Физика низких температур, 1999, т. 25, № 2, с. 177–185

Согласование базисов представлений в симметричных точках зоны Бриллюэна

О. В. Ковалев

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

Статья поступила в редакцию 8 сентября 1998 г.

Исследуется поведение базисных векторов полного представления для несимметричной точки при предельном переходе в симметричную точку. Установлены состав предельного представления и факт появления линейной зависимости между базисными векторами, что устраняет ряд противоречий. Введено понятие ограниченного индуцированного представления и на его основе предложены формулы для базисных векторов, которые при предельном переходе превращаются в базисные векторы только одного неприводимого представления в симметричной точке. Используется следующий принцип: неприводимое представление соответствует одному уровню энергии. Рассмотрены два варианта базисных векторов: функции Блоха (электронный спектр) и бесконечные суммы по трансляциям (магнитный, фононный, экситонный спектры, метод сильной связи). Работа в некотором смысле продолжает известную работу L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).

Досліджується поведінка базисних векторів повного зображення для несиметричної точки при граничному переході в симетричну точку. Установлено склад граничного зображення та факт появи лінійної залежності між базисними векторами, що ліквідує ряд суперечностей. Запроваджено поняття обмеженого індукованого зображення і на його основі запропоновано формули для базисних векторів, які при граничному переході перетворюються в базисні вектори тільки одного непривидимого зображення в симетричній точці. Використовується такий принцип: непривидиме зображення відповідає одному рівню енергії. Розглянуто два варіанти базисних векторів: функції Блоха (електронний спектр) і нескінченні суми по трансляціям (магнітний, фононний, ексітонний спектри, метод сильного зв'язку). Робота в деякому сенсі продовжує відому роботу L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).

PACS: **02.20+b**; 71.20.Ad; 63.20.Dj

В основополагающей работе [1] об энергетическом электронном спектре кристалла авторы указали на связь между решениями уравнения Шредингера для некоторой симметричной точки (СТ) $\mathbf{k}_{01}$ и решениями для соседней несимметричной точки $\mathbf{k}_1$. Базисные векторы (БВ) малого неприводимого представления (НП) t^α группы $G(\mathbf{k}_{01})$ переходят в БВ суммы $\sum\tau^\beta$ НП τ^β группы $G(\mathbf{k}_1)$ в соответствии с равенством $\hat{t}^\alpha\downarrow=\hat{t}^\beta$ для нагруженных представлений. Предполагается, что $G(\mathbf{k}_1)$ — подгруппа группы $G(\mathbf{k}_{01})$. При $\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}_{01}$ группа $G(\mathbf{k}_1)$ не меняется при движении $\mathbf{k}_{01}\to\mathbf{k}_1$ (или $\mathbf{k}_1\to\mathbf{k}_{01}$). Направленная вниз стрелка означает ограничение представления с группы на подгруппу. Упомянутые в равенстве НП называются, как известно, совместными. Авторы работы [1] исходили из принципов непрерывности и сохранения свойств симметрии БВ. Соотношения (таблицы) совместности широко применяются на практике.

Между тем при исследовании поведения БВ и энергетических уровней возникает ряд вопросов. Укажем на некоторые в предположении, что $G(\mathbf{k}_{01})=G$ — вся федоровская группа.

I. Размерность полного представления $\sum T^\beta$ всегда выше размерности НП T^α, так как в звезду НП T^β входит большее число лучей. Что же происходит с БВ НП T^β при предельном переходе $\mathbf{k}_1\to\mathbf{k}_{01}$? Если какие-то из них обращаются в нуль, то какие именно? Совершенно ясно, что никакой БВ представления T^β при $\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_{01}$ в нуль не обратится, если БВ не подчинены каким-то особым условиям. Каким?

II. Если несколько энергетических уровней E_β , принадлежащих НП τ^β, в СТ сливаются в один уровень E_α, то БВ НП τ^β должны обладать какими-то определенными свойствами. Какими?

III. Некоторое НП τ^β может быть совместным с двумя НП T^α и T^δ. Следовательно, должны существовать по меньшей мере два одинаковых НП τ^β с разными базисами. Каковы свойства этих базисов?

IV. Если в сумме $\sum\tau^\beta$ более одного слагаемого, то уровни E_β для НП τ^β должны сближаться при $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$. Как выбрать базисы НП τ^β, чтобы это действительно происходило? Да и вообще возможен ли такой выбор?

V. Если БВ строятся из локализованных функций, то к ним неприменимо понятие непрерывности. Следовательно, в этом случае необходим принципиально новый подход. Как добиться разумной физической картины?

В настоящей работе проведено максимально полное доступное автору исследование поведения матриц и БВ НП около СТ и установлены правила построения БВ, обеспечивающие реальную физическую картину. Эти правила должны использоваться в практических вычислениях любых энергетических спектров кристалла (естественно, получены ответы на сформулированные выше вопросы). В п. 1 результаты имеют общий характер в том смысле, что они не зависят от выбора БВ НП. Используются только свойства матриц НП, доказывается лемма о связи матриц полных НП в СТ с таковыми в соседней несимметричной точке. Это дает новый смысл понятию совместности. В п. 2 имеются в виду функции Блоха $\psi = u \exp(i\,\mathbf{kr})$ и существенно используется свойство непрерывности u от $\mathbf{k}$. В п. 3 речь идет о базисах индуцированных представлений (ИП) в смысле книги [2]. Используется то обстоятельство, что БВ строятся из некоторого ограниченного числа линейно независимых функций. Таким образом, в пп. 2 и 3 совершенно разные подходы, но в обоих случаях формулируются правила построения БВ для обеспечения действительной физической картины.

Нужно отметить, что в статье рассмотрены два варианта применения процедуры индуцирования. В общем плане она состоит в следующем. Пусть G_1 — подгруппа конечной или пространственной группы G; ψ_i — БВ некоторого НП подгруппы G_1 . Применим к ψ_i все элементы группы G. Полученные линейно независимые функции образуют базис ИП. Ниже процедура индуцирования используется, во-первых, при построении представлений группы $G(\mathbf{k}_{01})$ вектора $\mathbf{k}_{01}$ (или всей группы G) из малых НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ группы $G(\mathbf{k}_1)$. При этом ИП являются неприводимыми. Во-вторых, в других случаях имеются в виду ИП в смысле книги [2]. Эти ИП приводимы. Из текста всегда ясно, о каких ИП идет речь. Кроме того, будет введено понятие ограниченных ИП (ОИП).

