

Gradu Amaierako Lana / Trabajo Fin de Grado
Fisikako eta Ingeniaritza Elektronikoko Gradu Bikoitza (Fisika) / Doble Grado en Física e Ingeniería Electrónica (Física)

Elektroi Banden Topologiaren Azterketa LCAO Metodoa eta Taldeen Teoria Konbinatuz

Egilea/Autor/a:
Ainhize Barrainkua Aguirre
Zuzendaria/Director/a:
Luis Ángel Elcoro Cengotitabengoa

Gaien Aurkibidea

1	Sarrera eta Helburuak	2
2	Taldeen teoriaren oinarritzko kontzeptuak	4
2.1	Oinarritzko Definizioak	4
2.2	Adierazpenaren Teoria eta Oinarritzko Teoremak	5
2.3	Adierazpen Baten Karakterea	6
3	Taldeen teoria eta kristalografia	9
3.1	Simetria Eragiketen Notazioa	9
3.2	Oinarri Funtzioak	10
3.3	Talde espazialak espazio errealean	12
4	Lotura estuen metodoa eta simetria	17
4.1	Lotura Estuen Ereduaren Formalismoa	17
4.2	Lotura Estuen Metodoa eta Simetria	19
5	Bateragarritasun Erlazioak	23
6	Tokiko-simetria taldea	27
6.1	Tokiko-Simetriaren Hurbilketa	27
6.2	Banden adierazpenak	28
7	Adibide Praktikoa: Bismutoa.	31
8	Ondorioak	38
	Bibliografia	40

Kapitulua 1

Sarrera eta Helburuak

Material baten izaera elektronikoa, energia bandek sasi-momentuari dagokion elkarrekiko espazioan duten egituraren araberakoa da. Balentzia bandaren eta eroapen bandaren artean gainezarmenik dagoen ala ez, materiala eroalea, erdieeroalea edota isolatzailea izanen da. Banda elektronikoek elkarrekiko espazioan duten egitura zehazteko, aipatu espazioko puntu bakoitzaren kasuan, Schrödingerren ekuazioko autobalio zein autoegoerak zehaztu behar dira. Honela, aipatu problemaren ebazpen analitikoaren zailtasuna eta koste tenporala handiak dira.

Hala ere, material baten banda elektronikoak aztertzerako orduan, aipatu materialaren egitura kristalinoak agertzen duen simetriak, nabarmen murrizten du problemaren kostu analitikoa. Izan ere, materialaren egitura kristalinoak agertzen dituen simetrien arabera, talde espazial baten bidez ezaugarritzen ahal da [1]. Horrela, aztertzen den sistemaren espazio zuzeneko simetriak, zenbait mugapen eta baldintza ezarriko ditu banda elektronikoek elkarrekiko espazioan agertzen duten egituren gainean.

Kristal errealetan, puntu batekin lotutako simetria eragiketen konbinazio posibleak finituak dira: 32 zehazki. Oro har, simetria translazionalak kontsideratzean, talde espazialak definitzen ahal dira. Izan ere, kristal baten barne egiturari erreparatzean, erregulari kokatutako atomo zein molekulez osatzen direla ikusten da. Honela, talde espazialei esker, identikoak diren unitateen simetria hartzen da kontuan. Hain zuzen ere, taldeen teoria solido kristalografikoen analisisian aplikatzean, sarea, talde espazialeko simetria elementuen menpean bere buruan transformatzen den sistema fisiko gisa kontsideratzen da. Aitzitik, simetria taldeen elementuak, matrize bidezko adierazpenen arabera deskribatu daitezke, adierazpen hauek laburtezinak zein laburgarriak izan daitezkelarik.

Adierazpen laburtezinek [1] berebiziko garrantzia daukate, sistema mekaniko-kuantiko baten energia mailak anbiguotasunik gabe definitzea ahalbidetzen baitute. Talde kristalografikoen adierazpen laburtezinak taularatuta daude, eta sare kristalografiko bateko atomo baten energia mailak izendatzeko erabiltzen dira. Horrez gain, talde espazialek, ψ_i uhin funtzio bat molekula edo kristalaren Schrödingerren taldeko simetria elementuen eraginaren menpean nola transformatu den zehazten dute.

Kristal osoaren simetria gain, elementu osatzaile ezberdinen (atomo zein molekulen) tokiko-simetria kontsideratzean, egoera hedatuen (energia bandak, kasu) eta lokalizatuen (orbitalak, esaterako) arteko erlazioak definitzen ahal dira [2]-[3].

Aitzitik, simetria ezberdina agertzen duten Brillouinen zonaldeko puntu, lerro zein planoak, bateragarritasun erlazioek definitzen duten gisan lotzen dira [2]-[3], eta horrek, elkarrekiko espazioan bandek agertzen duten egitura mugatuko du. Izan ere, arestian aipatu gisan, energia banda bat, adierazpen laburtezin (edo hauen konbinazio) zehatz baten gisa transformatu da puntu, lerro eta plano horietako bakoitzean. Honela, adierazpen laburtezin ezberdinen arteko konexio posibleak definituta daudelarik,

bandek egitura zehatza agertuko dute elkarrekiko espazioan.

Honenbestez, lan honen xede nagusia, material baten egitura kristalinoaren simetrien araberako banda elektronikoen erduztatzea burutzeko oinarri teorikoaren azalpen laburtu bat burutzea da. Hain zuzen ere, arestian aipatu den gisan, bandek definitzen baitute materialaren izaera. Horretarako, bigarren kapituluan, simetria bidezko analisisien oinarri den taldeen teoriaren definizio zein teorema garrantzitsuenak azalduko dira [1]. Hirugarren kapituluan, taldeen teoria azterketa kristalografikoetara nola hedatzen den azalduko da. Laugarren kapituluan, sistema baten autobalio eta autoegoerak zehazteko metodologia bat aurkeztuko da: lotura estuen metodoa [4]-[5]. Bostgarren kapituluan, elkarrekiko espazioko puntu, lerro eta planoen arteko bateragarritasun erlazioak definituko dira, zeintzuek Brillouinen zonaldean bandek izan ditzaketen ibilbideak baldintzatzen dituzten [2]-[3]. Seigarren kapituluan, atomo (edo molekula) baten espazio zuzeneko tokiko-simetriak elkarrekiko espazioko banda elektronikoen gainean duen eragina aztertuko da [2]-[3]. Azkenik, azaldutako metodologia teorikoa, Bismuto materialaren banda elektronikoen Brillouinen zonaldean duten egitura ondorioztatzeko erabiliko da, izaera topologikoa aztertzeko.

Kapitulua 2

Taldeen teoriaren oinarrizko kontzeptuak

Prozesu fisiko oro, simetria baldintzen ondorio diren hautatze arauak baldintzatuta dago. Sistema fisiko guztietan, autoegoeren ezaugarriak eta autobalioen endekapenak aztergai dagoen sistemaren simetriaren menpekoak dira. Oro har, sistemaren simetria, matrizeekin zein oinarri funtzioekin lotu daiteke, adierazpena deritzon deskribapenaren bitartez. Horrela, sistemaren simetria aztertuz, sistemaren oinarrizko ezaugarriak zehaztu eta ulertu daitezke. Sistemaz gain, magnitude fisikoak ere aztertu daitezke simetria baliatuz, elkarrekintza zein fase trantsizioen aurrean agertzen duten transformazioen bitartez. Honela, kapitulu honetan, taldeen teoriarekin [1] lotutako oinarrizko kontzeptuak azaltzen dira, talde puntualetan oinarrituz.

2.1 Oinarrizko Definizioak

Taldearen definizioa. A, B, C, \dots elementuek osatzen duten multzoak *taldea* \mathcal{G} osatuko du, ondoko baldintzak betetzen badira:

- Bi elementuren arteko biderketaren emaitza taldeko elementu bat da.
- Elkartze legea betetzen da: $(AB)C = A(BC)$
- Identitate elementua existitzen da: E . Elementu honen eta taldeko edozein elementuren arteko biderketak aldagaitz uzten du elementua: $AE = EA = A$
- Elementu bakoitzerako alderantzizkoa existitzen da: A^{-1} , non: $AA^{-1} = A^{-1}A = E$

Taldeko elementuen arteko biderketen emaitzak, taldea ezaugarritzen duen *biderkaketa taulan* jasotzen dira. Orokorrean, taldeko elementuek ez dute elkarrekin konmutatzen, hots, $AB \neq BA$. Hala ere, talde bateko elementu guztiak elkarrekiko konmutagarriak badira, taldeari *talde Abeliarra* deritzo.

1. Definizioa. *Taldearen ordena* $|\mathcal{G}|$, taldean dagoen elementu kopuruari deritzo.

2. Definizioa. *Azpitaldea*, talde bateko elementu batzuekin osatutako multzo bat da, bere horretan talde izateko baldintzak betetzen dituena.

3. Definizioa. \mathcal{B}, \mathcal{G} taldearen azpitalde bat bada, eta $X \in \mathcal{G}$ taldeko elementua, $EX, B_1X, B_2X, \dots, B_gX$ elementu multzoa \mathcal{B} -ren eskuineko *albo-klasea* (*coset*, ingelesez) da, $E, B_1, B_2, \dots, B_g \in \mathcal{B}$ taldearen elementuak izanik.

4. Definizioa. B elementu bat A elementuaren *konjokatua* izango da, baldin eta $B \equiv XAX^{-1}$ bada, X taldeko ausazko elementu bat izanik.

5. Definizioa. *Klasea*, taldeko elementu batetik abiatuz, konjokazio bidez lor daitekeen elementuen multzoa da.

Talde Abeliarren kasuan, zeinetan elementu guztiak elkarrekiko konmutagarriak diren:

$$XAX^{-1} = XX^{-1}A = A \quad (2.1)$$

beteko da, X taldeko elementu guztien kasuan. Beraz, elementu adina klase egongo dira, elementu bakoitza klase ezberdin batean egongo baita, bere buruarekin.

6. Definizioa. B azpitalde bat *normala* (edo *auto-konjokatua*) izango da, baldin eta $A \equiv XAX^{-1}$ betetzen bada taldeko X elementuaren aukera guztietarako.

2.2 Adierazpenaren Teoria eta Oinarrizko Teoremak

7. Definizioa. Bi talde *isomorfitikoa* edo *homomorfitikoa* izango dira, beraien elementuen arteko korrespondentzia existitzen bada. Bi taldeek elementu kopuru bera badute *isomorfitikoa* izango dira eta banan-banango korrespondentzia izango dute. Bestela, *homomorfitikoa* izanen dira, anitz-bat korrespondentziarekin.

8. Definizioa. Talde baten *adierazpena*, matrize karratuez osatutako talde bat da. Talde hau, adierazi nahi duen jatorrizko taldearekiko isomorfitikoa edo homomorfitikoa da.

9. Definizioa. Adierazpen baten *dimentsionalitatea*, adierazpeneko matrizeen dimentsioak zehazten du; hots, zutabe edota lerro kopuruak.

10. Definizioa. Adierazpen matrizial bateko matrizeak bloke forma bera izatera eraman badaitezke, adierazpena *laburgarria* da. Bestela, *laburtezina* izango da. Honenbestez, adierazpen laburtezin bat ezin adierazi daiteke dimentsionalitate txikiagoko adierazpenen funtzio gisa.

Egoera solidoen fisikan, esaterako, adierazpen laburtezinetakako bakoitzak, autofuntzio multzo baten ezaugarrien transformazioa adierazten du, eta energiaren balio ezberdinei dagokie.

1. Teorema. Determinante ez nuluak dituzten matrizeekin eraikitako adierazpen oro, forma unitario batera bihurtu daiteke antzekotasun transformazio baten bitartez.

Ortogonalitate Teorema Zoragarria. Ondoko ortonormalitate baldintza, talde bati dagozkion eta baliokideak ez diren adierazpen laburtezin guztiek betetzen dute:

$$\sum_R D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(R) D_{\nu'\mu'}^{(\Gamma_{j'})}(R^{-1}) = \frac{h}{l_j} \delta_{\Gamma_j, \Gamma_{j'}} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (2.2)$$

Batura taldeko R elementu guztien gainekoa da. Γ_i -ak, taldearen adierazpen laburtezinak dira, eta l_j eta $l_{j'}$ parametroak, Γ_j eta $\Gamma_{j'}$ adierazpenen dimentsionalitateak, hurrenez hurren. Bestalde, $D^{(\Gamma_i)}(R)$, R elementuaren (Γ_i) adierazpen laburtezinako adierazpen matriziala da.

Adierazpenak unitarioak badira, ortonormalitate baldintza honela berridatz daiteke:

$$\sum_R D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(R)[D_{\nu'\mu'}^{(\Gamma_{j'})}(R)]^* = \frac{h}{l_j} \delta_{\Gamma_j, \Gamma_{j'}} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (2.3)$$

Adierazpenak eta Bektore Espazioak. Kotsideratu h -dimentsionala den bektore espazioa, h taldearen ordena izanik (elementu kopurua). $D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(R)$ adierazpenak, espazio honetako elementuak kotsidera daitezke:

$$V_{\mu, \nu}^{(\Gamma_i)} = [D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(A_1), D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(A_2), \dots, D_{\mu\nu}^{(\Gamma_i)}(A_h)] \quad (2.4)$$

Γ_i , μ eta ν indizeek bektore partikular bat zehazten dute. Honela, bi adierazpen ortogonalak izango dira hiru indizeetako edozein ezberdina badute.

2.3 Adierazpen Baten Karakterea

2. Teorema. Klase bateko elementu ororen karakterea berdina da.

11. Definizioa. R taldeko elementuaren $D^{(\Gamma_i)}(R)$ adierazpen matrizialari dagokion *karakterea* $\chi^{(\Gamma_i)}(R)$, matrice adierazpenaren trazari dagokio:

$$\chi^{(\Gamma_i)}(R) = \text{traza} \quad D^{(\Gamma_i)}(R) = \sum_{\mu=1}^{l_j} D^{(\Gamma_i)}(R)_{\mu\mu} \quad (2.5)$$

l_j , Γ_j adierazpenaren dimentsionalitatea delarik. Γ_j adierazpenek h karaktere izanen dituzte, taldeko elementu bakoitzeko bat. Talde bateko adierazpenen karaktereak *karakterea taulan* jasotzen dira. Taula honetan, adierazpen laburtezinak zutabe batean adierazten dira eta klaseak lerro gisa. Adierazpen bat laburtezina baldin bada, dagokion karakterea *primitiboa* izanen da, eta horiek dira karaktere tauletan jaso ohi direnak.

Oro har, matrice baten traza aldaezina da antzekotasun transformazioen aurrean, eta ondorioz, karakterea ere.

Karakterearentzako Ortogonalitate Teorema Zoragarria. Adierazpen laburtezin bateko karaktere primitiboek ondoko ortogonalitate baldintza betetzen dute:

$$\sum_R \chi^{(\Gamma_i)}(R) \chi^{(\Gamma_{j'})}(R^{-1}) = h \delta_{\Gamma_j, \Gamma_{j'}} \quad (2.6)$$

Honenbestez, adierazpen laburtezin bateko karaktere primitiboek ortogonalak diren bektore multzo bat osatzen dute h -dimentsionala den *talde-elementuen* espazioan. Espazio hau Hilbert-en espazio gisa ere ezagutzen da.

Adierazpen orok adierazpen unitario baliokide bat duenez, eta karakterea aldaezin mantentzen denez transformazio unitarioen menpean, honela berridatz daiteke (2.6) ekuazioa:

$$\sum_R \chi^{(\Gamma_i)}(R) [\chi^{(\Gamma_{j'})}(R)]^* = h \delta_{\Gamma_j, \Gamma_{j'}} \quad (2.7)$$

Hots, adierazpenak identikoak edo baliokideak izan ezean, karaktereak ortogonalak izango dira h dimentsioko espazio batean, h taldearen ordena izanik.

Klase bateko elementu orok karaktere bera duenez, (2.6) batura honela berridatz daiteke:

$$\sum_k N_k \chi^{(\Gamma_i)}(C_k) [\chi^{(\Gamma_{j'})}(C_k)]^* = h \delta_{\Gamma_j, \Gamma_{j'}} \quad (2.8)$$

non N_k -k k klasean dagoen elementu kopurua adierazten duen eta C_k parametroak klaseko elementueta-ko bakoitza. Honenbestez, karakterearen bitartez, adierazpen baten banakortasuna ziurtatzen ahal dugu teorema honi esker.

