Доклады Академии наук СССР
1973. Том 209, № 2

УДК 539.01 ФИЗИКА

Б. А. МЕНЬ, А. Н. МЕНЬ, В. И. ЧЕРЕПАНОВ

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПЕРАЦИИ ПЛЕТИЗМА ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ РАЗРЕШЕННЫХ ТЕРМОВ ПРИМЕСНЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРИСТАЛЛЕ

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 25 V 1972)

Расчет энергетического спектра комплекса примесных парамагнитных ионов в кристалле существенно облегчается, если провести заранее теоретико-групповую классификацию разрешенных термов. Решение этой задачи встречается с большими техническими трудностями для многоэлектронных многоядерных комплексов ([1], [2]). В настоящей работе предлагается использовать для этой цели операцию плетизма представлений групп ([3]).

Пусть имеется группа G, неприводимые представления которой обозначим Γ_i. Возьмем некоторый набор, содержащий m штук $\Gamma(\Gamma_{i_1}\ldots\Gamma_{i_m})$, среди которых могут быть и повторяющиеся. Рассмотрим группу $M\equiv G\times G\times\ldots\times G\leftthreetimes S_m$ (знак $\leftthreetimes$ означает полупрямое произведение группы $G_0\equiv G\times G\times\ldots\times G$ на группу перестановок S_m) со следующим законом умножения:

$$\Bigl\{g_1g_2\ldots g_m\underbrace{\begin{vmatrix} i_1i_2\ldots i_m\\ 1\;2\quad m\end{vmatrix}}_{P_i\in S_m}\Bigr\}\{h_1h_2\ldots h_m\,|\,P_j\}=\{g_1h_{i_1i_m}\ldots g_mh_{i_m}\,|\,P_iP_j\}. \quad (1)$$

Зафиксируем неприводимое представление $[\lambda]$ группы S_m. Теперь с помощью набора $(\Gamma_{i_1}\ldots\Gamma_{i_m})$ и $[\lambda]$ можно построить представление D группы M, характер $\chi^{(D)}$ которого на произвольном элементе $t=\{g_1\ldots g_m|P_i\}$ вычисляется следующим образом:

1) записываем перестановку P_i в виде произведения циклов

$$P_i=(\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{r_1})(\beta_1\beta_2\ldots\beta_{r_2})\ldots;$$

2) расставляем $\Gamma_{i_1}\ldots\Gamma_{i_m}$ произвольным образом на m местах, так чтобы если $(\alpha_1\ldots\alpha_{r_1})$ — цикл в P_i, то на местах $\alpha_1\ldots\alpha_{r_1}$ стоит одно и то же Γ_α;

3) для каждой такой расстановки вычисляем

$$\chi_0=\chi^{(\Gamma_\alpha)}(g_{\alpha_1}\ldots g_{\alpha_{r_1}})\,\chi^{(\Gamma_\beta)}(g_{\beta_1}\ldots g_{\beta_{r_2}})\ldots;$$

4) составляем сумму χ_0 по всем таким расстановкам;

5) умножаем ее на $\chi^{[\lambda]}(P_i)$.

Представление D назовем **плетизмом набора** $(\Gamma_{i_1}\ldots\Gamma_{i_m})$ с $[\lambda]$ $(D=(\Gamma_{i_1}\ldots\Gamma_{i_m})\boxtimes[\lambda])$.

Если $G=S_n$ — симметрическая группа, то группу $M\equiv S_n\times\ldots\times S_n\leftthreetimes S_m$ можно представить себе состоящей из таких перестановок группы S_{nm}, которые переводят символы одного прямого сомножителя целиком в другой в зависимости от $P_i\in S_m$. При таком подходе группа M будет подгруппой S_{nm}. Выбираем набор $([\lambda_{i_1}],[\lambda_{i_2}],\ldots,[\lambda_{i_m}])$ неприводимых представлений группы S_n и $[\lambda]$-группы S_m. Составляем плетизм $D=([\lambda_{i_1}]\ldots[\lambda_{i_m}])\boxtimes[\lambda]$; D — представление группы M. Находим индуцированное представление $D^{(S_{nm})}$ с группы M на группу S_{nm}. Представление $D^{(S_{nm})}$ будем называть плетизмом П схем Юнга в случае, когда $G = S_n$ — симметрическая группа. Покажем, как вычислять плетизм схем Юнга

$$\Pi = ([\lambda_{i_1}],\ [\lambda_{i_2}], \ldots,\ [\lambda_{i_m}]) \boxtimes [\lambda]. \tag{2}$$

