Nhóm đối xứng của các điểm đặc biệt trong các ô Wigner - Seitz của các mạng hệ lập phương

Bởi:

Nguyễn Văn Hiệu

Theo cách xây dựng ô Wigner – Seitz ta thấy trong mọi phép biến đổi mà không làm thay đổi vị trí cuủamạng Bravais thì ô Wigner – Seitz cũng không thay đổi vị trí. Nói khác đi, nhóm đối xứng của mạng Bravais là nhóm đối xứng của ô Wigner – Seitz. Mỗi nhóm đối xứng của một điêể nào đó là tập hợp các yếu tố của nhóm đối xứng của ô Wigner – Seitz giữa nguyên vị trí của điểm này hoặc là biến nó thành các điểm tương đương được định nghĩa như sau.

Hai điểm khac snhau r và r' trong một tinh thể được gọi là tương đương nếu có một phép tịnh tiến R của tinh thể

$R = n_1a_1 + n_2a_2 + n_3\ a_3$

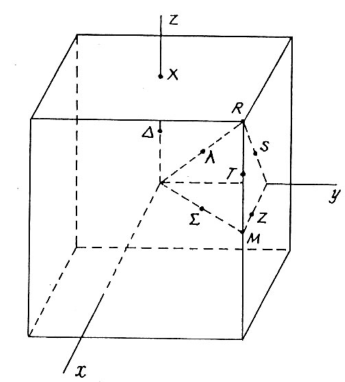
biến điểm nọ thành điểm kia, nghĩa là nếu có điểm r' trên mạng Bravais mà

$r' = r + R$

Theo các xây dựng ô Wigner – Seitz thì trong mọi phép tính tiến của tinh thể một ô nào đó chuyển hoàn toàn thành một ô khác hoặc là chỉ có mặt bên chung với nó, hoặc là không có điểm chung nào với nó cả. Vì thế các điểm ở trong ô Wigner – Seitz chỉ có thể tương đương với các điêể ở ngoài nó: hai điểm nằm trong một ô Wigner – Seitz là có các điểm tương đương năm ftrên các mặt đối diện của ô này. Do đó nhóm đối xứng của một điểm bên trong ô Wigner – Seitz gồm các phép đối xứng của ô Wigner – Seitz không thay đổi vị trí điểm này, còn nhóm đối xứng của một điểm trên mặt ô Wigner – Seitz là tập hợp các phép đối xứng của ô Wigner – Seitz giữ nguyên vị trí của điểm này hoặc biến nó thành các điểm tương đương. Ta gọi các biến đổi này là phép đối xứng của điểm đặc biệt đang xét.

Tâm Γ của ô Wigner – Seitz là điểm đặc biệt mà nhóm đối xứng của nó trùng với nhóm đối xứng của ô Wigner – Seitz . Nhóm đối xứng của các điểm khác nói chung đều là nhóm con thực sự của nhóm đối xứng của ô Wigner – Seitz . Trong đoạn này ta sẽ xét nhóm đối xứng của một số điểm đặc biệt không trùng với tâm của ô Wigner – Seitz của các mạng hệ lập phương.

Trước hết ta xét mạng lập phương đơn. Ô Wigner – Seitz của nó là hình lập phương. Ngoài tâm Γ hình này có các đặc điểm đặc biệt sau đây: 6 điểm đối xứng với nhau mà *X* là một, 6 điểm đối xứng với nhau mà Δ là một, 8 điểm mà đại diện là , 8 điểm mà đại diện là *R*, 12 điểm mà đại diện là *M*, 12 điểm mà đại diện là *T*, 12 điểm mà đại diện là ∑, 24 điểm mà đại diện là *Z* (xem hình 3.43). Ta dùng ngay tên gọi các điểm đặc biệt để ký hiệu nhóm đối xứng của chúng. Thí dụ như nhóm đối xứng của điểm *X* gọi là nhóm *X*. Nhóm đối xứng *Oh* của hình lập phương do đó cũng còn gọi là nhóm Γ.



Hình 3.43

Trước hết ta chú ý rằng *X* có một điểm tương đương nằm trên mặt bên đối diện, còn *M* có ba điểm tương đương nằm trên ba cạnh song song với cạnh chứa *M*. Mọi phép đối xứng của điểm *X* cũng là phép đối xứng của điểm *M* là đẳng cấu. Tương tự như vậy điểm *T* và điểm Δ có cùng một nhóm đối xứng, nghĩa là nhóm *T* đẳng cấu với nhóm Δ . Mọi phép đối xứng của hình lập phương đều biến điể R thành một điểm tương đương. Do đó nhóm đối xứng của điểm *R* trùng với nhóm Γ.

