

空間羣不可約表示对称羣 及反对称羣的簡約*

陈孝琛 謝希德
(复旦大学物理系)

提 要

本文将作者們对空間羣不可約表示直接乘积的簡約所发展的方法推广到空間羣不可約表示对称羣及反对称羣的簡約,列出了对六角密积与纖維鋅矿結構对称化平方的計算結果;利用这些結果,对組态不穩定性作了初步討論。

一、引 言

在研究晶体紅外吸收及喇曼效应的选择定則^[1],二級相变时晶体对称性的改变^[2,3],固体組态不稳定性^[4],以及利用二級相变理論于磁羣以确定磁性結構时^[5],常涉及空間羣对称羣及反对称羣簡約系数的計算。本文将作者在研究空間羣选择定則所发展的方法^[6],推广到空間羣 n 次对称羣和反对称羣簡約系数的計算,列出了六角密积結構和纖維鋅矿結構的空間羣不可約表示的二次对称羣的簡約系数。最后作为应用例子,对晶格振动所引起的簡并能态的不稳定性做了簡短的討論。

二、方 法

根据定义,空間羣 G 不可約表示 $*K_j^{(m)}$ 的 n 次对称羣的品格是^[7]

$$[*K_j^{(m)}(R)]_n = \sum_i \frac{[*K_j^{(m)}(R^{q_1})]^{r_1} \cdots [*K_j^{(m)}(R^{q_v})]^{r_v}}{r_1! q_1^{r_1} \cdots r_v! q_v^{r_v}}. \quad (1)$$

n 次反对称羣的品格是

$$\{*K_j^{(m)}(R)\}_n = \sum_i (-1)^{\sum_i r_i - n} \frac{[*K_j^{(m)}(R^{q_1})]^{r_1} \cdots [*K_j^{(m)}(R^{q_v})]^{r_v}}{r_1! q_1^{r_1} \cdots r_v! q_v^{r_v}}. \quad (2)$$

例如

$$[*K_j^{(m)}(R)]_2 = \frac{1}{2} \{[*K_j^{(m)}(R)]^2 + *K_j^{(m)}(R^2)\}. \quad (3)$$

由上面的式子可以看出,如果求出 $*K_j^{(m)}(R^n)$ 的簡約系数,就可以求出对称羣或反对称羣的簡約系数,推广前此发展的方法,可以容易求出 $*K_j^{(m)}(R^n)$ 的簡約。首先討論

* 1964 年 1 月 18 日收到。

$*K_j^{(m)}(R^2)$ 的簡約, 然后将結果推广到 $*K_j^{(m)}(R^n)$ 的情况. 令 $[*K_j^{(m)}(R^2)|*K_{j'}^{(m')}(R)]$ 表示 $*K_j^{(m)}(R^2)$ 的簡約系数, 根据前文^[6]的結果, 可以把簡約系数写为

$$\begin{aligned} (*K_j^{(m)}(R^2)|*K_{j'}^{(m')}(R)) &= \frac{1}{\mathcal{L}h} \sum_R *K_j^{(m)}(R^2) *K_{j'}^{(m')}(R) * = \\ &= \frac{1}{\mathcal{L}h} \sum_{n,l} \left\{ \sum_{k_j, \nu} [D_{k_j}^{(m)}(\alpha_n | \mathbf{a}_n)^2]_{\nu\nu} e^{i(\alpha_n^{-1} \mathbf{k}_j + \mathbf{k}_{j'}) \cdot \mathbf{t}_l} \right\} \times \\ &\times \left\{ \sum_{k_{j'}, \mu} [D_{k_{j'}}^{(m')}(\alpha_n | \mathbf{a}_n)]_{\mu\mu}^* e^{-i\mathbf{k}_{j'} \cdot \mathbf{t}_l} \right\}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\mathcal{L}$ 是平移羣 T 的阶; h 是 G/T 的阶; R 是对空間羣全部元素求和; n, l 則分別对 G/T 及 T 求和; $D_{k_j}^{(m)}$ 是波矢羣 G^{k_j} 的第 m 个不可約表示. (4) 式又可写成

$$\begin{aligned} (*K_j^{(m)}(R^2)|*K_{j'}^{(m')}(R)) &= \frac{1}{\mathcal{L}h} \sum_{n,l} \sum_{k_j, k_{j'}} \sum_{\nu, \mu} [D_{k_j}^{(m)}(\alpha_n | \mathbf{a}_n)^2]_{\nu\nu} \times \\ &\times [D_{k_{j'}}^{(m')}(\alpha_n | \mathbf{a}_n)]_{\mu\mu}^* e^{i(\alpha_n^{-1} \mathbf{k}_j + \mathbf{k}_{j'} - \mathbf{k}_{j'}) \cdot \mathbf{t}_l}. \end{aligned} \quad (5)$$

