

# EINFÜHRUNG IN DIE GRUPPENTHEORIE FÜR PHYSIKER

Thomas Nattermann

gesetzt in TEX von Mariela Boevska

Sommersemester 2001

....There is a more general moral here. A symmetry principle should not be an end in itself. Sometimes the physics of a problem is so complicated that symmetry arguments are the only practical means of extracting information about the system. Then, by all means use them. But, do not stop looking for an explicit dynamical scheme that makes more detailed calculation possible. Symmetry is a tool that should be used to determine the underlying dynamics, which must in turn explain the success (or failure) of the symmetry arguments. Group theory is a useful technique, but it is no substitute for physics.

Howard Georgi

1. Grundlagen der Gruppentheorie
  - 1.1 Begriff der Gruppe
  - 1.2 Konkretisierung
  - 1.3 Produktgruppe, Klasse
2. Darstellung von Gruppen
  - 2.1 Lineare Vektorräume und Operatoren
  - 2.2 “Darstellung” einer Gruppe
  - 2.3 Beispiele von Darstellungen
  - 2.4 Invariante Unterräume
  - 2.5 Irreduzible Darstellungen
  - 2.6 Äquivalente Darstellungen, Schwarzsches Lemma
  - 2.7 Charakter von Darstellungen
  - 2.8 Reduktion von Darstellungen
  - 2.9 Orthogonalität von Basisfunktionen für irreduzible Darstellungen
  - 2.10 Direktes Produkt zweier Darstellungen
  - 2.11 Reduktion einer irreduziblen Darstellung bei Beschränkung auf eine Untergruppe
  - 2.12 Projektionsoperator
  - 2.13 Darstellung des direkten Produkts von zwei Gruppen
  - 2.14 Das Wigner–Eckart–Theorem
3. Symmetrien in der Quantenmechanik
  - 3.1 Symmetriegruppe des Hamiltonians
  - 3.2 Molekülschwingungen
  - 3.3 Punktgruppen
4. Kontinuierliche Gruppen und ihre Darstellungen
  - 4.1 Allgemeine Bemerkungen
  - 4.2 Infinitesimale Operatoren
  - 4.3 Die  $SO(2)$ -Gruppe
  - 4.4 Die  $SO(3)$ -Gruppe (+  $SO(4)$ : H-Atom)

4.5 Spin, Drehimpuls und die Gruppen  $SO(3)$ ,  $SU(2)$

4.6 Die  $SU(2)$ -Gruppe (Isospin)

4.7 Die  $SU(3)$ -Gruppe (Quarks)

# Kapitel 1

## Grundlagen der Gruppentheorie

### 1.1 Begriff der Gruppe

Betrachte Menge  $\mathcal{G}$  von endlich oder unendlich vielen Elementen  $G_a, G_b, \dots$  (oder auch  $a, b, \dots$ ), in der eine **Zusammensetzungsregel** (ZSR) definiert ist, so dass jedem geordneten Paar  $a, b \in \mathcal{G}$  eindeutig ein Element  $c = a \cdot b$  von  $\mathcal{G}$  zugeordnet ist. I.a. gilt  $a \cdot b \neq b \cdot a$ , oft wird der Punkt weggelassen.

BEISPIEL 1

$\mathcal{G}$ =Menge aller natürlichen Zahlen  $1, 2, 3, \dots$ , mit der Multiplikation als Zusammensetzungsregel (ZSR) ZSR: **Multiplikation**

BEISPIEL 2

$\mathcal{G}$ =Menge aller reellen Zahlen grösser als 0 mit der **Multiplikation** als ZSR. ( $\mathcal{G}$  ist überabzählbar.)

BEISPIEL 3

$\mathcal{G}$ =Menge der ganzen Zahlen  $\dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots$  mit der **Subtraktion** als ZSR. ( $\mathcal{G}$  abzählbar unendlich.)

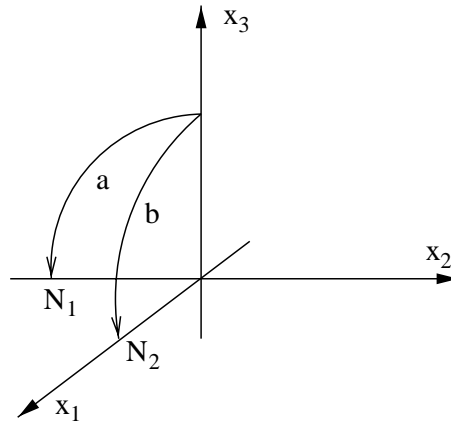
BEISPIEL 4

$\mathcal{G}$ =Menge aller Drehungen der Ebene, die ein reguläres Sechseck in sich überführt. ZSR ist das **Hintereinanderausführen zweier Drehungen**. ( $\mathcal{G}$  ist endlich.) Inklusive der Drehung um  $O_o$  (Identität) besteht  $\mathcal{G}$  aus 6 Elementen:  $a, a^2, a^3, a^4, a^5, a^6 = e$ .

BEISPIEL 5

$\mathcal{G}$ =Menge aller eigentlichen Drehungen des Raumes, die eine Kugel invariant lassen (alle Drehungen um beliebigen Achsen durch Kugelmittelpunkt, keine Spiegelun-

gen). ZSR ist das Hintereinanderausführen der Drehungen.  $\mathcal{G}$  ist kontinuierlich, i.a.  $a \cdot b \neq b \cdot a$ . Siehe Bild:  $b \cdot a(N) = N_1$ ,  $a \cdot b(N) = N_2$ .



Wir kommen jetzt zur **Definition einer Gruppe**:

#### DEFINITION 1

Eine Menge  $\mathcal{G}$  von Elementen mit einer ZSR (Produkt), die jedem geordneten Paar  $a \cdot b$  von Elementen dieser Menge eindeutig ein Element  $c = a \cdot b$  von  $\mathcal{G}$  zuordnet und folgende Eigenschaften I, II, III hat, heißt Gruppe:

- I. Es existiert ein **Neutralement**  $e \in \mathcal{G}$ , auch **Identität** oder **Einselement** genannt, mit  $s \cdot e = e \cdot s = s$ ,  $\forall s \in \mathcal{G}$ .
- II. Zu jedem  $s \in \mathcal{G}$  existiert ein **Inverses**  $s^{-1} \in \mathcal{G}$  mit  $s \cdot s^{-1} = s^{-1} \cdot s = e$ ,  $\forall s \in \mathcal{G}$ .
- III. Die ZSR ist assoziativ, d.h.  $(ab)c = a(bc)$ ,  $\forall a, b, c \in \mathcal{G}$  mit der Übereinkunft  $abc := (ab)c = a(bc)$   
(Abarbeitung von recht nach links)

Die Gesamtzahl  $g$  der Elementen von  $\mathcal{G}$  (wenn endlich) heißt Ordnung der Gruppe.  
 $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$  da  $(ab)^{-1}(ab) = e$ ,  $b^{-1}a^{-1}ab = e$ .

Beispiel 1:  $e = 1$ , assoziativ aber es existiert **kein inverses** Element  $1/a \notin \mathcal{G} \rightarrow$  keine Gruppe.

Beispiel 2:  $e = 1$ ,  $s^{-1} = 1/s$ , assoziativ  $\rightarrow$  Gruppe.

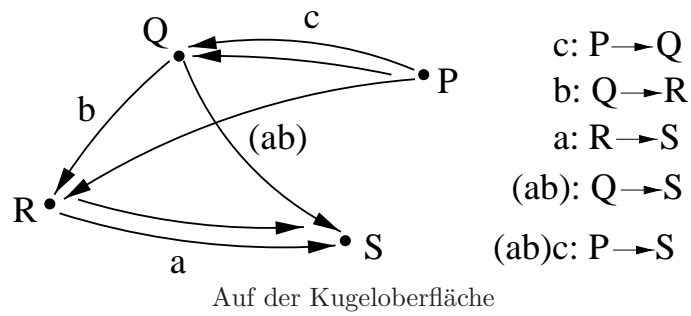
Beispiel 3:  $\exists$  keine  $e$ :  $0 - s \neq s - 0$ ; kein  $e$ ,  $s^{-1}$ ,  $(a - b) - c \neq a - (b - c) \rightarrow$  keine Gruppe.

Beispiel 4:  $e = \text{Drehung um } 0^\circ$ ,  $s = a^k \rightarrow s^{-1} = a^{6-k}$ , assoziativ  $\rightarrow$  Gruppe.

Beispiel 5:  $e, s^{-1}$ , betr. für Assoziativgesetz Transformation auf Kugeloberfläche.

## BEISPIELE

- 
- |  |  |
|--|--|
| 1. $\mathcal{G}$ : natürliche Zahlen $1, 2, \dots$ ; ZSR: Multiplikation   | $1/a \notin \mathcal{G} \rightarrow$ keine Gruppe  |
| 2. $\mathcal{G}$ : reelle Zahlen $> 0$ ; ZSR: Multiplikation   | $e = 1, s^{-1} = 1/s \rightarrow$ Gruppe   |
| 3. $\mathcal{G}$ : ganze Zahlen $\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$ ;<br>ZSR: Substraktion   | $e \nexists \quad s - e \neq e - s \rightarrow$ keine Gruppe<br>$(a - b) - c \neq a - (b - c)$   |
| 4. $\mathcal{G}$ : Drehungen in der Ebene; ZSR: Hintereinander-<br>aufführung 2er Drehungen, die reguläres 6-Eck in<br>sich überführen: $a, a^2, \dots, a^6 = e$ | $e$ : Drehung um $0^\circ, s = a^k$<br>$s^{-1} = a^{6-k}$ , assoziativ $\rightarrow$ Gruppe,<br>abelsch, zyklisch, Trf. Gruppe $g = 6$                               |
| 5. $\mathcal{G}$ : eigentliche Drehungen des Raumes, die Kugel<br>invariant lassen (keine Spiegelung); ZSR: s.o., i.a.<br>$ab \neq ba$                           | $e, s^{-1} \rightarrow$ Gruppe; assoziativ?<br>$abc = (ab)c = a(bc)$ ; nicht abelsch,<br>Trf. Gruppe<br><b>Drehungen um 2 Achsen bilden Er-<br/>zeugendensystem.</b> |



Definition der **Untergruppe**  $\mathcal{H}$ :

DEFINITION 2

Eine Teilmenge einer Gruppe heißt Untergruppe  $\mathcal{H}$ , falls ihre Elemente unter der ZSR von  $\mathcal{G}$  wieder eine Gruppe bilden.

**Beispiel:** In der **additiven** Gruppe der **ganzen Zahlen**  $\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$  bilden die geraden Zahlen eine Untergruppe, nicht die ungeraden

$$\mathcal{G}: \quad e = 0 \quad 0 + s = s + 0, \quad s^{-1} = -s \quad s \cdot s^{-1} = s - s = -s + s = 0$$

$$\mathcal{G}_1: \quad e = 0 \quad G = G_1 + G_2 \quad (\text{gerade Zahlen})$$

$$\mathcal{G}_2: \quad \exists \text{ kein } e \quad (\text{ungerade Zahlen})$$

### Transformationsgruppen

DEFINITION 3

Eine **Transformation** ist eine **eindeutige** Abbildung  $f(x)$  einer Menge  $W$  auf sich.

(eindeutig: aus  $x \neq y$  folgt  $f(x) \neq f(y)$ .)

Abbildung  $f$  heißt auf, falls gilt  $\forall b \in W \quad \exists a$ , so dass  $f(a) = b$ .)

$W$ : **Wirkungsmenge**

Die Menge aller Transformationen mit der Vorschrift

$$f \cdot g(x) = f(g(x)) \quad \forall x \in W$$

bildet eine Gruppe, die sogenannte **volle Transformations-Gruppe von  $W$** , denn

I. Existiert  $e$ : identische Abbildung  $x = x$ , d.h.  $f = 1$ .

II. Existiert inverses Element:  $f^{-1}$ .

III. assoziativ  $(f \cdot g) \cdot h(x) = f(g(h(x)))$ .

**Untergruppe** der vollen Transformationsgruppe von  $W$  heißen **Transformationsgruppen**.

**Physik:** Gesamtheit aller Symmetrietransformationen eines Körpers – Symmetriegruppe = Koordinatentransformationen, die den Hamiltonian des Systems invariant lässt, enthält auch die Vertauschungsgruppe bei identische Teilchen.

Beispiel 4 und 5 sind Transformationsgruppen,  $W$ : alle Punkte der Ebene oder des Raumes.

Eine Gruppe  $\mathcal{G}$  heißt **abelsch** oder **kommutativ**, wenn  $ab = ba \forall a, b \in \mathcal{G}$  gilt.

Beispiele 2 und 4 sind abelsch, 5 nicht.

Eine Gruppe  $\mathcal{G}$  heißt **zyklisch**, wenn sie ausschliesslich aus Potenzen  $a^k$  eines Elements  $a$  besteht.  $a$  heißt **erzeugendes Element**,  $k$  **Periode der Gruppe**.

Beispiel 4 ist eine zyklische Gruppe.

**Erzeugendensystem:** Satz von Elementen einer Gruppe  $\mathcal{G}$ , bei dem sich jedes Element von  $\mathcal{G}$  als Produkt von endlich vielen Elementen dieses Satzes oder dessen Inversen geschrieben werden kann (ist i.a. nicht eindeutig bestimmt).

Beispiel 5 Drehung um 2 Koordinatenachsen bildet Erzeugendensystem.

**Ordnung  $g$  einer Gruppe:** Anzahl ihrer Elemente.

Beispiel 4  $g = 6$ .

## 1.2 Konkretisierung von Gruppen

Transformation einer endlichen Wirkungsmenge  $W$ : Permutation.  $W$  besteht aus  $N$  Objekten, bezeichnet mit  $1, 2, \dots, N$  (auch  $a, b, c, d, \dots, s, \dots$ )

$$\text{Permutation} \quad \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 2 & 4 & 5 & 1 \end{array} \end{array}$$

Die Gruppe  $G$  aller Permutationen von  $N$  Objekten heißt **symmetrische Gruppe**  $S_N$ , deren Ordnung  $g$  ist  $N!$

Untergruppen von  $S_N$  heißen **Permutationsgruppen**.

BEISPIEL 6

*Symmetrische Gruppe  $S_3$  von 3 Objekten  $W = 1, 2, 3$ ,  $g = 6$ . ( $S_3$  ist isomorph zu  $D_3$ , wie wir noch sehen werden.)*

$$e = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{array} \end{array}, \quad a = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{array} \end{array}, \quad b = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{array} \end{array}, \quad c = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{array} \end{array}$$

$$d = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{array} \end{array}, \quad f = \begin{array}{c} \downarrow \\ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{array} \end{array}$$

Erläuterung: Anordnung der Elemente ist unwichtig,  $a : (1 \rightarrow 2; 2 \rightarrow 3; 3 \rightarrow 1)$



Es gilt

$$\begin{array}{l}
 b = a^2 : \quad \begin{array}{ccc} a \downarrow & 1 & 2 & 3 \\ & 2 & 3 & 1 \\ & a \downarrow & 3 & 1 & 2 \end{array} \\
 \\
 ca = bc = d : \quad \begin{array}{ccc} a \downarrow & 1 & 2 & 3 & c \downarrow & 1 & 2 & 3 \\ & 2 & 3 & 1 & & 1 & 3 & 2 \\ & c \downarrow & 3 & 2 & 1 & b \downarrow & 3 & 2 & 1 \end{array} \\
 \\
 cb = ac : \quad \begin{array}{ccc} b \downarrow & 1 & 2 & 3 & c \downarrow & 1 & 2 & 3 \\ & 3 & 1 & 2 & & 1 & 3 & 2 \\ & c \downarrow & 2 & 1 & 3 & a \downarrow & 2 & 1 & 3 \end{array} \\
 \\
 e = a^3 : \quad \begin{array}{ccc} a \downarrow & 1 & 2 & 3 \\ & 2 & 3 & 1 \\ & a \downarrow & 3 & 1 & 2 \\ & & a \downarrow & 1 & 2 & 3 \end{array}
 \end{array}$$

$ca \neq ac$ :  $\mathcal{G}$  nicht abelsch.

$e, a, b$  bilden zyklische Untergruppe (Zeige das!).

Vertauschung von zwei Objekte: **Transposition**.

Beispiel:  $c, d, f$

**Gruppentafel**: Tabelle aller Produkte aus je 2 Elementen, beschreibt abstrakte Struktur der Gruppe

|           |          |          |          |         |          |
|-----------|----------|----------|----------|---------|----------|
| Kopfzeile | $e$      | $a$      | $b$      | $\dots$ | $s$      |
|           | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |         | $\vdots$ |
| $u \in G$ | $ue$     | $ua$     | $ub$     | $\dots$ | $us$     |
|           | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |         | $\vdots$ |

Beispiel 6:  $S_3$

|            |     |     |     |     |     |     |
|------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $\nearrow$ | $e$ | $a$ | $b$ | $c$ | $d$ | $f$ |
| $e$        | $e$ | $a$ | $b$ | $c$ | $d$ | $f$ |
| $a$        | $a$ | $b$ | $e$ | $f$ | $c$ | $d$ |
| $b$        | $b$ | $e$ | $a$ | $d$ | $f$ | $c$ |
| $c$        | $c$ | $d$ | $f$ | $e$ | $a$ | $b$ |
| $d$        | $d$ | $f$ | $c$ | $b$ | $e$ | $a$ |
| $f$        | $f$ | $c$ | $d$ | $a$ | $b$ | $e$ |
| invers     | $e$ | $b$ | $a$ | $c$ | $d$ | $f$ |

SATZ 1

Multipliziert man alle Elemente  $s$  einer Gruppe  $G$  mit einem festen Element  $u \in G$  von links, so ist  $s \rightarrow us$  eine dem Element zugeordnete Permutation  $P(u)$  der Gruppenelemente.

Beweis: Alle Elemente  $us$  sind paarweise verschieden, denn wäre  $us = ut$  für  $s \neq t$ , dann  $u^{-1}us = s = u^{-1}ut = t$ ,  $s = t$  im Widerspruch zur Annahme.

Folglich ist jedem  $u \in G$  eine Permutation  $P(u)$  der Gruppenelemente zugeordnet.

Beispiel:  $P(c) = \begin{matrix} e & a & b & c & d & f \\ \downarrow & & & & & \\ c & d & f & e & a & b \end{matrix}$

SATZ 2

$$P(b)P(a) = P(ba).$$

Beweis:

$$P(a) = \downarrow \begin{matrix} s \\ as \end{matrix}, \quad P(b) = \downarrow \begin{matrix} s \\ bs \end{matrix} = \downarrow \begin{matrix} as \\ b(as) \end{matrix}$$

$$P(b)P(a) = \downarrow \begin{matrix} s \\ b(as) \end{matrix} = \downarrow \begin{matrix} s \\ (ba)s \end{matrix} = P(ba)$$

**Allgemeiner** (beliebige Wirkungsmenge): wird jedem Element  $a$  einer beliebigen Gruppe eine Transformation  $T(a)$  irgendeiner Wirkungsmenge  $W$  so zugeordnet, dass gilt  $T(b)T(a) = T(ba) \quad \forall a, b \in G$  so nennt man das eine **Konkretisierung** von  $G$ .

Dies wiederum ist Spezialfall von folgender Situation: Sei jedem Element von  $a$  einer Gruppe  $G$  ein Element  $a'$  einer Gruppe  $G'$  so zugeordnet, dass gilt  $(ba) = (b'a')$   $\forall a, b \in G$ . Eine solche Abbildung heißt **Homomorphismus**. Ist die Abbildung **eineindeutig**, heißt sie **Isomorphismus**. Beide Gruppen haben dieselbe abstrakte Struktur.

### 1.3 Das direkte Produkt von Gruppen, Klassen

Seien  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{K}$  **Untergruppen** von  $\mathcal{G}$ , deren **Elemente kommutieren**

$$H_a K_b = K_b H_a$$

für alle  $H_a \in \mathcal{H}$ ,  $K_b \in \mathcal{K}$ . Ferner lasse sich jedes Element von  $\mathcal{G}$  eindeutig als Produkt  $K_a H_b$  schreiben. Dann nennt man  $\mathcal{G}$  das direkte Produkt von  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{K}$ , man schreibt  $\mathcal{G} = \mathcal{K} \times \mathcal{H}$ .

Vorteil: kann man  $\mathcal{G}$  als direktes Produkt schreiben, kann man ihre Eigenschaften aus denen von  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{K}$  schließen.

Die **Multiplikationstafel** folgt aus denen von  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{K}$ , da

$$(H_a K_b)(H_c K_d) = (H_a H_c)(K_b K_d).$$

Ist  $g$  groß, werden die Gruppentafeln unhandlich  $\rightarrow$  Vereinfachung des Studiums der Gruppenstruktur durch Betrachtung von "Klassen" von Elementen mit ähnlichen Eigenschaften.

Man sagt, ein **Element**  $a$  ist **konjugiert zu**  $b$ , wenn es mindestens ein  $s$  gibt, so dass  $a = sbs^{-1}$ , wobei  $s \in \mathcal{G}$ , ebenso  $a, b$  ( $s$  **bestimmt die Klasse**).

- (i) Sind  $b$  und  $c$  **konjugiert zu**  $a$ , dann sind  $b$  und  $c$  **konjugiert zueinander**

$$\begin{aligned} a &= sbs^{-1} & a &= s'cs'^{-1} \\ b &= s^{-1}as = s^{-1}s'cs'^{-1}s = (s^{-1}s')c(s^{-1}s')^{-1} \end{aligned}$$

**Elemente** einer **Gruppe**, die **zueinander konjugiert** sind, bilden eine **Klasse**.

$\Rightarrow$  Suche Klassen von Objekten, die konjugiert zueinander sind!

- (ii) Kein Element kann zu mehr als einer Klasse gehören, denn sei  $a$  in zwei Klassen, jeweils von  $b_i$  und  $c_i$  gebildet:

$$\begin{aligned} a &= sb_i s^{-1} & a &= s'c_i s'^{-1} \\ b_i &= s^{-1}as = s^{-1}s'c_i s'^{-1}s = s^{-1}s'c_i(s^{-1}s')^{-1}, \end{aligned}$$

d.h.  $b_i$  und  $c_i$  in einer Klasse.

- (iii)  $e$  bildet eine Klasse  $ses^{-1} = e$ .

- (iv) **Abelsche** Gruppe:  $sbs^{-1} = ss^{-1}b = b$ , d.h. **jedes Element bildet eine Klasse**.

- (v) Bei **endlichen** Gruppen muss  $a^n = e$  für ein endliches  $n$  gelten ( $\forall a^m \in \mathcal{G}$ ). Dann haben alle Elemente **einer Klasse** die gleiche Ordnung  $n$ : sei  $a^n = e$ , dann  $b = sas^{-1}$ ,  $b^n = (sas^{-1})^n = sa^n s^{-1} = e$  und Ordnung  $n$ .

- (vi) Sei  $\mathcal{H}$  Untergruppe von  $\mathcal{G}$  und  $G_b \in \mathcal{G}$ ,  $G_b \notin \mathcal{H}$ , dann bilden auch  $G_b H_a G_b^{-1} \forall H_a \in \mathcal{H}$  eine Untergruppe von  $\mathcal{G}$ .  $\mathcal{H}$  und  $G_b H_a G_b^{-1}$  sind **konjugierte Untergruppen**, jedes Element von  $G_b H_a G_b^{-1}$  ist konjugiert zu einem Element von  $\mathcal{H}$ .

Verändere jetzt Element  $G_b$  – fallen dann alle konjugierte Untergruppen mit  $\mathcal{H}$  zusammen, so heißt  $\mathcal{H}$  ein **Normalteiler** von  $\mathcal{G}$ .

Fazit: Jede Gruppe kann in separate Klassen  $\mathcal{C}_p$  aufgebrochen werden.

**Beispiele für Klassen:**

1. **Rotationsgruppe**  $\mathcal{R}_3$ .

Betrachte Rotation um Winkel  $a$  um Achse  $\mathbf{k}$ :  $R_{\mathbf{k}}(a)$ . Welche Elemente sind in der gleichen Klasse?

$$RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1} = R_{\mathbf{k}'}(a) \quad \text{mit} \quad \mathbf{k}' = R\mathbf{k}$$

für beliebiges  $R$  (beliebige Rotation).

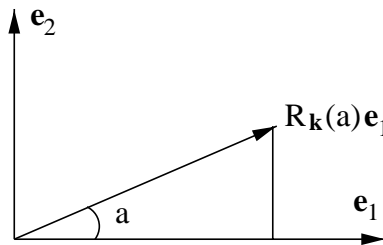
Beweis:

$$[RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1}]\mathbf{k}' = RR_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{k} = R\mathbf{k} = \mathbf{k}'$$

i.e.  $RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1}$  ändert  $\mathbf{k}'$  nicht, d.h. ist Rotation um  $\mathbf{k}'$ .

Noch zu zeigen, dass Winkel  $a$  der gleiche:

Seien  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$  zwei orthogonale Einheitsvektoren in der Ebene senkrecht zu  $\mathbf{k}$



$$R_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_1 \cos a + \mathbf{e}_2 \sin a .$$

Rotation  $R$  überführt Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_1$  und  $\mathbf{e}_2$  in  $\mathbf{e}'_1$  und  $\mathbf{e}'_2$  sowie  $\mathbf{k}$  in  $\mathbf{k}'$ .  $\mathbf{e}'_1$  und  $\mathbf{e}'_2$  sind senkrecht zu  $\mathbf{k}'$ . ( $R$  ist eine orthogonale Transformation.)

$$\mathbf{e}'_1 = R\mathbf{e}_1, \quad \mathbf{e}'_2 = R\mathbf{e}_2$$

$$R_{\mathbf{k}'}(a)\mathbf{e}'_1 = \mathbf{e}'_1 \cos a + \mathbf{e}'_2 \sin a$$

andererseits gilt

$$[RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1}]\mathbf{e}'_1 = \mathbf{R}R_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{e}_1 = R(\mathbf{e}_1 \cos a + \mathbf{e}_2 \sin a) = \mathbf{e}'_1 \cos a + \mathbf{e}'_2 \sin a .$$

Es ist daher immer möglich eine Rotation zu finden, die  $\mathbf{k}$  in  $\mathbf{k}'$  überführt. Folglich gehören zwei Rotationen um denselben Winkel in die selbe Klasse (Rotationsachse geht durch den Ursprung), Rotation um verschiedenen Winkel gehören in verschiedenen Klassen.

## 2. Symmetrische Gruppe $S_3$ .

$$\mathcal{C}_1 = e$$

$$\mathcal{C}_2 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = a, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = b \right\} \quad (\text{hier werden alle 3 Elemente verändert})$$

$$\mathcal{C}_3 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = f, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = d, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = c \right\} \quad (1 \text{ Element wird nicht verändert})$$

**Beweis:**

(a)

$$ses^{-1} = e$$

$$eae^{-1} = a,$$

d.h.  $e$  ist immer zu sich selbst konjugiert.

(b)

$$bab^{-1} = ba^2 = b^2 = a \quad b^{-1}ab = a$$

$$cac^{-1} = cac = cd = b \quad c^{-1}ac = c^{-1}d = cd = b$$

$$dad^{-1} = dad = dc = b \quad d^{-1}ad = df = b$$

$$faf^{-1} = faf = fc = b \quad f^{-1}af = b,$$

Damit aber  $b$  zu  $a$  konjugiert, d.h.  $a, b$  in einer Klasse.

$$sas^{-1} = b, \quad a = s^{-1}bs.$$

(c)

$$aca^{-1} = acb = af = d$$

$$bcb^{-1} = bca = bd = f$$

$$dcd^{-1} = dcd = da = f$$

$$fcf^{-1} = fcf = fb = d,$$

d.h.  $f, c, d$  in einer Klasse

BEISPIEL 7

$\mathcal{G} : 1, -1, i, -i$ , ZSR: Multiplikation.

Gruppentafel:

|      | 1    | -1   | $i$  | $-i$ |
|------|------|------|------|------|
| 1    | 1    | -1   | $i$  | $-i$ |
| -1   | -1   | 1    | $-i$ | $i$  |
| $i$  | $i$  | $-i$ | -1   | 1    |
| $-i$ | $-i$ | $i$  | 1    | -1   |

Zyklisch:  $i, i^2 = -1, i^3 = -i, i^4 = 1, i^5 = i$ .

Abelsch: jedes Element bildet eine Klasse.

BEISPIEL 8

 $\mathcal{H} = C_2$ ,  $e$ =Drehung um  $0^\circ$ ,  $R$ =Drehung um  $\angle\pi$  um  $z$ -Achse

|     |     |     |
|-----|-----|-----|
|     | $e$ | $R$ |
| $e$ | $e$ | $R$ |
| $R$ | $R$ | $e$ |

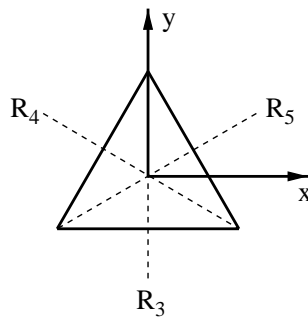
 $\mathcal{K} = S_2$ ,  $e$ ,  $I$ =Inversion jedes Vektor,  $I^2 = 1$ 

|     |     |     |
|-----|-----|-----|
|     | $e$ | $I$ |
| $e$ | $e$ | $I$ |
| $I$ | $I$ | $e$ |

 $C_2$  und  $S_2$  sind isomorph.

Betrachte weitere Gruppe der Transformationen, die ein Dreieck in sich überführen.

BEISPIEL 9

 $D_3 = \{e, R_1, \dots, R_5\}$ .Diese Gruppe ist **isomorph** zu  $S_3$ . $R_1$ : Drehung um  $2\pi/3$  um  $z$ -Achse;  $R_2$ : Drehung um  $4\pi/3$  um  $z$ -Achse. $D_3$  isomorph zu  $S_3$ :  $R_1 \leftrightarrow b$ ,  $R_2 \leftrightarrow a$ ,  $R_3 \leftrightarrow f$ ,  $R_4 \leftrightarrow c$ ,  $R_5 \leftrightarrow d$ .

$$\begin{aligned}
 R_1 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} &= \begin{array}{c} \triangle \\ 3 \\ 1 \quad 2 \end{array} \\
 R_4 R_1 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} &= R_4 \begin{array}{c} \triangle \\ 3 \\ 1 \quad 2 \end{array} = \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 3 \quad 2 \end{array} = R_3 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array}
 \end{aligned}$$

|                  | $e$   | $R_1$ | $R_2$ | $R_3$ | $R_4$ | $R_5$ |
|------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $e$              | $e$   | $R_1$ | $R_2$ | $R_3$ | $R_4$ | $R_5$ |
| $R_1$            | $R_1$ | $R_2$ | $e$   | $R_4$ | $R_5$ | $R_3$ |
| $R_2$            | $R_2$ | $e$   | $R_1$ | $R_5$ | $R_3$ | $R_4$ |
| $R_3$            | $R_3$ | $R_5$ | $R_4$ | $e$   | $R_2$ | $R_1$ |
| $R_4$            | $R_4$ | $R_3$ | $R_5$ | $R_1$ | $e$   | $R_2$ |
| $R_5$            | $R_5$ | $R_4$ | $R_3$ | $R_2$ | $R_1$ | $e$   |
| inverses Element | $e$   | $R_2$ | $R_1$ | $R_3$ | $R_4$ | $R_5$ |

Klassen:

$$\mathcal{C}_1 = 1$$

$$\mathcal{C}_2 = \{R_1, R_2\} \quad R_2 = R_3 R_1 R_3^{-1}$$

$$\mathcal{C}_3 = \{R_3, R_4, R_5\} \quad R_3 = R_1 R_4 R_1^{-1} = R_2 R_5 R_2^{-1}$$

### Die Klassenstruktur der Produktgruppe

Wir suchen jetzt die Klassen für die direkte Produktgruppe  $\mathcal{G} = \mathcal{H} \times \mathcal{K}$ . Eine Klasse von  $\mathcal{H} \times \mathcal{K}$  enthält alle Produkte  $H_a K_b$ , wobei  $H_a$  die Elemente einer Klasse von  $\mathcal{H}$  und  $K_b$  die Elemente einer Klasse von  $\mathcal{K}$  sind.

Beweis: Seien  $K_a H_b$  und  $K_c H_d$  in der gleichen Klasse (der Produktgruppe). Dann gibt es ein Element  $K_e H_f$ , so dass (wir benutzen die Tatsache, dass die Elemente von  $\mathcal{H}$  mit denen von  $\mathcal{K}$  kommutieren)

$$(K_e H_f)(K_a H_b)(K_e H_f)^{-1} = K_c H_d$$

i.e.

$$(K_e K_a K_e^{-1})(H_f H_b H_f^{-1}) = K_c H_d$$

i.e.  $K_a$  und  $K_c$  sind in derselben Klasse von  $\mathcal{K}$  und  $H_b$  und  $H_d$  in derselben Klasse von  $\mathcal{H}$ .

# Kapitel 2

## Darstellungen von Gruppen

### 2.1 Lineare Vektorräume und Operatoren

Ein Physikalischer Zustand eines Systems lässt sich als Vektor (Ortsvektor, Wellenvektor etc.) in einem Raum darstellen. Im Weiteren betrachten wir die Wirkung einer Symmetrieoperation auf diesen Vektor.

#### 2.1.1 Lineare Vektorräume

1.  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_s, \dots$  bilden lineare Vektorraum, wenn mit  $\mathbf{u}_1 \in L, \mathbf{u}_2 \in L$  auch  $\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2 \in L, c\mathbf{u} \in L$  ( $c$  komplex oder reell).
2.  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p$  **linear unabhängig**, wenn  $\sum_{k=1}^p c_k \mathbf{u}_k = 0$  nur für alle  $c_k \equiv 0$  erfüllt.
3. **Dimension**: Maximalzahl der linear unabhängigen Vektoren.
4. **Basis**  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_s\}$  des Vektorraums: jeder Vektor  $\mathbf{u}$  lässt sich in der Form

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^s u_i \mathbf{e}_i$$

schreiben.

5. Definition eines **Skalarprodukts** zwischen  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ : jedem geordneten Paar  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$  ist eine komplexe Zahl  $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$  zugeordnet mit

$$(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1) = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)^*$$

$$(\mathbf{u}_1, c\mathbf{u}_2) = c(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$$

$$(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3) + (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3)$$

$$(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \geq 0 \quad (= 0 \text{ nur für } \mathbf{u} = 0), \quad (\mathbf{u}, \mathbf{u})^{1/2} = \text{“Norm”}$$

Wenn  $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = 0$ , dann sind  $\mathbf{u}_1$  und  $\mathbf{u}_2$  orthogonal. Eine Basis mit  $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$  heißt orthonormale Basis.



Beispiele:

(i)  $\mathbf{u} \in R^n$  Position von  $N$  Teilchen ( $n = 3N$ ),  $\mathbf{u} = \vec{r}$

$$(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2.$$

(ii)  $\mathbf{u} = \psi(\vec{r})$  Wellenfunktion ( $\mathbf{u} \in$  Funktionsraum)

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_a^b \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d^n r.$$

### 2.1.2 Lineare Operatoren

1. **Abbildung** eines Vektors  $\mathbf{u} \in L$ :  $\hat{T}\mathbf{u} = \mathbf{u}' \in L$ .  $\hat{T}$  "Operator".

2.  $\hat{T}$  **linear**, wenn

$$\begin{aligned} \hat{T}(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2) &= \hat{T}\mathbf{u}_1 + \hat{T}\mathbf{u}_2 \quad \forall \mathbf{u}_i \in L \\ \hat{T}c\mathbf{u} &= c\hat{T}\mathbf{u} \quad \forall c \in \mathbb{C} \end{aligned}$$

3. **invarianter Unterraum**  $L_1$

$$\mathbf{u}_1 \in L_1 \rightarrow \mathbf{u}'_1 = \hat{T}\mathbf{u}_1 \in L_1, \quad \forall \mathbf{u}_1 \in L_1$$

$\rightarrow L_1$  "invariant bezüglich"  $\hat{T}$ .

4. **adjungierte, unitäre, hermitesche Operatoren**

adjungierte Operator zu  $\hat{T}$ :  $\hat{T}^\dagger$  definiert durch  $(\mathbf{u}, \hat{T}^\dagger \mathbf{v}) = (\hat{T}\mathbf{u}, \mathbf{v})$ ,  $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in L$ .

hermitesch oder selbstadjungiert:  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$ .

unitärer Operator:  $\hat{T}^\dagger \hat{T} = E$  oder  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$ .

$$(\mathbf{u}', \mathbf{v}') = (\hat{T}\mathbf{u}, \hat{T}\mathbf{v}) = (\mathbf{u}, \hat{T}^\dagger \hat{T}\mathbf{v}) = (\mathbf{u}, \mathbf{v})$$

$\Rightarrow$  formen die  $\{e_i\}$  eine orthonormale Basis, dass auch die  $\{e'_i = \hat{T}e_i\}$ .

$$\mathbf{e}'_i = \hat{T}\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^s T_{ji} \mathbf{e}_j$$

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^s r_i \mathbf{e}_i$$

$$\mathbf{r}' = \hat{T}\mathbf{r} = \sum_{i=1}^s r_i \hat{T}\mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^s r_i \sum_{j=1}^s T_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^s \left( \sum_{i=1}^s T_{ji} r_i \right) \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^s r'_j \mathbf{e}_j$$

mit

$$r'_j = \sum_{i=1}^s T_{ji} r_i.$$

Es ist zu beachten, dass in den Relationen für  $\mathbf{e}'_i$  bzw.  $r'_j$  auf der rechten Seite einmal über den ersten und einmal über den zweiten Index summiert wird.

## 2.2 Die Definition der Darstellung einer Gruppe

(Alle Definitionen sind sicher für endliche Gruppen, bei unendliche Gruppen in der Regel  $\sum_a \rightarrow \int da$ .)

Es existiert ein Satz  $\{\hat{T}\}$  von linearen Operatoren  $\hat{T}(G_a)$  in einem Vektorraum  $L$ , der den Elementen  $G_a \in \mathcal{G}$  entspricht, so dass

$$\boxed{\hat{T}(G_a)\hat{T}(G_b) = \hat{T}(G_aG_b), \quad \hat{T}(e) = 1}$$

gilt, dann wird dieser Satz von Operatoren eine **Darstellung der Gruppe  $\mathcal{G}$  im Vektorraum  $L$  genannt**.

D.h. die Darstellung einer Gruppe  $\mathcal{G}$  ist eine Abbildung der Elemente  $G_a$  auf die Operatoren  $\hat{T}(G_a)$  in  $L$ . Wenn  $s$  die Dimension von  $L$  ist, dann heißt die Darstellung  $s$ -dimensional.  $L$  ist der Darstellungsraum von  $\hat{T}$ . Eine Darstellung heißt **treu** (faithful), wenn es eine eindeutige Beziehung zwischen den Operatoren  $\hat{T}(G_a)$  und den Gruppenelemente  $G_a$  gibt (Isomorphismus). I.a. werden verschiedene Gruppenelemente durch den selben Operator dargestellt, extremes Beispiel ist die **1-Darstellung**, in der alle Gruppenelemente durch den  $\hat{1}$ -Operator dargestellt werden ( $1 \cdot 1 = 1$  trivial).

Häufig definiert man einen **Operator** durch die Wirkung (s)einer **Matrix** auf eine gewählte Basis  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_s$  in  $L$

$$\boxed{\mathbf{e}'_i = \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i = \sum_j T_{ji}(G_a)\mathbf{e}_j}$$

d.h. neuer Basisvektor wird nach altes Basis entwickelt. Für das  $m$ -te Element von  $\mathbf{e}_i$  gilt  $e'_i{}^{(m)} = T_{mk}e_i{}^{(k)} = T_{mi}$ .

Der Satz von Matrizen  $\underline{T}(G_a)$  mit den Matrixelementen  $T_{ji}(G_a)$  bildet eine Matrixdarstellung der Gruppe mit der Eigenschaft

$$\underline{T}(G_a)\underline{T}(G_b) = \underline{T}(G_aG_b).$$

$$\begin{aligned} \hat{T}(G_a)\hat{T}(G_b)\mathbf{e}_i &= \sum_j \hat{T}(G_a)\hat{T}_{ji}(G_b)\mathbf{e}_j = \sum_j \sum_k T_{ji}(G_b)T_{kj}(G_a)\mathbf{e}_k \\ \hat{T}(G_aG_b)\mathbf{e}_i &= \sum_k T_{ki}(G_aG_b)\mathbf{e}_k \end{aligned}$$

$$\boxed{T_{ki}(G_aG_b) = \sum_j T_{kj}(G_a)T_{ji}(G_b)}$$

Um Matrixelemente zu finden  $T_{ji}(G_a) = (\mathbf{e}_j, \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i)$ , da

$$(\mathbf{e}_k, \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i) = (\mathbf{e}_k, T_{ji}\mathbf{e}_j) = T_{ji}\delta_{kj} = T_{ki}.$$

$$\begin{aligned}
\hat{T}\mathbf{e}_i &= \begin{pmatrix} T_{11} & \cdots & T_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ T_{s1} & \cdots & T_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{1i} \\ T_{2i} \\ T_{3i} \\ \vdots \\ T_{si} \end{pmatrix} \\
&= T_{1i} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + T_{2i} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots + T_{si} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.1}
\end{aligned}$$

Andererseits

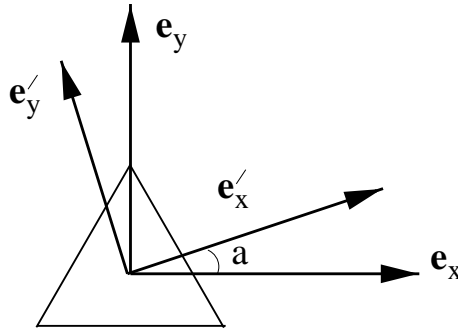
$$\begin{aligned}
\mathbf{u}' &= \hat{T}\mathbf{u} = \sum_{i=1}^s u_i \hat{T}\mathbf{e}_i \stackrel{2.1}{=} \sum_{i=1}^s u_i \sum_{j=1}^s T_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_j \left( \sum_i T_{ji} u_i \right) \mathbf{e}_j = \sum_j u'_j \mathbf{e}_j \\
\rightarrow u'_j &= \sum_i T_{ji} u_i
\end{aligned}$$

## 2.3 Beispiele von Darstellungen

Betrachte zunächst Beispiele im  $\mathbb{R}^3$  (3 dimensionaler euklidischer Raum).