Xét ý nghĩa hình học của các phép đối xứng trong nhóm *Oh* hoặc bảng các yếu tố của nhóm *Oh*, ta có thể thử lại rằng nhóm *X* chứa tám yếu tố loại 1 sau đây: E, C_4^z, $(C_4^z)^{-1}$, C_2^z, C_2^x, C_2^y, C_2^{xy}, $C_2^{x\bar{y}}$. Các yếu tố loại 2 của nhóm *X* là tích của các yếu tố này với phép nghịch đảo. Trong số tám yếu tố loại 2 này có năm phép phản xạ gương:

$\sigma_x$qua mặt phẳng $x = 0$,

$\sigma_y$qua mặt phẳng $y = 0$,

$\sigma_z$qua mặt phẳng $z = 0$,

σ_{xy}qua mặt phẳng x = y,

$\sigma_{x\bar{y}}$qua mặt phẳng x = -y,

Các yếu tố của nhóm X chia thành mười lớp:

1. Lớp C_1^X gồm yếu tố đơn vị, lớp iC_1^X gồm phép nghịch đảo i,
2. Lớp C_2^X gồm hai phép quay C_4^Z và $(C_4^z)^{-1}$, lớp iC_2^X gồm hai phép quay gương $i(C_4^z)$ và $i(C_4^z)^{-1}$,
3. Lớp C_3^X gồm phép quay C_2^x, lớp iC_3^X gồm phép phản xạ gương σ_z,
4. Lớp C_4^X gồm hai phép quay C_2^x và C_2^y, lớp iC_4^X gồm hai phép phản xạ gương là σ_z và σ_y,
5. Lớp C_5^X gồm hai phép quay C_2^{xy} và $C_2^{x\bar{y}}$, lớp iC_5^X gồm hai phép phản xạ gương σ_{xy} và $\sigma_{x\bar{y}}$.

Chú ý rằng trục quay C_4 nằm trên mặt phẳng phản xạ gương nên hai phép quay ngược nhau liên hợp với nhau và nằm trong cùng một lớp.

Điểm Δ nằm trên đoạn thẳng nối điểm Γ và điểm X. Do đó nhóm Γ là nhóm con của nhóm X. Nó có tám yếu tố, chia thành năm lớp:

$C_1^\Delta = C_1^X$,

$C_2^\Delta = C_2^X$,

$C_3^\Delta = C_3^X$,

$C_4^\Delta = C_4^X$,

$C_5^\Delta = C_5^X$.

Điểm Λ nằm trong ô Wigner – Seitz và không có điểm tương đương trong ô này. Các yếu tố của Oh giữ cố định điểm này là: biến đổi đồng nhất, hai phép quay C_3 và C_3^{-1} quanh các mặt phẳng chứa một trong ba trục toạ độ và điểm Λ. Nếu chọn Λ là điểm mà $x = y = z$ như trên hình 3.43 thì trục quay là đường thẳng

$x = y = z$,

còn các mặt phẳng phản xạ gương là các mặt phẳng với các phương trình sau đây:

σ_{xy}:$x = y$,

$\sigma_{yz}: y = z$,

$\sigma_{zx}: z = x$.

Sáu yếu tố nói trên của nhóm Λ chia thành ba lớp:

a. C_1^{Λ} gồm một yếu tố E,

b. C_2^{Λ} gồm hai phép quay C_3 và C_3^{-1},

c. C_3^{Λ} gồm ba phép phản xạ gương.

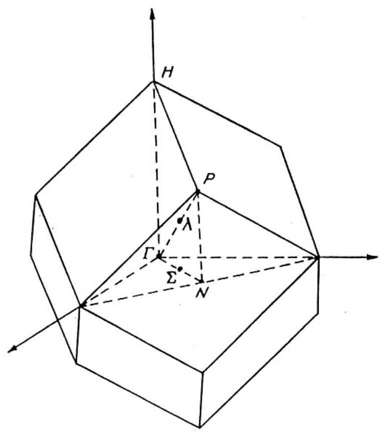
Trong các phép quay C_3 và C_3^{-1} một mặt phẳng phản xạ gương biến thành các mặt phẳng kia. Vì mặt phẳng chứa trục quay nên hai phép quay ngược nhau liên hợp với nhau và tạo thành một lớp.

Điểm ∑ cũng không có điểm tương đương ở bên trong hình lập phương. Nhóm ∑ chứa 4 yếu tố. Nếu chọn ∑ mà $z = 0$, $x = y$ như trên hình 3.43 thì bốn yếu tố của ∑ là: E, C_2^{xy}, σ_z, σ_{xy}. Mỗi yếu tố là một lớp.

Điểm Z có một điểm tương đương nằm trên mặt bên đối diện. Nhóm Z có bốn yếu tố. Nếu chọn Z nằm trên đường thẳng $z = 0$, $y = 1$ thì các yếu tố đó là E, C_2^{x}, σ_y, σ_z.

