12 Doppelpunktgruppen

12.1 Teilchen mit Spin (Elektronen)

Berücksichtigt man den Spin der Elektronen, so landet man beim Hilbertraum, der aufgespannt wird durch

mit Ortsraumbasis und Spinorzuständen , wobei und Eigenzustände von sind.

Verhalten von Spinoren unter räumlichen Drehungen:

Damit ist z.B. bei -Drehung

also:

ist nicht mehr das Eins-Element der Gruppe, sondern

Unter einer Inversion ist ein Spinor invariant (Dirac-Gleichung)

12.2 Definition der Doppelpunktgruppen

Offenbar müssen wir bei eigentlichen Drehungen unterscheiden zwischen Winkeln und .

Fall 1) eigentliche PG

Fall 2) uneigentlich

Formal ist es am einfachsten, wir führen eine neue "fiktive" Eins ein:

Sei dann

die PG des Systems ohne Spin. Dann schreiben wir die "Doppelpunktgruppe" (DPG) als

Vorsicht:

Diese Schreibweise suggeriert, dass Untergruppe von ist und geschrieben werden kann als

In diesem Fall wären die i.i.D. von einfach die Produkt-darstellung der i.i.D. von und (->Aufgabe 10) Darstellungsproblem wäre gelöst.

Tatsächlich aber ist die Algebra der Elemente modifiziert, z.B. ist für eine 2-zählige Drehung nicht mehr , sondern . Die Teilmenge von ist also nicht mehr abgeschlossen, und damit keine UG von !

Stattdessen gilt:

Die Untergruppe

ist Normalteiler von mit den Nebenklassen

Die Faktorgruppe ist dann isomorph zur PG , mit dem Isomorphismus

denn

Gleichung (*) gilt tatsächlich für alle Drehungen, auch für zwei-zählige, denn

Die Algebra der Elemente ergibt sich allgemein mit Hilfe der expliziten Form der Doppelgruppe:

wobei die Elemente der PG sind, allerdings mit Drehwinkeln . Wenn eine Drehinversion ist, geht nur der Drehanteil in ein. Gruppenmultiplikation:

Beispiel:

Einfache Spezialfälle:

i) n-zählige Drehung

ii) Inversion vertauscht mit allen Elementen von , d.h.

iii) Drehinversion

also z.B. bei Spiegelebenen:

Bemerkung:

Bei der Definition der DPG haben wir bereits angenommen, dass die ST auf den Ortsraum und den Spinorraum gleichzeitig angewandt werden. Dies wird physikalisch erzwungen durch die Spin-Bahn-Kopplung (z.B.) der Form

Ist die Spin-Bahn-Kopplung gleich Null, so ist die SG die Produktgruppe irr. Darstellungsräume von sind Produkträume (Aufg. 10)

?/ man kann den Spin in diesem Fall auch einfach ignorieren

12.3 Die Klassen der Doppelpunktgruppen

Hier benötigen wir die explizite Form der DPG

A) Zwei Elemente , die in der PG in unterschiedlichen Klassen sind, sind auch in der DPG in verschiedenen Klassen, denn die Konjugiertheit wird von den Matrizen verhindert.

B) Wenn zwei Drehungen in einer Klasse sind, dann sind nur dann in einer Klasse wenn ( )

In Frage kommen also nur zwei-zählige Drehachsen. Dann ist noch zu klären, mit welchen Drehungen sich Gleichung (x) erfüllen lässt.

Antwort: muss eine zweizählige Drehachse senkrecht zu und sein

Beispiel:

Offenbar gilt die gleiche Argumentation bei Spiegelebenen
, wenn es eine zwei-zählige Drehachse gibt.

In beiden Fällen sind also alle Elemente in einer Klasse in .

C) Falls die Elemente einer Klasse in G nicht-zweizählige Drehungen enthält, gilt

die Klasse spaltet also auf in zwei Klassen .
Nicht zwingend sind aber die Elemente oder .

Einfachstes Gegenbeispiel: die Klasse
Hier ist

Also bilden und jeweils eine Klasse

Zusammangefasst: Im Normalfall haben DPG Klassen

Für die anderen gilt:

$\mathcal{G}$	r	$\bar{r}$
D_2, C_{2v}	4	5
D_{2h}	8	10
D_4, C_{4v}, D_{2d}	5	7
D_{4h}	10	14
D_6, C_{6v}, D_{3h}	6	9
D_{6h}	12	18
T	4	7
T_h	8	14
T_d, O	5	8
O_h	10	16

Beispiel für DPG:

Sei

ist also offenbar isomorph zur Gruppe (-> Kap.2) und besitzt die 4 Klassen

→ Charaktertafel:

	E^+	δ_2^+	E^-	δ_2^-
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	1	-1
Γ_3	1	i	-1	- i
Γ_4	1	-i	-1	i

Table 11.1: Character table of the double group $\bar{C}_2$.

12.4 Irreduzible Darstellungen der DPG

Mathematisch haben wir es mit folgendem Problem zu tun:
Gegeben ist eine Gruppe G mit einem Normalteiler H (hier: $\mathcal{E}$), dessen i.i.D. bekannt sind. Dann gibt es ein allgemeines Verfahren zur Konstruktion der i.i.D. von G
(siehe z.B. Streitwolf, Kap. 1.3.7–1.3.9) oder Böhm, Kap.VII6.
Wir gehen hier pragmatischer vor und beschränken uns auf unseren Spezialfall der DPG.

