

FONCTIONS D'ONDES SYMETRISEES POUR LE GROUPE D'ESPACE D_{3d}^5 DANS LA METHODE DES LIAISONS FORTES. APPLICATION A NiO DANS SA PHASE ANTIFERROMAGNETIQUE

Reçu le 04/09/2000 – Accepté le 31/03/2003

Résumé

La théorie des groupes est un outil puissant pour le calcul et la classification des états électroniques dans les solides. Elle est utile aussi bien pour les théoriciens qui voudraient faire des calculs de bandes d'énergie que pour ceux qui voudraient les interpréter et les relier à l'observation expérimentale.

Nous avons appliqué la théorie des groupes aux oxydes des métaux de transition dans leur ordre antiferromagnétique afin de déterminer les fonctions d'ondes symétrisées. Nous avons également établi toutes les relations de compatibilité entre les points et les lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin.

Ces résultats sont d'une importance capitale pour l'analyse du problème par la théorie des groupes. Cette analyse permet, entre autres, de comprendre l'origine de la bande interdite dans les semi-conducteurs.

Mots clés: Groupe d'espace, opérateurs de symétrie, fonctions d'ondes symétrisées, opérateur de projection, relations de compatibilité.

Abstract

Group theory is a powerful tool for the calculation and the classification of the electronic states in solids. It is useful as well for the theorists who would like to make calculations of energy bands as for those which would like to interpret them and connect them to the experimental observation.

We applied group theory to the transition metal oxides in their antiferromagnetic ordering in order to determine the symmetrized wave functions. We also established all the compatibility relations between points and lines of high symmetry of the Brillouin zone.

These results are of capital importance to analyze the problem by group theory. Such an analysis allows, in particular, to understand the origin of the forbidden energy band in semiconductors.

Keywords: Space group, symmetry operator, symmetrized wave functions, projection operator, compatibility relations.

M.A. BELKHIR

W. TAZIBT

N. AKROUNE

Laboratoire de Physique Théorique

Groupe de Physique des Solides

Université de Béjaïa

06000 Béjaïa, Algérie

ملخص

إن نظرية الزمر تمنحنا طريقة نظامية لوصف تماثل المواد وتحليل النتائج.

إنها تمون للمعتمد على النظرية دليلا ملزما للتصدي لمشكلة تعقد علاقة النتائج التجريبية مع البنية الإلكترونية للبلورات.

لقد قمنا بتطبيق نظرية الزمر على الأكاسيد المعدنية المتذبذبة في ترتيب ضد المغنطة الحديدية وذلك لتعيين الدوال الموجية المتماثلة لحساب البنية العصابات.

التحليل بطريقة نظرية الزمر تمثل أداة قادرة على فهم مصدر العصابات المحرمة.

الكلمات المفتاحية: الزمر الفضائية التماثل، المعاملات التماثل، الدوال الموجية المتماثلة، المعاملات الإسقاط.

La théorie des groupes s'avère être utile chaque fois que le problème étudié présente des symétries susceptibles de former un groupe au sens mathématique du terme. Elle convient particulièrement à l'étude des propriétés physiques des solides cristallins. La fécondité de la théorie des groupes dans son application à l'étude des propriétés physiques des matériaux résulte de la conjonction de deux concepts mathématiques très différents. Il s'agit de la structure géométrique du cristal avec ses propriétés de symétrie d'une part, et de la possibilité d'exprimer les propriétés physiques d'un matériau en termes de fonctions d'ondes, d'autre part.

Pour mener à bien un calcul de structure de bandes, la construction des fonctions symétrisées, de même que la détermination des relations de compatibilités, sont nécessaires. Les fonctions symétrisées sont calculées en utilisant les tables des caractères du groupe d'espace D_{3d}^5 suivant la technique des opérateurs de projection. Conformément à Slater [1], nous adoptons le point de vue passif pour les éléments de symétrie.

Il faut noter que le choix de l'origine des axes, dans le cas d'une maille primitive contenant plusieurs atomes, donne lieu à un changement d'étiquettes pour les représentations irréductibles.

Ce papier est organisé de la manière suivante :

La première partie est consacrée à l'étude de la symétrie rhomboédrique des oxydes antiferromagnétiques des métaux de transition. Dans la seconde, nous décrivons la manière de construire les fonctions symétrisées. Les résultats obtenus aux différents points et lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin sont présentés dans la troisième partie. Dans la quatrième partie, nous donnons les relations de compatibilités qui existent entre les différentes représentations irréductibles aux points de raccordement des lignes de symétrie de la zone de Brillouin. Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion.