Điểm S cũng có một điểm tương đương. Nhóm S cũng có bốn yếu tố: nếu chọn S như trên hình 3.43 thì ta có các yếu tố sau: E, C_2^{zx}, σ_y, σ_{zx}. Rõ ràng là nhóm S đẳng cấu với nhóm ∑.

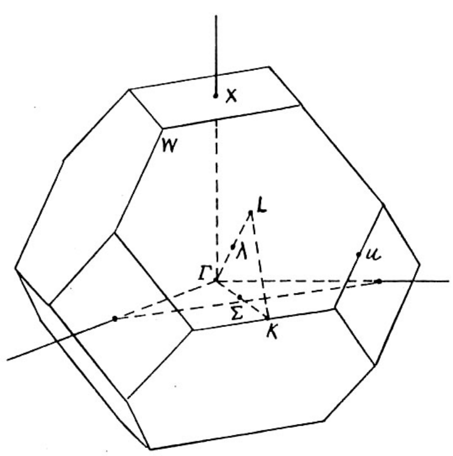
Bây giờ ta xét mạng lập phương tâm diện. Ô Wigner – Seitz là hình 12 mặt (xem hình 3.44). Các điểm đặc biệt Γ, Δ, Λ và ∑ có nhóm đối xứng giống như trong trường hợp mạng lập phương đơn. Ngoài ra, còn có ba điểm đặc biệt mà ta cần chú ý: H, N và P (hình 3.44). Lý luận giống như ở trên, có thể chứng minh rằng nhóm đối xứng của điểm H chính là nhóm Oh, nghĩa là nhóm H



Hình 3.44

trùng với nhóm *Oh*. Nhóm *N* có tám yếu tố, trong đó bốn yếu tố loại 1 là: E, C_2^z, C_2^{xy}, $C_2^{\overline{xy}}$, còn bốn yếu tố loại 2 là tích của các yếu tố loại 1 với phép nghịch đảo. Mỗi yếu tố của *N* là một lớp. Điểm *P* có ba điểm tương đương, và nếu ta nối liền bốn điểm tương đương với nhau này thì ta được hình tứ diện. Nhóm *P* chính là nhóm *Td* mà ra đã biết.

Cuối cùng ta xét mạng lập phương tâm thể. Ô Wigner – Seitz là hình 14 mặt (xem hình 3.45).



Hình 3.45

Ngoài các điểm đặc biệt Γ, X, Δ, Λ, ∑ có nhóm đối xứng giống như trong trường hợp mạng lập phương đơn ta cần chú ý thêm điểm *L*. Để xác định ta chọn *L* là điểm mà $x = y = z$. Nhóm đối xứng của điểm *L* có 12 yếu tố, chia thành sáu lớp như sau:

a. C_1^L gồm E, iC_1^L gồm i,

b. C_2^L gồm C_3^{xyz} và $(C_3^{xyz})^{-1}$,

iC_2^L gồm iC_3^{xyz}và $i(C_3^{xyz})^{-1}$,

c. C_3^L gồm $C_2^{x\bar{y}}$, $C_2^{y\bar{z}}$và $C_2^{z\bar{x}}$,

iC_L^3 gồm σ_{xy}, σ_{yz} và σ_{zx}.

Nhóm đối xứng của các điểm khác cũng có thể thiết lập một cách tương tự. Để cho tiện đôi khi ta dùng ngay trên trục quay và số phép quay trong một lớp để ký hiệu lớp các phép quay, dùng ký hiệu σ và số phép phản xạ gương trong một lớp để ký hiệu lớp phản xạ gương này.

Thí dụ như đối với nhóm Γ ta còn dùng các ký hiệu sau:

$C_1 = E$, $C_2 = 6C_4$, $C_3 = 3C_4^2$, $C_4 = 8C_3$, $C_5 = 6C_2$,

$i\,C_1 = i$, $i\,C_2 = 6\,i\,C_4$, $i\,C_3 = 3iC_4^2$, $i\,C_4 = 8\,i\,C_3$, $iC_5 = 6\,\sigma$,

còn đối với nhóm X ta có

$C_1^X = E$, $C_2^X = 4C_4$, $C_3^X = C_2$, $C_4^X = 2C_2^{'}$, $C_5^X = 2C_2^{''}$,

$iC_1^X = i$, $iC_2^X = 4iC_4$, $iC_3^X = \sigma$, $iC_4^X = 2\sigma'$, $iC_5^X = 2\sigma''$

v.v…

Sau này các nhóm đối xứng nói trên của các điểm đặc biệt trong các ô Wigner – Seitz của các mạng hệ lập phương và các biểu diễn của chúng sẽ được sử dụng khi nghiên cứu sự đối xứng của các trạng thái điện tử trong tinh thể.