在对(5)式求和时注意下面几点:

(1) 对 n 求和时, 首先 $(\alpha_n | \mathbf{a}_n)$ 应是 $G^{k_{j'}}$ 的元素, 而且 α_n 还必须滿足

$$\alpha_n \mathbf{k}_j + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_{j'} = 0. \quad (6)$$

令波矢羣 $G^{k_{j'}}$ 中滿足上述条件的元素为 $(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma)$, 元素的数目为 h_σ , 由于

$$\alpha_\sigma^2 \mathbf{k}_j = \mathbf{k}_j, \quad (7)$$

因此 $(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma)^2$ 是波矢羣 G^{k_j} 的元素.

(2) h_σ 是公共羣 $G^{k_j k_{j'}}$ 的阶 h_λ 或者是零.

如令 $G^{k_j k_{j'}}$ 代表波矢羣 G^{k_j} 与 $G^{k_{j'}}$ 的公共羣, $G^{k_{j'}}$ 可写成

$$G^{k_{j'}} = \sum_{\rho} (\alpha_\rho | \mathbf{a}_\rho) G^{k_j k_{j'}}, \quad (8)$$

由于 $(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma)$ 不一定組成羣, 但必是 $(\alpha_\rho | \mathbf{a}_\rho) G^{k_j k_{j'}}$ 型的元素, 因为如果 $(\alpha_\rho | \mathbf{a}_\rho)$ 滿足(6)式, 則 $(\alpha_\rho | \mathbf{a}_\rho) G^{k_j k_{j'}}$ 的 h_λ 个元素也都滿足(6)式. 如果在(8)式中有 α_ρ 及 $\alpha_{\rho'}$ 同时滿足(6)式, 則

$$\alpha_\rho \mathbf{k}_j = \alpha_{\rho'} \mathbf{k}_j.$$

因此 α_ρ 及 $\alpha_{\rho'}$ 必須同属于某一 $(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma) G^{k_j k_{j'}}$, 但由(8)式, $\alpha_\rho, \alpha_{\rho'}$ 不同属于某一 $(\alpha_\rho | \mathbf{a}_\rho) G^{k_j k_{j'}}$, 因此不能有两个 α_ρ 滿足(6)式, 即 h_σ 和 $G^{k_j k_{j'}}$ 的阶相同, 或者 $h_\sigma = 0$, 就是也有可能波矢羣 $G^{k_{j'}}$ 中不存在滿足(6)式的元素.

(3) 由于空間羣

$$G = \sum_{\theta} (\alpha_\theta | \mathbf{a}_\theta) G^{k_j k_{j'}} \quad \left(\theta = 1, \dots, \frac{h}{h_\lambda} \right), \quad (9)$$

将(5)式进一步簡化, 定义

$$*(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'}) = \alpha_\theta(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'}) \quad \left(\theta = 1, \dots, \frac{h}{h_\lambda} \right).$$

如果对波矢 $(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 有 $(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma)$ 滿足(6)式, 則相应地对波矢 $\alpha_\theta(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$, 有 $(\alpha_\theta | \mathbf{a}_\theta)(\alpha_\sigma | \mathbf{a}_\sigma)(\alpha_\theta | \mathbf{a}_\theta)^{-1}$ 滿足(6)式, $G^{\alpha_\theta(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})}(\theta=1, \dots, h/h_\lambda)$ 是同构共轭子羣, 因此在(5)式中对 n 及对 $(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 的求和, 可以用对 σ 以及 θ 和 $*(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 的求和来代替, 得到

$$\begin{aligned}
 (*K_j^{(m)}(R^2) | *K_{j'}^{(m')}(R)) &= \sum_{*} \frac{1}{h} \frac{h}{h_\lambda} \sum_{\sigma} \sum_{\nu \mu} [D_{\mathbf{k}_j}^{(m)}(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^2]_{\nu \nu} [D_{\mathbf{k}_{j'}}^{(m')}(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})]_{\mu \mu}^{*} = \\
 &= \sum_{*} \frac{1}{h_\lambda} \sum_{\sigma} \sum_{\nu \mu} [D_{\mathbf{k}_j}^{(m)}(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^2]_{\nu \nu} [D_{\mathbf{k}_{j'}}^{(m')}(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})]_{\mu \mu}^{*}, \quad (10)
 \end{aligned}$$

“ $\sum_{*}$ ”代表对星的求和.