3. Teorema. Bi adierazpen baliokideak izateko nahitaezko eta nahikoa den baldintza da karaktereak berdinak izatea.

4. Teorema. Laburgarria den edozein adierazpenen murrizketa, dagozkion elementu laburtezinetan, bakarra da.

Honenbestez, $\chi(C_k)$ laburgarria den adierazpen bateko klase baten karakterea bada, adierazpen laburtezinaren karaktereen konbinazio lineal gisa idatz daiteke:

$$\chi(C_k) = \sum_{\Gamma_i} a_i \chi^{(\Gamma_i)}(C_k) \quad (2.9)$$

a_i koefizienteak, zenbaki oso ez-negatiboak direlarik. Koefiziente hauek, adierazpen laburgarrian, Γ_i adierazpen laburtezina zenbat aldiz agertzen den adierazten du.

5. Teorema. Talde bati dagokion adierazpen laburtezin kopurua bat dator taldearen klase kopuruarekin.

Talde Abeliarren kasuan, adierazpen laburtezin kopurua, taldean dauden elementuen kopuruaren berdina da; elementu bakoitza klase batean baitago, bakarrik. Klase bakoitzak elementu bakarra duenez, laburtezinak diren adierazpen guztiak dimentsio bakarrekoak dira.

Karaktereentzako Bigarren Ortogonalitate Erlazioa. Baldintza hau adierazpen laburtezinaren gaineko batuketari dagokio:

$$\sum_{\Gamma_j} \chi^{(\Gamma_j)}(C_k) [\chi^{(\Gamma_{j'})}(C'_k)]^* N_k = h \delta_{k, k'} \quad (2.10)$$

Honenbestez, Karaktereentzako Ortogonalitate Teorema Zoragarriak karaktere taulako lerroen arteko ortogonalitate erlazioa definitzen du, eta bigarren ortogonalitate erlazio honek, zutabeentzako ortogonalitate erlazioa.

Adierazpen Erregularra. Adierazpen erregularrak, talde baten adierazpen laburtezin oro aurkitzeko algoritmo bat eskaintzen du, nahiz eta sarri ez den metodorik bizkorrena. Adierazpen erregularra lortzeko, taldeari dagokion biderketa taulan, lerroak eta zutabeak birmoldatu behar dira, identitate elementua diagonal nagusian egon dadin. Taldeko elementuak zutabeen gaineko aldean egongo dira, eta alderantzizkoak lerroen hasieran. Azkenik, X elementu baten adierazpen erregularra lortzen da taulan X agertzen den lekuan 1 jarri eta 0 ezarri beste posizio guztietan.

6. Teorema. Adierazpen erregularrak, adierazpen laburtezinetakoko bakoitza agertzen du, adierazpenaren dimentsionalitatea haina aldiz.

7. Teorema. Talde baten ordena (h) eta dagozkion Γ_j adierazpen laburtezinaren dimentsionalitatea (l_j) ondorengo eran daude erlazionatuta:

$$\sum_j l_j^2 = h \quad (2.11)$$

Kapitulua 3

Taldeen teoria eta kristalografia

Kristalografian, elkarloturik dauden atomo zein molekulez osatutako sareak aztertzen dira, hura deskribatzen duten simetria elementuak aintzat hartuz. Sare kristalino baten simetria taldea, aldaezin uzten duten transformazio multzoa da, eta tresna oso erabilgarria da sistema fisikoa deskribatzeko. Sarearen azterketa matematikoa egiteko, kristal osoaren bloke eraikitzaile gisa jarduten duen patroia identifikatu eta aztertzen da. Patroi hori, aldaezin uzten duten simetria eragiketez osatutako \mathcal{G} taldearen bitartez ordezkatu daiteke. Sare periodikoetan, luzera finituko molekulei dagozkien simetria eragiketez gain (islapenak eta biraketak), translazio simetriak zein eragiketa konposatuak daude. Kristal horiei dagozkien simetria taldeei, *talde espazial (kristalografiko)* deritze. Kapitulu honetan, taldeen teoriak baliatuz eta talde espazialak erabiliz, egitura kristalinoen azterketa nola burutu daitekeen deskribatzen da.

3.1 Simetria Eragiketen Notazioa

Simetria eragiketak adierazteko bi notazio erabili ohi dira nagusiki: Schoenflies simetria notazioa eta Hermann-Mauguin notazioa edo notazio internazionala.

Schoenflies Simetria Notazioa.

- E = identitatea
- $C_n = \frac{2\pi}{n}$ -ko biraketa. Bravais-en sareetan $n = 1, 2, 3, 4,$ edo 6 izan daiteke soilik.
- σ = plano batean zeharreko islapena.
- σ_h = plano horizontal batean zeharreko islapena. Islapen planoak biraketa simetria handiena duen ardatzarekiko perpedikularra da.
- σ_v = plano bertikal batean zeharreko islapena. Islapen planoak biraketa simetria handiena duen ardatza du barnean.
- σ_d plano diagonal batean zeharreko islapena. Plano honi plano dihedrala deritzo.
- i = inbertsioa
- $S_n = \frac{2\pi}{n}$ -ko biraketa inpropioa; hots, $\frac{2\pi}{n}$ -ko biraketa eta jarraian plano horizontal batean zeharreko islapena. Ondoko eran ere definitu daiteke: $\frac{4\pi}{n}$ -ko biraketa eta ostean, inbertsioa.
- iC_n = biraketa-inbertsio konposatua.

Hermann-Maugin Simetria Notazioa edo Notazio Internazionala. Kristalografari buruzko testuliburuetan gehien erabiltzen den notazioa da. 3.1 taulak notazio honen eta Schoenflies notazioaren arteko baliokidetasuna jasotzen du.

	Schoenflies	Hermann-Maugin
Biraketa	C_n	n
Roto-inbertsioa	iC_n	\bar{n}
Ispilu plano	σ	m
Islapen plano horizontala	σ_h	$\frac{n}{m}$
Islapen plano bertikala	σ_v	nm
2 islapen plano bertikal ez-baliokide	$\sigma_{v'}$	nmm

3.1. taula: Schoenflies eta Hermann-Maugin notazioen arteko alderaketa.

Hermann-Maugin notazioan, lehenengo sinboloak ardatz edo plano nagusia adierazten du. Bigarren sinboloak ardatz edo plano horrekiko perpendikularra den plano edo ardatza adierazten du (talde kubikoetan izan ezik; hauetan $\langle 111 \rangle$ norabideko ardatzari egiten dio erreferentzia). Hirugarren sinboloak, lehenengo ardatzarekiko perpendikularra den eta bigarrenarekiko π/n angelua osatzen duen ardatz edo plano adierazten du.

Simetria Erlazioak. Simetria eragiketen arteko konmutazio erlazioak ondokoak dira:

1. Inbertsioa konmutagarria da simetria eragiketa puntual guztiekin.
2. Ardatz berdinean zeharreko biraketa guztiak konmutagarriak dira.
3. Biraketa ardatz batekiko biraketak konmutagarriak dira ardatzarekiko perpendikularrak diren plano batean zeharreko islapenekin.
4. Ardatz perpendikularrei dagozkien biraketa sekundarioak konmutagarriak dira.
5. Plano perpendikularretan zeharreko islapenak konmutagarriak dira.
6. σ_h, S_n, C_n simetria eragiketetako bik, hirugarrena dakarte.

32 dira guztira dauden talde puntualak. Horrez gain, 9 talde daude molekular eta klusterrak osatzen dituztenak. Azken talde hauei *talde ikosaedralak* deritze, I_h . Azkenik, badaude *talde erdi-infinituak* ($C_{\infty v}, D_{\infty h}$), ardatz batean zeharreko erabateko simetria dutenak. Talde hauetan, simetria ardatz nagusian, infinitu simetria eragiketa eta klase daude.

3.2 Oinarri Funtzioak

Aurreko kapituluan adierazi denez, adierazpen matrizialak bakarrak ez diren arren, karaktereak badira. Bestalde, adierazpen laburtekin bakoitzarekin lotutako oinarri funtzioak daude. Horiei esker, adierazpen laburtezinei dagozkien simetria elementuen matrizeak eraiki daitezke.

Simetria Eragiketak eta Oinarri Funtzioak. Konsideratu \mathcal{G} taldea, R simetria elementuekin eta \hat{P}_R simetria eragileekin. Izan bitez Γ_n taldeari dagozkion adierazpen laburtekinak. Hori horrela, oinarri bektoreen multzo bat definitu daiteke: $|\Gamma_n j\rangle$. Bektore horietako bakoitza, Γ_n adierazpen laburtezinako *erkide* bat izango da, j indizeak horietako bakoitza izendatzen duelarik. j indizeak har ditzakeen baliok

adierazpen laburtezinaren dimentsionalitatearen bitartez daude mugatuak. Oinarri bektoreek, \hat{P}_R simetria eragilea bere $D^{(\Gamma_n)}(R)$ adierazpen matrizialarekin erlazionatzen dute:

$$\hat{P}_R|\Gamma_n\alpha\rangle = \sum_j D^{(\Gamma_n)}(R)_{j\alpha}|\Gamma_nj\rangle \quad (3.1)$$

Mekanika kuantikoan, Schrödingerren ekuazioko energien autobalioetako bakoitza, dagokion simetria sailkapenaren arabera izendatzen da, zeina simetria taldearen adierazpen laburtezin baten arabera zehazten den. Adierazpenaren dimentsionalitatea $j > 1$ bada, energiaren autobalioen endekapena j baliokoa izango da eta linealki independenteak diren j autofuntzio egongo dira. \hat{P}_R eragile batek uhin-funtzio hauetan eragitean, j oinarri funtzio horiek sortutako konbinazio lineal bat sortzen da, (3.1) ekuazioan ikusten den gisan.

Oro har, oinarri bektoreek ortogonalitate erlazioak betetzen dituzte:

$$\langle\Gamma_nj|\Gamma_{n'}j'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{jj'} \quad (3.2)$$

Oinarri Funtzioen Erabilera Adierazpen Murrizgaitzak Sortzeko. (3.1) ekuazioa $\langle\Gamma_{n'}j'|$ oinarri bektorearekin biderkatzen bada ezker aldean eta oinarri funtzioen ortogonalitate baldintza aintzat hartzen bada, ondokoa lortzen da:

$$\langle\Gamma_{n'}j'|\hat{P}_R|\Gamma_n\alpha\rangle = \sum_j D^{(\Gamma_n)}(R)_{j\alpha}\langle\Gamma_{n'}j'|\Gamma_nj\rangle = D^{(\Gamma_{n'})}(R)_{j'\alpha}\delta_{nn'} \quad (3.3)$$

Ekuazio honetatik, simetria eragile bakoitzak oinarri funtzioetan duen eragina eta $D^{\Gamma_n}(R)_{j\alpha}$ matrize elementuen arteko erlazioa lor daiteke:

$$D^{\Gamma_n}(R)_{j\alpha} = \langle\Gamma_nj|\hat{P}_R|\Gamma_n\alpha\rangle \quad (3.4)$$

Berdintza hau haintzat hartuz, simetria elementuen adierazpen matrizialak eraiki daitezke.

Ortonormalitate baldintzak betetzeko, oinarri funtzioak luzera unitateko bektoreak izan behar dira, eta simetria eragiketak adierazten dituzten matrizeak, matrize unitarioak.

Adierazpen matrizialekin gertatzen den gisan, oinarri funtzioak ere ez dira bakarrak. Hala ere, oinarri funtzioen multzo zehatz baterako, funtzio hauek sortzen duten adierazpen matriziala bakarra da. Honenbestez, arestian definitu den gisan, adierazpen bati dagokion karakterea honela definitu daiteke:

$$\chi^{(\Gamma_n)}(R) = \text{tr}D^{(\Gamma_n)}(R) = \sum_j D^{(\Gamma_n)}(R)_{jj} = \sum_j \langle\Gamma_nj|\hat{P}_R|\Gamma_nj\rangle \quad (3.5)$$

Antzekotasun transformazioen aurrean traza aldaezin mantentzen denez, karakterea, aukeratutako oinarri funtzioen edo adierazpen matrizialaren independentea da.

Talde Teoriaren Aplikazioa Mekanika Kuantikoan. Suposatu E_n energia Schrödingerren ekuazioaren k aldiz endekatutako maila dela. $\psi_{n1}, \psi_{n2}, \dots, \psi_{nk}$ autofuntzioen edozein konbinazio lineal ere Schrödingerren ekuazioaren soluzioa izango da, energia berbera izanik. Autofuntzio hauen gaineko $\hat{P}_R\psi_{n\alpha}$ eragiketa honela idatz daiteke:

$$\hat{P}_R\psi_{n\alpha} = \sum_j D^{(n)}(R)_{j\alpha}\psi_{nj} \quad (3.6)$$

non $D^{(n)}(R)_{j\alpha}$ konbinazio lineala ezaugarritzen duen matrize laburtezin bat den, n energia maila izendatzeko indizea eta α endekapena izendatzeko indizea. $D^{(n)}(R)$ matrizeek, l_n dimentsioko Schrödingerren

ekuazioaren taldearen adierazpen laburtezin bat osatzen dute. Aldi berean, l_n -k E_n energia autobalioen endekapena adierazten du.

Honekin lotuta, R eta S Hamiltondarrarekin konmutagarriak diren bi simetria eragiketa badira, ondokoa betetzen da:

$$\hat{P}_{RS}\psi_{n\alpha} = \hat{P}_R\hat{P}_S\psi_{n\alpha} = \hat{P}_R \sum_j D^{(n)}(S)_{j\alpha}\psi_{nj} = \sum_{jk} D^{(n)}(R)_{kj}D^{(n)}(S)_{j\alpha}\psi_{nk} = \sum_k [D^{(n)}(R)D^{(n)}(S)]_{k\alpha}\psi_{nk} \quad (3.7)$$

Bestalde, definizioz, RS eragilea honela idatz daiteke:

$$\hat{P}_{RS}\psi_{n\alpha} = \sum_k D^{(n)}(RS)_{k\alpha}\psi_{nk} \quad (3.8)$$

Honenbestez:

$$D^{(n)}(RS) = D^{(n)}(R)D^{(n)}(S) \quad (3.9)$$

Mekanika kuantikoko egoerak, egoera bektoreen (oinarri bektoreen) bidez adierazten dira: $|\alpha, \Gamma_n, j\rangle$. Non Γ_n adierazpen laburtezin bat den eta j adierazpeneko erkideetako bakoitza izendatzeko indizea. Horrez gain, kasu honetan, α indizeak, \hat{P}_R eragileen simetriatik at dauden gainontzeko zenbaki kuantikoak adierazten ditu.

Orokorrean, $\hat{P}_R\psi_{n\alpha}$ -ren bitartez eraikitako $D^{(n)}(R)$ adierazpena, adierazpen laburtezina izango da, baldin eta deskonposizioan erabilitako ψ_{nk} guztiak E_n autobalio berdinari badagozkio. Honenbestez, arestian aipatu den gisan, Schrödingerren ekuazioaren taldean, simetria eragiketekin lotutako matrizeek adierazpen laburtezin bat osatzen dute. Horrez gain, adierazpen laburtezin baten dimentsioa, dagokion E_n autobalioaren endekapenaren berdina da. Laburbilduz, Schrödingerren ekuazioaren simetria taldearen adierazpen laburtezinak, sistemaren egoerak eta dagozkien endekapenak zehazten ahal dituzte.

Horrez gain, taldeen teoriari esker, sistema baten simetria murrizten deneko kasuetan, energia mailen endekapena nola aldatzen den aztertu daiteke. Orokorrean, simetria handieneko egoerari dagokion taldearen adierazpen laburtezinak, simetria baxueneko egoeraren adierazpen laburgarriak izango dira.

3.3 Talde espazialak espazio errealean

Sare bat aldaezin uzten duten simetria eragiketek, sarearen \mathcal{G} talde espaziala osatzen dute. Sistema deskribatzeko elektroi bakarreko Hamiltondarraren eta potentzial periodikoaren simetria taldea, kristalaren talde espazialaren berdina izanen da. Talde espazialean, simetria eragiketa translazionalak eta talde puntualaren simetria eragiketak konbinatzen dira.

