2.2.5. Nichtsymmorphe Raumgruppen

Wir bestimmen jetzt die erlaubten irreduziblen Darstellungen einer nichtsymmorphen Gruppe $G_{\mathbf{k}}$. Es kommt häufig vor, daß die nichtsymmorphe Gruppe $G_{\mathbf{k}}$ eine symmorphe Untergruppe $G_{\mathbf{k}}^T$ vom Index 2 hat, d. h., die Hälfte aller Elemente von $G_{\mathbf{k}}$ enthält nur primitive Translationen. Allgemein kann man zeigen, daß jede nichtsymmorphe Raumgruppe eine symmorphe Untergruppe vom Index 2 oder 3 hat. Den Fall mit dem Index 3 wollen wir hier nicht betrachten.

Wir formulieren das Problem etwas allgemeiner: Gegeben sei eine Gruppe G mit einer Untergruppe G^T vom Index 2. Alle irreduziblen Darstellungen von G^T seien bekannt, und es wird nach allen irreduziblen Darstellungen von G gefragt.

Wir lassen also vorerst außer Betracht, daß uns nur die erlaubten Darstellungen interessieren.

Da G^T vom Index 2 ist, so ist G^T ein Normalteiler von G. Wir können daher das in Abschn. 1.3.9 beschriebene Verfahren zur Ableitung der irreduziblen Darstellungen von G verwenden.

Zu diesem Zweck muß man die irreduziblen Darstellungen von G^T in Orbits einteilen. Ist a_0 ein Element aus G, aber ist $a_0 \notin G^T$, so kann man G in seine beiden Nebenklassen nach G^T zerlegen:

$$G = G^T + a_0 G^T.$$

Dann gilt für alle $a, b \in G^T$

$$D_{a_0 a}(b) = D(a^{-1} a_0^{-1} b a_0 a) = D^{-1}(a) D_{a_0}(b) D(a),$$

wenn $\mathfrak{D}$ eine Darstellung von G^T ist. Also ist $\mathfrak{D}_{a_0 a} \sim \mathfrak{D}_{a_0}$. Ist $\mathfrak{D}$ eine irreduzible Darstellung von G^T und $\mathfrak{D} \sim \mathfrak{D}_{a_0}$, so ist $\mathfrak{D} \sim \mathfrak{D}_a$ für alle $a \in G$, d. h., $\mathfrak{D}$ ist selbstkonjugiert. Ist dagegen $\mathfrak{D} \nsim \mathfrak{D}_{a_0}$, so gibt es kein $a \in G$, dessen $\mathfrak{D}_a$ sowohl zu $\mathfrak{D}$ als auch zu $\mathfrak{D}_{a_0}$ inäquivalent ist, denn für $a \in G^T$ ist $\mathfrak{D}_a \sim \mathfrak{D}$, und für $a \notin G^T$ ist $\mathfrak{D}_a \sim \mathfrak{D}_{a_0}$. G^T hat also bezüglich G nur selbstkonjugierte irreduzible Darstellungen oder Paare konjugierter irreduzibler Darstellungen. Die Orbits von G^T bezüglich G können nur die Ordnungen 1 oder 2 haben.

Wir betrachten beide Fälle getrennt:

1. $\mathfrak{D} \nsim \mathfrak{D}_{a_0}$. Die Ordnung des Orbits ist gleich 2. $\mathfrak{D}$ und $\mathfrak{D}_{a_0}$ bilden ein (inäquivalentes) Paar konjugierter Darstellungen. Dann ist G^T die kleine Gruppe zu G, G^T und $\mathfrak{D}$. Sie hat nur eine erlaubte[1]) irreduzible Darstellung, nämlich $\mathfrak{D}$, denn sie ist dem Normalteiler G^T gleich. Aus $\mathfrak{D}$ kann man eine irreduzible Darstellung von G induzieren [siehe (1.29)]:

$$D^{(J)}(a) = \begin{pmatrix} D(a) & 0 \\ 0 & D(a_0^{-1} a a_0) \end{pmatrix} \qquad (a \in G^T),$$

$$D^{(J)}(a) = \begin{pmatrix} 0 & D(a a_0) \\ D(a_0^{-1} a) & 0 \end{pmatrix} \qquad (a \notin G^T).$$

Jedes Paar konjugierter irreduzibler Darstellungen von G^T liefert also genau eine irreduzible Darstellung von G.

[1]) Man beachte, daß hier die Bezeichnungen „kleine Gruppe" und „erlaubte Darstellung" bezüglich ganz anderer Gruppen und Darstellungen gebraucht werden als in Abschn. 2.2.3.

2. $\mathfrak{D} \sim \mathfrak{D}_{a_0}$. Die Ordnung des Orbits ist gleich 1. $\mathfrak{D}$ ist bezüglich G eine selbstkonjugierte irreduzible Darstellung von G^T. Die kleine Gruppe zu G, G^T und $\mathfrak{D}$ ist G selbst. Für jede erlaubte irreduzible Darstellung $\mathfrak{D}^{(e)}$ von G muß also die durch G^T aus ihr subduzierte Darstellung $\mathfrak{D}^{(e,s)}$ ein Vielfaches einer Darstellung $\mathfrak{D}$ von G^T sein:

$$\mathfrak{D}^{(e,s)} = \mathfrak{D} \oplus \mathfrak{D} \oplus \mathfrak{D} \oplus \ldots = m\mathfrak{D}.$$

Wir zeigen jetzt, daß $\mathfrak{D}^{(e)}$ nur dann irreduzibel ist, wenn $\mathfrak{D}^{(e,s)} = \mathfrak{D}$ ist, wenn also die oben angegebene Summe nur einen Summanden hat oder der Orbit von $\mathfrak{D}^{(e,s)}$ die Multiplizität $m = 1$ hat.

Da $\mathfrak{D} \sim \mathfrak{D}_{a_0}$ ist, existiert eine unitäre Matrix U mit

$$D(a_0^{-1} a a_0) = \mathrm{U}^{-1} D(a)\, \mathrm{U} \qquad \text{für alle } a \in G^T. \tag{2.33}$$

