Трансляционная симметрия бесконечного кристалла

В прошлый раз:

- Рассматриваем трехмерные решетки Браве $\Leftrightarrow$ группы трансляций $\left\{\mathbb{t}_{\mathbf{R_n}}\right\}$:

$$\mathbb{t}_{\mathbf{R_n}}\,\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R_n} = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}, \;\; n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}.$$

(и аналогично в двумерном случае)

- Плоские волны $\exp\left(i\mathbf{kr}\right)$ преобразуются по одномерным представлениям $\Gamma_{\mathbf{k}}$ группы $\left\{\mathbb{t}_{\mathbf{R_n}}\right\}$ с характерами:

$$\chi_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{R_n}\right) = \exp\left(-i\mathbf{kR_n}\right), \quad \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$$

- Тип трансляционной симметрии $\Leftrightarrow$ волновой вектор $\mathbf{k}$.

- Вектор $\mathbf{k}$ пробегает значения в обратном пространстве нашей решетки

$\Leftrightarrow$ *раскладывается по базису обратной решетки*

Биортогональные системы векторов

Определение: *пусть* $\Gamma = \left(\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n\right)$ *– система векторов в* n*-мерном евклидовом пространстве* R_n*. Система векторов* $\Gamma^* = \left(\mathbf{e}_1^*, \ldots, \mathbf{e}_1^*\right)$ *называется* *биортогональной системе* Γ*, если:*

$$\left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l^*\right) = \delta_{kl} = \begin{cases} 1, & k = l; \\ 0, & k \neq l. \end{cases} \qquad (*)$$

(**Замечание:** *индекс* * *здесь не следует путать с комплексным сопряжением!*).

Некоторые простые утверждения:

1. *Если* Γ^* *биортогональна* Γ*, то и* Γ *биортогональна* Γ^**.*

Доказательство: следует из элементарных свойств скалярного произведения.

2. *Если система векторов* Γ *– ортонормированный базис (О.Н.Б.) в* R_n*, то она биортогональна сама себе.*

Доказательство: по определению О.Н.Б., $\left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l\right) = \delta_{kl}$, – *ч.т.д.*

3. Если система векторов Γ – базис в R_n (необязательно О.Н.Б.!), то биортогональная ей система Γ^* существует и единственна.

Доказательство. Вначале докажем единственность биортогональной системы.

Пусть есть две разные системы векторов Γ^* и $\tilde{\Gamma}^*$, биортогональные базису Γ:

$$\left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l^*\right) = \delta_{kl}, \quad \left(\mathbf{e}_k, \tilde{\mathbf{e}}_l^*\right) = \delta_{kl}$$

Тогда, вычитая эти равенства друг из друга, получим:

$$\left(\mathbf{e}_k, \left(\mathbf{e}_l^* - \tilde{\mathbf{e}}_l^*\right)\right) = \left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l^*\right) - \left(\mathbf{e}_k, \tilde{\mathbf{e}}_l^*\right) = \delta_{kl} - \delta_{kl} = 0, \quad \forall\, k, l$$

Таким образом, вектор $\mathbf{e}_l^* - \tilde{\mathbf{e}}_l^*$ ортогонален каждому вектору базисной системы $\Gamma \Leftrightarrow \mathbf{e}_l^* - \tilde{\mathbf{e}}_l^* = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{e}_l^* = \tilde{\mathbf{e}}_l^*, \ \forall l \Leftrightarrow \Gamma^* = \tilde{\Gamma}^*$, и приходим к противоречию, *ч.т.д.*

Для доказательства существования биортогональной системы векторов Γ^* *построим ее явным образом* для любой базисной системы Γ в R_n.

Поскольку, по условию, система Γ – базис в R_n , то каждый из векторов искомой системы $\Gamma^* = \left(\mathbf{e}_1^*, \ldots, \mathbf{e}_1^*\right)$ может быть разложен по базису Γ:

$$\mathbf{e}_l^* = \sum_{j=1}^{n} C_{jl}\, \mathbf{e}_j \qquad (**)$$

По определению биортогональной системы $(*)$, должно быть выполнено:

$$\left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l^*\right) = \sum_{j=1}^{n} \left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_j\right) C_{jl} = \sum_{j=1}^{n} S_{kj}\, C_{jl} = \left(\mathbf{S}\,\mathbf{C}\right)_{kl} = \delta_{kl} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{S}\,\mathbf{C} = \mathbf{1},$$

$\mathbf{S}$ – *матрица перекрывания* (*матрица Грамма*, *метрическая матрица*) базиса Γ:

$$S_{kj} = \left(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_j\right).$$

Поскольку Γ – базис в R_n, то $\mathbf{S}$ – невырожденная $\Leftrightarrow$ существует $\mathbf{S}^{-1}$. Таким образом, если мы подставим в $(**)$ матрицу $\mathbf{C} = \mathbf{S}^{-1}$, то получим систему Γ^*, биортогональную базису Γ. Тем самым существование Γ^* доказано, *ч.т.д.*

4. Если система векторов Γ^*, биортогональная данной системе Γ, существует, то она линейно независима в R_n .