Talde espazialak. Talde puntualak eta kristala bere baitara eramaten duten translazio simetria eragiketek, *talde espazial* izeneko taldea osatzen dute. Horiek adierazteko Seitz-en notazioa erabili ohi da: $\{R|\vec{\tau}\}$. R -ek talde puntualeko simetria eragiketak adierazten dituztelarik, eta $\vec{\tau}$ -k translazioak.

Talde espazialeko eragiketa konposatuak. Talde espazialean, eragiketa konposatuak aurkitu daitezke; hots, talde puntualeko eragiketen eta translazioen arteko konbinazioak. Horien artean, *irristaketa planoak* eta *torloju ardatzak* daude. Irristaketa planoek, emandako plano baten paraleloa den translazio bat eta plano horretan zeharreko islapena adierazten dute. Bestalde, torloju ardatzek, ardatz baten inguruko biraketa eta ardatzaren paraleloa den translazioa zehazten dute.

Translazio azpitaldea. \mathcal{G} talde espazialean dauden $\{E|\vec{\tau}\}$ motako elementu guztiek, \mathcal{T} translazio taldea osatzen dute. \mathcal{T} talde hau, \mathcal{G} taldeak Bravais-en sarea definitzen du, eta \mathcal{G} taldearen azpitaldea da. Zehazki, \mathcal{T} translazio taldea, \mathcal{G} talde espazialaren azpitalde normal edo autokonjokatuia da. Hala ere, ezin esan daiteke \mathcal{G} taldea, translazio taldearen eta talde puntualaren arteko biderketa zuzenaren emaitza denik.

Translazio eragiketa guztiak elkarrekin konmutagarriak direnez, translazioek talde Abeliarra osatzen dute. Honenbestez, τ translazio eragiketa bat, bektore unitarioen translazioen funtzio adierazten bada,

$$\vec{\tau} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i \quad (3.10)$$

\vec{a}_i bektoreek oinarri primitiboa osatzen dute. Horrela, deskribatutako norabide bakoitzari lotutako translazio eragileak, eragile konmutagarri gisa ikus daitezke:

$$\{E|\vec{\tau}\} = \{E|\vec{\tau}_1\}\{E|\vec{\tau}_2\}\{E|\vec{\tau}_3\} \quad (3.11)$$

non $\vec{\tau}_i = n_i \vec{a}_i$ den.

Translazio Taldearen Adierazpena. $\{E|\vec{\tau}_i\}$ eragileen konmutagarritasunak, 3 azpitalde konmutagarri ematen ditu. Born eta Von Karman-en mugalde baldintza ziklikoak erabiltzen badira, ondokoa betetzen da:

$$\{E|\vec{\tau}_1\}^{\mathcal{N}_1} = \{E|\vec{\tau}_2\}^{\mathcal{N}_2} = \{E|\vec{\tau}_3\}^{\mathcal{N}_3} = \{E|0\} \quad (3.12)$$

non \mathcal{N}_i , $\vec{\tau}_i$ norabideko gelaxka primitibo kopurua den.

Talde ziklikoetan, simetria elementu guztiak konmutagarriak dira, eta beraz, talde Abeliarrak dira. Elementu bakoitza klase batean dagoenez, bere baitan, taldeak dimentsio bakarreko adierazpen laburtezinak izango ditu. Adierazpen laburtezin kopurua bat dator klase kopuruarekin, zeina kasu honetan, taldeko elementu kopuruaren (h) berdina den. $\{E|\vec{\tau}_i\}^{\mathcal{N}_i} = \{E|0\}$ izanik, talde ziklikoaren adierazpen laburtezinetak bakoitza, $\exp(ik_i n_i a_i)$ gisan adierazitako fase faktore edo karaktereak diren matrize multzo gisa idatz daiteke. Balio horiek, unitatearen \mathcal{N}_i erroak adierazten dituzte. $k_i = m_i/\mathcal{N}_i$ parametroak elkarrekiko espazioko \vec{k} bektore baten koordenatuak dira, m_i zenbaki oso bat izanik:

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 k_i \vec{b}_i \quad (3.13)$$

\vec{b}_i elkarrekiko espazioko oinarri bektore primitiboak dira.

k_i parametroek, adierazpen laburtezinak definitzen dituzte. Honenbestez, $\mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2 \mathcal{N}_3 \sim 10^{23}$ adierazpen laburtezin egongo dira. Adierazpen laburtezin bakoitzarekin sistemaren autobalio bat dagoenez lotuta, k_i parametro horiek, energia bandak ere izendatuko dituzte.

Bloch-en Teorema. ψ_k autofuntzio bat, k adierazpen laburtezinari dagokion translazio taldearen eraginpean transformatzen bada, ondoko erlazioa beteko du:

$$\hat{P}_{\{\varepsilon|\tau\}} \psi_k(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r} + \vec{\tau}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{\tau}} \psi_k(\vec{r}) \quad (3.14)$$

Ondorioz, $\psi_k(\vec{r})$ honela definitu daiteke:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}) \quad (3.15)$$

non $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{\tau})$ funtzioak kristalaren simetria osoa duen. Bloch-en funtzioak, \mathcal{T} translazio taldearen oinarri funtzioak dira.

\vec{a}_i norabideetako bakoitzean dagoen gelaxka kopurua \mathcal{N}_i baldin bada (hau da, norabide horietako bakoitzean egin daitekeen translazio kopurua), \vec{k} bektoreen kopurua mugatuta egongo da, eta beraz, bektorearen osagaiak soilik ondoko balioak izan ditzakete:

$$k_i = 0, \pm \frac{2\pi}{\mathcal{N}_i a}, \pm \frac{4\pi}{\mathcal{N}_i a}, \dots, \pm \frac{\pi}{a} \quad (3.16)$$

Mugapen honi esker ziurtatu daiteke adierazpen laburtezinaren kopurua klase kopuruaren berdina dela. Aitzitik, \vec{k} bektore guzti hauek, Brillouin-en lehenengo zonaldean aurkitzen dira.

Talde puntualeko Eragiketen Eragina Bloch-en funtzioetan. Talde puntualeko simetria eragileek, ondoko eran eragiten dute Schrödingerren ekuazioaren autofuntzioen gainean:

$$\hat{P}_{\{R_\alpha|0\}}\psi_k(\vec{r}) = \hat{P}_{\{R_\alpha|0\}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r}) = e^{iR_\alpha\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{R_\alpha k}(\vec{r}) \equiv \psi_{R_\alpha k}(\vec{r}) \quad (3.17)$$

$\psi_{R_\alpha k}(\vec{r})$ autofuntzioak, \mathcal{T} translazio taldearen $R_\alpha\vec{k}$ -garren adierazpen laburtezinako oinarri funtzioak izanen dira.

Talde espazial Simorfikoak eta Ez-Simorfikoak. Talde espazialeko eragiketak honela idatz daitezke:

$$\{R_\alpha|\vec{\tau}\} = \{R_\alpha|\vec{K}_n + \vec{\tau}_\alpha\} = \{E|\vec{K}_n\}\{R_\alpha|\vec{\tau}_\alpha\} \quad (3.18)$$

\vec{K}_n Bravais-en sareko bektore orokor bat izanik eta $\vec{\tau}_\alpha$ bektorea, nulua edota Bravais-en sarearekiko primitiboa ez den translazio bat. Honela, \mathcal{G} talde espaziala *simorfikoa* izango da, baldin eta sare zuzenean jatorri aukeraketa egoki baten bitartez, \mathcal{G} taldearen elementu guztiak $\{R_\alpha|\vec{\tau}\} = \{R_\alpha|\vec{K}_n\} = \{E|\vec{K}_n\}\{R_\alpha|0\}$ erakoak badira. Sare zuzeneko oinarri aukeraketa egokiarekin $\{R_\alpha|\vec{\tau}\}$ eragileetako batentzat gutxienez $\vec{\tau}_\alpha \neq 0$ bada (hots, torloju-ardatzak edota irristaketa planoak baditu), orduan \mathcal{G} talde *ez-simorfikoa* izanen da.

Bravais-en Sarea eta Talde Espazialak. 3 dimentsioko egiturak kontsideratuz, 14 Bravais-en sare kristalografiko posible daude. Bestalde, 230 dira guztirako talde espazialak, horietatik 73 simorfikoak eta 157 ez-simorfikoak. Talde hauek, Bravais-en sarean egitura atomiko ezberdinak ezarrita lortzen dira.

12. Definizioa. \vec{k} uhin-bektorea bere buruan edo baliokidea den $\vec{k} = \vec{k} + \vec{K}_m$ bektore batengan bilakatzen duen talde espazialeko simetria eragiketen multzoak *uhin-bektorearen taldea* $\mathcal{G}^{\vec{k}}$ osatzen dute, \vec{K}_m elkarrekiko sarearen bektore bat izanik. Talde hau \vec{k} -ren *talde txikia* izenez ere izendatzen da.

\vec{K}_m -ren gehikuntzak ez du sistemaren energia aldatzen, hots, \vec{k} eta $\vec{k} + \vec{K}_m$ adierazpen laburtezin translazional berberari dagozkio.

13. Definizioa. \vec{k} uhin-bektore bati talde puntualeko simetria eragiketa guztiak aplikatuz lortzen diren \vec{k}' uhin-bektoreek, \vec{k} -ren *izarra* osatzen dute.


Talde Espazialen Adierazpenak. \vec{k} uhin-bektore bakoitzerako, talde espazialen adierazpenak uhin-bektorearen talde txikian eta \vec{k} -ren izarrean oinarrituz eraikitzen dira. Adierazpenak, $(lq) \times (lq)$ dimentsioko matrize karratuak dira: $q \times q$ matrizeko $l \times l$ bloke. l zenbakiak, \vec{k} -ren izarrean dagoen bektore kopurua adierazten du eta q uhin-bektorearen taldeko adierazpenek zehazten dute. Matrizeko zutabee-tako (edo lerroetako) bakoitzak ez-nulua den $q \times q$ sarrera bakarra izango du, gainontzekoak nulua diren $q \times q$ matrizeak izango direlarik. $l \times l$ blokeen antolamenduak, \vec{k} -ren izarreko bektore ezberdinen simetria deskribatzen du. Ez-nuluak diren $q \times q$ matrizeek, bestalde, \vec{k} zehatz baten eta dagokion taldearen simetria deskribatzen dute. Oro har, talde espazialen adierazpenak [2] estekan aurki daitezke.

14 Definizioa. Brillouinen zonaldeko $\vec{k} = 0$ puntuak talde puntualaren simetria eragiketa guztiak ditu barne, eta ondorioz, *adierazpen handi* deritze puntu horrekin lotutako adierazpenei. Bestalde, Brillouinen zonaldeko simetria txikiagoko puntuetan aurkitzen dituen \vec{k} uhin-bektorearen azpitaldeei, *adierazpen txikiak* deritze.

2 Dimentsioko Talde Espazialak. Talde espazialak adierazteko erabili ohi den notazioa ulertzeko, 2 dimentsioko adibide bat kontsideratu da: $p4gm$. Lehen sinboloak, gelaxka unitarioa deskribatzen du; p hizkiak, gelaxka unitarioa primitiboa dela adierazten du, eta c hizkia izango balu, zentratua dela. 4 sinboloak, 2 dimentsioko kristalaren perpendikularra den ardatz baten inguruko biraketa simetria deskribatzen du. Azken bi sinboloek, baldin eta agertzen badira, ondokoa adierazten dute:

- Kristalaren planoan barne dauden bi ardatz ez baliokideetako simetria eragiketa gehigarriak.
- Ardatz nagusian zeharreko irristaketa plano bat (g)
- Ardatz nagusian zeharreko islapen planoak (m)
- 1 zenbakiak, simetria gehigarriak ez dagoela adierazten du.

Talde espazialei buruzko informazioa liburu anitzetan dago jasota [6], baita zenbait web orritan ere. Esaterako, Bilbao Crystallographic Server (BCS) web zerbitzarian [2], GENPOS programak [3], talde espazial bakoitza osatzen duten simetria eragiketak biltzen ditu. Izatez, talde espazialek infinitu simetria eragiketa dituzte. Honela, aipatu programan agertzen diren simetria eragiketen multzo finituari sare bektoreen multiploak diren translazioak posible guztiak gehituz, aipatu simetria eragiketa multzo infinitua lortzen da. 3.1 irudian, GENPOS programak *Ibam* (#72) talde espazialaren kasuan emandako informazioa ageri da.

No.	(x,y,z) form	Matrix form	Symmetry operation	
			ITA	Seitz 
(0,0,0) + set				
1	x,y,z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	1	{ 1 0 }
2	-x,-y,z	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	2 0,0,z	{ 2 ₀₀₁ 0 }
3	-x+1/2,y+1/2,-z	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	2 (0,1/2,0) 1/4,y,0	{ 2 ₀₁₀ 1/2 1/2 0 }
4	x+1/2,-y+1/2,-z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	2 (1/2,0,0) x,1/4,0	{ 2 ₁₀₀ 1/2 1/2 0 }
5	-x,-y,-z	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	-1 0,0,0	{ -1 0 }
6	x,y,-z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	m x,y,0	{ m ₀₀₁ 0 }
7	x+1/2,-y+1/2,z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	a x,1/4,z	{ m ₀₁₀ 1/2 1/2 0 }
8	-x+1/2,y+1/2,z	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	b 1/4,y,z	{ m ₁₀₀ 1/2 1/2 0 }
(1/2,1/2,1/2) + set click here the show and hide more information				

3.1. irudia: *Ibam* (#72) talde espazialaren kasuan, BCS [2] web zerbitzariko GENPOS programak [3], taldeko simetria eragiketei buruz eskaintzen duen informazioa.

Kapitulua 4

Lotura estuen metodoa eta simetria

Lotura estuen metodoa [4]-[5], egitura kristalino baten banda elektronikoaren egitura ondorioztatzea ahalbidetzen duen hurbilketa bat da. Horretarako, isolatutako atomoen uhin-funtzioen gainezarmen gisa definitutako uhin-funtzio elektronikoen multzo batez baliatzen da. Hots, Hamiltondarraren matrize elementuen parametrizazioa burutzen da, orbital atomiko lokalizatuen antzekoak diren funtzioen bidez, energia banden egitura eta autoegoerak aztertzeko.

Mekanika kuantikoan oinarritzen den eredu honek, solidoetan estu loturik dauden elektroien ezaugarriak deskribatzen ditu. Hau da, hurbilketa honetan, elektroio oro dagokion atomora estuki lotuta egon behar da, inguruko atomoen egoera eta potentzialekin duten elkarrekintza txikia izanik. Honela, elektroien uhin-funtzioa, dagokion atomo askearen orbital atomikoaren antzekoa izanen da.

Orokorrean, hainbat orbital eta energia maila atomiko kontsideratu behar dira hurbilketan. Orbital ezberdinak, adierazpen ezberdinen arabera transformatzen direnez, zenbat eta banda gehiago kontsideratu, hainbat handiagoa da problemaren konplexutasuna. Oro har, elkarrekiko sareak eta Brillouinen zonaldeak agertzen duten simetriei dagokien talde espaziala, solidoaren egitura kristalinoari dagokionaren ezberdina da. Horrez gain, Brillouinen zonaldeko (zein elkarrekiko sareko) puntu ezberdinek, simetria ezberdinak aurkezten dituzte. Honela, elkarrekiko espazioko puntu hauei simetria talde ezberdinak dagozkie, eta beraz, bandetako bakoitza adierazpen ezberdin baten arabera transformatuko da puntu hauetako bakoitzean.