I- ETUDE DE LA SYMETRIE ANTIFERROMAGNETIQUE DES OXYDES DES METAUX DE TRANSITION

Les oxydes des métaux de transition sont des matériaux antiferromagnétiques caractérisés par leur température critique de Néel T_N , leur structure cristalline dépend de la température [2]. Au-dessus de T_N (523 Kelvins pour NiO), l'oxyde de nickel est paramagnétique. Sa structure cristalline est celle de NaCl avec deux ions par maille élémentaire: un ion métal Ni^{++} et un ion oxygène O^{--} .

En-dessous de T_N , les moments magnétiques des ions métal d'un même plan (111) sont parallèles entre eux, tandis que ceux de deux plans successifs (111) sont antiparallèles. Cet ordre magnétique conduit à une symétrie inférieure puisque la cellule unité devient rhomboédrique et contient quatre ions : un ion métal "moment \uparrow ", un ion métal "moment \downarrow " et deux ions oxygène. La nouvelle structure peut être considérée comme constituée de deux sous-réseaux rhomboédriques : le sous-réseau associé au motif "métal \uparrow plus un oxygène", et le sous-réseau associé au motif "métal \downarrow plus un oxygène". Nous passons donc de la structure cubique faces centrées (NaCl) de groupe d'espace O_h^5 [3] à la structure rhomboédrique de groupe d'espace D_{3d}^5 [4].

La figure 1 montre la disposition des ions nickel avec leurs moments magnétiques et des ions oxygène de la maille élémentaire rhomboédrique.

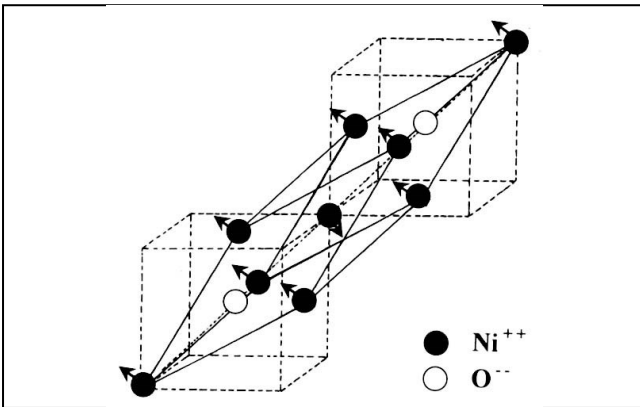


Figure 1 : Maille primitive (en trait continu) du réseau antiferromagnétique de NiO. Les cubes (en trait pointillé) montrent la structure non magnétique de NiO, *i.e.* la structure NaCl. Hormis ceux portés par la grande diagonale, les ions O^{--} et $Ni^{++}(\downarrow)$ ne sont pas représentés.

La figure 2 représente la première zone de Brillouin du réseau de Bravais rhomboédrique. Le domaine irréductible est représenté en trait pointillé.

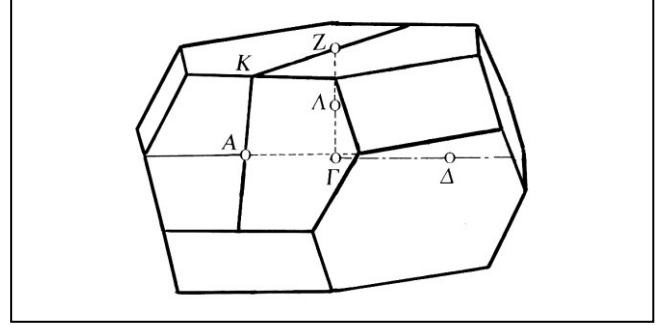


Figure 2 : Zone de Brillouin pour le groupe d'espace D_{3d}^5 avec quelques points et lignes de haute symétrie.