Доказательство: допустим обратное, что Γ^* – линейно зависимая; тогда при некоторых коэффициентах, одновременно не равных 0, выполняется равенство:

$$c_1\mathbf{e}_1^* + \ldots + c_n\mathbf{e}_n^* = \mathbf{0}.$$

Умножим его с обеих сторон скалярно на $\mathbf{e}_k$, $\forall k$:

$$0 = \left(\mathbf{e}_k,\ c_1\mathbf{e}_1^* + \ldots + c_n\mathbf{e}_n^*\right) = \sum_{l=1}^{n} c_l\left(\mathbf{e}_k,\ \mathbf{e}_l^*\right) = \sum_{l=1}^{n} c_l\ \delta_{kl} = c_k$$

Таким образом, $c_k = 0,\ \forall k$, и мы приходим к противоречию. – *ч.т.д.*

Замечание: тем самым показано, что биортогональные системы Γ и Γ^*, если существуют, то одновременно являются базисами в R_n (*необязательно О.Н.Б.*!).

Обратная решетка в двумерном случае

Применим введенные понятия для построения *обратных решеток* в $\mathbb{R}^2$ и $\mathbb{R}^3$.

Пусть $\left\{ \mathfrak{t}_{\mathbf{R_n}} \right\}$ – *двумерная решетка Браве* , т.е. группа трансляций вида:

$$\mathbf{R_n} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b}, \;\; n_{1,2} \in \mathbb{Z}.$$

Будем рассматривать *основные векторы трансляций* $\Gamma = \{\mathbf{a}, \;\mathbf{b}\}$ как базис в $\mathbb{R}^2$

и построим для него биортогональный базис $\Gamma^* = \{\mathbf{a}^*, \;\mathbf{b}^*\}$ по явным формулам:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} (\mathbf{a},\mathbf{a}) & (\mathbf{a},\mathbf{b}) \\ (\mathbf{b},\mathbf{a}) & (\mathbf{b},\mathbf{b}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \gamma \end{bmatrix} \quad \Rightarrow$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{S}^{-1} = \frac{1}{\Delta}\begin{bmatrix} \gamma & -\beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix}, \quad \Delta = \det \mathbf{S} = \alpha\gamma - \beta^2 \quad \Rightarrow$$

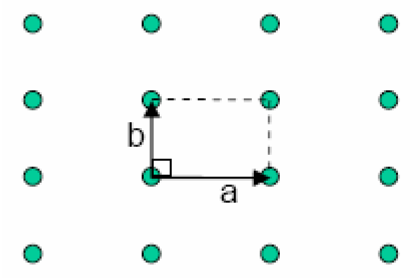
$$\{\mathbf{a}^*, \;\mathbf{b}^*\} = \{\mathbf{a}, \;\mathbf{b}\}\; \mathbf{S}^{-1} = \{\mathbf{a}, \;\mathbf{b}\} \frac{1}{\Delta}\begin{bmatrix} \gamma & -\beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix} = \left\{ \frac{\gamma\mathbf{a} - \beta\mathbf{b}}{\Delta}, \;\; \frac{-\beta\mathbf{a} + \alpha\mathbf{b}}{\Delta} \right\}$$

Определение: *обратной двумерной решеткой Браве* называется группа $\left\{\mathbb{t}_{\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^*}\right\}$ с основными векторами трансляций $\Gamma^* = \left\{\mathbf{a}^*,\ \mathbf{b}^*\right\}$, т.е.:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^* = n_1\,\mathbf{a}^* + n_2\,\mathbf{b}^*,\ \ n_{1,2} \in \mathbb{Z}.$$

Пример 1. Пускай прямая решетка Браве – прямоугольная примитивная:

$$\mathbf{a} = a\,\mathbf{e}_x;\quad \mathbf{b} = b\,\mathbf{e}_y$$



$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} (\mathbf{a},\mathbf{a}) & (\mathbf{a},\mathbf{b}) \\ (\mathbf{b},\mathbf{a}) & (\mathbf{b},\mathbf{b}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{bmatrix} \Rightarrow \Delta = a^2 b^2 \Rightarrow \left\{\mathbf{a}^*,\ \mathbf{b}^*\right\} = \left\{\frac{\mathbf{a}}{a^2},\ \frac{\mathbf{b}}{b^2}\right\}$$