Ниже используются обозначения и терминология книги [2]. Повороты h и элементы $g = (\alpha/h)$ иногда считаются операторами.

1. В этом пункте решаем формальную задачу: в матрицах полного НП группы G совершаем замену $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ и устанавливаем состав полученного представления.

Уточним обозначения. Ради определенности считаем, что все точки $\mathbf{k}_1$ образуют прямую линию (линию $\mathbf{k}_1$), проходящую через точку $\mathbf{k}_{01}$; $\mathbf{k}_{01}$ — это либо центр зоны Бриллюэна, либо СТ на поверхности зоны; $\mathbf{K}_0$, v_0 , $H(\mathbf{k}_{01})$, $\tau(\mathbf{k}_{01})$ и $T(\mathbf{K}_0)$ — это соответственно звезда, число ее лучей, группа поворотов в элементах группы $G(\mathbf{k}_{01})$, малые и полные представления применительно к СТ $\mathbf{k}_{01}$. Обозначения $\mathbf{K}$, v, $H(\mathbf{k}_1)$, $\tau(\mathbf{k}_1)$ и $T(\mathbf{K})$ имеют подобный смысл для точки $\mathbf{k}_1$.

Выполним предельный переход $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$, т.е. в матрицах представлений $\tau(\mathbf{k}_1)$ и $T(\mathbf{K})$ заменим $\mathbf{k}_1$ на $\mathbf{k}_{01}$ и вместе с тем заменим векторы звезды $\mathbf{K}$ на векторы звезды $\mathbf{K}_0$. При этом не один, а несколько векторов из звезды $\mathbf{K}$ станут эквивалентными вектору $\mathbf{k}_{01}$. Пусть это векторы $\mathbf{k}_1$, ..., $\mathbf{k}_\sigma$. Обозначим их множество через $\mathbf{K}_\sigma$, а множество их предельных значений $\mathbf{k}_{01}$, ..., $\mathbf{k}_{0\sigma}$ — через $\mathbf{K}_{0\sigma}$. Очевидно, $v = \sigma v_0$.

Пусть $T^\beta(\mathbf{K})$ — полное НП группы G. В результате указанного перехода оно превратится в некоторое представление $T_0^\beta = \lim T^\beta\,(\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01})$, которое принадлежит звезде $\mathbf{K}_0$ и в общем случае является приводимым. Число вхождения некоторого НП $T^\alpha(\mathbf{K}_0)$ в T_0^β равно

$$\mu(T^\alpha(\mathbf{K}_0) \to T_0^\beta) = \frac{1}{N} \sum \chi_0^\beta(g)^* \chi^\alpha(g) \equiv \mu \,, \quad (1)$$

где суммирование проводится по основным элементам группы G; N — их число.

Упростим (1). Те БВ представления T_0^β , которые связаны с векторами из $\mathbf{K}_{0\sigma}$, образуют подпространство, инвариантное относительно группы $G(\mathbf{k}_{01})$. Они преобразуются по некоторому промежуточному представлению $t^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$ группы $G(\mathbf{k}_{01})$. Это следует из того, что вектор $h\mathbf{k}_i$ принадлежит множеству $\mathbf{K}_\sigma$, если $\mathbf{k}_i$ принадлежит $\mathbf{K}_\sigma$, а h — поворот из $H(\mathbf{k}_{01})$. Важны два момента.

Во-первых, $t(\mathbf{K}_{0\sigma})$ можно истолковать как малое представление группы $G(\mathbf{k}_{01})$, с помощью которого по общим правилам строится соответствующее полное представление всей группы G. Это последнее эквивалентно представлению T_0^β. Поэтому в (1) можно заменить полные представления группы G на малые представления группы $G(\mathbf{k}_{01})$:

$$\mu = \frac{v_0}{N} \sum \chi[t^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma}), g]^* \, \chi[\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01}), g] \, , \qquad (2)$$

где суммирование проводится по основным элементам группы $G(\mathbf{k}_{01})$.

Во-вторых, представление $t^\beta(\mathbf{K}_\sigma)$ эквивалентно представлению $t_1^\beta(\mathbf{K}_\sigma)$, которое строим следующим образом. Рассматриваем группу $G(\mathbf{k}_{01})$ как некоторую федоровскую группу G_1 и находим ее полное представление из малого представления $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ по общему правилу индуцирования. При этом вводятся векторы $\mathbf{k}_1$, ..., $\mathbf{k}_\sigma$. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ НП $t_1^\beta(\mathbf{K}_\sigma)$ превращается в некоторое, вообще говоря, приводимое представление $t_1^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$. Поскольку $t^\beta(\mathbf{K}_\sigma)$ и $t_1^\beta(\mathbf{K}_\sigma)$ эквивалентны, $t^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$ и $t_1^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$ также эквивалентны. Поэтому

$$\mu = \frac{v_0}{N} \sum \chi[t_1^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma}), g]^* \, \chi[\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01}), g] \, . \qquad (3)$$

Можно считать, что представление $t_1^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$ получается из НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_{01}) \equiv \tau^\beta(\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01})$ опять-таки согласно общему методу индуцирования при расширении с группы $G(\mathbf{k}_1)$ на группу $G(\mathbf{k}_{01})$. Поскольку $\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01})$ — НП, то на основании теоремы Фробениуса об индуцированных представлениях находим

$$\mu = \frac{v}{N} \sum \chi[\tau^\beta(\mathbf{k}_{01}), g]^* \, \chi[\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01}), g] \, , \qquad (4)$$

где суммирование выполняется по основным элементам группы $G(\mathbf{k}_1)$. Перейдем к нагруженным представлениям:

$$\mu(T^\alpha(\mathbf{K}_0) \to T_0^\beta) = \frac{v}{N} \sum \chi[\hat{\tau}^\beta(h)]^* \chi[\hat{\tau}^\alpha(h)] =$$

$$= \mu\,(\hat{\tau}^\beta \to \hat{\tau}^\alpha \downarrow), \qquad (5)$$

где $h \in H(\mathbf{k}_1)$.

