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 Produktdarstellung 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	$\tilde{r}$
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:

Bemerkung:

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
$\lvert\frac{1}{2};\sigma\rangle$ $(\sigma=\pm\frac{1}{2})$	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
$\lvert\frac{3}{2};\sigma\rangle$ $(\sigma=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2})$	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 $\bar{O}$

13 Raumgruppen

13.1 Definitionen

13.1.1 Reelle affine Gruppen

Die "reelle affine Gruppe" A besteht aus allen Translationen und orthogonalen Transformationen des Raums

Gruppeneigenschaften:

i)

ii)

ii)

13.1.2 Definition von Raumgruppen

Als "Raumgruppe" (RG) eines Kristalls bezeichnen wir die Untergruppe von A, die den Kristall invariant lässt.

13.1.3 Translationsgruppen und Punktgruppen

i) Die (abelsche) UG der reinen Translationen

einer RG G heißt "Translationsgruppe von G". Ihre Elemente heißen "primitive Translationen" und definieren das Bravais-Gitter

des Kristalls.

ii) ist Normalteiler von . Alle Elemente einer Nebenklasse von T haben den gleichen Drehanteil .

iii) Die Menge aller Drehanteile in definiert die "Punktgruppe von ".

iv) Die Elemente von lassen das durch T definierte Bravais-Gitter invariant.

Beweise:

i) klar

ii) –Normalteiler:

Sei . Dann ist

a) Beh. (iv):

b) T ist Vereinigung vollständiger Klassen

T ist Normalteiler

(Elemente einer Klasse sind alle mit für irgendein)

– Nebenklassen: seien und in gleicher NK bzgl. T. Dann gilt

ii) alle in einer NK sind gleich

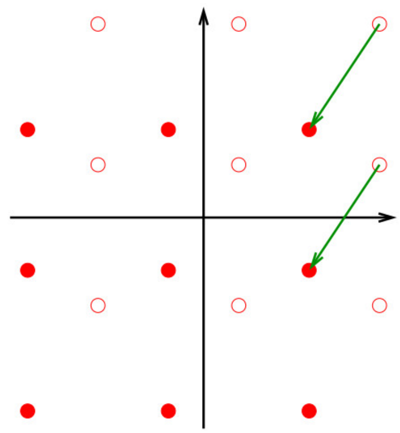
iii) Noch zu zeigen: ist eine Gruppe:

– Seien , dann gibt es mit

Bemerkungen:

Die Definition der Punktgruppe eines Kristalls verallgemeinert unsere frühere Definition, denn

i) Bisher waren PG definiert bzgl. eines gewissen Ursprungs. Dies ist nun nicht mehr Zahl, z.B. in 2 Dimensionen:



Die Gruppe ist also unabhängig von der Wahl des Ursprungs, denn: Sei ein RG eines Kristalls mit den Elementen
Dann vermittelt die Verschiebung des Urspungs
eines Isomorphismus :

ii) Angenommen:

(d.h. mit) mit (wie in i))

dann ist die Frage: Gibt es immer eine Ursprungsverschiebung, so dass und damit

Antwort: Dies gelingt nicht immer, d.h. es gibt Kristalle mit Elementen von , die nur zusammen mit einer Translation eine Symmetrietransformation darstellen ("nicht-symmorphe Kristalle"):

13.2 Symmorphe und nicht-symmorphe Raumgruppen

13.2.1 Nicht-primitive Translationen

Jedes Element der RG G eines Kristalls lässt sich schreiben als mit und einem Vektor (den sogenannten "nicht-primitiven Translationen". Damit können wir schreiben

wobei offenbar jeweils ein Element einer Nebenklasse von T ist. Jede RG ist also eindeutig charakterisiert durch

Angabe von: i) T

ii)

iii) Vektoren

<u>Beweis</u>: Wenn und , dann auch

13.2.2 Symmorphe und nicht-symmorphe Raumgruppen

Wie in (*) gezeigt, führt eine Verschiebung des Ursprungs nur zu einer Verschiebung der nicht-primitiven Translationen,

Existiert ein , bei dem , so nennt man die RG "symmorph", sonst "nicht-symmorph".

