

# InS の電子帯構造の群論的考察

財 部 健 一

岡山理科大学 理学部 基礎理学科

(昭和61年9月30日 受理)

## 1. 序論

著者は InS (indium monosulfide) の電子帯構造計算を行っているが、その一部分として、帯構造の群論的考察を行ったので報告する。

InS は III - VI 族化合物半導体の 1 つである。この系では、GaSe にみられるように多くは層状物質となる。したがって積層周期の違いによって、様々の多形が生じる。InS もこの系の多形の 1 つと考えられるが、InS の結晶構造は層状とはならず、3 次元的な斜方晶になる。また、cation-cation まわりのカルコゲン原子の配置をみると、層状物質では、エタン分子でいわれる、重なり配置 (eclipsed configuration) に相当し、一方、InS では“ずれ配置” (staggered configuration) に相当している。このことは、InS が本質的に ‘Hume-Rothery 則’ からはずれているという意味で、この系内で特異な位置を占めており、興味ある物質である。

一方、InS はこの様に一群の層状物質と本質的に違っているため、その物性研究は実験的にも、理論的にも層状物質群と比較したとき大きく遅れているのが現状である。また、電子帯構造の理論的研究は現在まで報告されていない。本研究はその一部をなすものである。

## 2. 電子帯構造と群論

バンド計算とは、原理的には時間に依存しない Schrödinger 方程式、

$$H\psi_n = E_n \psi_n \quad (1)$$

を解いて、固有値  $E_n$ 、固有関数  $\psi_n$  を求めることに帰着する。ハミルトニアン  $H$  は一電子近似の立場で書くと、

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2)$$

となる。一電子近似では次の 2 点を仮定する。

(1) 原子系は電子系と比較すると、その運動は静止しているとして考えられるので分離

して考える。(Born-Oppenheimer 近似)

- (2) 各々の電子は核と他の電子がつくる平均化されたポテンシャルの中を運動するとする。(原子における, Hartree, Hartree-Fock 近似)

こうすれば, ハミルトニアン  $H$  は(1)式のように一電子の座標 ( $\mathbf{r}$ ), 運動量 ( $\mathbf{p}$ ) のみの関数として表すことができる。

しかし, この様な簡単化を行っても, まだ(1)式を解くのは容易ではない。一方, ハミルトニアン  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  の中には結晶のもつ, 空間的対称性が直接反映されており, この点に注目して考察すれば, 数値計算することなく, 厳密に以下の様な事を知ることができる。

- (1) Brillouin 域内の各  $\mathbf{k}$  点での固有値の縮退度,
- (2) 各  $\mathbf{k}$  点での波動関数の取りうる対称性,
- (3) 各  $\mathbf{k}$  点での光学的双極子遷移に対する, 偏光を含む選択則,

などである。これらを応用すれば, 例えば, ある  $\mathbf{k}$  点で固有値が縮退することが, 群論的考察で予めわかれば, 計算された固有値をみて, そのバンド計算の善し悪しの判定になるであろう。(3)の選択則は, 帯間遷移を同定するのに, 光子エネルギーだけではなく, 偏光も考えて同定することができ, 異方性結晶ではとくに有効である。なお, 以下の考察ではスピン-軌道相互作用は考察に含めていないことを注記しておく。

