

Max Wagner

Gruppentheoretische Methoden in der Physik

Ein Lehr- und Nachschlagewerk



Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
I	Mathematische Grundlagen	5
2	Elemente der Gruppentheorie	7
2.1	Gruppenpostulate	7
2.2	Gruppentafel	8
2.3	Ordnung der Gruppe	9
2.4	Periode eines Elements	9
2.5	Abelsche Gruppen	10
2.6	Konjugierte Elemente	10
2.7	Klassen	11
2.8	Multiplikation von Klassen	12
2.9	Untergruppe	12
2.10	Lagrange-Theorem	12
2.11	Isomorphie	13
2.12	Homomorphie	13
2.13	Aufgaben zu Kapitel 2	14
3	Darstellungstheorie	17
3.1	Darstellung einer Gruppe	17
3.2	Äquivalente Darstellungen	18
3.3	Unitäre Darstellung	18
3.4	Reduzibilität einer Darstellung	19
3.5	Das Große Orthogonalitätstheorem	20
3.6	Charaktere	21
3.7	Reduktion einer Darstellung	23
3.8	Orthogonalität und Vollständigkeit der Charaktere	23
3.8.1	1. Satz von Burnside	24
3.8.2	Orthogonalitätsrelation der Charaktere	24
3.8.3	Vollständigkeitsrelation der Charaktere (2. Orthogonalitätsrelation)	24
3.8.4	Folgerungen	25
3.8.5	2. Satz von Burnside	25
3.8.6	Durchführung einer Reduktion	26
3.9	Die reguläre Darstellung	27
3.10	Konstruktion einer Charaktertafel	29
3.11	Aufgaben zu Kapitel 3	31
	35

4	Basisvektoren (Basisfunktionen)	35
4.1	Invarianter Vektorraum	35
4.1.1	Kartesische Einheitsvektoren und Ortsvektor	35
4.1.2	Funktionen im Ortsraum	37
4.2	Symmetriekonformen Punkten zugeordnete Vektoren und Koordinatensysteme	40
4.3	Basis einer Darstellung	42
4.4	Wigner-Formel	44
4.5	Erzeugender Operator einer irreduziblen Basis	49
4.6	Drehspiegelgruppe $SO(3) = \mathbf{R} \times C_i$	50
4.6.1	Rotationsgruppe \mathbf{R}	51
4.6.2	Drehspiegelgruppe $SO(3) = \mathbf{R} \times C_i$	55
4.7	Aufgaben zu Kapitel 4	58
II	Einfache physikalische Anwendungen	63
5	Quantenmechanik	65
5.1	Archetypische Problemstellungen	65
5.1.1	Variationsverfahren: Irreduzible Versuchsfunktionen	65
5.1.2	Molekulare Orbitale	66
5.1.3	Aufspaltung von Energieeigenwerten	70
5.2	Korrelationstabeln (Kompatibilitätstabeln)	71
5.3	Entartete Störungstheorie	72
5.3.1	Störungstheorie 1. Ordnung	73
5.3.2	Störungstheorie 2. Ordnung	78
5.3.3	Höhere Multiplizitäten	79
5.4	Aufspaltung im homogenen elektrischen Feld	79
5.4.1	Wasserstoffähnliche Atome (modifiziertes Coulomb-Potential)	79
5.4.2	Quadratischer Stark-Effekt	82
5.4.3	Linearer Stark-Effekt	82
5.5	Aufgaben zu Kapitel 5	85
6	Potentialfelder in der Mechanik, Elektrodynamik und Quantenmechanik	87
6.1	Multipolentwicklung	88
6.1.1	Theoretisch-physikalischer Hintergrund	88
6.1.2	Anwendung der Gruppentheorie	90
6.2	Kristallfeldtheorie (Ligandenfeldtheorie)	91
6.3	Aufgaben zu Kapitel 6	95
7	Klassische Punktdynamik: Harmonische Schwingungen in symmetrischen Systemen	97
7.1	Harmonische Schwingungssysteme	97
7.2	Transformation des Ortsvektors und der Einheitsvektoren	99
7.3	Invarianzen	101
7.4	Symmetrievektoren und Symmetriekoordinaten	103
7.5	Hamiltonfunktion in Symmetriekoordinaten	105
7.6	Eigenvektoren und Eigenfrequenzen	107
7.6.1	Darstellungen mit $a_\mu = 1$	107
7.6.2	Darstellungen mit $a_\mu > 1$	108