总结以上讨论, 求 $*K_j^{(m)}(R^2)$ 的簡約系数的步骤如下:

(1) 写出公共羣 $G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}}/T$ 的元素, 如 $G^{\mathbf{k}_{j'}}/T$ 中有一个元素 $(\alpha_{\rho} | \mathbf{a}_{\rho})$ 满足(6)式, 作乘积 $(\alpha_{\rho} | \mathbf{a}_{\rho})G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}}/T$, 可以得到所有元素 $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})$.

(2) 计算 $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^2$ 在波矢羣 $G^{\mathbf{k}_j}$ 中的品格, 由(10)式计算簡約系数.

(3) 当 $*(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 不止一个时, 一般說应对所有的星求和.

可以将上述的结果推广到 n 次的情况, 由于空間羣中的 α_{σ} 可組成循环羣 $\alpha_{\sigma}^P = \varepsilon$, 因此在计算 $*K_j^{(m)}(R^n)$ 时, 只需考虑 $n < P$ 的情况, 和上面类似的讨论, 得到同(6)相应的关系式:

$$(\alpha_{\sigma}^{n-1} + \alpha_{\sigma}^{n-2} + \cdots + \alpha_{\sigma} + 1)\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_{j'} = 0. \quad (11)$$

满足上式的 $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})$ 有下列性质:

(1) 当 $n\mathbf{k}_j = \mathbf{k}_{j'}$ 时, $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})$ 全部是公共羣 $G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}}$ 的元素; 如 $n\mathbf{k}_j \neq \mathbf{k}_{j'}$ 时, $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})$ 不是公共羣 $G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}}$ 的元素, 或者 $h_{\sigma} = 0$.

(2) 如 α_{σ} 与公共羣的元素 α_{λ} 对易, 则 $\alpha_{\lambda}\alpha_{\sigma}$ 满足(11)式, $\alpha_{\lambda}\alpha_{\sigma}\alpha_{\lambda}^{-1}$ 也满足(11)式.

$*K_j^{(m)}(R^n)$ 的簡約系数可写成

$$(*K_j^{(m)}(R^n) | *K_{j'}^{(m')}(R)) = \sum_{*} \frac{1}{h_\lambda} \sum_{\sigma} \sum_{\nu \mu} D_{\mathbf{k}_j}^{(m)}[(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^n]_{\nu \nu} D_{\mathbf{k}_{j'}}^{(m')}[(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})]_{\mu \mu}^{*}. \quad (12)$$

下面以求金鋼石結構 $[*X_1]_2$ 的簡約系数为例, 說明上述计算方法¹⁾.

令 $\mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$, $\mathbf{k}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$, $\mathbf{k}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$. 先计算 $(*K_j^{(m)}(R^2) | \Gamma)$,

$(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 只組成一个星, 即

$$*(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'}) = (\mathbf{k}_1, \Gamma), (\mathbf{k}_2, \Gamma), (\mathbf{k}_3, \Gamma).$$

且因 $2\mathbf{k} = \Gamma$, 满足(6)式的元素 $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})$ 是 $G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}}$ 的元素, $G^{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_{j'}} = G^{\mathbf{k}_1}$, $h_{\lambda} = 16$. 相应的 $(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^2$ 及品格 $\chi(\alpha_{\sigma} | \mathbf{a}_{\sigma})^2$ 列在下面:

$(\alpha_{\sigma} \mathbf{a}_{\sigma})$	$(\alpha_{\sigma} \mathbf{a}_{\sigma})^2$	品格 $\chi(\alpha_{\sigma} \mathbf{a}_{\sigma})^2$
$(\varepsilon 0)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\delta_{2x}, \delta_{2y}, \delta_{2z} 0)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\delta_{2yz} \tau_1)$	(εt_{yz})	2
$(\delta_{2xz} \tau_1)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\delta_{4x} \tau_1)$	$(\delta_{2x} t_{xy})$	-2
$(\delta_{4x}^{-1} \tau_1)$	$(\delta_{2x} t_{xx})$	-2
$(i \tau_1)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\rho_x \tau_1)$	(εt_{yz})	2
$(\rho_y \tau_1)$	(εt_{xx})	-2
$(\rho_z \tau_1)$	(εt_{xy})	-2
$(\rho_{yz}, \rho_{xz} 0)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\sigma_{4x}, \sigma_{4x}^{-1} 0)$	$(\delta_{2x} 0)$	2

1) 这里所用符号与 C. Herring, *Jour. Frank. Inst.*, **233** (1942), 525 同.

由(10)得到¹⁾

$$\begin{aligned} (*X_1(R^2)|\Gamma_1^+) &= 1 & (\quad |\Gamma_2^+) &= 0 & (\quad |\Gamma_{12}^+) &= 0 \\ (\quad |\Gamma_{15}^+) &= 0 & (\quad |\Gamma_{25}^+) &= 0 & & \\ (\quad |\Gamma_1^-) &= 0 & (\quad |\Gamma_2^-) &= 1 & (\quad |\Gamma_{12}^-) &= 1 \\ (\quad |\Gamma_{15}^-) &= 1 & (\quad |\Gamma_{25}^-) &= 0 & & \end{aligned}$$

再計算 $(*K_j^{(m)}(R^2)|X)$, $(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_{j'})$ 組成二个星:

(1) $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1), (\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2), (\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_3)$,

(2) $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), (\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1), (\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3), (\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1), (\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3), (\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2)$.

对于第一个星, 由于 $2\mathbf{k}_j \cong \mathbf{k}_{j'}$, 因此 $h_\sigma = 0$, 即沒有滿足(6)的元素, 对于第二个星, $h_\sigma = h_\lambda = 8$.

$$G^{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_1} = (\varepsilon|0), (\delta_{2x}, \delta_{2y}, \delta_{2z}|0), (i|\tau_1), (\rho_x, \rho_y, \rho_z|\tau_1).$$

$$(\alpha_\sigma|\mathbf{a}_\sigma) = (\delta_{2yz}|\tau_1)G^{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_1} = (\delta_{2yz}, \delta_{2\bar{y}z}|\tau_1), (\delta_{4x}, \delta_{4x}^{-1}|\tau_1), (\rho_{yz}, \rho_{\bar{y}z}|0), (\sigma_{4x}, \sigma_{4x}^{-1}|0).$$

$(\alpha_\sigma \mathbf{a}_\sigma)$	$(\alpha_\sigma \mathbf{a}_\sigma)^a$	品格 $\chi(\alpha_\sigma \mathbf{a}_\sigma)^a$
$(\delta_{2yz} \tau_1)$	(εt_{yz})	-2
$(\delta_{2\bar{y}z} \tau_1)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\delta_{4x} \tau_1)$	$(\delta_{2x} t_{xy})$	0
$(\delta_{4x}^{-1} \tau_1)$	$(\delta_{2x} t_{\bar{x}x})$	0
$(\rho_{yz} 0)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\rho_{\bar{y}z} 0)$	$(\varepsilon 0)$	2
$(\sigma_{4x} 0)$	$(\delta_{2x} 0)$	0
$(\sigma_{4x}^{-1} 0)$	$(\delta_{2x} 0)$	0

由(10)得到

$$\begin{aligned} (*X_1(R^2)|X_1) &= 1, & (\quad |X_2) &= -1, \\ (\quad |X_3) &= -1, & (\quad |X_4) &= 1. \end{aligned}$$

已知

$$*X_1*X_1 = \Gamma_1^+ + \Gamma_2^- + \Gamma_{12}^+ + \Gamma_{15}^- + \Gamma_{25}^+ + X_1 + X_2 + X_3 + X_4,$$

得到二次对称群的簡約为

$$[*X_1]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_2^- + \Gamma_{12}^+ + \Gamma_{25}^+ + X_1 + X_4^{2)}.$$

三、六角密积结构 D_{6h}^I 与纖維鋅结构 C_{6v}^I 的不可約表示对称化平方的簡約

空間羣 D_{6h}^I 及 C_{6v}^I 不可約表示对称化平方的簡約分別列于表 1 及表 2.