4.1 Lotura Estuen Ereduaren Formalismoa

Suposatu 3D-ko sare bat, ondoko sare bektore eta elkarrekiko sarearen bektoreak dituen:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (4.1)$$

$$\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \quad (4.2)$$

non definizioz:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (4.3)$$

$$e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1 \quad (4.4)$$

Sareko atomoek sare primitiboan dituzten posizioak $r_\alpha^\vec{r}$ posizio bektoreen bidez deskribatzen dira, eta atomoetako bakoitzak $j = 1, \dots, n$ bitartez izendatutako orbitalak ditu. Honela, lotura estuen ereduko

oinarriaren orbitalak honela adierazten dira:

$$\varphi_{\mu,\alpha}(\vec{r} - \vec{R} - \vec{r}_\mu) \equiv \phi_{\vec{R},\mu,\alpha}(\vec{r}) \quad (4.5)$$

Analisia *gutxieneko lotura estuen metodora* mugatuko da, non oinarri orbitalak ortonormalak diren:

$$\langle \phi_{\vec{R},\mu,\alpha} | \phi_{\vec{R}',\mu',\beta} \rangle = \delta_{\vec{R},\vec{R}'} \delta_{\mu,\mu'} \delta_{\alpha,\beta} \quad (4.6)$$

eta posizio matrizeak posible denik eta egitura sinpleena duen:

$$\langle \phi_{\vec{R},\mu,\alpha} | \vec{r} | \phi_{\vec{R}',\mu',\beta} \rangle = (\vec{R} + \vec{r}_\mu) \delta_{\vec{R},\vec{R}'} \delta_{\mu,\mu'} \delta_{\alpha,\beta} \quad (4.7)$$

Hamiltondarrak translazio simetria gorde dezan, dagozkion matrize elementuak ondorengo eran daude definituak:

$$H_{\mu\beta,\mu'\alpha}(\vec{R}) = \langle \phi_{\vec{R}',\mu\beta} | H | \phi_{\vec{R}'+\vec{R},\mu'\alpha} \rangle = \langle \phi_{\vec{0},\mu\beta} | H | \phi_{\vec{R},\mu'\alpha} \rangle \quad (4.8)$$

Suposatzen da $H_{\mu\beta,\mu'\alpha}(\vec{R})$ elementuak oso azkar txikitzen direla \vec{R} handitzean.

Guzti hau kontuan izanik, Bloch-en funtzioen itxurako oinarri funtzioak eraiki daitezke, Fourierren transformatuan oinarrituz. Bi aukera posible daude:

1. Aukera:

$$|\chi_{\mu,\alpha}^{\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}+\vec{r}_\mu)} |\phi_{\vec{R},\mu,\alpha}\rangle \quad (4.9)$$

Ondorioz, Hamiltondarra:

$$H_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} \equiv \langle \chi_{\mu\beta}^{\vec{k}} | H | \chi_{\mu'\alpha}^{\vec{k}} \rangle = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{r}_\mu+\vec{r}_{\mu'})} H_{\mu\beta,\mu'\alpha}(\vec{R}) \quad (4.10)$$

Honenbestez, autoegoerak ondorengoak izanen dira:

$$|\psi_{n\vec{k}}\rangle = \sum_{\mu\beta} C_{\mu\beta}^{n\vec{k}} |\chi_{\mu\beta}^{\vec{k}}\rangle \quad (4.11)$$

eta ebatzi beharreko ekuazio sekularra:

$$H_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} C_{\mu'\alpha}^{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} C_{\mu\beta}^{n\vec{k}} \quad (4.12)$$

2. Aukera:

$$|\tilde{\chi}_{\mu,\alpha}^{\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\phi_{\vec{R},\mu,\alpha}\rangle \quad (4.13)$$

Hamiltondarra:

$$\tilde{H}_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} \equiv \langle \tilde{\chi}_{\mu\beta}^{\vec{k}} | H | \tilde{\chi}_{\mu'\alpha}^{\vec{k}} \rangle = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} H_{\mu\beta,\mu'\alpha}(\vec{R}) \quad (4.14)$$

Autoegoerak:

$$|\psi_{n\vec{k}}\rangle = \sum_{\alpha i} \tilde{C}_{\mu\beta}^{n\vec{k}} |\tilde{\chi}_{\mu\beta}^{\vec{k}}\rangle \quad (4.15)$$

Ekuazio sekularra:

$$\tilde{H}_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} \tilde{C}_{\mu'\alpha}^{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \tilde{C}_{\mu\beta}^{n\vec{k}} \quad (4.16)$$

Ohartu, bi aukerak ezberdinak direla soilik gelaxka bakoitzean atomo bakarra baino gehiago badago. Bestalde, 1. aukeran, Hamiltondarra ez da periodikoa Brillouinen zonaldean, baina translaziorik gabeko simetria eragiketak \vec{k} -ren independenteak izango dira; aldiz, 2. aukerari dagokionez, Hamiltondarra periodikoa da Brillouinen zonaldean. Era baliokidean, $C_{\mu\beta}^{n\vec{k}}$ koefizienteak ez dira periodikoak Brillouinen zonaldean, baina $\tilde{C}_{\mu\beta}^{n\vec{k}}$ koefizienteak bai. Hots, ondoko analogia definitu daiteke:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \Leftrightarrow \tilde{C}_{\mu\beta}^{n\vec{k}} \quad (4.17)$$

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \Leftrightarrow C_{\mu\beta}^{n\vec{k}} \quad (4.18)$$

Oro har, bi aukerak L -dimentsionala den espazioko biraketa unitario baten bitartez daude erlazionatuta, non L gelaxka primitiboko orbital kopurua den:

$$\tilde{H}_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_{\mu} - \vec{r}_{\mu'})} H_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} \quad (4.19)$$

$$\tilde{C}_{\mu\beta}^{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{\mu}} C_{\mu\beta}^{n\vec{k}} \quad (4.20)$$

Aplikazio topologikoetarako, zeinetan sistemaren simetriak aztertzen diren, 1. aukera kontsideratu ohi da. Honenbestez, lan honetan, Fourierren konbentzio hori da erabiliko dena.

Definitu bedi ondorengo matrize diagonalak:

$$V(\vec{k})_{\mu\beta,\mu'\alpha} = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\alpha\beta} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{\mu}} \quad (4.21)$$

zeinari esker ondorengo berdintza deskribatzen ahal den:

$$H_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}+\vec{K}} = e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}_{\mu'} - \vec{r}_{\mu})} H_{\mu\beta,\mu'\alpha}^{\vec{k}} = [V(\vec{K})^{-1} H^{\vec{k}} V(\vec{K})]_{\mu\beta,\mu'\alpha} \quad (4.22)$$

Ondorioz, nahiz eta Hamiltondarrak ez duen Brillouinen zonaldeko periodizitatea, $H^{\vec{k}}$ eta $H^{\vec{k}+\vec{K}}$ matri-zeek autobalio berberak dituzte.

4.2 Lotura Estuen Metodoa eta Simetria

Simetria baldintzetan oinarrituz, elkarrekiko espazioan bandek duten egitura aztertzeko, lehenbizi sistema deskribatuko duen Hamiltondarra zehaztu behar da. Azken honek, deskribatzen duen sistemaren simetria berdina izan behar du. Hots, sistemari dagokion taldearen eragileek aldaezin utzi behar dute Hamiltondarra, honen ganean aplikatzean. Behin Hamiltondarra definituta, sistemaren autoegoera eta autobalioak zehaztuko dituen ekuazio sekularra ebatzi behar da, elkarrekiko espazioko \vec{k} -ren balio bakoitzerako. Honela, \vec{k} zehatz bakoitzerako, dagokion talde txikia identifikatu behar da, eta karaktere taula lortu. Hau da, kristala zehazten duen simetria taldearen eragiketak \vec{k} zehatz horretako autoegoeren ganean aplikatuz, dagozkien adierazpen matritzialak zehaztu behar dira, edota karaktereak bederen. Oro har, simetria taldeekin lotutako karaktere taulak definituta daude [2].

Aurreko kapituluan ikusi den gisan, talde espazial bateko simetria elementuak ondoko eran definitzen dira:

$$\mathcal{O}_s = \{R_s | \vec{v}_s\} \quad (4.23)$$

non R_s talde puntualeko elementu bat den eta \vec{v}_s translazio bat.

Eragile hauek ondoko eran eragiten dute espazio errealeko funtzioen gainean:

$$\mathcal{O}f(\vec{r}) = f(\mathcal{O}^{-1}\vec{r}) = f(R^{-1}\vec{r} - R^{-1}\vec{v}) \quad (4.24)$$

Talde espazialeko eragileen adierazpen matrizialak, Bloch-en uhin-funtzioek osatutako oinarriaren bitartez lortu daitezke:

$$\mathcal{O}_s^{mn} = \langle \psi_{m\vec{k}} | \mathcal{O}_s | \psi_{n\vec{k}} \rangle \quad (4.25)$$

Adierazpen matrizial hauen trazek karaktereak definituko dituzte. Karaktereak ezinbestekoak dira \vec{k} uhin-bektorearen *talde txikiari* dagozkion adierazpen laburtezinak zehazteko. Gogora ekarriz, \vec{k} uhin-bektorearen talde txikia honela definitzen da:

$$\mathcal{G}^{\vec{k}} : \{ \mathcal{O}_s | R_s k = \vec{k} + \vec{K} \} \quad (4.26)$$

non \vec{K} elkarrekiko sareari dagokion translazio bektore oso bat den. Praktikan, eragileak adierazten dituzten matrizeak erabiltzen direnean, tauletan agertzen diren matrizeen irauliak kontsideratu behar dira.

Honenbestez, aipatu karaktereak:

$$Tr[\mathcal{O}_s] = \sum_n \mathcal{O}_s^{nn}, \quad \mathcal{O}_s \in \mathcal{G}^{\vec{k}} \quad (4.27)$$

Atal honetan, ez da spin-a kontuan hartu. Hala ere, lortzen diren emaitzak erraz estropolatzan ahal dira spin-orbita akoplamendua kontsideratzen den kasuetara, R_s eragileak $R_s \otimes SU_s(2)$ -gatik ordezkatzuz. Hots, oinarriak bikoiztu egiten dira biderketa zuzenaren bidez:

$$\{jatorrizko \text{ oinarria}\} \otimes \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \quad (4.28)$$

Aurreko atalean, sare zuzeneko bektoreak ezaugarritzeko \vec{R} sinboloa erabili da, eta atal honetan, simetria eragiketak adierazteko ere R hizkia erabili da. Gaizkiulertuak saihesteko, notazioa moldatuko da: talde puntualeko elementuak adierazteko R sinboloa mantenduko da, eta, aldiz, espazio zuzeneko sare bektoreak \vec{L}_j bitartez deskribatuko dira.

Talde puntualari dagozkion simetria eragiketek ondoko eragina dute lotura estuen metodoko orbital lokalizatuen gainean, μ atomoaren kasurako:

$$\hat{R}_s \phi_{\mu,\alpha}(\vec{r}) \equiv R_s \phi_{\mu,\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\beta} \phi_{\mu,\beta}(\vec{r}) D_{\beta\alpha}^{s,\mu} \quad (4.29)$$

D matrize hauek tauletan daude jasota [2], orbital mota ezberdinetarako (s, p, d, f, \dots).

Ildo beretik, talde espazialeko eragileek honela eraginen dute $|\chi_{\alpha,j}^{\vec{k}}\rangle$ egoeretan:

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_s|\chi_{\mu,\alpha}^{\vec{k}}\rangle &= \chi_{\mu,\alpha}^{\vec{k}}(R_s^{-1}\vec{r} - R_s^{-1}\vec{v}_s) \\
&= \sum_j \phi_{\mu,\alpha}(R_s^{-1}\vec{r} - R_s^{-1}\vec{v}_s - \vec{r}_\mu - \vec{L}_j)e^{i\vec{k}\cdot(\vec{L}_j+\vec{r}_\mu)} \\
&= \sum_j \phi_{\mu,\alpha}(R_s^{-1}[\vec{r} - \vec{v}_s + R_s\vec{r}_\mu - R_s\vec{L}_j])e^{i\vec{k}\cdot(\vec{L}_j+\vec{r}_\mu)} \\
&= \sum_j \hat{R}_s\phi_{\mu,\alpha}[\vec{r} - \vec{v}_s + R_s\vec{r}_\mu - R_s\vec{L}_j]e^{i(R_s\vec{k})\cdot R_s(\vec{L}_j+\vec{r}_\mu)} \\
&= e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \sum_j \hat{R}_s\phi_{\mu,\alpha}[\vec{r} - (\vec{v}_s + R_s\vec{r}_\mu) - R_s\vec{L}_j]e^{i(R_s\vec{k})\cdot[R_s\vec{L}_j+(R_s\vec{r}_\mu+\vec{v}_s)]}
\end{aligned}$$

$\vec{v}_s + R_s\vec{r}_\mu = \vec{L}_0^i + r_{\mu'}^{\vec{r}}$ izanik:

$$= e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \sum_j \hat{R}_s\phi_{\mu,\alpha}[\vec{r} - (r_{\mu'}^{\vec{r}} + \vec{L}_0^i - R_s\vec{L}_j)]e^{i(R_s\vec{k})\cdot[R_s\vec{L}_j+(r_{\mu'}^{\vec{r}}+\vec{L}_0^i)]}$$

Bestalde $\vec{L}_{j'} = L_0^i + R_s\vec{L}_j$ definituz:

$$\begin{aligned}
&= e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \sum_{j'} \hat{R}_s\phi_{\mu,\alpha}[\vec{r} - r_{\mu'}^{\vec{r}} - \vec{L}_{j'}]e^{i(R_s\vec{k})\cdot[\vec{L}_{j'}+r_{\mu'}^{\vec{r}}]} \\
&= e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \sum_{\beta} \chi_{\mu',\beta}^{R_s\vec{k}}(\vec{r})D_{\beta\alpha}^{s,\mu}
\end{aligned}$$

Honela, adierazpenen karaktereak ezaugarritzen dituzten adierazpen matritzialen diagonaleko elementuak honela definitzen ahal dira:

$$\langle\psi_{n\vec{k}}|\mathcal{O}_s|\psi_{n\vec{k}}\rangle = e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \sum_{\alpha,\mu,\beta} C_{\mu'\beta}^{n*} e^{i(R_s\vec{k}-\vec{k})\cdot r_{\mu'}^{\vec{r}}} D_{\beta\alpha}^{s,\mu} C_{\mu\alpha}^n \quad (4.30)$$

Matrizen formatuan idatzita:

$$\langle\psi_{n\vec{k}}|\mathcal{O}_s|\psi_{n\vec{k}}\rangle = e^{-(R_s\vec{k}\cdot\vec{v}_s)} \left[C^\dagger V(R_s\vec{k} - \vec{k}) DC \right]_{nn} \quad (4.31)$$

non:

$$\bar{V}(\vec{k})_{\mu'\beta,\mu\alpha} = e^{i\vec{k}\cdot r_{\mu'}^{\vec{r}}} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\alpha\beta} \quad (4.32)$$

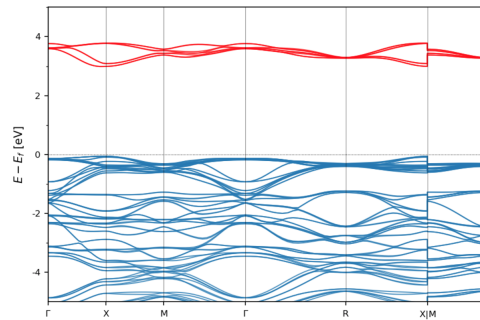
$$\bar{C}_{\mu\alpha,n} = C_{\mu\alpha}^n \quad (4.33)$$

$$\bar{D}_{\mu'\beta,\mu\alpha} = \begin{cases} D_{\beta\alpha}^{s,\mu}, & \vec{v}_s + R_s\vec{r}_\mu = \vec{L}_0^i + r_{\mu'}^{\vec{r}} \text{ baldin bada;} \\ 0, & \text{bestela.} \end{cases} \quad (4.34)$$

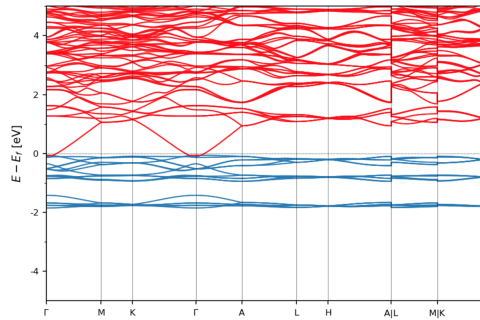
Honela, karaktereak behatuz, egoera zehatz bati dagokion banda, elkarrekiko espazioko \vec{k} puntu ba-koitzean, \vec{k} -ren talde txikiaren zein adierazpen laburtezinen (edo adierazpen laburtezinen konbinazio linealen) arabera transformatu den zehazten ahal da. Elkarrekiko sarearen \vec{k} puntu ezberdinak lotuz, elkarrekiko espazioan bandek duten forma ondorioztatuta daiteke era kualitatibo batean. Laburbilduz, espazio errealeko simetriekin bat datozen adierazpen laburtezinek, momentuaren espazioko energia banden errepresentazioa zehazten dute.