### 2.3.1 Die Gruppe $D_3$ (Beispiel 9)

1. Treue Darstellung:  $\mathbf{e}_x$  in  $x$ -Richtung,  $\mathbf{e}_y$  in  $y$ -Richtung,  $\mathbf{e}_z$  senkrecht zu Blatt-Ebene.



Rotation in  $x$ - $y$ -Ebene um  $a = 2\pi/3 = 120^\circ$

$$\begin{aligned}
\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_x &= \mathbf{e}'_x = \mathbf{e}_x \cos a + \mathbf{e}_y \sin a = -\frac{1}{2}\mathbf{e}_x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} \mathbf{e}_y \\
\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_y &= \mathbf{e}'_y = \mathbf{e}_y \cos a - \mathbf{e}_x \sin a = -\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} \mathbf{e}_x - \frac{1}{2}\mathbf{e}_y \\
\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_z &= \mathbf{e}'_z = \mathbf{e}_z
\end{aligned}$$

$$\underline{\underline{T}}(R_1) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T^{(3)} & 0 \\ 0 & T^{(2)} \end{pmatrix}$$

Darstellungen der anderen Gruppenelemente

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}(R_2) &= \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_3) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{T}}(R_4) &= \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_5) &= \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{T}}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_1) &= \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

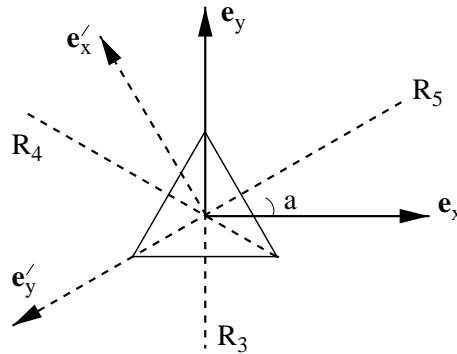
Man kann leicht zeigen, dass die Matrizen die gleichen Multiplikationstabellen haben wie die Gruppenelemente, z.B. gilt

$$\underline{\underline{T}}(R_1)\underline{\underline{T}}(R_4) = \underline{\underline{T}}(R_5).$$

Die treue Darstellung ist nicht die einzige Darstellung dieser Gruppe. Man kann z.B. nur den  $1-d$ -Vektorraum des Vektors  $\mathbf{e}_z$  benutzen  $\rightarrow$  erzeuge  $1-d$  Darstellung  $T^{(2)}$  der Gruppe  $D_3$ .

$$\begin{aligned} T^{(2)}(R_1) &= 1, & T^{(2)}(R_2) &= 1, & T^{(2)}(R_3) &= -1, & T^{(2)}(R_4) &= -1, & T^{(2)}(R_5) &= -1 \\ T^{(2)}(e) &= 1 \end{aligned}$$

Es ist wichtig zu betonen, dass die Darstellung  $T^{(2)}$  verschieden ist von der (trivialen)  $1$ -Darstellung  $T^{(1)}$  von  $D_3$ :  $T^{(1)}(R_i) = T^{(1)}(e) = 1, \forall i$ .



### 2.3.2 Die Gruppe $\mathcal{R}_2$

Alle Rotationen um  $z$ -Achse, Gruppenelement durch  $\angle a \in [0, 2\pi]$ .

Gleicher Vektorraum wie in 2.3.1.

$$\underline{T}(a) = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a & 0 \\ \sin a & \cos a & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{T}(a)\underline{T}(b) = \underline{T}(a+b)$$

### 2.3.3 Darstellungen im Funktionsraum

Streng genommen muss man jetzt bei der Bezeichnung der Operatoren zwischen den Operatoren im  $\mathbb{R}^n$  und im Funktionsraum unterscheiden, z.B.  $\hat{T}$  und  $\hat{T}_\psi$ . Bisher  $L$   $3d$ -Raum ( $\mathbb{R}_3$ ), es existieren aber auch Darstellungen von z.B.  $D_3$  und  $\mathcal{R}_2$  mit mehr als 3 Dimensionen. Betrachte Raum von Funktionen  $\psi(\mathbf{r})$ , der invariant unter einer Gruppe von Koordinatentransformationen  $G_a$  in dem Sinne ist, dass wenn  $\psi(\mathbf{r})$  zu  $L$  gehört, dann auch  $\psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r}) \quad \forall G_a \in \mathcal{G}$ .

Definiere Darstellung  $\hat{T}$  in  $L$

$$\boxed{\hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})}$$

(Hier sind 2 Vektorräume involviert: der Raum des Koordinatenvektors  $r_1, \dots, r_s$  und der Raum der  $\psi(\mathbf{r})$ .)

Genauer

$$\boxed{\hat{T}_\psi(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{T}_r(G_a^{-1})\mathbf{r}) \equiv \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})},$$

d.h. wir schreiben der Kürze halber  $\hat{T}_r(G_a^{-1}) \equiv \hat{G}_a^{-1}$ . Ist das so definierte  $\hat{T}(G_a)$  eine Darstellung? Definiere  $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}\mathbf{r})$ . Dann gilt:

$$\begin{aligned} \hat{T}(G_a)\hat{T}(G_b)\psi(\mathbf{r}) &= \hat{T}(G_a)\psi(\hat{G}_b^{-1}\mathbf{r}) = \hat{T}(G_a)\psi'(\mathbf{r}) = \psi'(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \psi(\hat{G}_b^{-1}\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi((\hat{G}_a\hat{G}_b)^{-1}\mathbf{r}) = \hat{T}(G_aG_b)\psi(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

d.h. das so definierte  $\hat{T}(G_a)$  ist tatsächlich eine Darstellung. Vorsicht, i.a. gilt  $\hat{T}(G_a)\psi(\hat{G}_b^{-1}\mathbf{r}) \neq \psi(\hat{G}_a^{-1}\hat{G}_b^{-1}\mathbf{r})$ .

#### Matrixdarstellung im Funktionsraum

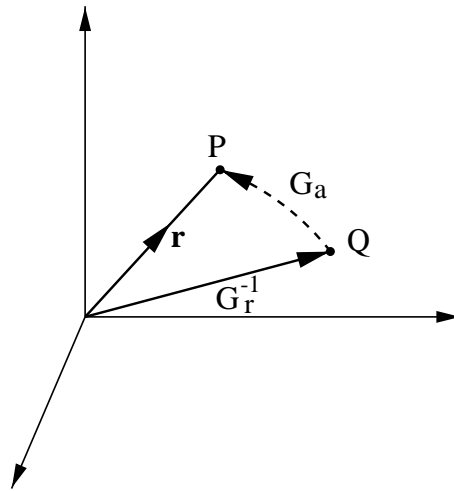
$\mathbf{e}_i =: \psi_i(\mathbf{r})$  (Basis im Funktionsraum)

$$\hat{T}(G_a)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi'_i(\mathbf{r}) = \sum_j T_{ji}(G_a)\psi_j(\mathbf{r})$$

“**Induzierte Transformation**”: Transformation von  $\psi$  durch Transformation der Koordinaten

$$\hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}).$$

Betrachte Körper  $K$ .



$G_a$ : z.B. Rotation von  $K$ .  $\psi(\mathbf{r})$  Temperatur am Ort  $\mathbf{r}$ . Später nützlich:

$$\psi'(\mathbf{r}) = \hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \text{Temp. an } \mathbf{r} \text{ nach der Transformation}$$

$$= \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \text{Temp. an } G_a^{-1}\mathbf{r} \text{ vor Transformation}$$

$$\hat{G}_a \hat{G}_a^{-1}\mathbf{r} = \mathbf{r}$$

**Beispiel:** Konstruktion einer **Darstellung** der  $D_3$  im **Raum der Funktionen**

$x^2, y^2, z^2, yz, zx, xy$

$$\psi_1 = x^2 = (\mathbf{e}_x, \mathbf{r})^2$$

$$\psi_2 = y^2 = (\mathbf{e}_y, \mathbf{r})^2$$

$$\psi_3 = z^2 = (\mathbf{e}_z, \mathbf{r})^2$$

$$\psi_4 = yz = (\mathbf{e}_y, \mathbf{r})(\mathbf{e}_z, \mathbf{r})$$

$$\psi_5 = zx = (\mathbf{e}_z, \mathbf{r})(\mathbf{e}_x, \mathbf{r})$$

$$\psi_6 = xy = (\mathbf{e}_x, \mathbf{r})(\mathbf{e}_y, \mathbf{r}).$$

Die  $\psi_i$  sind linear unabhängig, und invariant unter der Gruppe  $D_3$ :

$$T(R_1)\psi_1 = \frac{1}{4}\psi_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_6 + \frac{3}{4}\psi_2$$

denn da die Drehung eine orthogonale Transformation ist, gilt

$$(\mathbf{e}'_i, \mathbf{r}) = (\hat{G}\mathbf{e}_i, \mathbf{r}) = (\mathbf{e}_i, \hat{G}^{-1}\mathbf{r})$$

und damit:

$$\begin{aligned} \hat{T}(R_1)\psi_1 &= \psi_1(\hat{R}_1^{-1}\mathbf{r}) = (\mathbf{e}_x, \hat{R}_1^{-1}\mathbf{r})^2 = (\hat{R}_1\mathbf{e}_x, \mathbf{r})^2 \\ &= (\mathbf{e}'_x, \mathbf{r})^2 = \left[ \left( -\frac{1}{2}\mathbf{e}_x, \mathbf{r} \right) + \left( \frac{3}{4} \right)^{1/2} (\mathbf{e}_y, \mathbf{r}) \right]^2 \\ &= \frac{1}{4}\psi_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_6 + \frac{3}{4}\psi_2 \end{aligned}$$

Die resultierende Transformationsmatrix für  $R_1$  ist

$$\underline{\underline{T}}(R_1) = \begin{pmatrix} x^2 & y^2 & z^2 & yz & zx & xy \\ 1/4 & \sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

**Ergänzung:** multipliziert man eine Darstellung  $\psi(\mathbf{r})$  mit einer skalaren Funktion  $f(\mathbf{r}^2)$ , dann ist auch  $\psi(\mathbf{r}) \cdot f(\mathbf{r}^2)$  eine Darstellung, falls  $\hat{G}_a$  ein unitärer Operator ist, denn:

$$\hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r}) \cdot f(\mathbf{r}^2) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})f((\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})^2) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})f(\mathbf{r}^2).$$

Fällt  $f(\mathbf{r})$  hinreichend schnell ab, dann kann die Integration im Skalarprodukt über den ganzen Raum erstreckt werden.  $\psi f$  könnte dann z.B. eine Wellenfunktion sein. Die Transformationsmatrix nimmt Blockdiagonalgestalt an, wenn man die Basisfunktion in der Reihenfolge  $x^2, y^2, xy, z^2, yz, zx$  schreibt:

|       | $x^2$         | $y^2$        | $xy$          | $z^2$ | $yz$          | $zx$         |
|-------|---------------|--------------|---------------|-------|---------------|--------------|
| $x^2$ | 1/4           | $\sqrt{3}/4$ | $\sqrt{3}/2$  | 0     |               |              |
| $y^2$ | 3/4           | 1/4          | $-\sqrt{3}/2$ | 0     | 0             |              |
| $xy$  | $-\sqrt{3}/2$ | $\sqrt{3}/2$ | -1/2          | 0     |               |              |
| $z^2$ | 0             | 0            | 0             | 1     | 0             |              |
| $yz$  |               |              |               | 0     | -1/2          | $\sqrt{3}/2$ |
| $zx$  |               | 0            |               | 0     | $-\sqrt{3}/2$ | -1/2         |

## 2.4 Invariante Unterräume

Wenn mit  $\mathbf{u}_1 \in L_1$  auch  $\hat{T}\mathbf{u}_1 \in L_1, \forall \mathbf{u}_1$  dann heißt  $L_1$  ein **invarianter** Unterraum bezüglich  $\hat{T}$ . Hier:  $\hat{T} = \hat{T}(G_a), G_a \in \mathcal{G}$ .

Beispiel:  $D_3$

- (i)  $D_3$  in treuer Darstellung im  $\mathbb{R}_3$

$$L_1 : \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$$

$$L_2 : \mathbf{e}_z ;$$

- (ii)  $D_3$  im Raum aufgespannt durch  $\psi_1, \dots, \psi_6$ , selbst Unterraum des Raumes aller stetigen Funktionen.

Konstruiere invarianten Unterraum durch Anwendung von  $\hat{T}(G_a)$  auf beliebig gewählten Vektor in  $L$

$$\mathbf{u}_a = \hat{T}(G_a)\mathbf{u} \quad \forall G_a \in \mathcal{G}.$$

Die Vektoren  $\mathbf{u}_a$  spannen invarianten Unterraum auf, denn für jedes  $b$  gilt

$$\hat{T}(G_b)\mathbf{u}_a = \hat{T}(G_b)\hat{T}(G_a)\mathbf{u} = \hat{T}(G_bG_a)\mathbf{u} = \hat{T}(G_c)\mathbf{u} = \mathbf{u}_c.$$

Sind alle Vektoren  $\mathbf{u}_a$  linear unabhängig, so bilden sie eine  $g$ -dimensionale Darstellung der Gruppe. In diesem Fall gilt für die Matrixelemente

$$T_{ji}(G_b) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } G_bG_i = G_c \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

I.a. sind nicht alle  $\mathbf{u}_a$  linear unabhängig  $\rightarrow$  finde  $s(\leq g)$  linear unabhängige (orthonormale) Basisvektoren.

Beispiel: Aufbau einer Basis für die Darstellung von  $D_3$  aus  $\psi_i = x^2$ .

## 2.5 Irreduzibilität

In Prinzip lassen sich bei hinreichend großem Funktionsraum immer größere Matrixdarstellungen von  $\mathcal{G}$  erzeugen.

**Allerdings:** Bei einer endlichen Gruppe lassen sich alle Darstellungen aus einer endlichen Anzahl verschiedener irreduzibler Darstellungen aufbauen!

Beispiel:  $D_3$  hat zwei eindimensionale und eine zweidimensionale Darstellungen:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \\ \text{1-Darstellung} \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2\text{-dim} \\ 1\text{-dim} \end{array}$$

Man sagt, die 3-dim. Darstellung ist **reduziert** in eine 2- und eine 1-dim. Darstellung.

Beide lassen sich nicht mehr reduzieren, d.h. es existiert kein  $\mathbf{e}'_x = \alpha\mathbf{e}_x + \beta\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}'_y = \beta\mathbf{e}_x - \alpha\mathbf{e}_y$ , so daß

$$T'_{xy}(R_a) = (\mathbf{e}'_x, \hat{T}(R_a)\mathbf{e}'_y) \quad \text{und} \quad T'_{yx}(R_a) = (\mathbf{e}'_y, \hat{T}(R_a)\mathbf{e}'_x)$$

verschwinden für  $\forall R_a \in D_3$ .

Beispiel:  $R_1$

$$\begin{aligned} T'_{xy}(R_1) &= (\alpha\mathbf{e}_x + \beta\mathbf{e}_y) \cdot (\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_x\beta - \alpha\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_y) \\ &= (\alpha\mathbf{e}_x + \beta\mathbf{e}_y) \cdot \left( -\frac{\beta}{2}\mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\beta\mathbf{e}_y + \alpha\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x + \frac{\alpha}{2}\mathbf{e}_y \right) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2}(\alpha^2 + \beta^2) \geq 0 \end{aligned}$$



**Spätere Anwendungen in der QM:** Wellenfunktionen stationärer Zustände (eines symmetrischen Systems) mit gleicher Energie liefern die Basisfunktionen für die irreduzible Darstellung der Gruppe der Symmetrieoperationen.

### Allgemeine Definition der Irreduzibilität

DEFINITION 4

Sei  $L$  ein Vektorraum, der unter den Transformationen  $\hat{T}(G_a)$ ,  $\forall G_a \in \mathcal{G}$ , invariant ist. Sei ferner  $L_1$  ein invarianter Unterraum,  $L_2$  dessen orthogonale Ergänzung (jeder Vektor in  $L$  lässt sich dann aus den Basisfunktionen von  $L_1$  und  $L_2$  aufbauen). Sind dann  $L_1$  **und**  $L_2$  jeweils invariant bezüglich  $\hat{T}(G_a)$ ,  $\forall G_a \in \mathcal{G}$ , dann nennt man die Darstellung  $\hat{T}$  **reduzibel**. Lässt sich keine solche Darstellung finden, nennt man die Darstellung **irreduzibel**.

Sind die Operatoren  $\hat{T}(G_a)$  **unitär**, dann impliziert die Invarianz von  $L_1$  die Invarianz von  $L_2$ .

**Beweis:** Seien  $\mathbf{e}_i$  und  $\tilde{\mathbf{e}}_j$  die Basisvektoren von  $L_1$  bzw.  $L_2$ , so dass  $(\mathbf{e}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j) = 0 \forall i, j$ . Aus der Invarianz von  $L_1$  folgt:

$$(\hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j) = 0, \quad \forall a, i, j.$$

Aus der Unitarität von  $\hat{T}$  folgt

$$(\mathbf{e}_i, \hat{T}^{-1}(G_a)\tilde{\mathbf{e}}_j) = 0,$$

i.e.  $\hat{T}^{-1}(G_a)\tilde{\mathbf{e}}_j$  ist orthogonal zu  $\mathbf{e}_i$  und liegt deshalb in  $L_2$ .

$\hat{T}^{-1}(G_a) = \hat{T}(G_a^{-1})$ , mit  $G_a$  sind auch alle  $G_a^{-1}$  in  $\mathcal{L}$ .

I.a. wird sich  $L$  in invariante Unterräume aufspalten lassen

$$L = L_1 + L_2 + L_3 + \dots,$$

wobei jeder  $L_q$  irreduzibel und invariant bezügl. der Transformationen  $\hat{T}(G_a)$  ist.

Analog schreibt man für die Darstellung

$$\boxed{\hat{T}(G_a) = \hat{T}^{(1)}(G_a) \oplus \hat{T}^{(2)}(G_a) \oplus \hat{T}^{(3)}(G_a) \oplus \dots = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \hat{T}^{(\alpha)}} \quad (2.2)$$

Hierbei ist  $\hat{T}^{(q)}(G_a)$  die irreduzible Darstellung von  $\mathcal{G}$  in  $L_q$ .

Ordnet man in der Darstellung durch Matrizen die Basisvektoren  $\{\mathbf{e}_i\} = \{\mathbf{e}_i^{(1)}, \mathbf{e}_i^{(2)}, \dots, \mathbf{e}_i^{(q)}, \dots\}$

dann nimmt die  $T$ -Matrix **Diagonalgestalt** an:

$$(\underline{T})_{ij} = \begin{pmatrix} \underline{T}^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \underline{T}^{(2)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \underline{T}^{(3)} & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \underline{T}^{(\cdot)} \end{pmatrix}$$

Hierbei ist jede Matrix  $\underline{T}^{(q)}(G_a)$  eine irreduzible Darstellung von  $\mathcal{G}$ .

Beginnt man mit einer beliebigen Matrixdarstellung von  $\mathcal{G}$ , dann muß man eine neue Basis suchen, in der die Darstellungsmatrix die obige Blockgestalt hat.

Analog zur Zerlegung (2.2) des Operators  $\hat{T}$  schreibt man die Zerlegung der Matrix als

$$\underline{T}(G_a) = \underline{T}^{(1)}(G_a) \oplus \underline{T}^{(2)}(G_a) \oplus \underline{T}^{(3)}(G_a) \oplus \dots$$

Wir hatten gesehen, dass man aus einem beliebigen Vektor  $\mathbf{u}$  einen invarianten Raum  $L$  über  $\hat{T}(G_a)\mathbf{u} = \mathbf{u}_a$  konstruieren kann. Wenn dieser Raum  $L$  jetzt in irreduziblen Unterräumen reduziert wird, so folgt, dass man  $\mathbf{u} = \sum_q \mathbf{u}_q$  schreiben kann, wobei  $\mathbf{u}_q$  in  $L_q$  liegt.  **$\mathbf{u}$  ist in irreduzible Komponenten  $\mathbf{u}_q$  zerlegt.** Diese Zerlegung ist i.a. nicht eindeutig.

## 2.6 Äquivalente Darstellungen, Schursche Lemmata

Im Weiteren Beschränkung auf die **Eigenschaften reduzierbarer Darstellungen.**

I.a. gibt es aber immer noch unendlich viele irreduzible Darstellungen, z.B. durch Wahl anderer Basisvektoren.

**Wesentliche Eigenschaften** der Darstellungen werden dadurch jedoch nicht berührt, was man durch Einführung des Begriffs der **äquivalenten Darstellung** widerspiegelt.

SATZ 3

Sei  $\hat{T}(G_a)$  eine Darstellung von  $\mathcal{G}$  in  $L$ ,  $\hat{A}$  eine Abbildung von  $L$  auf  $L'$  (mit der gleichen Dimension). Dann bilden die Operatoren

$$\hat{T}'(G_a) = \hat{A}\hat{T}(G_a)\hat{A}^{-1} \quad (2.3)$$

eine Darstellung von  $\mathcal{G}$  in  $L'$ .

**Beweis:**

$$\begin{aligned} \hat{T}'(G_a)\hat{T}'(G_b) &= \hat{A}\hat{T}(G_a)\hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{T}(G_b)\hat{A}^{-1} \\ &= \hat{A}\hat{T}(G_a)\hat{T}(G_b)\hat{A}^{-1} \\ &= \hat{A}\hat{T}(G_a G_b)\hat{A}^{-1} = \hat{T}'(G_a G_b) \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Man nennt  $\hat{T}$  und  $\hat{T}'$  **äquivalent** (gleiches  $\hat{A}$  für alle  $G_a!$ ). Sind  $\hat{T}$  und  $\hat{T}'$  sowie  $\hat{T}''$  und  $\hat{T}'$  paarweise äquivalent, dann sind  $\hat{T}''$  und  $\hat{T}$  äquivalent ( $\exists$  Klassen von wechselseitig äquivalenten Darstellungen).

Bei Darstellungen durch Matrizen führt der Übergang zu **einer neuen Basis** zu einer äquivalenten Matrixdarstellung:

Sei  $\hat{T}\mathbf{e}_i = \sum_j T_{ji}\mathbf{e}_j$ , neue Basis  $\mathbf{e}'_i = \hat{A}\mathbf{e}_i = \sum_j A_{ji}\mathbf{e}_j$ , dann

$$\hat{T}\mathbf{e}'_i = \hat{T}\hat{A}\mathbf{e}_i = \sum_j (\underline{\underline{T}}\underline{\underline{A}})_{ji}\mathbf{e}_j = \sum_{jk} (\underline{\underline{T}}\underline{\underline{A}})_{ji}(\underline{\underline{A}}^{-1})_{kj}\mathbf{e}'_k = \sum_k (\underline{\underline{A}}^{-1}\underline{\underline{T}}\underline{\underline{A}})_{ki}\mathbf{e}'_k.$$

$(\underline{\underline{A}}^{-1}\underline{\underline{T}}\underline{\underline{A}})_{ki}$  ist eine neue Darstellungsmatrix.

Es liegen zwei **inäquivalente irreduzible Darstellungen**  $\hat{T}, \hat{T}'$  vor, wenn **kein** Operator  $\hat{A}$  existiert, so dass  $\hat{T}'(G_a) = \hat{A}\hat{T}(G_a)\hat{A}^{-1}$  erfüllt ist.

#### THEOREM 1 ( MASCHKES THEOREM)

Bei endlichen Gruppen enthält jede Klasse von äquivalenten Darstellungen **unitäre Darstellungen** (trifft auch auf die unendlichen Gruppen in der Physik zu).

**Beweis:** Zu zeigen, daß jede Darstellung einer unitären Darstellung äquivalent ist.

D.h. zu einer Darstellung  $\hat{T}(G_a)$  müssen wir einen Operator  $\hat{S}$  finden, so dass die äquivalente Darstellung  $\hat{T}'(G_a) = \hat{S}\hat{T}(G_a)\hat{S}^{-1}$  unitär ist. Benutze  $\hat{S} = \left\{ \sum_b \hat{T}^\dagger(G_b)T(G_b) \right\}^{1/2}$ .  
Nun zu zeigen, dass  $(\hat{T}'(G_a))^\dagger = (\hat{T}(G_a))^{-1}$ . Wir beginnen mit

$$\begin{aligned} \hat{T}^\dagger(G_a)\hat{S}^2\hat{T}(G_a) &= \sum_b \hat{T}^\dagger(G_a)\hat{T}^\dagger(G_b)\hat{T}(G_b)\hat{T}(G_a) = \sum_b \hat{T}^\dagger(G_bG_a)\hat{T}(G_bG_a) \\ &= \sum_c \hat{T}^\dagger(G_c)\hat{T}(G_c) = \hat{S}^2 \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $\hat{T}^{-1}(G_a)\hat{S}^{-1}$  auf beiden Seiten von rechts und mit  $\hat{S}^{-1}$  von links.  
Folgt

$$\hat{S}^{-1}\hat{T}^\dagger(G_a)\hat{S} = \hat{S}\hat{T}^{-1}(G_a)\hat{S}^{-1}$$

Die linke Seite ist äquivalent zu (wir benutzen die Hermitezität von  $\hat{S}$ ):

$$\begin{aligned} (\hat{S}\hat{T}(G_a)\hat{S}^{-1})^\dagger &= (\hat{S}^{-1})^\dagger(\hat{S}\hat{T})^\dagger = \hat{S}^{-1\dagger}\hat{T}^\dagger\hat{S}^\dagger \stackrel{\hat{S}^\dagger=\hat{S}}{=} \hat{S}^{-1}\hat{T}^\dagger\hat{S} \stackrel{r.h.S.}{=} (\hat{S}\hat{T}\hat{S}^{-1})^{-1} \\ \hat{T}'^\dagger &= \hat{T}'^{-1} \quad (\hat{S} \text{ hermitesch}) \quad (\hat{S}^2)^\dagger = \sum_b T^\dagger(G_b)T(G_b) = \hat{S}^2 = \hat{S}^{\dagger 2} \end{aligned}$$

Damit ist Maschkes Theorem gezeigt.

Wir betrachten im Weiteren nur **inäquivalente irreduzible Darstellungen**. Diese haben die folgenden wichtigen (Orthogonalitäts-) **Eigenschaften**:

#### LEMMA 1 (VON SCHUR)

Sei  $\hat{T}(G_a)$  eine irreduzible Darstellung von  $\mathcal{G}$  in  $L$  und  $\hat{A}$  ein fester Operator in  $L$ .  
Gilt dann  $\hat{T}(G_a)\hat{A} = \hat{A}\hat{T}(G_a)$ ,  $\forall G_a \in \mathcal{G}$ , dann ist  $\hat{A} = \lambda\hat{1}$ . ( $\hat{1}$ =Einsoperator.)

LEMMA 2 (VON SCHUR)

Seien  $\hat{T}^{(1)}(G_a)$  und  $\hat{T}^{(2)}(G_a)$  zwei inäquivalente irreduzible Darstellungen von  $\mathcal{G}$  in zwei Räumen  $L_1$  bzw.  $L_2$  mit den Dimensionen  $s_1$  bzw.  $s_2$ . Sei  $\hat{A}$  ein Operator, der Vektoren von  $L_2$  in  $L_1$  transformiert. Gilt ferner  $\hat{T}^{(1)}(G_a)\hat{A} = \hat{A}\hat{T}^{(2)}(G_a)$ ,  $\forall G_a \in \mathcal{G}$ , dann ist  $\hat{A}$  der Nulloperator  $\hat{A} = \hat{0}$ .

Aus den Schurschen Lemmata folgt die Orthogonalität der Darstellungsmatrizen **irreduzibler** unitärer Darstellungen

$$\boxed{\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{qp} / s_\alpha} \quad (2.4)$$

Insbesondere folgt aus (2.4) für die Diagonalelemente

$$\sum_{a=1}^g |T_{ip}^{(\alpha)}(G_a)|^2 = g / s_\alpha.$$

(2.4) kann als Test für die Reduzibilität einer Darstellung benutzt werden.

Beweis der **Orthogonalitätsbeziehung für Darstellungsmatrizen**

$$\left. \begin{array}{l} \hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \text{ wirkt in } L_\alpha \\ \hat{T}^{(\beta)}(G_a) \text{ wirkt in } L_\beta \end{array} \right\} 2 \text{ inäquivalente irreduzible Darstellungen}$$

Definiere

$$\hat{A} = \sum_b \hat{T}^{(\alpha)}(G_b) \hat{X} \hat{T}^{(\beta)}(G_b^{-1}) \quad (2.5)$$

$\hat{X}$  transformiert Vektoren in  $L_\beta$  in Vektoren in  $L_\alpha$ , dann gilt die im 2. Schurschen Lemma geforderte Eigenschaft, denn

$$\begin{aligned} \hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \hat{A} &= \sum_b \hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \hat{T}^{(\alpha)}(G_b) \hat{X} \hat{T}^{(\beta)}(G_b^{-1}) \\ &= \sum_b \hat{T}^{(\alpha)}(G_a G_b) \hat{X} \hat{T}^{(\beta)}((G_a G_b)^{-1}) \hat{T}^{(\beta)}(G_a) \\ &= \sum_c \hat{T}^{(\alpha)}(G_c) \hat{X} \hat{T}^{(\beta)}(G_c^{-1}) \hat{T}^{(\beta)}(G_a) = \hat{A} \hat{T}^{(\beta)}(G_a) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Schurs Lemma:

- (i)  $\hat{T}^{(\alpha)} = \hat{T}^{(\beta)} \rightarrow \hat{A} = \lambda \hat{1}$ .
- (ii)  $\hat{T}^{(\alpha)}$  inäquivalent zu  $\hat{T}^{(\beta)} \rightarrow \hat{A} = \hat{0}$ .

Zusammengefasst:

$$\hat{A} = \lambda \delta_{\alpha\beta} \hat{1}.$$

Im Matrixform folgt aus (2.5)

$$A_{ij} = \sum_{a=1}^g \sum_{m=1}^{s_\beta} \sum_{k=1}^{s_\alpha} T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) X_{km} T_{mj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$$

da  $X_{km}$  beliebig, wähle  $X_{km} = \delta_{kp}\delta_{mq}$  (nur 1 Element  $\neq 0$ ).

LkS. von (2.4)  $\rightarrow$

$$\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$$

Zur Bestimmung von  $\lambda$  setzen wir ( $s_\alpha$  ist die Dimension der Darstellung,  $g$  die Ordnung der Gruppe)

$$\alpha = \beta, i = j, \sum_i : \sum_{i=1}^{s_\alpha} \sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qi}^{(\alpha)}(G_a^{-1}) = \lambda s_\alpha = \sum_{a=1}^g T_{qp}^{(\alpha)}(e) = g \delta_{qp}$$

Folgt

$$\lambda = \frac{g}{s_\alpha} \delta_{pq}$$

Damit ist die Orthogonalitätsrelation gezeigt! Für unitäre Operatoren läßt sich die Relation noch weiter vereinfachen:

$$\hat{T}^{(\beta)}(G_a^{-1}) \hat{T}^{(\beta)}(G_a) = \hat{T}^{(\beta)}(e) = \hat{1} \quad \rightarrow \quad \hat{T}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \left( \hat{T}^{(\beta)}(G_a) \right)^{-1}$$

Falls  $\hat{T}$  unitär ist, dann gilt

$$T_{qi}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = T_{jq}^{(\beta)}(G_a)^* \quad \rightarrow \quad \sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)}(G_a) = g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{pq} / s_\alpha.$$

Dies ist die gewünschte Beziehung.

Wir betrachten **2 Anwendungen der Schurschen Lemmata:**

1. Die irreduziblen Darstellungen einer Abelschen Gruppe sind 1-dimensional.

Beweis: Sei  $\hat{T}^{(\alpha)}(G_a)$  eine irreduziblen Darstellung der Abelschen Gruppe  $\mathcal{G}$ .

Dann gilt

$$\hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \hat{T}^{(\alpha)}(G_b) = \hat{T}^{(\alpha)}(G_b) \hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \quad \forall G_b \in \mathcal{G}.$$

Identifiziere dann  $\hat{A}$  aus dem Lemma 1 mit  $\hat{T}^{(\alpha)}(G_b) \rightarrow$

$$\hat{A} = \hat{T}^{(\alpha)}(G_b) \quad \Rightarrow \quad \lambda_b^{(\alpha)} \hat{1},$$

d.h. die Darstellung ist diagonal  $\forall G_a \in \mathcal{G}$  und daher reduzibel (Widerspruch zur Annahme), es sei denn sie ist eindimensional, q.e.d.

2. Zeige Orthogonalitätseigenschaften für  $\hat{T}^{(3)}$  von  $D_3$ .  $\rightarrow$  Übungen.

Die (treue) Darstellung von  $D_3$ :

$$\left. \begin{array}{l} T^{(2)} \quad 1 - \dim \\ T^{(3)} \quad 2 - \dim \end{array} \right\} \text{irreduzibel}$$

Zusätzlich hat jede Gruppe die 1-Darstellung:

| Element $G_a$ | $E$  | $R_1$   | $R_2$   | $R_3$   | $R_4$   | $R_5$   |
|---------------|--|---|---|---|---|---|
| $T^{(1)}$     | 1  | 1   | 1   | 1   | 1   | 1   |
| $T^{(2)}$     | 1  | 1   | 1   | -1  | -1  | -1  |
| $T^{(3)}$     | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ |

Starte mit (2.4),

$$\alpha = \beta = 1 \quad \text{lhs. 6,} \quad \text{rhs. } 6/1 = 6$$

$$\alpha = \beta = 2 \quad \text{lhs. 6,} \quad \text{rhs. } 6/1 = 6$$

Zeige Orthogonalität  $s_1 = 1, s_2 = 1, s_3 = 2; g = 6$ .

$\alpha = \beta = 3$  und (2.4)  $\rightarrow$

$$\sum_{a=1}^6 [T_{ip}^{(3)}(G_a)]^2 = \frac{6}{2} = 3, \quad \forall i, p.$$

$$i, p = 1 \quad \rightarrow \quad \sum_{a=1}^6 [T_{ip}^{(3)}(G_a)]^2 = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 3$$

$$i = 1, p = 2 \quad \rightarrow \quad \sum_{a=1}^6 [T_{ip}^{(3)}(G_a)]^2 = 0 + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 0 + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} = 3$$

etc.

(2.4)  $\rightarrow$

$$\sum_{a=1}^6 T_{ip}^{(3)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 0, \quad \forall i, p$$

$$i, p = 1 \quad \rightarrow \quad \sum_{a=1}^6 T_{ip}^{(3)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0.$$

etc.

(2.4)  $\rightarrow$

$$\sum_{a=1}^6 T^{(1)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 0$$

$$\sum_{a=1}^6 T^{(1)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 1 + 1 + 1 - 1 - 1 - 1 = 0.$$

2.4  $\rightarrow$

$$\sum_{a=1}^6 [T^{(2)}(G_a)]^2 = \frac{6}{1} = 6$$

$$\sum_{a=1}^6 \left[ T^{(2)}(G_a) \right]^2 = 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 6.$$

**Beweis des 1. Schurschen Lemmas:**

Sei  $\mathbf{u}$  Eigenvektor von  $\hat{A}$  im  $L$ :  $\hat{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$ . Sei ferner  $\mathbf{u}_a = \hat{T}(G_a)\mathbf{u} \rightarrow$

$$\hat{A}\mathbf{u}_a = \hat{A}\hat{T}(G_a)\mathbf{u} = \hat{T}(G_a)\hat{A}\mathbf{u} = \lambda\hat{T}(G_a)\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}_a.$$

D.h.  $\mathbf{u}_a$  ist auch Eigenvektor von  $\hat{A}$  mit dem selben Eigenwert  $\lambda$ . Lasse jetzt  $\hat{T}(G_a)$  durch alle Elemente der Gruppe laufen. Der Satz  $\mathbf{u}_a$  ( $G_a \in \mathcal{G}$ ) bildet einen invarianten Unterraum, da

$$\hat{T}(G_b)\mathbf{u}_a = \hat{T}(G_b)\hat{T}(G_a)\mathbf{u} = \hat{T}(G_bG_a)\mathbf{u} = \hat{T}(G_c)\mathbf{u} = \mathbf{u}_c.$$

Da aber  $L$  nach Definition irreduzibel ist, muß der Raum der  $\mathbf{u}_a$  der gesamte Raum sein. D.h. für jeden Vektor  $\mathbf{R} = \sum_a c_a \mathbf{u}_a$  in  $L$  gilt

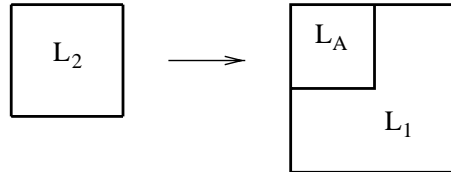
$$\hat{A}\mathbf{R} = \hat{A} \sum_a c_a \mathbf{u}_a = \sum_a c_a \lambda \mathbf{u}_a = \lambda \mathbf{R},$$

da  $\mathbf{R}$  beliebig ist, folgt  $\hat{A} = \lambda \hat{1}$ .

**Beweis des 2. Schurschen Lemmas:** Betrachte zunächst  $s_2 \leq s_1$ , dann generiert  $\hat{A}$  aus  $L_2$  einen Unterraum  $L_A$  von  $L_1$  mit der Dimension  $s_A \leq s_2 \leq s_1$ .  $L_A$  wird von den Vektoren  $\hat{A}\mathbf{u}$  aufgespannt, wobei  $\mathbf{u}$  ein beliebiger Vektor in  $L_2$  ist.  $L_A$  ist invariant unter  $\mathcal{G}$ , da

$$\hat{T}^{(1)}(G_a)\hat{A}\mathbf{u} = \hat{A}\hat{T}^{(2)}(G_a)\mathbf{u} = \hat{A}\mathbf{u}_a.$$

$\hat{A}\mathbf{u}_a$  liegt in  $L_A$ , da  $\mathbf{u}_a$  in  $L_2$  liegt.  $\hat{T}^{(1)}$  ist aber nach Voraussetzung irreduzibel, so daß  $L_1$  keinen invarianten Unterraum haben kann.  $\rightarrow$  Widerspruch, es sei  $L_A = 0$  ( $s_A = 0$ ) oder  $L_A = L_1$  ( $s_A = s_1$ ), i.e. entweder  $\hat{A}\mathbf{u} = 0, \forall \mathbf{u} \in L_2$ , d.h.  $\hat{A} = 0$  oder  $s_A = s_1 = s_2$  (wegen  $s_A \leq s_2 \leq s_1$ ). Die zweite Alternative ist wegen der Annahme ausgeschlossen, dass  $\hat{T}^{(1)}$  und  $\hat{T}^{(2)}$  inäquivalente Darstellungen sind: wenn  $L_1$  und  $L_2$  die gleiche Dimension hätten, dann  $\exists \hat{T}^{(1)}(G_a) = \hat{A}\hat{T}^{(2)}(G_a)\hat{A}^{-1} \rightarrow \hat{A} = 0$ .



Ähnlich für  $s_1 \leq s_2$ . Dann notwendig  $s_A < s_2$ , so dass Vektoren  $\mathbf{u} \in L_2$  nach  $\mathbf{0}$  abgebildet werden durch  $\hat{A}$ , d.h.  $\hat{A}\mathbf{u} = 0$ . Sei der Unterraum solcher Vektoren  $L_B$ , er hat die Dimension  $(s_2 - s_A)$ .

## 2.7 Der Charakter von Darstellungen

Durch Wechsel der Basis einer Darstellung sind unendlich viele (irreduzible) äquivalente Darstellungen konstruierbar. Wir suchen jetzt Eigenschaften von Darstellungen, die durch Basiswechsel nicht berührt werden. (Was bleibt invariant dabei?)

Für die meisten Zwecke hier ist die  $\sum$  der Eigenwerte = Spur der Matrix ausreichend.

$$\boxed{\sum_{i=1}^{s_\alpha} T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) = \chi^{(\alpha)}(G_a), \quad \{\chi^{(\alpha)}(G_a), \forall G_a \in \mathcal{G}\} = \text{Charakter von Darstellung}}$$

Einige Eigenschaften von Charakteren:

1.  $\chi(G_a)$  ist invariant unter der (Ähnlichkeits-) Transformation  $\hat{T}'(G_a) = \hat{A}\hat{T}(G_a)\hat{A}^{-1}$ .