II- CONSTRUCTION DES FONCTIONS SYMETRISEES

La construction des fonctions symétrisées de même que la vérification des relations de compatibilité sont nécessaires pour mener à bien un calcul de structure de bandes. Ces fonctions symétrisées sont obtenues en employant la technique de l'opérateur de projection [5]. Ce dernier est défini par :

$$P_{mn}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \Gamma_j(R)_{mn}^* O_R,$$

où l_j représente la dimension de la représentation irréductible Γ_j , h est l'ordre du groupe ponctuel de symétrie, $\Gamma_j(R)_{mn}^*$ désigne le complexe conjugué de l'élément de matrice $m n$ de Γ_j pour l'opération de symétrie R , et O_R est l'opérateur de symétrie correspondant à R . La sommation porte sur toutes les opérations du groupe ponctuel.

Par définition, l'effet de l'opérateur de symétrie sur une fonction $f(\vec{r})$ est :

$$O_R f(\vec{r}) = f(R^{-1}\vec{r}).$$

Les opérations de symétrie peuvent être utilisées sous le point de vue actif ou le point de vue passif. Une opération de symétrie qui transforme les points repérés par rapport à des axes fixes est dite active. Une opération de symétrie passive consiste à transformer les axes, les points et les vecteurs restant fixes. Dans une cellule élémentaire contenant plusieurs atomes où chacun occupe son propre réseau de Bravais, comme dans le cas de NiO, les représentations irréductibles peuvent changer d'étiquettes lorsque l'origine des axes subit une translation d'un atome à un autre [6]. Dans ce cas, les tables des caractères doivent être adaptées.

III- APPLICATION A NiO

Comme le montre la figure 1, notre maille élémentaire est composée de quatre atomes: un ion métal $Ni^{++} \uparrow$, un ion métal $Ni^{++} \downarrow$, un ion oxygène O^{--} et un ion oxygène O''^{--} .

Partant des configurations électroniques

$$Ni^{++} : 1s^2 2s^2 2p^6 3d^8 4s^0 4p^0$$

$$O^{--} : 1s^2 2s^2 2p^6$$

et ayant en vue la description des dernières bandes de valence et des premières bandes de conduction, les fonctions de Bloch servant de base au développement de la fonction monoélectronique du cristal sont construites à partir des orbitales

$2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ notées s', x', y', z' pour l'ion O'^{--} , et s'', x'', y'', z'' pour l'ion O''^{--} , et $3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{zx}$,

$3d_{3z^2-r^2}, 3d_{x^2-y^2}, 4s, 4p_x, 4p_y, 4p_z$ notées

$d'_{xy}, d'_{yz}, d'_{xz}, d'_{3z^2-r^2}, d'_{x^2-y^2}, S', X', Y', Z'$ pour l'ion

$Ni^{++} \uparrow$, et $d''_{xy}, d''_{yz}, d''_{xz}, d''_{3z^2-r^2}, d''_{x^2-y^2}, S'', X'', Y'', Z''$

pour l'ion $Ni^{++} \downarrow$.

Le groupe d'espace D_{3d}^5 étant symmorphique, i.e. ne possédant pas de translation non primitive, pour calculer les fonctions symétrisées, il suffit de considérer les opérations de symétrie du groupe ponctuel D_{3d} données dans l'appendice.

Notons que par rapport au centre de la maille ($Ni^{++} \downarrow$ sur la figure 1), les opérations $X_{+1}, X_3, X_{-1}, Y_{+1}, Y_3$ et Y_{-1} transforment O' en O'' et vice versa. Autrement dit, ces opérations inversent le signe des coordonnées des atomes de la diagonale et il faut en tenir compte dans les calculs.

Les tables des caractères aux différents points et lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin, que nous avons utilisées, sont celles données dans la référence [1].

Nous donnons ci-dessous les résultats obtenus pour les fonctions symétrisées aux différents points et lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin. Notons que ces tables doivent être adaptées aux points A et Z pour lesquels un changement d'étiquettes a lieu lorsque l'origine des axes est translatée d'un ion Ni^{++} moment \uparrow à un ion Ni^{++} moment \downarrow . Précisons également que nos calculs sont effectués dans le système d'axes liés aux arêtes de la structure cubique.

Au point $\Gamma : (0, 0, 0)$.