Ist nun $\mathfrak{D}^{(e,s)} = m\mathfrak{D}$ und definiert man $U = m\,\mathrm{U}$, so kann man (2.33) auch in der Form

$$D^{(e)}(a_0^{-1} a a_0) = U^{-1} D^{(e)}(a) U \qquad \text{für alle } a \in G^T$$

schreiben. Diese Gleichung besagt aber, daß $D^{(e)}(a_0)\, U^{-1}$ mit allen $D^{(e)}(a)$ vertauschbar ist. Spaltet man $D^{(e)}(a_0)$ in gleichgroße Blöcke auf, deren Dimension gleich der von $\mathfrak{D}$ ist:

$$D^{(e)}(a_0) = (D_{ij}^{(e)}(a_0)) \qquad (i, j = 1, \ldots, m),$$

so lautet die Vertauschbarkeit von $D^{(e)}(a_0) U^{-1}$ mit $D^{(e)}(a)$

$$\sum_{l,k} D_{il}^{(e)}(a_0)\, \mathrm{U}^{-1} \delta_{lk} D(a)\, \delta_{kj} = \sum_{l,k} D(a)\, \delta_{il} D_{lk}^{(e)}(a_0)\, \mathrm{U}^{-1}\, \delta_{kj}$$

oder

$$D_{ij}^{(e)}(a_0)\, \mathrm{U}^{-1} D(a) = D(a) D_{ij}^{(e)}(a_0)\, \mathrm{U}^{-1}.$$

Die Matrizen $D_{ij}^{(e)}(a_0)\, \mathrm{U}^{-1}$ sind also mit dem irreduziblen Matrixsystem $\mathfrak{D}$ vertauschbar und müssen daher nach dem Schurschen Lemma Vielfache der Einheitsmatrix sein:

$$D_{ij}^{(e)}(a_0) = \lambda_{ij}\, \mathrm{U}.$$

Da $D^{(e)}(a_0)$ und U unitäre Matrizen sind, so ist (λ_{ij}) auch eine unitäre Matrix:

$$\delta_{ij} = \sum_l D_{il}^{(e)}(a_0) D_{jl}^{(e)\dagger}(a_0) = \sum_l \lambda_{il} \lambda_{jl}^* \mathrm{U}\, \mathrm{U}^\dagger = \sum_l \lambda_{il} \lambda_{jl}^*.$$

Dann kann man $\lambda = (\lambda_{ij})$ mit einer unitären Matrix $S = (s_{ij})$ diagonalisieren:

$$S^{-1} \lambda S = \lambda' = (\lambda_i \delta_{ij}).$$

Bildet man jetzt die Matrix $S = (s_{ij} \cdot I)$, so reduziert diese die Darstellung $\mathfrak{D}^{(e)}$ aus, indem sie die Matrizen von $\mathfrak{D}^{(e)}$ in vergröberte Diagonalform bringt, wobei jeder Diagonalblock die Dimension von $\mathfrak{D}$ hat. Für Elemente $a \in G^T$ gilt nämlich

$$D_{ij}^{(e)\prime}(a) = \sum_{l,k} s_{li}^* D(a)\, \delta_{lk} s_{kj} = D(a)\, \delta_{ij},$$

da S unitär ist; und für a_0 ist

$$D_{ij}^{(e)\prime}(a_0) = \sum_{l,k} s_{li}^* D_{lk}^{(e)}(a_0)\, s_{kj} = \sum_{l,k} s_{li}^* \lambda_{lk} s_{kj} \mathrm{U} = \lambda_i \mathrm{U}\, \delta_{ij}.$$

Nur wenn $m = 1$ ist, ist also $\mathfrak{D}^{(e)}$ irreduzibel. Damit $\mathfrak{D}^{(e)}$ eine erlaubte irreduzible Darstellung von G ist, muß $\mathfrak{D}^{(e)}$ also dieselbe Dimension wie $\mathfrak{D}$ haben, und es ist

$$D^{(e)}(a) = D(a) \qquad \text{für } a \in G^T,$$
$$D^{(e)}(a_0) = \lambda \mathrm{U},$$

wobei U durch (2.33) bestimmt wird. Der Phasenfaktor λ muß so bestimmt werden, daß $\mathfrak{D}^{(e)}$ eine Darstellung wird (was nicht für beliebige λ möglich ist). Da U aus (2.33) nur bis auf einen Phasenfaktor festgelegt ist, nehmen wir an, wir hätten U so bestimmt, daß

$$D^{(e)}(a) = D(a) \qquad \text{für } a \in G^T,$$
$$D^{(e)}(a_0) = \mathrm{U}$$

eine Darstellung von G definiert. Wir fragen nun, für welche λ dann durch

$$\overline{D}^{(e)}(a) = D(a) \qquad \text{für } a \in G^T,$$
$$\overline{D}^{(e)}(a_0) = \lambda \mathrm{U}$$

weitere Darstellungen von G definiert werden. Notwendig dafür ist, daß

$$\overline{D}^{(e)}(a_0^2) = D(a_0^2) = \lambda^2 \mathrm{U}^2$$

ist; da andererseits

$$D^{(e)}(a_0^2) = D(a_0^2) = \mathrm{U}^2$$

gilt, folgt $\lambda^2 = 1$ oder $\lambda = \pm 1$. Für $\lambda = -1$ ist $\overline{\mathfrak{D}}^{(e)}$ aber auch wirklich eine Darstellung, wie man leicht durch Nachprüfen der Darstellungseigenschaft zeigt. Die beiden Darstellungen sind inäquivalent. Sonst würde nämlich eine mit allen $D(a)$ $(a \in G^T)$ vertauschbare Transformationsmatrix S existieren, die nach dem Schurschen Lemma $S = \mu \cdot I$ wäre und die U in $-\mathrm{U}$ transformieren müßte:

$$S^{-1} \mathrm{U} S = -\mathrm{U}.$$

Danach wäre $\mathrm{U} = 0$, was nicht möglich ist.

Es gibt also zu der kleinen Gruppe G (im Fall der selbstkonjugierten Darstellung $\mathfrak{D}$) genau zwei erlaubte irreduzible Darstellungen, die durch

$$D_{\pm}^{(e)}(a) = D(a) \qquad \text{für } a \in G^T,$$
$$D_{\pm}^{(e)}(a_0) = \pm \mathrm{U}$$

definiert sind, wobei U aus $\mathfrak{D}_{a_0} = \mathrm{U}^{-1}\, \mathfrak{D} \mathrm{U}$ so zu bestimmen ist, daß die $\mathfrak{D}_{\pm}^{(e)}$ Darstellungen werden. Das ist immer in eindeutiger Weise möglich.

Die aus den beiden erlaubten Darstellungen $\mathfrak{D}_{\pm}^{(e)}$ der kleinen Gruppe zu induzierenden Darstellungen von G sind aber mit $\mathfrak{D}_{\pm}^{(e)}$ identisch.

Wir fassen zusammen:

Ist G^T eine Untergruppe vom Index 2 (und damit ein Normalteiler) einer Gruppe G und ist $G = G^T + a_0\, G^T$, so erhält man alle irreduziblen Darstellungen von G aus allen irreduziblen Darstellungen von G^T in folgender Weise:

Man fasse die irreduziblen Darstellungen von G^T zu Orbits bezüglich G zusammen. Dabei kommen nur Orbits der Ordnung 2 (Paare konjugierter Darstellungen) oder der Ordnung 1 (selbstkonjugierte Darstellungen) vor.