Gaur egun, kapitulu honetan azalduko problema konputazionalki ebatzi daiteke, bizkor eta zehatz. Horrela, nahi diren elkarrekiko sareko \vec{k} puntuak lotzen dituen ibilbidean zeharreko banden egitura lor-tzen ahal da. Aitzitik, elementu ezberdinen banden egiturak kalkulatu eta jasota daude [7]-[8].

Aurreko kapituluan aipatu den gisan, adierazpen laburtezin batek deskribatzen duen eran transforma-tzen diren energia bandak endekatuak dira. Aldiz, orokorrean, adierazpen laburtezin ezberdinen arabera transformatzen diren bandak ez dira endekatuak egongo, baldin eta ausazko endekapenik ematen ez bada. Bestalde, elkarrekiko espazioko simetria handiko lerroetan zehar, adierazpen laburtezin ezberdinen gisan transformatzen diren bandak gurutzatu egin daitezke. Oro har, banden artean *gap* bat agertzen bada (4.1 irudia) , aztergai dugun egitura kristalinoa duen materiala isolatzaile tribiala izango da. Horrez gain, banden arteko *gap*-a egonik, gainazaleko egoerei dagozkien banden arteko gurutzapena ematen bada, materiala *topologikoa* da [7] (4.2 irudia). Banden arteko gurutzatze horrek sortzen duen *gap*-ik gabeko egiturari *Dirac konoa* deritzo, bi norabidetan jasaten duen dispersioagatik.



4.1. irudia: $P\bar{4}3m$ talde espazialari dagokion simetria erakusten duen material bati dagozkion bandek, Brillouinen zonaldean duten egitura, [8]-tik hartua. Simetria handiko Brillouinen zonaldeko puntuak kontsideratu dira. Oinarritzko egoeran bete den azken bandaren eta erabat hutsik dagoen lehen bandaren artean *gap* bat ageri da.



4.2. irudia: $P6_3cm$ talde espazialari dagokion simetria erakusten duen material bati dagozkion bandek, Bri-llouinen zonaldean duten egitura, [8]-tik hartua. Simetria handiko Brillouinen zonaldeko puntuak kontsideratu dira. Γ puntuan, banden arteko gurutzapena ematen da eta *Dirac konoa* deritzon egitura eratzen da.

Kapitulua 5

Bateragarritasun Erlazioak

Bateragarritasun erlazioek, \vec{k} puntu baten, eta beste simetria talde ezberdin bati dagokion Brillouinen zonaldeko beste puntu bati dagokien oinarri funtzioak nola erlazionatzen diren zehazten dute. Era berean, elkarrekiko sareko \vec{k} puntu batetik abiatuz, uhin-bektorearen beste simetria talde bati dagokion gertuko puntu batera joatean, energia bandek izanzen duten itxura baldintzatzen dute.

Izan ere, orokorrean, erlazio hauek, Brillouinen zonaldeko puntu baten eta puntu hori barne hartzen duen lerroko talde txikien adierazpen laburtezinaren arteko korrelazioak zehazten dituzte. Lerroari dagokion talde txikia, puntuari dagokion talde txikiaren azpitalde bat da. Honez gain, lerro-plano eta puntu-plano pareen adierazpen laburtezinaren arteko korrelazioak ere definitzen dituzte. Honela, bateragarritasun erlazioek berebiziko garrantzia dute banda elektronikoen konektibitatea aztertzerakoan.

Talde espazialari dagokion banda-adierazpenaren bitartez deskribatutako edozein banda, partzialki identifikatu daiteke, \vec{k} -ren talde txikiari dagozkion adierazpen laburtezinetan deskonposatzen bada, Brillouinen zonaldeko \vec{k} puntu guztientzat. Hala ere, banden barneko konexioak aztertzeko ez da beharrezkoa adierazpenak Brillouinen zonalde osoan identifikatzea, nahikoa da simetria maximoko \vec{k} -bektoreak kontsideratzea. Bektore horiek oso gutxi dira 230 talde espazialean (4 eta 8 bitartean), beraz, analisia sinplifikatu egiten da. Aitzitik, \vec{k} puntu bat, simetria maximoko puntua izango da, baldin eta dagokion talde-txikia ez bada puntu honekin konektatuta dagoen beste \vec{k}' puntu baten talde-txikiaren azpitaldea.

Kontsideratu momentuaren espazioko \vec{k} puntu bat, eta puntu hau barne hartzen duen lerroa (l) \vec{k}_1 . Suposatu \vec{k} -ren talde txikia $\mathcal{G}^{\vec{k}}$, \vec{k}_1 -ri dagokion talde txikiaren supertalde bat dela, $\mathcal{G}^{\vec{k}_1} < \mathcal{G}^{\vec{k}}$ izanik, arestian aipatu gisan. Esate baterako, \vec{k} simetria handiko puntu bat izan daiteke eta \vec{k}_1 puntu horretatik igarotzen den momentu-lerro bat. Honenbestez, $\mathcal{G}^{\vec{k}_1}$ talde txikiko simetria eragiketei dagozkien $\mathcal{G}^{\vec{k}}$ taldeko $\rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}}}^i$ adierazpen laburtezinako adierazpen matrizialek, $\mathcal{G}^{\vec{k}_1}$ taldeko adierazpen bat osatuko dute, zeina ez den laburtezina izango ezinbestean. Azken adierazpen hau, orokorrean, $\mathcal{G}^{\vec{k}_1}$ taldeko $\rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}_1}}^i$ adierazpen laburtezinaren batura zuzena da:

$$\rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}}}^i \downarrow \mathcal{G}^{\vec{k}_1} = \bigoplus_{n=1}^s m_{in}^{\vec{k}, \vec{k}_1} \rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}_1}}^i \quad (5.1)$$

s $\mathcal{G}^{\vec{k}_1}$ taldearen adierazpen laburtezin kopurua izanik, eta $m_{in}^{\vec{k}, \vec{k}_1}$, $\rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}_1}}^i$ adierazpenaren anizkoitzasuna $\rho_{\mathcal{G}^{\vec{k}}}^i$ -ren deskonposizioan. Deskonposaketa honen bitartez, elkarloturik dauden puntu eta lerroen adierazpen laburtezinaren arteko konexio posibleak zehazten dira.

Argudio eta prozedura bera erabiltzen da puntu baten eta puntu hori barne hartzen duen planoaren zein lerro baten eta lerroa barne hartzen duen planoaren adierazpen laburtezinaren korrelazioak kalkulatzeko. BCS zerbitzariko [2] DCOMPREL programak [3], momentuaren espazioko konektatuta dauden bi

\vec{k} bektore bikote bakoitzaren anizkoitzasunen berri ematen du translaziorik gabeko ezein talde espazial bikoitzen kasurako.

Abstrakzio teorikoa barneratzeke kontsidera bedi, esaterako, $Pm\bar{3}m$ (#221) talde espazialari dagozkion egitura kristalinoen kasua. Brilluinen zonaldeko simetria handiko bi \vec{k} puntu batzen dituen ondoko ibilbidea kontsideratu da: $\Gamma \rightarrow \Delta \rightarrow X$. Honela, alde batetik, $\Gamma = (0, 0, 0)$ puntuaren eta $\Delta = (0, v, 0)$ lerroaren arteko bateragarritasun erlazioak aztertu dira, eta bestetik, $\Delta = (0, v, 0)$ lerroari eta $X = (0, \frac{1}{2}, 0)$ puntuari dagozkionak. Aipatu erlazioak, esaterako, BCS web zerbitzarian [2] aurkitu daitezke, DCOMPREL programa erabiliz [3] (5.1 irudia). Parentesi artean dauden zenbakiek talde txikiaren adierazpen laburtezinaren dimentsioak adierazten dituzte eta geziak orientazioak, simetria txikitzen deneko noranzkoa.

Compatibility Relations
$GM_1^+(1) \rightarrow DT_1(1)$
$GM_1^-(1) \rightarrow DT_4(1)$
$GM_2^+(1) \rightarrow DT_2(1)$
$GM_2^-(1) \rightarrow DT_3(1)$
$GM_3^+(2) \rightarrow DT_1(1) \otimes DT_2(1)$
$GM_3^-(2) \rightarrow DT_3(1) \otimes DT_4(1)$
$GM_4^+(3) \rightarrow DT_4(1) \otimes DT_5(2)$
$GM_4^-(3) \rightarrow DT_1(1) \otimes DT_5(2)$
$GM_5^+(3) \rightarrow DT_3(1) \otimes DT_5(2)$
$GM_5^-(3) \rightarrow DT_2(1) \otimes DT_5(2)$
$GM_6(2) \rightarrow \overline{DT}_7(2)$
$GM_7(2) \rightarrow \overline{DT}_6(2)$
$GM_8(2) \rightarrow \overline{DT}_7(2)$
$GM_9(2) \rightarrow \overline{DT}_6(2)$
$GM_{10}(4) \rightarrow \overline{DT}_6(2) \otimes \overline{DT}_7(2)$
$GM_{11}(4) \rightarrow \overline{DT}_6(2) \otimes \overline{DT}_7(2)$

(a)

Compatibility Relations
$X_1^+(1) \rightarrow DT_1(1)$
$X_1^-(1) \rightarrow DT_4(1)$
$X_2^+(1) \rightarrow DT_2(1)$
$X_2^-(1) \rightarrow DT_3(1)$
$X_3^+(1) \rightarrow DT_4(1)$
$X_3^-(1) \rightarrow DT_1(1)$
$X_4^+(1) \rightarrow DT_3(1)$
$X_4^-(1) \rightarrow DT_2(1)$
$X_5^+(2) \rightarrow DT_5(2)$
$X_5^-(2) \rightarrow DT_5(2)$
$X_6(2) \rightarrow \overline{DT}_7(2)$
$X_7(2) \rightarrow \overline{DT}_6(2)$
$X_8(2) \rightarrow \overline{DT}_7(2)$
$X_9(2) \rightarrow \overline{DT}_6(2)$

(b)

5.1. irudia: Simetria handiko Brillouinen zonaldeko bi punturen eta horiek lotzen dituen lerroaren arteko bateragarritasun erlazioak, $Pm\bar{3}m$ (#221) talde espazialaren kasurako. (a) irudian, Γ puntuaren eta Δ lerroaren artekoak adierazten dira, eta (b) irudian, X puntuaren eta Δ lerroaren artekoak. Taula hauek, BCS web zerbitzariako DCOMPREL[3] programaren bidez lortu dira. Parentesi arteko zenbakiek adierazpen laburtezinaren dimentsioa adierazten dute, eta geziak, simetria txikitzeke deneko noranzkoa.

Suposa bedi Γ puntuan Γ_4^+ adierazpen laburtezinaren arabera transformatzen diren egoerak. Puntu horretan, egoera horiei dagozkien energiak 3 aldiz daude endekatuak, Γ_4^+ adierazpenaren dimentsioa 3-koa baita. 5.1 irudian ikus daiteke Γ_4^+ adierazpen laburtezina, zein adierazpen laburtezinekin den bateragarria Δ lerroan; eta era berean, adierazpen laburtezin horiekin zeintzuk diren bateragarriak X puntuan:

$$\Gamma_4^+(3) \rightarrow \Delta_4(1) + \Delta_5(2) \quad (5.2)$$

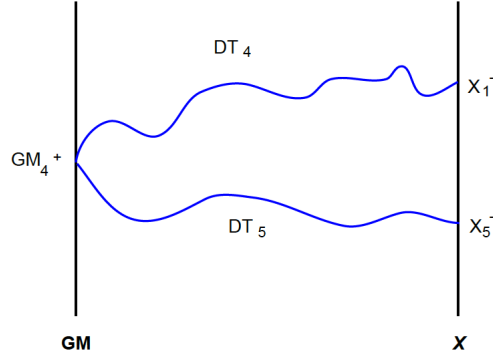
$$\Delta_4(1) \leftarrow X_1^-(1) \quad (5.3)$$

$$\Delta_4(1) \leftarrow X_3^+(1) \quad (5.4)$$

$$\Delta_5(2) \leftarrow X_5^+(2) \quad (5.5)$$

$$\Delta_5(2) \leftarrow X_5^-(2) \quad (5.6)$$

(5.2)-(5.6) erlazioetan ikusten da, nola Γ puntuan 3 aldiz endekatua den energia, bi bandatan banatzen den aipatu Brilluinen zonaldeko ibilbidean (5.2 irudia). Banda horietako bat 2 dimentsiokoa izanen da (Δ_5 lerroa jarraituz doana), eta bestea bakarrekia (Δ_4 lerroan zehar).



5.2. irudia: $Pm\bar{3}m$ (#221) talde espazialari dagozkion (5.2)-(5.6) bateragarritasun erlazioen ondoriozko Γ eta X puntuen arteko banden egituraren adibide bat.

Ondorioz, $Pm\bar{3}m$ talde espazialaren kasuan, Γ puntuan Γ_4^+ adierazpen laburtezinaren arabera transformatzeko diren egoerak, X puntuan X_1^- , X_3^+ , X_5^+ edo X_5^- adierazpen laburtezinaren arabera transformatzeko diren egoerekin lotu daitezke; baina, inoiz ez, esaterako, X_4^+ adierazpen laburtezinaren arabera transformatzeko diren egoerekin. Honela, metodologia honetaz baliatuz, energia banden Brillouinen zonaldeko konexio posibleak zehazten ahal dira.

Prozedura hau, Γ_4^- adierazpen laburtezinaren kasurako errepikatzen bada, ondoko bateragarritasun erlazioak lortzen dira:

$$\Gamma_4^-(3) \rightarrow \Delta_1(1) + \Delta_5(2) \quad (5.7)$$

$$\Delta_1(1) \leftarrow X_1^+(1) \quad (5.8)$$

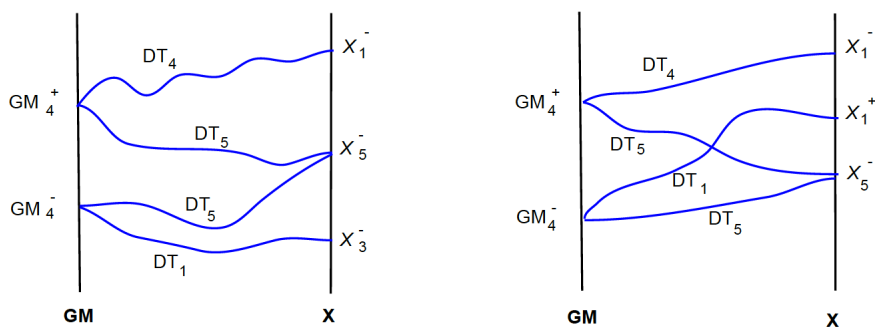
$$\Delta_1(1) \leftarrow X_3^-(1) \quad (5.9)$$

$$\Delta_5(2) \leftarrow X_5^+(2) \quad (5.10)$$

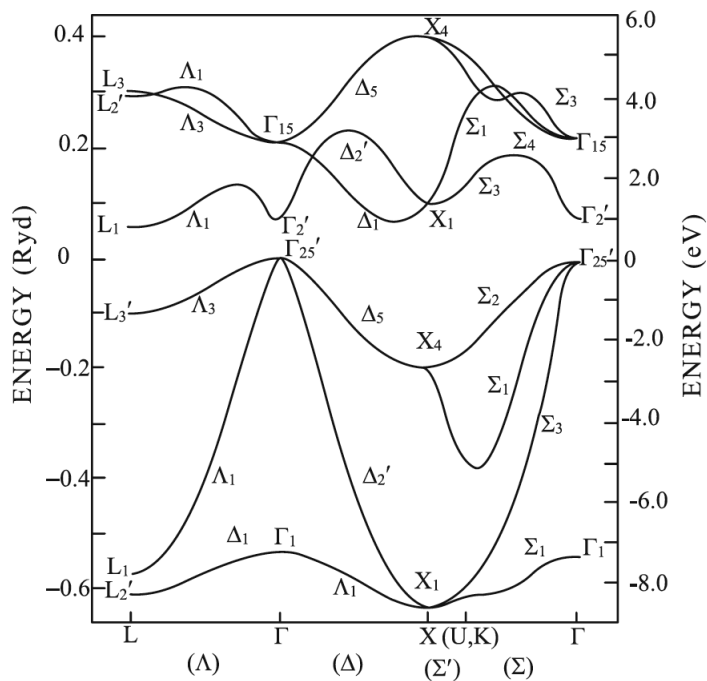
$$\Delta_5(2) \leftarrow X_5^-(2) \quad (5.11)$$

Γ puntuan Γ_4^+ eta Γ_4^- adierazpenak kontsideratuz, eta X puntuarekin lotzen dituen bateragarritasun erlazioak aintzat hartuz, Brillouinen zonaldean energia bandek izan ditzaketen formaren adibide batzuk kontsideratu dira (5.3 irudia). Adierazpen ezberdinen arabera transformatzeko diren banden kasuan, posible da gurutzapena gertatzea. Gurutzapenaren ostean, bandek, jatorrizko simetriak mantentzen dituzte.

