

SYMMETRY

برنامه SYMMETRY گروه‌های نقطه ای هریک از نقاط شبکه، عملگرهای تقارنی متناظر با هر گروه نقطه ای، و مقادیر LM نمایش هماهنگی شبکه را بر اساس نوع شبکه و موقعیتهای اتمی داده شده تعیین می کند. ورودی این برنامه case.struct و خروجیهای آن case.outputs و case.in2_st است. این برنامه توسط G. Vielsack برای تعیین ترکیبات LM در یک دستگاه مختصات دلخواه نوشته شده است که سپس در آن از ماتریسهای دوران موضعی برای کمینه کردن تعداد ترکیبات LM در بسط هماهنگی شبکه پتانسیل و چگالی بار مطابق با رابط زیر استفاده می شود:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{LM} V_{LM}(\vec{r}) Y_{LM}(\vec{r}) ; r \in MT \\ \sum_K V_K e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} ; r \in I \end{cases}, \quad \rho(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{LM} \rho_{LM}(\vec{r}) Y_{LM}(\vec{r}) ; r \in MT \\ \sum_K \rho_K e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} ; r \in I \end{cases}$$

که در آنها MT و I به ترتیب نواحی درون کرات و ناحیه خارج از کرات را نمایش می دهند. مثلا در گروه نقطه ای mm2 و برای

$L=1$ اگر دستگاه مختصات به گونه ای اختیار شود که محور z بر محور دوران دوگانه منطبق باشد آنگاه فقط ترکیب $LM=1, 0$ لازم است، در حالی که در یک دستگاه مختصات دلخواه هر سه جمله $LM=1, 1$; $1, 1$; $1, 0$ ضروری اند.

تعبیر بارهای جزیی مستلزم انتخاب یک دستگاه مختصات مناسب است. در مثال بالا اربیتالهای p به دو نمایش کاهش ناپذیر شکافته می شوند، اما آنها تنها در صورتی می توانند به اربیتالهای p_x, p_y, p_z نسبت داده شوند که محور z یک محور دوران دو گانه باشد.