Représentation $\Gamma_1 :$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' + s'')$$

$$s'$$

$$s''$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x' + y' + z' - x'' - y'' - z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d'_{xy} + d'_{yz} + d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d''_{xy} + d''_{yz} + d''_{xz})$$

Représentation $\Gamma_3 :$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' - s'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x' + y' + z' + x'' + y'' + z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X' + Y' + Z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X'' + Y'' + Z'')$$

Représentation $(\Gamma_5)_{11} :$

$$d'_{3z^2-r^2}$$

$$d''_{3z^2-r^2}$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}}(-x' - y' + 2z' + x'' + y'' - 2z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d'_{xy} - d'_{yz} - d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d''_{xy} - d''_{yz} - d''_{xz})$$

Représentation $(\Gamma_5)_{22} :$

$$d'_{x^2-y^2}$$

$$d''_{x^2-y^2}$$

$$\frac{1}{2}(x' - y' - x'' + y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{yz} - d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{yz} - d''_{xz})$$

Représentation $(\Gamma_6)_{11} :$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2Z' - X' - Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2Z'' - X'' - Y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}}(x' + y' - 2z' + x'' + y'' - 2z'')$$

Représentation $(\Gamma_6)_{22} :$

$$\frac{1}{2}(x' - y' + x'' - y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X' - Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'')$$

Dans une direction du plan ($Z\Gamma$, ZK).

La représentation paire :

$$\begin{aligned}
 & s' \\
 & s'' \\
 & S' \\
 & S'' \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(x'' + y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X' + Y') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X'' + Y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(x' + y') \\
 & z' \\
 & z'' \\
 & Z' \\
 & Z'' \\
 & d'_{3z^2-r^2} \\
 & d''_{3z^2-r^2} \\
 & d'_{xy} \\
 & d''_{xy} \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{xz} + d'_{yz}) \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{xz} + d''_{yz})
 \end{aligned}$$

La représentation impaire :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(x' - y') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(x'' - y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X' - Y') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{xz} - d'_{yz}) \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{xz} - d''_{yz}) \\
 & d'_{x^2-y^2} \\
 & d''_{x^2-y^2}
 \end{aligned}$$

Au point $A: \frac{\pi}{2a}(-1, -1, 3)$.

Représentation A_1 :

$$S'$$

$$\begin{aligned}
 & Z'' \\
 & \frac{1}{2}(x' + y' + x'' + y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X'' + Y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(z' + z'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(s' - s'') \\
 & d'_{3z^2-r^2} \\
 & d'_{xy}
 \end{aligned}$$

Représentation A_4 :

$$\begin{aligned}
 & S'' \\
 & Z'' \\
 & \frac{1}{2}(x' + y' - x'' - y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X' + Y') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(z' - z'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(s' + s'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{yz} + d''_{xz}) \\
 & d''_{3z^2-r^2} \\
 & d''_{xy}
 \end{aligned}$$

Représentation A_3 :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'') \\
 & \frac{1}{2}(x' - y' - x'' + y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{xz} - d''_{yz}) ?? \\
 & d''_{x^2-y^2}
 \end{aligned}$$

Représentation A_2 :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'') \\
 & \frac{1}{2}(x' - y' + x'' - y'') \\
 & \frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{xz} - d'_{yz}) \\
 & d'_{x^2-y^2}
 \end{aligned}$$

Au point $Z : \frac{\pi}{2a}(1, 1, 1)$.

Représentation $Z_1 :$

$$S'$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' - s'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x' + y' + z' + x'' + y'' + z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d'_{xy} + d'_{yz} + d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X'' + Y'' + Z'')$$

Représentation $Z_3 :$

$$S''$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' + s'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x' + y' + z' - x'' - y'' - z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X' + Y' + Z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d''_{xy} + d''_{yz} + d''_{xz})$$

Représentation $(Z_5)_{11} :$

$$d'_{3z^2-r^2}$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d'_{xy} - d'_{yz} - d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2Z'' - X'' - Y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}}(x' + y' - 2z' + x'' + y'' - 2z'')$$

Représentation $(Z_5)_{22} :$

$$d'_{x^2-y^2}$$

$$\frac{1}{2}(x' - y' + x'' - y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{yz} - d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'')$$

Représentation $(Z_6)_{11} :$

$$d''_{x^2-y^2}$$

$$\frac{1}{2}(x' - y' - x'' + y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X' - Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{yz} - d''_{xz})$$

Représentation $(Z_6)_{22} :$

$$d''_{3z^2-r^2}$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}}(-x' - y' + 2z' + x'' + y'' - 2z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2Z' - X' - Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d''_{xy} - d''_{yz} - d''_{xz})$$

Dans la direction $\Delta : \frac{4\pi}{a}p(1, -1, 0); 0 \leq p \leq \frac{1}{2}$.