Jedes Paar konjugierter irreduzibler Darstellungen von G^T ($\mathfrak{D}$ sei einer der Partner des Paares) liefert genau eine irreduzible Darstellung von G, nämlich

$$\begin{aligned} D^{(J)}(a) &= \begin{pmatrix} D(a) & 0 \\ 0 & D(a_0^{-1} a a_0) \end{pmatrix} \qquad (a \in G^T), \\ D^{(J)}(a) &= \begin{pmatrix} 0 & D(a a_0) \\ D(a_0^{-1} a) & 0 \end{pmatrix} \qquad (a \notin G^T). \end{aligned} \tag{2.34}$$

Jede selbstkonjugierte irreduzible Darstellung $\mathfrak{D}$ von G^T liefert genau zwei inäquivalente irreduzible Darstellungen von G, nämlich

$$\begin{aligned} D_{\pm}^{(e)}(a) &= D(a) \qquad (a \in G^T), \\ D_{\pm}^{(e)}(a) &= \pm \mathrm{U}\, D(a_0^{-1} a) \qquad (a \notin G^T). \end{aligned} \tag{2.35}$$

U ist dabei durch $\mathfrak{D}_{a_0} = \mathrm{U}^{-1}\, \mathfrak{D} \mathrm{U}$ und die Forderung, daß die $\mathfrak{D}_{\pm}^{(e)}$ Darstellungen von G sind, definiert.

Nach dem in Abschn. 1.3.9 formulierten Satz sind das alle irreduziblen Darstellungen von G.

Wir kommen jetzt auf unser eigentliches Problem zurück, nämlich die Bestimmung aller (jetzt bezüglich T) erlaubten irreduziblen Darstellungen der nichtsymmorphen Gruppe $G_{\mathbf{k}}$. Erlaubt sind Darstellungen, deren Translationselemente von der Form

$$D_{\mathbf{k}}(\{\varepsilon|\mathbf{R}\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} \cdot I$$

sind.

Ist $G_{\mathbf{k}}^T$ eine symmorphe Untergruppe von $G_{\mathbf{k}}$, deren Index 2 ist, so können wir das soeben beschriebene Verfahren zur Ableitung der irreduziblen Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ verwenden. Wir kennen die erlaubten irreduziblen Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$. Sie wurden in Abschn. 2.2.4 auf die irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe $G_{0\mathbf{k}}$ zurückgeführt. Wir müssen jetzt noch zeigen, daß erlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$ erlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ liefern und daß umgekehrt nichterlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$ auch nichterlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ liefern, so daß wir nur die erlaubten Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$ brauchen, um alle erlaubten Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ zu erhalten.

Da wegen $a_0 \in G_{\mathbf{k}}$

$$D_{\mathbf{k}}(a_0^{-1} \{\varepsilon|\mathbf{R}\}\, a_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}, \alpha_0^{-1}\mathbf{R})} \cdot I = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} \cdot I.$$

ist, folgt aus (2.34) und (2.35) sofort, daß erlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$ wieder erlaubte Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ liefern. Die Umkehrung ist aus den Darstellungen (2.34) und (2.35) ebenfalls sofort abzulesen.

2.2.6. k-Vektoren in der Brillouin-Zone

Um die Orbits von T bezüglich G zu erhalten, müssen wir alle $\mathbf{k}$-Sterne in der Brillouin-Zone untersuchen. Wir führen daher zunächst einige Betrachtungen über die Art und Lage der Sterne in der Brillouin-Zone durch.

Geht man von einem $\mathbf{k}$ in der Brillouin-Zone aus, zu dem eine bestimmte Gruppe $G_{0\mathbf{k}}$ gehört, und geht zu einem infinitesimal benachbarter $\mathbf{k} + \varkappa$ über, so ist die zugehörige Gruppe offenbar

$$G_{0\mathbf{k}+\varkappa} = G_{0\mathbf{k}} \cap G_{0\varkappa} \qquad (\varkappa \text{ infinitesimal}). \tag{2.36}$$

Alle in infinitesimaler Nachbarschaft von $G_{0\mathbf{k}}$ liegenden Gruppen sind also Untergruppen von $G_{0\mathbf{k}}$. Speziell liegen in einer infinitesimalen Umgebung von Punkten $\mathbf{k}$ in allgemeiner Lage wiederum nur Punkte in allgemeiner Lage, d. h., Punkte in allgemeiner Lage sind innere Punkte[1]) der Brillouin-Zone. Wegen (2.36) kann man in infinitesimaler Umgebung jedes Punktes einen Punkt in allgemeiner Lage finden. Man braucht nur $\varkappa$ in allgemeiner Lage zu wählen, was immer möglich ist. Die Punkte in symmetrischer (d. h. nicht allgemeiner) Lage treten also höchstens als Randpunkte von Gebieten in allgemeiner Lage auf. Da die Symmetrieoperationen der Punktgruppen Drehungen und Drehinversionen sind, werden die Gebiete in allgemeiner Lage von Ebenen begrenzt. Die Punkte in symmetrischer Lage bilden einzelne *Symmetrieelemente*, d. h. Mengen von $\mathbf{k}$-Vektoren, die die gleichen Gruppen $G_{0\mathbf{k}}$ haben. Sie gehören zu den Begrenzungsebenen der Gebiete in allgemeiner Lage. Demnach gibt es *Symmetrieebenen*, *Symmetriegeraden* und *Symmetriepunkte*. Nimmt man von jedem Stern nur eine Zacke (so wie man aus jedem Orbit nur eine Darstellung nehmen darf, um alle irreduziblen Darstellungen von G nur einmal zu erhalten), und zwar von infinitesimal benachbarten Sternen jeweils infinitesimal benachbarte Zacken, so daß alle diese Zacken ein geschlossenes Gebiet erfüllen, so ist dieses Gebiet gerade der g-te Teil der Brillouin-Zone (g Ordnung der Punktgruppe), da alle inneren Punkte in allgemeiner Lage sind. Ein solches Gebiet nennt man *Elementargebiet*. Man erhält alle Elementargebiete, indem man alle Punktgruppenelemente auf ein spezielles Elementargebiet anwendet. Die Oberflächenpunkte eines Elementargebiets gehen dabei zum Teil in sich selbst über (denn sie sind zum Teil in symmetrischer Lage).

2.2.7. Beispiel: Diamantstruktur

2.2.7.1. Symmetrieelemente

Die primitiven Translationen der Diamantstruktur bilden das flächenzentriert-kubische Gitter. Die Brillouin-Zone dieses Gitters ist ein gekapptes Oktaeder. Sie setzt sich aus 48 Elementargebieten zusammen, da die Ordnung der Punktgruppe 48 ist. Man wählt ein Elementargebiet aus und bezeichnet die Symmetrieelemente durch große lateinische und griechische Buchstaben (Abb. 13). Die Symmetrieelemente mit ihren zugehörigen Punktgruppen sind in den Tabellen 13 bis 15 angegeben.