Л е м м а. Число вхождения полного НП $T^\alpha(\mathbf{K}_0)$ в предельное значение T_0^β полного НП $T^\beta(\mathbf{K})$ группы G равно числу вхождения нагруженного НП $\hat{\tau}^\beta$ в ограничение $\hat{\tau}^\alpha \downarrow$ нагруженного НП $\hat{\tau}^\alpha(\mathbf{k}_{01})$ на подгруппу $H(\mathbf{k}_1)$ группы $H(\mathbf{k}_{01})$.

С л е д с т в и е. Если НП τ^β несовместно с НП τ^α в точке $\mathbf{k}_{01}$, то пространство НП T^α ортогонально пространству предельного представления T_0^β.

Лемму также можно получить, используя формулы в [2,3] для матриц полных представлений.

Лемму и некоторые другие результаты проиллюстрируем на следующем примере: $G = O_h^7 = Fd3m$, несимметричные точки — прямая $\mathbf{k}_1 = (0, 0, k_1)$, две СТ — $\mathbf{k}_0 = 0$ и $\mathbf{k}_{10} = (0, 0, \pi/\tau) = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/2$. В первой звезде $\mathbf{K}_0$ один луч, номер его опускаем. Во второй звезде $\mathbf{K}_{10}$ число лучей равно трем.

Поясним лемму. Вычислим по (5) значения μ для всех α и β, При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ берем характеры нагруженных НП из таблиц T119 и T205 в [2,3], при переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{10}$ — из таблиц T119 и T159. Результат (числа вхождений) приведен в табл. 1. Назовем ее таблицей вхождений. Табл. T119 содержит 5 НП, их номера β помещены в первой колонке. В табл. T205 содержится 10 НП, их номера записаны под символом $\mathbf{k}_0$. Под символом $\mathbf{k}_{10}$ записаны номера НП из табл. T159. На пересечении строки с номером β и столбца с номером α указаны числа вхождений $\mu(T^\alpha \to T_0^\beta) = \mu(\hat{\tau}^\beta \to \hat{\tau}^\alpha\downarrow)$. Например, в строке с номером $\beta = 5$ показано, что при переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ полное НП $T^5(K)$ превращается в сумму $T^7 + T^8 + T^9 + T^{10}$ НП, принадлежащих звезде $\mathbf{K}_0$, а при переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{10}$ — в сумму $T^1 + T^2$ НП, принадлежащих звезде $\mathbf{K}_{10}$.

Таблица 1

$\mathbf{k}_1$	$\mathbf{k}_0$, α										$\mathbf{k}_{10}$, α			
β	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4
1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0
2	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	1
3	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0	1	0
4	0	0	0	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1
5	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0

Таблица вхождений и набор соответствующих таблиц совместности содержат одну и ту же информацию в силу леммы. Сведения о составах предельных представлений нужны при исследовании энергетических уровней кристалла, фазовых переходов и т. п. Сейчас остановимся лишь на одном вопросе. В [2] приведены составы индуцированных представлений только для СТ. Для несимметричных точек рекомендовано находить таковые с помощью соотношений совместности, однако в [2] эта рекомендация не обоснована. Обоснование — лемма.

2. Ниже речь пойдет о базисах представлений. Теорема Фробениуса (теорема взаимности) ука-

зывает на связь матриц представлений, по ней находится состав ИП. Она также может быть получена при индуцировании базисов, но при условии, что все вводимые БВ являются линейно независимыми. Если же такая независимость отсутствует, то индуцированный базис осуществляет не истинные ИП Фробениуса, а несколько иные. Пусть, например, H — некоторая точечная группа, H_1 — ее подгруппа. Будем индуцировать единичное НП τ^1 подгруппы H_1. Мы получим заведомо приводимое, а вовсе не единичное представление группы H. Предположим, однако, что в качестве БВ НП τ^1 взята сферически симметричная функция ψ. Ясно, что теперь базис представления, которое получается при индуцировании, будет исчерпываться функцией ψ. Таким образом, если исходные БВ НП подгруппы таковы, что указанный выше принцип линейной независимости не соблюдается, то в результате индуцирования базисов мы получим не то ИП и его базис, которые должны следовать из классической теории Фробениуса. Такие представления назовем ограниченными ИП (ОИП). Состав ОИП определяется свойствами симметрии БВ ψ_i исходного НП τ-подгруппы. Они являются дополнительными к свойствам, которые следуют только из того, что БВ ψ_i преобразуются по НП τ.

Необходимость исследования ОИП покажем на примере. Согласно табл. 1, при переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ НП $T^5(\mathbf{K})$ превращается в $T_0^5 = T^7 + T^8 + T^9 + T^{10}$, а НП $T^4(\mathbf{K})$ превращается в $T_0^4 = T^4 + T^6 + T^7$ (подразумеваются T^α из табл. Т205). В физической задаче (например, при исследовании энергетического спектра) имеется соответствие между уровнями энергии E и НП. На линии $\mathbf{k}_1$ НП $T^5(\mathbf{K})$ и $T^4(\mathbf{K})$ соответствуют некоторым уровням E_5 и E_4. В точке $\mathbf{k}_0$ это можно записать в виде

$$T^4 \to E_4^0\ ,\ T^6 \to E_6^0\ ,\ T^7 \to E_7^0\ ,\ .\ .\ .\ .\ ,\ T^{10} \to E_{10}^0\ .$$

Однако ясно, что один уровень $E(\mathbf{K})$ не может превращаться в несколько в $\mathbf{k}_0$. Уровень E_5 должен превращаться лишь в один из уровней E_7^0, E_8^0, E_9^0 или E_{10}^0, а уровень E_4 — лишь в один из уровней E_4^0, E_6^0 или E_7^0.