1) 簡約系数的符号与文献[6]同.

2) 这个结果见文献[8].

表 1¹⁾

$[\Gamma_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_6^+$	$m = \pm 5, \pm 6$
$[A_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^-$	$m = 1, 2$
$[A_3]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^+ + \Gamma_6^+$	
$[M_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + M_1^+$	$m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$
$[L_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^+ + \Gamma_6^+ + M_1^+ + M_2^- + M_3^+$	$m = 1, 2$
$[K_m]_2 = K_1 + \Gamma_1^+$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[K_m]_2 = K_1 + K_5 + \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + \Gamma_4^-$	$m = 5, 6$
$[H_1]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^- + K_1 + K_2 + K_3$	
$[H_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^+ + K_2 + K_3$	$m = 2, 3$
$[\Delta_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Delta_1'$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[\Delta_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + \Delta_1' + \Delta_5'$	$m = 5, 6$
$[\Sigma_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + \Sigma_1 + \Sigma_1' + T_1$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[R_m]_2 = \Gamma_3^+ + \Gamma_5^+ + \Sigma_1 + \Sigma_1' + T_2$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[T_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + \Sigma_1 + T_1' + T_1$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[S_1]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^+ + 2\Gamma_6^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^- + 2\Sigma_1$ $+ \Sigma_2 + \Sigma_3 + T_1' + T_2' + T_4' + T_1 + 2T_2 + T_4$	
$[P_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_4^- + P_1' + \Delta_1' + K_1$	$m = 1, 2$
$[P_3]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_4^- + \Gamma_5^+ + \Gamma_6^+ + P_1' + P_3' + \Delta_1' + \Delta_2' + \Delta_5'$ $+ K_1 + K_2 + K_5$	
$[U_m]_2 = \Gamma_1^+ + \Gamma_5^+ + \Delta_1' + \Delta_5' + M_1^+ + U_1''$	$m = 1, 2, 3, 4$

表 2

$[\Gamma_m]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_5$	$m = 5, 6$
$[A_m]_2 = \Gamma_3 + \Gamma_6$	$m = 5, 6$
$[M_m]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_5 + M_1$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[L_m]_2 = \Gamma_3 + \Gamma_6 + M_3$	$m = 1, 2, 3, 4$
$[K_m]_2 = \Gamma_1 + K_1$	$m = 1, 2$
$[K_3]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_5 + K_1 + K_3$	
$[H_m]_2 = \Gamma_3 + K_2$	$m = 1, 2$
$[H_3]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_6 + K_2 + K_3$	
$[\Delta_m]_2 = \Delta_1' + \Delta_5'$	$m = 5, 6$
$[\Sigma_m]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_5 + T_1 + \Sigma_1' + \Sigma_1$	$m = 1, 2$
$[R_m]_2 = \Gamma_3 + \Gamma_6 + T_2 + \Sigma_1' + \Sigma_1$	$m = 1, 2$
$[S_m]_2 = \Gamma_3 + \Gamma_6 + T_2' + T_2 + \Sigma_1$	$m = 1, 2$
$[T_m]_2 = \Gamma_1 + \Gamma_5 + T_1' + T_1 + \Sigma_1$	$m = 1, 2$
$[P_m]_2 = P_1' + \Delta_1'$	$m = 1, 2$
$[P_3]_2 = P_1' + P_3' + \Delta_1' + \Delta_3' + \Delta_5'$	
$[U_m]_2 = U_1' + \Delta_1' + \Delta_5'$	$m = 1, 2, 3, 4$

四、应 用

空間羣不可約表示对称羣与反对称羣的簡約可以应用于研究晶体的二級相变、紅外吸收与喇曼效应的选择定則等,这里将前面所得的結果,对晶格振动对晶体簡并电子能态的影响作初步討論。

如果属于空間羣不可約表示 $*K_j^{(m)}$ 的电子簡并态波函数为 $\psi_j^{(m)}$, 晶格振动簡正坐标

1) 这里不可約表示的符号与前文^[6]同。

$Q_j^{(m')}$ 属于空间群不可约表示 $*K_j^{(m')}$, 由于晶格振动产生的微扰势可写成

$$V_{jm} = V_{jm}^0 + \sum_{j'm'} V_{jm,j'm'} Q_j^{(m')} + \sum_{j'm'} \sum_{j''m''} V_{jm,j'm'j''m''} Q_j^{(m'')} Q_j^{(m'')} + \dots,$$

其中 $V_{jm,j'm'}$ 是简正坐标的函数, 也属于不可约表示 $*K_j^{(m')}$ [9], 可以证明, 简并态是否稳定, 主要取决于积分

$$\int \psi_i^{(m)*} V_{jm,j'm'} \psi_j^{(m)} d\tau$$

是否为零, 也就是看 $[*K_j^{(m)}]_2$ 的简约分量中是否包含不可约表示 $*K_j^{(m')}$.