<u>Bemerkungen</u>:

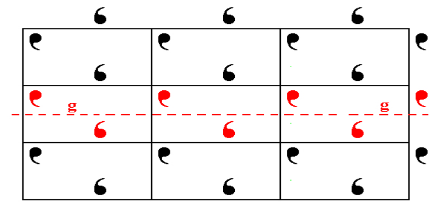
i) Ist G symmorph, so ist offenbar isomorph zu einer UG von von G, denn wählt man den Ursprung so, dass alle ,
dann ist

In diesem Fall lässt sich jedes Element der RG schreiben als

ii) Es existieren zwei Arten von Symmetrietransformationen, die eine RG nicht-symmorph machen können:

a) Gleitspiegelungen

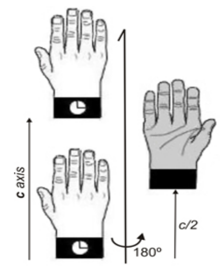
(Spiegelung an Ebenen+Translation)



Pg

b) Schraubungen

(-Drehung+Translation)



13.3 Inäquivalente Raumgruppen

Vorbemerkung:

Bei der PG hatten wir realisiert, dass es zu der Klassifikation nicht hilfreich ist, nur die Isomorphie zu betrachten. Stattdessen hatten wir darauf geschaut, wieviele inäquivalente reelle dreidimensionale Matrixgruppen es gibt. Dies waren in Festkörpern 32

Ähnlich werden wir nun bei den RG verfahren:

13.3.2 Matrix-Raumgruppen

Zu jeder RG G mit Elementen definieren wir eine hierzu isomorphe 4-dimensionale und reelle "Matrix-RG (MRG)" über

Isomorphie:

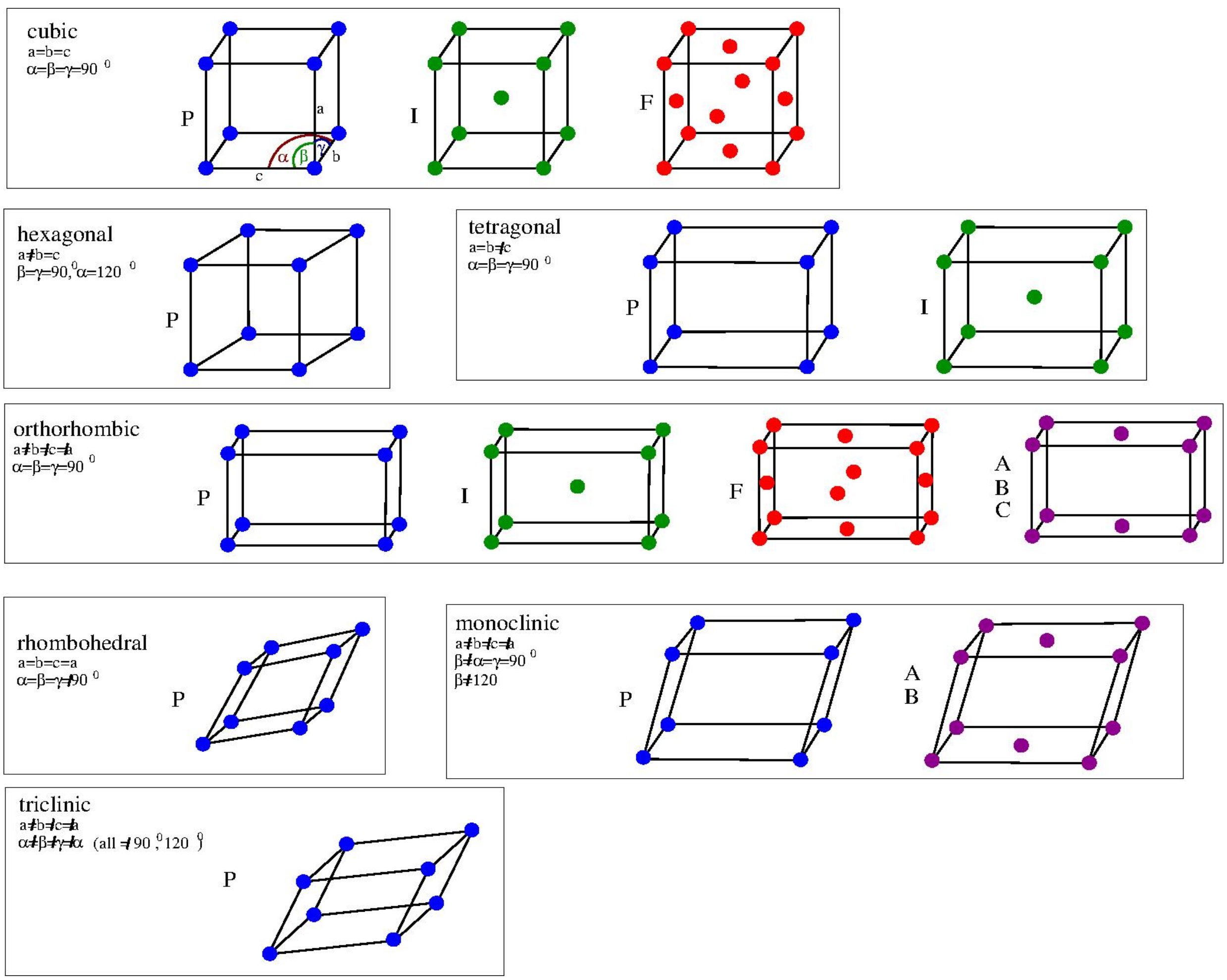
13.2.2 Anzahl inäquivalenter MRG

Es gibt 230 inäquivalente MRG. Von diesen sind 73 symmorph. (ohne Beweis)

13.3.3 Die (14) inäquivalenten Bravais-Gitter

Erinnerung: In Kap. 3 hatten wir die Bravais-Gitter bereits nach den möglichen PG-Symmetrien in 7 Kristallsystemen unterteilt.

Nun können wir fragen, wie viele inäquivalente RG in Bravais-Gittern lassen sich genau 14 inäquivalente RG (genauer MRG) realisieren. Da diese RG symmorph sind, sind die eindeutig charakterisiert durch Angabe von G_0 (-> 7 Kristallsysteme) und T.



Bemerkungen:

i) Dies sind tatsächlich Bravais-Gitter, d.h. es gibt in allen 14 primitive Basisvektoren , die das ganze Gitter aufspannen.

Zum Beispiel bei den 3 kubischen Gittern:

a) einfach kubisch: (Gitterkonstante)

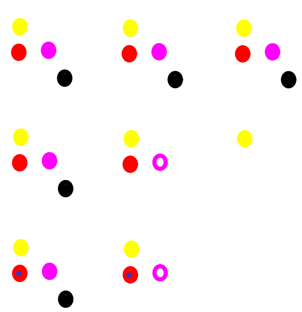
b) kubisch raumzentriert:

c) kubisch flächenzentriert:

ii) Alle Translationsgruppen T mit Elementen sind äquivalent (und damit auch isomorph) zueinander, da jede Basistrafo eine Ähnlichkeitstransformation für die MRG darstellt

13.3.4 Klassifikation der RG

Zur Klassifikation einer RG reicht die Angabe von und des Bravais-Gitters (+ nicht-triviale Translationen in nicht-symmorphen RG). Bei Kristallen ist die Wahl des BG (und seine Kristallklasse) aber im allgemeinen nicht eindeutig, d.h. es gibt äquivalente RG mit verschiedenen BG. Zum Beispiel in 2-dim



Punktgruppen

mögliches Bravais-Gitter: kubisch

Die RG ließe sich also charakterisieren durch

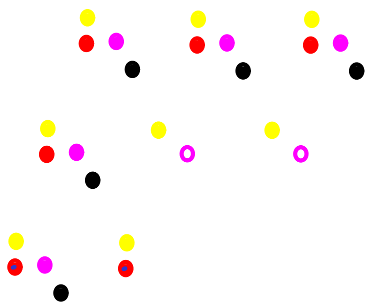
, BG=einfach kubisch (bzw. quadratisch in 2-dim)

Eine solche Charakterisierung wird aber vermieden, da

i) sie etwas irreführend ist, denn die vermeintlich hohe Symmetrie des kubischen Gitters ist durch die Basis vollständig

ii) eine solche Struktur in der Natur ohnehin nicht vorkäme, da die gebrochene Rotationssymmetrie sich auf das Gitter übertragen würde.