Сделаем следующее предположение. На линии $\mathbf{k}_1$ имеются четыре НП с одинаковыми матрицами $T^5(\mathbf{K})$, но разными базисами. Обозначим их $T^{5,7}(\mathbf{K})$, $T^{5,8}(\mathbf{K})$, $T^{5,9}(\mathbf{K})$ и $T^{5,10}(\mathbf{K})$. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ БВ НП $T^{5,7}(\mathbf{K})$ превращаются в БВ НП $T^7(5)$, где в скобках номер 5 указывает на происхождение базиса из БВ НП $T^5(\mathbf{K})$. Аналогичным образом возникают БВ НП $T^8(5)$, $T^9(5)$ и $T^{10}(5)$. На линии $\mathbf{k}_1$ также имеются три НП с одинаковыми матрицами $T^4(\mathbf{K})$, но разными базисами. Это $T^{4,4}(\mathbf{K})$, $T^{4,6}(\mathbf{K})$ и $T^{4,7}(\mathbf{K})$. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ их БВ превращаются соответственно в БВ НП $T^4(4)$, $T^6(4)$ и $T^7(4)$. С другой стороны, $\hat{T}^7\downarrow = T^7\downarrow = \hat{\tau}^4(\mathbf{k}_1) + \hat{\tau}^5(\mathbf{k}_1)$, т.е. трехмерное пространство НП T^7 образовано из взятых после перехода $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$ двух БВ малого НП $\tau^5(\mathbf{k}_1)$ и одного БВ малого НП $\tau^4(\mathbf{k}_1)$. Остальные БВ полных предельных НП T_0^5 и T_0^4 должны быть линейными комбинациями трех упомянутых БВ. Это означает, что пространства НП $T^7(5)$ и $T^7(4)$ совпадают и уровни E_4 и E_5 в точке $\mathbf{k}_0$ сливаются в один уровень E_7^0. Мы не будем рассматривать другие возможные варианты согласования базисов НП в точках $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_{10}$, которые можно извлечь из табл. 1 и которые соответствуют разумной физической картине. Поставим следующую задачу: в общем случае найти те условия, которым необходимо подчинить базисы представлений для того, чтобы всегда возникала правильная физическая картина.

Начнем с близкого вопроса. Пусть H — конечная точечная группа; H_1 — ее подгруппа; T и τ — НП группы и подгруппы соответственно, причем НП τ входит в ограничение $T\downarrow$ НП T на подгруппу H_1. Будем считать, что $T\downarrow$ взято в приведенном виде, матрицы НП τ располагаются в левой верхней части матриц $T\downarrow$. Пусть F — некоторая функция координат общего вида, так что $hF(\mathbf{r}) = F(h^{-1}\mathbf{r})$. Введем функцию

$$f_i = \sum T(h)_{i1}^* hF\ , \qquad (6)$$

где $h \in H$. Функция f_i принадлежит i-й строке НП T и в то же время принадлежит i-й строке НП τ. Если к ней применить процедуру индуцирования, то получим исключительно БВ НП T; T есть ОИП. Функция f_i обладает некоторыми свойствами симметрии, которые вытекают из (6), но не следуют просто из того обстоятельства, что f_i принадлежит пространству НП τ.

Если мы располагаем только характерами НП, то вместо (6) можно воспользоваться формулой

$$f = \sum \chi_\tau(h')^* \chi_T(h)^* h'hF\ , \qquad (7)$$

где суммирование проводится по $L' \in H_1$ и $h \in H$. Функция f принадлежит пространству НП τ. При индуцировании f получаем лишь БВ НП T.

Заметим, что в (6) можно заменить нижний индекс 1 номером любого столбца НП T. При этом нужно специально доказать, что f_i принадлежит i-й строке НП τ.

При исследовании БВ в окрестности СТ в зоне Бриллюэна формулу (6) используем в качестве подсказки. Ради краткости будем называть представления группы $G(\mathbf{k}_{01})$ полными представлениями (обозначения T^α, T^δ вместо t^α, t^δ). Они являются истинными полными, если $G(\mathbf{k}_{01}) = G$. Если же $G(\mathbf{k}_{01})$ — нетривиальная подгруппа группы G, то истинные полные строятся из представлений группы $G(\mathbf{k}_{01})$ обычным методом индуцирования. При этом каждое НП группы $G(\mathbf{k}_{01})$ порождает соответствующее одно НП группы G. Поэтому наше упрощение не понижает общности. БВ $\psi^\alpha_{i\lambda}$, принадлежащий i-й строке НП T^α группы $G(\mathbf{k}_{01})$, можно записать в виде

$$\psi^\alpha_{i\lambda}(\mathbf{k}_{01}) = u^\alpha_{i\lambda}(\mathbf{k}_{01}) \exp i\mathbf{k}_{01}\mathbf{r} =$$

$$= \sum T^\alpha(g)^*_{i\lambda}\, g[u(\mathbf{k}_{01}) \exp i\mathbf{k}_{01}\mathbf{r}] \;, \qquad (8)$$

где $u(\mathbf{k}_{01})$ — достаточно произвольная периодическая функция (назовем ее производящей). Суммируем по основным элементам группы $G(\mathbf{k}_{01})$. Из (8) следует, что

$$u^\alpha_{i\lambda}(\mathbf{k}_{01}) = \sum S(g/\alpha i\lambda)\, gu\, (\mathbf{k}_{01}),$$

$$S(g/\alpha i\lambda) = \hat{T}^\alpha(h)^*_{i\lambda} \exp\,[i\, \mathbf{b}(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{r})], \qquad (9)$$

где $\mathbf{b} = \mathbf{k}_{01} - h\mathbf{k}_{01}$; $g = \alpha/h$, $h \in H(\mathbf{k}_{01})$; S можно рассматривать как некоторую матрицу.

Будем считать, что ограничение НП $\hat{T}^\alpha$ на подгруппу $H(\mathbf{k}_1)$ разложено на НП и что в это разложение входит НП $\hat{\tau}^\beta$ размерностью l (известно, что l может быть равно 1 или 2). Матрицы $\hat{\tau}(h)$ расположим в левых верхних углах матриц $\hat{T}^\alpha{\downarrow}(h)$. Предлагаем в качестве БВ НП τ^β взять функции

$$\psi^\beta_{i1}(\mathbf{k}_1) = u^\beta_{i\lambda}(\mathbf{k}_1) \exp\, i\mathbf{k}_1\mathbf{r},$$

$$u^\beta_{i1}(\mathbf{k}_1) = \sum S(g/\alpha i 1) gu(\mathbf{k}_1), \qquad (10)$$

где S — та же матрица, что и в (9). Подразумевается, что $u(\mathbf{k}_1)$ непрерывно переходит в $u(\mathbf{k}_{01})$.

Предложенные функции позволяют удовлетворить всем требованиям, вытекающим из физических соображений.

а. Достаточно очевидно, что переход $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ приводит к предельным значениям функций (10), которые являются БВ НП T^α.