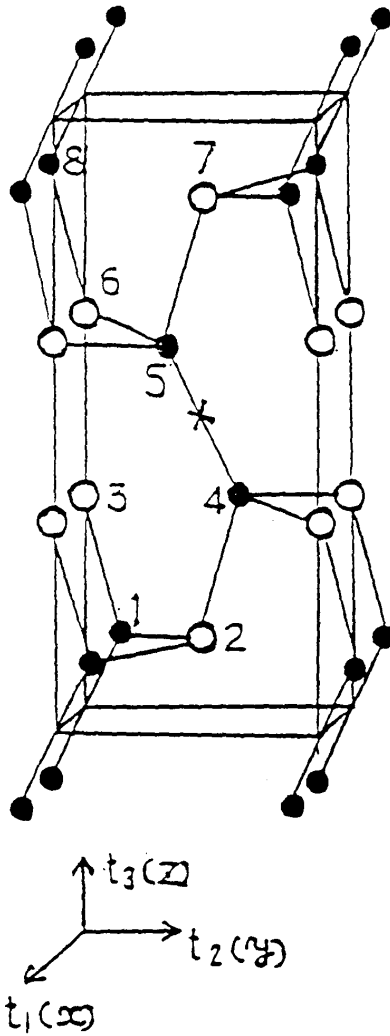
### 3. InS への群論の適用と諸結果

群論のバンド理論への適用とは, 群論の言葉で言えば  $\mathbf{k}$  群の既約表現と指標表を求めることにつきる。この点について順次説明していく。

最初に InS の空間群と対称操作について述べる。図 1 に, InS の結晶構造<sup>1)</sup>を描いた。単位胞の Bravais 格子は直方格子になる。座標軸  $x, y, z$  を結晶軸  $a, b, c$  と平行に定める。格子単位ベクトル  $(a, 0, 0), (0, b, 0), (0, 0, c)$  を  $t_1, t_2, t_3$  と記す。単位胞は In, S 原子を 4 個ずつ含むが各原子の位置を 1~8 で番号を付け図中に記した。Table 1, 2 に原子位置と原子間距離を記しておいた。なお, 格子ベクトルだけ移動して重なり合う原子は等価である。例えば,  $(0.0, -0.125, 0.871)$  と  $(0.0, 0.875, 0.871)$  とにある In 原子などである。InS の空間群は  $D_{2h}^{14}$  で, 点群の対称操作を Table 3 にのせてある。<sup>1)</sup> 空間群は点群と並進操作によって構成される。点群は  $D_{2h}$  である。考察を容易にするため, 点群の対称操作の原点は In(4)-In(5) 結合の中点におく。点群には, 恒等操作の他に,  $x, y, z$  軸回りの  $\pi$  回転, 鏡映操作及び反転操作がある。例えば  $C_{2x}$  操作を行うと, 原子の移動は,

$$(1 \rightleftharpoons 8), (2 \rightleftharpoons 7), (3 \rightleftharpoons 6), (4 \rightleftharpoons 5),$$

となり, 各々, In, S 原子同士が重なる。(1→8)の移動を追ってみると, (1)原子の位置



● Indium atom  
○ Sulphur atom

図1 InS の Bravais 格子と原子位置. ×印は対称操作の原点を示す.

Table 1. The atomic positions in InS.

| number | atom | x   | y       | z     |
|--------|------|-----|---------|-------|
| 1      | In   | 0.0 | 0.125   | 0.121 |
| 2      | S    | 0.5 | 0.495   | 0.145 |
| 3      | S    | 0.0 | - 0.005 | 0.355 |
| 4      | In   | 0.5 | 0.625   | 0.379 |
| 5      | In   | 0.5 | 0.375   | 0.621 |
| 6      | S    | 0.0 | 0.005   | 0.645 |
| 7      | S    | 0.5 | 0.505   | 0.855 |
| 8      | In   | 0.0 | - 0.125 | 0.879 |

Table 2. The unit cell dimensions, and the shortest interatomic distances in InS.  $n$  in  $n\text{In}$  or  $n\text{S}$  is number of atoms at equal distance.

| distances | Å      |
|-----------|--------|
| a         | 3.944  |
| b         | 4.447  |
| c         | 10.648 |
| In-In     | 2.806  |
| In-1S     | 2.553  |
| In-2S     | 2.595  |
| S-1S      | 3.088  |
| S-4S      | 3.719  |

Table 3. The list of symmetry operation of  $D_{2h}^2$

| Operation           |   |
|---------------------|---|
| E                   | identity  |
| $\{C_{2x} 0\}$      | $\pm\pi$ rotation about $t_1$                             |
| $\{C_{2y} \tau\}$   | $\pm\pi$ rotation about $t_2$ and translation with $\tau$ |
| $\{C_{2z} \tau\}$   | $\pm\pi$ rotation about $t_3$ and translation with $\tau$ |
| $\{I 0\}$           | space inversion   |
| $\{\sigma_x 0\}$    | mirror plane $\perp t_1$                                  |
| $\{\sigma_y \tau\}$ | mirror plane $\perp t_2$ and translation with $\tau$      |
| $\{\sigma_z \tau\}$ | mirror plane $\perp t_3$ and translation with $\tau$      |

$$t_1=(a, 0, 0); \quad t_2=(0, b, 0); \quad t_3=(0, 0, c)$$

$$\tau=(a/2, b/2, c/2)$$

座標は Table 1 から,  $(0, 0.125, 0.121)$  とわかり,

$$C_{2x}(0, 0.125, 0.121)=(0.0, 0.875, 0.879),$$

$$(0.0, 0.875, 0.879)-t_2=(0.0, -0.125, 0.871)$$

となり,  $(1 \rightarrow 8)$  In 原子が移り, 重なる. 同様に  $C_{2y}$  操作を行うと, 回転後, 格子ベクトルだけでは同種原子が重なることが出来ず, 半端な並進,  $\tau=1/2(t_1+t_2+t_3)$ , が必要になる. これは, 対称操作の原点を移しても消えることのない本質的なものである.  $\tau$  を含む操作が 4 個ある ( $C_{2y}$ ,  $C_{2z}$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ ). このような, 半端な並進  $\tau$  を含む空間群は非共型 (non-symmorphic) であるとよび,  $\tau$  のない共型 (symmorphic) な空間群に較べて複雑で,  $k$  群を考察するとき, とくに Brillouin 域境界で注意が必要となる.

