{(2)}{E}$	$\overset{(2)}{E}$
$L=3$ — $\overset{(7)}{F}$	$\overset{(3)}{T_2}$	$\overset{(1)}{A_1}$, $\overset{(2)}{E}$
	$\overset{(3)}{T_1}$	$\overset{(1)}{A_1}$, $\overset{(2)}{E}$
	$\overset{(1)}{A_2}$	A_2

عددهای بالای هر خط تبهگنی را نشان می‌دهد

C_2 ی دوری حول محورهای xy ، yz ، zx است

مطابق علامت گذاری های متعارف گروه مکعبی کامل
(عناصر چرخش + وارونی) را با O_h نشان می دهند
گروه مکعبی بدون عنصر وارونی را با O نشان می دهند

جدول کاراکتر گروه مکعبی O

		E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
Γ_1	A_1	1	1	1	1	1
Γ_2	A_2	1	1	1	-1	-1
Γ_{12}	E	2	-1	2	0	0
Γ_{15}'	T_1	3	0	-1	-1	1
Γ_{25}'	T_2	3	0	-1	1	-1

$$\sum l_i^2 = 3^2 + 3^2 + 2^2 + 1^2 + 1^2 = 24 = h$$

C_3 چرخش حول قطرهای مکعب است (چرخش $\frac{2\pi}{3}$ و $\frac{4\pi}{3}$ برای چهار قطر مکعب $4\times 2 = 8$)

C_2 های اولی حول محورهای x و y و z است.

C_2 های دومی حول محورهای xy ، yz و zx (3).

جدول کاراکتر حالت d های اتم آزاد

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
D_2	5	-1	+1	+1	-1

براحتی دیده می شود که $D_2 = E + T_1$ است.

شکسته شدن سطح d اتم آزاد با تبهگنی پنج گانه به دو سطح
با تبهگنی های دوگانه و سه گانه استنتاج می‌شود.

دقیقاً همین ارزیابی در مورد نوارهای انرژی بلورها
مطرح می‌شود.

نقطه Γ دارای ماکزیمم تقارن است و خط ΓX
حاصل است با تقارن کمتر. در حقیقت خط ΓX دارای گروه
تقارنی است که زیر گروه متعلق به گروه تقارنی Γ است.
بدیهی است که اگر E در نقطه Γ تبهگنی سه گانه داشته باشد
با استناد به روش فوق الذکر براحتی می‌توان نشان داد که چگونه
خطوط نوار انرژی باید شکسته شوند.

ذکر چند نکته ضروری است

۱. نوار انرژی سه بعدی است به این معنی که

$$E(\vec{k}) = E(k_x, k_y, k_z)$$

۲. نشان دادن انرژی در کلیه نقاط اولین ناحیه بریلوئن غیرضروری است
از آنجا که نشان دادن مقدار انرژی در راستای خطوط تقارنی مشابه
آن است که مقدار آن را در راستای کلیه خطوط دیگر با همان تقارن نشان
بدهیم، انرژی نوار را تنها در راستای این خطوط و در نقاط تقارنی
$\Gamma, X, L, \ldots$ محاسبه می‌کنند.

۲ - فرض کنید یکی از حالت های ویژه الکترونی سامانه ψ_k باشد و R یکی از عملگرهای گروه تقارنی آن. در آن صورت

$$R\psi_k = \psi_{Rk}$$

هر عملگر تقارنی تابع موج جدیدی به ما می دهد که به بردار موج Rk مربوط است. اگر همه عملگرهای تقارنی روی ψ_k اثر کنند مجموعه از بردارهای موج را می سازند. در مورد ساختار مکعبی ساده دیدیم تعداد این عناصر تقارنی ۴۸ تا است.