б. Чтобы доказать, что функции (10) суть БВ НП τ^β (при $i \le l$), можно применить к $\psi^\beta_{i1}(\mathbf{k}_1)$ элемент $g' = (\alpha'/h')$ из группы $G(\mathbf{k}_1)$. При этом нужно учесть соотношения

$$\hat{T}^\alpha(h')_{ij} = \hat{\tau}^\beta(h')_{ij} \;; \qquad i, j \le l;$$

$$g' \exp\,(i\mathbf{k}_1 r) = \exp\,[i\mathbf{k}_1(\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}')] \;.$$

в. С некоторым одним НП T^α в СТ, как правило, совместны не одно, а несколько НП в соседней несимметричной точке. Предположим для определенности, что $\hat{T}^\alpha{\downarrow} = \hat{\tau}^\beta + \hat{\tau}^\gamma$ (τ^β — двумерное НП, τ^γ — одномерное). Используя (10), находим ψ^β_{11} и ψ^β_{21}. Положим в (10) $i = 3$, а индекс β пока опустим. Пусть $g' \in G(\mathbf{k}_1)$. Имеем

$$g'\psi_{31} = \sum \exp\Big\{i\, [(\mathbf{k}_1 - h'\mathbf{b})(\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}') + \mathbf{b}\boldsymbol{\alpha}]\Big\}\, \hat{T}^\alpha(h)_{31} g'gu,$$

где суммируем по основным элементам группы $G(\mathbf{k}_{01})$. Перейдем к суммированию по элементам $g'' = g'g$ и примем во внимание, что $\hat{T}^\alpha(h')_{j3} = 0$ при $j = 1, 2$ и $\hat{T}^\alpha(h')_{33} = \hat{\tau}^\gamma(h')_{11}$. Получим, что $g'\psi_{31} = \tau^\gamma(g')_{11}\, \psi_{31}(\mathbf{k}_1)$. Таким образом, функция ψ_{31} — БВ НП τ^γ (она может быть отмечена верхним индексом γ).

Рассуждения нетрудно распространить на любой вид разложения $\hat{T}^\alpha{\downarrow}$ на НП $\hat{\tau}$. Вывод: БВ НП T^α — это предельные значения БВ всех НП τ, которые совместны с T^α.

г. Пусть $\hat{T}^\alpha{\downarrow} = \sum \hat{\tau}^\beta$ и $\hat{T}^\alpha{\downarrow}$ разложено на НП. Несколько изменим обозначения БВ представления $\sum \tau^\beta$, а именно, опустим верхний индекс β, а нижним индексом пронумеруем все БВ представления $\sum \tau^\beta$. Таким образом, $\psi_{i1}(\mathbf{k}_1)$ — БВ представления $\sum \tau^\beta$, $1 \le i \le l_\alpha$. После перехода $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ получающиеся предельные значения $\psi_{i1}(\mathbf{k}_{01})$ преобразуются по НП T^α. Покажем, что предельные значения всех вообще БВ полного представления $\sum T^\beta$ являются линейными комбинациями предельных значений БВ $\psi_{i1}(\mathbf{k}_{01})$.

Пусть $g' = (\alpha'/h')$ — такой элемент, что $h'\,\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, где $\mathbf{k}_2$ — вектор из звезды $\mathbf{K}$; более того, g' — представитель левого смежного класса разложения группы $G(\mathbf{k}_{01})$ по подгруппе $G(\mathbf{k}_1)$. В этом случае, согласно правилу построения полных НП [2,3], $g'\psi_{i1}(\mathbf{k}_1) = \psi_{i1}(\mathbf{k}_2)$ — БВ НП T^β. С другой стороны,

$$g'\psi_{i1}(\mathbf{k}_1) = \sum \exp\,\Big\{i\,\, [(h'\mathbf{k}_1 - h'\mathbf{b})(\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}') + h\mathbf{k}_{01}\boldsymbol{\alpha}\,]\Big\} \times$$

$$\times\, T^\alpha(g)^*_{i1} g'gu(\mathbf{k}_1) \;.$$

Введем $g'' = g'g$, $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_{01}$ и преобразуем экспоненту. Получим, что

$$\psi_{i1}(\mathbf{k}_2) = \exp\,\big\{i[h'\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}) - \boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}]\,\big\}\, T^\alpha(g')_{ji}\, \psi_{j1}\,(\mathbf{k}_1), \qquad (11)$$

$$\psi_{i1}(\mathbf{k}_{02}) = T^\alpha(g')_{ji}\, \psi_{j1}\,(\mathbf{k}_{01}). \qquad (12)$$

Соотношение (11) означает, что любой БВ полного представления $\sum T^{\beta}$ есть своеобразная «линейная» комбинация БВ малого представления $\sum \tau^{\beta}$. В ней коэффициенты зависят от вектора $\mathbf{\kappa}$. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ ($\mathbf{\kappa} \to 0$) получаем (12) из (11). Подчеркнем, что (11) и (12) справедливы при выполнении условия (10), но отнюдь не в общем случае.

д. Пусть $\hat{T}^{\alpha}\downarrow = \hat{\tau}^{\beta} + \hat{\tau}^{\gamma}$, $l_{\beta} = 2$, $l_{\gamma} = 1$. Покажем, что при условии (10) уровни $E_{\beta}(\mathbf{k}_1)$ и $E_{\gamma}(\mathbf{k}_1)$ в точке $\mathbf{k}_{01}$ сливаются в один уровень $E_{\alpha}(\mathbf{k}_{01})$.

Имея в виду НП τ^{β}, можно записать

$$\psi_1(\mathbf{k}_1) = \psi_1(\mathbf{k}_{01}) + \mathbf{\kappa}\nabla_{\mathbf{k}}\psi_1(\mathbf{k}_{01}) + \ldots, \qquad (13)$$

$$E_{\beta}(\mathbf{k}_1) = \langle\psi_1(\mathbf{k}_{01}),\, H\psi_1(\mathbf{k}_{01})\rangle + \mathbf{\kappa}\,\mathbf{A} + \ldots \qquad (14)$$

где $\mathbf{A}$ — сумма матричных элементов, возникающая вследствие (13). Заменив в (13), (14) β на γ и нижний индекс 1 на индекс 3, получим выражение для $E_{\gamma}(\mathbf{k}_1)$. В соответствии с (10) БВ $\psi_1(\mathbf{k}_{01})$ и $\psi_3(\mathbf{k}_{01})$ принадлежат первой и третьей строкам НП T^{α}. Поэтому

$$E_{\beta}(\mathbf{k}_1) = E_{\alpha}(\mathbf{k}_{01}) + \mathbf{\kappa A}\ ,\ E_{\gamma}(\mathbf{k}_1) = E_{\alpha}(\mathbf{k}_{10}) + \mathbf{\kappa A}',$$

если пренебречь слагаемыми с $\mathbf{\kappa}$ в степенях 2 и выше.