表 3

电 子 态	简并度	声子对称性
Γ_5^+, Γ_6^+	2	Γ_5^+
A_1, A_2	2	Γ_8^+
A_3	4	$\Gamma_8^+, \Gamma_5^+, \Gamma_6^+$
$*M_1, *M_2, *M_3, *M_4$	3	Γ_8^+, M_1^+
$*L_1, *L_2$	6	$\Gamma_8^+, \Gamma_5^+, \Gamma_6^+, M_1^+, M_2^+, M_3^+$
$*K_1, *K_2, *K_3, *K_4$	2	K_1
$*K_5, *K_6$	4	Γ_5^+, K_1, K_5
$*H_1$	4	Γ_5^+, K_1, K_3
$*H_2 + *H_3$	8	$2K_3, \Gamma_5^+, \Gamma_6^+, \Gamma_8^+, \Gamma_5^-, K_1, K_3, K_6$
$*\Delta_i + *\Delta_i^* \quad (i = 1, 2, 3, 4)$	4	$\Delta_1', \Delta_1'^*, 2\Gamma_2^+$
$*\Delta_i + *\Delta_i^* \quad (i = 5, 6)$	8	$2\Gamma_5^+, \Delta_1', \Delta_1'^*, \Delta_5', \Delta_5'^*, 2\Gamma_2^-, 2\Gamma_5^+$
$*\Sigma_1, *\Sigma_2, *\Sigma_3, *\Sigma_4$	6	$\Gamma_5^+, \Sigma_1, \Sigma_1', T_1$
$*R_1 + *R_3$	12	$2\Gamma_8^+, 2\Sigma_1, 2\Sigma_1', T_2, \Gamma_5^+, \Gamma_6^+, \Sigma_3, T_1, T_4$
$*R_2 + *R_4$	12	$2\Gamma_8^+, 2\Sigma_1, 2\Sigma_1', T_2, \Gamma_5^+, \Gamma_6^+, \Sigma_3, T_1, T_4$
$*T_1, *T_2, *T_3, *T_4$	6	$\Gamma_5^+, \Sigma_1, T_1, T_1'$
$*S_1$	12	$\Gamma_5^+, \Gamma_6^+, \Gamma_8^+, 2\Sigma_1, \Sigma_3, T_1', T_2', T_4', T_1, 2T_2, T_4$
$*P_i + *P_i^* \quad (i = 1, 2)$	8	$2K_1, \Delta_1', \Delta_1'^*, P_1', P_1'^*, 2\Gamma_2^-, 2K_1$
$*U_i + *U_i^* \quad (i = 1, 2, 3, 4)$	12	$2\Gamma_8^+, \Delta_1', \Delta_5', 2M_1^+, U_1'', \Delta_1'^*, \Delta_5'^*, U_1''^*, 2\Gamma_2^-, 2\Gamma_5^+, M_1^+, M_2^+$
$*P_3$	8	$\Gamma_5^+, P_1, P_3, \Delta_1', \Delta_2', \Delta_5', K_1, K_6$