از طرف دیگر تحت اثر عملگرهای تقارنی هامیلتونی ناوردا باقی می ماند. بنابراین کلیه این حالتها باید تبهگن باشند. به عبارت دیگر باید به یک انرژی مربوط باشند

$$H\psi_k = \mathcal{E}(k)\psi_k \quad , \quad RH\psi_k = \mathcal{E}(k)R\psi_k = H(R\psi_k)$$

$$\mathcal{E}(k)R\psi_k = H\psi_{Rk} = \mathcal{E}(Rk)\psi_{Rk} = \mathcal{E}(Rk)R\psi_k$$

$$\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}(Rk)$$

قبلاً گروه تقارنی مکعبی را بررسی کردیم. نقطه Γ دارای همین گروه تقارنی است. اما اگر در راستای k_x در داخل ناحیه بریلوئن حرکت کنیم گروه تقارنی دیگر O_h نخواهد بود، بلکه گروه تقارنی در راستای x Γ ها Δ C_{4v} است که هشت عنصر دارد.

$$C_{4v} = \{E,\ C_2,\ 2C_4,\ 2\sigma_v,\ 2\sigma_d\}$$

این عناصر k_x را ناوردا باقی می‌گذارند.

می‌توان نشان داد که این گروه ۴تا نمایش یک‌بعدی و یک نمایش دوبعدی است $(8 = 1^2+1^2+1^2+1^2+2^2)$

جدول کاراکتر این گروه و مقایسه آن با جدول کاراکتر گروه مکعبی ساده نشان می‌دهد که T_{1u} باید به نمایش‌های E, A_1 برود. در اینجا تقارن از O_h به C_{4v} کاهش یافته است. برای روشن شدن مطلب جدول کاراکتر گروه‌های C_{4v} و O_h را می‌نویسیم

C_{4v}	E	C_4^2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Δ_1	1	1	1	1	1
Δ_2	1	1	-1	1	-1
Δ_3	1	1	-1	-1	1
Δ_4	1	1	1	-1	-1
Δ_5	2	-2	0	0	0

$\sigma_d = C_2 R$; تقارن انعکاس $= R$; $O_h = O \times R$ ترجمه‌کننده

$\sigma_v = R C_4^2$

جدول کاراکتر گروه مکعبی کامل با 48 عنصر

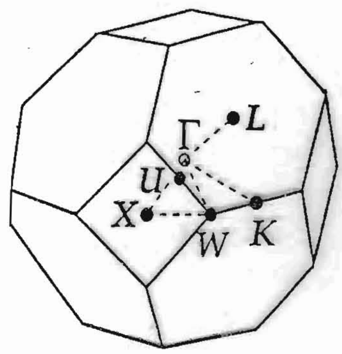
O'	E	R	$8C_3$	$8RC_3$	$3C_2+3RC_2$	$6C_2+6RC_2$	$6C_4$	$6RC_4$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1		1	1	1	-1	-1	-1
Γ_3	2	2	-1	-1	2	0	0	0
Γ_4	3	3	0	0	-1	-1	1	1
Γ_5	3	3	0	0	-1	1	-1	-1
Γ_6	2	-2	1	-1	0	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$
Γ_7	2	-2	1	-1	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
Γ_8	4	4	-4	-1	0	0	0	0

Octahedral double group O'

24 عنصر گروه مکعبی که قبلاً تعریف شده است.
ضرب هر یک از 24 عنصر در المان R، 24 عنصر دیگر تولید
می‌کند. جمعاً 48 عنصر جداگانه داشت. 8 کلاس و در نتیجه
8 نمایش تحویل ناپذیر جداگانه داشت