е. Предположим, что некоторое НП τ^{β} при $\mathbf{k}_{01}$ совместно с T^{α} и T^{δ}, причем T^{α} и T^{δ} неэквивалентны: $\hat{T}^{\alpha}\downarrow = \hat{\tau}^{\beta 1} + \sum\hat{\tau}$, $\hat{T}^{\delta}\downarrow = \hat{\tau}^{\beta 2} + \sum\hat{\tau}'$. Мы не интересуемся составами сумм $\sum\tau$ и $\sum\tau'$, но $\sum\tau \neq \sum\tau'$. НП $\tau^{\beta 1}$ и $\tau^{\beta 2}$ имеют одинаковые матрицы, но их базисы строятся по (10) с помощью неэквивалентных НП T^{α} и T^{β}. Предполагается, что ограничения $\hat{T}^{\alpha}\downarrow$ и $\hat{T}^{\delta}\downarrow$ взяты в приведенном виде, матрицы $\hat{\tau}^{\beta}$ занимают верхние левые углы.

Очевидно, смешанный матричный элемент энергии

$$H_{12}(\mathbf{k}_1) = \langle\psi_1^{\beta 1}(\mathbf{k}_1),\, H\psi_1^{\beta 2}(\mathbf{k}_1)\rangle$$

отличен от нуля при $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_{01}$. Физические соображения требуют, чтобы он обратился в нуль при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{01}$. Покажем, что это действительно так, если используется определение (10). С учетом разложений вида (13) получим

$$H_{12}(\mathbf{k}_1) = \langle\psi_1^{\beta 1}(\mathbf{k}_{01}),\, H\psi_1^{\beta 2}(\mathbf{k}_{01})\rangle + \mathbf{\kappa}\,\mathbf{D}, \qquad (15)$$

где $\mathbf{D}$ — сумма соответствующих матричных элементов, в общем случае $\mathbf{D} \neq 0$. Согласно (10), $\psi_1^{\beta 1}(\mathbf{k}_{01})$ принадлежит первой строке НП T, $\psi_1^{\beta 2}(\mathbf{k}_{01})$ — первой строке НП T^{δ}. Поскольку T^{α} и T^{δ} неэквивалентны, $H_{12}(\mathbf{k}_{01}) = 0$.

Замечание. В (10) и других формулах используется первый столбец матрицы T^{α}, однако можно взять любой другой. Рассуждения усложнятся, но результаты не изменятся. Можно вывести соотношения ($T^{\alpha} = T$)

$$u_{in}(\mathbf{k}_1) = \sum_m T(g')w_{im}(h'),\ g' = (\alpha'/h'), \qquad (16)$$

$$w_{im}(\mathbf{h}') = \sum \exp\{i[(\mathbf{k}_{01} - h\mathbf{k}_{01})(\mathbf{\alpha} - \mathbf{r})]\}\,\hat{T}(h)_{im}gw(h'), \qquad (17)$$

$$w(\mathbf{h}') = \exp(-i\mathbf{k}_{01}\mathbf{r})(g')^{-1}[u(\mathbf{k}_1)\exp i(\mathbf{k}_{01})\mathbf{r}]\ . \qquad (18)$$

Из них видно, что периодическая функция $u_{in}(\mathbf{k}_1)$, полученная с помощью n-го столбца матрицы T, выражается через периодические функции, полученные с учетом других столбцов. Однако при этом необходимо брать другую произвольную производящую периодическую функцию, а именно функцию (18). В частности, если имеется такой элемент g', что сумма (16) сводится к одному слагаемому, например, с номером m, то переход в (10) от n-го столбца к m-му эквивалентен просто другому выбору произвольной производящей функции. Указанный элемент существует при $\mathbf{k}_{01} = 0$, но может отсутствовать для СТ на поверхности зоны. Возможно, практические вычисления заставят использовать линейные комбинации функций u_{im} от разных столбцов матрицы T.

3. В этом пункте БВ являются линейными комбинациями взаимно ортогональных локализованных функций. Переход от них к БВ ИП предполагается унитарным, поэтому БВ образуют ортогональную систему (имеется в виду эрмитово скалярное произведение — интеграл по ячейке). Теперь энергетический спектр определяется коэффициентами при инвариантных комбинациях (ИК) соответствующих локальных или симметризованных величин (например, смещений атомов, магнитных моментов и т. п.).

Далее рассматриваются не все вообще НП и их базисы, а лишь часть их. Ограничение обусловлено тем, что учитываются одна система эквивалентных позиций и только одно НП Г локальной группы позиций. Именно в этих рамках решается задача о связи БВ НП из $i(\Gamma,\mathbf{k}_1)$ с БВ НП из $i(\Gamma,\mathbf{k}_{01})$.

Пусть l_{Γ} — размерность НП Г, m — число эквивалентных позиций в ячейке. Тогда ml_{Γ} — размерность малого ИП $i(\Gamma,\ \mathbf{k})$. Это число одинаково для всех точек зоны Бриллюэна. Отсюда следует

Теорема 1. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{0\,1}$ все $\sigma m l_\Gamma$ предельных БВ, которые до перехода принадлежали ИП $I(\Gamma,\mathbf{K}_\sigma)$ и были связаны с векторами $\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_\sigma$, являются линейными комбинациями $m l_\Gamma$ предельных значений БВ малого ИП $i(\Gamma, \mathbf{k}_{01})$.

Действительно, во-первых, до перехода $m l_\Gamma$ БВ ИП $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$ были взаимно ортогональны и таковыми останутся и после перехода. Во-вторых, упомянутые в теореме предельные БВ принадлежат пространству малого ИП $i(\Gamma, \mathbf{k}_{01})$, размерность которого равна $m l_\Gamma$.