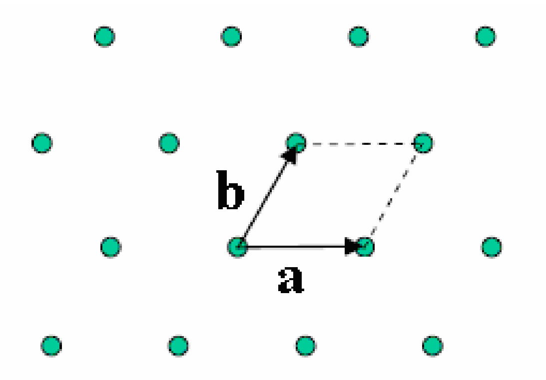
$\Rightarrow$ обратная решетка также будет прямоугольной примитивной (но с растяжением осей). *В частности, решетка, обратная к квадратной, также квадратная.*

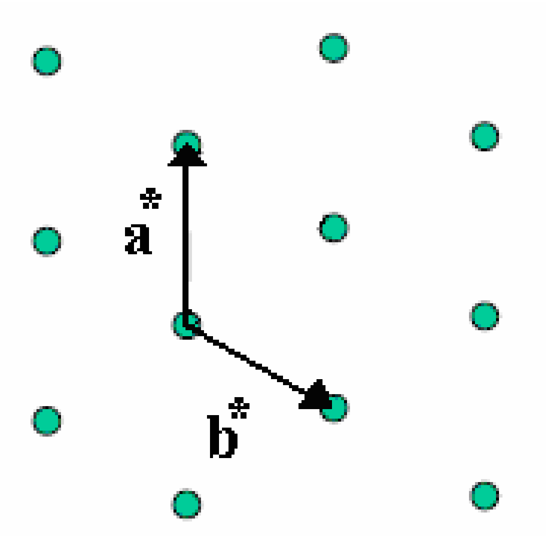
Пример 2. Прямая решетка Браве – гексагональная:

$$\mathbf{a} = a\,\mathbf{e}_x; \quad \mathbf{b} = (a/2)\,\mathbf{e}_x + \left(a\sqrt{3}/2\right)\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} (\mathbf{a},\mathbf{a}) & (\mathbf{a},\mathbf{b}) \\ (\mathbf{b},\mathbf{a}) & (\mathbf{b},\mathbf{b}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2 & a^2/2 \\ a^2/2 & a^2 \end{bmatrix} \Rightarrow \quad \Delta = 3a^4/4 \quad \Rightarrow$$

$$\left\{\mathbf{a}^*,\ \mathbf{b}^*\right\} = \left\{\frac{4\mathbf{a}-2\mathbf{b}}{3a^2},\ \frac{-2\mathbf{a}+4\mathbf{b}}{3a^2}\right\} = \left\{(1/a)\mathbf{e}_x - \left(1/a\sqrt{3}\right)\mathbf{e}_y,\ \left(2/a\sqrt{3}\right)\mathbf{e}_y\right\}$$





$\Rightarrow$ обратная решетка – тоже гексагональная (с поворотом и растяжением осей).

Обратная решетка в трехмерном случае

Пусть задана *трехмерная решетка Браве* $\Leftrightarrow$ группа трансляций $\left\{ \mathbb{t}_{\mathbf{R_n}} \right\}$:

$$\mathbb{t}_{\mathbf{R_n}}\,\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R_n} = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c},\;\; n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}.$$

Как и в двумерном случае, дадим следующее

Определение: *обратной трехмерной решеткой Браве* называется группа $\left\{ \mathbb{t}_{\mathbf{R_n^*}} \right\}$ с основными векторами трансляций $\Gamma^* = \left\{ \mathbf{a}^*,\; \mathbf{b}^*,\; \mathbf{c}^* \right\}$, т.е.:

$$\mathbf{R_n^*} = n_1\,\mathbf{a}^* + n_2\,\mathbf{b}^* + n_3\,\mathbf{c}^*,\;\; n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}.$$

Утверждение. *В трехмерном случае базисные векторы обратной решетки можно вычислить в явном виде по следующим формулам:*

$$\mathbf{a}^* = \frac{[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]}{(\mathbf{a},[\mathbf{b}\times\mathbf{c}])};\quad \mathbf{b}^* = \frac{[\mathbf{c}\times\mathbf{a}]}{(\mathbf{b},[\mathbf{c}\times\mathbf{a}])};\quad \mathbf{c}^* = \frac{[\mathbf{a}\times\mathbf{b}]}{(\mathbf{c},[\mathbf{a}\times\mathbf{b}])}$$