Lösung: Äquivalent zur RG des obigen Gitters ist z.B. die RG von:



mit (wie oben) und BG mit

(Grund: Bemerkung ii) in 13.3.3)

Konvention zur Charakterisierung der RG:

Wähle unter allen äquivalenten RG, diejenigen mit einem BG der niedrigst-möglichen Symmetrieklasse. So ergibt sich für die 73 symmorphe RG:

Table 9.1. The 73 symmorphic space groups

crystal system	Bravais lattice	space group
triclinic	P	$P1$, $P\bar{1}$
monoclinic	P	$P2$, Pm, $P2/m$
	B or A	$B2$, Bm, $B2/m$
orthorhombic	P	$P222$, $Pmm2$, $Pmmm$
	C, A, or B	$C222$, $Cmm2$, $Amm2$[a], $Cmmm$
	I	$I222$, $Imm2$, $Immm$
	F	$F222$, $Fmm2$, $Fmmm$
tetragonal	P	$P4$, $P\bar{4}$, $P4/m$, $P422$, $P4mm$, $P\bar{4}2m$, $P\bar{4}m2$[a], $P4/mmm$
	I	$I4$, $I\bar{4}$, $I4/m$, $I422$, $I4mm$, $I\bar{4}2m$, $I\bar{4}m2$[a], $I4/mmm$
cubic	P	$P23$, $Pm3$, $P432$, $P\bar{4}3m$, $Pm3m$
	I	$I23$, $Im3$, $I432$, $I\bar{4}3m$, $Im3m$
	F	$F23$, $Fm3$, $F432$, $F\bar{4}3m$, $Fm3m$
trigonal	P[b]	$P3$, $P\bar{3}$, $P312$, $P321$[a], $P3m1$, $P31m$[a], $P\bar{3}1m$, $P\bar{3}m1$[a]
(rhombohedral)	R	$R3$, $R\bar{3}$, $R32$, $R3m$, $R\bar{3}m$
hexagonal	P[b]	$P6$, $P\bar{6}$, $P6/m$, $P622$, $P6mm$, $P\bar{6}m2$, $P\bar{6}2m$[a], $P6/mmm$

[P, I, F (A, B or C) and R, respectively, denote primitive, body centered, face centered, base centered (along the a, b or c crystallographic axis) and rhombohedral Bravais lattices (see Fig. 9.3)]

14 Die irreduziblen Darstellungen der Raumgruppen

14.1 Die Translationsgruppe (TG)

Die TG ist gegeben durch die Menge aller primitiven Translationen

Wie machen die RG (und damit T) nun endlich durch Einführung der periodischen Randbedingungen

Dann ist

wobei jedes eine zyklische Gruppe der Ordnung N ist, deren Elemente durch erzeugt werden

Die Gruppen (und damit T) sind abelsch und besitzen daher N (bzw.) eindimensionale irreduzible Darstellungen (-> 4.2.3). Diese sind

mit den Zahlen . Alternativ können wir das "reziproke Gitter" mit den Basis-Vektoren einführen, für die gilt

oder explizit

Anstelle von (*) definieren wir dann Vektoren so dass

<u>Bemerkungen</u>:

i) Für alle Vektoren des reziproken Gitters

(und nur für diese) gilt:

denn sei wie in (*) gegeben, dann ist

Das geht nur, wenn auch ist.

ii) Das reziproke Gitter gehört zum gleichen Kristallsystem wie das zugrundeliegende BG, d.h., es hat die gleiche PG ,
denn falls , dann ist

Das reziproke Gitter hat aber im Allgemeinen nicht die gleiche RG wie das BG, z.B. bei den kubischen Gittern

Bravais-Gitter reziprokes Gitter

iii) Translationen um einen reziproken Gittervektor ändert die irr. Darstellungen von T nicht, Anstelle der obigen Wahl für ist es meistens praktischer, diese aus der Brillouin-Zone zu nehmen: (o.B.d.A N gerade)