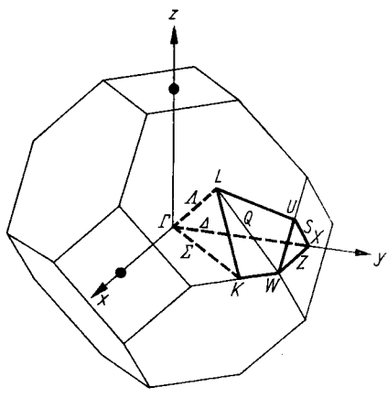

Abb. 13. Brillouin-Zone des flächenzentrierten kubischen Gitters mit Elementargebiet der Diamantstruktur

[1]) Die Bezeichnung „innere" Punkte ist hier im mengentheoretischen Sinn zu verstehen. Damit ist nicht ausgeschlossen, daß Oberflächenpunkte der Brillouin-Zone in allgemeiner Lage sein können.

1. Symmetriepunkte

Tabelle 13

Punkt	$\mathbf{k}$	$G_{0\mathbf{k}}$[1])	Elemente α von $G_{0\mathbf{k}}$[2])		
			$\alpha \in T_d$	$\alpha \notin T_d$	
Γ	0	$O_h\ (O \times C_2)$	ε	$\boldsymbol{i}$	
			$6\,\sigma_{4i}^{\pm 1}$	$6\,\delta_{4i}^{\pm 1}$	$i = x, y, z$
			$6\,\varrho_i$	$6\,\delta_{2i}$	$i = xy, yz, zx$ $x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x}$
			$8\,\delta_{3i}^{\pm 1}$	$8\,\sigma_{6i}^{\pm 1}$	$i = xyz,\ x\bar{y}\bar{z},\ \bar{x}y\bar{z},\ \bar{x}\bar{y}z$
			$3\,\delta_{2i}$	$3\,\varrho_i$	$i = x, y, z$
X	$\frac{\pi}{a}(0, 1, 0)$	$D_{4h}\ (D_4 \times C_2)$	ε	$\boldsymbol{i}$	
			$2\,\sigma_{4y}^{\pm 1}$	$2\,\delta_{4y}^{\pm 1}$	
			δ_{2y}	ϱ_y	
			$\varrho_{zx}, \varrho_{z\bar{x}}$	$\delta_{2zx}, \delta_{2z\bar{x}}$	
			δ_{2z}, δ_{2x}	ϱ_z, ϱ_x	
L	$\frac{\pi}{2a}(1, 1, 1)$	$D_{3v}\ (D_6)$	ε	$\boldsymbol{i}$	
			$2\,\delta_{3xyz}^{\pm 1}$	$2\,\sigma_{6xyz}^{\pm 1}$	
			$3\,\varrho_i$	$3\,\delta_{2i}$	$i = x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x}$
W	$\frac{\pi}{2a}(1, 2, 0)$	$D_{2d}\ (D_4)$	ε	$\delta_{2y\bar{z}}$	
			σ_{4x}	ϱ_y	
			δ_{2x}	δ_{2yz}	
			σ_{4x}^{-1}	ϱ_z	

2. Symmetriegeraden

Tabelle 14

Gerade	$\mathbf{k}$	$G_{0\mathbf{k}}$[1])	Elemente α von $G_{0\mathbf{k}}$[2])	
			$\alpha \in T_d$	$\alpha \notin T_d$
Δ	$\frac{\pi}{a}(0, \lambda, 0)$[3])	$C_{4v}\ (D_4)$	ε	$2\,\delta_{4y}^{\pm 1}$
			δ_{2y}	ϱ_z, ϱ_x
			$\varrho_{zx}, \varrho_{z\bar{x}}$	

[1]) Die abstrakte Punktgruppe wird jeweils in Klammern angegeben.
[2]) Nach Klassen konjugierter Elemente geordnet.
[3]) $0 < \lambda < 1$.

Tabelle 14 (Fortsetzung)

Gerade	$\mathbf{k}$	$G_{0\mathbf{k}}$ [1]	Elemente $\boldsymbol{\alpha}$ von $G_{0\mathbf{k}}$ [2]	
			$\boldsymbol{\alpha} \in T_d$	$\boldsymbol{\alpha} \notin T_d$
Λ	$\frac{\pi}{2a}(\lambda, \lambda, \lambda)$ [3]	C_{3v} (D_3)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $2\,\boldsymbol{\delta}_{3xyz}^{\pm 1}$ $3\,\boldsymbol{\varrho}_i \quad i = x\bar{y}, y\bar{z}, z\bar{x}$	
Σ, K	$\frac{3\pi}{4a}(\lambda, \lambda, 0)$ [4]	C_{2v} (D_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\varrho}_{x\bar{y}}$	$\boldsymbol{\delta}_{2xy}$ $\boldsymbol{\varrho}_z$
Z	$\frac{\pi}{2a}(\lambda, 2, 0)$ [3]	C_{2v} (D_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\delta}_{2x}$	$\boldsymbol{\varrho}_y$ $\boldsymbol{\varrho}_z$
S	$\frac{\pi}{a}\left(\frac{1}{4}\lambda, 1, \frac{1}{4}\lambda\right)$ [3]	C_{2v} (D_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\varrho}_{z\bar{x}}$	$\boldsymbol{\delta}_{2zx}$ $\boldsymbol{\varrho}_y$
Q	$\frac{\pi}{2a}(1, 2-\lambda, \lambda)$ [3]	C_2 (C_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\delta}_{2y\bar{z}}$

3. Symmetrieebenen

Tabelle 15

Ebene	$G_{0\mathbf{k}}$ [1]	Elemente $\boldsymbol{\alpha}$ von $G_{0\mathbf{k}}$ [2]	
		$\boldsymbol{\alpha} \in T_d$	$\boldsymbol{\alpha} \notin T_d$
$\Gamma\Delta\Lambda$	C_s (C_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\varrho}_{z\bar{x}}$	
$\Gamma\Sigma\Lambda$, KL	C_s (C_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\varrho}_{x\bar{y}}$	
$\Gamma\Delta\Sigma$, KW	C_s (C_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\varrho}_z$
WUX, WU	C_s (C_2)	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\varrho}_y$

[1]) Die abstrakte Punktgruppe wird jeweils in Klammern angegeben.
[2]) Nach Klassen konjugierter Elemente geordnet.
[3]) $0 < \lambda < 1$.
[4]) $0 < \lambda \leqq 1$.