Beweis:

$$\chi'(G_a) = \sum_{j,k,i} A_{ij} T_{jk}(G_a) A_{ki}^{-1} = \sum_{k,i} A_{ki}^{-1} A_{ij} T_{jk}(G_a) = \sum_j T_{jj}(G_a) = \chi(G_a).$$

2. Alle Elemente einer Klasse  $\mathcal{C}_p$  haben den gleichen Charakter  $\chi_p$ .

Beweis:

$$\begin{aligned} \chi(G_a) &= \sum_i T_{ii}(G_a) = \sum_i T_{ii}(G_m G_b G_m^{-1}) = \sum_{ijk} T_{ij}(G_m) T_{jk}(G_b) T_{ki}(G_m^{-1}) \\ &= \sum_{jk} T_{jk}(G_b) T_{kj}(e) = \sum_j T_{jj}(G_b) = \chi(G_b) \end{aligned}$$

- 3.

$$\boxed{\sum_{\alpha=1}^g \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a)^* = \sum_{p=1}^n c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g \delta_{\alpha\beta}} \quad (2.6)$$

$\sim$  Orthogonalitätsrelation für die "Vektoren"  $\sqrt{c_p} \chi_p^{(\alpha)}$ ,  $c_p$  Anzahl der Elemente in  $\mathcal{C}_p$ ,  $n$  Anzahl der Klassen in  $\mathcal{G}$ . Speziell gilt für  $\alpha = \beta$

$$\sum_{\alpha=1}^g \left| \chi^{(\alpha)}(G_a) \right|^2 = \sum_{p=1}^n c_p \left| \chi^{(\alpha)} \right|^2 = g$$

Beweis: (2.4) aus 2.6 mit  $p = i$ ,  $q = j$ ,  $\sum_{ij}$

$$\sum_{i,j} \sum_{\alpha=1}^g T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta} \sum_{i,j} \delta_{ij} \delta_{ij} / s_\alpha = g \delta_{\alpha\beta} \quad \text{q.e.d.}$$

Dimension des Raums der Vektoren  $\{c_p^{1/2} \chi_p^{(\alpha)}\}$  ist  $n$ , die Zahl der Klassen von  $\mathcal{G} \rightarrow n$  ist die Maximalzahl der nichtäquivalenten irreduziblen Darstellungen.



**Beispiel:** Charaktere der Darstellung der Gruppe  $D_3$

| Klasse      | $\mathcal{C}_1(E)$ | $\mathcal{C}_2(R_1, R_2)$ | $\mathcal{C}_3(R_3, R_4, R_5)$ |
|-------------|--------------------|---------------------------|--------------------------------|
| Darstellung |                    |                           |                                |
| $T^{(1)}$   | 1                  | 1                         | 1                              |
| $T^{(2)}$   | 1                  | 1                         | -1                             |
| $T^{(3)}$   | 2                  | -1                        | 0                              |

∃ weitere Orthogonalitätsrelation für Charaktere

$$\sum_{\alpha=1}^{\tilde{n}} \chi_p^{(\alpha)*} \chi_q^{(\alpha)} = \delta_{pq} \frac{g}{c_p}$$

$\tilde{n}$  Zahl der irreduziblen Darstellungen  $\alpha, \beta$ .

$n$  Zahl der Klassen, Klasse  $p$  enthält  $c_p$  Elemente,  $\sum_{p=1}^n c_p = g$ .

**Beweis:** Führe Matrixelemente  $B_{\alpha p} = \sqrt{\frac{c_p}{g}} \chi_p^{(\alpha)}$  ein, Annahme  $\tilde{n} = n$ , diese bilden

$n \times n$  Matrix

$$\sum_{p=1}^n B_{\beta p} B_{\alpha p}^* = \sum_p \frac{1}{g} c_p \chi_p^{(\beta)*} \chi_p^{(\alpha)} = \delta_{\alpha\beta},$$

d.h.

$$\underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}}^{*T} = \underline{\underline{1}}$$

$$\underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}}^\dagger = \underline{\underline{1}}$$

da  $\underline{\underline{B}}$  quadratisch  $|\underline{\underline{B}}| = 1$ ,  $\underline{\underline{B}}^{-1} = \underline{\underline{B}}^\dagger \rightarrow \underline{\underline{B}}^\dagger \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{1}}$ , i.e.  $\sum_{\alpha=1}^n B_{\alpha p}^* B_{\alpha q} = \delta_{pq}$  oder  $\sum_{\alpha=1}^n \frac{c_p}{g} \chi_p^{(\alpha)*} \chi_q^{(\alpha)} = \delta_{pq}$  q.e.d.

## 2.8 Die Reduktion von Darstellungen

Für reduzible Darstellungen gilt offenbar

$$\chi_p = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)}$$

$$T = \sum_{\alpha} m_{\alpha} T^{(\alpha)}$$

$p$  indiziert die Klasse,  $m_{\alpha}$ : Häufigkeit der irreduziblen Darstellung  $\alpha$  in der betrachteten reduziblen Darstellung. Sind die irreduziblen Charaktere bekannt, dann folgt aus (2.6) und obiger Zerlegung (wir identifizieren  $\chi^{(\alpha)}$  in (2.6) mit  $\chi_p$ )

$$\frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\beta)*} \chi_p = \frac{1}{g} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \sum_p c_p \chi_p^{(\beta)*} \chi_p^{(\alpha)} = \frac{1}{g} \sum_{\alpha} m_{\alpha} g \delta_{\alpha\beta} = m_{\beta}$$

( $\chi_p$  ist i.a. reduzibel, im Unterschied zu  $\chi_p^{(\beta)}$ ), d.h. die Koeffizienten  $m_{\alpha}$  können leicht bestimmt werden, kennt man die irreduziblen Charaktere.

**Beispiel:** Die treue Darstellung der  $D_3$  im  $\mathbb{R}^3$

Wir hatten schon gezeigt, dass die 3-dimensionale Darstellung von  $D_3$  die Charaktere  $(-3, 0, -1)$  hat. Aus der Zerlegung

$$T = m_1 T^{(1)} + m_2 T^{(2)} + m_3 T^{(3)}$$

folgt für die Zerlegung der treuen Darstellung

$$\begin{aligned} m_d &= \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p \\ m_1 &= \frac{1}{6} (1 \cdot 1 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot (-1)) = 0 \\ m_2 &= \frac{1}{6} (1 \cdot 1 \cdot 3 + 0 + 3 \cdot (-1) \cdot (-1)) = 1 \\ m_3 &= \frac{1}{6} (1 \cdot 1 \cdot 3 + 0 + 0) = 1 \end{aligned}$$

i.e.

$$T = T^{(2)} + T^{(3)}.$$

$T^{(3)}$  ist irreduzibel, da  $\sum_p c_p |\chi_p|^2 = 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + 0 = 6 = g$ .

**Aus den Charakteren einer Darstellung kann man unmittelbar ableiten, ob eine Darstellung irreduzibel oder reduzibel ist, da für irreduzible Darstellungen**

$$\sum_p c_p |\chi_p|^2 = g \quad (2.7)$$

**gilt. Umgekehrt, gilt (2.7), dann ist die Darstellung irreduzibel.**

Beweis: Für eine möglicherweise reduzible Darstellung gilt (s.o.)

$$\sum_p c_p |\chi_p|^2 = \sum_p \sum_{\alpha, \beta} c_p m_\alpha m_\beta \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = \sum_{\alpha, \beta} g \delta_{\alpha\beta} m_\alpha m_\beta = g \sum_\alpha m_\alpha^2.$$

Ist nun (2.7) erfüllt, gilt  $\sum_{\alpha=1}^n m_\alpha^2 = 1$ , da  $m_\alpha$  ganze Zahlen sind, müssen alle  $m_\alpha = 0$  mit Ausnahme eines  $m_\alpha = 1$  sein, d.h. die Darstellung ist irreduzibel, q.e.d.

Beispiel  $D_3$ .

Wie viele inäquivalente irreduzible Darstellungen gibt es?  $n$ .

Betrachte eine spezielle Darstellung: die **reguläre Darstellung**  $\hat{T}^{(R)}$  mit der Dimension  $g$ .

Die Darstellungsmatrizen  $T^{(R)}(G_a)$  sind über die Gleichung

$$G_a G_b = \sum_c T_{cb}^{(R)}(G_a) G_c$$

definiert. Die Matrizen sind tatsächlich eine Darstellung von  $\mathcal{G}$ , denn

$$\begin{aligned} G_d G_a G_b &= \sum_c T_{cb}^{(R)}(G_a) G_d G_c = \sum_{c,e} T_{cb}^{(R)}(G_a) T_{ec}^{(R)}(G_d) G_e \\ &= \sum_e \left[ \sum_c T_{ec}^{(R)}(G_d) T_{cb}^{(R)}(G_a) \right] G_e \\ &= (G_d G_a) G_b = \sum_e T_{eb}^{(R)}(G_d G_a) G_e \end{aligned}$$

Da  $G_a G_b$  selbst Gruppenelement ist, **kann nur ein Matrixelement pro Zeile** von Null verschieden sein ( $=1$ ). Für  $G_a G_b = G_f$ ,  $T_{cb}^{(R)}(G_a) = \delta_{cf}$ . Dieses Matrixelement steht nur dann in der Diagonalen, wenn  $G_a$  das Einselement ist:  $e G_b = G_b = \sum_c T_{cb}^{(R)}(e) G_c = G_b$ , i.e.  $T_{cb}^{(R)} = \delta_{cb}$ . Folglich ist der Charakter der regulären Darstellungen Null, mit Ausnahme des 1-Elementes.

$$\begin{aligned} \chi^{(R)}(G_a) &= 0 \quad G_a \neq e \\ \chi^{(R)}(e) &= g \\ \hat{T}^{(R)}(G_a) &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \hat{T}^{(\alpha)}(G_a) \\ m_{\alpha} &= \frac{1}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(R)}(G_a) = \frac{1}{g} \chi^{(\alpha)}(e) g = s_{\alpha}, \end{aligned}$$

d.h. die irreduzible Darstellung  $T^{(\alpha)}$  ist  $s_{\alpha}$  mal in der regulären Darstellung enthalten. Folglich muß die reguläre Darstellung alle irreduziblen Darstellungen enthalten.

$$\boxed{g = \sum_{\alpha} m_{\alpha} s_{\alpha} = \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2} \quad (2.8)$$

$g = \dim T^{(R)}$ . Diese Relation ist unabhängig von der hier gewählten Ableitung.

**Beweis, dass die Anzahl  $\tilde{n}$  der möglichen inäquivalenten irreduziblen Darstellungen einer Gruppe gleich der Zahl  $n$  der Klassen ist:**

Abschnitt 2.6 “großes Orthogonalitätstheorem”:

$$\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{jq}^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{pq} / s_{\alpha}.$$

$T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) \sim$  “Vektoren” in einem  $g$ -dimensionalen Raum. Gesamtzahl dieser Vektoren ( $i, p = 1 \dots s_{\alpha}$ ):  $\sum_{\alpha=1}^{\tilde{n}} s_{\alpha}^2 = g$ .  $\tilde{n}$ : Zahl der irreduziblen Darstellungen.

→ Die Anzahl  $\sum_{\alpha=1}^{\tilde{n}} s_{\alpha}^2$  der orthogonalen Vektoren  $\{T_{ij}^{(\alpha)}(G_1); T_{ij}^{(\alpha)}(G_2); \dots; T_{ij}^{(\alpha)}(G_g)\}$  ist gleich der Dimension  $g$  des Raumes, d.h. die  $\{T_{ij}^{(\alpha)}(G_1); T_{ij}^{(\alpha)}(G_2); \dots; T_{ij}^{(\alpha)}(G_g)\}$  spannen den Raum auf.

Jeder beliebige Vektor  $\underset{\sim}{v}$  in diesem Raum lässt sich als

$$\underset{\sim}{v} = \sum_{\alpha, i, j} c(\alpha, i, j) T_{ij}^{(\alpha)} = \sum_a \underset{\sim}{v}_a e_a = \sum_a \sum_{\alpha, i, j} c(\alpha, i, j) T_{ij}^{(\alpha)}(G_a) e_a$$

schreiben. Betrachte jetzt

$$\begin{aligned}
 \tilde{v}_a &= \frac{1}{g} \sum_{b=1}^g v_c \Big|_{G_c = G_b G_a G_b^{-1}} \frac{1}{g} \sum_{b=1}^g \sum_{\alpha, i, j} c(\alpha, i, j) T_{ij}^{(\alpha)}(G_b^{-1} G_a G_b) \\
 &= \frac{1}{g} \sum_b \sum_{\alpha, i, j} \sum_{k, l} c(\alpha, i, j) T_{ik}^{(\alpha)}(G_b^{-1}) T_{kl}^{(\alpha)}(G_a) T_{lj}^{(\alpha)}(G_b) \\
 &= \frac{1}{g} \sum_{\alpha, i, j} \sum_{k, l} c(\alpha, i, i) T_{kl}^{(\alpha)}(G_a) \delta_{ij} \delta_{kl} g / s_\alpha \\
 &= \sum_{\alpha, i} \frac{1}{s_\alpha} c(\alpha, i, i) \chi^{(\alpha)}(G_a)
 \end{aligned}$$

Diese Vektoren  $\tilde{v}_a$  bilden einen Unterraum der Dimension  $n$  (Zahl der Klassen), die Charaktere, die einen Satz orthonormaler Vektoren in diesem Unterraum bilden, spannen diesen Unterraum auf. Es gibt genau  $\tilde{n}$  Charaktere, daher  $\tilde{n} = n$ .

### Konstruktion einer Charaktertafel

Vorhandene Information:

- (1) Zahl der inäquivalenten irreduziblen Darstellungen = Anzahl der Klassen.
- (2) Dimension  $\alpha$  der irreduziblen Darstellungen  $\alpha$  :  $\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 = g$
- (3)  $\exists$  immer die 1-Darstellung,  $s_1 = 1$ ,  $T(G_a) = 1$ ,  $\chi(G_a) = 1$ .
- (4) Reihen sind orthogonal  $\sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g \delta_{\alpha\beta}$   
 $\beta \hat{=} \text{Einsdarstellung: } \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} = 0, \alpha \neq \text{Einsdarstellung.}$
- (5) Spalten sind orthogonal

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)} \chi_q^{(\alpha)*} &= \frac{g}{c_p} \delta_{pq} \\
 C_q = e : \quad \sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)} s_{\alpha} &
 \end{aligned}$$

| Klasse      | $C_1(E)$ | $C_2$ | $C_3$ | $\dots$ | $C_n$ |
|-------------|----------|-------|-------|---------|-------|
| Darstellung |          |       |       |         |       |
| $T^{(1)}$   | 1        | 1     | 1     |         | 1     |
| $T^{(2)}$   |          | $s_2$ |       |         |       |
| $T^{(3)}$   |          | $s_3$ |       |         |       |
| $\vdots$    |          |       |       |         |       |
| $T^{(n)}$   |          | $s_n$ |       |         |       |

Dimension des Raums der Vektoren  $\{c_p^{1/2} \chi_p^{(\alpha)}\}$  ist  $n$ , die Zahl der Klassen von  $\mathcal{G} \rightarrow n$  ist die Maximalzahl der nichtäquivalente irreduziblen Darstellungen.

## 2.9 Die Orthogonalität von Basisfunktionen für irreduzible Darstellungen

Sei  $\mathbf{e}_i^{(\alpha)}$ ,  $i = 1 \dots s_\alpha$  ein Satz von Basisfunktionen für eine irreduzible Darstellung. Die Basisfunktionen für zwei verschiedene, nichtäquivalente irreduzible unitäre Darstellungen sind orthogonal zueinander.

$$\begin{aligned}\hat{T}^{(\alpha)}(G_a)\mathbf{e}_i^{(\alpha)} &= \sum_l T_{li}^{(\alpha)}(G_a)\mathbf{e}_l^{(\alpha)} \\ \hat{T}^{(\beta)}(G_a)\mathbf{e}_j^{(\beta)} &= \sum_l T_{lj}^{(\beta)}(G_a)\mathbf{e}_l^{(\beta)}\end{aligned}$$

$$(\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \mathbf{e}_j^{(\beta)}) = (\hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_j^{(\beta)}) = \sum_{l,m} T_{li}^{(\alpha)*}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_m^{(\beta)})$$

Mittle jetzt über Gruppenelemente  $\frac{1}{g} \sum_a$ , (2.4)

$$\boxed{(\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \mathbf{e}_j^{(\beta)}) = \frac{1}{g} \sum_{l,m} g \delta_{\alpha\beta} \delta_{lm} \delta_{ij} / s_\alpha (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_m^{(\beta)}) = \frac{1}{s_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \sum_l (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_l^{(\beta)})} \quad (2.9)$$

→  $(\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \mathbf{e}_j^{(\beta)})$  ist unabhängig von  $i \sim$  alle Basisfunktionen haben gleiche Normierung.

→ Orthogonalität für  $\alpha \neq \beta$ .

→ Orthogonalität für  $i \neq j$ , wenn  $\alpha = \beta$ .

$$i = j, \alpha = \beta \quad \sum_{i=1}^{s_\alpha} (\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \mathbf{e}_i^{(\alpha)}) = \frac{s_\alpha}{s_\alpha} \sum_l (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_l^{(\alpha)}) \quad \rightarrow \quad (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_l^{(\alpha)}) = c_\alpha$$

Für die Einsdarstellung gilt  $T_{11}^{(1)}(G_a) = 1$ , betrachte insbesondere Darstellung im Funktionsraum  $\mathbf{e}^{(1)} = \text{const.}$

Mit (2.9) folgt

$$(\mathbf{e}_1^{(1)}, \mathbf{e}_j^{(\beta)}) = c \int dr \phi_j^{(\beta)}(\mathbf{r}) = 0.$$

## 2.10 Das direkte Produkt zweier Darstellungen

Direktes Produkt von Gruppen: 1.3.

Direktes Produkt von Matrizen:

$$\begin{aligned}\underline{A} \quad n \times n; \quad \underline{B} \quad m \times m \\ (\underline{A} \times \underline{B})_{ij,kl} = A_{ik} B_{jl}\end{aligned}$$

Auf diese Weise lassen sich auch Produkte von Darstellungen konstruieren.

$$\underline{T}^{(\alpha)} \times \underline{T}^{(\beta)} = \underline{T}^{(\alpha \times \beta)} \quad T_{ij,kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) = T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) T_{jl}^{(\beta)}(G_a)$$

$T^{(\alpha \times \beta)}$  ist tatsächlich Darstellung, da

$$\begin{aligned} \left[ T^{(\alpha \times \beta)}(G_a) T^{(\alpha \times \beta)}(G_b) \right]_{ij,kl} &= \sum_{m,n} T_{ij,mn}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) T_{mn,kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_b) \\ &= \sum_{m,n} T_{im}^{(\alpha)}(G_a) T_{jn}^{(\beta)}(G_a) T_{mk}^{(\alpha)}(G_b) T_{nl}^{(\beta)}(G_b) \\ &= T_{ik}^{(\alpha)}(G_a G_b) T_{jl}^{(\beta)}(G_a G_b) = T_{ij,kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a G_b) \end{aligned}$$

Charakter:

$$\chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a) = \sum_{ij} T_{ij,ij}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) = \sum_{ij} T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\beta)}(G_a) = \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a),$$

d.h. der Charakter des direkten Produkts der Darstellung = Produkt der Charaktere der beiden Faktoren  $T^{(\alpha)}, T^{(\beta)}$ . Sind  $\alpha, \beta$  irreduzibel, dann ist i.a. das direkte Produkt **nicht** irreduzibel

$$T^{(\alpha \times \beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} T^{(\gamma)},$$

mit

$$m_{\gamma} = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\gamma)*} \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)}.$$

**Beispiel:**  $D_3$ : betrachte 2-dimensionale Darstellung  $T^{(3)}$

$$T^{(3)} \times T^{(3)} : \chi_c^{(3 \times 3)} = \chi_c^{(3)} \chi_c^{(3)} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \chi^{\alpha} = (4, 1, 0)$$

$$\begin{aligned} m_{\gamma} &= \frac{1}{6} \sum_p c_p \chi_p^{(\gamma)*} \chi_p^{(\alpha)^2} \\ m_1 &= \frac{1}{6} [4 + 2 \cdot 1 \cdot 1 + 0] = 1 \\ m_2 &= \frac{1}{6} [4 + 2 \cdot 1 \cdot 1 + 0] = 1 \\ m_3 &= \frac{1}{6} [4 \cdot 2 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \cdot 1 \cdot 2 + 0] = 1 \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} m_{\gamma} \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{aligned}} \right\} T^{(3)} \times T^{(3)} = T^{(1)} + T^{(2)} + T^{(3)}$$

Direkte Produkt-Darstellungen treten dort auf, wo man Produkte von Funktionen betrachtet.

Transformiert sich ein Satz von Funktionen  $\phi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  ( $k = 1 \dots s_{\alpha}$ ) nach der Darstellung  $T^{(\alpha)}$  und ein weiterer Satz  $\psi_l^{(\beta)}(\mathbf{r})$  ( $l = 1 \dots s_{\beta}$ ) nach  $T^{(\beta)}$ , dann transformieren sich die  $s_{\alpha} s_{\beta}$  Funktionen  $\phi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \psi_l^{(\beta)}(\mathbf{r})$  nach der Darstellung  $T^{(\alpha \times \beta)}$ :

$$\begin{aligned} \hat{T}(G_a) \left\{ \phi_k^{(\alpha)} \psi_l^{(\beta)} \right\} &= \sum_{i,j} T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) T_{jl}^{(\beta)}(G_a) \left\{ \phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\beta)} \right\} \\ &= \sum_{i,j} T_{ij,kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) \left\{ \phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\beta)} \right\}. \end{aligned}$$

Lässt sich nun  $T^{(\alpha \times \beta)}$  reduzieren  $T^{(\alpha \times \beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} T^{(\gamma)}$ , dann muss es durch Wechsel der Basis möglich sein, neue Basisfunktionen

$$\psi_k^{(\gamma)t} = \sum_{i,j} c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \left\{ \phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\beta)} \right\}$$

zu finden, die sich irreduzibel nach den Darstellungen  $T^{(\gamma)}$  transformieren.

$c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k)$  heißen ‘‘Clebsch–Gordon–Koeffizienten’’.

$\gamma = 1 \dots m_{\gamma}$ ; falls  $m_{\gamma} = 0, 1$  nennt man die Gruppe ‘‘einfach reduzibel’’.

### Ergänzung zum direkten Produkt zweier Darstellungen:

$$T^{(\alpha \times \beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} T^{(\gamma)}, \quad \psi_k^{(\gamma)t} = \sum_{i,j} c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \left\{ \phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\beta)} \right\}.$$

Voraussetzung  $\phi_i^{(\alpha)} \neq \psi_i^{(\alpha)}$ , ansonsten sind die  $s_{\alpha}^2$  Produkte  $\phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\alpha)} = \phi_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)}$  nicht linear abhängig:  $\phi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\alpha)} - \psi_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)} = 0$ .  $\rightarrow$  Basisfunktionen  $\psi_k^{(\gamma)t}$  können verschwinden.

Normierung der Clebsch–Gordon–Koeffizienten

$$\sum_{i,j} |c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k)|^2 = 1 \quad \rightarrow \text{sichert Normierung der } \psi_k^{(\gamma)t}.$$

Sind die Koordinaten von  $\phi$  und  $\psi$  verschieden

$$\psi_k^{(\gamma)t} = \sum c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \phi_i^{(\alpha)}(\mathbf{r}_1) \psi_j^{(\beta)}(\mathbf{r}_2),$$

dann

$$\begin{aligned} \left( \psi_k^{(\gamma)t}, \psi_{k'}^{(\gamma')t'} \right) &= \sum_{i,j} \sum_{i',j'} c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) c(\alpha', \beta', \gamma', t'; i', j', k') (\phi_i^{(\alpha)} \phi_{i'}^{(\alpha')}) (\psi_j^{(\beta)} \psi_{j'}^{(\beta')}) \\ &= \sum_{i,j} c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) c(\alpha, \beta, \gamma', t'; i, j, k') \end{aligned}$$

Orthogonalität der Basisfunktionen irreduzibler Darstellungen  $\rightarrow$

$$= \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{tt'} \delta_{kk'}$$

Umkehrung

$$\phi_i^{(\alpha)}(\mathbf{r}_1) \psi_j^{(\beta)}(\mathbf{r}_2) = \sum_{\gamma,t,k} c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \psi_k^{(\gamma)t}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.10)$$

mit

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) c(\alpha, \beta, \gamma', t'; i, j, k) &= \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{tt'} \delta_{kk'} \\ \sum_{\gamma,t,k} c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) c(\alpha, \beta, \gamma, t; i', j', k) &= \delta_{ii'} \delta_{jj'} \end{aligned}$$

## 2.11 Die Reduktion einer irreduziblen Darstellung bei Beschränkung auf eine Untergruppe

Sei  $\mathcal{H}$  eine Untergruppe von  $\mathcal{G}$  und sei  $T^\alpha(G_a)$  eine irreduzible Darstellung von  $\mathcal{G}$ .  
 $\rightarrow T^{(\alpha)}(H_a)$  ist eine Darstellung von  $\mathcal{H}$ , aber nicht notwendig irreduzible Darstellung von  $\mathcal{H}$ :

$$T^{(\alpha)} = \sum_{\beta} n_{\alpha\beta} U^{(\beta)}.$$

$U^{(\beta)}$ : irreduzible Darstellung von  $\mathcal{H}$ .

Benutze Resultat von 2.8:

$$n_{\alpha\beta} = \frac{1}{g} \sum_p \tilde{c}_p (\tilde{\chi}_p^{(\beta)})^* \chi_p^{(\alpha)} \quad (2.11)$$

(Summe über alle Klassen von  $\mathcal{H}$ .)

**Beispiel:**  $D_3$ , enthält als Untergruppe  $C_3 = (e, R_1, R_2)$ .  $C_3$  ist abelsch, i.e. alle irreduzible Darstellungen sind 1-dimensional,  $\exists$  3 irreduzible inäquivalente Darstellungen.

| $C_3$     | $e$ | $R_1$          | $R_2 = R_1^2$  |
|-----------|-----|----------------|----------------|
| $U^{(1)}$ | 1   | 1              | 1              |
| $U^{(2)}$ | 1   | $e^{2\pi i/3}$ | $e^{4\pi i/3}$ |
| $U^{(3)}$ | 1   | $e^{4\pi i/3}$ | $e^{2\pi i/3}$ |

$$(U(R_1))^3 = U(R_1)U(R_2) = 1$$

$$\sum_{a=1}^g \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta}$$

$$T^{(1)} = n_{11}U^{(1)} + n_{12}U^{(2)} + n_{13}U^{(3)} \quad \text{etc.}$$

Mit (2.11)

$$\begin{aligned} n_{11} &= \frac{1}{3}(1 + 1 + 1) &= 1 = n_{21} & n_{31} &= \frac{1}{3}(2 - 1 - 1) = 0 \\ n_{12} &= \frac{1}{3}(1 + e^{2\pi i/3} + e^{4\pi i/3}) = 0 = n_{22} & n_{32} &= \frac{1}{3}(2 - e^{2\pi i/3} - e^{4\pi i/3}) = 1 \\ n_{13} &= \frac{1}{3}(1 + e^{4\pi i/3} + e^{2\pi i/3}) = 0 = n_{23} & n_{33} &= \frac{1}{3}(2 - e^{4\pi i/3} - e^{2\pi i/3}) = 1 \end{aligned}$$

Folgt

$$T^{(1)} \equiv T^{(2)} = U^{(1)}$$

$$T^{(3)} = U^{(2)} \oplus U^{(3)}$$



## 2.12 Projektionsoperatoren

Projektion auf Unterraum des  $\mathbb{R}^N$ .

Suche jetzt Verallgemeinerung für Funktionsräume.

Betrachte Vektorraum  $L$  der invariant bezüglich der Transformationen  $\hat{T}(G_a)$  ist,  $G_a \in \mathcal{G}$ . I.a. ist dieser Vektorraum reduzibel. Basisvektoren in den irreduziblen Unterräumen seien  $\mathbf{e}_i^{(\alpha)t}$ ; sind  $(\alpha)$  und  $t$  fest, dann  $i = 1, \dots, s_\alpha$  (Dimension der Darstellung  $\alpha$ ).  $t > 1$ , wenn es mehr als einen Unterraum von  $L$  gibt, der sich nach der **gleichen** irreduziblen Darstellung  $T^{(\alpha)}$  transformiert.

$$\hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i^{(\alpha)t} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(G_a)\mathbf{e}_j^{(\alpha)t}.$$

Die  $\mathbf{e}_i^{(\alpha)t}$  mit festem  $\alpha$  und  $i$  (!) spannen den Unterraum  $L_{\alpha i}$  auf,  $L_\alpha = \sum_{i=1}^{s_\alpha} L_{\alpha i}$ . Wir zeigen jetzt, dass der Operator

$$\hat{P}_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a)\hat{T}(G_a) \quad (2.12)$$

eine **Projektion** von  $L$  auf  $L_{\alpha i}$  liefert.

Betrachte:

$$\begin{aligned} \hat{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{e}_j^{(\beta)t} &= \frac{s_\alpha}{g} \sum_{a,k} T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a)T_{kj}^{(\beta)}(G_a)\mathbf{e}_k^{(\beta)t} = \frac{s_\alpha}{g} \delta_{\alpha\beta} \sum_{a,k} \delta_{ik} \delta_{ij} \mathbf{e}_k^{(\beta)t} \frac{g}{s_\alpha} \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \mathbf{e}_j^{(\alpha)t} \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Sei  $\mathbf{r}$  ein beliebiger Vektor in  $L$ :  $\mathbf{r} = \sum_{\beta,t,j} c(\beta,t,j)\mathbf{e}_j^{(\beta)t}$ . Es folgt

$$\hat{P}_i^{(\alpha)}\mathbf{r} = \sum_t c(\alpha,t,i)\mathbf{e}_i^{(\alpha)t},$$

i.e.  $\hat{P}_i^{(\alpha)}$  projiziert den Vektor  $\mathbf{r}$  in den Unterraum  $L_{\alpha i}$ . Praktisch ist  $\hat{P}_i^{(\alpha)}$  oft schwierig zu ermitteln, da alle  $T_{ii}^{(\alpha)}(G_a)$  bekannt sein müssen.

Leichter möglich: Projektion in den Unterraum  $L_\alpha = \sum_i L_{\alpha i}$ .

$$\hat{P}^{(\alpha)} = \sum_i \hat{P}_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \sum_i T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a)T(G_a) = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)*}(G_a)\hat{T}(G_a),$$

i.e. nur  $\chi^{(\alpha)}(G_a)$  muß bekannt sein.

Es gilt

$$\boxed{\sum_\alpha \hat{P}^{(\alpha)} = \hat{1}}.$$

Beweis:  $(\sum_\alpha \chi_p^{(\alpha)} s_\alpha = 0, C_p \neq e)$

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \hat{P}^{(\alpha)} &= \frac{1}{g} \sum_\alpha \left\{ s_\alpha \chi^{(\alpha)*}(e)\hat{T}(e) + \sum_{a \neq e} s_\alpha \chi^{(\alpha)*}(G_a)\hat{T}(G_a) \right\} \\ &= \frac{1}{g} \sum_\alpha s_\alpha^2 \hat{T}(e) = \hat{T}(e) = \hat{1}. \end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{P}_j^{(\alpha)} \hat{P}_k^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} \hat{P}_j^{(\alpha)}}$$

**Beispiel:** Betrachte  $\psi_1(\mathbf{r}) = x^2$ , für Gruppe  $D_3$  aus dieser Funktion invarianten Unterraum generiert:  $x^2, y^2, xy$  bzw.  $\sim x^2, \sim (8y^2 - 3x^2), xy$ .

$$\begin{aligned} P^{(1)}x^2 &= \frac{1}{6} \left[ 1 + \hat{T}(R_1) + \hat{T}(R_2) + \cdots + \hat{T}(R_5) \right] x^2 \\ &= \frac{1}{6} [x^2 + 2x^2 + 3y^2 + 0] = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \\ P^{(2)}x^2 &= \frac{1}{6} \left[ 1 + \hat{T}(R_1) + \hat{T}(R_2) - \hat{T}(R_3) - \hat{T}(R_4) - \hat{T}(R_5) \right] x^2 \\ &= \frac{1}{6} \left[ \frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{2}y^2 - \frac{3}{2}x^2 - \frac{3}{4}y^2 \right] = 0 \\ P^{(3)}x^2 &= \frac{2}{6} \left[ 2 - \hat{T}(R_1) - \hat{T}(R_2) \right] x^2 = \frac{1}{3} \left[ 2x^2 - \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{2}y^2 \right] = \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \\ \rightarrow x^2 &= \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \end{aligned}$$

$\frac{1}{2}(x^2 + y^2)$  transformiert sich nach  $T^{(1)}$ ,  $\frac{1}{2}(x^2 - y^2)$  transformiert sich nach  $T^{(3)}$ .

In diesem Fall kann man auch die einzelnen  $\hat{P}_i^{(\alpha)}$  bekommen

$$\begin{aligned} P_1^{(3)}x^2 &= \frac{2}{6} \left[ x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_1)x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_2)x^2 - \hat{T}(R_3)x^2 + \frac{1}{2}\hat{T}(R_4)x^2 + \frac{1}{2}\hat{T}(R_5)x^2 \right] = 0 \\ T_{11}^{(3)} &= \left\{ 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \\ P_2^{(3)}x^2 &= \frac{3}{6} \left[ x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_1)x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_2)x^2 + \hat{T}(R_3)x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_4)x^2 - \frac{1}{2}\hat{T}(R_5)x^2 \right] \\ &= \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \end{aligned}$$

## 2.13 Darstellungen des direkten Produkts zweier Gruppen

In 1.3 wurde das direkte Produkt  $\mathcal{G} = \mathcal{K} \times \mathcal{H}$  zweier Gruppen betrachtet. ( $\mathcal{K}, \mathcal{H}$  Untergruppen von  $\mathcal{G}$ ,  $H_a K_b = K_b H_a \quad \forall H_a \in \mathcal{H}, K_b \in \mathcal{K}$ .) Eine Klasse von  $\mathcal{K} \times \mathcal{H}$  enthält alle Produkte  $K_a H_b$ , wobei  $K_a$  bzw.  $H_b$  die Elemente einer Klasse von  $\mathcal{K}$  bzw.  $\mathcal{H}$  sind.

**Beweis:** Seien  $K_a H_b$  und  $K_c H_d$  in der gleichen Klasse der Produktgruppe. Dann existiert ein Element  $K_e H_f$ , so dass

$$\begin{aligned} K_e H_f \cdot K_a H_b \cdot (K_e H_f)^{-1} &= K_c H_d \\ \underbrace{K_e K_a K_e^{-1}}_{K_c} \underbrace{H_f H_b H_f^{-1}}_{H_d} &= K_c H_d, \end{aligned}$$

d.h.  $K_a$  und  $K_c$  sind in der selben Klasse von  $\mathcal{K}$  und  $H_b, H_d$  in der selben Klasse von  $\mathcal{H}$ .

Seien  $\underline{T}^{(\alpha)}(K_a)$  und  $\underline{U}^{(\beta)}(H_b)$  jeweils irreduzible Matrixdarstellungen von  $\mathcal{K}$  bzw.  $\mathcal{H}$ . Dann bildet das direkte Produkt der Matrizen eine **irreduzible** Darstellung der Produktgruppe  $\mathcal{G} = \mathcal{K} \times \mathcal{H}$ .

$$\underline{V}^{(\alpha \times \beta)}(K_a H_b) = \underline{T}^{(\alpha)}(K_a) \times \underline{U}^{(\beta)}(H_b)$$

Beweis, dass  $\underline{V}$  eine Darstellung ist: siehe 2.10.

Beweis, dass  $\underline{V}$  irreduzibel:

$$\begin{aligned} \chi^{(\alpha \times \beta)}(K_a H_b) &= \chi^{(\alpha)}(K_a) \chi^{(\beta)}(H_b) \\ \sum_{a,b} \left| \chi^{(\alpha \times \beta)}(K_a H_b) \right|^2 &= \sum_a \left| \chi^{(\alpha)}(K_a) \right|^2 \sum_b \left| \chi^{(\beta)}(H_b) \right|^2 = k \cdot h. \end{aligned}$$

$k$  ist die Ordnung von  $\mathcal{K}$ ,  $h$  die Ordnung von  $\mathcal{H}$ ,  $k \cdot h$  ist aber gleich der Ordnung der Produktgruppe, d.h.  $k \cdot h = g$ . Nach (2.7) ist daher  $V^{(\alpha \times \beta)}$  irreduzibel.

Tatsächlich schöpft  $\underline{V}^{(\alpha \times \beta)}$  alle irreduziblen Darstellungen der Produktgruppe  $\mathcal{G} = \mathcal{K} \times \mathcal{H}$  aus. Aus (2.8) folgt

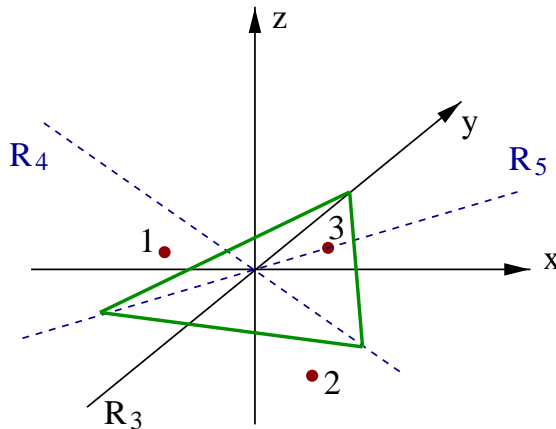
$$\sum_{\alpha, \beta} (s_\alpha s_\beta)^2 = \sum_\alpha s_\alpha^2 \sum_\beta s_\beta^2 = kh = g.$$

**Beispiel:** Charaktertabelle für die Gruppe  $D_{3h} = D_3 \times S_1$

$$S_1 = \{e, \sigma_h\} \quad \sigma_h^2 = e$$

|           | $e$ | $\sigma_h$ |
|-----------|-----|------------|
| $U^{(1)}$ | 1   | 1          |
| $U^{(2)}$ | 1   | -1         |

$R_3 \sigma_h = \sigma_3$ : Reflexion an der Ebene, die durch die Achsen  $R_3$  und  $z$  aufgespannt wird ( $\exists 3 \times 2 = 6$  Klassen).



$$\underline{V} = \underline{T} \times \underline{U}$$

| $D_{3h}$          | $\mathcal{C}_1(e)$ | $\mathcal{C}_2(R_1, R_2)$ | $\mathcal{C}_3(R_3, R_4, R_5)$ | $\mathcal{C}'_1(\sigma_h)$ | $\mathcal{C}'_2(R_1\sigma_h, R_2\sigma_h)$ | $\mathcal{C}'_3(\sigma_3, \sigma_4, \sigma_5)$ |
|-------------------|--------------------|---------------------------|--------------------------------|----------------------------|--|--|
| $V^{(1\times 1)}$ | 1                  | 1                         | 1                              | 1                          | 1  | 1  |
| $V^{(2\times 1)}$ | 1                  | 1                         | -1                             | 1                          | 1  | -1   |
| $V^{(3\times 1)}$ | 2                  | -1                        | 0                              | 2                          | -1   | 0  |
| $V^{(1\times 2)}$ | 1                  | 1                         | 1                              | -1                         | -1   | -1   |
| $V^{(2\times 2)}$ | 1                  | 1                         | -1                             | -1                         | -1   | 1  |
| $V^{(3\times 2)}$ | 2                  | -1                        | 0                              | -2                         | 1  | 0  |

## 2.14 Das Wigner–Eckart Theorem

Betrachte Transformation  $\hat{T}(G_a)$  im Raum  $L$ ,  $G_a \in \mathcal{G}$ . Betrachte ferner Operator  $\hat{S}$  in  $L \rightarrow$  transformierter Operator  $\hat{S}' = \hat{T}(G_a)\hat{S}\hat{T}(G_a)^{-1}$ .

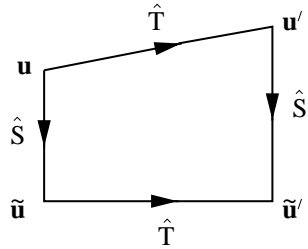
**Transformierter Operator:**

Betrachte Operatoren  $\hat{T}, \hat{S}$  in  $L$

$$\begin{aligned}\hat{T}\mathbf{u} &= \mathbf{u}' & \hat{S}\mathbf{u} &= \tilde{\mathbf{u}} \\ \hat{T}\tilde{\mathbf{u}} &= \tilde{\mathbf{u}}'\end{aligned}$$

Welcher Operator transformiert dann  $\mathbf{u}'$  in  $\tilde{\mathbf{u}}'$ ? Antwort:  $\hat{S}'$ .

$$\begin{aligned}\hat{S}'\mathbf{u}' &= \tilde{\mathbf{u}}' = \hat{T}\tilde{\mathbf{u}} = \hat{T}\hat{S}\mathbf{u} = \hat{T}\hat{S}\hat{T}^{-1}\mathbf{u}' \\ \hat{S}' &= \hat{T}\hat{S}\hat{T}^{-1}\end{aligned}$$



Definiere jetzt **irreduziblen Satz von Operatoren**  $\hat{S}_i^{(\alpha)}$

$$\hat{S}_i^{(\alpha)'} = \hat{T}(G_a)\hat{S}_i^{(\alpha)}\hat{T}(G_a)^{-1} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}.$$

Der Satz  $\hat{S}_i^{(\alpha)}$  transformiert sich nach der irreduziblen Darstellung  $T^{(\alpha)}$ . Es existieren  $s_\alpha$  solche Operatoren.