14.2 Die irreduziblen Darstellungen der Raumgruppen

14.2.1 Vorbemerkungen

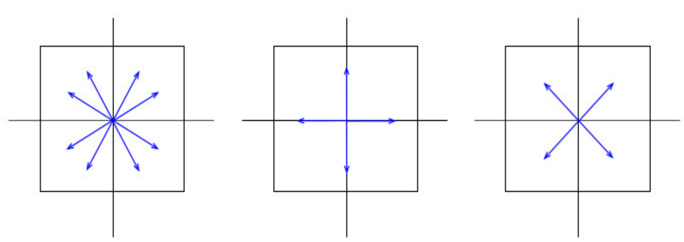
i) Mathematisch haben wir es mit folgenden Problemem zu tun:
Gegeben sei eine Gruppe G mit einem Normalteiler H (hier: T), dessen i.i.D. alle bekannt sind (->13.2). Dann gibt es ein allgemeines Verfahren zur Konstruktion der i.i.D. von G (siehe z.B. Streitwolf, Kap. 1.3.7-1.3.9).

ii) Wir gehen einfacher vor, indem wir das Ergebnis für die RG angeben und die Darstellungseigenschaften überprüfen.

iii) Der Einfachheit halber betrachten wir nur symmorphe RG.

14.2.2 Definitionen

Zu jedem Vektor aus der BZ definiert man den "Stern von " als Mengen aller Vektoren, die über ein aufeinander abgebildet werden. Offenbar ist ein SVK höchstens -elementig, wenn die Zahl der Elemente in ist. -elementige SVK bezeichnet man als "in allgemeiner Lage", z.B. in 2-dim:



14.2.3 Irreduzible Darstellungen

Zu jedem SVK gibt es genau eine -dimensionale i.i.D. der Raumgruppe.

14.2.4 Irreduzible Darstellungen eines Sterns in allgemeiner Lage

Die g Elemente eines SVK seien

Dann ist eine i.i.D der RG gegeben durch die g -dimensionalen Matrizen

hat also in jeder Zeile (Spalten) genau ein endliches Element. Insbesondere ist (wie in 14.1)

<u>Beweis:</u>

i) Darstellung:

Es war

ii) Irreduzibilität:

Kriterium 5.2.3:

hier:

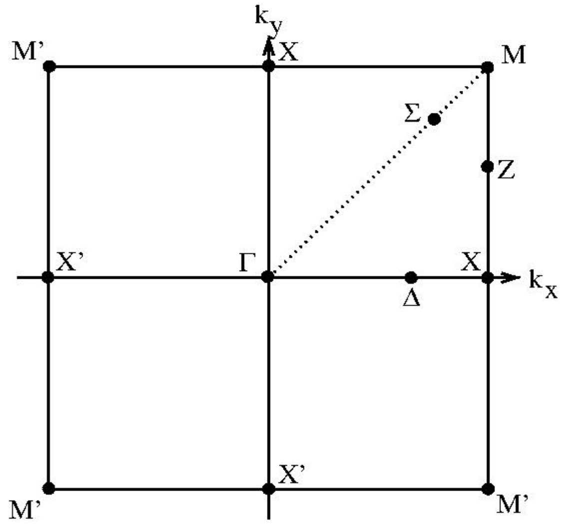
Es ist nur für

14.2.5 Sterne in nicht allgemeiner Lage

Ist ein -Punkt nicht in allgemeiner Lage, so existieren ,
für die gilt

mit irgendeinem rez. GV

Diese Elemente bilden eine UG von , z.B. in 2-dim
Quadratgitter



Beachte: Falls in allgemeiner Lage ist

Seien nun also

i) die Elemente eines SVK wieder gegeben durch

wobei für die "Repräsentanten" gelten soll:

Beachte: Dies modifiziert die Definition von SVK in 13.1.2 für k-Punkte auf dem Rand der BZ, z.B. besteht der Stern des X-Punktes [1,0] nur aus zwei Vektoren z.B. [1,0] und [0,1] (denn und sind nicht in der Brillouine Zone)

ii) eine -dimensionale i.i.D. von , dann ist die zum SVK gehörende i.i.D der Raumgruppen - dimensional und gegeben durch

Bemerkungen:

i) Wenn ist

ii) Auch hier ist (bei festem) in jeder Zeile/Spalte bzgl. ungleich null, denn falls

ii) Als Matrix geschrieben hat also die Form wie in 10.2.5 nur mit ersetzt durch die Matrix

Beweis:

i) Darstellung:

wie in 10.2.4 wobei nun

zu zeigen ist. Da eine i.i.D ist, ergibt auf der rechten Seite zunächst

ergibt einen einzigen Beitrag, wenn

ii) Irreduzibilität:

wieder Kriterium 5.2.3:

Es ist

iii) Haben wir alle irreduziblen Darstellungen gefunden?