Die Ebenen LKW und LWU sowie das gesamte Innere des Elementargebiets sind in allgemeiner Lage. Von der Oberfläche des Elementargebiets gehört nur die Gerade LU (ausschließlich L, aber einschließlich U) nicht zum Elementargebiet, da die auf LU endenden $\mathbf{k}$-Vektoren zum Stern der auf LK endenden $\mathbf{k}$-Vektoren gehören und das Elementargebiet nicht zwei Vektoren des gleichen Sterns enthalten sollte.

2.2.7.2. Symmorphe Gruppen $G_{\mathbf{k}}$

Wir gehen jetzt dazu über, die erlaubten irreduziblen Darstellungen $\mathfrak{D}_{\mathbf{k}}$ der kleinen Gruppe $G_{\mathbf{k}}$ abzuleiten.

Nach (2.29) ist

$$D_{\mathbf{k}}(\{\boldsymbol{\beta}|\mathbf{b}\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{b}} D_{0\mathbf{k}}(\boldsymbol{\beta})$$

für Punkte im Inneren der Brillouin-Zone, also für Γ, Δ, Λ, Σ, $\Gamma\Delta\Delta$, $\Gamma\Sigma\Lambda$, $\Gamma\Delta\Sigma$. Das gilt auch für die Punkte der angegebenen Symmetrieelemente, die auf der Oberfläche der Brillouin-Zone liegen, also für K, KL, KW. Die Charakterentafeln für die entsprechenden Gruppen $G_{0\mathbf{k}}$ sind in den Tabellen 16 bis 21 angegeben.

Tabelle 16. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe O

O	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$3\,\boldsymbol{\delta}_2$	$6\,\boldsymbol{\delta}_4$	$6\,\boldsymbol{\delta}_2$	$8\,\boldsymbol{\delta}_3$
T_d	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$3\,\boldsymbol{\delta}_2$	$6\,\boldsymbol{\sigma}_4$	$6\,\boldsymbol{\varrho}$	$8\,\boldsymbol{\delta}_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	−1	−1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	−1
Γ'_{15}	3	−1	1	−1	0
Γ'_{25}	3	−1	−1	1	0

Tabelle 17. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe $O \times C_2$

O_h	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$3\,\boldsymbol{\delta}_2$	$6\,\boldsymbol{\delta}_4$	$6\,\boldsymbol{\delta}_2$	$8\,\boldsymbol{\delta}_3$	$\boldsymbol{i}$	$3\,\boldsymbol{\varrho}$	$6\,\boldsymbol{\sigma}_4$	$6\,\boldsymbol{\varrho}$	$8\,\boldsymbol{\sigma}_6$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	−1	2	2	0	0	−1
Γ'_{15}	3	−1	1	−1	0	3	−1	1	−1	0
Γ'_{25}	3	−1	−1	1	0	3	−1	−1	1	0
Γ'_1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ'_2	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
Γ'_{12}	2	2	0	0	−1	−2	−2	0	0	1
Γ_{15}	3	−1	1	−1	0	−3	1	−1	1	0
Γ_{25}	3	−1	−1	1	0	−3	1	1	−1	0

Tabelle 18. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe D_4

C_{4v}	ε	$2\,\delta_{4y}$	δ_{2y}	ϱ_x, ϱ_z	$\varrho_{zx}, \varrho_{z\bar{x}}$
D_{2d}	ε	δ_{2z}, δ_{2x}	δ_{2y}	$\varrho_{zx}, \varrho_{z\bar{x}}$	$2\,\sigma_{4y}$
Δ_1	1	1	1	1	1
Δ_1'	1	1	1	−1	−1
Δ_2	1	−1	1	1	−1
Δ_2'	1	−1	1	−1	1
Δ_5	2	0	−2	0	0

Tabelle 19. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe D_3

C_{3v}	ε	$2\,\delta_3$	$3\,\varrho$
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	1	−1
Λ_3	2	−1	0

Tabelle 20. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe C_2

C_i	ε	i
D_+	1	1
D_-	1	−1

Tabelle 21. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe $D_2 = C_2 \times C_2$

$C_{2v}\,(\Sigma)$		ε	$\varrho_{x\bar{y}}$	δ_{2xy}	ϱ_z
$C_{2v}\,(S)$		ε	$\varrho_{z\bar{x}}$	δ_{2zx}	ϱ_y
S_3[1]	Σ_1	1	1	1	1
S_4	Σ_2	1	−1	1	−1
S_1	Σ_3	1	1	−1	−1
S_2	Σ_4	1	−1	−1	1

[1]) Es ist üblich, die Darstellungen für S in der angegebenen Weise zu numerieren. Der Grund hierfür wird später verständlich (siehe Abschn. 10.7.2). Man beachte, daß S_1 nicht wie sonst die identische Darstellung charakterisiert.

2.2.7.3. Nichtsymmorphe Gruppen $G_{\mathbf{k}}$

Für die verbleibenden nichtsymmorphen Gruppen $G_{\mathbf{k}}$, die zu den Symmetrieelementen X, L, W, Z, S, Q, WUX gehören, kann man das in Abschn. 2.2.5 angegebene Verfahren zur Bestimmung der erlaubten irreduziblen Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ anwenden.

Offenbar existiert immer $G_{\mathbf{k}}^T$ mit dem Index 2. $G_{0\mathbf{k}}^T$ enthält alle zu T_d gehörigen Elemente von $G_{0\mathbf{k}}$. Wir wählen ein $a_0 \notin G_{\mathbf{k}}^T$. Dann ist $\boldsymbol{\alpha}_0 \notin T_d$ und $\mathbf{v}_{\boldsymbol{\alpha}_0} = \boldsymbol{\tau}$, so daß $a_0 = \{\boldsymbol{\alpha}_0|\boldsymbol{\tau}\}$ ist.

Die erlaubten irreduziblen Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$ sind

$$D_{\mathbf{k}}^T(\{\boldsymbol{\beta}|\mathbf{R}\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\beta}),$$

wobei $D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\beta})$ alle irreduziblen Darstellungen von $G_{0\mathbf{k}}^T$ durchlaufen darf. Um die Darstellungen $\mathfrak{D}_{\mathbf{k}}^T$ zu Orbits zusammenzufassen, muß man untersuchen, in welchem Fall

$$D_{\mathbf{k}}^T(b) \sim D_{\mathbf{k}}^T(a_0^{-1} b a_0)$$

ist.