$$48 = 1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 2^2 + 2^2 + 4^2$$

٤١



$X = (1,0,0)$

$L = (0.5, 0.5, 0.5)$

$K = (0.75, 0.75, 0)$

$W = (1, 0.5, 0)$

$U = (1, 0.25, 0.25)$

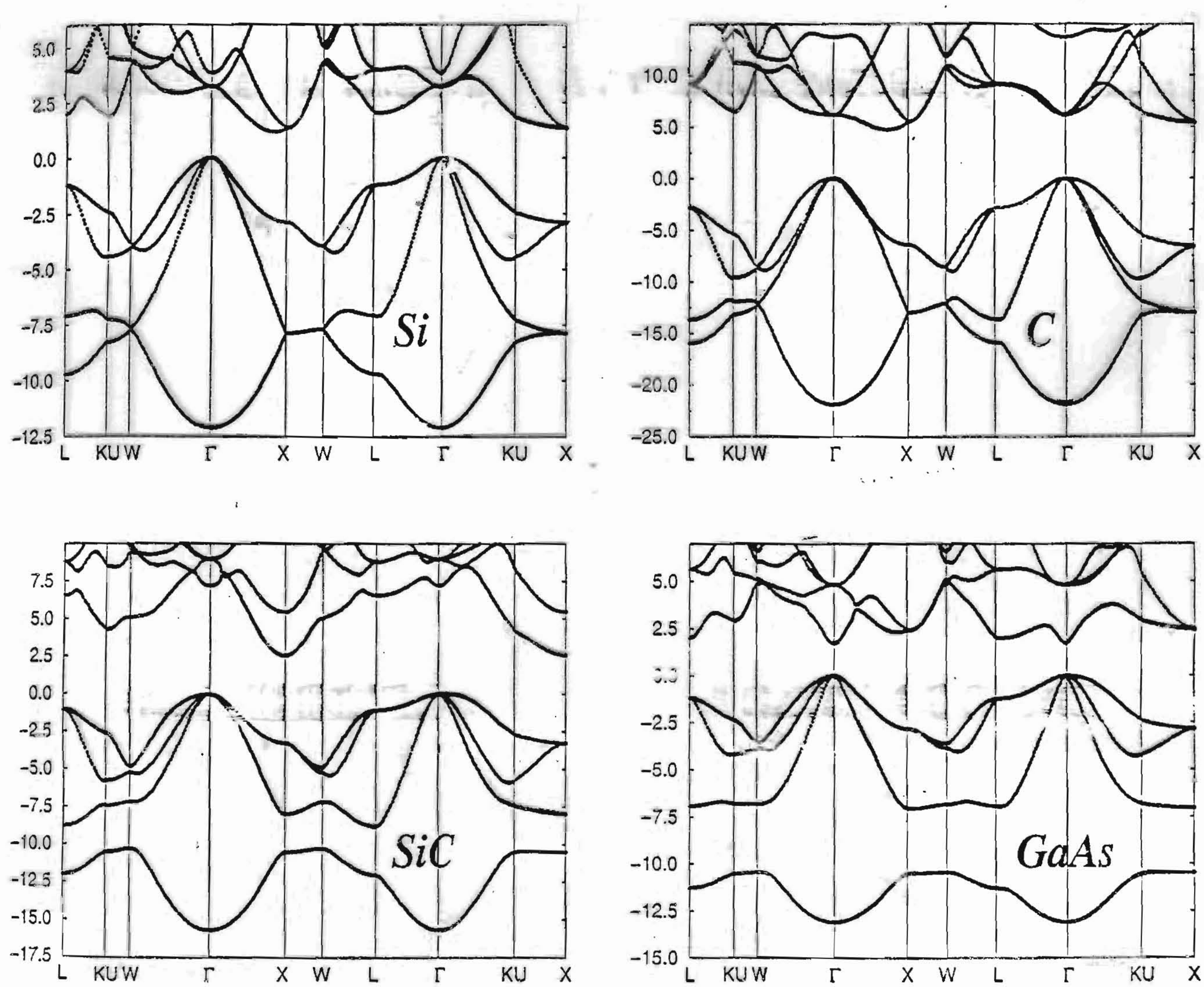


Figure 4.8. Band structure of four representative covalent solids: Si, C, SiC, GaAs. The first and the last are semiconductors, the other two are insulators. The small diagram above the band structure indicates the Brillouin Zone for the FCC lattice, with the special **k**-points X, L, K, W, U identified and expressed in units of $2\pi/a$, where a is the lattice constant; Γ is the center of the BZ. The energy scale is in electronvolts and the zero is set at the Valence Band Maximum. (Based on calculations by I.N. Remediakis.)