7.7	Prototypisches Lösungsbeispiel	108
7.7.1	Wahl des Koordinatensystems	109
7.7.2	Ausreduktion	109
7.7.3	Symmetrievektoren mit Multiplizität $a_\mu = 1$	111
7.7.4	Symmetrievektoren mit Multiplizität $a_\mu > 1$	112
7.7.5	Eigenmoden der Multiplizität $a_\mu = 1$	115
7.7.6	Eigenmoden der Multiplizität $a_\mu > 1$	116
7.8	Aufgaben zu Kapitel 7	118

III Fortgeschrittene physikalische Anwendungen 125

8	Tensoren im Kristall	127
8.1	Energiedichte im Kontinuum mit lokaler Punktsymmetrie	127
8.2	Reduktion durch Symmetrie	129
8.3	Rechenprozedur	130
8.4	Kristallsysteme, Kristallklassen	132
8.5	Dielektrizitätstensor	132
8.5.1	Rückblick auf die Wigner-Konvention	132
8.5.2	Transformationseigenschaften	134
8.6	Elastizitätstensor	136
8.7	Piezoelektrizität	138
8.8	Aufgaben zu Kapitel 8	141
9	Absorption, Emission und Streuung von Licht	143
9.1	Dipolübergänge	143
9.2	Kohärente Lichtstreuung und Raman-Streuung	145
9.2.1	Dispersion („elastische Lichtstreuung“)	145
9.2.2	Raman-Streuung	147
9.3	Produktdarstellungen	148
9.3.1	Reduktion von Produktdarstellungen	148
9.3.2	Symmetrische und antisymmetrische Darstellung	150
9.4	Standardisierte Produktreduktionen	151
9.4.1	Kopplungskoeffizienten (Wigner-Koeffizienten)	151
9.4.2	Multiplikationstafeln	153
9.4.3	Kopplungstafeln	154
9.4.4	Wigner-(Clebsch-Gordan)-Koeffizienten	154
9.4.5	Wigner-Eckart-Theorem	156
9.5	Prototypische Beispiele	157
9.5.1	Dipolübergänge	157
9.5.2	Raman-Übergänge	159
9.6	IR- und Raman-Schwingungsspektren	160
9.6.1	Grundschrwingungen	160
9.6.2	Kombinations- und Obertöne	162
9.7	Aufgaben zu Kapitel 9	164
10	Die Translationsgruppe T	167
10.1	Periodische Randbedingungen	167
10.1.1	Realisierung	167

10.1.2 Implikationen für die Physik	168
10.2 Blochfunktionen	169
10.2.1 Reziprokes Gitter	169
10.2.2 Basisfunktionen der irreduziblen Darstellungen	169
10.2.3 Erste Brillouin-Zone (1. BZ)	170
10.2.4 Konstruktion der 1. Brillouin-Zone	171
10.2.5 Höhere Brillouin-Zonen	171
10.3 Aufgabe zu Kapitel 10	173
11 Darstellungstheorie der Raumgruppen	175
11.1 Symmetrioperationen der Raumgruppen	175
11.2 Eigenfunktionen als Blochfunktionen	177
11.3 Einelektronenbandstruktur	178
11.4 Spezielle Punkte der 1. Brillouin-Zone	180
11.4.1 Gruppe des \vec{k} -Vektors (Kleine Gruppe)	181
11.4.2 Sternoperationen von \vec{k} („Stern von \vec{k} “)	181
11.4.3 Restoperationen	182
11.5 Irreduziblen Darstellungen	184
11.5.1 Aufbau der irreduziblen Darstellungen	184
11.5.2 Bezeichnungsweise der irreduziblen Darstellungen	184
12 Energiebänder im Kristall	187
12.1 Energieaufspaltung im Kristall	187
12.2 Kompatibilitätsbeziehungen	190
12.2.1 Wege zwischen besonderen \vec{k} -Punkten	190
12.2.2 Erzwungene Überschneidung (Zufällige Entartung)	193
12.3 Aufgabe zu Kapitel 11 und 12	196
IV Lie-Gruppen	197
13 Die kontinuierliche Gruppe $R \times C_i \equiv SO(3)$	199
13.1 Generatoren	199
13.2 Irreduzible Darstellungen	201
13.3 Lie-Algebra	201
13.4 Operatordiagramm	203
13.5 Multiplette	204
13.6 Normierung und Matrixelemente	204
13.7 Clebsch-Gordan-Koeffizienten	206
14 Lie-Algebra des Wasserstoffproblems	209
14.1 Der Runge-Lenz-Vektor	210
14.2 Multiplettstrukturen	214
14.3 Aufbau der Eigenfunktionen	215
14.4 Zusammenhang mit den konventionellen Eigenfunktionen von H	215
15 Lie-Algebra der Elementarteilchen	217
15.1 Isospin-Algebra	217
15.2 Multipletts als Elementarteilchen	218