Außer für den Punkt W (der später gesondert betrachtet werden muß) sind alle Gruppen $G_{0\mathbf{k}}$ entweder abelsch (da ihre abstrakten Punktgruppen C_2 oder D_2 sind), oder sie enthalten die Inversion $\boldsymbol{i}$ (X und L), so daß mit $\boldsymbol{\alpha}_0 = \boldsymbol{i}$ für X und L und $\boldsymbol{\alpha}_0 \notin T_d$ (beliebig) für die abelschen $G_{0\mathbf{k}}$ gilt:

$$D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0) = D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\beta}) \qquad (\boldsymbol{\beta} \in G_{0\mathbf{k}}^T). \tag{2.37}$$

Dann ist

$$D_{\mathbf{k}}^T(a_0^{-1} b a_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})}\, D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})}\, D_{\mathbf{k}}^T(b). \tag{2.38}$$

Für die zu L, S, Q, WUX gehörenden Gruppen $G_{0\mathbf{k}}^T$ ist der Faktor

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})} = 1, \tag{2.39}$$

denn für $G_{0\mathbf{k}} \triangleq C_2$ ist $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\varepsilon}$, und die zu L und S gehörenden Gruppen $G_{0\mathbf{k}}^T$ führen nach Tab. 12, S. 63, $\boldsymbol{\tau}$ wieder in $\boldsymbol{\tau}$ über.

Alle zu L, S, Q, WUX gehörenden Gruppen $G_{\mathbf{k}}^T$ haben also nur selbstkonjugierte Darstellungen. Jede dieser selbstkonjugierten Darstellungen liefert nach (2.35) zwei irreduzible Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} D_\pm(\{\boldsymbol{\alpha}|\mathbf{R}\}) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\alpha}) && \text{für } \boldsymbol{\alpha} \in G_{0\mathbf{k}}^T, \\ D_\pm(\{\boldsymbol{\alpha}|\boldsymbol{\tau} + \mathbf{R}\}) &= \pm\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}}\, \mathrm{U} D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\alpha}) && \text{für } \boldsymbol{\alpha} \notin G_{0\mathbf{k}}^T. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Wir bestimmen jetzt U. Da wir für alle betrachteten Fälle $\boldsymbol{\alpha}_0$ derart wählen können, daß $\boldsymbol{\alpha}_0^2 = \boldsymbol{\varepsilon}$ ist, so wird

$$\mathrm{U}^2 = D_\pm(a_0^2) = D_\pm(\{\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau})} \cdot I.$$

Da außerdem wegen (2.38) und (2.39) $D_{\mathbf{k}}^T(b) = D_{\mathbf{k}}^T(a_0^{-1} b a_0) = \mathrm{U}^{-1} D_{\mathbf{k}}^T(b)\,\mathrm{U}$ ist, so ist U mit $\mathfrak{D}_{\mathbf{k}}^T$ vertauschbar und nach dem Schurschen Lemma ein Vielfaches von I, d. h., es ist

$$\mathrm{U} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau})} \cdot I.$$

Da $\boldsymbol{\alpha}_0 \notin T_d$ ist, so gibt es nach Tab. 12 ein $\boldsymbol{i}\,\mathfrak{L}_i$, welches $\boldsymbol{\alpha}_0$ enthält, und nach (2.9) wird

$$\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} = \mathbf{t}_i .$$

Tab. 22 gibt die $\mathbf{t}_i$ für die betrachteten Gruppen und die angegebene Wahl von $\boldsymbol{\alpha}_0$ an.

Tabelle 22

Symmetrie-element	$\boldsymbol{\alpha}_0$	$\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} = \mathbf{t}_i$
L	$\boldsymbol{i}$	$\mathbf{t}_0 = 0$
S	$\boldsymbol{\varrho}_y$	$\mathbf{t}_2 = a(1, 0, 1)$
Q	$\boldsymbol{\delta}_{2y\bar{z}}$	$\mathbf{t}_0 = 0$
WUX	$\boldsymbol{\varrho}_y$	$\mathbf{t}_2 = a(1, 0, 1)$

Da für alle betrachteten Fälle $\boldsymbol{\alpha}_0$ mit $G_{0\mathbf{k}}^T$ vertauschbar ist, kann man

$$G_{0\mathbf{k}} = G_{0\mathbf{k}}^T \times \{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\alpha}_0\}$$

schreiben. Man erhält dann die Charakterentafel von $G_{0\mathbf{k}}$ aus der von $G_{0\mathbf{k}}^T$ analog (1.24). Wir können also das $\pm$-Zeichen in (2.40) mit in $D_{0\mathbf{k}}^T$ aufnehmen und so zu den irreduziblen Darstellungen $D_{0\mathbf{k}}$ von $G_{0\mathbf{k}}$ übergehen. Schließlich ist also

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}(\{\boldsymbol{\alpha}|\mathbf{R}\}) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}} D_{0\mathbf{k}}(\boldsymbol{\alpha}) && \text{für } \boldsymbol{\alpha} \in G_{0\mathbf{k}}^T, \\ D_{\mathbf{k}}(\{\boldsymbol{\alpha}|\boldsymbol{\tau} + \mathbf{R}\}) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}}\, \mathrm{U}\, D_{0\mathbf{k}}(\boldsymbol{\alpha}) && \text{für } \boldsymbol{\alpha} \notin G_{0\mathbf{k}}^T. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} \mathrm{U} &= I && \text{für } L \text{ und } Q, \\ \mathrm{U} &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\frac{\mathbf{t}_2}{2}} && \text{für } S \text{ und } WUX. \end{aligned} \tag{2.42}$$

Die Bezeichnung der Darstellungen $\mathfrak{D}_{\mathbf{k}}$ wollen wir entsprechend den Bezeichnungen der zugehörigen Darstellungen $\mathfrak{D}_{0\mathbf{k}}$ wählen. Die Charakterentafeln findet man in den Tabellen 23, 21 und 20.

Tabelle 23. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe $D_6 = D_3 \times C_2$

D_{3d}	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$2\,\boldsymbol{\delta}_3$	$3\,\boldsymbol{\varrho}$	$\boldsymbol{i}$	$2\,\boldsymbol{\sigma}_6$	$3\,\boldsymbol{\delta}_2$
L_1	1	1	1	1	1	1
L_2	1	1	−1	1	1	−1
L_3	2	−1	0	2	−1	0
L_2'	1	1	1	−1	−1	−1
L_1'	1	1	−1	−1	−1	1
L_3'	2	−1	0	−2	1	0

2.2.7.4. Die Symmetrieelemente X, Z und W

Wir müssen jetzt noch die Symmetrieelemente X, Z und W betrachten. Für X und Z gilt (2.37), so daß mit (2.9) der Faktor in (2.38)

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{t}_i} = (-1)^i \qquad \text{für } \boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{L}_i \tag{2.43}$$

wird, wenn $\mathbf{k} = \mathbf{k}_X$ oder $\mathbf{k} = \mathbf{k}_Z$ ist.