ع ۴

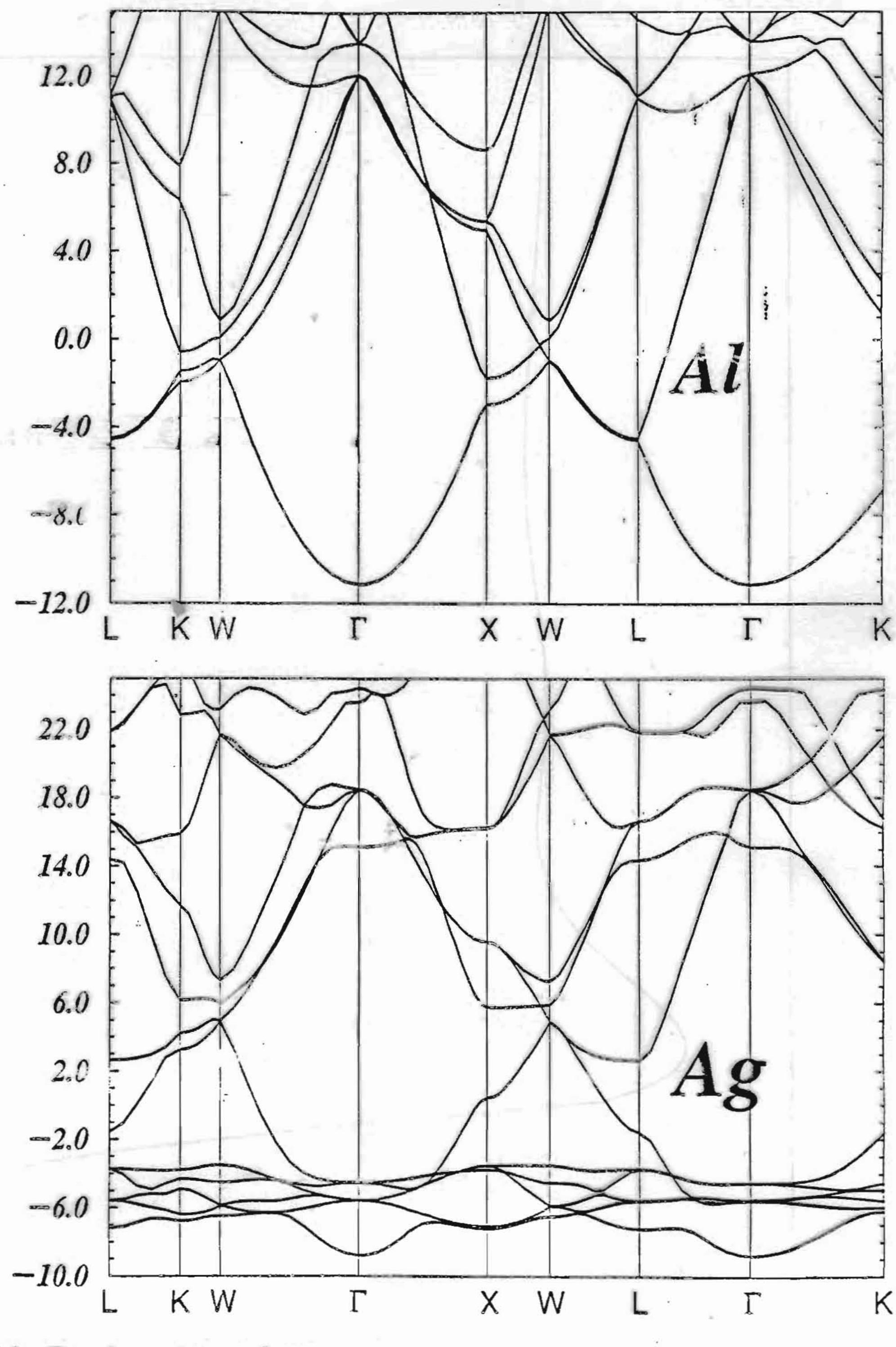


Figure 4.11. Band structure of two representative metallic solids: Al, a free-electron metal, and Ag, a d-electron metal. The zero of energy denotes the Fermi level. (Based on calculations by I.N. Remediakis.)