Доказательство: требуется лишь проверить, что указанная система векторов $\Gamma^* = \{\mathbf{a}^*,\ \mathbf{b}^*,\ \mathbf{c}^*\}$ является биортогональной базису $\Gamma = \{\mathbf{a},\ \mathbf{b},\ \mathbf{c}\}$. Имеем:

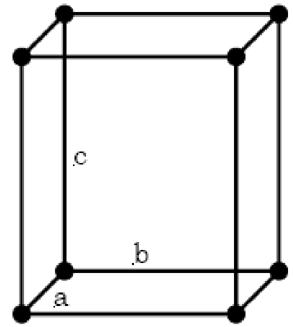
$$\left(\mathbf{a},\mathbf{a}^*\right) = \frac{\left(\mathbf{a},[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]\right)}{\left(\mathbf{a},[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]\right)} = 1$$ – и аналогично для $\left(\mathbf{b},\mathbf{b}^*\right)$, $\left(\mathbf{c},\mathbf{c}^*\right)$;

$\left(\mathbf{a},\mathbf{b}^*\right) = 0$ (и аналогично для остальных разноименных комбинаций) – следует из элементарных свойств векторного произведения. – *ч.т.д.*

Замечание: здесь и далее используется определению базиса обратной решетки, принятое в кристаллографической литературе. В литературе по физике твердого тела определение базиса обратной решетки обычно видоизменяется введением множителя 2π:

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]}{\left(\mathbf{a},[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]\right)};\quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi[\mathbf{c}\times\mathbf{a}]}{\left(\mathbf{b},[\mathbf{c}\times\mathbf{a}]\right)};\quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi[\mathbf{a}\times\mathbf{b}]}{\left(\mathbf{c},[\mathbf{a}\times\mathbf{b}]\right)}$$

Примеры:



1. Исходная решетка Браве –

орторомбическая примитивная:

$$\mathbf{a} = a\,\mathbf{e}_x; \quad \mathbf{b} = b\,\mathbf{e}_y; \quad \mathbf{c} = c\,\mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{a}^* = \frac{[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]}{(\mathbf{a},[\mathbf{b}\times\mathbf{c}])} = \frac{bc\left[\mathbf{e}_y\times\mathbf{e}_z\right]}{abc\left(\mathbf{e}_x,\left[\mathbf{e}_y\times\mathbf{e}_z\right]\right)} = \mathbf{e}_x/a; \quad \mathbf{b}^* = \mathbf{e}_y/b; \quad \mathbf{c}^* = \mathbf{e}_z/c$$

$\Rightarrow$ обратная решетка также будет примитивной орторомбической (без поворота осей, но с растяжением). *В частности, обратная решетка к простой кубической* $(a = b = c)$*, тоже будет простой кубической (с растяжением осей).*

2. Решетка, обратная ГЦК, – ОЦК, и наоборот.

3. Решетка, обратная простой гексагональной, также простая гексагональная (с поворотом и растяжением осей).

Теоретико-групповой смысл введения обратной решетки

Произвольную трансляцию мы раскладываем по базису *прямой решетки*:

$$\mathbf{R_n} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}, \;\; n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}.$$

Разложим теперь волновой вектор $\mathbf{k}$ по базису *обратной решетки*:

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{a}^* + k_2\mathbf{b}^* + k_3\mathbf{c}^*, \;\; k_{1,2,3} \in \mathbb{R}$$

Тогда, в силу биортогональности базисов $\{\mathbf{a},\; \mathbf{b},\; \mathbf{c}\}$ и $\{\mathbf{a}^*,\; \mathbf{b}^*,\; \mathbf{c}^*\}$:

$$\mathbf{kR_n} = (\mathbf{k}, \mathbf{R_n}) = k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3$$

т.е. скалярное произведение имеет (формально) тот же вид, что и в обычном ортонормированном базисе. Отсюда получаем соотношение для характеров:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R_n}) = \exp(-i\mathbf{kR_n}) = \exp(-ik_1n_1)\exp(-ik_2n_2)\exp(-ik_3n_3) =$$
$$= \chi_{k1}(n_1)\,\chi_{k2}(n_2)\,\chi_{k3}(n_3)$$

– в полном соответствии с тем, что: $\mathfrak{t}_{\mathbf{R_n}} = \mathfrak{t}_{n_1\mathbf{a}} \circ \mathfrak{t}_{n_2\mathbf{b}} \circ \mathfrak{t}_{n_3\mathbf{c}}$