Représentation $\Delta_1 :$

$$S'$$

$$S''$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' + s'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x' - y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(z' - z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(y' - x'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X' - Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X'' - Y'')$$

$$d'_{xy}$$

$$d''_{xy}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{yz} + d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{yz} + d''_{xz})$$

$$d'_{3z^2-r^2}$$

$$d''_{3z^2-r^2}$$

Représentation $\Delta_2 :$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(s' - s'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x' + y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x'' + y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(z' + z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{xz} - d'_{yz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{xz} - d''_{yz})$$

$$d'_{x^2-y^2}$$

$$d''_{x^2-y^2}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X'+Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X''+Y'')$$

$$Z'$$

$$Z''$$

Dans la direction $\Delta : \frac{\pi}{a} p (1, 1, 1) ; 0 \leq p \leq \frac{1}{2}$.

Représentation Λ_1 :

$$s'$$

$$s''$$

$$S'$$

$$S''$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(x'+y'+z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(x''+y''+z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X'+Y'+Z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(X''+Y''+Z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d'_{xy} + d'_{yz} + d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(d''_{xy} + d''_{yz} + d''_{xz})$$

Représentation $(A_3)_{11}$:

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x'+y'-2z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(x''+y''-2z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(X'+Y'-2Z')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(X''+Y''-2Z'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d'_{xy} - d'_{yz} - d'_{xz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(2d''_{xy} - d''_{yz} - d''_{xz})$$

$$d'_{3z^2-r^2}$$

$$d''_{3z^2-r^2}$$

Représentation $(A_3)_{22}$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x'-y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x''-y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X'-Y')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(X''-Y'')$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d'_{xz} - d'_{yz})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(d''_{xz} - d''_{yz})$$

$$d'_{x^2-y^2}$$

$$d''_{x^2-y^2}$$

IV- RELATIONS DE COMPATIBILITE

Dans toute structure de bandes, certaines relations dites de compatibilité doivent être satisfaites entre les représentations irréductibles des états situés sur les lignes de symétrie de la zone de Brillouin.

Pour mieux comprendre ce concept de compatibilité, examinons la situation entre le point Γ et la ligne Δ . Lorsqu'on se rapproche indéfiniment du point Γ à partir de la ligne Δ , les niveaux d'énergie en Δ doivent satisfaire, pour des raisons de continuité, des relations de symétrie compatibles avec les représentations irréductibles au point Γ . Considérons, par exemple, le niveau énergétique de symétrie Γ_6 au point Γ de la zone de Brillouin. Ce niveau, étant deux fois dégénéré, appartient à la fois à deux bandes d'énergie. On peut se demander quelles seront les symétries de ces bandes près du point Γ en venant de la ligne Δ . Autrement dit, quelles sont les représentations irréductibles de Δ qui sont compatibles avec Γ_6 ? Pour répondre, commençons par faire remarquer que le groupe du vecteur d'onde en Γ est tout simplement le groupe ponctuel D_{3d} puisque Γ est laissé invariant sous toutes les opérations de symétrie. En conséquence, le groupe du vecteur d'onde en Δ est un sous-groupe du groupe en Γ , et par suite, les représentations irréductibles en Γ sont des représentations, en général réductibles, du groupe en Δ .

Si on connaît les tables de caractères en Γ et Δ , on pourra décomposer les représentations Γ_i du groupe en Γ suivant les représentations de Δ en utilisant la relation bien connue :

$$n_{\Delta} = \frac{1}{g_{\Delta}} \sum_R \chi_{\Gamma_i}^*(R) \chi_{\Delta}(R),$$

où $\chi_{\Gamma_i}^*(R)$ et $\chi_{\Delta}(R)$ désignent respectivement les caractères des représentations Γ et Δ pour l'opération de symétrie R , g_{Δ} l'ordre du groupe en Δ et où la sommation porte sur les éléments du groupe en Δ . n_{Δ} donne le nombre de fois que la représentation Δ (i.e. ici Δ_1 ou Δ_2) est contenue dans Γ_i .