Prozedura hau, Brillouinen zonaldeko simetria handiko puntu ezberdinetarako errepikatzen bada, 5.4 irudikoaren gisako adierazpen grafikoak lortzen ahal dira. Banda bakoitzak Brillouinen zonaldeko \vec{k} puntu bakoitzean duen balioa ezagutzeko, aurreko kapituluan azalduko lotura estuen metodoaren bidez lortutako Schrödingerren ekuazioaren emaitzez baliatzen ahal da.



5.3. irudia: $Pm\bar{3}m$ (#221) talde espazialari dagokion konfigurazio kristalinoa duen kristal batek Brillouinen zonaldeko simetria handiko Γ eta X puntuen artean izan ditzakeen banden egituraren aukera posibleen bi adibide.



5.4. irudia: Germanioaren energia banden egitura ($Fd\bar{3}m$ (#227) talde espaziala), [1]-etik hartua.

Kapitulua 6

Tokiko-simetria taldea

6.1 Tokiko-Simetriaren Hurbilketa

Brillouinen zonaldean, egitura kristalinoaren egoera hedatuek (banda elektronikoak kasu) aurkezten duten simetria, kristalaren talde espazialaren adierazpen laburtezinek deskribatzen dute. Bestalde, kristala osatzen duten egitura unitateen egoera lokalizatuen simetria, simetria talde lokalen adierazpen laburtezinek deskribatzen dute. Tokiko-simetria taldea, espazio errealeko toki geometrikoa aldaezin uzten duten talde espazialeko simetria elementuek osatzen dute. Beraz, talde espazialaren azpitaldea da. Oro har, egoera hedatuen simetria eta egoera lokalizatuen simetria hertsiki loturik daude. Honela, kristalaren egituraren oinarrituz, egoera hedatuen simetria aurrez aurre azaldu da.

Aipatu problema ebazteko, formalki, indukzio metodoa erabili behar da: \mathcal{S} simetria talde lokalaren (zeina \mathcal{G} talde espazialaren azpitaldea den) adierazpen laburtezinek deskribatzen dituzten egoera lokalek, \mathcal{G} talde espazialaren adierazpen laburtezinak indusitzen dituzte. Horrela, posible izango litzateke adierazpen laburtezin horien arabera transformatzeko diren egoera hedatuen simetria kalkulatzeko. Hala ere, aipatu lana ez da batere erraza; izan ere, \mathcal{S} tokiko simetria taldea (talde puntual batekiko isomorfikoa) \mathcal{G} -ren indize infinituko azpitalde bat da. Honenbestez, \mathcal{S} -ren adierazpen laburtezin batetik indusitutako \mathcal{G} -ren adierazpenak infinitu dimentsio izango litzateke, eta ondorioz, ezinezkoa da zuzenean kalkulatzeko.

Horrela, tokiko-simetriaren hurbilketak arazo hori konpontzen du Frobeniusen erreziprozitate teorema aplikatuz. Teorema honetan, adierazpenen teoriako 2 kontzeptuk dute garrantzia: subdukzioak eta indukzioak. Subdukzioaren bidez, \mathcal{G} talde baten deskonposaketa burutzen da, $\mathcal{H} < \mathcal{G}$ azpitalde baten adierazpen laburtezinaren funtzioan. Aldiz, indukzio prozedurak, \mathcal{G} taldearen adierazpen bat eraikitzea ahalbidetzen du, \mathcal{H} -ren adierazpen batetik abiatuz.

Suposa bedi, \mathcal{H} eta \mathcal{K} , \mathcal{G} taldearen azpitaldeak direla, eta $\rho_{\mathcal{H}}$ eta $\rho_{\mathcal{K}}$ azpitalde horien adierazpen laburtezinak. $\rho_{\mathcal{H}}$ adierazpenaren bitartez indusitutako \mathcal{G} taldearen adierazpena, \mathcal{K} taldearen adierazpena ere izanen da. Orokorrean, adierazpena laburgarria izanen da, eta beraz deskonposatu daiteke \mathcal{K} taldearen adierazpen laburtezinaren konbinazio lineal gisa. Deskonposaketa horretan, $\rho_{\mathcal{K}}$ adierazpenak anizkoiztasun bat izanen du: m . Prozedura berbera aplikatuz, $\rho_{\mathcal{K}}$ adierazpenaren oinarrituz indusitutako \mathcal{G} taldearen adierazpenaren \mathcal{H} talderako subdukzioan, $\rho_{\mathcal{H}}$ adierazpenak anizkoiztasun bat izanen du: m' . Hots:

$$((\rho_{\mathcal{H}} \uparrow \mathcal{G}) \downarrow \mathcal{K})_{\rho_{\mathcal{K}}} \rightarrow m \quad (6.1)$$

$$((\rho_{\mathcal{K}} \uparrow \mathcal{G}) \downarrow \mathcal{H})_{\rho_{\mathcal{H}}} \rightarrow m' \quad (6.2)$$

Frobenius-en erreziprozitate teorema ziurtatzen du $m = m'$ dela.

Kontsidera bedi \mathcal{G} egitura kristalinoari dagokion talde espaziala dela (infinitua), \mathcal{H} Wyckoff-en posizio bati dagokion simetria taldea (finitua) eta \mathcal{K} uhin-bektore zehatz batekin lotutako talde-txikia (infinitua). Talde-txikiarekin lotutako adierazpenak ezagunak dira, eta beraz, horietako batean oinarrituz, \mathcal{G} talde espazialaren adierazpen bat definitzen ahal da. Adierazpen hau, finitua den \mathcal{H} tokiko-simetriari dagokion taldera subduzitzean, talde honen adierazpen laburtezinaren multiplizitateak ezagutzen ahal dira. Honela, Frobeniusen erreprozitete teoremaren ondorioz, ezagunak dira kontrako prozesuan, talde-txikiko adierazpenak izango zukeen anizkoiztasuna.

Beraz, tokiko-simetria taldearen adierazpen laburtezinaren bidez induzitutako \mathcal{G} talde espazialaren adierazpenaren dimentsioa infinitua bada ere, adierazpen horretan \vec{k} uhin-bektore batekin lotuta dagoen \mathcal{G} -ren adierazpen laburtezinaren multzoari dagokion zatia ezagutu daiteke. Izan ere, aurreko ataletan aipatu den gisan, \mathcal{G} talde espazialaren adierazpen laburtezinak elkarrekiko espazioko \vec{k} uhin-bektoreen arabera sailkatzen dira: \vec{k} bektore bakoitzarekin, \mathcal{G} -ren adierazpen laburtezinaren multzo finitu bat dago erlazionatuta. Oro har, aplikazio gehienetan, soilik uhin-bektore konkretu batzuekin lotutako adierazpen laburtezinak aztertzen direnez, induzitutako adierazpenaren ezagutza partziala nahikoa da.

Honenbestez, funtsean, tokiko-simetriaren hurbilketaren bidez, kristala osatzen duten egitura unitateei dagokien egoera lokalizatuek induzitutako kristalaren egoera hedatuen simetria ezagutu daiteke. Horretarako, arestian aipatu den gisan, Wyckoff-en posizio bateko tokiko-simetria taldearen adierazpen laburtezinak induzitutako elkarrekiko espazioko edozein puntuko \mathcal{G} talde espazialaren adierazpen laburtezinak lortzea eskatzen du metodologia honek.

6.2 Banden adierazpenak

Energia bandak, Brillouinen zonaldean definituta dauden funtzio jarraituak dira. Tokiko-simetriaren hurbilketan oinarrituz, energia bandak nola deskribatu azalduko da azpiatal honetan, adibide batean oinarrituz. Har bedi $P4/mmm$ (#123) talde espaziala eta a Wyckoff posizioan dagoen atomo bat kontsideratu. Posizio horretako tokiko-simetria puntuala $4/mmm$ da; hots, talde espazialeko $\{R|0\}$ simetria elementu guztiek aldaezin uzten dute a puntua, R guztietarako. Talde puntualek, klase adina adierazpen laburtezin dituzte. Beraz, $4/mmm$ talde puntualak 10 adierazpen laburtezin ditu, 6.1 irudiko taulan jasoak. Taula hau, BCS [2] web zerbitzariko Representations PG programa erabiliz lortu da.

$P4/mmm$ talde espazialak deskribatutako simetria agertzen duen egitura baten kasuan, a Wyckoff-en posizioan kokatutako atomo batek p orbitala betea edo erdibetea badu, izaera elektronikoa zehaztuko duten energia bandak, p orbitalek induzitutakoak izanzen dira. p_x , p_y eta p_z orbitalak, x , y eta z osagaien arabera transformatzen dira. Honenbestez, lehenik, osagai horiek zein adierazpenen arabera transformatzen diren zehaztu behar da.

Har bedi (x, y) espazioko puntu bat. Puntu horri C_5 klaseko 4_{001}^+ biraketa koaternarioa aplikatzean, $(y, -x)$ puntua lortzen da. Hots, transformazio horri dagokion matrizea ondokoa da:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Matrize honen traza 0 da. 6.1 irudian simetria eragiketeta hori barne hartzen duen klaseari dagokion karakterea (traza) nulua da E_g eta E_u adierazpenen kasuan. Beraz, bigarren simetria eragiketeta bat aztertu behar da: inbertsioa (C_6 klaseko parte dena), esaterako. Eragiketeta horrek ondoko koordinatu aldaketa definitzen du: $(x, y) \rightarrow (-x, -y)$. Beraz, dagokion adierazpen matriziala:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(1)	(2)	(3)	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₈	C ₉	C ₁₀
GM ₁ ⁺	A _{1g}	GM ₁ ⁺	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
GM ₁ ⁻	A _{1u}	GM ₁ ⁻	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
GM ₃ ⁺	B _{1g}	GM ₂ ⁺	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
GM ₃ ⁻	B _{1u}	GM ₂ ⁻	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
GM ₂ ⁺	A _{2g}	GM ₃ ⁺	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
GM ₂ ⁻	A _{2u}	GM ₃ ⁻	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
GM ₄ ⁺	B _{2g}	GM ₄ ⁺	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
GM ₄ ⁻	B _{2u}	GM ₄ ⁻	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
GM ₅ ⁺	E _g	GM ₅ ⁺	2	-2	0	0	0	2	-2	0	0	0
GM ₅ ⁻	E _u	GM ₅ ⁻	2	-2	0	0	0	-2	2	0	0	0

6.1. irudia: $4/mmm$ talde puntualaren adierazpen laburtezinak, eta adierazpen laburtezin bakoitzaren arabeko simetria elementuen karaktereak jasotzen dituen taularen irudia. BCS [4] web zerbitzariko Representations PG programa erabiliz lortu da.

Adierazpen matrizialari dagokion traza -2 da. Beraz, (x, y) koordenatu bikotea E_u adierazpenaren arabera transformatzen da.

z koordenatuaren prozesura bera errepikatuz, zehazten ahal da A_{2u} adierazpenaren arabera transformatzen dela. Honenbestez, a Wyckoff-en posizioan dagoen atomoaren kasuan, (p_x, p_y) orbital bikotea E_u adierazpenaren arabera transformatuko da, eta p_z orbitala, A_{2u} adierazpenaren arabera. Hots, Wyckoff-en posizio bateko tokiko-simetria taldeak, egoera lokalizatuak (orbital atomikoak, kasu) sailkatzen ditu.

Honenbestez, bi banda induzituko dira; bata dimentsio batekoa izango da (p_z orbitalarekin lotutakoa) eta bestea bi dimentsiotakoa (p_x eta p_y orbital bikotearekin lotutakoa). Orbital horiei dagozkien bandak, tokiko-simetria taldearen ($4/mmm$ talde puntuala) A_{2u} eta E_u adierazpenek induzitutakoak, \vec{k} puntu zehatz bateko talde txikiko adierazpen laburtezin konkretu baten (edo hauen konbinazioen) arabera transformatzen dira Brilluinen zonaldean (6.1 taula).

BZ-ko puntua	$A_{2u} \uparrow \mathcal{G}(1)$	$E_u \uparrow \mathcal{G}(2)$
$A (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$A_3^- (1)$	$A_5^- (2)$
$\Gamma (0,0,0)$	$\Gamma_3^- (1)$	$\Gamma_5^- (2)$
$M (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$M_3^- (1)$	$M_5^- (2)$
$Z (0, 0, \frac{1}{2})$	$Z_3^- (1)$	$Z_5^- (2)$
$R (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$R_2^- (1)$	$R_3^- (1) \oplus R_4^- (1)$
$X (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$R_2^- (1)$	$R_3^- (1) \oplus R_4^- (1)$

6.1. taula: Brilluinen zonaldeko simetria handiko puntuetan, induzitutako energia bandei dagozkien adierazpen laburtezin edota adierazpen laburtezinaren konbinazioak, BCS-ko BANDREP funtzioa erabiliz [2]-[3] lortuak.

Kasu honetan, induzitutako banda hauek oinarritzkoak eta deskonposa-ezinak dira.

E_u adierazpenaren bitartez induzitutako bandaren kasuan, zeina 2 dimentsiokoa den, energiak endekatuak dira Γ , A , M , eta Z puntuetan. R eta X puntuetan, aldiz, bi adar ezberdinetan banatzen dira; hots, energia balio ezberdinak hartzen dituzte Brillouinen zonaldeko puntu horietan.

Brillouinen zonaldeko simetria handiko puntuetan ez ezik, zonalde osoko deskribapena nahi bada, prozedura berbera da. Baina, kasu honetan, BANDREP datu-basea erabiltzean [2]-[3], k guztiak kontsideratu behar dira. Honela, Brillouinen zonaldeko simetria handiko puntuez gain, hauek lotzen dituzten lerroen informazioa ere ezagutzen ahal da. Honi esker, esaterako, Γ eta Z puntu bereziak, $\Lambda = (0, 0, w)$ lerroaren bitartez konektatuta daudela ikus daiteke. Lerro honetan, E_u adierazpena, 2 dimentsiotakoa den Λ_5 adierazpen laburtezinaren arabera transformatzen da. Honenbestez, $\Gamma \rightarrow \Lambda \rightarrow Z$ lerroan zehar, E_u adierazpenetik induzitutako 2 dimentsioko bandako bi energiak endekatuak daude. Aldiz, Γ eta M puntuak $\Sigma = (u, u, 0)$ lerroaren bidez lotzen dira. Lerro honetan, E_u adierazpena $\Sigma_1(1) \oplus \Sigma_2(1)$ adierazpen laburtezinaren kobinazio gisa transformatzen da. Beraz, Γ eta M puntuak lotzen dituen ibilbidean zehar, 2 aldiz endekatua den energia 2 adar ezberdinetan banatzen da. Honenbestez, banden egitura, egitura kristalinoaren simetriak inposatzen du, Brillouinen zonaldeko puntu ezberdinetako adierazpen laburtezinaren arteko konexio posibleak definituak baitaude.

Ondorioz, Wyckoff-en posizio batetik induzitutako banden adierazpenari buruzko beharrezko informazioa lortzeko, nahikoa da dagokion tokiko-simetria taldearen adierazpen laburtezinaren bitartez induzitutako banden adierazpenak kalkulatzeko.