15.3	$SU(3)$ -Algebra („Eigthfold way“)	219
15.3.1	Kommutatorialgebra	219
15.3.2	Operatordiagramm der $SU(3)$	220
15.3.3	Irreduzible Multipletts der $SU(3)$ (Gell-Mann-Modell)	221
16	Einführung in die Lie-Gruppen und deren Terminologie	225
16.1	Vorbemerkungen	225
16.2	Kontinuierliche Gruppen	225
16.3	Lie-Gruppen	226
16.4	Realisierung von Lie-Gruppen als Transformationsgruppen	226
16.5	Die linearen Gruppen $GL(n)$ und $SL(n)$	227
16.5.1	Allgemeine Lineare Gruppe $GL(n)$	227
16.5.2	Spezielle Lineare Gruppe $SL(n)$ (Unimodulare Gruppe)	228
16.6	Exponentialdarstellung unitärer Matrizen	228
16.6.1	Determinante einer unitären Matrix	229
16.6.2	Determinanten-Spur-Beziehung	229
16.7	Die Familie der unitären Gruppen: $U(n), SU(n), O(n), SO(n)$	230
16.7.1	Die Unitäre Gruppe $U(n)$	230
16.7.2	Die Spezielle Unitäre Gruppe $SU(n)$	232
16.7.3	Die Orthogonale Gruppe $O(n)$	233
16.7.4	Die Spezielle Orthogonale Gruppe $SO(n)$	234
16.8	Weg zur Lie-Algebra	235
16.8.1	Generatoren der Lie-Gruppe	235
16.8.2	Lie-Algebra der Generatoren	236
16.9	Operatoren als Generatoren	240
	Anhang	245
A	Symmetrie	245
A.1	Symmetrioperationen/-elemente	245
A.2	Symmetriesätze	246
A.3	Kurzbeschreibung der Punktgruppen	246
A.3.1	Die Gruppen C_n	247
A.3.2	Die Gruppen C_{nh}	247
A.3.3	Die Gruppen C_{nv}	248
A.3.4	Die Gruppen S_n	248
A.3.5	Die Gruppen D_n	249
A.3.6	Die Gruppen D_{nd}	249
A.3.7	Die Gruppen D_{nh}	250
A.3.8	Die kubischen Gruppen: T, T_d, T_h, O, O_h	251
A.3.9	Die Ikosaeder-Gruppen: I, I_h	252
A.3.10	R (Volle Rotationsgruppe)	252
A.3.11	$SO(3) = R \times C_i$ (Rotations-Inversionsgruppe)	252
B	Charaktertafeln	255
B.1	Zur Benennung der Darstellung	255
B.2	Isomorphien und Produktrelationen	255
B.3	Charaktertafeln	256

B.3.1	Die einfachsten Gruppen C_1, C_s und C_i	256
B.3.2	Die Gruppen $C_n, n = 2, \dots, 8$	256
B.3.3	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$	258
B.3.4	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$	261
B.3.5	Die Gruppen $S_n, n = 4, 6, 8$	262
B.3.6	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6$	263
B.3.7	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$	265
B.3.8	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$	267
B.3.9	Die kubischen Gruppen: T, T_d, T_h, O, O_h	270
B.3.10	Die Ikosaeder-Gruppen: I, I_h	272
B.3.11	Die unendlichen Gruppen $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$	273
B.3.12	Die volle Rotationsgruppe R	274
B.3.13	Die Rotations-Inversionsgruppe $SO(3) = R \times C_i$	275
C	Korrelationstabeln	277
C.1	Hierarchische Ordnung der Gruppen	277
C.2	Korrelationstabeln	277
C.2.1	Die Gruppen C_4 und C_6	277
C.2.2	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$	277
C.2.3	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$	279
C.2.4	Die Gruppen $S_n, n = 4, 6, 8$	280
C.2.5	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6$	280
C.2.6	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$	281
C.2.7	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$	282
C.2.8	Die kubischen Gruppen: T, T_d, T_h, O, O_h	285
C.2.9	Die Ikosaeder-Gruppen: I, I_h	286
C.2.10	Die Gruppe $C_{\infty v}$	286
C.2.11	Die Gruppe $SO(3) = R \times C_i$	287
C.2.12	Spezialfälle	288
D	Multiplikationstabeln	291
D.1	Grundregeln	291
D.2	Symmetrische und antisymmetrische direkte Produkte	292
D.3	Multiplikationstabeln	293
D.3.1	Die einfachsten Gruppen C_1, C_s und C_i	293
D.3.2	Die Gruppen $C_n, n = 2, \dots, 6, 8$	293
D.3.3	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$	293
D.3.4	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$	293
D.3.5	Die Gruppen $S_n, n = 2, 4, 6, 8, 12$	294
D.3.6	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6, 8, 12$	294
D.3.7	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$	296
D.3.8	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$	296
D.3.9	Die kubischen Gruppen	296
D.3.10	Die Ikosaeder-Gruppen	296
D.3.11	Die unendlichen Gruppen $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$	297
D.3.12	Die Rotationsgruppe R / Rotations-Inversionsgruppe $SO(3) = R \times C_i$	297
E	Kopplungskoeffizienten (Wigner-Koeffizienten für endliche Punktgruppen)	299
E.1	Definitionen und Regeln	299