En guise d'exemple, nous donnons ci-dessous le calcul de la relation de compatibilité entre Γ_6 et (Δ_1 et Δ_2). Les

tables des caractères que nous avons utilisées sont celles données par Slater [1]. La formule précédente, appliquée à notre exemple, s'écrit :

$$n_{A_2} = \frac{1}{2} [\chi_{\Gamma_6}^*(X_0)\chi_{A_2}(X_0) + \chi_{\Gamma_6}^*(Y_3)\chi_{A_2}(Y_3)],$$

la somme s'effectuant sur les éléments du groupe en Δ qui sont X_0 et Y_3 .

Sachant que $\chi_{\Gamma_6}(X_0)=2$, $\chi_{\Gamma_6}(Y_3)=0$, $\chi_{A_2}(X_0)=1$, $\chi_{A_2}(Y_3)=1$ et $\chi_{A_1}(Y_3)=-1$, on trouve $n_{A_1}=1$ et $n_{A_2}=1$. On a donc $\Gamma_6 = \Delta_1 \oplus \Delta_2$. Autrement dit, les représentations irréductibles de Δ qui sont compatibles avec Γ_6 sont Δ_1 et Δ_2 .

En termes de bandes d'énergie, ce résultat signifie que le niveau Γ_6 deux fois dégénéré en Γ se sépare, dans la direction Δ , en deux bandes non dégénérées de symétrie Δ_1 et Δ_2 . De la même façon, nous obtenons les relations de compatibilité suivantes pour le groupe d'espace D_{3d}^5 :

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= A_1, & \Gamma_1 &= A_1 \\ \Gamma_2 &= A_2, & \Gamma_2 &= A_2 \\ \Gamma_3 &= A_1, & \Gamma_3 &= A_2 \\ \Gamma_4 &= A_2, & \Gamma_4 &= A_1 \\ \Gamma_5 &= A_3, & \Gamma_5 &= \Delta_1 \oplus \Delta_2 \\ \Gamma_6 &= A_3, & \Gamma_6 &= \Delta_1 \oplus \Delta_2 \\ \\ Z_1 &= A_1 \\ Z_2 &= A_2 \\ Z_3 &= A_1 \\ Z_4 &= A_2 \\ Z_5 &= A_3 \\ Z_6 &= A_3 \end{aligned}$$

CONCLUSION

Nous avons calculé les fonctions de base symétrisées aux différents points et lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour le groupe d'espace D_{3d}^5 , appliqué à NiO dans sa structure antiferromagnétique. On a montré que la translation de l'origine des axes, d'un ion Ni^{++} moment \uparrow à un ion Ni^{++} moment \downarrow , entraîne un changement d'étiquettes pour les représentations irréductibles aux points A et Z de la zone de Brillouin. Nous avons aussi établi les relations de compatibilité entre les représentations irréductibles situées sur les lignes de symétrie de la zone de Brillouin.

En termes de symétrie des bandes, un niveau d'énergie de symétrie Γ_5 ou Γ_6 deux fois dégénérés se séparent dans la direction Δ , conformément aux relations de compatibilité, en deux bandes de symétrie Δ_1 et Δ_2 non dégénérées.

Par conséquent, pour mener à bien le calcul et l'analyse d'une structure de bandes, la construction des fonctions symétrisées et la vérification des relations de compatibilité s'imposent.

REFERENCES

- [1]- Slater J.C., "Symmetry and energy bands in crystals", McGraw-Hill Book Co, Inc, New York (1965).
- [2]- Cracknell P., Joshna S.J., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 66, (1963), p. 493.
- [3]- Koster G.F., "Space Groups and their representations", *Solid Stat. Phys.*, 55, (1957), p.173.
- [4]- Slater J.C., "Quantum theory of molecules and solids", McGraw-Hill book Co, Inc, New York (1965).
- [5]- Hamermesh M., "group theory and its application to physical problems", Dover Publication, (1962).
- [6]- Cornwell J.F., "Origin Dependence of the labelling of Electron States", *Phys. Stat. Sol.*, Vol. B43, (1971), pp. 763. \square

APPENDICE

Opérations du groupe ponctuel D_{3d} avec leur matrice de transformation des axes de coordonnées.

Opération	Matrice de transformation	Opération	Matrice de transformation
X_0	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	X_3	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
X_{+1}	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	X_{-2}	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
X_{+2}	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	X_{-1}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
Y_0	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Y_{+3}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
Y_{+1}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	Y_{-2}	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
Y_{+2}	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Y_{-1}	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$