1 Grups discrets infinits: El grup de traslacions

Considerem una xarxa unidimensional. Anomenem a a la longitud de la cel·la unitat. El conjunt de traslacions $\hat{T}_n$, $n \in Z$, definides:[1]

$$\hat{T}_n f(x) = f(x + na) \tag{1}$$

formen un grup abelià. La representació coordenada de l'operador de traslació és: $\hat{T}_n = e^{ian\hat{p}}$ on $\hat{p}$ és l'operador de moment lineal,[2] $\hat{p} = -i\frac{d}{dx}$, com es pot comprovar immediatament:

$$e^{i\,a\,n\,\hat{p}} f(x) = \sum_j^{\infty} \frac{(a\,n)^j}{j!} \frac{d^j f(x)}{dx^j} = f(x + a\,n)$$

Com $n \in Z$, hi ha infinites operacions i, per ser el grup abelià ($\hat{T}_n\hat{T}_m = \hat{T}_m\hat{T}_n = e^{ia(n+m)\hat{p}}$), aquest tindrà infinites representacions irreduïbles unidimensionals. Per a calcular els caràcters d'aquestes representacións usarem les autofuncions de $\hat{p}$: $\hat{p}\, e^{i\,k\,x} = k\, e^{i\,k\,x}$, on $k \in (-\infty, \infty)$:

$$\hat{T}_n\, e^{i\,k\,x} = \sum_q^{\infty} \frac{(i\,a\,n)^q}{q!}\, \hat{p}^q\, e^{i\,k\,x} = \sum_q^{\infty} \frac{(i\,a\,n\,k)^q}{q!}\, e^{i\,k\,x} = e^{i\,a\,n\,k}\, e^{i\,k\,x} \tag{2}$$

Escrivim doncs la taula de caràcters:

	E	$\hat{T}_n,\ n \in Z$	basis
k	1	$e^{i\,k\,n\,a}$	$e^{i\,k\,x}$

(3)

En principi $k \in (-\infty, \infty)$, però resulta que les funcions pròpies del moment lineal lligades a k i $k' = k + \frac{2\pi}{a}\, m$, $m \in Z$, són equivalents, en el sentit que són base de la mateixa irrep, atès que $\exp[i\,(\frac{2\pi}{a})\, n\, a] = 1$. Com la representació totalment simètrica[3] va lligada a $k = 0$, aleshores, és convenient definir les irreps no equivalents del grup amb $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$. A aquesta regió de valors de k s'anomena primera zona de Brillouin. Tanmateix, s'anomena espai recíproc a l'espai de les k.

La generalització a 3D és immediata si canviem els escalars x, k pels vectors 3D $\mathbf{r}$ i $\mathbf{k}$.

Les bases més generals d'aquestes irreps les podem escriure $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}}\, u(\mathbf{r})$, on $u(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u(\mathbf{r})$, i $\mathbf{a}$ és un vector de xarxa. En efecte,

$$\hat{T}_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\,\mathbf{k}\,(\mathbf{r}+\mathbf{a})}\, u(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{a}}\, e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}}\, u(\mathbf{r}) = e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{a}}\, \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{4}$$

Aquestes funcions, anomenades de Bloch, són autofuncions de l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$, amb $V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r})$, on $\mathbf{a}$ és un vector de la xarxa.

Si subtituïm aquestes funcions en l'equació d'autovalors, després d'una poca àlgebra, trobem que $u(\mathbf{r})$ ha de ser autofunció de l'anomenat hamiltonià $k \cdot p$:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{k^2}{2\,m} + \frac{1}{m}\mathbf{k} \cdot \nabla \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\, u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{5}$$

És interessant considerar el cas límit de potencial zero, $V(\mathbf{r}) \to 0$. En tal cas $\hat{\mathcal{H}} \to -\frac{1}{2}\nabla^2$, de manera que les autofuncions de $\hat{\mathbf{p}}$, $e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}}$, ho són també de $\hat{\mathcal{H}}$. Aquestes funcions s'anomenen ones planes i el vector $\mathbf{k}$ té significat de moment lineal.[4]

L'altre cas límit és el de *cel·la buida*, i.e., el límit $\mathbf{a} \to \infty$. En aquest límit la xarxa periòdica es converteix en un conjunt d'àtoms o molècules aïllades. Tanmateix, atès que $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, veiem que la xarxa recíproca colapsa en

[1] Estrictament hauriem d'escriure: $\hat{T}_{-n} f(x) = f(x + na)$. Però al remat tot serà una qüestió d'etiquetatge de les representacions.
[2] Implícitament estem usant a.u.
[3] La que té tots els caràcters igual a la unitat
[4] En el cas $V(\mathbf{r}) \neq 0$ al vector $\mathbf{k}$ se l'anomena pseudomoment.

l'anomenat punt Γ ($\mathbf{k} = 0$), de manera que les funcions $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}}\,u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ colapsen en $\Psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r})$, que representa la autofunció de l'àtom o molècula aïllada. Finalment, com el conjunt de funcions de Bloch colapsen en un *orbital*, tindem en el sòlid real tantes bandes com orbitals o funcions té l'àtom (o molècula) aïllat.