次に, 図 2 に InS の逆格子の第 1 Brillouin 域を示した. 逆格子ベクトル,

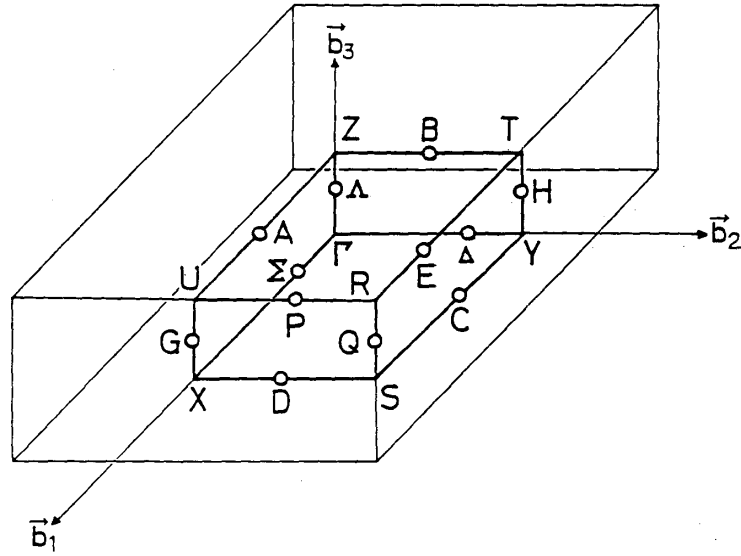


図2 InS の第1 Brillouin 域とその中の対称性の高い点の名称.  
逆格子は単純直方格子である

$b_1, b_2, b_3$  は,

$$b_1 = 2\pi(t_1^{-1}, 0, 0), \quad b_2 = 2\pi(t_2^{-1}, 0, 0), \quad b_3 = 2\pi(t_3^{-1}, 0, 0),$$

と与えられる。これらが、InS の直方格子に対して定まり、逆格子ベクトル、格子ベクトル、座標軸の間には、

$$b_1 \parallel t_1 \parallel x, \quad b_2 \parallel t_2 \parallel y, \quad b_3 \parallel t_3 \parallel z,$$

と、単純で、明確な関係が規定されている。第1 Brillouin 域の  $k$  は

$$k = p_1 b_1 + p_2 b_2 + p_3 b_3; \quad (-0.5 < p_i \leq 0.5),$$

と表すことができる。 $k$  は Bloch 関数の良い量子数である。ここで  $k$  群を考える。 $k$  群は、Brillouin 域の  $k$  を不変に保つ対称操作によって構成される。結晶の空間群の部分群になる。Bloch 関数の考察から、逆格子ベクトルだけ離れた、 $k$  と  $k + K$  も等しいとする。記号的に、

$$k \doteq k + K,$$

と書く。したがって、次のような  $k$  は等しい。(0.5, 0.0, 0.0) と (-0.5, 0.0, 0.0) などである。 $\Sigma$ 線上の

$$k = p_1 b_1; \quad |p_1| < 0.5,$$

を取り上げて  $k$  群をつくってみる。Table 3 に示した点対称操作の中で、例えば  $C_{2y}$  は

$$C_{2y} k = -k,$$

となり、等しい  $k$  にうつらず、 $k$  を不変に保つ操作ではない。このようにして、

$$E, C_{2x}, \sigma_y, \sigma_z,$$

の4つの操作が  $k$  を不変に保つ。これが、群になっていることは群の4公理<sup>2)</sup>を満足していることを確かめればよい。例えば、

$$\sigma_y \sigma_z = C_{2x},$$

となり、積に関して閉じている、などである。以上で、 $\Sigma$ 線上の  $k$  群が定まった。ここで対称操作の数のことを位数 ( $g$ ) といい、今の場合、 $g=4$  である。これからは、群論の次の一般的定理を用いて、指標表をもとめることになる。

- (i) 既約表現の個数 ( $n_r$ ) は類の個数 ( $n_c$ ) に等しい。
- (ii) 既約表現の次元 ( $d_i$ ) の2乗は位数 ( $g$ ) と次の関係がある。

$$\sum_{i=1}^{n_r} d_i^2 = g$$

- (iii) 指標表 (character table) は全ての行ベクトル、列ベクトルの各々の積に直交する。

今の場合、 $n_r = n_c$  となり、既約表現の数は4個である。(2)から  $d_i$  は1次元であることがわかる。1次元の場合、指標がそのまま、既約表現になる。このようにし、実際に求めたものを Table 4 の  $\Sigma$  のところにのせてある。(3)の関係が成立していることも、実際に積を作れば容易にわかる。8個の高対称点、 $\Gamma, X, Y, Z, S, T, U, R$  12本の高対称線、 $\Sigma, D, C, \Delta, A, P, E, B, A, G, Q, H$  で求めた指標表をすべて Table 4 にのせておいた。詳細は省くが、Brillouin 域境界では、 $D_{2h}^2$  が半端な並進  $\tau$  を含むため、上の(i)~(iii)だけでは指標表が求まらず、Herring の方法<sup>2)</sup>によった。Table 4 からわかることは次のようなことである。