$\hat{S}' = \hat{S}$ :  $\hat{S}$  transformiert sich nach der 1–Darstellung.

Betrachte jetzt die Wirkung eines Operators  $\hat{S}_i^{(\alpha)}$  auf eine Funktion  $\phi_j^{(\beta)}$ , beide transformieren sich nach den irreduziblen Darstellungen der gleichen Gruppe  $\mathcal{G}$

(wichtig bei Berechnung von Matrixelementen in QM). Dann transformiert sich der Satz der  $s_\alpha s_\beta$  Funktionen

$$\psi_{ij} = \hat{S}_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\beta)}$$

nach dem **direkten Produkt**  $\hat{T}^{(\alpha \times \beta)}$  **der Darstellungen**:

$$\begin{aligned} \hat{T}(G_a) \psi_{ij} &= \hat{T}(G_a) \hat{S}_i^{(\alpha)} \hat{T}(G_a)^{-1} \hat{T}(G_a) \phi_j^{(\beta)} \\ &= \sum_{k,m} T_{ki}^{(\alpha)}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) \hat{S}_k^{(\alpha)} \phi_m^{(\beta)} \\ &= \sum_{k,m} T_{km,ij}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) \psi_{km}. \end{aligned}$$

$\hat{T}^{(\alpha \times \beta)}$  lässt sich wieder in irreduziblen Darstellungen zerlegen. Und analog kann man die  $\psi_{ij}$  in irreduzible Komponenten zerlegen (analog zur Zerlegung (2.10))

$$\hat{S}_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\beta)} = \psi_{ij} = \sum_{\gamma', t, k'} c^*(\alpha, \beta, \gamma', t; i, j, k) \psi_{k'}^{(\gamma')t}.$$

Betrachte jetzt Matrixelement (Quantenmechanik!)

$$\begin{aligned} (\phi_k^{(\gamma)}, \hat{S}_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\beta)}) = (\phi_k^{(\gamma)}, \psi_{ij}^{(\alpha, \beta)}) &= \sum_{\gamma', t, k'} c^*(\alpha, \beta, \gamma', t; i, j, k') (\phi_k^{(\gamma)}, \psi_{k'}^{(\gamma')t}) \\ &= \sum_t c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) (\phi_k^{(\gamma)}, \psi_k^{(\gamma)t}) \quad (2.13) \end{aligned}$$

→ d.h. das Matrixelement des Operators  $S_i^{(\alpha)}$  verschwindet, es sei denn die irreduzible Darstellung  $T^{(\gamma)}$  erscheint in der Reduktion des Produkts  $T^{(\alpha)} \times T^{(\beta)}$ .

$$\rightarrow m_\gamma = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\gamma)*} \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)} \neq 0?$$

→ die Matrixelemente ( $\alpha, \beta, \gamma, i, j$  fest gewählt) lassen sich aus einer viel kleineren Zahl von Konstanten bestimmen:  $(\phi_k^{(\gamma)}, \psi_k^{(\gamma)t})$  ist **unabhängig von  $k$**  (und  $i, j$ ), d.h. in (2.13) enthält jeder Summand nur einen unbekanntem Koeffizient ( $\phi, \psi^t$ ), die Clebsch–Gordan–Koeffizienten sind aus Gruppentheorie bekannt.

$$(\phi_k^{(\gamma)}, \psi_k^{(\gamma)t}) = \langle \phi^{(\gamma)} \| s^{(\alpha)} \| \phi^{(\beta)} \rangle$$

nennt man die “reduzierten Matrixelemente”. Wigner–Eckart–Theorem

$$\boxed{(\phi_k^{(\gamma)}, \hat{S}_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\beta)}) = \sum c^*(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \langle \phi^{(\gamma)} \| s^{(\alpha)} \| \phi^{(\beta)} \rangle}$$

**Beispiel:**

Betrachte Operatoren  $\frac{\partial}{\partial x_i}$ ,  $i = 1, \dots, N$  im Vektorraum der stetigen Funktionen  $\phi(x_1, \dots, x_N) = \phi(\mathbf{r})$ . Sei  $\mathcal{G}$  die Rotationsgruppe  $\mathcal{R}_n$   $\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_N)$

$$\phi'(\mathbf{r}) = \hat{T}(R)\phi(\mathbf{r}) = \phi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) = \phi(\bar{\mathbf{r}}), \quad \bar{\mathbf{r}} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n).$$

Der transformierte Operator ist  $\hat{T}(R)\frac{\partial}{\partial x_i}\hat{T}(R)^{-1} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i}$ ,  $\frac{\partial}{\partial \bar{x}_i}\hat{T}(R) = \hat{T}(R)\frac{\partial}{\partial x_i}$ , denn

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i}\hat{T}(R)\phi(\mathbf{r}) &= \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i}\phi(\bar{\mathbf{r}}) \\ \hat{T}(R)\frac{\partial}{\partial x_i}\phi(\mathbf{r}) &= \hat{T}\tilde{\phi}(\mathbf{r}) = \tilde{\phi}(\bar{\mathbf{r}}) = \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i}\phi(\bar{\mathbf{r}}). \end{aligned}$$

$\frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} = \sum_j \frac{\partial x_j}{\partial \bar{x}_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$ , i.e. die  $n$  Operatoren bilden einen invarianten Satz bezüglich der Rotation.

$$\hat{R}\mathbf{e}_i = \sum_j R_{ji}\mathbf{e}_j$$

$$x_i = \mathbf{e}_i \mathbf{r} = \mathbf{e}_i \cdot \hat{R}\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_i \sum_j \bar{x}_j \hat{R}\mathbf{e}_j = \sum_j \bar{x}_j \sum_l \mathbf{e}_i R_{lj} \mathbf{e}_l = \sum_j \bar{x}_j R_{ij}$$

$$\rightarrow \frac{\partial x_i}{\partial \bar{x}_j} = R_{ij}$$

$$T(R)\frac{\partial}{\partial x_i}T^{-1}(R) = \sum_j R_{ji}\frac{\partial}{\partial x_j},$$

d.h. die Operatoren  $\frac{\partial}{\partial x_i}$  transformieren sich wie die Basisvektoren. Der Satz der Operatoren  $\frac{\partial}{\partial x_i}$  ist irreduzibel für die Gruppe  $\mathcal{R}_n$ .

$D_3$ :  $\frac{\partial}{\partial z}$  transformiert sich nach  $T^{(2)}$ ,  $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}$  transformieren sich nach  $T^{(3)}$ .

**Zusammenfassung: Endlichen Gruppen und ihre Darstellungen**

1.) **Gruppe**  $\mathcal{G}$ ,  $G_a \in \mathcal{G}$ ,  $G_a G_b = G_c$ ,  $(G_a G_b)G_c = G_a(G_b G_c)$ ,  $\exists e, G_a^{-1}$ . Gruppenzerlegung in Klassen:  $e, \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \dots, \mathcal{C}_n$

2.) **Darstellung** von  $\mathcal{G}$  durch Operatoren in linearem Vektorraum ( $\mathbb{R}^d$ , Funktionsraum).

$$G_a \rightarrow \hat{T}(G_a), \quad \hat{T}(G_a)\hat{T}(G_b) = \hat{T}(G_a G_b)$$

$$\mathbf{e}'_i = \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i = \sum_j T_{ji}\mathbf{e}_j$$

$\mathbf{e}_j$  Basis im linearen Vektorraum.

$\underline{T} = (T_{ij})$  hängt von Basis ab, durch Übergang zu neuer Basis häufig Reduktion auf Blockdiagonalform möglich.

$$\begin{pmatrix} \square & & & & \\ & \square & & & \\ & & \square & & 0 \\ & & & \square & \\ 0 & & & & \square \\ & & & & & \square \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} T^{(\alpha)}, \quad m_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p.$$

$$\{\mathbf{e}_i\} \rightarrow \{\mathbf{e}_i^{(1)}, \mathbf{e}_i^{(2)}, \dots\}$$

$$\mathbf{e}_i^{(\alpha)'} = \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_i^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^{s_\alpha} T_{ji}^{(\alpha)} \mathbf{e}_j^{(\alpha)}$$

$\sum_p c_p |\chi_p^{(\alpha)}|^2 = g$  Irreduzibilitätskriterium.

$$(\mathbf{e}_i^{(\alpha)}, \mathbf{e}_j^{(\beta)}) = \frac{1}{s_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \sum_l (\mathbf{e}_l^{(\alpha)}, \mathbf{e}_l^{(\alpha)})$$

Basisfunktionen, die sich nach irreduziblen Darstellungen transformieren, sind orthogonal.  $\mathbf{e}_i^{(\alpha)}$  können sich sehr unterscheiden, abhg. von  $d$ .

→ irreduzibler Satz von Operatoren

$$\hat{S}_i^{(\alpha)'} = \hat{T}(G_a) \hat{S}_i^{(\alpha)} \hat{T}(G_a)^{-1} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}$$

### 3.) Direktes Produkt von Darstellungen

$$\hat{T}^{(\alpha)} \times \hat{T}^{(\beta)} = \hat{T}^{(\alpha \times \beta)} = \sum_\gamma m_\gamma \hat{T}^{(\gamma)}$$

aus den irreduziblen Basisfunktionen  $\phi_i^{(\alpha)}, \phi_j^{(\beta)}$  wird

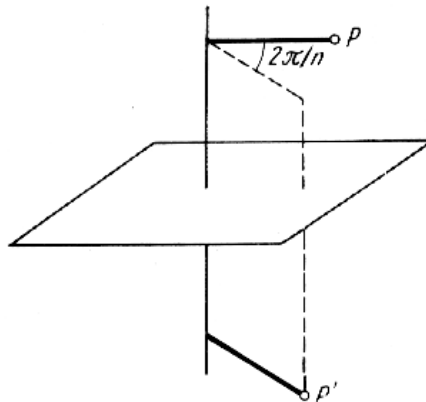
$$\psi_k^{(\gamma)t} = \sum c(\alpha, \beta, \gamma, t; i, j, k) \phi_i^{(\alpha)} \phi_j^{(\beta)}.$$

## 2.15 Punktgruppen

Symmetrietransformationen: Rotationen um Achsen um Winkel  $\theta$ ; Spiegelung an Ebenen:  $\sigma$ ; Translationen.

1.)  $\theta = \frac{2\pi}{n}$ :  $\exists$  Symmetrie  $n$ -ter Ordnung, Rotation  $C_n$   $C_n^n = E$ .

2.)  $\exists$  Drehspiegelachse



$$S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n.$$

$n$  ungerade:  $S_n$  kein neues Symmetrieelement  $S_m^n = \sigma_h$ .

3.) Spezialfall von 2.):  $n = 2$  "Inversion"  $I = S_2 = C_2\sigma_h$ .

4.) Das Produkt zweier Rotationen um Achsen, die sich in einem Punkt schneiden, ist eine Rotation um eine dritte Achse, die auch durch diesen Punkt geht.

**Punktgruppen:** Symmetriegruppe eines Körpers mit endlicher Dimension, ein Punkt bleibt bei allen Transformationen fest!

→ Alle Symmetrieachsen und -ebenen haben einen gemeinsamen Schnittpunkt.

∃ einfache Regel zum Auffinden der Klassen bei Punktgruppen: siehe Landau, Lifschitz: Band III.

### Die Punktgruppe:

I  $C_n = n$ :  $C_1 = E$  keine Symmetrie vorhanden.

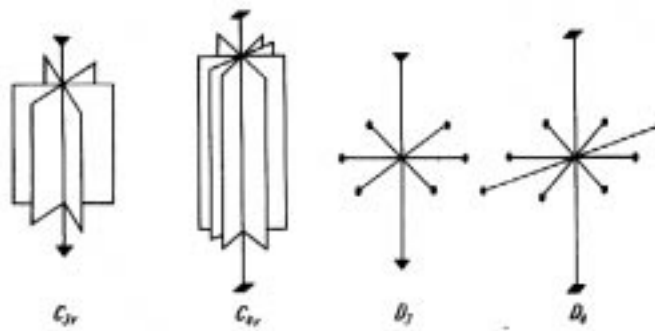
(II)  $S_{2n}$ : ist  $2n = 4p + 1$ , dann  $S_{4p+2} = C_{2p+1} \times C_i$ .

$S_2 = (E, I) \equiv C_i$ .

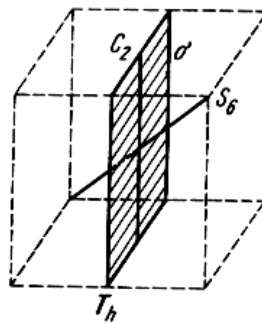
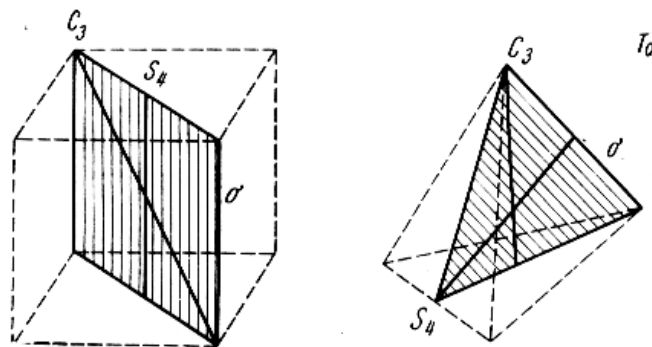
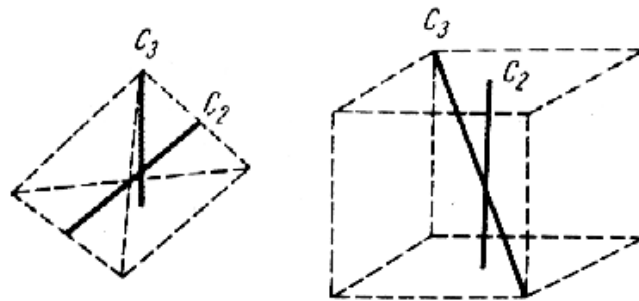
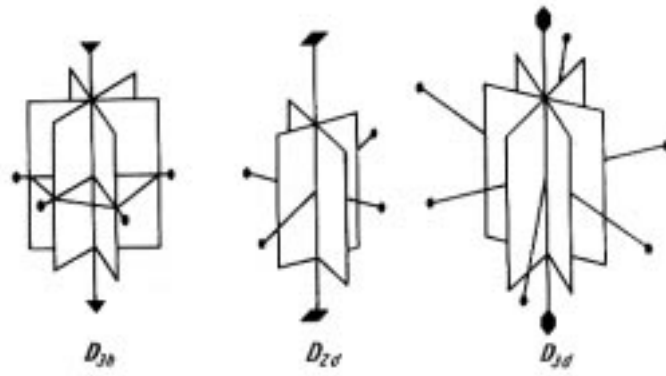
(III)  $C_{nh}$ :  $n$ -zählige Symmetrieachse + dazu senkrechte Symmetrieebene.  $C_{nh} = (C_n^k, k = 1 \dots n; C_n^k \sigma_k, k = 1 \dots n)$ , **abelsch**.

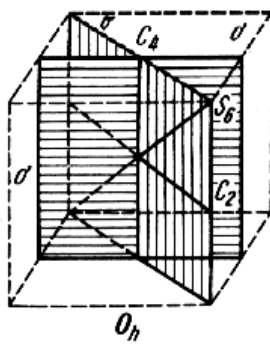
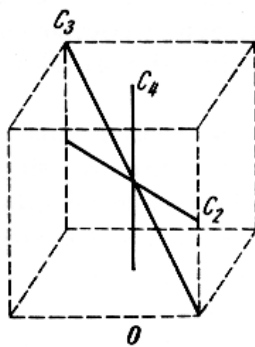
(IV)  $C_{nv} = nmm$ :  $n$ -zählige Symmetrieachse +  $n$  Symmetrieebenen, die durch die Symmetrieachsen gehen. Die Gruppe enthält  $2n$  Elemente.

(V)  $D_n$ : Symmetrieachse  $n$ -ter Ordnung + dazu senkrechte Achse zweiter Ordnung → weitere  $n-1$  horizontale Achsen 2-ter Ordnung. Enthält  $2n$  Elemente:  $n$  Drehungen um Achse  $n$ -ter Ordnung und  $n$  Drehungen um Winkel  $\pi$  um die horizontale Achsen.









| $C_i$                   | $C_2$               | $C_3$                  | $E$<br>$E$<br>$E$ | $I$<br>$C_2$<br>$\sigma$ | $C_3$                   | $E$ $C_3$ $C_3^2$  |
|-------------------------|---------------------|------------------------|-------------------|--------------------------|-------------------------|--|
| $A_g$<br>$A_u; x; y; z$ | $A; z$<br>$B; x; y$ | $A'; x; y$<br>$A''; z$ | 1<br>1            | 1<br>-1                  | $A; z$<br>$E; x \pm iy$ | $\left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 \\ 1 & \varepsilon^2 & \varepsilon \end{array} \right.$ |

| $C_{2h}$                                  | $C_{2v}$                                  | $D_2$                                   | $E$<br>$E$<br>$E$ | $C_2$<br>$C_2$<br>$C_2^x$ | $\sigma_h$<br>$\sigma_v$<br>$C_2^y$ | $I$<br>$\sigma_v'$<br>$C_2^z$ |
|---|---|---|-------------------|---------------------------|-------------------------------------|-------------------------------|
| $A_g$<br>$B_g$<br>$A_u; z$<br>$B_u; x; y$ | $A_1; z$<br>$B_2; y$<br>$A_2$<br>$B_1; x$ | $A$<br>$B_3; x$<br>$B_1; z$<br>$B_2; y$ | 1<br>1<br>1<br>1  | 1<br>-1<br>1<br>-1        | 1<br>-1<br>-1<br>1                  | 1<br>1<br>-1<br>-1            |

| $C_{3v}$                       | $D_3$                          | $E$ $2C_3$ $3\sigma_v$<br>$E$ $2C_3$ $3U_2$                         | $C_4$                          | $S_4$                          | $E$ $C_4$ $C_2$ $C_4^3$<br>$E$ $S_4$ $C_2$ $S_4^3$   |
|--------------------------------|--------------------------------|---|--------------------------------|--------------------------------|--|
| $A_1; z$<br>$A_2$<br>$E; x; y$ | $A_1$<br>$A_2; z$<br>$E; x; y$ | $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{matrix}$ | $A; z$<br>$B$<br>$E; x \pm iy$ | $A$<br>$B; z$<br>$E; x \pm iy$ | $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -i & -1 & i \end{matrix}$ |

| $C_6$                                     | $E$   | $C_6$   | $C_3$  | $C_2$  | $C_3^2$  | $C_6^5$  |
|---|---|---|--|--|--|--|
| $A; z$<br>$B$<br>$E_1$<br>$E_2; x \pm iy$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{matrix} \right.$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ -\omega^2 \\ \omega \\ -\omega \end{matrix} \right.$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ 1 \\ \omega^2 \\ \omega^2 \end{matrix} \right.$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{matrix} \right.$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ \omega^2 \\ -\omega \\ \omega^2 \end{matrix} \right.$ | $\left\{ \begin{matrix} 1 \\ -1 \\ -\omega \\ \omega \end{matrix} \right.$ |

| $C_{4v}$   | $D_4$  | $D_{2d}$   | $E$<br>$E$<br>$E$     | $C_2$<br>$C_2$<br>$C_2$ | $2C_4$<br>$2C_4$<br>$2S_4$ | $2\sigma_v$<br>$2U_2$<br>$2U_2$ | $2\sigma_v'$<br>$2U_2'$<br>$2\sigma_d$ |
|--|--|--|-----------------------|-------------------------|----------------------------|---------------------------------|--|
| $A_1; z$<br>$A_2$<br>$B_1$<br>$B_2$<br>$E; x, y$ | $A_1$<br>$A_2; z$<br>$B_1$<br>$B_2$<br>$E; x, y$ | $A_1$<br>$A_2$<br>$B_1$<br>$B_2; z$<br>$E; x, y$ | 1<br>1<br>1<br>1<br>2 | 1<br>1<br>1<br>1<br>-2  | 1<br>1<br>-1<br>-1<br>0    | 1<br>-1<br>1<br>-1<br>0         | 1<br>-1<br>-1<br>1<br>0                |

Abbildung 2.1: Die Charaktere der irreduziblen Darstellungen der Punktgruppen

| $D_6$       | $C_{6v}$    | $D_{3h}$    | $E$ | $C_2$      | $2C_2$ | $2C_6$ | $3U_2$      | $3U'_2$      |
|-------------|-------------|-------------|-----|------------|--------|--------|-------------|--------------|
|             |             |             | $E$ | $C_2$      | $2C_2$ | $2C_6$ | $3\sigma_v$ | $3\sigma'_v$ |
|             |             |             | $E$ | $\sigma_h$ | $2C_3$ | $2S_3$ | $3U_2$      | $3\sigma_v$  |
| $A_1$       | $A_1; z$    | $A'_1$      | 1   | 1          | 1      | 1      | 1           | 1            |
| $A_2; z$    | $A_2$       | $A'_2$      | 1   | 1          | 1      | 1      | -1          | -1           |
| $B_1$       | $B_2$       | $A''_1$     | 1   | -1         | 1      | -1     | 1           | -1           |
| $B_2$       | $B_1$       | $A''_2; z$  | 1   | -1         | 1      | -1     | -1          | 1            |
| $E_2$       | $E_2$       | $E''; x, y$ | 2   | 2          | -1     | -1     | 0           | 0            |
| $E_1; x, y$ | $E_1; x, y$ | $E'''$      | 2   | -2         | -1     | 1      | 0           | 0            |

| $T$          | $E$ | $3C_2$ | $4C_3$       | $4C_3^2$     | $O$            | $T_d$          | $E$    | $8C_3$ | $3C_2$ | $6C_2$ | $6C_4$ |
|--------------|-----|--------|--------------|--------------|----------------|----------------|--------|--------|--------|--------|--------|
|              | $E$ | $8C_3$ | $3C_2$       | $6\sigma_d$  |                |                | $6S_4$ |        |        |        |        |
| $A$          | 1   | 1      | 1            | 1            | $A_1$          | $A_1$          | 1      | 1      | 1      | 1      | 1      |
| $E$          | 1   | 1      | $\epsilon$   | $\epsilon^2$ | $A_2$          | $A_2$          | 1      | 1      | 1      | -1     | -1     |
|              | 1   | 1      | $\epsilon^2$ | $\epsilon$   | $E$            | $E$            | 2      | -1     | 2      | 0      | 0      |
| $F; x, y, z$ | 3   | -1     | 0            | 0            | $F_2$          | $F_2; x, y, z$ | 3      | 0      | -1     | 1      | -1     |
|              |     |        |              |              | $F_1; x, y, z$ | $F_1$          | 3      | 0      | -1     | -1     | 1      |

Abbildung 2.2: Fortsetzung



# Kapitel 3

## Symmetrie in der Quantenmechanik

### 3.1 Definition der Symmetrie in der Quantenmechanik

Betrachte zeitunabhängigen Hamiltonoperator  $\hat{H}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ .  $\psi(\mathbf{r})$  sei eine beliebige Wellenfunktion.

Sei  $\mathcal{G}$  eine Gruppe von Koordinatentransformationen  $\hat{T}_r(G_a)\mathbf{r} = \mathbf{r}' = \hat{G}_a\mathbf{r}$ .

→ induziert Transformation von  $\psi$

$$\hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})$$

und  $\hat{\mathcal{H}}$  (“transformierter Operator”)

$$\hat{T}(G_a)\hat{\mathcal{H}}\hat{T}^{-1}(G_a) = \hat{\mathcal{H}}' .$$

$$\hat{T}\hat{\mathcal{H}}\psi = \hat{T}\hat{\mathcal{H}}\hat{T}^{-1}\hat{T}\psi = \hat{\mathcal{H}}'\psi'$$

Gilt nun  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{T}(G_a)\hat{\mathcal{H}}\hat{T}(G_a)^{-1} \quad \forall G_a \in \mathcal{G}$  ( $G_a$  Symmetrieelement), dann nennt man  $\mathcal{G}$  die **Symmetriegruppe des Hamiltonians**

$$\hat{\mathcal{H}}\hat{T}(G_a) - \hat{T}(G_a)\hat{\mathcal{H}} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{T}(G_a)] = 0 .$$

Konsequenz

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\psi &= E\psi \\ \hat{T}\hat{\mathcal{H}}\psi &= E\psi' = \hat{\mathcal{H}}'\psi' , \end{aligned}$$

d.h. die Wellenfunktionen  $\psi$  und  $\hat{T}(G_a)\psi = \psi'$  sind Eigenfunktionen von  $\hat{\mathcal{H}}$  zum gleichen Eigenwert  $E$ .

Beispiele für Symmetriegruppen:

Rotationsgruppe (bei kugelsymmetrischem Potential)

Punktgruppe (bei Molekülen)

Translationsgruppe (in Kristallen)

Symmetrische Gruppe (identische Teilchen)

Zwei wichtige Folgerungen aus der Existenz einer Symmetriegruppe  $\mathcal{G}$  des Hamiltonians  $\hat{\mathcal{H}}$ :

- (i) Die Eigenfunktionen  $\psi$  und die Eigenwerte  $E$  lassen sich nach den irreduziblen Darstellungen  $\hat{T}^{(\alpha)}$  der Gruppe  $\mathcal{G}$  indizieren.
- (ii) Das Energieniveau  $E^{(\alpha)}$  ist mindestens  $s_\alpha$ -fach entartet, wobei  $s_\alpha$  die Dimension von  $T^{(\alpha)}$  ist.

Quantenmechanik:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}\psi_i &= E\psi_i, \quad i = 1, \dots, d \\ (\psi_i, \psi_j) &= \int d^3N \mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}\end{aligned}$$

$\hat{T}\hat{\mathcal{H}}\psi_i = \hat{\mathcal{H}}\hat{T}\psi_i = E\hat{T}\psi_i$ , d.h.  $\hat{T}\psi_i$  Eigenfunktion zum selben Eigenwert  $E$ .  $\rightarrow$

$$\hat{T}\psi_i = \sum_{j=1}^d T_{ji}\psi_j, \quad T_{ji} = (\psi_j, \hat{T}\psi_i)$$

denn dann immer noch  $\hat{\mathcal{H}}\hat{T}\psi_i = \sum_{j=1}^d T_{ji}\hat{\mathcal{H}}\psi_j = E\hat{T}\psi_i$ .

$\rightarrow$  die **Matrizelemente  $T_{ji}$  bilden eine unitäre Darstellung der Gruppe  $\mathcal{G}$  in der Basis  $\psi_1, \dots, \psi_d$** . Diese Darstellung ist i.a. **irreduzibel**. Wäre sie reduzibel, dann zerfiel die Basis mindestens in zwei Sätze von Funktionen  $\psi_i^{(1)}, \psi_i^{(2)}$ , so dass

$$\hat{T}\psi_i^{(1)} = \sum_{j=1}^{d_1} T_{ji}^{(1)}\psi_j^{(1)} \quad \text{etc.}$$

Die Funktionen zum gleichen Satz haben den gleichen Eigenwert, i.a. würden wir dann aber zwei verschiedene Energieeigenwerte  $E_1, E_2$  erwarten, es sei denn es liegt eine **zufällige** (d.h. nicht auf Symmetrien zurückgehende) Entartung vor. Gilt dagegen  $E_1 = E_2 = E$ , dann ist die Darstellung irreduzibel.

**Fazit:** Die Eigenfunktionen zum gleichen (entarteten) Energieeigenwert bilden die Basis für eine irreduzible Darstellung  $T^{(\alpha)}$  der Symmetriegruppe. Die Entartung  $s_\alpha$  ist gleich der Dimension der Darstellung.

**Beispiel:** Teilchen im kugelsymmetrischen Potential

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}).$$

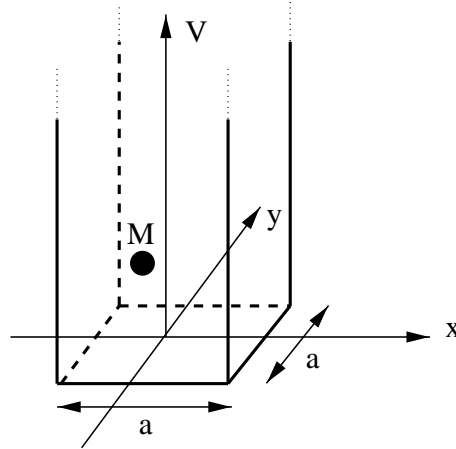
Lösung  $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = P_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ .  $P_{nl}$  hängt von  $V$  ab,  $Y_{lm}$  normierte Kugelfunktionen.

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \psi \right] + V(r)\psi = E\psi$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$$

Symmetriegruppe: Rotationsgruppe  $\hat{T}(R)Y_{lm} = \sum_{m'=-l}^l Y_{lm'} D_{m'm}^{(l)}(R)$ . Entartung  $2l+1$ .

**Beispiel: Teilchen im unendlich tiefen quadratischen Potentialtopf**



$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \left\{ \begin{array}{l} -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} \leq y \leq \frac{a}{2} \end{array} \right. \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_i(x, y) = E_i\psi_i(x, y)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y)$$

Ansatz:  $\psi(x, y) = \phi_1(x)\phi_2(y)$ ,  $\phi_i(x) = A \sin(kx + \delta)$ .

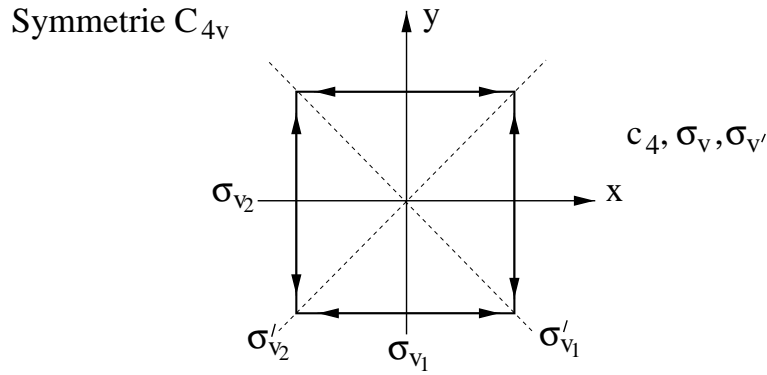
Lösung: ( $i = n, m$ )

$$\psi_{n,m}(x, y) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi n}{a} \left( x + \frac{a}{2} \right) \sin \frac{\pi m}{a} \left( y + \frac{a}{2} \right),$$

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} (n^2 + m^2), \quad n, m = 1, 2, 3, \dots$$

2-fache Entartung  $n = p \pm k$ ,  $m = p \mp k$ ,  $n^2 + m^2 = (p^2 + k^2)2$





Darstellung der Gruppe  $C_{4v}$  in der Basis  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ :

$$\hat{e} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{c}_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{c}_4^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{c}_4^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}'_{v_1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}'_{v_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_{v_1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_{v_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Irreduzible  $\sum_a \chi^2(G_a) = g = 4 + 4 = 8$ : Darstellung ist irreduzibel!

Es gibt nur eine 2-dimensionale nichtäquivalente Darstellung der  $C_{4v}$ .

**Nebenrechnung:** Darstellung der Gruppe  $C_{4v}$  im  $\mathbb{R}^2$

$$\mathbf{e}'_i = \hat{T} \mathbf{e}_i = \sum_j T_{ji} \mathbf{e}_j \quad T_{ji} = (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}'_i)$$

$$\hat{T} \mathbf{u} = \mathbf{u}' = \hat{T} \sum_i u_i \mathbf{e}_i = \sum_{ij} u_i T_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_j \left( \underbrace{\sum_i u_i T_{ji}}_{u'_j} \right) \mathbf{e}_j = \sum_j u'_j \mathbf{e}_j.$$

Rotation um  $\angle \alpha$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_x &= \mathbf{e}_x \cos \alpha + \mathbf{e}_y \sin \alpha \\ \mathbf{e}'_y &= -\mathbf{e}_x \sin \alpha + \mathbf{e}_y \cos \alpha \end{aligned} \quad \underline{\underline{T}}_R(R(\alpha)) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

Spiegelung an  $y$ - $z$ -Ebene:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_x &= -\mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}'_y &= \mathbf{e}_y \end{aligned} \quad T_R(\sigma_{v_1}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_R(\sigma_{v_2}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spiegelung an Ebene  $z$ , Winkelhalb.  $x, y$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_x &= \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}'_y &= \mathbf{e}_x \end{aligned} \quad T_R(\sigma'_{v_2}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_R(\sigma'_{v_1}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \mathbf{e}'_x &= -\mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}'_y &= -\mathbf{e}_x \end{aligned}$$

**induzierte Transformation:**  $\hat{T}_\psi(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi(x', y') = \psi'$ , ( $\hat{G}_a =$ :

$\hat{T}_R(G_a))$ 

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y \\ x &= (\mathbf{e}_x, \mathbf{r}), \quad y = (\mathbf{e}_y, \mathbf{r}) \\ x' &= (\mathbf{e}_x, \hat{G}_a^{-1}\mathbf{r}) \\ x' &= T_{xx}x + T_{xy}y, \quad y' = T_{yx}x + T_{yy}y \\ \psi'_a &= \psi_a(x', y') = T_{aa}\psi_a + T_{ba}\psi_b \\ \psi'_b &= \psi_b(x', y') = T_{ab}\psi_a + T_{bb}\psi_b\end{aligned}$$

Beispiel:  $G_a = C_4$ ;  $C_4^{-1} = C_4^3$ ;  $x' = y$ ,  $y' = -x$

$$\left. \begin{aligned}\hat{T}_\psi(C_4)\psi_a = \psi'_a = \psi_a(C_4^{-1}\mathbf{r}) = \psi_a(x', y') &= 2 \sin \pi(y + \frac{1}{2}) \sin 2\pi(-x + \frac{1}{2}) \\ &= -2 \sin \pi(y + \frac{1}{2}) \sin 2\pi(x + \frac{1}{2} - 1) = -\psi_b\end{aligned} \right\} \rightarrow \begin{aligned}T_{aa} &= 0 \\ T_{ba} &= -1\end{aligned}$$

Die quantenmechanischen Wellenfunktionen zum gleichen Energieeigenwert sollten Basisfunktionen für eine irreduzible Darstellung der Symmetriegruppe sein.

Test:

$$\begin{aligned}\psi_a &= \psi_{1,2}(x, y) = 2 \sin \pi(x + \frac{1}{2}) \sin 2\pi(y + \frac{1}{2}) \\ \psi_b &= \psi_{2,1}(x, y) = 2 \sin 2\pi(x + \frac{1}{2}) \sin \pi(y + \frac{1}{2})\end{aligned}$$

Suche Darstellung in der neuen Basis;  $T(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})$ .  $T(\hat{e}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .

Zeige:  $\rightarrow \psi_a, \psi_b$  tatsächlich Basis für irreduzible Darstellung.

$$C_4: \quad \begin{aligned}x' &= y \\ y' &= -x\end{aligned}, \quad T(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}:$$

$$\begin{aligned}\psi'_a &= \psi_a(\hat{C}_4^3\mathbf{r}) = 2 \sin \pi\left(y + \frac{1}{2}\right) \sin 2\pi\left(-x + \frac{1}{2}\right) \\ &= -2 \sin \pi\left(y + \frac{1}{2}\right) \sin 2\pi\left(x + \frac{1}{2}\right) = -\psi_b \\ \psi'_b &= \psi_b(\hat{C}_4^3\mathbf{r}) = +2 \sin 2\pi\left(y + \frac{1}{2}\right) \sin \pi\left(-x + \frac{1}{2}\right) = +\psi_a\end{aligned}$$

$$C_4^2 = C_2: \quad \begin{aligned}x' &= -x \\ y' &= -y\end{aligned}, \quad T(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}:$$

$$\begin{aligned}\psi'_a &= \psi_a(\hat{C}_4^2\mathbf{r}) = 2 \sin \pi\left(x + \frac{1}{2} - 1\right) \sin 2\pi\left(y + \frac{1}{2} - 1\right) = -\psi_a \\ \psi'_b &= \psi_b(\hat{C}_4^2\mathbf{r}) = 2 \sin 2\pi\left(x + \frac{1}{2} - 1\right) \sin \pi\left(y + \frac{1}{2} - 1\right) = -\psi_b\end{aligned}$$

$$C_4^3: \quad \begin{matrix} x' = -y \\ y' = x \end{matrix}, \quad T(C_4^3) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}:$$

$$\psi'_a = \psi_a(\hat{C}_4 \mathbf{r}) = 2 \sin \pi \left( -y + \frac{1}{2} \right) \sin 2\pi \left( x + \frac{1}{2} \right) = +\psi_b$$

$$\psi'_b = \psi_b(\hat{C}_4 \mathbf{r}) = 2 \sin 2\pi \left( -y + \frac{1}{2} \right) \sin \pi \left( x + \frac{1}{2} \right) = -\psi_a$$

$$\hat{\sigma}_{v_1}: \quad \begin{matrix} x' = -x \\ y' = y \end{matrix}, \quad T(\sigma_{v_1}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}:$$

$$\psi'_a = \psi_a(\hat{\sigma}_{v_1} \mathbf{r}) = -2 \sin \pi \left( x + \frac{1}{2} - 1 \right) \sin 2\pi \left( y + \frac{1}{2} \right) = \psi_a$$

$$\psi'_b = \psi_b(\hat{\sigma}_{v_1} \mathbf{r}) = -\psi_b$$

$$\hat{\sigma}_{v_2}: \quad \begin{matrix} x' = x \\ y' = -y \end{matrix}, \quad T(\sigma_{v_2}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}:$$

$$\psi'_a = \psi_a(\hat{\sigma}_{v_2} \mathbf{r}) = -\psi_a$$

$$\psi'_b = \psi_b$$

$$\hat{\sigma}'_{v_1}: \quad \begin{matrix} x' = -y \\ y' = -x \end{matrix}, \quad T(\sigma'_{v_1}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}:$$

$$\psi'_a = \psi_a(\hat{\sigma}'_{v_1} \mathbf{r}) = 2 \sin \pi \left( y + \frac{1}{2} - 1 \right) \sin 2\pi \left( x + \frac{1}{2} - 1 \right) = -\psi_b$$

$$\psi'_b = \psi_b(\hat{\sigma}'_{v_1} \mathbf{r}) = 2 \sin 2\pi \left( y + \frac{1}{2} - 1 \right) \sin \pi \left( x + \frac{1}{2} - 1 \right) = -\psi_a$$

$$\hat{\sigma}'_{v_2}: \quad \begin{matrix} x' = y \\ y' = x \end{matrix}, \quad T(\sigma'_{v_2}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}:$$

$$\psi'_a = \psi_a(\hat{\sigma}'_{v_2} \mathbf{r}) = 2 \sin \pi \left( y + \frac{1}{2} \right) \sin 2\pi \left( x + \frac{1}{2} \right) = \psi_b$$

$$\psi'_b = \psi_b(\hat{\sigma}'_{v_2} \mathbf{r}) = 2 \sin 2\pi \left( y + \frac{1}{2} \right) \sin \pi \left( x + \frac{1}{2} \right) = \psi_a$$

Die 2-dimensionalen irreduziblen Darstellungen der Gruppe  $C_{4v}$ :  $T_R(G)$  und  $T_\psi(G)$  sollten äquivalent sein, d.h. es muss eine Matrix existieren, so dass

$$\underline{T}_R(G_a) = \underline{A}^{-1} T_\psi(G_a) \underline{A} \quad \forall G_a \in \mathcal{G}.$$

Behauptung:  $\underline{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \underline{A}^{-1}$ .

$$\underline{A} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & d \\ a & b \end{pmatrix} \quad \text{i.e. Zeilen vertauschen}$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \underline{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & a \\ d & c \end{pmatrix} \quad \text{i.e. Spalten vertauschen}$$

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\epsilon}} & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} \\
C_4 & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
C_2 & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
C_4^3 & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\sigma_{v_1} & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
\sigma_{v_2} & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\sigma'_{v_1} & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\sigma'_{v_2} & \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Betrachte jetzt nicht-entartetes Energieniveau  $(n, n)$ ,  $E_{n,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{M a^2} n^2$ .

$$\psi_c = \psi_{n,n}(x, y) = 2 \sin \pi n \left( x + \frac{1}{2} \right) \sin \pi n \left( y + \frac{1}{2} \right)$$

$$\begin{aligned}
C_4 : \quad & \begin{matrix} x' = y \\ y' = -x \end{matrix} & \psi' = -2 \sin \pi n \left( y + \frac{1}{2} \right) \sin \pi n \left( x + \frac{1}{2} - 1 \right) = \psi (-1)^{n+1} \\
C_4^2 : \quad & \begin{matrix} x' = -x \\ y' = -y \end{matrix} & \psi' = +2 \sin \pi n \left( x + \frac{1}{2} - 1 \right) \sin \pi n \left( y + \frac{1}{2} - 1 \right) = \psi \\
C_4^3 : \quad & \begin{matrix} x' = -y \\ y' = x \end{matrix} & \psi' = \psi (-1)^{n+1} \\
\sigma_{v_1} : \quad & \begin{matrix} x' = -x \\ y' = y \end{matrix} & \psi' = \psi (-1)^{n+1} \\
\sigma_{v_2} : \quad & \begin{matrix} x' = x \\ y' = -y \end{matrix} & \psi' = \psi (-1)^{n+1} \\
\sigma'_{v_1} : \quad & \begin{matrix} x' = -y \\ y' = -x \end{matrix} & \psi' = \psi \\
\sigma'_{v_2} : \quad & \begin{matrix} x' = y \\ y' = x \end{matrix} & \psi' = \psi
\end{aligned}$$

**Fazit:** Für  $n$  ungerade transformieren sich  $\psi_c$  nach der 1-Darstellung  $A_1$ .

Für  $n$  gerade transformieren sich  $\psi_c$  nach der Darstellung  $B_2$ .

