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

Bemerkungen:

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

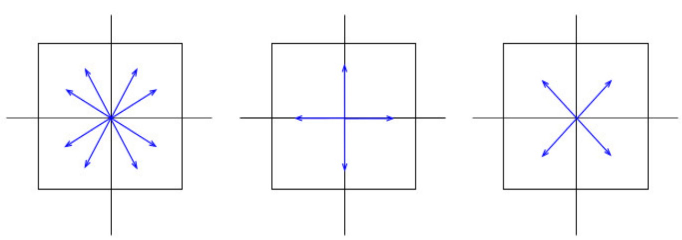
i) Mathematisch haben wir es mit folgenden Problemem zu tun:
Gegeben sei eine Gruppe G mit einem Normalteiler H (hier:T), dessen i.i.D. alle bekannt sind (->13.2). Dann gibt es ein allgemeines Verfahren zur Konstruktion der i.i.D. von G (siehe z.B. Streitwolf, Kap. 1.3.7-1.3.9).

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:

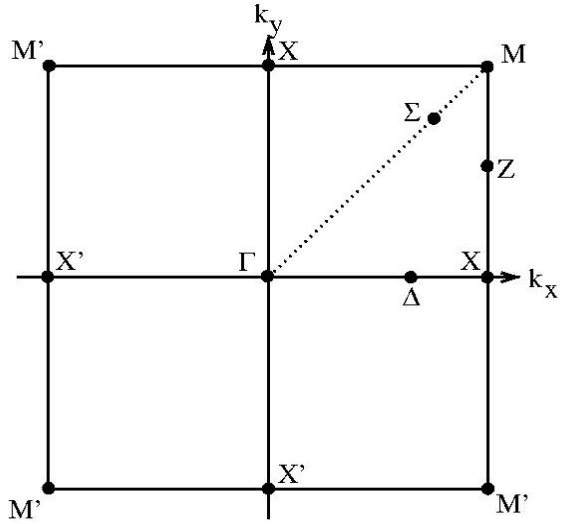
Es ist nur für

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