Tokiko-simetria talde bereko adierazpen laburtezin ezberdinetatik induzitutako banden adierazpenak ez dira balioakideak. Hala ere, Wyckoff-en posizio ezberdinetatik induzitutako banden adierazpenak balioakideak izaten ahal dira. Bi banda balioakideak izango dira talde-txikiko adierazpen berdinetara subduzitzen badute Brillouinen zonaldeko puntu guztietan.

Oro har, banda bat *konposatua* izango da beste banda adierazpen batzuen batura zuzenaren balioakidea baldin bada. Konposatua ez den banda adierazpena *oinarrizkoa* da. Oinarrizko bandak, simetria maximoko Wyckoff-en posizioetatik induzitzen dira eta dagozkien adierazpenak, [2] web zerbitzarian aurkitu daitezke. Hala ere, simetria maximoko Wyckoff-en posizioetatik induzitutako banda guztiak ez dira oinarrizkoak.

Laburbilduz, talde espazial zehatz baten simetria aurkezten duen kristal batean, posizio zehatz bateko (Wyckoff-en posizio bateko) atomo bat kontsideratzen bada, atomoaren azken orbitalak ezagunak izanik, orbital horiek induzitutako banden simetriaren ezaugarriak (energiaren endakapenak barne) erabat finikaturik geratzen dira. Gainera, bandak aztertzeko, nahikoa da Brillouinen zonaldeko simetria handiko \vec{k} puntuak kontsideratzea. Oro har, analisirako behar den informazio guztia taularatuta agertzen da, esaterako, [2] estekako web zerbitzariko programa ezberdinetan.

Honela, banda elektronikoak esperimentalki kalkulatzeko eta, ondoren, simetria maximoko \vec{k} -puntuetako adierazpen laburtezin guztiak identifikatzeko, material isolatzaileen kasuan, bi egoera agertu daitezke: Fermiren mailaren azpian dauden bandak arestian aipatutako oinarrizko banden kombinazioa izatea, edo ez. Lehenengo kasuan, isolatzailea *tribiala* da; bigarrenean, aldiz, *topologikoa*. Azken kasu honetan, derrigorrez, gainazaleko egoeren kasuan, balentzia banda eta kondukzio banda elkartu egin behar dira. Horren ondorioz, materiala eroalea izanen da gainezalean.

Kapitulua 7

Adibide Praktikoa: Bismutoa.

Egitura kristalino baten oinarrizko deskribapena burutzeko, agertzen duen simetria biltzen duen talde espaziala, sare parametroak eta atomo independenteen multzoaren koordenatuak (hauek okupatzen dituzten Wyckoff-en posizioak) zehaztu behar dira. Honela, kristala osatzen duten atomo guztien posizioak, atomo independenteen koordenatuei talde espazialeko simetria eragiketak aplikatuz lortzen dira.

Bismutoak, $R\bar{3}m$ (#166) talde espazial kristalografikoari dagokion simetria erakusten du, eta ondoko sare parametroak ditu:

$$\begin{cases} a = b = 4.584\text{\AA} \\ c = 11.852\text{\AA} \\ \alpha = \beta = 90^\circ \\ \gamma = 120^\circ \end{cases}$$

Egitura honetan, atomo independente bakarra dago, $(0, 0, 0.237)$ posizioan. Posizio hau, Wyckoff-en $6c$ posizioari dagokio, $(0, 0, z)$ koordenatuak baititu. Posizio berezi honek, $3m$ tokiko simetria aurkezten du. Atomo independente honi talde espazialeko simetria eragiketa guztiak aplikatuz, sare osoa eraikitzen ahal da. Oro har, gelaxka primitiboan bi atomo daude. Lotura estuen metodoa erabiltzeko, ondoko koordenatuak dituzten atomoak aukeratu dira:

$$\begin{cases} Bi1 : (0, 0, 0.237) \\ Bi2 : (0, 0, -0.237) \end{cases}$$

Bismutoaren egitura elektronikoki erreparatuz, $6s$ orbitala erabat betea dauka, eta $6p$ orbitala erdi-beteta ($6p^3$). Aipatu bi orbitalen artean ez dago hibridaziorik, eta beraz, p orbitalak hartu dira kontuan materialaren izaera zehazteko banda elektronikoak aztertzean. Honela, atomoko 3 orbital egongo direnez, 6 funtzio erabili dira lotura estuen metodoan. Oro har, hamiltondarra eraikitzerako orduan, lehen auzokoen arteko elkarrekintza hartu da soilik.

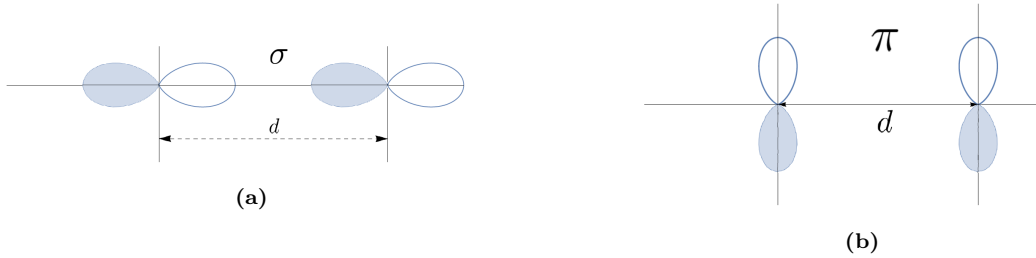
Gelaxka primitiboko atomo bakoitzaren kasuan, ondokoak dira dagozkien lehen auzokoak (koordinatuak oinarri hexagonalean daude adierazita):

$$A : (0, 0, z) \longrightarrow \begin{cases} B1 : (0, 0, -z) + (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}) \\ B2 : (0, 0, -z) + (-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}) \\ B3 : (0, 0, -z) + (-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, \frac{1}{3}) \end{cases} \quad (7.1)$$

$$B : (0, 0, -z) \longrightarrow \begin{cases} A1 : (0, 0, z) + (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, -\frac{1}{3}) \\ A2 : (0, 0, z) + (-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}) \\ A3 : (0, 0, z) + (\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}) \end{cases} \quad (7.2)$$

Atomoen eta dagozkien lehen auzokoen arteko elkarrekintzak aztertzerako orduan, XY planoko p orbitalen arteko elkarrekintzak σ eta π loturek definitzen dituzten egoera limiteen (7.1 irudia) konbinazio gisa definitu dira:

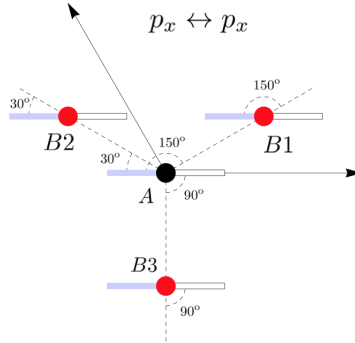
$$H_{\sigma\pi} = \cos\theta_1 \cos\theta_2 H_{\sigma} + \sin\theta_1 \sin\theta_2 H_{\pi} \quad (7.3)$$



7.1. irudia: (a) irudian σ loturaren adierazpen grafikoa ageri da, eta (b) irudian π loturari dagokiona. Egoera limite hauek, XY planoko p orbitalen arteko elkarrekintzak ezaugarritzeko erabili dira.

Esaterako, A atomoaren p_x orbitalaren eta dagozkion B1 lehen auzokoaren p_x orbitalaren arteko elkarrekintza (7.2 irudia) osagaia honela zehazten da:

$$\langle A p_x | H | B_1 p_x \rangle = \cos 150^\circ \cos 150^\circ H_{\sigma} + \sin 150^\circ \sin 150^\circ H_{\pi} = \frac{3}{4} H_{\sigma} + \frac{1}{4} H_{\pi} \quad (7.4)$$



7.2. irudia: A atomoaren eta dagozkien lehen auzokoaren p_x orbitalak.

Aipatu prozedura, bi atomo independenteek dagozkien lehen auzokoekin dituzten p_x , p_y eta p_z orbitalen arteko elkarrekintza posible guztien kasurako errepikatu da. Honela, ondorengo elkarrekintza matrizeak lortu dira, autoegoerak ondoko ordenean hartu direlarik: $|A_{p_x}\rangle$, $|A_{p_y}\rangle$, $|A_{p_z}\rangle$, $|B_{p_x}\rangle$, $|B_{p_y}\rangle$, $|B_{p_z}\rangle$.

$$H_A^{B1} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} H_{\sigma} + \frac{1}{4} H_{\pi} & \frac{\sqrt{3}}{4} (H_{\sigma} - H_{\pi}) & \frac{\sqrt{3}}{2} H_{zx} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} (H_{\sigma} - H_{\pi}) & \frac{1}{4} H_{\sigma} + \frac{3}{4} H_{\pi} & \frac{1}{2} H_{zx} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} H_{zx} & \frac{1}{2} H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

$$H_A^{B2} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}H_\sigma + \frac{1}{4}H_\pi & -\frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & -\frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & \frac{1}{4}H_\sigma + \frac{3}{4}H_\pi & \frac{1}{2}H_{zx} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} & \frac{1}{2}H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.6)$$

$$H_A^{B3} = \begin{pmatrix} H_\pi & 0 & 0 \\ 0 & H_\sigma & -H_{zx} \\ 0 & -H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

$$H_B^{A1} = \begin{pmatrix} H_\pi & 0 & 0 \\ 0 & H_\sigma & -H_{zx} \\ 0 & -H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

$$H_B^{A2} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}H_\sigma + \frac{1}{4}H_\pi & \frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & \frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & \frac{1}{4}H_\sigma + \frac{3}{4}H_\pi & \frac{1}{2}H_{zx} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} & \frac{1}{2}H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

$$H_B^{A3} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}H_\sigma + \frac{1}{4}H_\pi & -\frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & -\frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(H_\sigma - H_\pi) & \frac{1}{4}H_\sigma + \frac{3}{4}H_\pi & \frac{1}{2}H_{zx} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}H_{zx} & \frac{1}{2}H_{zx} & H_{zz} \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

Elkarrakzio hauek kontuan izanik, eta *on-site* energiak kontsideratuz,

$$H_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

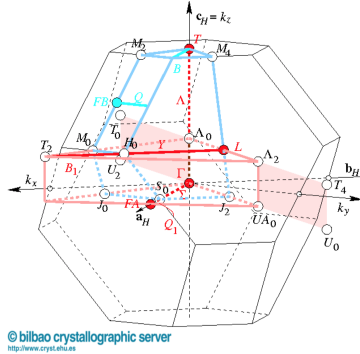
sistema deskribatzen duen Hamiltondarra ondokoa izanen da (Hamiltondar honek sistemak aurkezten duen simetria berbera izango duelarik):

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{B1}} \begin{pmatrix} 0 & H_A^{B1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{B2}} \begin{pmatrix} 0 & H_A^{B2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{B3}} \begin{pmatrix} 0 & H_A^{B3} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{A1}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ H_B^{A1} & 0 \end{pmatrix} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{A2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ H_B^{A2} & 0 \end{pmatrix} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{A3}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ H_B^{A3} & 0 \end{pmatrix}$$

Behin Hamiltondarra ebatzita, Schrödingerren ekuazioa ebatzi da autobalio eta autofuntzioak kalkulatzeko, lotura estuen metodoa erabiliz. Eredu teorikoari jarraituz garatutako ebazpenean, sei parametro daude: ε_x , ε_z , H_π , H_σ , H_{zx} eta H_{zz} . Parametro hauen konbinazio posible bakoitzerako, lortzen den soluzioa ezberdina izanen da. Honela, konbinazio bakoitzarekin lortzen den banden adierazpena ezberdina izanen da, eta ondorioz, azalduko duten izaera elektronikoa ere. Errealitatean, material baten energia bandak eta izaera elektronikoa finkatuta daude. Honela, materialaren izaera eredu teoriko honen bidez azalduko bada, banda elektronikoko errealei gehien hurbiltzea ahalbidetzen duten balioa izanen dute parametroek. Hau da, parametroen konbinazio zehatz bat egokituko zaio material bakoitzari. Hala ere, aurrez ezinezkoa da jakiten parametro horiek izango dituzten balioak. Honela, eredu honetan, konbinazio ezberdinak aztertuko dira, eta horien aurrean banda elektronikoko agertzen duten egitura eta ondorioztatzen duten izaera aztertu. Ebazpenean, soilik lehen auzokoen arteko elkarrekintzak hartu direnez kontuan, bi motatako izaerak lortzen dira: erdieroalea eta isolatzaile tribiala.

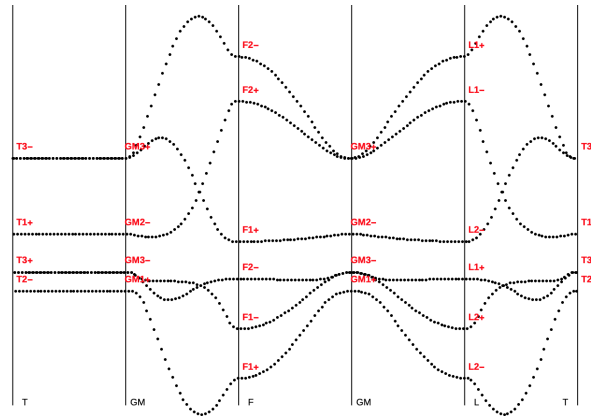
Lotura estuen metodoaren bidezko autobalio eta autobektoreen zehaztapena, ezberdina izanen da elkarrekiko espazioko \vec{k} puntu bakoitzerako. Hala ere, kasu honetan, nahikoa da Brillouinen zonaldeko simetria handiko puntuak kontsideratzea. Horiez gain, banden Brillouinen zonaldeko egitura zehatzagoa definituko bada, puntu horiek lotzen dituzten ibilbideetan ere zehaztu behar dira autoegoera zein autobalioak. Ebazpen honetan, tarteko 40 puntu kontsideratu dira ibilbideak ezaugarritzeko.

Banda elektronikoek, Bismuto elementuari dagokion Brillouinen zonaldean (7.3 irudia) agertzen duten itxura zehazteko, ekuazio sekularren ebazpena konputazionalki bideratu da. Ebazpenean, tokiko-simetriaren hurbilketa zein bateragarritasun erlazioak ere hartu dira kontutan, bandak elkarrekiko espazioan ezaugarritzeko.



7.3. irudia: $R\bar{3}m$ (#166) talde espazialari dagokion Brillouinen zonaldea, [2]-tik hartua.

Demagun ondoko parametro konbinazioa kontsideratzen dela: $\varepsilon_x = 2$, $\varepsilon_z = 2.5$, $H_\pi = -0.9$, $H_\sigma = 0.5$, $H_{zx} = 0.2$ eta $H_{zz} = 0.1$. Elkarrekiko espazioan p orbitalek induzitutako banda elektronikoek duten egitura, 7.4 irudian adierazten da.



7.4. irudia: $\varepsilon_x = 2$, $\varepsilon_z = 2.5$, $H_\pi = -0.9$, $H_\sigma = 0.5$, $H_{zx} = 0.2$ eta $H_{zz} = 0.1$ diren kasurako, p orbitalarekin lotutako Bismutoaren banda elektronikoak.

Gelaxka unitatean 2 atomo independente daude, eta azken orbitalean (p) 3 elektroi ditu bakoitzak. Ereduztapen honetan ez denez spin-a kontuta hartu, banda elektroniko bakoitzean 2 elektroi egonen dira. Honela, oinarritzeko egoeran, energia baxueneko 3 bandak beteko dira. Aukeratutako parametro konbinazio honekin, beteta dauden azken 3 banda elektronikoen eta hutsik dauden lehenengo banden artean gap

elektroniko bat behatzen da (7.4 irudia). Honenbestez, materiala, isolatzaile tribiala izanen da. Kasu honetan, bateragarritasun erlazioak aztertzean, aurrean zitekeen posible dela beteta dauden azken 3 banden kasuan, energia handiagoko bandekin gurutzapenik eman gabe zeharkatzea Brillouinen zonaldea.