Table 4. The derived character table for 8 high symmetry points and 12 high symmetry lines.  $k$  is shown in unit of  $(a, b, c)/\pi$ .  $\tau$  is the fractional traslation;  $(a/2, b/2, c/2)$ .

$\Gamma : k=(0, 0, 0)$ , reality=1

|              | $E$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{C_{2y} \tau\}$ | $\{C_{2z} \tau\}$ | $\{I 0\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ | $\{\sigma_z \tau\}$ |
|--------------|-----|----------------|-------------------|-------------------|-----------|------------------|---------------------|---------------------|
| $\Gamma_1^+$ | 1   | 1              | 1                 | 1                 | 1         | 1                | 1                   | 1                   |
| $\Gamma_2^+$ | 1   | -1             | 1                 | -1                | 1         | -1               | 1                   | -1                  |
| $\Gamma_3^+$ | 1   | 1              | -1                | -1                | 1         | 1                | -1                  | -1                  |
| $\Gamma_4^+$ | 1   | -1             | -1                | 1                 | 1         | -1               | -1                  | 1                   |
| $\Gamma_1^-$ | 1   | 1              | 1                 | 1                 | -1        | -1               | -1                  | -1                  |
| $\Gamma_2^-$ | 1   | -1             | 1                 | -1                | -1        | 1                | -1                  | 1                   |
| $\Gamma_3^-$ | 1   | 1              | -1                | -1                | -1        | -1               | 1                   | 1                   |
| $\Gamma_4^-$ | 1   | -1             | -1                | 1                 | -1        | 1                | 1                   | -1                  |

X:  $k=(1, 0, 0)$ , reality=1,  $t=(t_1, 0, 0)$

|       | E | $\{E t\}$ | $\{\sigma_x \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0, t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{C_{2x} t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ |
|-------|---|-----------|-----------------------------|--------------|---------------------------|----------------|----------------|-----------------------------|---------------------|---------------------------|
| $X_1$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | 2              | -2             | 0                           | 0                   | 0                         |
| $X_2$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | -2             | 2              | 0                           | 0                   | 0                         |

Y:  $k=(0, 1, 0)$ , reality=1,  $t=(0, t_2, 0)$

|       | E | $\{E t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0, t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_x t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ |
|-------|---|-----------|-----------------------------|--------------|---------------------------|------------------|------------------|---------------------------|-------------------|-----------------------------|
| $Y_1$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | 2                | -2               | 0                         | 0                 | 0                           |
| $Y_2$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | -2               | 2                | 0                         | 0                 | 0                           |

Z:  $k=(0, 0, 1)$ , reality=1,  $t=(0, 0, t_3)$

|       | E | $\{E t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0, t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_x t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ | $\{\sigma_x \tau, \tau+t\}$ |
|-------|---|-----------|-----------------------------|--------------|---------------------------|------------------|------------------|---------------------------|-------------------|-----------------------------|
| $Z_1$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | 2                | -2               | 0                         | 0                 | 0                           |
| $Z_2$ | 2 | -2        | 0                           | 0            | 0                         | -2               | 2                | 0                         | 0                 | 0                           |

U:  $k=(1, 0, 1)$ , reality=1,  $t=(2t_1, 0, t_3)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_x \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0\}$ | $\{I t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|-----------------------------|-------------------|-----------------------------|-----------|-----------|---------------------------|---------------------|---------------------------|
| $U^+$ | 2         | -2        | 0                           | 0                 | 0                           | 2         | -2        | 0                         | 0                   | 0                         |
| $U^-$ | 2         | -2        | 0                           | 0                 | 0                           | -2        | 2         | 0                         | 0                   | 0                         |

S:  $k=(1, 1, 0)$ , reality=1,  $t=(2t_1, t_2, 0)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2z} 0, t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0\}$ | $\{I t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ |
|-------|-----------|-----------|-----------------------------|-------------------|-----------------------------|-----------|-----------|---------------------------|---------------------|-------------------|
| $S^+$ | 2         | -2        | 0                           | 0                 | 0                           | 2         | -2        | 0                         | 0                   | 0                 |
| $S^-$ | 2         | -2        | 0                           | 0                 | 0                           | -2        | 2         | 0                         | 0                   | 0                 |