表 4

电 子 态	简并度	声子对称性
Γ_5, Γ_6	2	Γ_5
$A_3 + A_6$	4	$2\Gamma_8, 2\Gamma_6, \Gamma_8$
$*M_1, *M_2, *M_3, *M_4$	3	Γ_5, M_1
$*L_1 + *L_3$	6	$2\Gamma_8, 2\Gamma_6, 2M_3, \Gamma_5, M_1, M_4$
$*L_2 + *L_4$	6	$2\Gamma_8, 2\Gamma_6, 2M_3, \Gamma_5, M_1, M_4$
$*K_1, *K_2$	2	K_1
$*K_3$	4	$\Gamma_8, \Gamma_5, K_1, K_3$
$*H_1 + *H_2$	4	$2\Gamma_8, 2K_2, K_1$
$*\Delta_i + *\Delta_i^* \quad (i = 5, 6)$	4	$\Delta_1', \Delta_5', \Delta_1'^*, \Delta_5'^*, \Gamma_5$
$*\Sigma_1, *\Sigma_2$	6	$\Gamma_5, T_1, \Sigma_1, \Sigma_1'$
$*R_1, *R_2$	6	$\Gamma_8, \Gamma_6, T_2, \Sigma_1, \Sigma_1'$
$*T_1, *T_2$	6	$\Gamma_5, T_1, T_1', \Sigma_1$
$*S_1 + *S_2$	12	$2\Gamma_8, 2\Gamma_6, 2T_2, 2T_2', 2\Sigma_1, \Gamma_5, \Gamma_6, T_1, T_1', T_2, \Sigma_1, \Sigma_2$
$*P_i + *P_i^* \quad (i = 1, 2)$	4	$P_1', \Delta_1', P_1'^*, \Delta_1'^*, K_1$
$*P_3 + *P_3^*$	8	$P_1', \Delta_1', \Delta_5', \Delta_5', P_1'^*, \Delta_1'^*, \Delta_5'^*, \Delta_5'^*, \Gamma_3, \Gamma_5, \Gamma_6, K_1, K_3, K_6$
$*U_i + *U_i^* \quad (i = 1, 2, 3, 4)$	6	$U_1', \Delta_1', \Delta_5', U_1'^*, \Delta_1'^*, \Delta_5'^*, \Gamma_6, M_1, M_4$
$*H_3$	4	$\Gamma_8, \Gamma_6, K_3, K_6$

在表 3 及表 4 中列出空間羣 D_{6h}^4 及 C_{6v}^4 的簡并电子态及其簡并度和引起簡并度分裂的声子对称性。

Birman^[4] 对空間羣 O_h^2 及 T_d^2 的計算結果說明除簡并态 Γ_{15}^+ 及 Γ_{12} 以外,其他的簡并态都是不稳定的;由表 3 及表 4 的結果可以看出,对于空間羣 D_{6h}^4 及 C_{6v}^4 所有的簡并态对于晶格振动都是不稳定的,由于这些不稳定性也可能引起簡并态激子的分裂,这里就不詳細討論了。

附 录

这里 $\psi_i^{(m)}$ 及 $Q_j^{(m')}$ 均选为实基矢^[9],即按实不可約表示变换,如果 $\psi_i^{(m)}$ 及 $Q_j^{(m')}$ 是复基矢,或按复表示 D 变换,則取复共軛組合,即取实表示 $D + D^*$ 。

对于不可約表示的对称化平方可以証明:

$$[D + D^*]_2 = [D]_2 + [D^*]_2 + D \times D^*.$$

参 考 文 献

- [1] Birman, J. L., *Phys. Rev.*, **131** (1963), 1489.
- [2] Любарский, Г. Я., Теория групп и её применение в физике глава 7, Гостехиздат Москва, 1957.
- [3] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M., *Statistical Physics*, Chapter 14, Pergamon Press, London-Paris, 1958.
- [4] Birman, J. L., *Phys. Rev.*, **125** (1962), 1959.
- [5] Dimmock, J. C., *Phys. Rev.*, **130** (1963), 1337.
- [6] 謝希德、陈孝琛, 物理学报, **20** (1964), 970.
- [7] 同[2], §25.
- [8] Birman, J. L., *Phys. Rev.*, **127** (1962), 1093.
- [9] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M., *Quantum Mechanics*, Chapter 8, p. 370, Pergamon Press, London-Paris, 1958.

REDUCTIONS OF THE SYMMETRIZED AND THE ANTISYMMETRIZED POWER OF THE IRREDUCIBLE SPACE GROUP REPRESENTATIONS

CHEN HSIAO-SHEN HSIEH HSI-TEH
(Department of Physics, Fudan University)

ABSTRACT

The method developed by the authors for reducing the direct product of irreducible space group representations has been extended to the reduction of the symmetrized and the antisymmetrized n th power of irreducible space group representations. The reduction coefficients for symmetrized squares of the hexagonal closed-packed and wurtzite space groups are calculated. An application of the results thus obtained in the study of the configuration instabilities is briefly discussed.