1) Если $[\lambda_{i_1}] = [\lambda_{i_2}] = \ldots = [\lambda_{i_m}] \equiv [\lambda_i]$, то

$$\Pi = [\lambda_i] \otimes [\lambda], \tag{3}$$

где $\otimes$ означает обыкновенный плетизм, правила вычисления которого изложены в ([3]).

2) Пусть в наборе $[\lambda_i]$ имеется $n_1 - [\lambda_{i_1}]$, $n_2 - [\lambda_{i_2}]$ и т. д. Разлагаем $[\lambda]$ на группе $S_{n_1} \times S_{n_2} \times \ldots$ по правилу Литлвуда ([4]):

$$[\lambda] = \sum_{[\lambda_1],\,[\lambda_2]\ldots} a_{\lambda_1\lambda_2\ldots}\, [\lambda_1] \cdot [\lambda_2] \ldots \tag{4}$$

Теперь

$$\Pi = \sum_{[\lambda_1],\,[\lambda_2]\ldots} a_{\lambda_1\lambda_2\ldots}\, [\lambda_{i_1}] \otimes [\lambda_1] \cdot [\lambda_{i_2}] \otimes [\lambda_2] \ldots \tag{5}$$

При вычислении (5) сначала выполняем плетизм $\otimes$, а потом внешнее тензорное произведение $\cdot$.

Применим вышеизложенное к конкретным физическим задачам. Изложим процедуру нахождения разрешенных термов примесных комплексов в случае одинаковых спинов или одинаковых орбит. Для дальнейшего существенно, что группа симметрии комплекса G_k содержится в группе $M \equiv G \times G \times \ldots \times G \leftthreetimes S_N$, если G — группа локальной точечной симметрии атома. Пусть имеем N примесных одинаковых атомов, каждый из которых содержит n электронов. I-й атом находится в состоянии $\Gamma_i[\lambda_i]$. Ограничимся случаем, когда либо все Γ_i, либо все $[\lambda_i]$ совпадают. Для нахождения разрешенных термов поступаем следующим образом:

1) Выбираем произвольную схему Юнга $[\lambda]$ группы S_N.

2) Строим плетизм $D = (\Gamma_1\Gamma_2 \ldots \Gamma_N) \boxtimes [\lambda]$. Это представление группы M. Как мы подчеркнули выше, группа точечной симметрии комплекса G_k содержится в M. Разлагая D на группе G_k, получаем орбитальные состояния комплекса.

3) Строим плетизм $\Pi = ([\tilde\lambda_1],\ [\tilde\lambda_2] \ldots [\tilde\lambda_N]) \boxtimes [\lambda]$, ограничиваясь только физическими схемами (содержащими не более двух столбцов).

4) Приписываем получившиеся в п. 3) спины орбитальным состояниям в п. 2).

5) Перебирая $[\lambda]$ получаем все возможные разрешенные термы.

Пример 1. Пара $Mn^{3+} : Al_2O_3$. Оба иона Mn^{3+} находятся в состоянии ^5E, $G \equiv C_3$, $G_k \equiv D_3$, $M = C_3 \times C_3 \leftthreetimes S_2$. В D_3 входят элементы $\bar{E}\{ee|e\}$, $\bar{C}_3\{C_3C_3^{-1}|e\}$, $C_3^{-1}\{C_3^{-1}C_3|e\}$, $\bar{U}_2\{ee|(12)\}$, $\bar{U}_2\{C_3C_3^{-1}|(12)\}$, $\bar{U}_2\{C_3^{-1}C_3|(12)\}$.