R:  $k=(1, 1, 1)$ , reality=1,  $t=(t_1, t_2, t_3)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{I 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{C_{2x} t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{\sigma_x \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------------|--------------|-----------------------------|----------------|----------------|---------------------------|---------------------|-----------------------------|
| $R_1$ | 2         | -2        | 0                         | 0            | 0                           | 2              | -2             | 0                         | 0                   | 0                           |
| $R_2$ | 2         | -2        | 0                         | 0            | 0                           | -2             | 2              | 0                         | 0                   | 0                           |

$T: k=(0, 1, 1)$ , reality=3,  $t=(0, 2t_2, t_3)$

|         | $E$ | $\{\sigma_z \tau\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_z \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ | $\{C_{2x} t\}$ | $\{\sigma_y \tau+t\}$ |
|---------|-----|---------------------|-----------|-----------------------|----------------|---------------------|----------------|-----------------------|
| $T_1^+$ | 1   | $i$                 | -1        | $-i$                  | 1              | $i$                 | -1             | $-i$                  |
| $T_2^+$ | 1   | $-i$                | -1        | $i$                   | 1              | $-i$                | -1             | $i$                   |
| $T_3^+$ | 1   | $i$                 | -1        | $-i$                  | -1             | $-i$                | 1              | $i$                   |
| $T_4^+$ | 1   | $-i$                | -1        | $i$                   | -1             | $i$                 | 1              | $-i$                  |
| $T_1^-$ | 1   | $i$                 | -1        | $-i$                  | 1              | $i$                 | -1             | $-i$                  |
| $T_2^-$ | 1   | $-i$                | -1        | $i$                   | 1              | $-i$                | -1             | $i$                   |
| $T_3^-$ | 1   | $i$                 | -1        | $-i$                  | -1             | $-i$                | 1              | $i$                   |
| $T_4^-$ | 1   | $-i$                | -1        | $i$                   | -1             | $i$                 | 1              | $-i$                  |

\*

| $\{I 0\}$ | $\{C_{2z} \tau\}$ | $\{I t\}$ | $\{C_{2z} \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{C_{2y} \tau\}$ | $\{\sigma_x t\}$ | $\{C_{2y} \tau+t\}$ |
|-----------|-------------------|-----------|---------------------|------------------|-------------------|------------------|---------------------|
| 1         | $i$               | -1        | $-i$                | 1                | $i$               | -1               | $-i$                |
| 1         | $-i$              | -1        | $i$                 | 1                | $-i$              | -1               | $i$                 |
| 1         | $i$               | -1        | $-i$                | -1               | $-i$              | 1                | $i$                 |
| 1         | $-i$              | -1        | $i$                 | -1               | $i$               | 1                | $-i$                |
| -1        | $-i$              | 1         | $i$                 | -1               | $-i$              | 1                | $i$                 |
| -1        | $i$               | 1         | $-i$                | -1               | $i$               | 1                | $-i$                |
| -1        | $-i$              | 1         | $i$                 | 1                | $i$               | -1               | $-i$                |
| -1        | $i$               | 1         | $-i$                | 1                | $-i$              | -1               | $i$                 |

\* continued

$\Sigma: k=(\alpha, 0, 0)$ , reality=1,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|            | $\{E 0\}$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ | $\{\sigma_z \tau\}$ |
|------------|-----------|----------------|---------------------|---------------------|
| $\Sigma_1$ | 1         | 1              | $A$                 | $A$                 |
| $\Sigma_2$ | 1         | 1              | $-A$                | $-A$                |
| $\Sigma_3$ | 1         | -1             | $A$                 | $-A$                |
| $\Sigma_4$ | 1         | -1             | $-A$                | $A$                 |

$\Delta: k=(0, \alpha, 0)$ , reality=1,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|            | $\{E 0\}$ | $\{C_{2y} \tau\}$ | $\{\sigma_z \tau\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ |
|------------|-----------|-------------------|---------------------|------------------|
| $\Delta_1$ | 1         | $A$               | $A$                 | 1                |
| $\Delta_2$ | 1         | $A$               | $-A$                | -1               |
| $\Delta_3$ | 1         | $-A$              | $A$                 | -1               |
| $\Delta_4$ | 1         | $-A$              | $-A$                | 1                |



$\Lambda: k=(0, 0, \alpha)$ , reality=1,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{C_{2z} \tau\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ |
|-------|-----------|-------------------|------------------|---------------------|
| $A_1$ | 1         | $A$               | 1                | $A$                 |
| $A_2$ | 1         | $A$               | -1               | $-A$                |
| $A_3$ | 1         | $-A$              | 1                | $-A$                |
| $A_4$ | 1         | $-A$              | -1               | $A$                 |