Zufällige Entartung: Die Kombinationen

$$c = n^2 + m^2 = 16^2 + 63^2 = 33^2 + 56^2 = 25^2 + 60^2 = 39^2 + 52^2 = 65^2$$

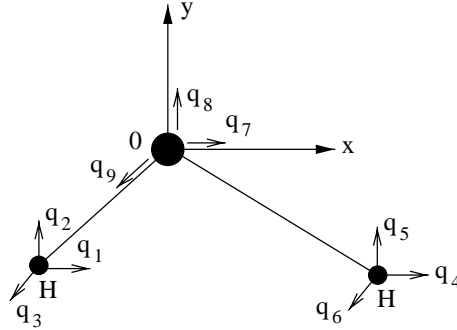
führen zum gleichen Energieeigenwert.

Zahlentheorie: Ist  $c$  eine Primzahl der Resklasse 1 mod 4, dann besitzt  $c$  genau eine Darstellung  $c^2 = n^2 + m^2$  etc.

$$\frac{c}{4} = l + \frac{1}{4}$$

### 3.2 Molekülschwingungen

Betrachte Molekül aus  $N$  Atomen (punktförmig). Auslenkungen aus Gleichgewichtslage  $\{q_1, q_2, \dots, q_{3N}\}$ .



**Hamilton-Funktion**  $p_i = M_i \dot{q}_i$

**Hamilton-Operator**  $\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} \frac{p_i^2}{M_i} + V(q_1, \dots, q_{3N})$$

“harmonische Näherung”:

$$V(q_1, \dots, q_{3N}) \simeq V_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} V(q_1, \dots, q_{3N}) \Big|_{q_k=0} \cdot q_i q_j + \dots$$

Reskalierung:

$$\begin{aligned} \tilde{q}_i &= \sqrt{M_i} q_i \\ \tilde{p}_i &= \dot{\tilde{q}}_i \left( = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_i} \right). \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \tilde{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij} \tilde{q}_i \tilde{q}_j \quad \text{mit} \quad D_{ij} = (M_i M_j)^{-1/2} \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} V(q_1, \dots, q_{3N}) \Big|_{q=0} = D_{ji}$$

Hauptachsentransformation:

$$\sum_j (D_{ij} - \omega_k^2 \delta_{ij}) a_{jk} = 0.$$

$\begin{pmatrix} q_{1k} \\ \vdots \\ a_{3Nk} \end{pmatrix}$  ist Eigenvektor zum Eigenwert  $\omega_k^2$ , die Eigenvektoren sind orthogonal.

$$\sum_i a_{ik} a_{il} = \delta_{kl} \quad \rightarrow \quad \tilde{q}_i = \sum_k a_{ik} Q_k \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned}
\sum_i \tilde{p}_i^2 &= \sum_i \sum_{k,k'} a_{ik} a_{ik'} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} = \sum_k \dot{Q}_k^2 = \sum_k \omega_k^2 Q_k^2 \\
\sum_{i,j} D_{ij} \tilde{q}_i \tilde{q}_j &= \sum_{i,j} \sum_{k,k'} D_{ij} a_{ik} a_{jk'} Q_k Q_{k'} = \sum_{i,j,k,k'} \omega_{k'}^2 \delta_{ij} a_{ik} a_{jk'} Q_k Q_{k'} \\
\rightarrow \mathcal{H}_0 &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N} [P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2] \sim \text{harmonische Oszilatoren mit Frequenz } \omega_k.
\end{aligned}$$

Wir wollen jetzt zeigen, dass die Normalmoden  $Q_k$  nach irreduziblen Darstellungen indiziert werden können. Betrachte  $3N$ -dimensionalen Vektorraum. Verschiebung = Verzerrung des M. = Vektor im  $R^{3N}$

$$\mathbf{q} = \{\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_{3N}\} = \sum_{i=1}^{3N} \tilde{q}_i \tilde{\mathbf{e}}_i, \quad (\tilde{\mathbf{e}}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j) = \delta_{ij}.$$

Operator  $\hat{D}$  (im Vektorraum) für die potentielle Energie:  $\hat{D}\tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_j D_{ij} \tilde{\mathbf{e}}_j$ .

$$V(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}, \hat{D}\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \tilde{q}_i \tilde{q}_j (\tilde{\mathbf{e}}_i, \hat{D}\tilde{\mathbf{e}}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij} \tilde{q}_i \tilde{q}_j$$

Gehe zu neuer Basis  $\mathbf{e}_k = \sum_i a_{ik} \tilde{\mathbf{e}}_i$  über

$$(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_{k'}) = \sum_{i,j} a_{ik} a_{jk'} (\tilde{\mathbf{e}}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j) = \sum_i a_{ik} a_{ik'} = \delta_{k,k'}.$$

In dieser neuen Basis

$$\mathbf{q} = \sum_{i=1}^{3N} \tilde{q}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_{i,j,k} a_{ij} \tilde{q}_j a_{ik} \mathbf{e}_k = \sum_k Q_k \mathbf{e}_k.$$

$Q_k$  ist die "Normalkoordinate". Umkehrtransformation  $\tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_k a_{ik} \mathbf{e}_k$ , folgt

$$\boxed{\hat{D}\mathbf{e}_p = \sum_i a_{ip} \hat{D}\tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_{i,j} a_{ip} D_{ji} \tilde{\mathbf{e}}_j = \sum_{i,j} a_{ip} \delta_{ij} \omega_p^2 \tilde{\mathbf{e}}_j = \omega_p^2 \mathbf{e}_p}$$

Betrachte nun eine Symmetrieoperation  $G_a$ , die die kinetische und potentielle Energie invariant lässt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{q} &\rightarrow \mathbf{q}' = \hat{T}(G_a)\mathbf{q} \\
\tilde{\mathbf{e}}_i &\rightarrow \tilde{\mathbf{e}}'_i = \sum_j T_{ji}(G_a) \tilde{\mathbf{e}}_j
\end{aligned}$$

$$\sum_i M \mathbf{q}_i^2 = (\mathbf{q}, \mathbf{q}) = (\mathbf{q}', \mathbf{q}') = (\mathbf{q}, \hat{T}^\dagger \hat{T} \mathbf{q})$$

i.e.  $\hat{T}$  unitär. Das gleiche gilt für  $\dot{q}$ .

$$V(q) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}, \hat{D}\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{q}', \hat{D}\mathbf{q}') = \frac{1}{2}(\mathbf{q}, \hat{T}^{-1} \hat{D} \hat{T} \mathbf{q})$$

i.e.  $\boxed{\hat{D} = \hat{T}^{-1} \hat{D} \hat{T}}$ , d.h.  $\hat{D}$  kommutiert mit  $\hat{\mathcal{H}}$ .

- (i) Ist  $\mathbf{e}_p$  eine Normal-Auslenkung zur Frequenz  $\omega_p$ , dann ist auch  $\mathbf{e}'_p = \hat{T}(G_a)\mathbf{e}_p$  eine Normal-Auslenkung zur selben Frequenz, denn

$$\hat{D}\mathbf{e}'_p = \hat{D}\hat{T}\mathbf{e}_p = \hat{T}\hat{D}\mathbf{e}_p = \omega_p^2\hat{T}\mathbf{e}_p = \mathbf{e}'_p\omega_p^2.$$

- (ii) Der Satz der Normal-Auslenkungen zur gleichen Frequenz bildet eine Darstellung der Symmetrie-Gruppe.
- (iii) Schließt man eine zufällige Entartung aus, dann sind diese Darstellungen irreduzibel und haben die Dimension  $s_\alpha$ .

Unterschied zum Schrödingerproblem: Gesamtzahl der Moden ist  $3N$ , Gesamtzahl der Eigenfunktionen ist  $\infty$ .

- (i) Sind **alle**  $\omega_p$  **verschieden**, dann ist  $T_{pp'}(G_a)$  diagonal  $\forall G_a$ , i.e. Darstellung  $T_{pp'}$  ist in eindimensionale irreduzible Darstellungen zerlegbar.
- (ii) Sind **einige**  $\omega_p$  **gleich**:  $\omega_{p_1}^2 = \omega_{p_2}^2 = \dots = \omega_{p_s}^2$ , dann  $T_{pp'}(G_a)$  für  $p_1 \leq p, p' \leq p_s$  i.a. von Null verschieden:
- (a)  $\exists$  kein Symmetriegrad für Entartung (zufällige Entartung) der Schwingungsfrequenzen  $\rightarrow$  durch Wahl geeigneter  $\mathbf{e}_p$  weitere Diagonalisierung möglich.
- (b) Entartung nicht zufällig, dann keine weitere Diagonalisierung für alle  $T_{pp'}(G_a)$  möglich.  $\rightarrow$  Durch Ausreduktion von  $\tilde{T}$  sind die Anzahl der verschiedenen Eigenfrequenzen zu ermitteln.

**Klassifikation der Normalmoden:** Der  $3N$ -dimensionale Raum aller möglichen Verschiebungen liefert eine i.a. reduzible Darstellung  $\tilde{T}^{(3N)}$  der Symmetriegruppe. Zerlege jetzt diesen Raum in Unterräume, die durch  $\mathbf{e}_p$  zur gleichen Frequenz aufgespannt werden.

$$\tilde{T}^{(3N)} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} T^{(\alpha)}.$$

Ist  $m_{\alpha} > 1$ , dann  $\exists m_{\alpha}$  verschiedene Frequenzen, für jede  $\exists$  ein Satz von  $s_{\alpha}$  Vektoren  $\mathbf{e}_p^{(\alpha)}$

$$m_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(3N)} \chi_p^{(\alpha)*}$$

$\chi_p^{(\alpha)}$  schon bekannt, wenn  $\mathcal{G}$  bekannt.  $\chi_p^{(3N)}$  ?





Symmetriegruppe: Rotation um feste Achse um  $\theta = 2\pi/n$  + Spiegelungen.

Eigentliche Drehung um  $z$ -Achse um Winkel  $\theta$ : "Vektordarstellung"

$$\hat{T}(R)\mathbf{e}_x = \mathbf{e}_x \cos \theta + \mathbf{e}_y \sin \theta$$

$$\hat{T}(R)\mathbf{e}_y = -\mathbf{e}_x \sin \theta + \mathbf{e}_y \cos \theta$$

$$\hat{T}(R)\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z$$

Da die Spur unabhängig von der Basis ist, gilt  $\chi = 2 \cos \theta + 1$  für alle eigentliche Drehung. Sind unter der eigentlichen Drehungen  $R(\theta)$   $N_{R(\theta)}$  Atome unbewegt, dann ist der Charakter  $\chi^{(3N)}(R(\theta)) = N_{R(\theta)}(2 \cos \theta + 1)$ . Bei einer **uneigentlichen Drehung** geht zusätzlich  $z \rightarrow -z$  über:  $\sigma_h R(\theta) = S(\theta)$  (Drehspiegelung).  $\rightarrow \chi = 2 \cos \theta - 1$ . Damit sind die  $m_\alpha$  bestimmbar.

Eliminiere zunächst alle Moden mit Frequenz Null: das sind Verschiebungen, die der **Translation + Rotation des Gesamtmoleküls** entsprechen.

$$\chi_{\text{trans}}(R(\theta)) = 2 \cos \theta + 1$$

$$\chi_{\text{trans}}(S(\theta)) = 2 \cos \theta - 1$$

Die Rotationsmoden transformieren sich wie ein Vektor unter einer Rotation, aber sie verhalten sich gerade unter der Inversion, d.h. sie bilden einen Pseudovektor (axialer Vektor).  $S(\theta) = \sigma_h R(\theta) = IC_2 R(\theta) = IR(\theta + \pi)$

Unter Inversion ändern  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{a}$  das Vorzeichen  $\rightarrow \mathbf{a}' \times \mathbf{r}' = \mathbf{a} \times \mathbf{r}$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{d} = \mathbf{d}(\mathbf{r}) = \mathbf{a} \times \mathbf{r} & \xrightarrow{\hat{R}(\theta)} \mathbf{d}' = \hat{R}(\mathbf{a} \times \hat{R}^{-1}\mathbf{r}) = \hat{R}\mathbf{a} \times \mathbf{r} \\ & \xrightarrow{\hat{I}} \mathbf{d}'(\mathbf{r}) = \hat{I}(\mathbf{a} \times \hat{I}\mathbf{r}) = \mathbf{a} \times \mathbf{r} \end{aligned}$$

Unter Rotation verhält sich  $\mathbf{d}$  wie ein Vektor, unter eigentlichen Drehungen

$$\rightarrow \chi_{\text{rot}}(R(\theta)) = (2 \cos \theta + 1)$$

$$\rightarrow \chi_{\text{rot}}(S(\theta)) = -(2 \cos \theta - 1)$$

$\rightarrow \mathbf{d}$  ist ein Pseudovektor.

Plausibel machen: bei Drehungen wie poli-Vektor bei Inversion:  $\mathbf{a} \rightarrow -\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  ungeändert.

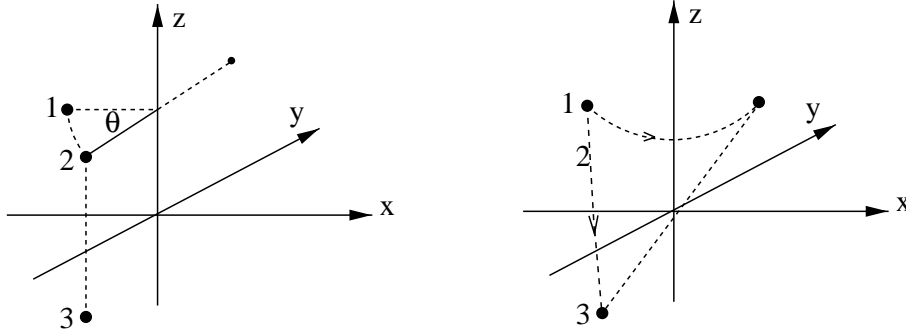
**Ergänzung:** Uneigentliche Drehung = Drehspiegelung  $S(\theta) =$  Drehung um Winkel  $\theta$  um  $z$ -Achse + Spiegelung an  $xy$ -Ebene.

Transformation polarer Vektoren

$$\underline{\underline{T}}(S(\theta)) = \underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \chi = -1 + 2 \cos \theta.$$

Der Vektor  $\mathbf{d}$ , der die **Rotation** des Gesamtmoleküls beschreibt, ändert sich bei Inversion des Koordinatensystems nicht. Nun gilt

$$S(\theta) = \sigma_h C(\theta) = IC_2 C(\theta) = IC(\theta + \pi).$$



Transformation axialer Vektoren (keine Änderung unter Inversion)

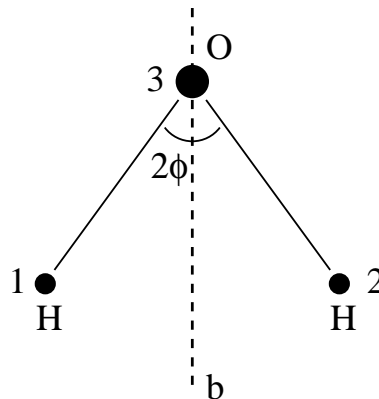
$$\underline{T}(S(\theta)) = \begin{pmatrix} \cos(\theta + \pi) & -\sin(\theta + \pi) & 0 \\ \sin(\theta + \pi) & \cos(\theta + \pi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \chi = 1 - 2 \cos \theta.$$

Damit erhalten wir für die Vibrationsmoden

$$\begin{aligned} \chi_{\text{vib}} &= \chi^{(3N)} - \chi_{\text{trans}} - \chi_{\text{rot}} \\ \chi_{\text{vib}}(R(\theta)) &= (N_{R(\theta)} - 2)(2 \cos \theta + 1) \\ \chi_{\text{vib}}(S(\theta)) &= N_{S(\theta)}(2 \cos \theta - 1) \end{aligned}$$

Man kann sich jetzt vorstellen, die Translationen + Rotationen des Moleküls als Ganzen ... zu haben, es bleiben dann die inneren Freiheitsgraden übrig. Die immer noch reduzierbare Darstellungen in diesem Unterraum reduzieren wir jetzt aus.

**Beispiel:** H<sub>2</sub>O-Molekül



Symmetriegruppe  $C_{2v}$ :  $E$ ;  $C_2$  Rotation um  $b$  um  $\pi$ ;  $\sigma_v$  Reflexion in Molekülebene;  
 $\sigma'_v$  Reflexion an Ebene senkrecht zur Molekülebene durch  $b$ .

$$E(\text{eigentliche Drehung um } \theta = 0, N_E = 3) \quad \chi_{\text{vib}}(E) = (3 - 2)(2 \cos 0 + 1) = 3$$

$$C_2(\text{eigentliche Drehung um } \theta = \pi, N_{C_2} = 1) \quad \chi_{\text{vib}}(C_2) = (1 - 2)(2 \cos \pi + 1) = 1$$

$$\sigma_v(\text{uneigentliche Drehung um } \theta = 0, N_{\sigma_v} = 3) \quad \chi_{\text{vib}}(\sigma_v) = 3(2 \cos 0 - 1) = 3$$

$$\sigma'_v(\text{uneigentliche Drehung um } \theta = 0, N_{\sigma'_v} = 1) \quad \chi_{\text{vib}}(\sigma'_v) = 1(2 \cos 0 - 1) = 1$$

→ alle  $\omega_p$  verschieden!

| Charaktertafel        |     |       |            |             |  |
|-----------------------|-----|-------|------------|-------------|--|
| $C_{2v}$              | $E$ | $C_2$ | $\sigma_v$ | $\sigma'_v$ |  |
| $A_1$                 | 1   | 1     | 1          | 1           | $m_1 = \frac{1}{4}(3 + 1 + 3 + 1) = 2$         |
| $A_2$                 | 1   | 1     | -1         | -1          | $m_2 = \frac{1}{4}(3 + 1 - 3 - 1) = 0$         |
| $B_1$                 | 1   | -1    | 1          | -1          | $m_3 = \frac{1}{4}(3 - 1 + 3 - 1) = 1$         |
| $B_2$                 | 1   | -1    | -1         | 1           | $m_4 = \frac{1}{4}(3 - 1 - 3 + 1) = 0$         |
| $\chi_{\text{vib}}$   | 3   | 1     | 3          | 1           | $\tilde{T}^{(\text{vib})} = 2A_1 + 1B_1$       |
| $\chi_{\text{rot}}$   | 3   | -1    | -1         | -1          | $\tilde{T}^{(\text{rot})} = A_2 + B_1 + B_2$   |
| $\chi_{\text{trans}}$ | 3   | -1    | 1          | 1           | $\tilde{T}^{(\text{trans})} = A_1 + B_1 + B_2$ |
| $\chi^{(3N)}$         | 9   | -1    | 3          | 1           | $\tilde{T}^{(3N)} = 3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$  |

Alle Darstellungen eindimensional → keine Entartung der Schwingungsfrequenzen.

In der **reduziblen** Darstellung  $T^{(9)}$  sind die Darstellungen  $B_1$  einmal und  $A_1$  zweimal enthalten.

**Fazit:**  $\tilde{T}^{(3N)} = \underbrace{(A_1 + B_1 + B_2)}_{\text{Translation}} + \underbrace{(A_2 + B_1 + B_2)}_{\text{Rotation}} + (2A_1 + B_1) \rightarrow$  keine Entartung der Schwingungsfrequenzen.

**Hauptachsentransformation:** Berechnung der Transformationsmatrix:

$\underline{a} = (a_{ik})$  ohne Kenntnis der Kraftmatrix  $D_{ij}$  (soweit möglich!).

$$Q_p = \sum_i a_{ip} \tilde{q}_i = \sum_{t=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} a_{t,\alpha;p} q_{t,\alpha} \sqrt{M_t}$$

**Normierung:** wegen Orthogonalität der Transformation  $\sum_i a_{ik} a_{ip} = \delta_{kp}$ .

**1. Translationen des Schwerpunkts:**  $Q_{p=1,2,3}$

$$Q_\alpha = \sum_{t=1}^N \sqrt{m_t} \tilde{q}_{t,\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3$$

$$Q_1 = \mathcal{N}_1 \sum_{t=1}^N M_t q_{t,x} = \mathcal{N}_1 \sum_{t=1}^N \sqrt{M_t} \tilde{q}_{t,x}, \quad a_{t,\alpha;1} = \mathcal{N}_1 \sqrt{M_t} \delta_{\alpha,x}$$

$$\mathcal{N}_1^2 \left( \sum_{t=1}^N M_t \right) = 1 \quad \rightarrow \quad \mathcal{N}_1 = \frac{1}{\sqrt{M}}, \quad \boxed{M = \sum_{t=1}^N M_t, \quad m_t = \frac{M_t}{M}}$$

$$\rightarrow a_{t,\alpha;1} = \sqrt{\frac{M_t}{M}} \delta_{\alpha,x}$$

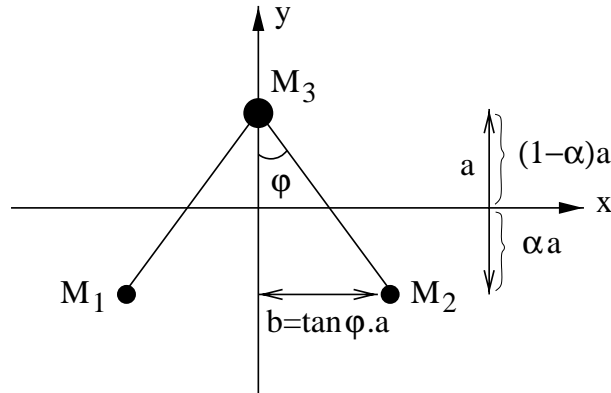
$Q_2, Q_3$  analog:

$$Q_2 = \sum_{t=1}^N \sqrt{\frac{M_t}{M}} \tilde{q}_{t,y}; \quad Q_3 = \sum_{t=1}^N \sqrt{\frac{M_t}{M}} \tilde{q}_{t,z}.$$

**2. Rotationen um den Schwerpunkt:**

$$\boxed{Q_{\alpha+3} = \sum_{t=1}^N \sqrt{\frac{M_t}{I_\alpha}} (\mathbf{R}_t^0 \times \tilde{\mathbf{q}}_t)_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3}$$

Lege Koordinatenursprung in den Schwerpunkt, dann sind die Ruhelagen  $\mathbf{R}_t^0$ .



$$2M_1 a \alpha = (1 - \alpha) a M_3 \quad \rightarrow \quad \alpha = \frac{M_3}{M}; \quad R_{t,z}^0 = 0$$

$$-R_{1,x}^0 = R_{2,x}^0 = a \tan \varphi; \quad R_{1,y}^0 = R_{2,y}^0 = -\frac{M_3}{M} a$$

$$R_{3,x}^0 = 0, \quad R_{3,y}^0 = \frac{2M_1}{M} a$$

Trägheitsmomente:  $I_x = 2M_1 M_3 a^2 / M, \quad I_y = 2M_1 a^2 \tan^2 \varphi, \quad I_z = I_x + I_y$

**Allgemein:**

$$Q_4 = \mathcal{N}_4 \sum_{t=1}^N M_t (R_{t,y}^0 q_{t,z} - R_{t,z}^0 q_{t,y}) = \frac{1}{\sqrt{I_x}} \sum_{t=1}^N M_t^{1/2} (R_{t,y}^0 \tilde{q}_{t,z} - R_{t,z}^0 \tilde{q}_{t,y})$$

Normierung:  $\mathcal{N}_4^2 \sum_{t=1}^N M_t \left( R_{t,y}^0{}^2 + R_{t,z}^0{}^2 \right) = \mathcal{N}_4^2 I_x = 1$ ,  $\mathcal{N}_4 = 1/\sqrt{I_x}$ ,  $I_x$  Trägheitsmoment bezüglich der  $x$ -Achse.

$$I_\alpha = \sum_{t=1}^N M_t \left( \mathbf{R}_t^0{}^2 - R_{t,\alpha}^0{}^2 \right)$$

$$Q_5 = \frac{1}{\sqrt{I_y}} \sum_{t=1}^N M_t^{1/2} \left( R_{t,z}^0 \tilde{q}_{t,x} - R_{t,x}^0 \tilde{q}_{t,z} \right)$$

$$Q_6 = \frac{1}{\sqrt{I_z}} \sum_{t=1}^N M_t^{1/2} \left( R_{t,x}^0 \tilde{q}_{t,y} - R_{t,y}^0 \tilde{q}_{t,x} \right)$$

Damit wird

$$\begin{aligned} Q_4 &= I_x^{-1/2} \left\{ -M_1^{1/2} \frac{M_3}{M} a \tilde{q}_{1,z} - M_1^{1/2} \frac{M_3}{M} a \tilde{q}_{2,z} + M_3^{1/2} \frac{2M_1}{M} a \tilde{q}_{3,z} \right\} \\ &= I_x^{-1/2} \frac{a}{M} (M_1 M_3)^{1/2} \left\{ -M_3^{1/2} \tilde{q}_{1,z} - M_3^{1/2} \tilde{q}_{2,z} + 2M_1^{1/2} \tilde{q}_{3,z} \right\} \\ &= \frac{\sqrt{M} a (M_1 M_2)^{1/2}}{\sqrt{2M_1 M_3 a M}} \left\{ -M_3^{1/2} \tilde{q}_{1,z} - M_3^{1/2} \tilde{q}_{2,z} + 2M_1^{1/2} \tilde{q}_{3,z} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2M}} \left\{ -\sqrt{M_3} (\tilde{q}_{1,z} + \tilde{q}_{2,z}) + 2\sqrt{M_1} \tilde{q}_{3,z} \right\} \\ Q_5 &= I_y^{-1/2} \left\{ +a \tan \varphi M_1^{1/2} (\tilde{q}_{1,z} - \tilde{q}_{2,z}) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{q}_{1,z} - \tilde{q}_{2,z}) \\ Q_6 &= I_z^{-1/2} \left\{ M_1^{1/2} \left( -a \tan \varphi \tilde{q}_{1,y} + \frac{M_3}{M} a \tilde{q}_{1,x} \right) + M_1^{1/2} \left( a \tan \varphi \tilde{q}_{2,y} + \frac{M_3}{M} a \tilde{q}_{2,x} \right) + M_3^{1/2} \left( -\frac{2M_1}{M} a \tilde{q}_{3,x} \right) \right\} \\ &= I_z^{-1/2} a \left\{ \frac{M_1^{1/2} M_3}{M} \tilde{q}_{1,x} - M_1^{1/2} \tan \varphi \tilde{q}_{2,y} + \frac{M_1^{1/2} M_3}{M} \tilde{q}_{2,x} + M_1^{1/2} \tan \varphi \tilde{q}_{2,y} - 2 \frac{M_1 M_3^{1/2}}{M} \tilde{q}_{3,x} \right\} \\ &= a I_z^{-1/2} \frac{\sqrt{M_1 M_3}}{M} \left\{ \sqrt{M_3} (\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) - 2\sqrt{M_1} \tilde{q}_{3,x} + \frac{M}{\sqrt{M_3}} \tan \varphi (\tilde{q}_{2,y} - \tilde{q}_{1,y}) \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + \frac{M}{M_3} \tan^2 \varphi \right)^{-1/2} \left\{ \sqrt{\frac{M_3}{M}} (\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) - 2\sqrt{\frac{M_1}{M}} \tilde{q}_{3,x} + \sqrt{\frac{M}{M_3}} \tan^2 \varphi (\tilde{q}_{2,y} - \tilde{q}_{1,y}) \right\}, \end{aligned}$$

Bei der letzten Reihe benutzen wir

$$a I_z^{-1/2} \frac{(M_1 M_3)^{1/2}}{M} = \frac{a (M_1 M_3)^{1/2} \sqrt{M}}{M^{1/2} (2M_1 M_3 a^2 + 2M_1 \frac{M}{M_3} a^2 \tan^2 \varphi)^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2} (1 + M \tan^2 \varphi / M_3) M^{1/2}}.$$

Damit sind die 3 Rotationsfreiheitsgrade mit  $p = 4, 5, 6$  bestimmt:

$$\begin{aligned} Q_4 &= -\sqrt{\frac{m_3}{2}} (\tilde{q}_{1,z} + \tilde{q}_{2,z}) + \sqrt{2m_1} \tilde{q}_{3,z} \\ Q_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{q}_{1,z} - \tilde{q}_{2,z}) \\ Q_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \tan^2 \varphi / m_3)^{-1/2} \left\{ \sqrt{m_3} (\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) - 2\sqrt{m_1} \tilde{q}_{3,x} + \frac{\tan \varphi}{\sqrt{m_3}} (\tilde{q}_{2,y} - \tilde{q}_{1,y}) \right\} \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der **Schwingungsfreiheitsgrade** ist es sinnvoll, die Projektionen von  $\mathbf{q} = \sum_{i=1}^{3N} \tilde{q}_i \tilde{\mathbf{e}}_i$  in den Unterraum  $L_\alpha$  zu betrachten, der von den Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_p \equiv \mathbf{e}_i^{\alpha,t}$ ,  $t = 1 \dots m_\alpha$ ,  $i = 1 \dots s_\alpha$ , aufgespannt wird.

**Zur Notation:** In der alten Basis  $\tilde{\mathbf{e}}_i$  war  $i$  ein Indexpaar  $i = (t, \alpha)$   $t = 1 \dots N$  (Zahl der Atome),  $\alpha = x, y, z$  und damit  $i = 1 \dots 3N$ . In der neuen Basis  $\mathbf{e}_p$  ist  $p$  ein Indextripel  $p = (\alpha, t, i)$   $\alpha = 1 \dots n$  numeriert die irreduziblen Darstellungen,  $t = 1 \dots m_\alpha$  numeriert die gleichen irreduziblen Darstellungen wenn sie mehr als ein mal auftreten,  $i = 1 \dots s_\alpha$  numeriert die Reihe/Spalte in einer irreduzible Darstellung.  
 $\sum_{\alpha=1}^n \sum_{t=1}^{m_\alpha} \sum_{i=1}^{s_\alpha} 1 = 3N$ .

Die Anwendung des in 2.12 eingeführten Projektionsoperator

$$\hat{P}^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)*}(G_a) \hat{T}(G_a)$$

auf  $\mathbf{q}$  führt zu

$$\hat{P}^{(\alpha)} \mathbf{q} = \hat{P}^{(\alpha)} \sum_{i=1}^{3N} \tilde{q}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \hat{P}^{(\alpha)} \sum_{p=1}^{3N} Q_p \mathbf{e}_p = \sum_{t=1}^{m_\alpha} \sum_{i=1}^{s_\alpha} Q_{\alpha,t,i} \mathbf{e}_i^{\alpha,t}.$$

Enthält die rechte Seite nur einen Term ( $m_\alpha = s_\alpha = 1$ ), dann ist durch Berechnung der linken Seite  $Q_p$  als Linearkombination der  $\tilde{q}_i$  bestimmt. Enthält die rechte Seite mehr Terme, kann man zusätzliche Information aus der Orthogonalität der Zeilen und Spalten der Matrix  $(a_{ip})$  entnehmen, sowie aus der Kenntnis der  $Q_1 \dots Q_6$ . Im Fall des  $\text{H}_2\text{O}$  Moleküls haben wir 4 eindimensionale Darstellungen mit den Häufigkeiten  $m_1 = 1 + 0 + 2$ ,  $m_2 = 0 + 1 + 0$ ,  $m_3 = 1 + 1 + 1$ ,  $m_4 = 1 + 1 + 0$ .

Zur Bestimmung der Projektionen von  $\mathbf{q}$  benötigen wir die **Operatoren**  $\hat{T}(G_a)$  in der **totalen Darstellung**  $\underline{\underline{\hat{T}}}$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{i,j} &= \tilde{T}_{t,\alpha;t',\alpha'} = t_{\alpha,\alpha'} \times P_{t,t'} \\ \underline{\underline{t}}(e) &= \underline{\underline{E}}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{t}}(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \underline{\underline{t}}_1 \quad 3 \times 3 \text{ Matrizen} \\ \underline{\underline{t}}(\sigma_\nu) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \underline{\underline{t}}_2, \quad \underline{\underline{t}}(\sigma'_\nu) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \equiv \underline{\underline{t}}_3 \\ \underline{\underline{\hat{T}}}(e) &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{E}}_3 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{E}}_3 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\underline{E}}_3 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\hat{T}}}(C_2) = \begin{pmatrix} 0 & \underline{\underline{t}}_1 & 0 \\ \underline{\underline{t}}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\underline{t}}_1 \end{pmatrix} \quad 9 \times 9 \text{ Matrizen} \\ \underline{\underline{\hat{T}}}(\sigma_\nu) &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{t}}_2 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{t}}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\underline{t}}_2 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\hat{T}}}(\sigma'_\nu) = \begin{pmatrix} 0 & \underline{\underline{t}}_3 & 0 \\ \underline{\underline{t}}_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\underline{t}}_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wir kommen nun zur Bestimmung der Projektionsoperatoren:  $s_\alpha = 1$ ,  $g = 4$

$$\begin{aligned}
4\underline{P}^{(1)} &= \sum_{a=1}^4 \chi^{(1)*}(G_a) \tilde{\underline{T}}(G_a) = \begin{pmatrix} \underline{E}_3 + \underline{t}_2 & \underline{t}_1 + \underline{t}_3 & 0 \\ \underline{t}_1 + \underline{t}_3 & \underline{E}_3 + \underline{t}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{E}_3 + \underline{t}_1 + \underline{t}_2 + \underline{t}_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \underline{P}^{(1)} \mathbf{q} = \begin{pmatrix} (1/2)(\tilde{q}_{1,x} - \tilde{q}_{2,x}) \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,y} + \tilde{q}_{2,y}) \\ 0 \\ -(1/2)(\tilde{q}_{1,x} - \tilde{q}_{2,x}) \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,y} + \tilde{q}_{2,y}) \\ 0 \\ 0 \\ \tilde{q}_{3,y} \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Hieraus lesen wir ab (2 Schwingungen und 1 Translation transformieren sich nach  $A_1$ )

$$\frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,x} - \tilde{q}_{2,x})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,x} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,x}) + \frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,y} + \tilde{q}_{2,y})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,y} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,y}) + \tilde{q}_{3,y} \tilde{\mathbf{e}}_{3,y} = Q_2 \mathbf{e}_2 + Q_7 \mathbf{e}_7 + Q_8 \mathbf{e}_8$$

Zur Darstellung  $A_2$  gehört der Projektionsoperator  $\hat{P}^{(2)}$

$$\begin{aligned}
4\underline{P}^{(2)} &= \tilde{\underline{T}}(e) + \tilde{\underline{T}}(C_2) - \tilde{\underline{T}}(\sigma_\nu) - \tilde{\underline{T}}(\sigma'_\nu) = \begin{pmatrix} \underline{E}_3 - \underline{t}_2 & \underline{t}_1 - \underline{t}_3 & 0 \\ \underline{t}_1 - \underline{t}_3 & \underline{E}_3 - \underline{t}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{E}_3 + \underline{t}_1 - \underline{t}_2 - \underline{t}_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \underline{P}^{(2)} \mathbf{q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,z} - \tilde{q}_{2,z}) \\ 0 \\ 0 \\ (1/2)(\tilde{q}_{2,z} + \tilde{q}_{1,z}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\rightarrow \frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,z} - \tilde{q}_{2,z})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,z} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,z}) = Q_5 \mathbf{e}_5,
\end{aligned}$$

$A_2$  tritt nur einmal auf, da sich nach  $A_2$  nur eine Rotation transformiert.

Zur Darstellung  $B_1$  gehört  $\hat{P}^{(3)}$  (enthält 1 Translation, 1 Rotation, 1 Schwingung)

$$\begin{aligned}
4\underline{P}^{(3)} &= \tilde{\underline{T}}(e) - \tilde{\underline{T}}(C_2) + \tilde{\underline{T}}(\sigma_\nu) - \tilde{\underline{T}}(\sigma'_\nu) = \begin{pmatrix} \underline{E}_3 + \underline{t}_2 & -\underline{t}_1 - \underline{t}_3 & 0 \\ -\underline{t}_1 - \underline{t}_3 & \underline{E}_3 + \underline{t}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{E}_3 + \underline{t}_2 - \underline{t}_1 - \underline{t}_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \underline{P}^{(3)} \mathbf{q} = \begin{pmatrix} (1/2)(\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y}) \\ 0 \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) \\ (1/2)(\tilde{q}_{2,y} - \tilde{q}_{1,y}) \\ 0 \\ \tilde{q}_{3,x} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,x} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,x}) + \frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,y} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,y}) + \tilde{q}_{3,x}\tilde{\mathbf{e}}_{3,x} \\ = Q_1\mathbf{e}_1 + Q_6\mathbf{e}_6 + Q_9\mathbf{e}_9 \end{aligned}$$

Zur Darstellung  $B_2$  gehört  $\hat{P}^{(3)}$  (enthält eine Translation und 1 Rotation)

$$\begin{aligned} 4\underline{\underline{P}}^{(4)} &= \underline{\underline{T}}(e) - \underline{\underline{T}}(C_2) - \underline{\underline{T}}(\sigma_\nu) + \underline{\underline{T}}(\sigma'_\nu) = \begin{pmatrix} \underline{\underline{E}}_3 - \underline{\underline{t}}_2 & \underline{\underline{t}}_3 - \underline{\underline{t}}_1 & 0 \\ \underline{\underline{t}}_3 - \underline{\underline{t}}_1 & \underline{\underline{E}}_3 - \underline{\underline{t}}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\underline{E}}_3 + \underline{\underline{t}}_3 - \underline{\underline{t}}_1 - \underline{\underline{t}}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \underline{\underline{P}}^{(4)}\mathbf{q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,z} + \tilde{q}_{2,z}) \\ 0 \\ (1/2)(\tilde{q}_{1,z} + \tilde{q}_{2,z}) \\ 0 \\ 0 \\ \tilde{q}_{3,z} \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \frac{1}{2}(\tilde{q}_{1,z} + \tilde{q}_{2,z})(\tilde{\mathbf{e}}_{1,z} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,z}) + \tilde{q}_{3,z}\tilde{\mathbf{e}}_{3,z} = Q_3\mathbf{e}_3 + Q_4\mathbf{e}_4 \end{aligned}$$

Die Bestimmung der rechten Seiten, d.h. die Zuordnung der Translationen und Rotationen zu den Koordinaten erfolgt so:

- (i) der Vergleich von  $\hat{P}^{(2)}\mathbf{q}$  mit  $Q_4 - Q_6$  selektiert  $Q_5$ ;
- (ii) der Vergleich von  $\hat{P}^{(4)}\mathbf{q}$  mit  $Q_1 - Q_3$ ,  $Q_4$ ,  $Q_6$  selektiert  $Q_3$ ,  $Q_4$ ;
- (iii) der Vergleich von  $\hat{P}^{(3)}\mathbf{q}$  mit  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $Q_6$  selektiert  $Q_6$  und  $Q_1$ ;
- (iv)  $\hat{P}^{(1)}\mathbf{q}$  enthält  $Q_2$ .

Die Zuordnung von  $Q_7 - Q_9$  zu den Darstellungen  $A_1$  und  $B_1$  ist willkürlich.