Für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_Z$ ist $G_{0\mathbf{k}}^T = \{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\delta}_{2x}\}$. Es gibt zwei erlaubte irreduzible Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}^T$, die wegen (2.43) bezüglich $G_{\mathbf{k}}$ zueinander konjugiert sind. Sie liefern also genau eine erlaubte irreduzible Darstellung von $G_{\mathbf{k}}$, die man gemäß (2.34) konstruieren kann. Weitere erlaubte irreduzible Darstellungen gibt es für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_Z$ nicht. Ihre Charaktere sind aus Tab. 20 sofort abzulesen:

$$\begin{aligned} \chi(\{\boldsymbol{\varepsilon}|\mathbf{R}\}) &= 2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}}, \\ \chi(\{\boldsymbol{\beta}|\mathbf{b}\}) &= 0 \qquad \text{für } \boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_X$ ist $G_{0\mathbf{k}}^T = D_{2d}$. Die Charakterentafel von D_{2d} (siehe Tab. 18) zeigt wegen (2.43), daß Δ_1 und Δ_2' sowie Δ_1' und Δ_2 je ein Paar bezüglich $G_{\mathbf{k}}$ konjugierter Darstellungen bilden. Δ_5 ist als einzige zweidimensionale Darstellung natürlich selbstkonjugiert.

Die beiden eindimensionalen Paare liefern je eine erlaubte irreduzible Darstellung von $G_{\mathbf{k}}$, deren Charaktere nach (2.34) leicht angegeben werden können. Die selbstkonjugierte Darstellung Δ_5 liefert nach (2.35) zwei erlaubte irreduzible Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$. Um ihre Charaktere abzuleiten, müssen wir U bestimmen.

Zu diesem Zweck muß man die Darstellung Δ_5 von $G_{0\mathbf{k}}^T$ kennen. Man kann sie leicht aus der in Tab. 11, S. 62/63, angegebenen Darstellung von O_h ableiten. $G_{0\mathbf{k}}^T = D_{2d}$ subduziert aus ihr eine Darstellung, die bereits in ausreduzierter Form vorliegt: Die (22)-Matrixelemente bilden eine eindimensionale Darstellung, und die verbleibenden zweidimensionalen Matrizen $D_{0\mathbf{k}}^T$ bilden die Darstellung Δ_5, da sie dieselben Charaktere wie Δ_5 haben. Zum Beispiel ist

$$D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\sigma}_{4y}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\varrho}_{zx}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.44}$$

Da $\boldsymbol{\sigma}_{4y} \in \mathfrak{L}_3$ und $\boldsymbol{\varrho}_{zx} \in \mathfrak{L}_2$ ist (siehe Tab. 12), so muß U folgende Gleichungen erfüllen:

$$D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\sigma}_{4y})\,\mathrm{U} = -\mathrm{U}\,D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\sigma}_{4y}), \tag{2.45}$$

$$D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\varrho}_{zx})\,\mathrm{U} = \mathrm{U}\,D_{0\mathbf{k}}^T(\boldsymbol{\varrho}_{zx}). \tag{2.46}$$

Außerdem muß wegen $\boldsymbol{\alpha}_0 = \boldsymbol{i}$

$$\mathrm{U}^2 = D_{\mathbf{k}}^T(a_0^2) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\alpha}_0\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau})} \cdot I = I$$

sein. U ist also hermitesch, da es unitär ist, d. h., U hat die Form

$$\mathrm{U} = \begin{pmatrix} a & x \\ x^* & b \end{pmatrix}.$$

Mit (2.44) folgt dann aus (2.45) $x = x^*$ und $a = -b$ und weiterhin aus (2.46) $a = 0$, so daß wegen der Unitarität von U

$$\mathrm{U} = \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ist.

Um die Spuren der erlaubten Darstellungen $\mathfrak{D}_\pm$ zu berechnen, brauchen wir die Spuren der Matrizen $\mathrm{U} D^T_{0\mathbf{k}}(\boldsymbol{\beta})$ $(\boldsymbol{\beta} \in G^T_{0\mathbf{k}} = D_{2d})$. In Tab. 24 sind diese Spuren aus der Darstellung Δ_5 berechnet, die aus Tab. 11 abgelesen wurde.

Tabelle 24

	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$2\,\boldsymbol{\sigma}_{4y}^{\pm 1}$	$\boldsymbol{\delta}_{2y}$	$\boldsymbol{\varrho}_{zx}, \boldsymbol{\varrho}_{z\bar{x}}$	$\boldsymbol{\delta}_{2x}, \boldsymbol{\delta}_{2\bar{x}}$
Δ_5	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$
$\mathrm{U}\Delta_5$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$ $\pm\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$ $\pm\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\pm\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$ $\pm\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\mathrm{Sp}(\mathrm{U}\Delta_5)$	0	0	0	∓ 2 ± 2	0

Für die vier erlaubten irreduziblen Darstellungen von $G_\mathbf{k}$ $(\mathbf{k} = \mathbf{k}_X)$ erhält man also folgende Charaktere:

Tabelle 25

	$\{\boldsymbol{\varepsilon}\|0\}$	$2\{\boldsymbol{\sigma}_4\|0\}$	$\{\boldsymbol{\delta}_{2y}\|0\}$	$2\{\boldsymbol{\varrho}\|0\}$	$2\{\boldsymbol{\delta}_2\|0\}$	$\{\boldsymbol{\delta}_{2zx}\|\boldsymbol{\tau}\}$	$\{\boldsymbol{\delta}_{2z\bar{x}}\|\boldsymbol{\tau}\}$
X_1	2	0	2	2	0	0	0
X_2	2	0	2	-2	0	0	0
X_3	2	0	-2	0	0	2	-2
X_4	2	0	-2	0	0	-2	2

Die Charaktere von $\{\boldsymbol{\beta}|\mathbf{b}\}$ mit $\boldsymbol{\beta} \notin T_d$ und $\boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\delta}_{2zx}, \boldsymbol{\delta}_{2z\bar{x}}$ verschwinden alle. Die Charaktere für Elemente mit anderen primitiven Translationen als $\mathbf{R} = 0$ erhält man aus

$$\chi(\{\boldsymbol{\alpha}|\mathbf{v}_\alpha + \mathbf{R}\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}}\, \chi(\{\boldsymbol{\alpha}|\mathbf{v}_\alpha\}). \tag{2.47}$$

Schließlich bestimmen wir noch die Charaktere der erlaubten irreduziblen Darstellungen von $G_\mathbf{k}$ für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_W$. $G^T_{0\mathbf{k}}$ besteht nach Tab. 13, S. 77, aus den Elementen $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\sigma}_{4x}$, $\boldsymbol{\delta}_{2x}$, $\boldsymbol{\sigma}_{4x}^{-1}$ und ist damit der zyklischen Gruppe C_4 isomorph. $\boldsymbol{\sigma}_{4x}$ ist das erzeugende Element. Die Charakterentafel ist in Tab. 26 angegeben.