1) $[\lambda]$;

2) $D = (EE) \boxtimes [\lambda]$;

$$\chi^{(D)}(\bar{E}) = \chi^{(E)}(e)\chi^{(E)}(e)\chi^{[\lambda]}(e),$$

$$\chi^{(D)}(\bar{U}_2) = \chi^{(E)}(e^2)\chi^{[\lambda]}(12),$$

$$\chi^{(D)}(\bar{C}_3) = \chi^{(E)}(C_3)\,\chi^{(E)}(C_3^{-1})\,\chi^{[\lambda]}(e).$$

$\chi^{(D)}(\bar{E})$	$\chi^{(D)}(\bar{C}_3)$	$\chi^{(D)}(\bar{U}_2)$
4	1	2
4	1	—2

$$2A_1 + E \leftrightarrow [\lambda] = [2],$$

$$2A_2 + E \leftrightarrow [\lambda] = [1^2];$$

3) $([1^4], [1^4]) \boxtimes [2] = [1^4] \otimes [2] = [1^8] + [2^2 1^4] + [2^4]$,
$([1^4], [1^4]) \boxtimes [1^2] = [1^4] \otimes [1^2] = [21^6] + [2^3 1^2]$;

4) $2A_1 + E \leftrightarrow [1^8], [21^6], [2^4]$,
спин $\longrightarrow$ 4 2 0;
$2A_2 + E \leftrightarrow [21^6], [2^3 1^2]$,
спин $\longrightarrow$ 3 1;

5) $2^9A_1, 2^5A_1, 2^1A_1, 2^2A_2, {}^1E, {}^3E, {}^5E, {}^7E, {}^9E$.

Пример 2. Пара Cr^{3+} в Al_2O_3. Один ион в состоянии ${}^4E$, другой — ${}^2E$, $G = C_3$, $G_k = D_3$. Аналогично первому примеру для орбитальных состояний имеем

1) $[\lambda] = [2] \leftrightarrow 2A_1 + E$;
2) $[\lambda] = [1^2] \leftrightarrow 2A^2 + E$;
3) $([\widetilde{3}], [\widetilde{2, 1}]) \boxtimes [2] = /\underline{[2] = [1][1]}/$
$[13] \otimes [1] \cdot [21] \otimes [1] = [1^3][21] = [21^4] + [2^2 1^2]$
$/\underline{[1^2] = [1][1]}/$
$([\widetilde{3}], [2, 1]) \boxtimes [1^2] = [21^4] + [2^2 1^2]$;
4) $2A_1 + E \leftrightarrow [21^4], [2^2 1^2]$,

	$[21^4]$	$[2^2 1^2]$
спин	2	1

$2A_2 + E \leftrightarrow [21^4], [2^2 1^2]$;
5) $2^5A_1, 2^3A_1, 2^5A_2, 2^3A_2, 2^5E, 2^3E$.

Таблица 1

Пара ($N = 2$) (группы C_2)	Триада ($N = 3$) (группы D_3)	Тетраэдр ($N = 4$) (группы T_d)
1, 5, 9, 13 A	4, 6, 8, 10, 12, 16 A_1	1, 5, 9, 11, 13, 17 (2) (2) A_1
3, 7, 11, 15 B	4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 22 (2) A_2	1, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23, 25, 29 (3) (3) (2) (3) (2) (3) (2) A_2
	2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20 (2) (3) (2) (2) (2) E	1, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 25 (3) (4) (2) (5) (2) (5) (2) (3) (2) E
		3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23, 25, 27 (4) (3) (6) (5) (7) (5) (6) (4) (4) (2) (2) F_1
		3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23 (3) (3) (5) (4) (5) (4) (4) (2) (2) F_2

Пример 3. Каждый из N атомов, $N = 2, 3, 4$, содержащий 7 электронов, находятся в s-состоянии с мультиплетностью 8. Разрешенные термы приведены в табл. 1 (использованы следующие обозначения: ${}^{14,16}_{(2)}E$ означает состояния $2^{14}E$, ${}^{16}E$ и т. д.).

Институт металлургии
Уральского научного центра Академии наук СССР

Уральский государственный университет
им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило
15 V 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] В. И. Черепанов, А. А. Щетков, ЖЭТФ, 55, 1805 (1968). [2] Н. Г. Каплан, О. Б. Родимова, ЖЭТФ, 55, 1881 (1968). [3] В. Ванагас, Алгебраические методы в теории ядра, Вильнюс, 1971. [4] И. Г. Каплан, Симметрия многоэлектронных систем, «Наука», 1969.