### 3.3 Bestimmung der Vibrations-Normalkoordinaten

Aus  $\hat{P}^{(3)}\mathbf{q}$  folgt  $Q_9 = a(\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) + b(\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y}) + c\tilde{q}_{3,x}$ .  $a, b, c$  werden aus der Normierung  $2a^2 + 2b^2 + c^2 = 1$  sowie aus der Orthogonalität zu anderen NK bestimmt.

$$\text{Orthogonalität zu } Q_1: 2a\sqrt{m_1} + c\sqrt{m_3} = 0$$

$$\text{Orthogonalität zu } Q_6: \mathcal{N} \left[ 2a\sqrt{m_3} - 2b\frac{\tan\phi}{\sqrt{m_3}} - 2\sqrt{m_1}c \right] = 0.$$

$$\text{Lösung } a = -\mathcal{N} \tan\phi, \quad b = -\mathcal{N}, \quad c = 2\sqrt{\frac{m_1}{m_3}} \tan\phi \mathcal{N}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_9 &= \mathcal{N} \left\{ -\tan\phi(\tilde{\mathbf{e}}_{1,x} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,x}) - (\tilde{\mathbf{e}}_{1,y} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,y}) + 2\sqrt{\frac{m_1}{m_3}} \tan\phi \tilde{\mathbf{e}}_{3,x} \right\} \\ Q_9 &= \mathcal{N} \left\{ \tan\phi \left[ 2\sqrt{\frac{m_1}{m_3}} \tilde{q}_{3,x} - (\tilde{q}_{1,x} + \tilde{q}_{2,x}) \right] - (\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y}) \right\} \end{aligned}$$



$Q_7, Q_8$ : Aus  $\hat{P}^{(1)}(\mathbf{q})$  folgt der Ansatz

$$Q_7 = a(\tilde{q}_{1,x} - \tilde{q}_{2,x}) + b(\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y}) + c\tilde{q}_{3,y}$$

$$Q_8 = \bar{a}(\tilde{q}_{1,x} - \tilde{q}_{2,x}) + \bar{b}(\tilde{q}_{1,y} - \tilde{q}_{2,y}) + \bar{c}\tilde{q}_{3,y}$$

Normierung:

$$2(a^2 + b^2) + c^2 = 1 \quad (3.2)$$

$$2(\bar{a}^2 + \bar{b}^2) + \bar{c}^2 = 1 \quad (3.3)$$

Orthogonalität: ist zu  $Q_1, Q_3, Q_4, Q_5, Q_6, Q_9$  trivial erfüllt.

Zu  $Q_2$ :

$$2b\sqrt{m_1} + c\sqrt{m_3} = 0 \quad (3.4)$$

$$2\bar{b}\sqrt{m_1} + \bar{c}\sqrt{m_3} = 0 \quad (3.5)$$

Zwischen  $Q_7, Q_8$ :

$$2(a\bar{a} + b\bar{b}) + c\bar{c} = 0 \quad (3.6)$$

Mehr Relationen stehen nicht zur Verfügung! 6 Konstanten, 5 Relationen  $\rightarrow$  1 Konstante bleibt unbestimmt!

**Ansatz:**

$$a = a_0 \cos \alpha, \quad \bar{a} = a_0 \sin \alpha$$

$$b = b_0 \sin \alpha, \quad \bar{b} = -b_0 \cos \alpha$$

Aus (3.4) folgt  $c = -2b\sqrt{\frac{m_1}{m_3}}$ , aus (3.5) folgt  $\bar{c} = -2\bar{b}\sqrt{\frac{m_1}{m_3}}$ . Wenn man dieses Resultat und den Ansatz in (3.6) benutzt folgt  $a_0^2 = b_0^2(1 + 2\frac{m_1}{m_3})$ .

$$\begin{aligned} 1 &= 2(a_0^2 \cos^2 \alpha + b_0^2 \sin^2 \alpha) + 4b_0^2 \sin^2 \alpha \frac{m_1}{m_3} \\ &= 2b_0^2 \left( \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right) \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right) \right) = 2b_0^2 \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right) \\ b_0 &= \left(2 \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right)\right)^{-1/2} \\ a_0^2 &= \left(2 \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right)\right)^{-1} \left(1 + 2\frac{m_1}{m_3}\right) = \frac{1}{2} \\ a_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b_0 = \frac{1}{\sqrt{2(1 + 2m_1/m_3)}} = -\sqrt{\frac{m_3}{2}} \end{aligned}$$

Damit ist die Matrix  $\underline{a} = (a_{ip}) = (a_{t,\alpha;p})$  bis auf den Winkel  $\alpha$  bestimmt:

$$\underline{a} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{m_3}\mathcal{N} & \cos\alpha/\sqrt{2} & \sin\alpha/\sqrt{2} & -\tan\varphi\mathcal{N} \\ 0 & \sqrt{m_1} & 0 & 0 & 0 & -\tan\varphi\mathcal{N}/\sqrt{m_3} & \sin\alpha/(2/m_3)^{1/2} & -\cos\alpha/(2/m_3)^{1/2} & -\mathcal{N} \\ 0 & 0 & \sqrt{m_1} & -\sqrt{m_3}/2 & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{m_3}\mathcal{N} & -\cos\alpha/\sqrt{2} & -\sin\alpha/\sqrt{2} & -\tan\varphi\mathcal{N} \\ 0 & \sqrt{m_1} & 0 & 0 & 0 & \tan\varphi\mathcal{N}/\sqrt{m_3} & \sin\alpha/(2/m_3)^{1/2} & -\cos\alpha/(2/m_3)^{1/2} & \mathcal{N} \\ 0 & 0 & \sqrt{m_1} & -\sqrt{m_3}/2 & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{m_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\sqrt{m_1}\mathcal{N} & 0 & 0 & 2\sqrt{m_1/m_3}\tan\varphi\mathcal{N} \\ 0 & \sqrt{m_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sin\alpha\sqrt{2m_1} & \cos\alpha\sqrt{2m_1} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{m_3} & \sqrt{2m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$m_t = \frac{M_t}{M}, \quad M = \sum M_t$$

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + \frac{\tan^2\varphi}{m_3} \right)^{-1/2}$$

$$\mathbf{e}_7 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos\alpha (\tilde{\mathbf{e}}_{1,x} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,x}) + \sin\alpha \sqrt{\frac{m_3}{2}} (\tilde{\mathbf{e}}_{1,y} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,y}) - \sin\alpha \sqrt{2m_1} \tilde{\mathbf{e}}_{3,y}$$

$$\mathbf{e}_8 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\alpha (\tilde{\mathbf{e}}_{1,x} - \tilde{\mathbf{e}}_{2,x}) + (-\cos\alpha) \sqrt{\frac{m_3}{2}} (\tilde{\mathbf{e}}_{1,y} + \tilde{\mathbf{e}}_{2,y}) + \cos\alpha \sqrt{2m_1} \tilde{\mathbf{e}}_{3,y}$$

Damit Reduktion von 45  $(3N(3N+1)/2)$  Kraftkonstanten auf 4. Nach Elimination von Translation und Rotation bleiben allerdings nur 6, d.h. Symmetrie liefert nur Reduktion um 2.

Die potentielle Energie ist  $V = v_9 Q_9^2 + v_7 Q_7^2 + v_8 Q_8^2 + v_{78} Q_7 Q_8$ .

## E I N S C H U B

### Beispiele:

Betrachte die Gruppen  $C_3$ ,  $D_3$ ,  $S_2$ ,  $R_2 = \text{SO}(2)$ .

Sei  $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ .

$\nabla^2 = \nabla'^2$  unter Rotationen (siehe 2.14), da alle obigen Gruppenelemente Spezialfälle von Rotationen sind, bleibt die kinetische Energie invariant. Wir betrachten jetzt Fälle, wo die potentielle Energie ebenfalls invariant ist (unter einer der Symmetriegruppen).

1.)  $C_3$ :  $C_3 = e, R_1, R_2 = R_1^2 \sim$  Rotationen um die  $z$ -Achse um  $120^\circ$ ,  $C_3$  ist eine zyklische, abelsche Gruppe  $\rightarrow$  die Darstellungen sind 1-dimensional

$$\tau^{(\alpha)}(R_1) = e^{2\pi(\alpha-1)i/3}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad \text{z.B. } \tau^{(2)}(R_1)\tau^{(2)}(R_1) = \tau^{(2)}(R_2)$$

### Charaktertafel:

| $C_3$        | $e$ | $R_1$          | $R_2$          |
|--------------|-----|----------------|----------------|
| $\tau^{(1)}$ | 1   | 1              | 1              |
| $\tau^{(2)}$ | 1   | $e^{2\pi i/3}$ | $e^{4\pi i/3}$ |
| $\tau^{(3)}$ | 1   | $e^{4\pi i/3}$ | $e^{2\pi i/3}$ |

→ Die Eigenzustände sind nicht entartet, werden durch  $\alpha$  numeriert und haben die Eigenschaft

$$\hat{T}(R_1)\psi^{(\alpha)} = e^{2\pi(\alpha-1)i/3}\psi^{(\alpha)}(\phi) = \psi^{(\alpha)}\left(\phi - \frac{2\pi}{3}\right),$$

$\phi$  Polarkoordinatenwinkel. Man kann deshalb auch

$$\psi^{(\alpha)}(\phi) = u_\alpha(\phi)e^{-i(\alpha-1)\phi}$$

schreiben mit  $u_\alpha(\phi - \frac{2\pi}{3}) = u_\alpha(\phi)$ , d.h. man muß  $\psi^{(\alpha)}(\phi)$  nur für  $0 \leq \phi < \frac{2\pi}{3}$  kennen.

Auswahlregeln für dipole Übergänge  $\hat{S} = -eE_j x_j$

$j = z$ :  $ez$  ist invariant unter der Symmetriegruppe und gehört zur identischen Darstellung  $\tau^{(1)}$ . Wigner-Eckart-Theorem:  $\tau^{(1)} \times \tau^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} \rightarrow \exists$  in diesem Fall nur Übergänge ( $\psi^{(\beta)}, ez\psi^{(\alpha)}$ ) mit  $\beta = \alpha$ .

D.h. eine in  $z$ -Richtung polarisierte Lichtwelle kann nur Übergänge zwischen Zuständen mit dem gleichem Index  $\alpha$  hervorrufen. Ist das Licht dagegen in der  $XY$ -Ebene polarisiert, gilt  $z = r \cos \theta$ ,

$$\begin{aligned} x \pm iy &= r \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad \text{in Kugelkoordinaten} \\ \hat{x} &= \frac{1}{2}r \sin \theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ \hat{y} &= \frac{1}{2i}r \sin \theta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) \end{aligned}$$

$\tau^{(1)}$  läßt  $x, y$  unverändert,  $\tau^{(2)}, \tau^{(3)}$  hingegen nicht.

$$\begin{aligned} \hat{x}' &= \cos \left[ \frac{2\pi}{3}(\alpha - 1) \right] \hat{x} + \sin \left[ \frac{2\pi}{3}(\alpha - 1) \right] \hat{y} \\ \hat{y}' &= -\sin \left[ \frac{2\pi}{3}(\alpha - 1) \right] \hat{x} + \cos \left[ \frac{2\pi}{3}(\alpha - 1) \right] \hat{y} \end{aligned} \quad (3.7)$$

$\alpha = 2, 3$ . (3.7) reduzible Darstellung, läßt sich in  $\tau^{(2)}$  und  $\tau^{(3)}$  ausreduzieren.

Damit folgt: der Dipoloperator in der  $x$ - $y$ -Ebene enthält Anteile, die sich nach  $\tau^{(2)}$  bzw.  $\tau^{(3)}$  transformieren  $\rightarrow (1) \leftrightarrow (2), (1) \leftrightarrow (3)$  und  $(2) \leftrightarrow (3)$  möglich (siehe Wigner-Eckert-Theorem).

2.)  $D_3$ : 3 Klassen  $\rightarrow$  es existieren 3 irreduzible Darstellungen.

→ Eigenzustände sind entweder 2-fach entartet ( $\alpha = 3$ ) oder nicht entartet ( $\alpha = 1, 2$ ).

$\psi^{(1)}$  ist invariant unter allen Gruppentransformationen.

$\psi^{(2)}$  ist invariant unter  $R_1, R_2$  aber ändert Vorzeichen unter  $R_3, R_4, R_5$ .

$\psi_1^{(3)}, \psi_2^{(3)}$  werden i.a. unter den Gruppentransformationen gemischt.

Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge  $\hat{O} = e\hat{x}$ ,  $\hat{O}$  transformiert sich nach der treuen Darstellung.

(i) Man kann jede Rotation als Rotation um eine Achse (sagen wir  $z$ ) darstellen.

Der Charakter ist dann  $\chi_0 = 2 \cos \theta + 1$ , denn

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta$$

$$y' = -x \sin \theta + y \cos \theta$$

$$z' = z$$

Da die Spur unabhängig von der Basis ist, ist dies auch die Spur für jede andere Achse (bei Rotation um Winkel  $\theta$ ).

(ii) **Charaktertafel:**

| $D_3$   | $\tau_1(e)$ | $\tau_2(R_1, R_2)$                | $\tau_3(R_3, R_4, R_5)$ | Ausreduktion   |
|---|-------------|-----------------------------------|-------------------------|--|
| $T^{(1)}$   | 1           | 1                                 | 1                       | $m_\gamma = \frac{1}{9} \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\gamma)*}$                       |
| $T^{(2)}$   | 1           | 1                                 | -1                      |  |
| $\hat{T}^{(3)}$   | 2           | -1                                | 0                       |  |
| $\hat{O} = \hat{T}^{(2)} + \hat{T}^{(3)}$<br>(treue Darstellung)                | 3           | $(2 \cos \frac{2\pi}{3} + 1) = 0$ | $(2 \cos \pi + 1) = -1$ | $m_1 = \frac{1}{6}(3 - 3) = 0$<br>$m_2 = \frac{1}{6}(3 + 3) = 1$<br>$m_3 = \frac{1}{6}(6) = 1$ |
| $\hat{O} \times \hat{T}^{(1)} = \hat{T}^{(2)} + \hat{T}^{(3)}$                  | 3           | 0                                 | -1                      | $m_1 = \frac{1}{6}(3 - 3) = 0$<br>$m_2 = 1$<br>$m_3 = 1$                                       |
| $\hat{O} \times \hat{T}^{(2)} = \hat{T}^{(1)} + \hat{T}^{(3)}$                  | 3           | 0                                 | 1                       | $m_1 = \frac{1}{6}(3 + 3) = 1$<br>$m_2 = \frac{1}{6}(3 - 3) = 0$<br>$m_3 = \frac{1}{6}(6) = 1$ |
| $\hat{O} \times \hat{T}^{(3)} = 2\hat{T}^{(3)} + \hat{T}^{(2)} + \hat{T}^{(1)}$ | 6           | 0                                 | 0                       | $m_1 = \frac{1}{6}(6) = 1$<br>$m_2 = 1$<br>$m_3 = 2$   |

Matrixelemente  $(\psi^\alpha, \hat{O}\psi^\beta)$

| $\psi^\alpha$ | $\psi^\beta$ | $\beta = 1$  | $\beta = 2$                                      | $\beta = 3$   |
|---------------|--------------|--|--|---|
| $\alpha = 1$  |              | $\hat{O}T^{(1)} = T^{(2)} + T^{(3)}$<br>Matrixel. verschwindet | $\hat{O}T^{(2)} = T^{(1)} + T^{(3)}$<br>$\neq 0$ | $\hat{O}T^{(3)} = 2T^{(3)} + T^{(2)} + T^{(1)}$<br>$\neq 0$ |
| $\alpha = 2$  |              | $\neq 0$   | $\neq 0$   | $\neq 0$  |
| $\alpha = 3$  |              | $\neq 0$   | $\neq 0$   | $\neq 0$  |

# Kapitel 4

## Kontinuierliche Gruppen und ihre Darstellungen

### 4.1 Allgemeine Bemerkungen

**Bisher:** Kaum Unterschiede zwischen endlichen und kontinuierlichen Gruppen (bereits Rotationen und deren Charaktere berechnet).

**Aber:** Schwierigkeit bei Summen über Gruppenelementen.

Gruppenelement einer kontinuierlichen Gruppe:  $G(a_1, a_2, \dots, a_r)$ . Die  $r$  stetigen, **reellen** Parameter  $a_q, q = 1 \dots r$  sind für die Charakterisierung der Gruppenelemente nötig.  $r$  ist die Dimension der Gruppe.

Gruppenpostulat:

$$\begin{aligned} G(a_1, a_2, \dots, a_r) G(b_1, b_2, \dots, b_r) &= G(c_1, c_2, \dots, c_r) \\ \Rightarrow c_q &= \phi_q(a_1, a_2, \dots, a_r; b_1, b_2, \dots, b_r) \\ E &= G(0, 0, \dots, 0) \end{aligned}$$

$\phi_q$  müssen Bedingungen erfüllen, damit Gruppenpostulate erfüllt, z.B. Differenzierbarkeit (Lie-Gruppen).

$$\sum_{a=1}^g f(G_a) \Rightarrow \iiint \dots f(a_1, a_2, \dots, a_r) \rho(a_1, a_2, \dots, a_r) da_1 da_2 \dots da_r$$

im Falle der kompakten Gruppen

**Aber:** Konzept von Darstellung, Irreduzibilität, Charakter etc. unverändert. Matrixelemente und Charaktere sind jetzt stetige Funktionen der  $a$ 's:

$$T_{ij}^{(\alpha)}(a_1, a_2, \dots, a_r), \chi^{(\alpha)}(a_1, a_2, \dots, a_r).$$

Da die Zahl der Klassen einer kontinuierlichen Gruppe unendlich ist (z.B. Rotation um den gleichen Winkel) sind auch die Klassen stetig, auch die

Zahl der irreduziblen Darstellungen ist ebenfalls unendlich, obwohl deren Dimension in der Regel endlich ist.

## 4.2 Infinitesimale Operatoren

Obwohl kontinuierliche Gruppen der Dimension  $r$  mit den Parametern  $a_1, a_2, \dots, a_r$  eine unendliche Zahl von Gruppenelementen haben, können deren Eigenschaften (die meisten) aus  $r$  Operatoren: den **infinitesimalen Operatoren** abgeleitet werden.

Betr. jetzt Darstellung  $\hat{T}(\mathbf{a})$ ,  $\mathbf{a} = \{a_1, a_2, \dots, a_r\}$  der Gruppe  $\mathcal{G}$  in  $L$ .

$$\hat{T}(0, \dots, 0) = \hat{1}.$$

$$a_q \text{ klein: } \hat{T}(\mathbf{a}) \approx 1 + \sum_{q=1}^r a_q \hat{X}_q.$$

$\hat{X}_q$  lineare Operatoren, unabhängig von  $a_q$ , "infinitesimale Operatoren" der Darstellung  $\hat{T}$

$$\hat{X}_q = \lim_{a_q \rightarrow 0} \{T(0, 0, \dots, a_q, \dots, 0) - 1\} / a_q = \left[ \frac{\partial}{\partial a_q} \hat{T}(\mathbf{a}) \right]_{\mathbf{a}=0}$$

**Betrachte Spezialfall:** 1-parametrische Gruppe  $\mathcal{G}$  mit  $G(c) = G(a)G(b) = G(a+b)$ , wie z.B. in  $\mathcal{R}_2$ .

$n$  ganz:

$$\hat{T}(a) = \{\hat{T}(a/n)\}^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \hat{T}\left(\frac{a}{n}\right) \right\}^n \approx \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ 1 + \frac{a}{n} \hat{X} \right\}^n = e^{a\hat{X}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n \hat{X}^n}{n!}$$

i.e. der Operator  $\hat{T}(a)$  läßt sich aus dem infinitesimalen Operator  $\hat{X}$  aufbauen. Analoges gilt für den allgemeinen Fall.

SATZ 4

Ist eine Darstellung  $\hat{T}$  unitär, dann ist der Operator  $\hat{X}_q$  anti-hermitesch  $\hat{X}_q^\dagger = -\hat{X}_q$ .

$$\begin{aligned} \hat{1} = \hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}^\dagger(\mathbf{a}) &\approx \left( 1 + \sum_q a_q \hat{X}_q \right) \left( 1 + \sum_q a_q \hat{X}_q^\dagger \right) \\ &\approx \left( 1 + \sum_q a_q (\hat{X}_q + \hat{X}_q^\dagger) \right) \end{aligned}$$

$$\rightarrow \hat{X}_q = -\hat{X}_q^\dagger.$$

$$\text{Schreibt man } \hat{X}_q = i\hat{Y}_q \quad (\hat{X}_q + \hat{X}_q^\dagger) = i(Y_q - Y_q^\dagger) \rightarrow Y_q = Y_q^\dagger.$$

Es folgen drei wichtige Theoreme (wir werden sie hier nicht beweisen!)

## THEOREM 2

Wenn zwei Darstellungen der Gruppe  $\mathcal{G}$  die gleichen infinitesimalen Operatoren haben, dann sind sie gleich.

→ d.h.  $\hat{T}$  bestimmt durch die  $\hat{X}_q$ .

## THEOREM 3

Für jede Darstellung  $\hat{T}$  von  $\mathcal{G}$  genügt der Satz der infinitesimalen Operatoren  $\hat{X}_q$  den Kommutatorrelationen

$$\boxed{[\hat{X}_q, \hat{X}_p] = \sum_t c_{qp}^t \hat{X}_t} \quad (4.1)$$

$c_{qp}^t$  sind Strukturkonstanten. Sie sind für alle Darstellungen  $\hat{T}$  von  $\mathcal{G}$  die gleichen.

## THEOREM 4

Jeder Satz von Operatoren  $\hat{X}_q$  in  $L$  ist der Satz infinitesimaler Operatoren der Darstellung  $\hat{T}$  von  $\mathcal{G}$ , wenn er (4.1) befriedigt.

D.h. verschiedene Darstellungen mögen verschiedene  $\hat{X}_q$  haben, aber die  $c_{qp}^t$  sind die gleichen.

Theorem 1:  $\hat{T}$  bestimmt durch  $\hat{X}_q$ .

Theorem 2: Multiplikationsgesetz für infinitesimale Operatoren

$$\hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{b}) \approx \left(1 + \sum_q a_q \hat{X}_q\right) \left(1 + \sum_p b_p \hat{X}_p\right) \approx 1 + \sum_q (a_q + b_q) \hat{X}_q,$$

d.h. i.a. sind die infinitesimalen Operatoren für das Produkt von 2 Gruppenelementen gerade die Summe der infinitesimalen Operatoren für jeden Faktor.

**Aber:**

$$\begin{aligned} \hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{b})\hat{T}^{-1}(\mathbf{a})\hat{T}^{-1}(\mathbf{b}) &\approx \left(1 + \sum_q a_q \hat{X}_q\right) \left(1 + \sum_q b_q \hat{X}_q\right) \times \\ &\times \left(1 - \sum_q a_q \hat{X}_q\right) \left(1 - \sum_q b_q \hat{X}_q\right) \quad (4.2) \end{aligned}$$

$$\approx 1 + \sum_{q,p} a_q b_p [\hat{X}_q, \hat{X}_p] + O(a^3, a^2 b, \dots) \quad (4.3)$$

(4.2) hier verschwinden linearen Terme obwohl der Operator  $\hat{T}(a)\hat{T}(b)\hat{T}^{-1}(a)\hat{T}^{-1}(b) \neq \hat{1}$  ist!

(4.3) die linearen Terme verschwinden.

Mit der Gruppeneigenschaft folgt

$$\hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{b})\hat{T}^{-1}(\mathbf{a})\hat{T}^{-1}(\mathbf{b}) = \hat{T}(c) \approx 1 + \sum_t \tilde{c}^t \hat{X}_t \quad \rightarrow \quad ab = O(\tilde{c})$$



mit  $\tilde{c}^t = \sum_{q,p} c_{qp}^t a_q b_p$  (ist in gewisser Weise Beweis von Theorem 3).

$$[\hat{X}_q, \hat{X}_p] = \sum c_{qp}^t \hat{X}_t .$$

$c_{qp}^t$  folgen eindeutig aus den Multiplikationsregeln für Gruppenelemente.

⇒ Studium der kontinuierlichen Gruppen läßt sich auf die Algebra der infinitesimalen Operatoren zurückführen.

Gruppenmultiplikationstafel → Strukturkonstanten

**Untergruppe:** Untermenge von Operatoren einer Gruppe ist unter der Kommutatorrelation abgeschlossen.

Ein Satz von Funktionen  $\phi_i^{(\alpha)}$  transformiert sich nach einer irreduziblen Darstellung  $\hat{T}^{(\alpha)}$ , wenn die transformierten Funktionen sich als

$$\hat{T} \phi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)}$$

darstellen lassen ( $T_{ji}^{(\alpha)}$  bekannte Matrix).

Bei kontinuierlichen Gruppen ist es ausreichend zu zeigen, daß die obige Relation für die **Matrizen der infinitesimalen Operatoren** erfüllt ist:

$$\begin{aligned} \hat{T} &\approx \hat{1} + \sum_q a_q \hat{X}_q \\ (1 + \sum_q a_q \hat{X}_q) \phi_i^{(\alpha)} &= \sum_j \sum_q (a_q \hat{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)} + \phi_i^{(\alpha)} \\ \hat{X}_q \phi_i^{(\alpha)} &= \sum_j (\hat{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Ein Satz von Operatoren  $S_i^{(\alpha)}$  transformiert sich nach der Darstellung  $T^{(\alpha)}$  wenn, für jedes  $q$ , die infinitesimale Änderung des Operators durch die gleichen Matrizen beschrieben wird:

$$\hat{S}' = \hat{T} \hat{S} \hat{T}^{-1} \approx \left( 1 + \sum_q a_q \hat{X}_q \right) \hat{S} \left( 1 - \sum_q a_q \hat{X}_q \right) \approx \hat{S} + \sum_q a_q [\hat{X}_q, \hat{S}]$$

→

$$[\hat{X}_q, \hat{S}_i^{(\alpha)}] = \sum_j (\hat{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)} \quad (4.5)$$

(4.5) ist Bedingung für Transformation nach irreduzibler Darstellung  $\alpha$  (tritt an die Stelle von  $\hat{S}_i^{(\alpha)'} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}$ ).

**Beispiel:** invarianter Operator befriedigt  $[\hat{X}_q, \hat{S}] = 0$  (statt  $[\hat{T}, \hat{S}] = 0$ ).

Für das direkte Produkt zweier Darstellungen gilt

$$\begin{aligned}
T_{ij,kl}^{(\alpha \times \beta)}(\mathbf{a}) &= \left\{ \delta_{ik} + \sum_q a_q (X_q^{(\alpha)})_{ik} \right\} \left\{ \delta_{jl} + \sum_p a_p (X_p^{(\beta)})_{jl} \right\} \\
&= \delta_{ik} \delta_{jl} + \sum_q a_q \left\{ (X_q^{(\alpha)})_{ik} \delta_{jl} + (X_q^{(\beta)})_{jl} \delta_{ik} \right\} \\
&= \delta_{ik} \delta_{jl} + \sum_q a_q \left\{ \hat{X}_q^{(\alpha)} \hat{1}^{(\beta)} + \hat{X}_q^{(\beta)} \hat{1}^{(\alpha)} \right\}_{ij,kl} \\
&= \delta_{ik} \delta_{jl} + \sum_q a_q (\hat{X}_q^{(\alpha \times \beta)})_{ij,kl}
\end{aligned}$$

### 4.3 Die Gruppe $\mathcal{R}_2 = \text{SO}(2)$ (Rotation in der Ebene)

Es existiert nur ein Parameter: Rotationswinkel  $a$ :  $0 \leq a < 2\pi$ , Gruppe  $\mathcal{R}_2$  ist abelsch.

$$R(c) = R(a)R(b) \quad \rightarrow \quad c = a + b \quad \text{mod } 2\pi$$

Die irreduziblen Darstellungen sind eindimensional, suche daher Darstellung  $\hat{T}(a)$  mit  $\hat{T}(a)\hat{T}(b) = \hat{T}(a+b)$  und  $\hat{T}(0) = 1$ .

Differenziere  $\frac{\partial}{\partial b} \hat{T}(a+b) = \hat{T}(a)\hat{T}'(b)$ ,  $b=0 \rightarrow \hat{T}'(a) = \hat{T}(a)\hat{T}'(0) \rightarrow \hat{T}(a) = e^{a\hat{T}'(0)}$   
 Ausserdem  $\hat{T}(a) = \hat{T}(a+2\pi) \rightarrow e^{2\pi\hat{T}'(0)} = 1 \rightarrow i\hat{T}'(0) = m$ ,  $m$  ganz.

$$\hat{T}^{(m)}(a) = e^{-ima} \approx 1 - ima, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.6)$$

$a$  reeller Parameter,  $im \triangleq \hat{X}^{(m)}$ . Damit ist die Darstellung gefunden!  $\exists$  unendlich viele irreduzible Darstellungen.  $\exists$  unendlich viele Elemente und damit Klassen (abelsch). (4.6) offensichtlich unitär.

Ein Vektor  $\mathbf{e}_m$ , der sich nach einer irreduziblen Darstellung transformiert, genügt

$$\hat{T}(a)\mathbf{e}_m = e^{-ima}\mathbf{e}_m.$$

Nimmt man  $m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots$  an, dann ist es möglich eine unitäre Darstellung zu bilden, die stetig nur im Intervall  $0 \leq a < 4\pi$  ist. (Spin, später.)

Charakter:  $\chi^{(m)} = T^{(m)}(a) = e^{-ima}$ .

Orthogonalität:  $\int_0^{2\pi} da \chi^{(m)} \chi^{(m')*} = \int_0^{2\pi} e^{ia(m'-m)} da = 2\pi \delta_{mm'}$  (vergleiche 2.7),  
 d.h. wir ersetzen  $\sum_a \rightarrow \int_0^{2\pi} da$ .

Das in 4.1 eingeführte Gewicht ist hier =1.

Das "Gruppenvolumen" ist  $\int_0^{2\pi} da = 2\pi$  und ersetzt  $g$ , die Ordnung von  $\mathcal{G}$ .

**Multiplikation von Darstellungen:**  $\hat{T}^{(m_1)}\hat{T}^{(m_2)} = e^{-i(m_1+m_2)a}$

$$\hat{T}^{(m_1)} \times \hat{T}^{(m_2)} = \hat{T}^{(m_1+m_2)}$$

(Dimension ist wieder 1.)

### Basisvektoren

(i)  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$  Basisvektoren in  $R^2$

$$R_z(a)\mathbf{e}_x = \cos a \mathbf{e}_x + \sin a \mathbf{e}_y$$

$$R_z(a)\mathbf{e}_y = -\sin a \mathbf{e}_x + \cos a \mathbf{e}_y$$

$$R_z(a)(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y) = e^{\mp ia}(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y),$$

i.e.  $(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)$  transformieren sich nach der irreduziblen Darstellung mit  $m = \pm 1$ .

(Keine Rotation (um die  $z$ -Achse) eines **reellen** Vektors läßt sich als Vielfaches dieses Vektors schreiben  $\rightarrow$  komplexe Basis).

(ii) Betrachte Funktion  $\psi(r, \phi)$  (Polarkoordinaten) als potentielle Basis

$$\hat{T}(R_z(a))\psi(r, \phi) = \psi(r, \phi - a)$$

$\rightarrow \psi(r, \phi) = \psi(r)e^{im\phi}$  transformiert sich nach der Darstellung

$$T^{(m)} : \hat{T}(R_z(a))e^{im\phi} = e^{im(\phi-a)} = e^{-ima}e^{im\phi}$$

Betrachte beliebige Funktion

$$\psi(r, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(r)e^{im\phi}$$

mit

$$\psi_m(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \phi)e^{-im\phi} d\phi$$

Analyse der Funktion in Komponenten, die sich nach irreduziblen Darstellungen  $\hat{T}^{(m)}$  von  $R_2$  transformieren.

### Infinitesimale Operatoren

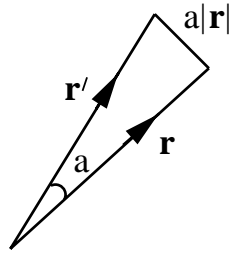
In der reduziblen Basis  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$  der Matrix  $R_z(a)$

$$\underline{\underline{R}}_z(a) = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a \\ \sin a & \cos a \end{pmatrix} \Big|_{a \text{ klein}} \approx \underline{\underline{1}} + a \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{X}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{X}}^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\underline{\underline{1}}$$

$$e^{a\hat{X}} = \hat{1} + a\hat{X} + \frac{1}{2}a^2\hat{X}^2 + \frac{1}{3!}a^3\hat{X}^3 + \dots = \hat{1} \left( 1 - \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{4!}a^4 - \dots \right) + \hat{X} \left( a - \frac{1}{3!}a^3 + \dots \right)$$

$$= \hat{1} \cos a + \hat{X} \sin a = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a \\ \sin a & \cos a \end{pmatrix} = \underline{\underline{R}}_z(a)$$



Kleine  $a$ :  $\hat{R}_z(a)\mathbf{r} \approx \mathbf{r} + a(\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}) \rightarrow$

$$\begin{aligned}\hat{R}_z(a) &\approx \hat{1} + a(\mathbf{e}_z \times \dots) = \hat{1} + a\hat{X} \\ \hat{T}(R_z(a))\psi(r, \phi) &= \psi(r, \phi - a) = \psi(r, \phi) - a\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(r, \phi) + \frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\psi(r, \phi) \\ \hat{T}(R_z(a)) &\approx \hat{1} - a\frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

$\hat{X} = -\frac{\partial}{\partial\phi} = -\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{-i}{\hbar}(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = -i\hat{l}_z$ ,  $\hat{l}_z$  Drehimpulsoperator.

$$\hat{T}(R_z(a)) = e^{-a\frac{\partial}{\partial\phi}}$$

Das Matrixelement von  $\hat{X}$  in einer irreduziblen Darstellung  $\hat{T}^{(m)}$  ist

$$e^{-im\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\phi}\right) e^{im\phi} = -im.$$

Hat eine Funktion  $\psi$  die Eigenschaft  $\hat{X}\psi = -im\psi$ , dann transformiert sich  $\psi$  nach einer irreduziblen Darstellung  $\hat{T}^{(m)}$  von  $R_2$ .

## 4.4 Die Gruppe $\mathcal{R}_3 = \text{SO}_3 = \text{SO}(3)$

### 4.4.1 Einleitung: Rotation eines Vektors im $\mathbb{R}^3$

$R_{\mathbf{k}}(a)$ ,  $0 \leq a < 2\pi$ .  $a$  Rotationswinkel,  $\mathbf{k}$  Einheitsvektor entlang der Rotationsachse  $\hat{=} 2$  Parametern  $\rightarrow 3$  parametrische Gruppe.

$$\begin{aligned}a_x &= ak_x \\ a_y &= ak_y \quad \mathbf{k}^2 = 1 \quad R(\mathbf{a}) \\ a_z &= ak_z\end{aligned}$$

$$\mathbf{r}' = \hat{R}_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{r} = \mathbf{r} \cos a + (1 - \cos a)(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} + (\sin a)\mathbf{k} \times \mathbf{r} = \underline{\underline{R}}_{\mathbf{k}}(a) \cdot \mathbf{r},$$

infinitesimal:  $\mathbf{r}' = a\mathbf{k} \times \mathbf{r}$

$$\begin{aligned}[R_{\mathbf{k}}(a)]_{xx} &= \cos a + (1 - \cos a)k_x^2 \\ [R_{\mathbf{k}}(a)]_{yx} &= (1 - \cos a)k_x k_y + k_z \sin a\end{aligned}$$

$\hat{R}_{\mathbf{k}}(a)$  erhält die Länge und die Winkel zwischen 2 Ortsvektoren  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$

$$\mathbf{r}'_1 = \hat{R}\mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}'_2 = \hat{R}\mathbf{r}_2 \quad \rightarrow \quad (\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_1) = (\hat{R}\mathbf{r}_2, \hat{R}\mathbf{r}_1) = (\mathbf{r}_2, \hat{R}^\dagger \hat{R}\mathbf{r}_1) = (\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

$\rightarrow \hat{R}^\dagger \hat{R} = 1$ , i.e.  $\hat{R}$  unitär.

Im  $\mathbb{R}^3$  (in der Basis des  $\mathbb{R}^3$ ) sind die Elemente von  $\underline{R}$  reell, die Matrix orthogonal,  $|\underline{R}| = \pm 1$ .

$\text{SO}(3) = \text{O}_3^\dagger = \mathcal{R}$  mit  $|\underline{R}| = \pm 1$ .

$\text{O}_3 = \mathcal{R}_3 \times \text{S}_2$ ,  $\text{S}_2$  Inversion, Transformationen mit ausschließlich Determinanten -1 bilden keine Gruppe!

#### 4.4.2 Die Infinitesimalen Operatoren der $\text{SO}(3)$

Jede Darstellung  $\hat{T}$  liefert die Strukturkonstanten.

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{r} &\stackrel{a \ll 1}{\approx} \mathbf{r} + a(\mathbf{k} \times \mathbf{r}) = \mathbf{r} + a \sum_{q=x}^z k_q (\mathbf{e}_q \times \mathbf{r}) \\ &= \mathbf{r} + \sum_q a_q (\mathbf{e}_q \times \mathbf{r}) \\ &= \left( \hat{1} + \sum_q a_q \mathbf{e}_q \times \right) \mathbf{r} \end{aligned}$$

$\hat{X}_q = (\mathbf{e}_q \times \ )$ . Benutzt man die Basis  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ , dann erhält man als Darstellung der  $\hat{X}_q$ :  $(X_q)_{pp'} = (\mathbf{e}_p, \hat{X}_q \mathbf{e}_{p'})$

$$\begin{aligned} \underline{X}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{X}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{X}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ [\hat{X}_x, \hat{X}_y]\mathbf{r} &= \mathbf{e}_x \times (\mathbf{e}_y \times \mathbf{r}) - \mathbf{e}_y \times (\mathbf{e}_x \times \mathbf{r}) = x\mathbf{e}_y - y\mathbf{e}_x = (\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}) = \hat{X}_z \mathbf{r} \\ \Rightarrow [\hat{X}_x, \hat{X}_y] &= \hat{X}_z \quad \text{etc.}; \quad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \end{aligned}$$

Mit  $\hat{X}_q i = \hat{J}_q$  folgt

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x$$

$\hat{J}_q$  hermitesch. Bilde:

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm &= \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= i\hat{J}_y \pm \hat{J}_x = \pm(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \pm\hat{J}_\pm \end{aligned}$$

### 4.4.3 Irreduzible Darstellungen der $\text{SO}(3)$

$\text{SO}(2)$  (eigentliche Rotationen in der Ebene):

abelsch  $\rightarrow$  1-dimensionale irreduzible Darstellungen  $\hat{T}(a)\mathbf{e}_m = e^{-ima}\mathbf{e}_m$ . Beispiel für Basis war

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_m &= e^{im\phi} \\ \hat{T}(a) &= e^{-a\frac{\partial}{\partial\phi}} = e^{-a\hat{X}} = e^{-ia\hat{L}_z}\end{aligned}$$

Suche jetzt **endlichdimensionale** irreduzible Darstellung von  $\text{SO}(3)$  (es existieren unendlich viele). Benutze Basis  $\mathbf{e}_m^{(\alpha)}$ , in der  $\hat{J}_z$  **diagonal** ist:  $\hat{J}_z\mathbf{e}_m^{(\alpha)} = m\mathbf{e}_m^{(\alpha)}$  ( $\alpha$  numeriert die Darstellung und  $m$  numeriert in der Darstellung). Damit ist auch  $\hat{J}_\pm\mathbf{e}_m$  Eigenfunktion von  $\hat{J}_z$ , denn

$$\hat{J}_z(\hat{J}_\pm\mathbf{e}_m) = [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm]\mathbf{e}_m + \hat{J}_\pm\hat{J}_z\mathbf{e}_m = (\pm 1 + m)\hat{J}_\pm\mathbf{e}_m.$$

Für eine spezielle irreduzible Darstellung gibt es einen größten Wert,  $j$ , für  $m$  (endliche Dimension!).

$\hat{J}_z\mathbf{e}_j = j\mathbf{e}_j$ ,  $\mathbf{e}_j$  Vektor des "größten Gewichts" (normiert). Dann muß  $\hat{J}_+\mathbf{e}_j = 0$  sein! Andererseits

$$\mathbf{e}_{j-1} = A_{j-1}\hat{J}_-\mathbf{e}_j,$$

$A_{j-1}$  so gewählt, dass  $\mathbf{e}_{j-1}$  normiert und orthogonal. Konstruktion der  $\mathbf{e}_{j-1}, \mathbf{e}_{j-2}, \dots$ , vergleiche 2.4:

$$\mathbf{e}_{j-2} = A_{j-2}\hat{J}_-\mathbf{e}_{j-1} \quad \text{etc.}$$

bis hin zu einem niedrigsten Wert  $m = j - t$ :  $\hat{J}_-\mathbf{e}_{j-t} = 0$ . Der so generierte Satz von Basisfunktionen  $\mathbf{e}_m$ ,  $j - t \leq m \leq j$  ist invariant unter  $\hat{J}_z, \hat{J}_-$  und  $\hat{J}_+$ . Invarianz bezüglich  $\hat{J}_z, \hat{J}_-$  schon gezeigt. Zeige nun Invarianz bezüglich  $\hat{J}_+$ .

Hilfskonstruktion:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\ [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\alpha] &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z \\ &= \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z \\ \hat{\mathbf{J}}^2\mathbf{e}_j &= (\hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z)\mathbf{e}_j = 0 + j(j+1)\mathbf{e}_j\end{aligned}$$

Hier ist  $\mathbf{e}_j$  höchstens  $m$ .

$$\hat{\mathbf{J}}^2\mathbf{e}_m = \hat{\mathbf{J}}^2 A_{j-1} A_{j-2} \dots A_m \hat{J}_- \dots \hat{J}_-\mathbf{e}_j = j(j+1)\mathbf{e}_m \quad (4.7)$$

$j - m$  Operatoren  $\hat{J}_-$ . Benutzt man die Kommutationsrelationen zwischen  $\hat{\mathbf{J}}^2$  und  $\hat{J}_-$ , dann

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ \mathbf{e}_m &= \hat{J}_+ A_m \hat{J}_- \mathbf{e}_{m+1} = A_m (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z) \mathbf{e}_{m+1} \\ &= A_m (j(j+1) - (m+1)^2 + m+1) \mathbf{e}_{m+1} \\ &= A_m (j+m+1)(j-m) \mathbf{e}_{m+1}\end{aligned}$$

i.e. auch Anwendung von  $\hat{J}_+$  führt nicht aus Satz der  $\mathbf{e}_m$  heraus (Vorsicht: bloße Anwendung von  $\hat{J}_+ \mathbf{e}_m = \mathbf{e}'_{m+1}$  hätte zu neuem Vektor mit  $\hat{J}_z \mathbf{e}'_{m+1} = (m+1) \mathbf{e}'_{m+1}$  führen können).

$$\hat{J}^2 \mathbf{e}_{j-t} = (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z) \mathbf{e}_{j-t} = 0 + (j-t)(j-t-1) \mathbf{e}_{j-t} \stackrel{4.7}{=} j(j+1) \mathbf{e}_{j-t}$$

$\rightarrow (2j-t)(t+1) = 0 \rightarrow 2j = t$  ganz,  $j$  halb oder ganzzahlig.