$E: k=(\alpha, 1, 1)$ , reality=3,  $t=(0, 2t_2, t_3)$ ,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_z \tau\}$ | $\{\sigma_z \tau+t\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ | $\{\sigma_y \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0\}$ | $\{C_{2x} t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------|-----------------------|---------------------|-----------------------|----------------|----------------|
| $E_1$ | 1         | -1        | $A$                 | $-A$                  | $A$                 | $-A$                  | 1              | -1             |
| $E_2$ | 1         | -1        | $-A$                | $A$                   | $-A$                | $A$                   | 1              | -1             |
| $E_3$ | 1         | -1        | $-A$                | $A$                   | $A$                 | $-A$                  | -1             | 1              |
| $E_4$ | 1         | -1        | $A$                 | $-A$                  | $-A$                | $A$                   | -1             | 1              |

$B: k=(0, \alpha, 1)$ , reality=3,  $t=(0, 0, t_3)$ ,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|           | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_z \tau\}$ | $\{\sigma_z \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_x t\}$ | $\{C_{2y} \tau\}$ | $\{C_{2y} \tau+t\}$ |
|-----------|-----------|-----------|---------------------|-----------------------|------------------|------------------|-------------------|---------------------|
| ${}^2B'$  | 1         | -1        | $A$                 | $-A$                  | 1                | -1               | $A$               | $-A$                |
| ${}^1B'$  | 1         | -1        | $-A$                | $A$                   | 1                | -1               | $-A$              | $A$                 |
| ${}^2B''$ | 1         | -1        | $-A$                | $A$                   | -1               | 1                | $A$               | $-A$                |
| ${}^1B''$ | 1         | -1        | $A$                 | $-A$                  | -1               | 1                | $-A$              | $A$                 |

$H: k=(0, 1, \alpha)$ , reality=3,  $t=(0, t_1, 0)$ ,  $A=\exp(i\alpha\pi/2)$

|           | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_x 0\}$ | $\{\sigma_x t\}$ | $\{\sigma_y \tau\}$ | $\{\sigma_y \tau+t\}$ | $\{C_{2z} \tau\}$ | $\{C_{2z} \tau+t\}$ |
|-----------|-----------|-----------|------------------|------------------|---------------------|-----------------------|-------------------|---------------------|
| ${}^2H'$  | 1         | -1        | 1                | -1               | $A$                 | $-A$                  | $A$               | $-A$                |
| ${}^1H'$  | 1         | -1        | 1                | -1               | $-A$                | $A$                   | $-A$              | $A$                 |
| ${}^2H''$ | 1         | -1        | -1               | 1                | $-A$                | $A$                   | $A$               | $-A$                |
| ${}^1H''$ | 1         | -1        | -1               | 1                | $A$                 | $-A$                  | $-A$              | $A$                 |

$A: k=(\alpha, 0, 1), \text{reality}=1, t=(0, 0, t_3)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|-----------------------------|-------------------|-----------------------------|
| $A_1$ | 2         | -2        | 0                           | 0                 | 0                           |

$G: k=(1, 0, \alpha), \text{reality}=1, t=(t_1, 0, 0)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------|---------------------------|-----------------------------|
| $G_1$ | 2         | -2        | 0                   | 0                         | 0                           |

$P: k=(1, \alpha, 1), \text{reality}=1, t=(2t_1, 0, t_3)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------------|-----------------------------|---------------------|
| $P_1$ | 2         | -2        | 0                         | 0                           | 0                   |

$Q: k=(1, 1, \alpha), \text{reality}=1, t=(2t_1, t_2, 0)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{C_{2z} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------------|---------------------|-----------------------------|
| $Q_1$ | 2         | -2        | 0                         | 0                   | 0                           |

$D: k=(1, \alpha, 0), \text{reality}=1, t=(t_1, 0, 0)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{C_{2y} \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_x 0, t\}$ |
|-------|-----------|-----------|---------------------------|-----------------------------|---------------------|
| $D_1$ | 2         | -2        | 0                         | 0                           | 0                   |

$C: k=(\alpha, 1, 0), \text{reality}=1, t=(0, t_2, 0)$

|       | $\{E 0\}$ | $\{E t\}$ | $\{C_{2x} 0, t\}$ | $\{\sigma_y \tau, \tau+t\}$ | $\{\sigma_z \tau, \tau+t\}$ |
|-------|-----------|-----------|-------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| $C_1$ | 2         | -2        | 0                 | 0                           | 0                           |

