Bloch定理、平移群与第一Brillouin区

Electrons in periodic potential $V(\mathbf{r})$

- $V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{R} \in \{\text{lattice vectors}\}$

$\Rightarrow$ translation operator $\hat{T}_{\mathbf{R}}$:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}+\mathbf{R})$$
$$[\hat{T}_{\mathbf{R}}, \hat{H}] = 0$$

$\Rightarrow$ Bloch theorem $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ with $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$\Rightarrow$ wave vector $\mathbf{k}$ is quantum number for the discrete translation invariance,
$\mathbf{k} \in$ first Brillouin zone

Proof for Bloch theorem (part 1 of 3)

设晶格做平移 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 时保持不变，并满足玻恩-卡门周期性边条件：

$$\psi(\vec{r}+N_i\vec{a}_i)=\psi(\vec{r})$$

引入如下平移操作算符 T_i $(i=1,2,3)$：

$$T_i\phi(\vec{r})=\phi(\vec{r}+\vec{a}_i)$$

显然 T_i $(i=1,2,3)$ 之间是互相对易的：

$$T_iT_j\phi(\vec{r})=T_i\phi(\vec{r}+\vec{a}_j)=\phi(\vec{r}+\vec{a}_j+\vec{a}_i)=\phi(\vec{r}+\vec{a}_i+\vec{a}_j)=T_jT_i\phi(\vec{r})$$

即 $\quad [T_i, T_j]=0$

设单电子的哈密顿量是 $\quad H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$，其中 $V(\vec{r}+\vec{a}_i)=V(\vec{r})$

显然，$\quad T_iH=HT_i$

由于 $[H, T_i]=0$，$[T_i, T_j]=0$，它们可以有共同的本征态 ϕ：

$$H\phi=E\phi$$

$$T_1\phi=\lambda_1\phi,\quad T_2\phi=\lambda_2\phi,\quad T_3\phi=\lambda_3\phi$$

Proof for Bloch theorem (part 2 of 3)

根据玻恩-卡门边条件：

$$\phi(\vec{r}) = \phi(\vec{r} + N_1\vec{a}_1) = T_1^{N_1}\phi(\vec{r}) = \lambda_1^{N_1}\phi(\vec{r})$$

$$\rightarrow \quad \lambda_1^{N_1} = 1 \quad \rightarrow \quad \lambda_1 = e^{i2\pi\frac{l_1}{N_1}} \quad (l_1 \in \mathbb{Z})$$

同理，$\lambda_2 = e^{i2\pi\frac{l_2}{N_2}}$，$\lambda_3 = e^{i2\pi\frac{l_3}{N_3}}$

对晶格做平移 $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$，则本征波函数变为

$$\phi(\vec{r} + \vec{R}_n) = \lambda_1^{n_1}\lambda_2^{n_2}\lambda_3^{n_3}\phi(\vec{r}) = \underbrace{e^{i2\pi\left(\frac{l_1}{N_1}n_1 + \cdots + \frac{l_3}{N_3}n_3\right)}}_{= e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}\phi(\vec{r})$$

其中 $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \cdots + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3$

Proof for Bloch theorem (part 3 of 3)

记 $\vec{b}_i$ 为倒格子的基矢，它们满足 $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$

令 $\vec{k} \equiv \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3$，则有

$$\vec{k}\cdot\vec{R}_n = \left(\frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \cdots + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3\right)\cdot\left(n_1\vec{a}_1 + \cdots + n_3\vec{a}_3\right)$$

$$= 2\pi\left(\frac{l_1}{N_1}n_1 + \cdots + \frac{l_3}{N_3}n_3\right)$$

因此，平移的本征波函数满足

$$\phi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\phi(\vec{r})$$

$$\rightarrow \quad e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\phi(\vec{r}+\vec{R}_n) = \phi(\vec{r})$$

(两边乘以 $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$)

$$\rightarrow \quad e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R}_n)}\phi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\phi(\vec{r})$$

可见：$u(\vec{r}) \equiv e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\phi(\vec{r})$ 在平移 $\vec{R}_n$ 下保持不变，

即 $u(\vec{r})$ 是晶格的周期函数，

也即是说，平移的本征波函数 $\phi(\vec{r})$ 可写为

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$$，其中 $u(\vec{r})$ 是周期函数.