Dimension von Darstellung ist  $2j+1$ .

Irreduzible Darstellung  $D^{(j)}$   $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

Die unter obiger Konstruktion aufgebaute Basis  $\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_{j-1}, \dots, \mathbf{e}_{-j}$  transformiert sich nach den irreduziblen Darstellungen  $\hat{T}^{(m)}$  der Untergruppe  $\text{SO}(2)$ . Beschränkt man sich daher auf die Untergruppe  $\text{SO}_2$ , so führt die Ausreduktion zu

$$D^{(j)} = \sum_{m=-j}^{m=j} T^{(m)}.$$

Matrizelemente der Generatoren in obiger Basis  $\mathbf{e}_m^{(j)}$

$$\begin{aligned}(\mathbf{e}_{m'}, \hat{J}_z \mathbf{e}_m) &= m \delta_{mm'} \\ (\mathbf{e}_{m'}, \hat{J}_- \mathbf{e}_m) &= (\hat{J}_+ \mathbf{e}_{m'}, \mathbf{e}_m) = (\mathbf{e}_m, \hat{J}_+ \mathbf{e}_{m'})^* \\ \delta_{m', m-1} A_{m'}^{-1} &= A_{m'}^* (j+m'+1)(j-m') \delta_{m, m'+1}\end{aligned}$$

$$\delta_{m, m'+1} = \delta_{m', m-1}$$

$$|A_m|^{-2} = (j+m+1)(j-m)$$

Der Satz der Darstellungen  $\hat{D}^{(j)}$  ist vollständig,  $\psi = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j a_{jm} \mathbf{e}_m^{(j)}$ . Wähle  $A_m$  positiv, reell (Condon-Shortley convention)  $\rightarrow$

$$\begin{aligned}\hat{J}_- \mathbf{e}_{m+1} &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} \mathbf{e}_m \\ \hat{J}_+ \mathbf{e}_m &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} \mathbf{e}_{m+1}\end{aligned}$$

Charaktere der Darstellung  $D^{(j)}$ ? Unabhängig von Basis  $\rightarrow$  wähle  $z$ -Achse  $\hat{=}$  Drehachse (Drehung um Winkel  $a$ ):

$$\begin{aligned}\chi^{(j)}(a) &= \sum_{m=-j}^j e^{-ima} = e^{-ija} [1 + e^{ia} + e^{2ia} + \dots + e^{2ija}] \\ &= e^{-ija} (e^{(2j+1)ia} - 1) / (e^{ia} - 1) \\ &= (e^{(j+\frac{1}{2})ia} - e^{-(j+\frac{1}{2})ia}) / (e^{ia/2} - e^{-ia/2})\end{aligned}$$

$$\chi^{(j)}(a) = \frac{\sin(j + 1/2)a}{\sin a/2}$$

$\chi^{(j)}(0) = 2j + 1$  so, wie es sein soll!

**Beispiele:**

a)  $j = 0$  1-Darstellung.

b)  $j = 1/2$ :

$$\underline{\underline{J}}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\chi^{(1/2)}(a) = \frac{\sin a}{\sin a/2} = 2 \cos \frac{a}{2} = (2(1 + \cos a))^{1/2}$$

$\rightarrow$

$$\underline{\underline{J}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen (bis auf Faktor  $1/2$ ).

c)  $j = 1$  Vektordarstellung:

$$\underline{\underline{J}}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\chi^{(1)}(a) = \frac{\sin 3/2a}{\sin a/2} = \dots = 2 \cos a + 1$$

$\rightarrow$

$$\underline{\underline{J}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{J}}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

**Anmerkung:** Die auf S. ... betrachtete Darstellung und die hier angegebene (die diagonal in  $\underline{\underline{J}}_z$  ist) sind äquivalent. Es gilt die Ähnlichkeitstransformation

$$\underline{\underline{J}}_q = i \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{X}}_q \underline{\underline{A}} \quad \text{mit} \quad \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}i \\ -i & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



#### 4.4.4 Das direkte Produkt zweier Darstellungen

Vergleiche 2.10.

Seien  $D^{(j_1)}$  und  $D^{(j_2)}$  zwei irreduzible Darstellungen der  $SO_3$ . Das direkte Produkt hiervon ist i.a. reduzibel:

$$D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = D^{(j_1 \times j_2)} = \sum_j c_j D^{(j)},$$

$D^{(j_1 \times j_2)}$  reduzibel,  $D^{(j)}$  irreduzibel.

Bestimmung von  $c_j$ : es gilt  $\chi^{(j_1 \times j_2)}(a) = \chi^{(j_1)}(a)\chi^{(j_2)}(a) = \sum_j c_j \chi^{(j)}(a)$ . Früher statt  $c_j = m^{(\alpha)}$ .

Annahme:  $j_1 \geq j_2$

$$\begin{aligned} \chi^{(j_1)}(a)\chi^{(j_2)}(a) &= \frac{\sin[(j_1 + 1/2)a] \sin[(j_2 + 1/2)a]}{\sin^2 a/2} \\ &= \frac{[-\cos(j_1 + j_2 + 1)a + \cos(j_1 - j_2)a]}{2 \sin^2 a/2} \\ &= \frac{\sin[(j_1 + j_2 + 1/2)a]}{\sin a/2} + \frac{\sin[j_1, a] \sin[j_2, a]}{\sin^2 a/2} \\ &= \chi^{(j_1 + j_2)}(a) + \chi^{(j_1 - 1/2)}(a)\chi^{(j_2 - 1/2)}(a) \end{aligned}$$

u.s.w.

$$\begin{aligned} &= \chi^{(j_1 + j_2)}(a) + \chi^{(j_1 + j_2 - 1)}(a) + \chi^{(j_1 - 1)}(a)\chi^{(j_2 - 1)}(a) \\ &\quad \vdots \\ &= \chi^{(j_1 + j_2)}(a) + \chi^{(j_1 + j_2 - 1)}(a) + \dots + \chi^{(j_1 - j_2)}(a)\chi^{(0)}(a) \end{aligned}$$

$$\chi^{(0)}(a) = 1$$

$$= \sum_{j=|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \chi^{(j)}(a) \quad \rightarrow \quad \forall c_j = 1$$

$$D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} D^{(j)}$$

i.e. die Gruppe  $SO(3)$  ist "einfach reduzibel".

Seien die  $\Phi_1(j_1, m_1)$ ,  $\Phi_2(j_2, m_2)$  Basisfunktionen für irreduzible Darstellungen  $D^{(j_1)}$ ,  $D^{(j_2)}$  der  $SO(3)$ , dann lassen sich die Basisfunktionen  $\Phi$  für die Darstellung  $D^{(j)}$  als Linearkombination der  $\Phi_1, \Phi_2$  darstellen:

$$\Phi(j, m) = \sum_{m_1, m_2} C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m) \Phi_1(j_1, m_1) \Phi_2(j_2, m_2).$$

$C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m)$  heißen Clebsch–Gordon–Koeffizienten. Sie lassen sich aus den  $\underline{\underline{J}}_q$ -Matrizen bestimmen (es tritt kein Index  $t$  auf).

Es gelten die Normierungs- und Orthogonalitätsrelationen von ...

$$C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m) = (-1)^{j_1 - j_2 + m} (2j + 1)^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

“Wigner  $3j$ -Symbol”. Es existieren 3 Tabelle hierfür.

#### 4.4.5 Basisfunktionen der $\text{SO}_3$

A. Basis im  $\mathbb{R}^3$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= -(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2} \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_{-1} &= (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2} \end{aligned}$$

$\hat{X}_q = \mathbf{e}_q \times$   $q = x, y, z$ . Also:

$$\begin{aligned} \hat{X}_x \mathbf{e}_1 &= \mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_1 = -\frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_z = -\frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_0 \rightarrow (X_x)_{11} = \mathbf{e}_1^* \left( -\frac{i}{\sqrt{2}} \right) \mathbf{e}_0 \\ \hat{X}_x \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_0 = -\mathbf{e}_y = +\frac{i}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_{-1}) \\ \hat{X}_x \mathbf{e}_{-1} &= \mathbf{e}_x \times (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_0 \\ \underline{iX}_x &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}i & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}}i & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}i \\ 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}i & 0 \end{pmatrix} \text{ etc.} \end{aligned}$$

B. Generation einer Basis aus  $x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$ . 6-dimensionaler Funktionsraum, Anwendung von Rotationen führt nicht heraus  $\rightarrow$  Basis für Darstellung ( $l = 2$ ).

$x^2 + y^2 + z^2$  ist invariant, i.e. transformiert sich nach  $D^{(0)}$

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ &= \hat{J}_x + i\hat{J}_y = z \left( \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} \right) - (x + iy) \frac{\partial}{\partial z} \\ \hat{J}_- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y = -z \left( \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \right) + (x - iy) \frac{\partial}{\partial z} \\ \hat{J}_z &= i \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \text{zyklische Vertauschung: } \hat{J}_x, \hat{J}_y \end{aligned}$$

$\psi_2 = (x + iy)^2 = (x^2 - y^2) + 2ixy = r^2 e^{2i\phi}$  hat das größte Gewicht mit  $m = 2$  ( $r^2 = x^2 + y^2$ ):

$$\hat{J}_+ \psi_2 = 0 \quad \text{und} \quad \hat{J}_z \psi_2 = 2\psi_2.$$

Wende jetzt Leiteroperatoren an (Normierung wie in 4.4.3:  $\hat{J}_- \mathbf{e}_z = [4]^{1/2} \mathbf{e}_1$ , etc.):

$$\begin{aligned}\psi_2 &= (x + iy)^2 = (x^2 - y^2) + 2ixy = r^2 e^{2i\phi} \\ \psi_1 &= \frac{1}{2} \hat{J}_- \psi_2 = -2z(x + iy) \\ \psi_0 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \hat{J}_- \psi_1 = -\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \\ \psi_{-1} &= 2z(x - iy) \\ \psi_{-2} &= (x - iy)^2\end{aligned}$$

$\psi_2, \psi_1, \dots, \psi_{-2}$  sind linear unabhängig, spannen mit  $x^2 + y^2 + z^2$  den Raum der quadratischen Funktionen auf.

$\psi_m$  sind proportional zu den Kugelflächenfunktionen  $Y_m^{(j)}(\theta, \phi)$  für  $j = 2$

$$\psi_m = \left(\frac{32\pi}{15}\right)^{1/2} \rho^2 Y_m^{(2)}(\theta, \phi)$$

$$\rho^2 = (x^2 + y^2 + z^2)$$

$$\begin{aligned}\psi_{\pm 2}^{(2)} &= -\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\ \psi_{\pm 1}^{(2)} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_0^{(2)} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta)\end{aligned}$$

Auf diese Weise lassen sich die Kugelfunktionen für andere  $j$  definieren.

Beginne wieder mit **Vektor des größten Gewichts**  $(x + iy)^j$ . Auf diese Weise erhält man

$$\begin{aligned}m > 0 \quad Y_m^{(j)} &= (-1)^m \left\{ \frac{(2j+1)(j-m)!}{4\pi(j+m)!} \right\}^{1/2} e^{im\phi} \sin^m \theta \left( \frac{d}{d \cos \theta} \right)^{j+m} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^j}{2^j j!} \\ m < 0 \quad Y_{-m}^{(j)} &= (-1)^m Y_m^{(j)*} \\ m = 0 \quad Y_0^{(j)} &= \left( \frac{2j+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_j(\cos \theta)\end{aligned}$$

$P_j(\cos \theta)$  Legendre-Polynom.

Beispiel für die Entwicklung einer Funktion nach irreduziblen Komponenten:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \phi).$$

Aus allgemeiner Orthogonalität von Basisfunktionen irreduzibler Darstellungen folgt Orthogonalität der Kugelfunktionen.

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{m'}^{(l')*}(\theta, \phi) Y_m^{(l)}(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

#### 4.4.6 Irreduzible Sätze von Operatoren $\{\hat{S}_i^{(\alpha)}\}$

Schon gesehen:  $[i\hat{X}_q, \hat{S}_i^{(\alpha)}] = \sum_j (i\underline{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}$ .

$\alpha \rightarrow j, \quad i \rightarrow m \quad q = x, y, z$

$$\boxed{[\hat{J}_z, \hat{S}_m^{(j)}] = m\hat{S}_m^{(j)}} \quad (4.8)$$

$$\boxed{[\hat{J}_\pm, \hat{S}_m^{(j)}] = \{(j \pm m + 1)(j \mp m)\}^{1/2} \hat{S}_{m\pm 1}^{(j)}} \quad (4.9)$$

(4.8), da

$$(\underline{J}_z)_{mm'}^{(j)} = m\delta_{mm'}.$$

(4.9), da

$$\begin{aligned} (\underline{J}_+)_{m'm}^{(j)} &= (\mathbf{e}_{m'}^{(j)}, \hat{J}_+ \mathbf{e}_m^{(j)}) = \delta_{m', m+1} [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} \\ (\underline{J}_-)_{m'm}^{(j)} &= (\mathbf{e}_{m'}^{(j)}, \hat{J}_- \mathbf{e}_m^{(j)}) = \delta_{m', m-1} [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \end{aligned}$$

(4.8) und (4.9) sind die Definitionsgleichungen für die  $\hat{S}_m^{(j)}$ .

**Beispiele:**

(i) Da die Multiplikation mit einer Funktion als Operator im Funktionsraum betrachtet werden kann:

$\rightarrow Y_m^{(j)}$  bilden einen Satz irreduzibler Operatoren (straightforward).

(ii) Die infinitesimale Operatoren selbst bilden einen irreduziblen Satz mit  $j = 1$  ("Vektoroperator"). Damit (4.8) und (4.9) erfüllt,  $\hat{S}_1^{(1)} = -\hat{J}_+/\sqrt{2}$ ,  $\hat{S}_0^{(1)} = \hat{J}_z$ ,  $\hat{S}_{-1}^{(1)} = \hat{J}_-/\sqrt{2}$ .

Matrixelemente von Operatoren  $\hat{S}_m^{(j)}$  aus dem Satz irreduzibler Operatoren: Vergleiche 2.14 Wigner–Eckart–Theorem

$$(\Phi_m^{(j)}, \hat{S}_q^{(l)} \Phi_{m'}^{(j')}) = C^*(j', l, j, m', q, m) (-1)^{2l} \langle \Phi^{(j)} \| \hat{S}^{(l)} \| \Phi^{(j')} \rangle$$

$C^*(j', l, j, m', q, m)$  reell in gewöhnlicher Konvention.  $\langle \Phi^{(j)} \| \hat{S}^{(l)} \| \Phi^{(j')} \rangle = (\Phi_m^{(j)}, \Psi_m^{(j)})$ ,  $\psi_m^{(j)}$  Basisfunktionen für die ausreduzierte Produktdarstellung.

#### 4.4.7 Ein- und mehrdeutige Darstellungen

**Darstellung der  $\text{SO}(2)$ :**  $R(a) \rightarrow \hat{T}(a) = e^{-ima} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$\rightarrow \hat{T}(2\pi) = \hat{T}(0)$ .

Jedem  $R(a)$  ist eindeutig ein  $\hat{T}^{(m)}(a)$  zugeordnet.

**Darstellung der  $\text{SO}(3)$**  (enthält  $\text{SO}(2)$  als Untergruppe): nicht explizit angegeben, sondern nur die der Generatoren

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad j \leq m \leq -j$$

$j$  halbzahlig  $\rightarrow$  auch  $m$  halbzahlig.

**Beispiele:**

(i)  $m = 1/2$

$$\begin{aligned}\hat{T}^{(1/2)}(0) &= 1 \\ \hat{T}^{(1/2)}(2\pi) &= -1\end{aligned}$$

während  $R(0) = R(2\pi)$ . Zweideutige Darstellung der  $SO(2)$ .

(ii)  $m = 1/3$

$$\begin{aligned}\hat{T}^{(1/3)}(0) &= 1 \\ \hat{T}^{(1/3)}(2\pi) &= e^{-2\pi i/3} \\ \hat{T}^{(1/3)}(4\pi) &= e^{-4\pi i/3}\end{aligned}$$

“Dreideutige” Darstellung (triple-valued).

Erweiterung des Begriffs der Darstellung einer Gruppe:

$$G(\mathbf{a})G(\mathbf{b}) = G(\mathbf{c}) \quad \rightarrow \quad \hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{b})\psi = \omega(\mathbf{a}, \mathbf{b})\hat{T}(\mathbf{c})\psi.$$

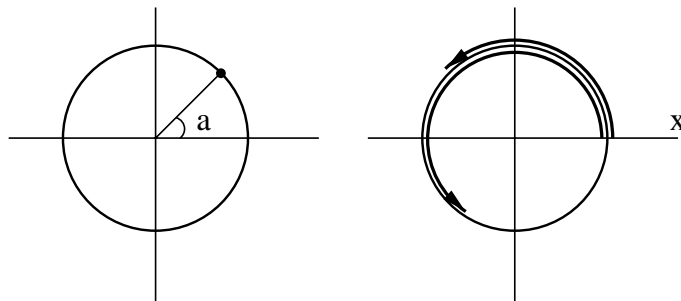
$\omega(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  heißt Phasenfaktor.

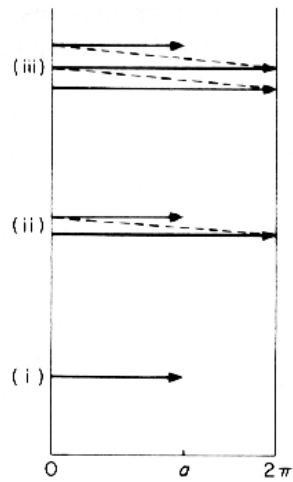
Die Darstellungen der  $SO(2)$  können  $n$ -deutig sein, die der  $SO(3)$  nur 1- und 2-deutig.

$$G(\mathbf{a}) \quad \rightarrow \quad \hat{T}(G(a)) \equiv \hat{T}(a)$$

**SO(2):**  $G(a)$ ,  $0 \leq a < 2\pi$ . Parameterraum: Kreisumfang  $r = 1$ .

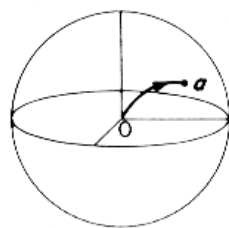
$$\hat{T}_1(a) = e^{-ia/3}, \quad \hat{T}_2(a) = e^{-i(a+2\pi)/3}, \quad \hat{T}_3(a) = e^{-i(a+4\pi)/3}.$$



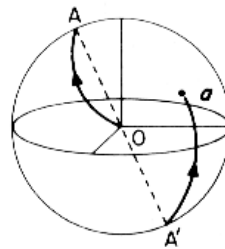


$\text{SO}(3)$ : Rotation um die Achse  $\vec{k}$  um Winkel  $a$ :  $0 \leq a \leq \pi$ . Parameterraum: Kugel mit Radius  $\pi$ : gegenüberliegende Punkte sind identisch!!

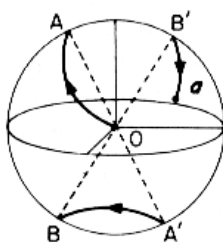
$$R_{\vec{k}}(\pi) = R_{-\vec{k}}(\pi)$$



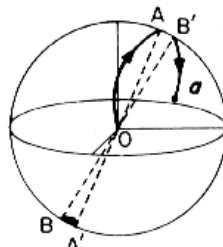
(i)



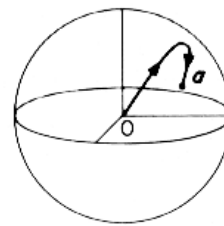
(ii)



(a)



(b)



(c)

(iii)

→ Es existiert nur ein- und zweiseitige Darstellungen der  $\text{SO}(3)$ .

Wiederholung:

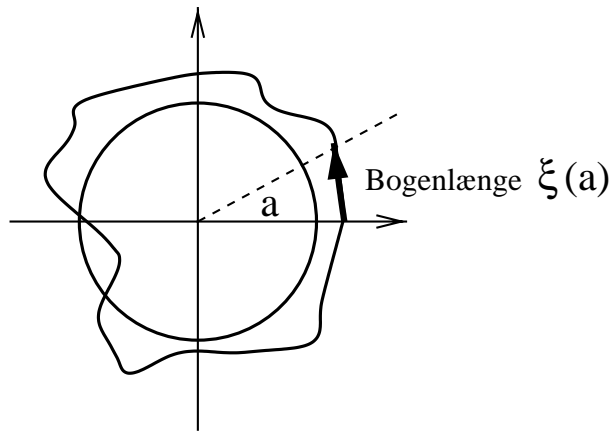
|  | Diskrete Gruppen  | Kontinuierliche Gruppen<br>(klassische Lie-Gruppen)   |
|--|---|---|
| Elemente                                     | $G_a, G_b, G_c, \dots$<br>endlich oder unendlich viele  | $G(a_1, a_2, \dots, a_r) = G(\mathbf{a})$<br>unendlich viele  |
| Gruppenpostulat                              | $G_a G_b = G_c$   | $G(a_1, \dots, a_r) G(b_1, \dots, b_r) = G(c_1, \dots, c_r)$<br>$c_q = \phi_q(a_1, \dots, b_r)$   |
| Einselement                                  | $E$   | $E = G(0, 0, \dots, 0)$   |
| Summe über Gruppenelemente                   | $\sum_{a=1}^g f(G_a)$   | $\int \dots \int da_1 \dots da_r f(a_1 \dots a_r) \rho(a_1 \dots a_r)$<br>$\rho$ Integrationsmaß  |
| Generator oder infinitesimaler Operator      | $G_1 = a, G_2 = a^2, \dots, G_n = a^n = 1$  | $\hat{T}(\mathbf{a})$ Darstellung von $\mathcal{G}$ in $L$<br>$\left. \frac{\partial}{\partial a_q} \hat{T}(\mathbf{a}) \right _{\mathbf{a}=0} = \hat{X}_q$<br>$\hat{T}(\mathbf{a}) \approx 1 + \sum_{q=1}^r a_q \hat{X}_q$ |
|  | Gruppenmultiplikationstafel   | Operatoralgebra<br>$\boxed{[\hat{X}_q, \hat{X}_p] = \sum_t c_{qp}^t \hat{X}_t}$<br>$c_{qp}^t$ Strukturkonstanten  |
| Transformation nach irreduzibler Darstellung | $\hat{T} \phi_i^{(\alpha)} = \sum_j \tilde{T}_{ji}^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)}$<br>$\hat{T} \hat{S}_i^{(\alpha)} \hat{T}^{-1} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}$ | $\hat{X}_q \phi_i^{(\alpha)} = \sum_j (\hat{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \phi_j^{(\alpha)}$<br>$[\hat{X}_q, \hat{S}_i^{(\alpha)}] = \sum_j (\hat{X}_q)_{ji}^{(\alpha)} \hat{S}_j^{(\alpha)}$                                       |
| Beispiele:                                   |   | $\mathcal{R}_2 = \text{SO}(2), G(a)G(b) = G(a+b)$<br>1 parametrische Gruppe, abelsch<br>$\hat{X} = -\frac{\partial}{\partial \phi} = -i\hat{l}_z$<br>$T^{(m)}(a) = \exp(ima)$   |

4.4.8 Invariantes Integrationsmaß

$$\sum_a f(G_a) \rightarrow \int da_1 \dots da_r f(G(\mathbf{a})) \rho(\mathbf{a})$$

$\rho(\mathbf{a})?$

SO(2) schon benutzt:  $\rho = 1, a = \phi$  Bogenlänge eines Einheitskreises,  $G(a)$  Rotation um Winkel  $a$  (andere Wahl möglich):



$$\int d\xi f[G(\xi)] = \int d\phi \xi'(\phi) f[G(\phi)] \neq \int d\phi f[G(\phi)]$$

Welche Wahl sollen wir treffen?

Endliche diskrete Gruppen: “Rearrangement”-Theorem immer benutzt

$$\sum_a f(G_a) = \sum_a f(S^{-1}G_a)$$

$S^{-1}G_a$  beliebiges Gruppenelement  $\rightarrow$

$$\int d\tau_G f(G) = \int d\tau_G f(S^{-1}G) = \int d\tau_{SG} f(G) \quad (4.10)$$

Gilt (4.10), dann  $\rho_G(\xi)$  “invariantes Maß”.

$$G = G(\xi) \rightarrow d\tau_G = \rho_G(\xi_G) d\xi_G; \quad d\tau_{SG} = \rho_{SG}(\xi_{SG}) d\xi_{SG}$$

$$d\tau_G = d\tau_{SG} \rightarrow \frac{\rho_G(\xi_G)}{\rho_{SG}(\xi_{SG})} = \frac{d\xi_{SG}}{s\xi_G}$$

Wähle nun

$$\rho_G(\xi_G) = \frac{d\xi_E}{d\xi_G} = \frac{d\xi_E}{d\xi_{SG}} \frac{d\xi_{SG}}{d\xi_G} = \rho_{SG}(\xi_{SG}) \frac{d\xi_{SG}}{d\xi_G}$$

$d\xi_E/d\xi_G$  aus Gruppenmultipl.-Tafel. Sei  $\xi_{SG}$  linear in  $\xi_G$ , z.B. wenn  $\xi = \phi$  Drehwinkel

$$\phi_{EG} = \phi_E + \phi_G, \quad \rho_G = \frac{d\phi_E}{d\phi_G} = \frac{d\phi_E}{d\phi_{EG}} = 1.$$

Ähnlich für SO(3).

## 4.5 Drehimpuls, Spin und die Gruppe SO(3)

### 4.5.1 Bahndrehimpuls

Erinnerung an Kapitel 3: Symmetrie in der QM



Anwendung auf rotationssymmetrischen Hamiltonian:  $SO(3)$  Symmetriegruppe. Wenn  $\hat{D}$  Darstellung einer Drehung, dann

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{D}] = 0.$$

Für infinitesimale Drehungen gilt:  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{J}_i] = 0 \quad i = x, y, z.$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}) &= E\psi(\mathbf{r}) \\ \hat{D}\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}) &= \hat{\mathcal{H}}\hat{D}\psi(\mathbf{r}) = E\hat{D}\psi(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

d.h. mit  $\psi(\mathbf{r})$  ist auch  $\hat{D}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r})$  ( $\hat{R}$  Vektordarstellung der Drehgruppe) Eigenfunktion zum Eigenwert  $E$ .

Alle Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert bilden linearen Vektorraum  $L_E$  (lineare Kombination gehört wieder dazu).

Wähle Basis in  $L_E$ :  $\psi_m^{(E)} \rightarrow$  liefert Darstellung von  $\hat{D} : m = 1 \dots s_E. s_E$  ist die Dimension der Darstellung

$$\hat{D}\psi_m^{(E)} = \sum_{m'} D_{m',m}^{(E)} \psi_{m'}^{(E)}.$$

Darstellung  $D_{m',m}^{(E)}$  kann reduzibel oder irreduzibel sein. Wenn reduzibel: **zufällige Entartung oder verborgene Symmetrie.**

Betrachte jetzt die irreduziblen Darstellungen  $D_{m',m}^{(j)}$  der  $SO(3)$ .  $\rightarrow$  Energieeigenwert mindestens  $s_E = 2j + 1$ -fach entartet:  $-j \leq m \leq j$ . Eigenfunktionen  $\psi_m^{(j)}$  für festes  $j$  unterscheiden sich durch Verhalten bezüglich Rotation um feste Achse: hier  $z. \rightarrow$

$$\begin{aligned} E &= E(\gamma, j) \\ \psi &= \psi_m^{(j)}(\gamma) \end{aligned}$$

$\gamma$ : Satz von Quantenzahlen, die nicht von  $j, m$  abhängen. Wie schon gezeigt (4.4.3):

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \psi_m^{(j)}(\gamma) &= m \psi_m^{(j)}(\gamma) \\ \hat{J}^2 \psi_m^{(j)}(\gamma) &= j(j+1) \psi_m^{(j)}(\gamma) \end{aligned}$$

Identifikation von  $\hat{J}_q$  mit dem Drehimpuls:

**Bahndrehimpuls eines Teilchens**

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{l}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{r}} \times \left( \frac{\hbar}{i} \right) \nabla \\ \hat{l}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hbar \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} = \hbar \hat{J}_z \end{aligned}$$

Setze künftig  $\hbar = 1!$  Analog  $\hat{l}_x = \hat{J}_x, \hat{l}_y = \hat{J}_y.$

$\psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi, \theta)$   $m$  hier ganz, da

$$\hat{D}(R_z(2\pi))\psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi, \theta) = e^{-im2\pi}\psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi, \theta) = \psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi + 2\pi, \theta)$$

und  $\psi$  als Lösung der Schrödingergleichung eindeutig und stetig

**Kugelsymmetrisches Potential**  $V(r)$ : Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r) - E\right)\psi &= 0 \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{J}^2}{r^2}\right) + V(r) - E\right]\psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi, \theta) &= 0, \end{aligned}$$

und mit  $\psi_m^{(j)}(\gamma; r, \phi, \theta) = u_{\gamma j}(r)Y_m^{(j)}(\phi, \theta)$ :

$$\left[-\frac{1}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \left(V(r) + \frac{l(l+1)}{2Mr^2}\right) - E\right]u_{\gamma j}(r) = 0$$

Notation im Weiteren:

|                  |  |
|------------------|--|
| Bahndrehimpuls   | $\hat{l}, \hat{L}$ (1 bzw. mehrere Teilchen) |
| Spin             | $\hat{s}, \hat{S}$                           |
| Gesamtdrehimpuls | $\hat{j}, \hat{J}$                           |

**$n$ -Teilchen**

Gesamtdrehimpuls

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} &= \sum_{i=1}^n \hat{\mathbf{l}}(i) = \sum_{i=1}^n \hat{\mathbf{r}}(i) \times \hat{\mathbf{p}}(i) \\ \hat{L}_z &= -i \sum_i \frac{\partial}{\partial \phi_i} \end{aligned}$$

$\phi_i$  polarer Winkel des Teilchens  $i$ .

$$\psi = \psi(r_1, \theta_1, \phi_1; r_2, \theta_2, \phi_2; \dots; r_n, \theta_n, \phi_n)$$

Rotation um  $z$ -Achse läßt  $\forall r_i, \theta_i$  fest,  $\phi_i \rightarrow \phi_i - a$  gehen

$$\begin{aligned} \hat{D}(R_z(a))\psi(\phi_1, \dots, \phi_n) &= \psi(\phi_1 - a, \dots, \phi_n - a) \\ &\stackrel{a \ll 1}{\approx} \psi(\phi_1, \dots, \phi_n) - \sum_i a \frac{\partial}{\partial \phi_i} \psi(\phi_1, \dots, \phi_n) + O(a^2) \\ \rightarrow \hat{D}(R_z(a)) &\approx 1 - a \sum_i \frac{\partial}{\partial \phi_i} \\ \hat{J}_z &= -i \sum_i \frac{\partial}{\partial \phi_i} = \hat{L}_z \end{aligned}$$

$\hat{J}_z$  Operator für infinitesimale Rotation = Gesamtdrehimpuls ( $\hbar = 1$ )

$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{J}_q] = 0 \rightarrow$  Erhaltung des **Gesamtdrehimpulses**

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\psi, \hat{O}\psi) &= \left( \frac{\partial \psi}{\partial t}, \hat{O}\psi \right) + \left( \psi, \hat{O} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \frac{1}{i\hbar} \{ -(\hat{\mathcal{H}}\psi, \hat{O}\psi) + (\psi, \hat{O}\hat{\mathcal{H}}\psi) \} \\ &= (\psi, [\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}]\psi) / i\hbar \end{aligned}$$

$\rightarrow \hat{O}$  Erhaltungsgröße, wenn  $[\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ .

**Nicht wechselwirkende Teilchen** (oder sehr schwache Wechselwirkung, so dass einzelne  $\hat{\mathbf{I}}(i)$  erhalten): Wellenfunktion faktorisiert

$$\psi_{m_1, m_2}^{(l_1, l_2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{m_1}^{(l_1)}(\mathbf{r}_1) \psi_{m_2}^{(l_2)}(\mathbf{r}_2) \quad (4.11)$$

$$\psi' = \hat{D}(\mathbf{R}(a))\psi = \psi_{m_1}^{(l_1)'}(\mathbf{r}_1) \psi_{m_2}^{(l_2)'}(\mathbf{r}_2) = \sum_{m_1', m_2'} D_{m_1 m_1'}^{(l_1)} D_{m_2 m_2'}^{(l_2)} \psi_{m_1'}^{(l_1)} \psi_{m_2'}^{(l_2)}$$

i.e.  $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$  Produktfunktionen bilden Basis für Produktdarstellung  $\hat{D}^{(l_1)} \times \hat{D}^{(l_2)}$  der Gruppe  $\text{SO}(3)$ , diese ist reduzibel.

Ausreduktion: siehe 4.4 (iv)

$$\begin{aligned} \hat{D}^{(l_1)} \times \hat{D}^{(l_2)} &= \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \hat{D}^{(L)}, \\ L &= l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|, \end{aligned}$$

d.h. es gilt die ‘Vektoradditionsregel’

Durch Übergang zu neuer Basis im  $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$  dimensionalen Raum der Produktfunktionen

$$\psi_M^{(L)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\substack{m_1 \\ m_2=M-m_1}} C(l_1, l_2, L, m_1, m_2, M) \psi_{m_1}^{(l_1)}(\mathbf{r}_1) \psi_{m_2}^{(l_2)}(\mathbf{r}_2)$$

Betrachte Rotation um  $z$ -Achse:  $\text{SO}(2) \hat{T}^{(m_1)} \times \hat{T}^{(m_2)} = \hat{T}^{(m_1+m_2)} \rightarrow M = m_1 + m_2$ .

Klassisch:  $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 \quad |\mathbf{L}| = |\mathbf{l}_1| + |\mathbf{l}_2|, \dots, ||\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2||$ .

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_M^{(L)} &= L(L+1) \psi_M^{(L)} \\ \hat{\mathbf{L}}_z \psi_M^{(L)} &= M \psi_M^{(L)} \quad -L \leq M \leq L \end{aligned}$$

3 Teilchen =  $(1+1)+1$  etc.

Anwendung eines Magnetfelds hebt  $2l + 1$ -fache Entartung auf.

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} + \mu_B B \hat{l}_z, \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{l}_z] = 0$$

Unterstes Niveau  $l = 0, m = 0 \rightarrow$  keine Aufspaltung des Niveaus im  $B$ -Feld zu erwarten.

H-Atom: Niveau spaltet auf  $\rightarrow$  Spin.

### 4.5.2 Der Spin

Protonen, Neutronen, Elektronen haben Spin  $s = 1/2$ ;  $\rho$ -Meson  $s = 1$ ;  $\Omega^-$ -Teilchen  $s = 3/2$ .

Diese Möglichkeit  $\exists$  bei Darstellungen der SO(3):  $j =$  ganz oder halbzahlig. Bahnmoment ganzzahlig:

$$\begin{array}{l} \text{Wellenfunktion} \rightarrow \text{Lösung der Schrödingergl.} \quad \psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi) \\ \text{Basisfkt. für irred. Darstellungen} \quad \psi(\phi = 0) = \pm \psi(\phi = 2\pi) \end{array}$$

$l = \frac{1}{2}$ :  $\psi(r, \phi) = -\psi(r, \phi + 2\pi - \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0}$  Wellenfunktion unstetig, nicht brauchbar als Lösung der Schrödingergleichung.

Spin folgt aus relativistischer (Dirac-) Gleichung,  $j = n/2$  möglich. Spin  $s$  im  $B$ -Feld Aufspaltung  $2s + 1$ -fach. Spin Zustand ist durch Basisfunktionen  $\chi_{m_s}^{(s)}$   $m_s = -s, \dots, s$  charakterisiert. Unter Rotation

$$\left(\chi_{m_s}^{(s)}\right)' = \hat{D}(R(\mathbf{a}))\chi_{m_s}^{(s)} = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(R(\mathbf{a}))\chi_{m'_s}^{(s)}.$$

Für infinitesimale Rotationen sind die  $\hat{D}$   $\hat{D} \approx 1 + a\hat{J}_i$  wieder durch die Matrizen von 4.4.3 gegeben. Für einen einzelnen Spin nennen wir  $\hat{J} = \hat{s}$ , für den Gesamtspin  $\hat{J} = \hat{S}$

$$\begin{aligned} \hat{s}_z \chi_{m_s}^{(s)} &= m_s \chi_{m_s}^{(s)} & (\chi_{m_s}^{(s)}, \chi_{m'_s}^{(s)}) &= \delta_{m_s m'_s} \\ \hat{s}^2 \chi_{m_s}^{(s)} &= s(s+1) \chi_{m_s}^{(s)} \end{aligned}$$

Gesamtspin  $\hat{S}_q = \sum_i \hat{s}_q(i)$ .

Gesamtwellenfunktion  $\Psi = \sum_{m_s=-s}^s \phi_{m_s}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}$

$$\chi_s^{(s)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{s-1}^{(s)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{etc.} \rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} \phi_s(\mathbf{r}) \\ \phi_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \phi_{-s}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

$$(\tilde{\Psi}, \Psi) = \sum_{m_s, m'_s} \int d^d r \tilde{\phi}_{m'_s}^*(\mathbf{r}) \phi_{m_s}(\mathbf{r}) (\chi_{m'_s}^{(s)}, \chi_{m_s}^{(s)})$$

$$\hat{D}(R)\Psi = \sum_{m_s} \phi_{m_s}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) (\chi_{m_s}^{(s)})'$$

$R$  beschreibe Rotation um  $z$ -Achse um kleinen Winkel  $a$ .

$$\begin{aligned} \hat{D}(R)\psi &\approx \sum_{m_s} (1 - ia\hat{l}_z) \phi_{m_s}(\mathbf{r}) (1 - ia\hat{s}_z) \chi_{m_s}^{(s)} \\ &\approx \sum_{m_s} [1 - ia(\hat{l}_z + \hat{s}_z)] \phi_{m_s}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)} = \sum_{m_s} [1 - ia(\hat{l}_z + \hat{s}_z)] \Psi \end{aligned}$$

→ infinitesimaler Operator für die vollständige Wellenfunktion  $\Psi$  ist  $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$ ,  
 $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$  "Gesamtdrehimpuls" des Teilchens (in  $\hbar$  Einheiten).

Endliche Rotation  $R(a)$

$$\begin{aligned} \hat{D}(R)\Psi &= \sum_{m_s} \phi_{m_s}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r})(\chi_{m_s}^{(s)})' \\ &= \sum_{m_s} \phi_{m_s}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \chi_{m'_s}^{(s)} \\ &= \sum_{m'_s} \left( \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \phi_{m_s}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \right) \chi_{m'_s}^{(s)} = \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_s(\mathbf{r}) \\ \tilde{\phi}_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$\tilde{\phi}_{m'_s}(\mathbf{r}) = \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \phi_{m_s}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r})$  "Koordinaten"-Transformation. Rotation sowohl in den Funktionen  $\phi(\mathbf{r})$  und den Spinzuständen.

Betrachte jetzt separate Rotation in beiden Anteilen der Wellenfunktion.

Spezieller Fall der Wellenfunktion  $\Psi$ : Teilchen in Zustand mit speziellem Spin- und Bahndrehimpulszustand.

$\Psi(l, s, m_l, m_s) = \psi_{m_l}^{(l)}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}$  es existieren  $(2l+1)(2s+1)$  solche Produkte.

Unter der Rotation transformiert sich  $\psi(l, s, m_s, m_l)$  nach der Produktdarstellung  $\hat{D}^{(l)} \times \hat{D}^{(s)}$  der  $SO(3)$ .

Diese Darstellung reduziert sich zu  $\hat{D}^{(l)} \times \hat{D}^{(s)} = \sum_{j=|l-s|}^{l+s} \hat{D}^{(j)}$   $j = (l+s), (l+s-1), \dots, |l-s|$ , wobei die neue Basis

$$\Psi(l, s, j, m) = \sum_{m_l} C(l, s, j, m_l, m_s, m) \psi_{m_l}^{(l)}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)} \quad (m_s + m_l = m).$$

### 4.5.3 Das H-Atom

Nicht-relativistisch  $V(r) = -\frac{e^2}{r}$  in  $\mathcal{H}$ .

Lösung der Schrödingergleichung  $\psi_{m_l}^{(l)}(n, \mathbf{r}) = u_{nl}(\mathbf{r}) Y_{m_l}^{(l)}(\theta, \phi)$ .