Table 4. continued

- (1) Brillouin 域内 ( $\Gamma, \Sigma, A, A$ ) ではすべて1次元表現となった。従って、スピンを除いて、固有値の縮退はない。
- (2) Brillouin 域境界面上では、E, B, H, T を除いた全てが2次元表現となる。これらは、映進面( $\{\sigma_y|\tau\}, \{\sigma_z|\tau\}$ ) とらせん軸( $\{C_{2y}|\tau\}, \{C_{2z}|\tau\}$ ) によるバンドの合体 (sticking together of the band) が生じたものである。もし、 $\tau$ がない共型な群ならば1次元表現になる。E, B, H, T は1次元表現であるが、複素数を含む表現となっているので、時間反転対称性を考慮すると、複素共役な表現 ( $T_1^+$ と $T_2^+$ など) が縮重する。(3.2) 式のハミルトニアンでは、外部磁場を考えていないので、時間反転対称性が成立する。従って、境界面上では、E, B, H, T も含めて、すべて固有値は2重に縮重する。なお、Table 4 で Reality とあるのは、時間反転対称性を加えたとき、縮重が生じないものを1、生じるものを3としてある。また、ベク

トル世は, Herring の方法で, 新しく法をつくる時に用いた付加並進ベクトルである.

さらに, 指標表から, 共立関係と光学電気双極子遷移に対する選択則を求めた. それらを Table 5, 6 にまとめておいた. Table 6 をみると, X, R, U, S 点で2本以上の偏光に同時に許容遷移となるが, 他の点では, 各偏光に対して選択則が生じる. このことは斜方晶系という, InS の低い対称性に基づく.

Table 5. Compatibility relation

| $X_1$                 | $X_2$                 | $Y_1$                 | $Y_2$                 | $Z_1$       | $Z_2$       |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------|-------------|
| $\Sigma_1 + \Sigma_2$ | $\Sigma_3 + \Sigma_4$ | $\Delta_1 + \Delta_4$ | $\Delta_2 + \Delta_3$ | $A_1 + A_3$ | $A_2 + A_4$ |

| $\Gamma_1^+$ | $\Gamma_2^+$ | $\Gamma_3^+$ | $\Gamma_4^+$ | $\Gamma_1^-$ | $\Gamma_2^-$ | $\Gamma_3^-$ | $\Gamma_4^-$ |
|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| $\Sigma_1$   | $\Sigma_3$   | $\Sigma_2$   | $\Sigma_4$   | $\Sigma_2$   | $\Sigma_4$   | $\Sigma_1$   | $\Sigma_3$   |
| $\Delta_1$   | $\Delta_2$   | $\Delta_4$   | $\Delta_3$   | $\Delta_2$   | $\Delta_1$   | $\Delta_3$   | $\Delta_4$   |
| $A_1$        | $A_4$        | $A_3$        | $A_2$        | $A_2$        | $A_3$        | $A_4$        | $A_1$        |

| $Z_1$             | $Z_2$               | $Y_1$             | $Y_2$               | $R_1$       | $R_2$       |
|-------------------|---------------------|-------------------|---------------------|-------------|-------------|
| ${}^2B' + {}^1B'$ | ${}^2B'' + {}^1B''$ | ${}^2H' + {}^1H'$ | ${}^2H'' + {}^1H''$ | $E_1 + E_2$ | $E_3 + E_4$ |

| $T_1^+$  | $T_2^+$  | $T_3^+$   | $T_4^+$   | $T_1^-$   | $T_2^-$   | $T_3^-$  | $T_4^-$  |
|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|----------|
| $E_1$    | $E_2$    | $E_4$     | $E_3$     | $E_1$     | $E_2$     | $E_4$    | $E_3$    |
| ${}^2B'$ | ${}^1B'$ | ${}^1B''$ | ${}^2B''$ | ${}^1B''$ | ${}^2B''$ | ${}^2B'$ | ${}^1B'$ |
| ${}^2H'$ | ${}^1H'$ | ${}^2H''$ | ${}^1H''$ | ${}^1H''$ | ${}^2H''$ | ${}^1H'$ | ${}^2H'$ |