12.4.1 Symmetrische Darstellungen

Es gilt: Ist eine irr. D. einer PG . Dann ergibt sich eine irr. D. der zugehörigen DPG, indem man setzt

Beweis:

i) Darstellungseigenschaften: klar

ii) Irreduzibilität:

5.2.3:

<u>Bemerkung</u>:

Diese r irr. Darstellungen von heißen "einfach" oder symmetrisch. In Ein-Teilchen-Systemen sind sie offenbar nicht realisiert, da

(also kein Vorzeichenwechsel bei -Drehung)

aber: In N-Teilchen-Systemen (mit geradem N) treten sie auf.

12.4.2 Spinordarstellungen

Alle anderen irr. D. heißen "Spinor-" oder "Extradarstellungen". Zu ihrer Konstruktion startet man sinnvollerweise von den Produktmatrizen der irr. Darstellungen von und den Spinor-Matrizen . Damit erhält man r weitere Darstellungen der DPG. Dann ist zu prüfen:

i) Sind diese Darstellungen eventuell reduzibel?

ii) Nach der Ausreduktion: Ergeben sich dabei eventuell äquivalente Darstellungen? Bei den Gruppen mit

muss das so sein, da man sonst mehr irr. Darstellungen hätte als Klassen

Beispiele:

A)

Also: Hier sind offenbar beide Produktdarstellungen reduzibel und äquivalent und wir erhalten genau die beiden eindimensionalen Darstellungen wie oben.

B)

Hier gibt es Klassen und damit i.i.D. Da wir vier symmetrische bereits kennen, kann es hier nur eine weitere

Spinordarstellung geben. Gleicher Ansatz:

D_2	E	$\delta_{2,x}$	$\delta_{2,y}$	$\delta_{2,z}$
A	1	1	1	1
B_1	1	−1	−1	1
B_2	1	−1	1	−1
B_3	1	1	−1	−1

Mit den 4 Darstellungen von kann man also 4 zwei-dimensionale Darstellungen von konstruieren. Bereits die erste ist aber irreduzibel, so dass die anderen äquivalent sein müssen. Die Irreduzibilität folgt wieder aus 5.2.3:

c)

$\bar{O}$		E^+	E^-	$8C_3^+$	$8C_3^-$	$3C_2^+$ $3C_2^-$	$6C_4^+$	$6C_4^-$	$6C_2'^+$ $6C_2'^-$
$x^2+y^2+z^2=r^2$	Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
	Γ_2	1	1	1	1	1	−1	−1	−1
$(x^2-y^2, 3z^2-r^2)$	Γ_3	2	2	−1	−1	2	0	0	0
	Γ_4	3	3	0	0	−1	1	1	−1
(x,y,z)	Γ_5	3	3	0	0	−1	−1	−1	1
$\left\vert\frac{1}{2};\sigma\right\rangle\ (\sigma=\pm\frac{1}{2})$	Γ_6	2	−2	1	−1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\Gamma_6\times\Gamma_2$	Γ_7	2	−2	1	−1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
$\left\vert\frac{3}{2};\sigma\right\rangle\ (\sigma=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2})$	Γ_8	4	−4	−1	1	0	0	0	0

Table 11.3: Character table of the group $\bar{O}$

Darstellungsfunktionen:

i) symmetrisch: offenbar die gleichen wie bei O

ii) extra:

Alternative auch hier wieder: https://cryst.ehu.es/

Bei der Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen gibt es bei den DPG ein gewisses Durcheinander, z.B. bei :

notations				type	dimension
A_{1g}	Γ_1^+	Γ_1	Γ_1	sym	1
A_{2g}	Γ_2^+	Γ_2	Γ_2	sym	1
E_g	Γ_3^+	Γ_3	Γ_{12}	sym	2
T_{1g}	Γ_4^+	Γ_4	Γ'_{15}	sym	3
T_{2g}	Γ_5^+	Γ_5	Γ'_{25}	sym	3
$\bar{E}_{1g}$	Γ_6^+	Γ_6	Γ_6^+	extra	2
$\bar{E}_{2g}$	Γ_7^+	Γ_7	Γ_7^+	extra	2
$\bar{G}_g$	Γ_8^+	Γ_8	Γ_8^+	extra	4
A_{1u}	Γ_1^-	Γ'_1	Γ'_1	sym	1
A_{2u}	Γ_2^-	Γ'_2	Γ'_2	sym	1
E_u	Γ_3^-	Γ'_3	Γ'_{12}	sym	2
T_{1u}	Γ_4^-	Γ'_4	Γ_{15}	sym	3
T_{2u}	Γ_5^-	Γ'_5	Γ_{25}	sym	3
$\bar{E}_{1u}$	Γ_6^-	Γ'_6	Γ_6^-	extra	2
$\bar{E}_{2u}$	Γ_7^-	Γ'_7	Γ_7^-	extra	2
$\bar{G}_u$	Γ_8^-	Γ'_8	Γ_8^-	extra	4

Table 11.4: Notations for the irreduzible representations of $\bar{O}$