Folgerung aus 4.2.1 war, dass allgemein

hier:

14.3 Energiespektren von Hamiltonoperatoren mit RG-Symmetrien

Wegen 6.2.3 ist nun klar, das EZ in Festkörpern klassifiziert sind durch

mit Energien

Hinweis: Die alte Schreibweise wird hier nicht verwendet, da sie etwas unpraktisch ist

Auftretende Entartungen:

Entartet sind immer Zustände (mit gleichem), die zum gleichen SVK gehören. Darüber hinaus gilt

i) -Vektoren in allgemeiner Lage: keine zusätzliche Entartung

ii) -Vektoren nicht in allgemeiner Lage: zusätzliche Entartung der Dimension von

iii) Der -Punkt ( ) ist ein Spezialfall, denn

- Der Stern von besteht aus nur einem Element
- , d.h. die irreduziblen Dastellungen sind genau diejenigen der Punktgruppen des Systems
- Eigenzustände am -Punkt sind translationsinvariant

15) Teilchen in periodischen Potentialen

15.1 Hamiltonoperatoren, Bloch`sches Theorem

Wir betrachten den Hamiltonoperator

mit einem Potential , das invariant unter den Transformationen einer RG ist, d.h.

Dann kann jedem EZ von ein Vektor aus der BZ zugeordnet werden und wir kennen das Verhalten dieses Zustands unter Translationen

Dies bedeutet insbesondere, dass

Dies ist das bekannte "Bloch-Theorem". Einsetzen von (2) in (1) ergibt

mit

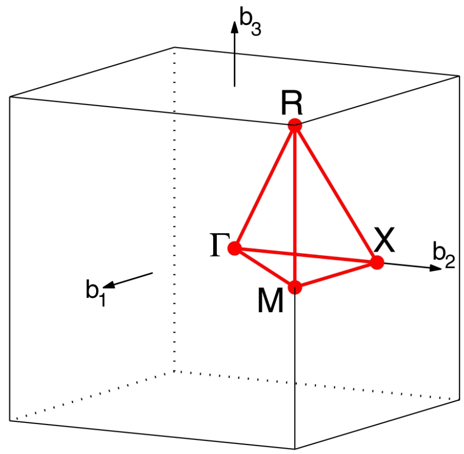
Die SG von ist

mit (wie in 11.2.5 definiert) und .

Da die translationsinvariant sein sollen, sind die Eigenräume von in (*) irreduzible Darstellungsräume von (-Punkt von , da)

15.2 Irreduzibler Teil der BZ

Als "irreduziblen Teil der BZ" bezeichnet man einen minimalen Teil der BZ aus dem alle Punkte der BZ durch Transformationen erzeugt werden können, z.B. in einem kubischen Gitter



CUB path: Γ-X-M-Γ-R-X|M-R

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]

Kennt man die EZ von in der irreduziblen BZ, so kann man alle EZ von einfach durch "Sternoperationen" bestimmen:

Gegeben EZ mit in der irr. BZ und Energien mit

Stern von : mir Repräsentanten

Dann bilden die Zustände

ein irr. DR der Raumgruppe G und damit ein Eigenraum von zur Energie

Beweis:

i) Drehung:

ii) Translation:

15.3 Kompatibilitätsbedingungen

Als Funktion von müssen sich die DR in wohldefinierter Weise entwickeln:

Sei gegeben, dann ist

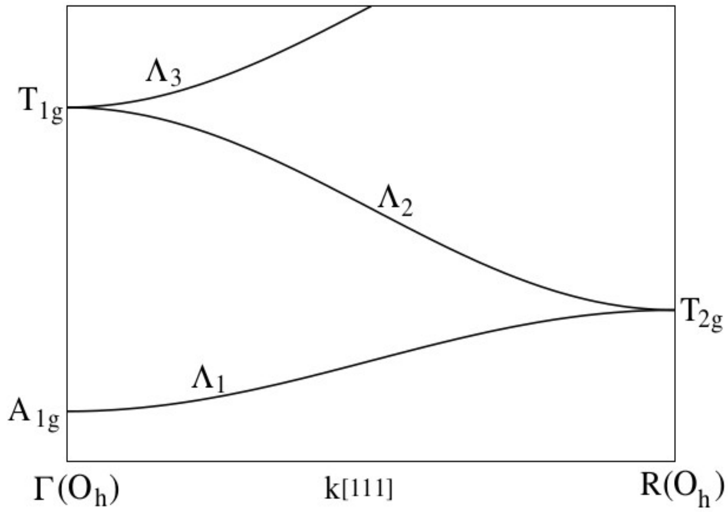
Falls ist eine kleine Störung und es greifen die störungstheoretischen Argumente aus Kap. 8:

Ist die i.i.D. eines EW bei , so ergeben sich die DR von durch Ausreduktion der subduzierten Darstellung

(-> Korrelationstabellen) falls die SG von UG von (SG von) ist.

Also:

Damit eine solche existiert, muss in der subduzierten Darstellung von und auftauchen, z.B. Natrium



.

15.4 Lösung des Eigenwertproblems mit ebenen Wellen

und sind translationsinvariant, daher

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung:

Angenommen, ist kleine Störung

entartete Störungstheorie für

Eigenfunktionen von :

Beispiel: kubisches Gitter ( )

i)

entarteter Unterraum von : alle mit gleichem Betrag

a)

b)

c)

reduzible DR von

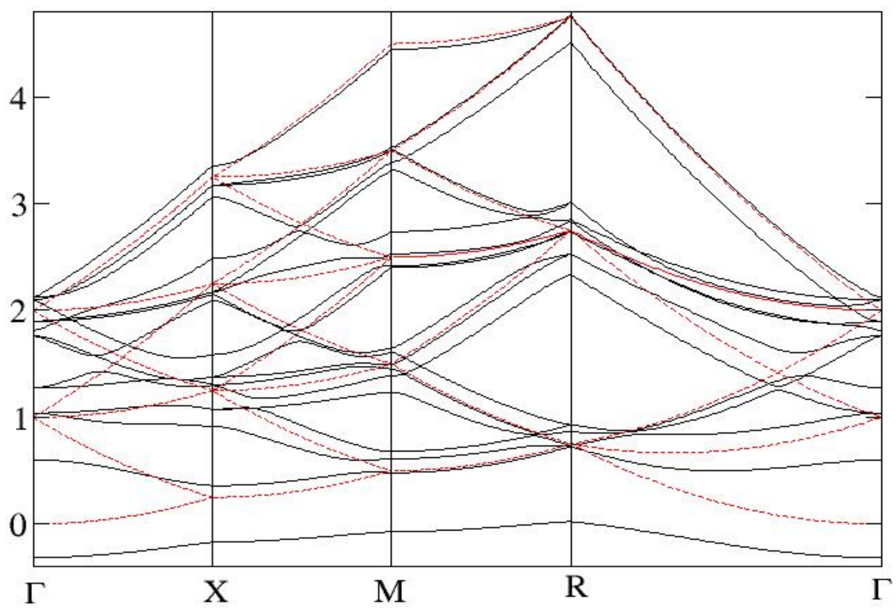
	O_h	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2'$	I	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	$8S_6$	$6S_4$
Γ_0:	$\vec{G}_0^2 = 0$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_1:	$\vec{G}_0^2 = 1$	6	2	2	0	0	0	4	2	0	0
Γ_2:	$\vec{G}_0^2 = 2$	12	0	0	0	2	0	4	2	0	0

Kap. 8.2.:

ii)

	C_{4v}	E	$2C_4$	C_4^2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_0:	$\vec{G}_0 = (0,0,0)$	1	1	1	1	1
Γ_1:	$\vec{G}_0 = (m,0,0)[m = \pm 1]$	1	1	1	1	1
Γ_2:	$\{\vec{G}_0 = (0,\pm 1,0), \vec{G}_0 = (0,0,\pm 1)\}$	4	0	0	2	0
Γ_3:	$\{\vec{G}_0 = (m,\pm 1,0), \vec{G}_0 = (m,0,\pm 1)\}[m = \pm 1]$	4	0	0	2	0
Γ_4:	$\{\vec{G}_0 = (0,\pm 1,\pm 1)\}$	4	0	0	0	2

Beispiel:



4
3
2
1
0
Γ
X
M
R
Γ