Таким образом, если общим методом индуцирования из $m l_\Gamma$ БВ $\psi_i(\mathbf{k}_1)$ представления $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$ группы $G(\mathbf{k}_1)$ построить БВ $\psi_i(\mathbf{k}_1), \ldots, \psi_i(\mathbf{k}_\sigma)$ представления $I(\Gamma,\mathbf{K}_\sigma)$ группы $G(\mathbf{k}_{01})$, а затем совершить предельный переход $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$, то среди БВ $\psi_i(\mathbf{k}_{01}), \ldots, \psi_i(\mathbf{k}_{0\sigma})$ окажется всего $m l_\Gamma$ линейно независимых. (Отметим, что в отличие от п. 2 теперь переход не связан с какими-либо предположениями о непрерывной зависимости от $\mathbf{k}$ и сводится просто к замене векторов $\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_\sigma$ на векторы $\mathbf{k}_{01}, \ldots, \mathbf{k}_{0\sigma}$ в соответствующих суммах по ячейкам.)

Полезно ввести новое понятие. Будем считать, что неэквивалентные НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ и $\tau^\gamma(\mathbf{k}_1)$ из $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$ соприкасаются в точке $\mathbf{k}_{01}$, если в $i(\Gamma, \mathbf{k}_{01})$ имеется хотя бы одно НП $\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01})$, с которым совместны как $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$, так и $\tau^\gamma(\mathbf{k}_1)$. Подчеркнем, что решение вопроса о соприкосновении двух НП определяется выбранными системой эквивалентных позиций и НП Г локальной группы.

Введенное понятие проиллюстрируем на примерах. Рассматриваем ранее выбранную федоровскую группу и векторы $\mathbf{k}$, используем табл. 1. Возьмем позицию (a) с локальной группой $G(a) = \bar{4}32 = T_d$. НП Г даны в таблице Т192 [2,3]. Согласно [2], для Г = Г5

$$i(\Gamma, \mathbf{k}_0) = T^8 + T^9, \qquad i(\Gamma, \mathbf{k}_1) = \tau^2 + \tau^3 + 2\tau^5,$$

$$i(\Gamma, \mathbf{k}_{10}) = \tau^1 + \tau^2 + \tau^4 .$$

Для только что упомянутых НП на основании табл. 1 составим вспомогательные таблицы совместности (табл. 2). Из них видно, что в $\mathbf{k}_0$ соприкасаются НП τ^3 и τ^5 и НП τ^2 и τ^5; НП τ^2 и τ^3 не соприкасаются. В $\mathbf{k}_{10}$, наоборот, соприкасаются τ^2 и τ^3, но τ^2 и τ^5 или τ^3 и τ^5 не соприкасаются. (Если выберем другую позицию или другое НП, то получим иные результаты.)

Таблица 2

$\mathbf{k}_0$	T^8	T^9
$\mathbf{k}_1$	$\tau^3 + \tau^5$	$\tau^2 + \tau^5$

$\mathbf{k}_{10}$	τ^1	τ^2	τ^4
$\mathbf{k}_1$	τ^5	τ^5	$\tau^2 + \tau^3$

Пространство предельных БВ ИП $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$ может быть разбито на взаимно ортогональные пространства НП $\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01})$. Пусть НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ и $\tau^\gamma(\mathbf{k}_1)$ не соприкасаются в $\mathbf{k}_{01}$, т.е. $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ совместно с одним набором S_β НП $\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01})$ из $i(\Gamma, \mathbf{k}_{01})$, а $\tau^\gamma(\mathbf{k}_1)$ — с другим набором S_γ, причем в S_β и S_γ отсутствуют одинаковые НП $\tau^\alpha(\mathbf{k}_{01})$. БВ представления $t^\gamma(\mathbf{K}_{0\sigma})$ ортогональны базисам всех НП в S_β. Следовательно, они ортогональны и всем БВ НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_{01})$, т.е. ортогональны БВ представления $t^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$. С другой стороны, согласно теореме 1, БВ представления $t^\gamma(\mathbf{K}_{0\sigma})$ линейно выражаются через предельные БВ представления $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$. Таким образом, теорему 1 уточняет

Теорема 2. БВ представления $t^\beta(\mathbf{K}_{0\sigma})$ являются линейными комбинациями предельных БВ НП $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$ и, возможно, тех малых НП из $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$, которые соприкасаются с $\tau^\beta(\mathbf{k}_1)$.

Поясним эту теорему на примере. Совершим переход $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_0$. Пусть малые НП τ^2, τ^3 и τ^5 в табл. 2 соответственно порождают полные НП $T^2(\mathbf{K})$, $T^3(\mathbf{K})$ и $T^5(\mathbf{K})$. Согласно теореме 2, предельные БВ полного НП $T^3(\mathbf{K})$ являются линейными комбинациями предельных БВ малых НП τ^3 и τ^{51}. Аналогично предельные БВ полного НП $T^2(\mathbf{K})$ являются линейными комбинациями предельных БВ малых НП τ^2 и τ^{52}. Для НП τ^5 мы ввели второй индекс: базис НП τ^{51} ведет к базису НП T^8, базис НП τ^{52} — к базису НП T^9. Нам нужно установить, чем различаются базисы НП τ^{51} и τ^{52}. Продолжим рассмотрение примера. Пусть $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{10}$. Снова имеем два НП τ^{51} и τ^{52}. У них одинаковые матрицы, но разные базисы. Кстати, нет оснований считать, что базис НП τ^{51} около точки $\mathbf{k}_0$ совпадает с базисом НП τ^{51} около точки $\mathbf{k}_{10}$. В целом данные из табл. 2 ставят перед нами вопрос: можно ли при $\mathbf{k} \to \mathbf{k}_0$ выбрать базисы двух НП τ^5 таким образом, чтобы в пространство полного НП T^8 вошли предельные БВ лишь НП τ^{51}, а в пространство НП T^9 — лишь НП τ^{52}? Аналогичный вопрос возникает и при переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{10}$. Положительный ответ на этот вопрос содержится в теореме 3.

Теорема 3. Если ограничение $\hat{\tau}^\alpha\!\downarrow(\mathbf{k}_{0\,1})$ с группы $H(\mathbf{k}_{01})$ на подгруппу $H(\mathbf{k}_1)$ равно

$$\hat{\tau}^{\beta 1}(\mathbf{k}_1) + \ldots + \hat{\tau}^{\beta m}(\mathbf{k}_1),$$

то можно выбрать базис малого ИП $i(\Gamma, \mathbf{k}_1)$ таким образом, чтобы предельные БВ представления

$$t^{\beta 1}(\mathbf{K}_\sigma) + \ldots + t^{\beta m}(\mathbf{K}_\sigma)$$

группы $G(\mathbf{k}_{01})$ образовали базис малого НП $\tau^{\alpha}(\mathbf{k}_{01})$.