E.1.1	Zerlegung in irreduzible Bestandteile	299
E.1.2	Generierung durch Basisfunktionen	299
E.1.3	Unitäre Darstellungen und Standardisierung	299
E.1.4	Symmetrische und antisymmetrische Anteile	300
E.2	Kopplungstabellen	300
E.2.1	Die Gruppen C_n , $n = 3, 4, 6$	300
E.2.2	Die Gruppen C_{nh} , $n = 2, \dots, 6$	302
E.2.3	Die Gruppen C_{nv} , $n = 2, \dots, 6$	302
E.2.4	Die Gruppen S_n , $n = 2, 4, 6, 8, 12$	302
E.2.5	Die Gruppen D_n , $n = 3, 4, 6$	302
E.2.6	Die Gruppen D_{nd} , $n = 2, \dots, 6$	304
E.2.7	Die Gruppen D_{nh} , $n = 2, \dots, 6$	304
E.2.8	Die kubischen Gruppen: T, T_d, T_h, O, O_h	304
E.2.9	Die Ikosaeder-Gruppen: I, I_h	310
F	Wigner–Clebsch–Gordan–Koeffizienten	329
F.1	Allgemeines	329
F.2	Tafeln der Wigner–Clebsch–Gordan–Koeffizienten	333
F.2.1	Tafel für $D_1 \times D_1$	333
F.2.2	Tafel für $D_1 \times D_2$	334
F.2.3	Tafel für $D_1 \times D_3$	335
F.2.4	Tafel für $D_2 \times D_2$	337
G	Optische Aktivität, Piezoelektrizität und Pyroelektrizität	339
H	Bravais-Gitter und Kristallsysteme	341
H.1	Bravais-Gitter und Translationsgruppen	341
H.2	Raumgitter und Raumgruppe	344
H.3	Kristallsysteme und Kristallklassen	344
H.4	Höhere Raumgruppen	345
H.5	Zusammenfassung	348
I	Brillouin-Zonen, Fermikörper und Fermiflächen	349
I.1	Die 1. Brillouin-Zone und ihre speziellen Punkte	349
I.1.1	Quadratgitter	349
I.1.2	Kubisch primitives, kubisch flächenzentriertes und kubisch raumzentriertes Gitter	350
I.1.3	Hexagonales Gitter	351
I.1.4	Bemerkung	351
I.2	Fermikörper und Fermiflächen	352
J	Elementarteilchen	355
J.1	Bezeichnungen der Elementarteilchen	355
J.2	Quarks und Quarkstruktur der Elementarteilchen	356
K	Lösungen der Übungsaufgaben	357
K.1	Zu Kapitel 2	357
K.2	Zu Kapitel 3	361
K.3	Zu Kapitel 4	370

K.4 Zu Kapitel 5	392
K.5 Zu Kapitel 6	399
K.6 Zu Kapitel 7	402
K.7 Zu Kapitel 8	416
K.8 Zu Kapitel 9	423
K.9 Zu Kapitel 10	431
K.10 Zu Kapitel 11 und 12	432
L Johannes Kepler:	
„Über den hexagonalen Schnee“	437
L.1 Textauszug	438
L.2 Kommentare	439
Abbildungsverzeichnis	443
Tabellenverzeichnis	445
Symbolverzeichnis	447
Literaturverzeichnis	451
Sachwortverzeichnis	455