Beteta dauden azken 3 banda elektronikoen, Brillouinen puntu ezberdinak lotzean betetzen dituzten bateragarritasun erlazioak aztertuz, ondoko ibilbideak behatzen dira (DCOMPREL [2]-[3] programa erabiliz lortuak):

- T eta Γ puntuen artean, $\Lambda = (0, 0, w)$ lerroaren bidez:

$$T_2^-(1) \longrightarrow \Lambda_1(1) \longleftarrow \Gamma_1^+(1) \quad (7.12)$$

$$T_3^+(2) \longrightarrow \Lambda_3(2) \longleftarrow \Gamma_3^-(2) \quad (7.13)$$

- Γ eta F puntuen artean, $\Sigma = (u, -2u, 0)$ lerroaren bidez:

$$\Gamma_1^+(1) \longrightarrow \Sigma_1(1) \longleftarrow F_1^+(1) \quad (7.14)$$

$$\Gamma_3^-(2) \longrightarrow \Sigma_1(1) \oplus \Sigma_2(1) \longleftarrow F_1^-(1) \oplus F_2^-(1) \quad (7.15)$$

- F eta Γ puntuen artean, $c = (u, -u, w)$ planoaren bidez:

$$\Gamma_1^+(1) \longrightarrow C_1(1) \longleftarrow F_1^+(1) \quad (7.16)$$

$$\Gamma_3^-(2) \longrightarrow C_1(1) \oplus C_2(1) \longleftarrow F_1^-(1) \oplus F_2^-(1) \quad (7.17)$$

- Γ eta L puntuen artean, $c = (u, -u, w)$ planoaren bidez:

$$\Gamma_1^+(1) \longrightarrow C_1(1) \longleftarrow L_2^-(1) \quad (7.18)$$

$$\Gamma_3^-(2) \longrightarrow C_1(1) \oplus C_2(1) \longleftarrow L_2^+(1) \oplus L_1^+(1) \quad (7.19)$$

- L eta T puntuak, $Y = (u, u, 3/2)$ lerroaren bidez:

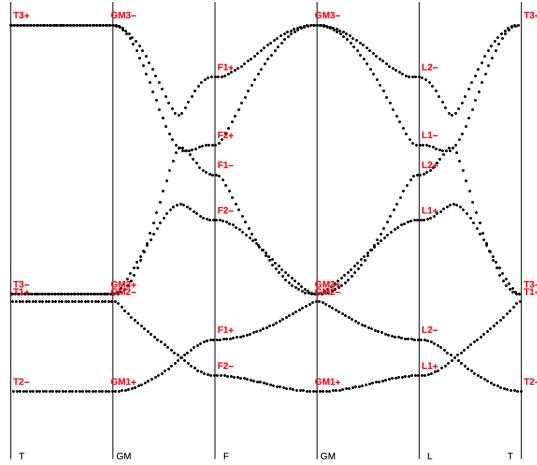
$$L_2^-(1) \longrightarrow Y_2(1) \longleftarrow T_2^-(1) \quad (7.20)$$

$$L_2^+(1) \oplus L_1^+(1) \longrightarrow Y_1(1) \oplus Y_2(1) \longleftarrow T_3^+(2) \quad (7.21)$$

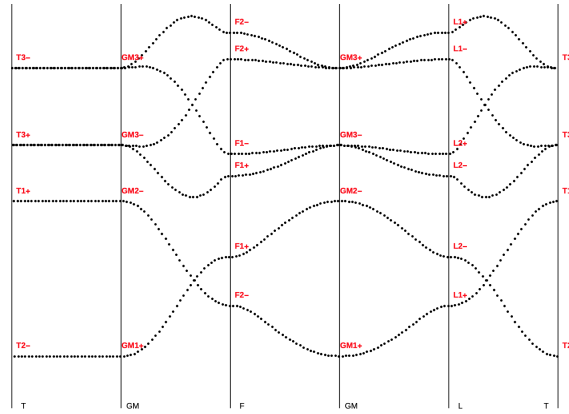
Aurreko erlazioetan, geziek, simetria zein noranzkotan txikitzen den adierazten dute. Horrela, simetria handiko puntu batetik, simetria txikiagoko lerro zein plano batera zuzentzen dira.

Honela, (7.12)-(7.21) erlazioetatik ere ondorioztatzen da, parametroen konbinazio honetarako, Brillouinen zonaldea zeharkatzean (simetria handiko puntuetan zein horiek lotzen dituzten ibilbideetan), berberak direla energia baxueneko 3 bandak. Honela, gap elektroniko bat behatzen da hiru banda hauen eta hurrengo banden artean eta materialak izaera isolatzaile tribiala agertzen du. Hau da, ez da eroapen bandaren eta balentzia bandaren arteko gainezarmenik jazotzen.

Aldiz, $[\varepsilon_x = 4, \varepsilon_z = 1.5, H_\pi = 0.8, H_\sigma = 0.4, H_{zx} = 0.3$ eta $H_{zz} = 0.2]$ parametro konbinazioa kontsideratzen baldin bada, 7.5 irudiko banda elektronikoen lortzen dira. Adibide honetan ikusten da, bandek Brillouinen zonaldea zeharkatzean, ez direla beti berberak energia baxueneko 3 bandak. Esaterako, F puntuan F_2^- adierazpen laburtezinaren arabera transformatzen den banda elektronikoen energia (kasu honetan 3. banda izango dena) F_1^- adierazpenaren arabera transformatzen den bandak (4. banda) duena baino txikiagoa den arren, puntu hau Γ puntuarekin lotzen duen ibilbidean, bandak gurutzatu egiten dira. Hau da, balentzia bandaren eta eroapen bandaren artean ez da gap elektronikorik, gainezarri egiten dira Brillouinen zonaldeko zenbait puntutan. Horrez gain, zenbait puntutan, 3. banda eta 4.



7.5. irudia: Burututako ebazpenean, $\varepsilon_x = 4$, $\varepsilon_z = 1.5$, $H_\pi = 0.8$, $H_\sigma = 0.4$, $H_{zx} = 0.3$ eta $H_{zz} = 0.2$ parametroen konbinaziorako lortzen diren banda elektronikoak.



7.6. irudia: Burututako ebazpenean, $\varepsilon_x = 4$, $\varepsilon_z = 2$, $H_\pi = -0.5$, $H_\sigma = 0.2$, $H_{zx} = 0.1$ eta $H_{zz} = 0.3$ parametroen konbinaziorako lortzen diren banda elektronikoak.

banda endakatuak daude. Beraz, kasu honetan, materialak ez du izaera isolatzailea erakusten.

3. adibide bat kontsideratu da, $[\varepsilon_x = 4$, $\varepsilon_z = 2$, $H_\pi = -0.5$, $H_\sigma = 0.2$, $H_{zx} = 0.1$ eta $H_{zz} = 0.3]$ parametro konbinazioarekin. Kasu honetan, 7.6 irudiko banda elektronikoak lortzen dira. Adibide honetan ere, ez da izaera isolatzaile tribiala behatzen. Izan ere, 7.6 irudian ikus daiteke nola Brillouinen zonaldeko simetria handiko zenbait puntutan 3. banda eta 4. banda endakatuak dauden, eta beraz ez dagoela balentzia eta kondukzio banden arteko banantzea eragiten duen gap elektronikorik. Hau da, kasu honetan, Brillouinen zonaldeko zenbait puntutan bandak gainezarrita daude eta beraz, materiala erdieroalea da.

Kasu erreal hau kontsideratzean, ikusi da, 6 parametro aske izanik, nahi adina konbinazio kontsideratu daitezkeela, eta bakoitzaren kasuan ezberdinak direla lortzen diren banda elektronikoak. Horrez gain, banda elektronikoek agertzen duten forma anitzaren aurrean, materialak izaera ezberdina izan da. Aitzitik, material bakoitzaren kasuan, finkatuta egonen da eredu teoriko honen bidez garatutako ebazpenean parametroek hartuko dituzten balioak. Izan ere, materiaren banda elektronikoak (zein izaera elektronikoa) zehaztuta daude, eta kalkulaturako bandak materialaren banda errealetara ahalbait ho-

bekien doitzea ahalbidetzen duten balioak hartuko dituzte aipatu parametroek. Hau da, materialaren izaera zehaztasun handienarekin ezaugarritzea bermatzen duten balioak izango dituzte parametro horiek.

7. kapituluko ebazpen honetan, hurbilketarik sinpleena kontsideratu da, lehen auzokoen elkarrekintzak hartu direlarik soilik aintzat. Horrek, garatutako ereduaren zehaztasuna eta egokitasuna mugatzen ditu. Horrela, zenbat eta auzoko gehiagoren eragina kontuan hartu, are eredu zehatzagoa eraikitzen ahal da. Hala ere, elkarrekintza gehiago kontsideratzean, nabarmen handitzen da ebazpenean agertzen diren parametroen kopurua, eta horrekin, kostu eta konplexutasun konputazionalak.

DFT kalkuluen arabera, Bismuto elementua isolatzaile topologikoa da [7]. Baina, eredu honetan, lehenengo auzokoen arteko elkarrekintzak kontsideratu direnez soilik, materiala isolatzailea deneko kasuetan, izaera isolatzaile tribiala agertzen du. Beraz, ezinbestekoa suertatzen da auzoko gehiagoren arteko elkarrekintzak kontsideratzea, isolatzaile topologikoei dagokien banda egitura konplexuagoak lortuko badira.

Kapitulua 8

Ondorioak

Azken atal honetan, garapenean zehar ondorioztatutako ideiarik garrantzitsuenak azpimarratuko dira. Berebat, etorkizunera begira, interesgarriak izan daitezkeen hobekuntzak proposatuko dira.

Material baten izaera elektronikoa, energia bandek elkarrekiko espazioan duten egituraren arabera da. Banden egitura, partzialki identifikatu daiteke, Brillouinen zonaldeko simetria handiko puntuetan aurkezten duten simetria aztertuz; hots, puntu horietan, talde-txikiari dagokion zein adierazpenen arabera transformatzen diren zehaztuz. Azken hori, elementu osatzaileen tokiko-simetrian oinarrituz zehaztu daiteke. Horrez hain, banda elektronikoak, simetria handiko puntuetan nola lotzen diren baldintzatuko dute bateragarritasun erlazioek.

Momentuaren espazioan bandek duten egitura ondorioztatuzko, Brillouinen zonaldeko puntu ezberdinetako banda multzoak bateratzen dira. Brillouinen zonaldeko \vec{k} puntu bakoitza, aldaezin mantenduko da (sare bektore bat gora-behera) dagokion talde-txikiko simetria eragiketen aurrean. Aitzitik, banda elektronikoak talde-txikiei dagozkien adierazpen laburtezinen (zein horien arteko konbinazioen) arabera transformatzen dira Brillouinen zonaldeko puntu ezberdinetan. Honela, simetria handiko Brillouinen zonaldeko puntuei dagozkien adierazpen laburtezinek, banda elektronikoen endakapenak zehazten dituzte. Simetria handiko puntuetatik aldentzean, zenbait endakapen hautsi egiten dira simetria murriztearen ondorioz, eta banden dispersioa ematen da.

Simetria ezberdina agertzen duten Brillouinen zonaldeko puntuak, lerro zein planoen bitartez lotzen dira. Kristalaren simetriek baldintzatutako bateragarritasun erlazioek, elkarrekiko espazioko aipatu puntu, lerro zein planoei dagozkien adierazpen laburtezinen arteko konexioak zehazten dituzte. Arestian aipatu gisan, energia bandetako bakoitza, adierazpen laburtezin (edo hauen konbinazio) zehatz baten gisa transformatuko da puntu, lerro eta plano horietako bakoitzean. Honela, adierazpen laburtezin ezberdinen arteko konexio posibleak definituta daudelarik, bandek Brillouinen zonaldean izanen duten egitura zehaztuta dago.

Bestalde, egitura kristalinoaren simetria gain, elementu osatzaile ezberdinen (atomo zein molekulen) tokiko-simetria kontsideratzean, egoera hedatuen eta lokalizatuen arteko erlazioak definitzen dira. Hain zuzen ere, tokiko-simetria taldearen adierazpenen bitartez induzitutako talde espazialaren adierazpenak aztertuz, egoera hedatu eta lokalizatuen arteko konexioa zehaztu daiteke, elkarrekiko espazioko puntu ezberdinei dagozkien talde-txikien bitartez. Aipatu hurbilketa, Frobeniusen erreproizitate teoreman zein taldeen teoriarekin lotutako subdukzio eta indukzio eragiketetan oinarritzen da. Beraz, soilik atomo independenteei dagozkien Wyckoff posizioa eta dagozkien orbitalen simetria ezagututa, Brillouinen zonaldeko puntu guztietan banda elektronikoek duten egitura ondorioztatu daiteke. Banda horiek, oinarritzkoak zein konposatuak izan daitezke.

Oro har, lotura estuen metodoari esker, egitura kristalino baten autoegoera eta autobalioak zehaztu daitezke. Horretarako, elektroien uhin-funtzioak, isolatutako atomoen uhin-funtzioen gainezarmen gisa kontsideratzen dira. Ondorioz, sistema deskribatzen duen Hamiltondarra eraikitzeke, atomo ezberdinen orbitalen arteko elkarrekintzak hartu behar dira aintzat. Zenbat eta auzoko gehiago kontsideratu hurbilketan, are zehatzagoa izanen da sistemaren definizioa; baina, problemaren dimentsioa nabarmen hazten da.

Bestalde, elementu baten banda elektronikoek elkarrekiko espazioan duten egitura definitzeko prozeduran beharrezkoa den informazio guztia, jasota dago Bilbao Crystallographic Server [2] zein Topological Quantum Chemistry [8] web zerbitzarietan.

Honela, taldeen teoriak, lotura estuen metodoak, bateragarritasun erlazioek eta tokiko-simetriaren hurbilketak, isolatzaile topologikoen identifikazioak eskatzen duen kostu konputazionala murrizten dute, sare kristalografikoaren analisia simetrian oinarrituz. Hala ere, kontsideratutako orbitalen arteko elkarrekintzen kopuruak, ereduaren zehaztasuna baldintzatuko du. Honela, etorkizunera begira, LCAO eta taldeen teoria izaera topologikoa identifikatzeko erabilgarriak izango badira, elektroien banden topologia aztertzeke eredu zehatzagoak burutu behar dira, auzoko gehiagoren orbitalen arteko elkarrekintzak kontsideratuz. Horrez gain, aztertutako metodologian beste aurrerapen bat sartu daiteke: spin-orbita akoplamendua aintzat hartzea. Izan ere, zenbait materialetan, fenomeno hau da konportamolde topologiko ez tribialaren jatorria. Hala ere, spin-orbita akoplamendua kontuan hartuko bada, Hamiltondarrean, *adierazpen bikoitzak* [3] kontsideratu behar dira.

Bibliografia

- [1] Mildred S. Dresselhaus, Gene Dresselhaus eta Ado Jorio, *Group Theory. Application to the Physics of Condensed Matter*, (Springer-Verlag, Berlin 2008)
- [2] Bilbao Crystallographic Server. <https://www.cryst.ehu.es>
- [3] Luis Elcoro, Barry Bradlyn, Zhijun Wang, Maia G. Vergniory, Jennifer Cano, Claudia Fleser, B. Andrei Bernevig, Danel Orobengoa, Gemma de la Flor eta Mois I. Aroyo, "Double crystallographic groups and their representations on the Bilbao Crystallographic Server," *J. Appl. Cryst.*, 50, 1457-1477 (2017)
- [4] Jiacheng Gao, Quansheng Wu, Clas Persson eta Zhijun Wang, "Irvsp: to obtain irreducible representations of electronic states in the VASP," arXiv:2002.04032 [cond-mat.mtrl-sci]
- [5] Tahir Yusufaly, David Vanderbilt eta Sinisa Coh, "Tight Binding Formalism in the Context of the PYTHTB Package," <https://www.physics.rutgers.edu/pythtb/formalism.html>
- [6] Mois I. Aroyo *International Tables for Crystallography, Volume A, 6th edition, Space-Group Symmetry*. (Wiley)
- [7] Barry Bradlyn, L. Elcoro, Jennifer Cano, M. G. Vergniory, Zhijun Wang, C. Felser, M. I. Aroyo eta Andrei Bernevig, "Topological quantum chemistry" *Nature*, **547**, 298–305 (2017).
- [8] Topological Quantum Chemistry. <https://www.topologicalquantumchemistry.com/>