Мы опускаем доказательство как довольно громоздкое. Упомянутый в теореме выбор БВ не вызывает затруднений в конкретных случаях. Целесообразно проиллюстрировать смысл теоремы на примерах.

Согласно табл. 2, $\hat{T}^8\downarrow(\mathbf{K}_0) = \hat{\tau}(\mathbf{k}_1) + \hat{\tau}^{51}(\mathbf{k}_1)$. Звезда $\mathbf{K}$ с вектором $\mathbf{k}_1$ в целом имеет 6 лучей: $(0, 0, \pm\mathbf{k}_1)$, $(0, \pm\mathbf{k}_1, 0)$, $(\pm\mathbf{k}_1, 0, 0)$. При предельном переходе $\mathbf{k}_1 \to 0$ все эти 6 векторов превращаются в один вектор $\mathbf{k}_0 = 0$. НП $t(\mathbf{K}_\sigma)$ в данном случае совпадают с полными НП $T(\mathbf{K})$, так что вторая упомянутая в теореме сумма есть $T^3(\mathbf{K}) + T^{51}(\mathbf{K})$. Это последнее представление 18-мерно. Согласно теореме, его базис при переходе $\mathbf{k}_1 \to 0$ превращается в 3-мерный базис НП $T^8(\mathbf{K}_0)$, если, конечно, нужным образом выбран базис представления $\tau^3(\mathbf{k}_1) + \tau^{51}(\mathbf{k}_1)$. Поскольку три БВ малого представления $\tau^3(\mathbf{k}_1) + \tau^{51}(\mathbf{k}_1)$ ортогональны как до предельного перехода, так и после него, то в качестве базиса НП $T^8(\mathbf{K}_0)$ можно взять предельные значения БВ представления $\tau^3(\mathbf{k}_1) + \tau^{51}(\mathbf{k}_1)$. Все 18 предельных БВ представления $T^3(\mathbf{K}) + T^{51}(\mathbf{K})$ являются линейными комбинациями трех предельных БВ представления $\tau^3(\mathbf{k}_1) + \tau^{51}(\mathbf{k}_1)$ (как утверждается в теореме 3). Такие же рассуждения справедливы по отношению к сумме $\tau^2(\mathbf{k}_1) + \tau^{52}(\mathbf{k}_1)$. По теореме 3, существует возможность разбиения 4-мерного пространства двух НП $\tau^5(\mathbf{k}_1)$ на пространства НП $\tau^{51}(\mathbf{k}_1)$ и $\tau^{52}(\mathbf{k}_1)$.

Точка $\mathbf{k}_{10}$. Здесь имеем, например, $\hat{\tau}^1\downarrow(\mathbf{k}_{10}) = \hat{\tau}^{51}(\mathbf{k}_1)$. При переходе $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{10}$ векторы $(0, 0, \pm\mathbf{k}_1)$ становятся эквивалентными вектору $\mathbf{k}_{10}$, так что $\mathbf{K}_\sigma = \{(0, 0, \mathbf{k}_1), (0, 0, -\mathbf{k}_1)\}$, $\mathbf{K}_{0\sigma} = \{\mathbf{k}_{10}, \mathbf{k}_{10} - \mathbf{b}_3\}$. В роли второй упомянутой в теореме суммы выступает НП $t^{51}(\mathbf{K}_\sigma)$. (Его можно рассматривать как полное НП группы $G(\mathbf{k}_1) + g_{25}G(\mathbf{k}_1)$, получающееся из малого НП $\tau^{51}(\mathbf{k}_1)$ по общим правилам.) НП $t^{51}(\mathbf{K}_\sigma)$ имеет 4-мерный базис. При переходе он превращается в 2-мерный базис малого НП $\tau^1(\mathbf{k}_{10})$. Ввиду взаимно однозначного соответствия между малыми и полными НП можно утверждать, что при предельном переходе 12-мерный базис полного НП $T^{51}(\mathbf{K})$ превращается в 6-мерный базис полного НП $T^1(\mathbf{K}_{10})$ ($\mathbf{K}_{10}$ — звезда с вектором $\mathbf{k}_{10}$).

Из теоремы 3, по существу, следует такое же соответствие разумной физической картине, какое было установлено в п. 2. Однако прямо доказать некоторые утверждения относительно энергетического спектра сейчас трудно: у нас нет формул для коэффициентов при инвариантных комбинациях, не установлены свойства последних и т. п.

Если базисы малых НП в несимметричной точке выбраны таким образом, что при $\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_{01}$ они превращаются непосредственно в БВ НП в СТ в соответствии с правильной физической картиной (имеется в виду взаимно однозначное соответствие между НП и уровнями энергии), то такие базисы назовем согласованными. Лишь для согласованных базисов справедливы утверждения, сделанные в [1]. В теореме 3 указывается на принципиальную возможность согласования базисов в случае ИП, но не указан способ. Последний аналогичен описанному в п. 2, он будет сформулирован в следующей работе автора на примере изучения магнитного энергетического спектра. По-видимому, впервые согласование базисов производилось в [4] при исследовании колебательного спектра. Но там отсутствуют общая схема и обоснование, не ставится вопрос о возникновении линейной зависимости в СТ, не затрагивается случай функций Блоха.

1. L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, *Phys. Rev.* **50**, 58 (1936).
2. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
3. О. В. Ковалев, *Неприводимые представления пространственных групп*, Изд-во АН УССР, Киев (1961).
4. О. В. Ковалев, *ФНТ* **10**, 83 (1984).

Self-consistency of the basis vectors of the representations at symmetric points of the Brillouin zone

O. V. Kovalev

The behavior of the basis vectors of the full representation for a non-symmetrical point under the limiting transition to a symmetrical point is studied. The structure of the limiting representation and the fact of the appearing linear relationship between the basis vectors are ascertained, which eliminates a number of contradictions. The notion of a limited induced representation is introduced. Proceeding from the notion, formulas are proposed for the basis vectors which under the limiting transition transform into basis vectors of alone irreducible representation at a symmetrical point. The following

principle is used: the irreducible representation corresponds to one energy level. Two variants of basis vectors are considered (i) Bloch functions (the electron spectrum) and (ii) infinite sums taken over translations (magnetic, phonon, exciton spectra, the method of strong coupling). This study is to a certain extent, a continuation of the known research by L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, *Phys. Rev.* **50**, 58 (1936).