补充知识1：

N阶平移群有N个一维的不等价不可约表示。

晶格在做平移 $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ 时保持不变，其中

$$n_1 = 0, 1, \cdots, N_1 - 1$$
$$n_2 = 0, 1, \cdots, N_2 - 1$$
$$n_3 = 0, 1, \cdots, N_3 - 1$$

这构成了一个 $N = N_1 N_2 N_3$ 阶平移群.

由于 $(T_{\vec{R}_m})^{-1} T_{\vec{R}_n} T_{\vec{R}_m} = T_{\vec{R}_n}$

可知：N阶平移群的每个元素自成一个共轭类，即共轭类数目是N.

对于有限群，共轭类数目 = 不可约表示数目

因此，N阶平移群的不可约表示数目也是N.

将这N个不可约表示标记为 $\alpha = 1, 2, \cdots, N$，它们的维数 n_α 满足 $\sum_{\alpha=1}^{N} n_\alpha^2 = N$

$\longrightarrow n_\alpha = 1$

即是说，N阶平移群的N个不可约表示都是一维的.

补充知识2：

波矢 k 可以标记平移群的不可约表示。

平移的本征函数 $\phi(\vec{r})$ 满足

$$T_{\vec{R}_n}\phi(\vec{r}) \equiv \phi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}_l\cdot\vec{R}_n}\phi(\vec{r})$$

其中 $\vec{R}_n \equiv n_1\vec{a}_1+\cdots+n_3\vec{a}_3$

$$\vec{k}_l \equiv \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1+\cdots+\frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3$$

每一个 $\vec{k}_l$（或 $l=(l_1,\cdots,l_3)$）可以标记平移群的一个不可约表示，

$\phi(\vec{r})$ 是这个一维不可约表示的基底，它满足

$$T_i\phi(\vec{r}) \equiv \phi(\vec{r}+\vec{a}_i) = e^{i2\pi\frac{l_i}{N_i}}\phi(\vec{r})$$

若 $\vec{k}'$ 与 $\vec{k}$ 只差一个倒格矢：

$$\vec{k}'-\vec{k} = \vec{K}_m \equiv m_1\vec{b}_1+\cdots+m_3\vec{b}_3 \quad (m_i\in\mathbb{Z})$$

则它们对应同一个不可约表示，即 $e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}_n} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$

Proof: $e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}_n} = e^{i(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{R}_n} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}e^{i\vec{K}_m\cdot\vec{R}_n}$

而 $\vec{K}_m\cdot\vec{R}_n = (m_1\vec{b}_1+\cdots+m_3\vec{b}_3)\cdot(n_1\vec{a}_1+\cdots+n_3\vec{a}_3)$

$= 2\pi(m_1n_1+\cdots+m_3n_3)$

$= 2\pi\cdot(\text{integer})$

$\rightarrow e^{i\vec{K}_m\cdot\vec{R}_n} = 1$

为了使平移群的每一个不可约表示对应唯一的$\vec{k}$，

即使 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$ 这个本征值对应唯一的$\vec{k}$，

可将 $\vec{k}_l = \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \cdots + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3$ 限制在如下区间：

$$\begin{cases} l_1 = 0, 1, \cdots, N_1 - 1 \\ \cdots\cdots \\ l_3 = 0, 1, \cdots, N_3 - 1 \end{cases}$$

此时，$\vec{k}_l \cdot \vec{a}_i = \sum_{j=1}^{3} \frac{l_j}{N_j} \underbrace{\vec{b}_j \cdot \vec{a}_i}_{= 2\pi\delta_{ij}} = 2\pi \frac{l_i}{N_i}$

$(l_i = 0, 1, \cdots, N_i - 1)$

$\rightarrow \quad \vec{k}_l \cdot \vec{a}_i \in [0, 2\pi) \qquad (i = 1, 2, 3)$

补充知识3：

平移群的不可约表示与第一布里渊区的波矢是一一对应的。

为了使这个区域相对于$\vec{k}=0$对称，

可将 $\vec{k}_l \cdot \vec{a}_i$ 的 $(\pi, 2\pi)$ 区间取值减去周期2π，

则有

$$\vec{k}_l \cdot \vec{a}_i \in (-\pi, \pi] \qquad (i = 1, 2, 3)$$

$\vec{k}_l$ 的这一区域被称为第一布里渊区.