Tabelle 26. Charakterentafel der abstrakten Punktgruppe C_4

S_4	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\sigma}_4$	$\boldsymbol{\delta}_2$	$\boldsymbol{\sigma}_4^{-1}$
$\mathfrak{D}_1$	1	1	1	1
$\mathfrak{D}_2$	1	-1	1	-1
$\mathfrak{D}_3$	1	i	-1	$-\mathrm{i}$
$\mathfrak{D}_4$	1	$-\mathrm{i}$	-1	i

Um festzustellen, welche Darstellungen zueinander konjugiert sind, muß man die Charaktere der Darstellungen $D^T_\mathbf{k}(a_0^{-1}\, b a_0)$ bestimmen. Wir wählen $a_0 = \{\boldsymbol{\varrho}_z|\boldsymbol{\tau}\}$. Dann wird [siehe (2.38)]

$$D^T_\mathbf{k}(a_0^{-1} b a_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}}\, D^T_{0\mathbf{k}}(\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0) \qquad (\boldsymbol{\beta} \in S_4).$$

Wir berechnen $\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0$ für das erzeugende Element $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_{4x}$:

$$\boldsymbol{\varrho}_z^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{4x}\boldsymbol{\varrho}_z = \boldsymbol{\varrho}_z\boldsymbol{\sigma}_{4x}\boldsymbol{\varrho}_z = \boldsymbol{\sigma}_{4x}^{-1}$$

(wie man rein anschaulich zeigen kann).

In Tab. 27 geben wir $\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0$ und den Wert für

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}(\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau})} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{t}_i} \qquad (\boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{L}_i)$$

für alle $\boldsymbol{\beta} \in S_4$ an $\left[\mathbf{k}_W = \dfrac{\pi}{2a}(1,2,0)\right]$.

Tabelle 27

$\boldsymbol{\beta}$	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}$	$\boldsymbol{\delta}_{2x}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}^{-1}$
$\boldsymbol{\alpha}_0^{-1}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_0$	$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}^{-1}$	$\boldsymbol{\delta}_{2x}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}$
$i\ (\boldsymbol{\beta} \in \mathfrak{L}_i)$	0	2	1	3
$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{t}_i}$	1	i	-1	$-\mathrm{i}$

Geht man von der identischen Darstellung $\mathfrak{D}_1$ aus, so hat die zu $\mathfrak{D}_1$ konjugierte Darstellung die Charaktere

$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}$	$\boldsymbol{\delta}_{2x}$	$\boldsymbol{\sigma}_{4x}^{-1}$
1	i	-1	$-\mathrm{i}$

d. h., $\mathfrak{D}_1$ und $\mathfrak{D}_3$ sind konjugierte Darstellungen. Ebenso sind $\mathfrak{D}_2$ und $\mathfrak{D}_4$ konjugierte Darstellungen. Man erhält also nach (2.34) zwei erlaubte irreduzible Darstellungen von $G_{\mathbf{k}}$ (für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_W$):

Tabelle 28

	$\{\varepsilon\|0\}$	$\{\sigma_{4x}\|0\}$	$\{\delta_{2x}\|0\}$	$\{\sigma_{4x}^{-1}\|0\}$	$\{\beta\|\tau\}$ mit $\beta \notin T_d$
W_1	2	$1+\mathrm{i}$	0	$1-\mathrm{i}$	0
W_2	2	$-1-\mathrm{i}$	0	$-1+\mathrm{i}$	0

Die Charaktere für $\{\alpha|\mathbf{v}_\alpha + \mathbf{R}\}$ folgen wieder gemäß (2.47).[1])

[1]) Wählt man statt $e^{-i\mathbf{kR}}$ für die Darstellung der Translationselemente $e^{+i\mathbf{kR}}$, so werden die Charaktere von $\{\sigma_{4x}|0\}$ $1-\mathrm{i}$ bzw. $-1+\mathrm{i}$, und die von $\{\sigma_{4x}^{-1}|0\}$ werden $1+\mathrm{i}$ bzw. $-1-\mathrm{i}$.

3. Darstellungsräume

Bisher haben wir uns allgemein mit Gruppen und ihren Darstellungen beschäftigt. Als Beispiel haben wir die kristallographischen Raumgruppen und ihre Darstellungen untersucht. Wir müssen jetzt versuchen, unsere Ergebnisse auf die Physik anzuwenden.

Die Symmetrien eines physikalischen Problems drücken sich in bestimmten Invarianzeigenschaften des Hamilton-Operators dieses Problems aus. Diese Invarianzeigenschaften haben ein bestimmtes Transformationsverhalten der Eigenfunktionen zur Folge.

Analog wie wir in Abschn. 1.2.4 einen Zusammenhang zwischen einer Gruppe linearer Abbildungen in einem linearen Vektorraum und einer Darstellung dieser Gruppe hergestellt haben, werden wir hier Transformationen im Hilbert-Raum und ihre Beziehungen zu Darstellungen betrachten. Im vierten Kapitel werden dann die hier entwickelten Vorstellungen auf das Eigenwertproblem des Hamilton-Operators eines symmetrischen Systems angewandt.

3.1. Basisfunktionen

Es sei eine Gruppe G mit Elementen $a \in G$ gegeben. Die Elemente a mögen isomorph auf unitäre Operatoren P_a des Hilbert-Raumes abgebildet werden, so daß

$$P_a P_b = P_{ab}$$

ist. Die P_a kann man als lineare Transformationen im Hilbert-Raum auffassen. Sei ferner $\mathfrak{D}$ eine d-dimensionale unitäre Darstellung von G, dann nennt man d Funktionen f_λ $(\lambda = 1, \ldots, d)$ des Hilbert-Raumes genau dann *Basisfunktionen der Darstellung* $\mathfrak{D}$, wenn

$$P_a f_\lambda = \sum_{\mu=1}^{d} D_{\mu\lambda}(a) f_\mu \tag{3.1}$$

für alle $a \in G$ und für alle $\lambda = 1, \ldots, d$ gilt. f_λ heißt die *zur λ-Zeile von $\mathfrak{D}$ gehörige Funktion.*

Hat man zwei Sätze f_λ und f'_λ $(\lambda = 1, \ldots, d)$ von Basisfunktionen zu derselben Darstellung $\mathfrak{D}$, so gehört auch der Satz $\alpha f_\lambda + \beta f'_\lambda$ (α, β beliebige Zahlen) zu der Darstellung $\mathfrak{D}$, da die Beziehung (3.1) linear ist.

Dabei ist von der Linearität der Operatoren P_a Gebrauch gemacht worden. Der Zeitumkehr-Operator K z. B. ist antilinear, d. h., für ihn ist

$$K \lambda f = \lambda^* K f,$$

und die oben gemachte Behauptung trifft für K nicht zu.

Die Basisfunktionen einer d-dimensionalen unitären Darstellung $\mathfrak{D}$ bilden ein orthogonales Funktionensystem und lassen sich gleichzeitig normieren.