Table 6. Selection rules for optical dipole transitions

| initial state  | accessible final state |                |                |
|----------------|------------------------|----------------|----------------|
|                | $E // x$               | $E // y$       | $E // z$       |
| $\Gamma_1^\pm$ | $\Gamma_3^\mp$         | $\Gamma_2^\mp$ | $\Gamma_4^\mp$ |
| $\Gamma_2^\pm$ | $\Gamma_4^\mp$         | $\Gamma_1^\mp$ | $\Gamma_3^\mp$ |
| $\Gamma_3^\pm$ | $\Gamma_1^\mp$         | $\Gamma_4^\mp$ | $\Gamma_2^\mp$ |
| $\Gamma_4^\pm$ | $\Gamma_2^\mp$         | $\Gamma_3^\mp$ | $\Gamma_1^\mp$ |
| $Y_1$<br>$Y_2$ | $Y_2$<br>$Y_1$         |                |                |
| $X_1$<br>$X_2$ |                        | $X_2$<br>$X_1$ | $X_2$<br>$X_1$ |
| $Z_1$<br>$Z_2$ | $Z_2$<br>$Y_1$         |                |                |
| $U^\pm$        | $U^\mp$                | $U^\mp$        | $U^\mp$        |
| $S^\pm$        | $S^\mp$                | $S^\mp$        | $S^\mp$        |
| $R_1$<br>$R_2$ |                        | $R_2$<br>$R_1$ | $R_2$<br>$R_1$ |
| $T_1^\pm$      | $T_1^\mp$              | $T_3^\mp$      | $T_4^\mp$      |
| $T_2^\pm$      | $T_2^\mp$              | $T_4^\mp$      | $T_3^\mp$      |
| $T_3^\pm$      | $T_3^\mp$              | $T_1^\mp$      | $T_2^\mp$      |
| $T_4^\pm$      | $T_4^\mp$              | $T_2^\mp$      | $T_1^\mp$      |
| $\Sigma_1$     | $\Sigma_1$             | $\Sigma_4$     | $\Sigma_3$     |
| $\Sigma_2$     | $\Sigma_2$             | $\Sigma_3$     | $\Sigma_4$     |
| $\Sigma_3$     | $\Sigma_3$             | $\Sigma_2$     | $\Sigma_1$     |
| $\Sigma_4$     | $\Sigma_4$             | $\Sigma_1$     | $\Sigma_2$     |
| $\Delta_1$     | $\Delta_3$             | $\Delta_1$     | $\Delta_4$     |
| $\Delta_2$     | $\Delta_4$             | $\Delta_2$     | $\Delta_3$     |
| $\Delta_3$     | $\Delta_1$             | $\Delta_3$     | $\Delta_2$     |
| $\Delta_4$     | $\Delta_2$             | $\Delta_4$     | $\Delta_1$     |
| $\Lambda_1$    | $\Lambda_4$            | $\Lambda_3$    | $\Lambda_1$    |
| $\Lambda_2$    | $\Lambda_3$            | $\Lambda_4$    | $\Lambda_2$    |
| $\Lambda_3$    | $\Lambda_2$            | $\Lambda_1$    | $\Lambda_3$    |
| $\Lambda_4$    | $\Lambda_1$            | $\Lambda_2$    | $\Lambda_4$    |

|           |           |           |           |
|-----------|-----------|-----------|-----------|
| $E_1$     | $E_1$     | $E_4$     | $E_3$     |
| $E_2$     | $E_2$     | $E_3$     | $E_4$     |
| $E_3$     | $E_3$     | $E_2$     | $E_1$     |
| $E_4$     | $E_4$     | $E_1$     | $E_2$     |
| ${}^2B$   | ${}^1B''$ | ${}^2B$   | ${}^1B$   |
| ${}^1B$   | ${}^2B''$ | ${}^1B$   | ${}^2B$   |
| ${}^2B''$ | ${}^1B$   | ${}^2B''$ | ${}^1B$   |
| ${}^1B''$ | ${}^2B$   | ${}^1B''$ | ${}^2B''$ |
| ${}^2H$   | ${}^1H''$ | ${}^1H$   | ${}^2H$   |
| ${}^1H$   | ${}^2H''$ | ${}^2H$   | ${}^1H$   |
| ${}^2H''$ | ${}^1H$   | ${}^1H''$ | ${}^2H''$ |
| ${}^1H''$ | ${}^2H$   | ${}^2H''$ | ${}^1H$   |

#### 4. 結論

群論的考察により得られた諸結果は以下のようなものである。

1. Brillouin 域内では、偶然縮重を除いて縮重はない。
2. Brillouin 境界上では、時間反転対称性を含めると固有値は、すくなくとも 2 重に縮重する。
3. Table 5 に共立関係、Table 6 に光学電気双極子遷移に対する選択則をまとめておいた。

これらの諸結果は、InS について今回初めて得られたものである。なお、数値計算を含めた電子帯構造は現在、草稿を準備している。

#### 5. 謝辞

日頃、いろいろ有益な討論と励ましをいただいている本学科川村教授、若村助教授に感謝いたします。また、面倒な表作成を本学科 4 年生、川井清孝君に助力をお願いしました。感謝いたします。

#### 参考文献

1. K. Schubert, E. Dörre and E. Günzel: *Naturwissenschaften*, 41 (1954) 448.
2. 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝: *応用群論—物理学と群表現—*, (裳華房, 1976).
3. C.J. Bradley and A.C. Cracknell: *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*, (Clarendon Press, Oxford, 1972).

Group Theoretical Considerations on the Electronic  
Band Structure of InS

Kenichi TAKARABE

*Department of Natural Science, Okayama University  
of Science*

(Received September 30, 1986)

Group theoretical considerations on the electronic band structure of InS were performed at the first time. On 8 high points and 12 high symmetry lines the character tables were derived. Compatibility relation and selection rules for optical dipole transitions were also derived. The results were summarized in Tables 5-7.