Energieniveaus (siehe QM)  $E_{nl} = -\frac{Me^4}{2\hbar^2 n^2}$

$n = 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n-1$

|                   | $n$      | $l$            | $K$ ( $n = 2K + 1, l = 2K, \dots, 0$ ) |
|-------------------|----------|----------------|--|
| Grundzustand      | 1        | 0(s)           | 0                                      |
| (2 fach entartet) | 2        | 0(s), 1(p)     | 1/2                                    |
| (3 fach entartet) | 3        | 0(s), 1(p), 3d | 1                                      |
|                   | $\vdots$ |                |  |

Aus  $SO(3)$  Symmetrie ist diese Entartung der Energieniveaus nicht zu verstehen (existiert nicht für  $1/r^{1+\epsilon}$  Potential).

Es existieren weitere “dynamische” (d.h. nicht auf Geometrie beruhende) Symmetrien.  $L = l$ :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \frac{e^2}{r} \\ \hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}_q] = 0 \quad q = x, y, z\end{aligned}$$

$\hat{\mathcal{H}}$  kommutiert mit weiterem Operator, “Runge–Lentz–Vektor”:

$$\boxed{\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2M}[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}] - \frac{e^2}{r} \mathbf{r}}$$

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_q] = 0 \quad q = x, y, z,$$

d.h.  $\hat{\mathbf{A}}$  ist Erhaltungsgröße. Außerdem:  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$ .

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \frac{2\hat{\mathcal{H}}}{M}(\hat{\mathbf{L}}^2 + 1) + e^4 \quad (\text{W. Pauli 1926})$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (4.12)$$

$$[\hat{A}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{A}_k \quad (4.13)$$

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -\frac{2i}{M} \hat{\mathcal{H}} \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (4.14)$$

$\hat{A}_i$  kommutiert nicht mit  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , i.e. Erhaltungsgröße, die nicht gleichzeitig mit  $\hat{L}$  gemessen werden kann.

Die Komponenten von  $\hat{\mathbf{L}}$  bilden abgeschlossene Algebra (die der SO(3)). Nicht so die von  $\hat{\mathbf{L}}$  und  $\hat{\mathbf{A}}$  ( $\hat{\mathcal{H}}$  erscheint rechts).

$\hat{\mathcal{H}}$  aber **zeitunabhängig**, kommutiert mit  $\hat{\mathbf{L}}$  und  $\hat{\mathbf{A}}$ . Beschränkung auf den Teil des Hilbertraums, der zu festem Energieeigenwert  $E$  von  $\hat{\mathcal{H}}$  gehört.  $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow E$ .

Gebundene Zustände:  $E < 0 \quad \hat{\mathbf{A}}' = \sqrt{-\frac{M}{2E}} \hat{\mathbf{A}}$

$$\boxed{\begin{aligned}[\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \\ [\hat{A}'_i, \hat{L}_j] &= i\varepsilon_{ijk} \hat{A}'_k \\ [\hat{A}'_i, \hat{A}'_j] &= i\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k\end{aligned}}$$

Die 6 Operatoren  $\hat{A}'_i, \hat{L}_i$  sind die **Generatoren der SO(4)** (im wesentlichen).

$\hat{L}_i$  Drehungen in  $yz, xz, xy$ -Ebene,  $\hat{A}_i$  Drehungen in  $xu, yu, zu$ -Ebene.

SO(4): realisiert durch reelle orthogonale  $4 \times 4$  Matrizen mit Determinate +1.

$\underline{\underline{D}}(R) = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{M}}$ , wobei die Matrixelemente von  $\underline{\underline{M}}$  klein für kleine Drehungen sind.

Orthogonalität:  $\underline{\underline{D}}^\dagger \underline{\underline{D}} = 1 \rightarrow \underline{\underline{M}} + \underline{\underline{M}}^\dagger = 0$

$$\rightarrow \underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} 0 & -a_z & a_y & c_x \\ a_z & 0 & -a_x & c_y \\ -a_y & a_x & 0 & c_z \\ -c_x & -c_y & -c_z & 0 \end{pmatrix} = \sum_{q=1}^3 a_q \underline{\underline{X}}_q + c_q \underline{\underline{Z}}_q$$

Wenn  $c_q \equiv 0 \rightarrow \text{SO}(3)$ , Untergruppe von  $\text{SO}(4)$ .

Also

$$\begin{aligned} \underline{\underline{X}}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{X}}_y &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{etc.} \\ &\vdots \\ \underline{\underline{Z}}_z &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Kann explizit zeigen, dass  $[\hat{X}_x, \hat{X}_y] = \hat{X}_z$  etc.;  $[\hat{X}_x, \hat{Z}_x] = 0$  etc., i.e. die  $\hat{X}_i$  und  $\hat{Z}_i$  haben die gleichen Vertauschungsregeln wie  $-i\hat{L}_i$  und  $-i\hat{A}'_i$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= (x_1, x_2, x_3), \quad \hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3) \\ [r_i, \hat{p}_j] &= i\delta_{ij} \end{aligned} \tag{4.15}$$

$$\hat{L}_{ij} = r_i \hat{p}_j - r_j \hat{p}_i \tag{4.16}$$

$$\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_{23}, \hat{L}_{31}, \hat{L}_{12}).$$

Dehne jetzt  $i, j$  auf 1...4 aus,  $r_4, \hat{p}_4$  erfüllen (4.12)–(4.14)

$$\hat{A}'_x = \hat{L}_{14}, \quad \hat{A}'_y = \hat{L}_{24}, \quad \hat{A}'_z = \hat{L}_{34} \quad \rightarrow \quad \boxed{\text{Kommutatorrelationen}}$$

(Funktioniert nur bei gebundenen Zuständen mit  $E < 0$ , falls  $E > 0 \rightarrow$  Lorentzgruppe.)

Energieniveaus des H-Atoms:

$$\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{A}}'), \quad \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{A}}')$$

$$[\hat{I}_i, \hat{I}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{I}_k$$

$$[\hat{K}_i, \hat{K}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{K}_k$$

$$[\hat{I}_i, \hat{K}_j] = 0 \quad \rightarrow \quad \hat{I}_k \text{ und } \hat{K}_k \text{ entkoppeln}$$

$$[\hat{\mathbf{I}}, \hat{\mathcal{H}}] = [\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$$

$\hat{I}_i$  und  $\hat{K}_i$  bestimmen eine SO(3) (oder SU(2)) Algebra.  $\rightarrow \text{SO}(4) \Leftrightarrow \text{SO}(3) \times \text{SO}(3)$

(gilt nur lokal).

$$\begin{aligned} \text{Eigenwerte von } \hat{\mathbf{I}}^2 &: I(I+1) & I = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \\ \hat{\mathbf{K}}^2 &: K(K+1) & K = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \end{aligned}$$

Irreduzible Darstellungen der  $\text{SO}(3) \times \text{SO}(3) \rightarrow$  direktes Produkt der Darstellungen der SO(3):  $\hat{D}^{(I,K)} = \hat{D}^{(I)} \times \hat{D}^{(K)}$ . Dimension der Darstellung  $(2I+1)(2K+1)$ .

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{I}}^2 &= \frac{1}{4}(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{A}}')^2 \\ \hat{\mathbf{K}}^2 &= \frac{1}{4}(\hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{A}}')^2 \\ \hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{K}}^2 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{A}}'^2) \\ \hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{\mathbf{K}}^2 &= \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}}' \end{aligned}$$

Da  $\mathbf{A}' \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A}' = 0$  folgt  $I = K$ .

Daher sind die Eigenwerte von  $\hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{K}}^2$ :  $2K(K+1)$ .

$$\hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{K}}^2 = \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{L}}^2 - \frac{M}{2E} \hat{\mathbf{A}}^2 \right) = -\frac{Me^4}{4E} - \frac{1}{2} = 2K(K+1)$$

Es folgt

$$E = -\frac{Me^4}{2(2K+1)^2}, \quad K = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$I$  und  $K$  können auch halbzahlig sein (siehe Add. von Drehimpulsen)

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{K}} \quad \rightarrow \text{Eigenwerte} \\ L &= I + K, I + K - 1, \dots, |I - K| = 0 \\ &= 2K, 2K - 1, \dots, 0 \end{aligned}$$

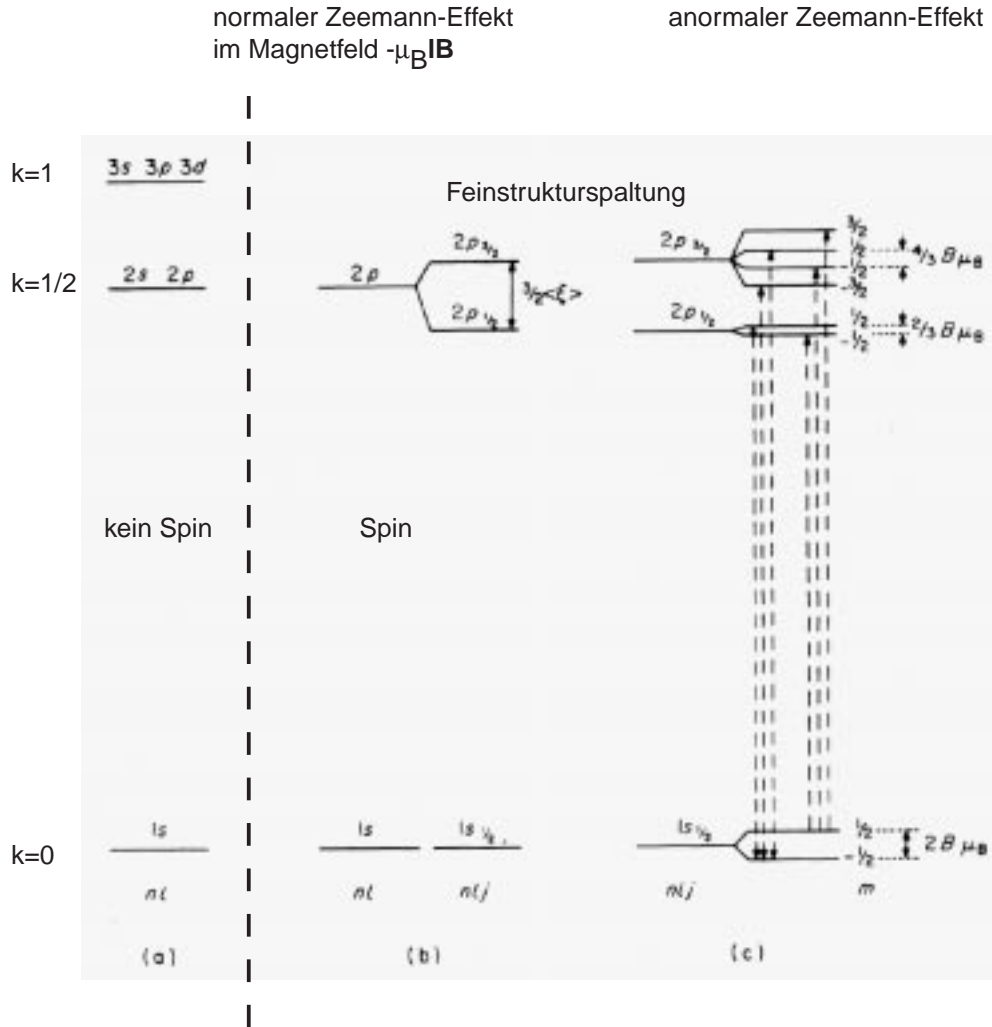
$\rightarrow$  Bahndrehimpuls ist ganzzahlig.

$\hat{I}_z$  und  $\hat{K}_z$  können jeweils  $2K+1$  unabhängige Eigenwerte annehmen  $\rightarrow (2K+1)^2$  Zustände.

Entartungsgrad  $(2K+1)^2 = n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)^2$ .



Energie Niveaus des H-Atoms im Magnetfeld:



Spin-Bahn-Kopplung

$$\mathcal{H}_{SB} \approx \alpha^2 \frac{e^2}{r_0} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \sim 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{137}$$

Ohne Spin-Bahn-Kopplung:  $SO(3) \times SO(3)$  oder besser  $SO(4) \times SO(3)$ .

Kopplung von Bahndrehimpulsen  $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2$ :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_1(1) + \hat{\mathcal{H}}_2(2) + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ww}}(1, 2)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2, \quad [\mathbf{L}^2, \mathbf{l}_i^2] = 0, \quad [L_z, \mathbf{l}_i^2] = 0$$

$\hat{\mathcal{H}}_1, \hat{\mathcal{H}}_2$   $SO(3)$ -symmetrisch.

Ohne Kopplung:

$$[\hat{\mathcal{H}}_i, \hat{\mathbf{l}}_i^2] = 0, \quad [\hat{\mathcal{H}}_i, \hat{l}_{i,z}] = 0$$

$l_1, m_1, l_2, m_2$  Quantenzahlen, oder auch  $L, M, l_1, l_2$ .

Mit Kopplung:

a)  $[\hat{\mathcal{H}}_{\text{ww}}(1, 2), \hat{\mathbf{I}}_i^2] = 0$ ,  $l_1, l_2$  immer noch Quantenzahlen;  $[\hat{\mathcal{H}}_{\text{ww}}, \hat{l}_{iz}] \neq 0$ .

$$\Psi_M^{(L)}(l_1, l_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_2 = M - m_1}} C(l_1, l_2, L, m_1, m_2, M) \psi_{m_1}^{(l_1)}(\mathbf{r}_1) \psi_{m_2}^{(l_2)}(\mathbf{r}_2)$$

$\Psi_M^{(L)}$  Basisfunktionen für SO(3), Störungstheorie mit diesen Funktionen.

$$\mathcal{H}_{\text{ww}} = a \hat{\mathbf{l}}_1 \cdot \hat{\mathbf{l}}_2 = a(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{l}}_1^2 - \hat{\mathbf{l}}_2^2)$$

b)  $[\mathcal{H}_{\text{ww}}(1, 2), \hat{\mathbf{I}}_i^2] \neq 0$ ,  $l_1, l_2$  keine guten Quantenzahlen mehr.

#### 4.5.4 Transformation von Vektorfeldern unter der Rotation

Rotation  $R$ : Vektordarstellung  $\hat{R}\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  (neuer Vektor in alter Basis).

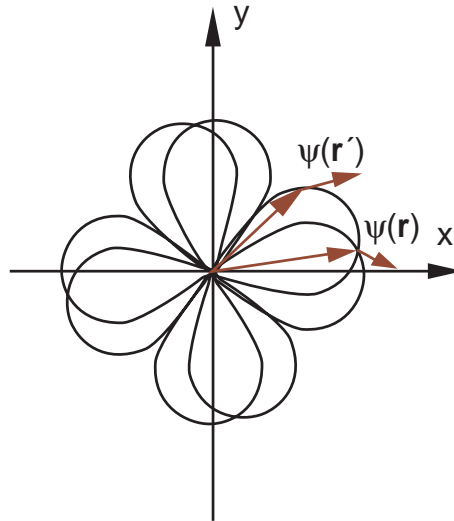
“Induzierte” Transformation für skalares Feld  $\psi$

$$\hat{D}(R)\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r})$$

oder

$$\boxed{\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r})} = \hat{D}(R)\psi(\hat{R}\mathbf{r}).$$

Anschauliche Bedeutung: (aktive) Drehung der Funktion  $\psi(\mathbf{r})$ :



Betrachte jetzt Vektorfeld  $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}), \psi_3(\mathbf{r}))$ , beispielsweise zur Beschreibung des Photons (Vektorpotential  $\mathbf{A}$ ) oder des Vektormesons.

**Aktive Drehung:**  $\boldsymbol{\psi}'(\mathbf{r}', t) = \hat{R}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}, t)$ , d.h. die Beträge transformieren sich wie gehabt  $|\boldsymbol{\psi}'(\mathbf{r}')| = |\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})|$ , die Richtung transformiert sich wie der Ortsvektor:

$$\boxed{\hat{D}(R)\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \boldsymbol{\psi}'(\mathbf{r}) = \hat{R}\boldsymbol{\psi}(\hat{R}^{-1}\mathbf{r})}$$

Betrachte wieder kleine Rotation um Achse  $\mathbf{k}$  um Winkel  $a$ :

$$\hat{R}_{\mathbf{k}}(a) \approx \hat{1} + a\mathbf{e}_k \times \dots$$

$a\mathbf{e}_k = \mathbf{a}_k$ ,  $\mathbf{e}_k = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ , lasse im Weiteren  $\mathbf{k}$  weg! (Achse bleibt fest gewählt.)

$$\begin{aligned} \hat{D}(R)\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\psi}'(\mathbf{r}) &= (1 + \mathbf{a} \times) \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r} - \mathbf{a} \times \mathbf{r}) + O(a^2) \\ &= \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) + (-\mathbf{a} \times \mathbf{r})_i \frac{\partial}{\partial x_i} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) + O(a^2) \end{aligned}$$

$|\mathbf{a}| \ll 1$ . Vereinfachung:

2. Term:

$$\begin{aligned} (\mathbf{a} \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}))_i &= \varepsilon_{ijk} a_j \psi_k = -i a_j (\hat{S}_j)_{ik} \psi_k = -i \mathbf{a} \cdot (\hat{\mathbf{S}})_{ik} \psi_k \\ (\hat{S}_j)_{ik} &= i \varepsilon_{ijk} \end{aligned}$$

Also  $(\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3), \hbar = 1)$

$$\begin{aligned} (\hat{S}_1)_{ik} &= i \varepsilon_{i1k} = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ (\hat{S}_2)_{ik} &= i \varepsilon_{i2k} = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ (\hat{S}_3)_{ik} &= i \varepsilon_{i3k} = i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

3. Term:

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{r})_i \frac{\partial}{\partial x_i} = \varepsilon_{ijk} a_j x_k \frac{\partial}{\partial x_i} = i \varepsilon_{jki} a_j x_k \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} = i \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{l}}$$

$\hat{\mathbf{l}}$ : Bahndrehimpuls.

$$\hat{D}(R)\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) \approx [1 - i \mathbf{a} \cdot (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})] \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) + O(a^2)$$

$\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{j}}$ ,  $\hat{\mathbf{s}}$  ist der innere Drehimpuls des Feldes oder "Spin".

$\hat{\mathbf{l}}$ : Differentialoperator.

$\hat{\mathbf{s}}$ : Matrixoperator, "mischt" die Komponenten des Vektors  $\boldsymbol{\psi}$ .

$$\rightarrow [\hat{\mathbf{l}}_i, \hat{s}_k] = 0, \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k \text{ schon früher gezeigt. } [\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k.$$

Wegen  $[\hat{l}_i, \hat{s}_j] = 0 \rightarrow [\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i \varepsilon_{ijk} \hat{j}_k$ , d.h. die Operatoren  $\hat{s}_i$  und  $\hat{j}_i$  erfüllen die

Kommutatorrelationen für Drehimpulse

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + \hat{s}_3^2 &= i^2 \left[ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 1(1+1)\hat{\mathbf{l}} \end{aligned}$$

**Fazit:** Vektorfelder tragen einen Spin von Betrag 1, sie beschreiben also Spin 1-Teilchen (Photonen, Vektormesonen).

### 4.5.5 Die Pauli–Gleichung, zweier–Spinoren

Oder, wie rotiert man Spin–Funktionen?

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = \left\{ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{B} \right\} \Psi \quad (\text{W. Pauli 1927})$$

$\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{B} = \hat{\sigma}_x B_x + \hat{\sigma}_y B_y + \hat{\sigma}_z B_z$ ,  $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$  zweier Spinor.

Unter einer Drehung  $\Psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}\Psi(\mathbf{r})$ .  $\hat{D}$ ?

Aus Erhaltung der Norm unter der Rotation folgt

$$(\Psi, \Psi) = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = (\Psi', \Psi') = (\Psi, \hat{D}^\dagger D \Psi)$$

i.e.  $\hat{D}^\dagger \hat{D} = 1$ .

Bei Spin–unabhängigen Prozessen:  $\Psi^\dagger \Psi$  muß sich wie  $\psi^* \psi$  (spin–unabhängige Wellenfunktion) transformieren:

$$\begin{aligned} \Psi'^\dagger(\mathbf{r}) \Psi'(\mathbf{r}) &= \Psi^\dagger(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \Psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{m=1}^2 \psi_m^*(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \psi_m(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \sum_{m=1}^2 \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a}_k \hat{1}} \psi_m(\mathbf{r}) \right]^* \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a}_k \hat{1}} \psi_m(\mathbf{r}) \right] \\ &= \left[ \hat{D}_l(R_{\mathbf{k}}(a)) \Psi \right]^\dagger \left[ \hat{D}_l(R_{\mathbf{k}}(a)) \Psi \right] \end{aligned}$$

$\hat{D}_l$  berücksichtigt Transformation des Koordinatenanteils der Spinoren. Das Transformationsverhalten wird durch den noch unbekanntem koordinatenunabhängigen Operator  $\hat{D}_s(R_{\mathbf{k}}(a))$  zu beschreiben sein, analog dem  $\hat{R}\boldsymbol{\psi}$  beim Vektorfeld.

$$\hat{D}(R_{\mathbf{k}}(a)) = \hat{D}_s(R) \cdot \hat{D}_l(R).$$

Da  $\hat{D}_l$  unitär, muß auch  $\hat{D}_s$  unitär sein.

**Ansatz:**  $\hat{D}_s(R_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})) = e^{-i\mathbf{a}_k \cdot \hat{\mathbf{b}}}$ .  $\hat{\mathbf{b}}$ ?

$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  verhalten sich bei Raumdrehungen wie ein Vektor

$$\hat{\sigma}'_i = \hat{D}_s^\dagger \hat{\sigma}_i \hat{D}_s = R_{ji} \hat{\sigma}_j \quad \text{oder} \quad R_{ij} \hat{D}_s^\dagger(\mathbf{a}_k) \hat{\sigma}_i \hat{D}_s(\mathbf{a}_k) = \hat{\sigma}_j$$

$R_{ji}$  Vektordarstellung. Bei infinitesimaler Drehung:

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \delta_{ij} + \varepsilon_{imj}(\mathbf{a}_k)_m \\ \hat{D}_s &= \hat{1} - i(\mathbf{a}_k)_m b_m \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j^* &\approx \left( \delta_{ij} + \varepsilon_{imj}(\delta a)_m \right) \left( \hat{1} + i(\delta a)_l \hat{b}_l \right) \hat{\sigma}_i \left( \hat{1} - i(\delta a)_n \hat{b}_n \right) \\ &\approx \left( \delta_{ij} + \varepsilon_{imj}(\delta a)_m \right) \left( \hat{\sigma}_i + i(\delta a)_n [\hat{b}_n, \hat{\sigma}_i] \right) \\ &\approx \hat{\sigma}_j + \varepsilon_{imj}(\delta a)_m \sigma_i + i(\delta a)_n [\hat{b}_n, \hat{\sigma}_j] \end{aligned}$$

Da  $(\delta a)_m$  beliebig gewählt  $\rightarrow [\hat{b}_n, \hat{\sigma}_j] = i\varepsilon_{knj}\hat{\sigma}_k$ .

Stelle  $\hat{b}_n$  über Pauli-Matrizen:

$$\hat{b}_n = \alpha_{nm}\hat{\sigma}_m + \beta_n\hat{1}$$

$\beta_n\hat{1}$  trivial, kann weggelassen werden.

$$\alpha_{nm}[\hat{\sigma}_m, \hat{\sigma}_j] = i\varepsilon_{njk}\hat{\sigma}_k$$

$$[\hat{\sigma}_m, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{mjk}\hat{\sigma}_k \rightarrow 2\alpha_{nm} = \delta_{nm} \text{ oder } \hat{b} = \hat{\sigma}_n \frac{1}{2} = \hat{s}_n$$

$$\hat{D}_s(R_{\mathbf{k}}(a)) = e^{-i\mathbf{a}_k \hat{\sigma} / 2}$$

$$\boxed{\hat{D}(R_{\mathbf{k}}(a)) = e^{-i\mathbf{a}_k(\hat{1} + \frac{1}{2}\hat{\sigma})}}$$

$$\hat{1} + \frac{1}{2}\hat{\sigma} = \mathbf{1} + \mathbf{s} = \mathbf{j}$$

$$\sigma^2 = 3, \quad s^2 = \left(\frac{1}{2}\sigma\right)^2 = \frac{3}{4} = s(s+1)$$

## 4.6 Die SU(2)–Gruppe

### 4.6.1 Gruppe der unitären $2 \times 2$ –Matrizen mit der Determinante Eins

Diese Gruppe ist *lokal equivalent* zur SO(3), *global kompakt* und *einfach zusammenhängend* (im Unterschied zur SO(3)).

$\rightarrow$  Darstellungen der SU(2) sind eindeutig.

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{D}}\underline{\underline{D}}^\dagger = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} aa^* + bb^* & ac^* + bd^* \\ ca^* + db^* & cc^* + dd^* \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (4.17)$$

$$|c|^2 + |d|^2 = 1 \quad (4.18)$$

$$ac^* + bd^* = 0 \quad (4.19)$$

Dies sind insgesamt 4 Bedingungen an die 8 Parameter  $a, b, c, d$ .

Ansatz:

$$a = \cos \theta e^{i\xi_a}, \quad b = -\sin \theta e^{i\xi_b}$$

$$c = \sin \phi e^{i\xi_c}, \quad d = \cos \phi e^{i\xi_d}$$

$$0 \leq \theta, \quad \phi \leq \frac{\pi}{2}, \quad 0 \leq \xi_i < 2\pi.$$

Damit sind (4.17) und (4.18) automatisch erfüllt.

$$\rightarrow |ac^*| = |bd^*|, \quad \xi_a - \xi_c = \xi_b - \xi_d, \quad \xi_a + \xi_b = \xi_c + \xi_d = 2\lambda,$$

$$\cos(\theta - \phi) = 0 \rightarrow \theta = \phi.$$

Es gilt dann (modulo  $2\pi$ ):

$$\begin{aligned} \xi_a &= \lambda + \xi & \xi_d &= \lambda - \xi \\ \xi_b &= \lambda + \eta & \xi_c &= \lambda - \eta \end{aligned}$$

Eine beliebige unitäre  $2 \times 2$  Matrix läßt sich als (SU(2):  $\lambda = 0$  wegen Determinante =1)

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} \cos \theta e^{i\xi} & -\sin \theta e^{i\eta} \\ \sin \theta e^{-i\eta} & \cos \theta e^{-i\xi} \end{pmatrix}$$

schreiben,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \lambda < \pi$ ,  $0 \leq \eta$ ,  $\xi < 2\pi$ .

Generatoren?  $\theta$  klein:

$$\underline{D} \approx \begin{pmatrix} e^{i\xi} & -\theta e^{i\eta} \\ \theta e^{-i\eta} & e^{-i\xi} \end{pmatrix} = \underline{1} + i\xi \underline{\sigma}_z - i\theta \underline{\sigma}_y - i\theta \eta \underline{\sigma}_x$$

mit den Pauli-Matrizen  $\underline{\sigma}_x, \underline{\sigma}_y, \underline{\sigma}_z$

$$\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

d.h. die SU(2) hat die gleichen Generatoren wie die SO(3).

Global ist das Verhalten verschieden. Schreibe  $\underline{D}$  als:

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} x_0 - ix_3 & -x_2 - ix_1 \\ x_2 - ix_1 & x_0 + ix_3 \end{pmatrix}.$$

(a):  $x_0^2 + x_3^2 + x_2^2 + x_1^2 = 1$   $\underline{D}$  unitär.

(b):  $x_2^2 + x_1^2 + x_0^2 + x_3^2 = 1$ .

(c):  $(x_0 - ix_3)(x_2 + ix_1) + (-1)(x_2 + ix_1)(x_0 - ix_3) = x_0x_2 + x_1x_3 - ix_2x_3 + ix_1x_0 - x_2x_0 - x_1x_3 + ix_2x_3 - ix_1x_0 = 0$ .

SU(2):  $\boxed{x_0^2 + x_3^2 + x_1^2 + x_2^2 = 1}$

Sind die  $x_i$  die karthesischen Koordinaten in einem 4-dimensionalen Euklidischen Raum, dann ist der Gruppenparameterraum die Oberfläche der Einheitskugel, d.h. die Gruppenmannigfaltigkeit ist kompakt und **einfach** zusammenhängend.

Man kann mit  $\theta = \beta/2$ ,  $\xi = (-\alpha - \gamma)/2$  und  $\eta = (-\alpha + \gamma)/2$   $\underline{D}$  in der Form

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2)e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin(\beta/2)e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin(\beta/2)e^{-i(\alpha-\gamma)/2} & \cos(\beta/2)e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

schreiben.  $0 \leq \beta \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \alpha < 2\pi$ ,  $0 \leq \gamma < 4\pi$ .

$\underline{D}$  entspricht völlig der Darstellung der SO(3) mit  $j = 1/2$ , mit Ausnahme vom Wertebereich für  $\gamma$  ( $0 \leq \gamma < 2\pi$ ). Die Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$  sind die Euler-Winkel:

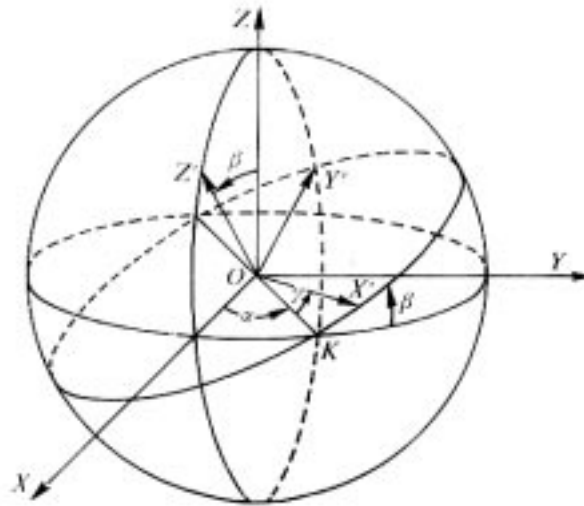
$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{3'}(\gamma)R_N(\beta)R_3(\alpha).$$

D.h., man kann mit dieser Darstellung der  $SO(3)$  die Darstellung der  $SU(2)$  bekommen, wenn man den Wertebereich von  $\gamma$  verdoppelt.

Für  $\gamma = 2\pi$ ,  $\alpha = \beta = 0$  sind die Rotationen  $R(0, 0, 2\pi)$ ,  $R(0, 0, 0)$  die gleichen Operationen, ihre Darstellungen durch  $SU(2)$  Matrizen:  $\bar{E} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ,  $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  jedoch nicht. D.h. die Darstellungen der  $SO(3)$  durch  $SU(2)$  Matrizen sind zweideutig.

Die Faktorgruppe  $SU(2)/Z_2$  ist isomorph zu  $SO(3)$ , mit  $Z_2 = \{\bar{E}, E\}$  als Normalteiler.

**Euler-Winkel**



Rotationsmatrix

$$D_{nm'} = \left[ e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z} \right]_{nm'} = e^{-im\alpha} (e^{-i\beta \hat{J}_y})_{nm'} e^{-i\gamma m'}$$

$j = 1/2$ :

$$\underline{\underline{D}}^{(1/2)} = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \beta/2 & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \beta/2 \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \beta/2 & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix}$$

**Einschub: Invariante Untergruppe:**

$\mathcal{H}$  sei Untergruppe von  $\mathcal{G}$ , dann auch  $G\mathcal{H}G^{-1}$  Untergruppe von  $\mathcal{G}$  (genauer: die **konjugierte** Untergruppe)

$$(GH_iG^{-1})(GH_jG^{-1}) = G(H_i, H_j)G^{-1} = GH_kG^{-1} \in G\mathcal{H}G^{-1}$$

$$(GH_iG^{-1})^{-1} = G(GH_i)^{-1} = GH_i^{-1}G^{-1}$$

i.a. ist  $\mathcal{H}$  verschieden von  $G\mathcal{H}G^{-1}$ .

Wenn jedoch  $\mathcal{H} = G\mathcal{H}G^{-1}$  für  $\forall G \in \mathcal{G}$ , dann nennt man  $\mathcal{H}$  eine **invariante Untergruppe** von  $\mathcal{G}$  (auch “**normale Untergruppe**” oder “**Normalteiler**” genannt).

Vergleiche Klassendefinition: invariante Untergruppen müssen aus Klassen zusammengesetzt sein!

**Beispiel  $C_{3v}$ :**

$$\begin{aligned} \text{Untergruppen} \quad \mathcal{H}_1 &= \{e, R_1, R_2 = R_1^{-1}\} = \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 \\ \mathcal{H}_2 &= \{e, R_3\} \\ \mathcal{H}_3 &= \{e, R_4\} \\ \mathcal{H}_4 &= \{e, R_5\} \end{aligned}$$

$\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3, \mathcal{H}_4$  nicht invariant, da jeweils 2 Elemente für  $\mathcal{C}_3$  fehlen.

$$\begin{aligned} \text{Klassen} \quad \mathcal{C}_1 &= e \\ \mathcal{C}_2 &= \{R_1, R_2\} \\ \mathcal{C}_3 &= \{R_3, R_4, R_5\} \end{aligned}$$

→  $\mathcal{H}_1$  ist eine invariante Untergruppe von  $C_{3v}$ !

Zerlege jetzt die Gruppe  $\mathcal{G}$  (Ordnung  $g$ ) bezüglich der invarianten Untergruppe  $\mathcal{N}$  der Ordnung  $n$  ( $\mathcal{N}G_i$  rechte Nebenklasse von  $\mathcal{N}$ )

$$\mathcal{G} = \mathcal{N}G_1 + \mathcal{N}G_2 + \cdots + \mathcal{N}G_l, \quad G_1 = e, \quad l = g/n$$

Konstruktion:  $G_2$  nicht in  $\mathcal{N}$  enthalten;  $G_3$  nicht in  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{N}G_2$  enthalten; etc.

**Fazit:** Alle Terme enthalten verschiedene Gruppenelemente.

Produkte von Elementen, die zu  $\mathcal{N}G_i$  und  $\mathcal{N}G_j$  gehören, können jetzt in der Form

$$(\mathcal{N}_p G_i)(\mathcal{N}_q G_j) = \mathcal{N}_p G_i \mathcal{N}_q G_i^{-1} G_i G_j = \mathcal{N}_r G_i G_j \in \mathcal{N}G_i G_j$$

$$(\mathcal{N}G_i)(\mathcal{N}G_j) = \mathcal{N}G_i G_j$$

i.e. das Produkt von 2 Nebenklassen ist eine Nebenklasse  $\sim$  Gruppeneigenschaft.

Die Elemente dieser "Gruppe" (Faktorgruppe) sind selbst Nebenklassen.

Die Faktorgruppe von  $\mathcal{G}$  bezüglich der invarianten Untergruppe  $\mathcal{N}$  wird mit  $\mathcal{G}/\mathcal{N}$  bezeichnet, deren Ordnung ist  $l = g/n$ .

**Beispiel:**  $C_{3v}$  hat die Faktorgruppe  $C_{3v}/\mathcal{H}_1 \cong D_3$

$$C_{3v} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 R_3 = \{e, R_1, R_2\} + \{R_3, R_4, R_5\}$$

mit folgender Multiplikationstabelle

|                     |                     |                     |
|---------------------|---------------------|---------------------|
|                     | $\mathcal{H}_1$     | $\mathcal{H}_1 R_3$ |
| $\mathcal{H}_1$     | $\mathcal{H}_1$     | $\mathcal{H}_1 R_3$ |
| $\mathcal{H}_1 R_3$ | $\mathcal{H}_1 R_3$ | $\mathcal{H}_1$     |



$g = 6$ ,  $n = 3$ ,  $l = 2$ ;  $C_{3v}/\mathcal{H}_1$  ist isomorph zur  $S_2$ .

Z.B.

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1 R_3 \mathcal{H}_1 &= \mathcal{H}_1 R_3 \mathcal{H}_1 R_3^{-1} R_3 = \mathcal{H}_1 \mathcal{H}_1 R_3 = \mathcal{H}_1 R_3 \\ \mathcal{H}_1 R_3 \mathcal{H}_1 R_3 &= \mathcal{H}_1 R_3 R_3 = \mathcal{H}_1\end{aligned}$$

Andere Sicht: homomorphe Abbildung  $f$ :

$$\begin{aligned}\mathcal{G} &\rightarrow \mathcal{G}/\mathcal{N} \\ f(G_i) &\rightarrow \mathcal{N}G_i \\ f(G_i)f(G_j) &= f(G_i G_j),\end{aligned}$$

d.h.  $\mathcal{G}$  ist homomorph zur Faktorgruppe:  $\mathcal{G} \sim \mathcal{G}/\mathcal{N}$ .

### 4.6.2 Der Isospin

Experiment:

$$M_p c^2 = 938.26 \text{ MeV}$$

$$M_n c^2 = 939.55 \text{ MeV}$$

$$\Delta M \hat{\approx} 0.13\%$$

(Starke) Kräfte zwischen pp, nn und pn gleich (ca. 1% Genauigkeit). (Elektromagnetische Kräfte sind für diese Unterschiede verantwortlich.)

→ Symmetrie zwischen Proton (stabil) und Neutron ( $\tau_L \approx 10^3 \text{ sec}$ ).

W.Heisenberg 1932 (Z. Physik 77, 1): “Proton und Neutron sind zwei Zustände desselben Teilchens.” → Nukleon.

(Analog den 2 Zuständen im H-Atom mit  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $s = \pm 1/2$ .)

Betrachte deshalb die beiden Zustände des Nukleons:

$$|p\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Zwei Zustände im Isospinraum in einem abstrakten Vektorraum. Die allgemeinste Transformation in diesem Raum ist durch unitäre  $2 \times 2$  Matrizen gegeben (Erhaltung der Norm!).

Die infinitesimalen Operatoren dieser Transformation sind hermitesch, jede hermitesche  $2 \times 2$  Matrix läßt sich durch die Pauli-Matrizen  $\sigma_i$  ( $\hat{1}$ ) ausdrücken. Schließt man gemeinsame Phasenänderungen aus, dann muß die Spur der infinitesimalen Operator verschwinden →  $SU(2)$ .

→ Rotation  $U$  im Isospinraum durch Darstellungen der SU(2) beschrieben.

$$D^{(T)} \text{ Darstellung} \quad \hat{\mathbf{t}} \text{ Isospin eines Nukleons} \quad \hat{t}_i = \frac{1}{2}\sigma_i$$

$$T = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad \hat{\mathbf{T}} = \sum_i \hat{\mathbf{t}}(i) \text{ Isospin vieler Nukleonen}$$

2-dimensionale Darstellung  $t = 1/2$

$$\hat{t}_z |p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle \quad m_t = 1/2$$

$$\hat{t}_z |n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle \quad m_t = -1/2$$

Bei starker Wechselwirkung  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{T}}] = 0$ . → Rotation im Isospinraum läßt  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sww}}$  invariant.

Ladung:  $\hat{Q} = e \left( \frac{1}{2} + \hat{t}_z \right)$

Isospin: **Anwendung in der Kernphysik**

Betrachte jetzt mehr als ein Nukleon, z.B. im Atomkern.

$A$  Nukleonen, Vektorraum hat  $2^A$  Dimensionen. Gesamtisospin:

$$\hat{\mathbf{T}} = \sum_{i=1}^A \hat{\mathbf{t}}(i) \quad \rightarrow \quad [\hat{T}_x, \hat{T}_y] = i\hat{T}_z \quad \text{etc.}$$

Der Produktzustand  $|1\rangle|2\rangle|3\rangle \dots |A\rangle$  transformiert sich nach dem i.a. reduziblen **Produkt der Darstellungen**, dieses läßt sich wieder ausreduzieren. Der Übergang zur neuen Basis, in der die Darstellung irreduzibel ist, folgt wieder durch zukzessive Addition von Isospins mit Hilfe der Clebsch–Gordon–Koeffizienten.

**Beispiel 2 Teilchen:** Vektorraum ausgespannt von

$$\psi_1 = |p_1\rangle|p_2\rangle \quad t_1 = 1/2 \quad t_2 = 1/2$$

$$\psi_2 = |p_1\rangle|n_2\rangle \quad T = 1, 0$$

$$\psi_3 = |n_1\rangle|p_2\rangle$$

$$\psi_4 = |n_1\rangle|n_2\rangle$$

$$\hat{T}_z \psi_1 = 1\psi_1 = M_T \psi_1 \quad M_T = 1 \rightarrow T = 1.$$

Konstruiere jetzt Zustand mit  $T = 1$ ,  $M_T = 0$  durch Anwendung von  $\hat{T}_-$ :

$$\hat{t}_-(i) = \frac{1}{2}(\hat{t}_x - i\hat{t}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \hat{t}_- |p\rangle = \hat{t}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |n\rangle$$

$$\hat{t}_- |n\rangle = \hat{t}_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

2 Nukleonen,  $|p_1\rangle|p_2\rangle$  ist der Vektor des höchstens Gewichts:

$$\begin{aligned}\hat{T}_- &= \hat{t}_-(1) + \hat{t}_-(2) \quad \psi'_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 - \psi_3) \\ \hat{T}_- |p_1\rangle|p_2\rangle &= |n_1\rangle|p_2\rangle + |p_1\rangle|n_2\rangle = \psi_2 + \psi_3 = 2^{1/2}\psi'_2 \\ \hat{T}_-\psi'_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}[0 + |n_1\rangle|n_2\rangle + |n_1\rangle|n_2\rangle + 0] = 2^{1/2}\psi_4.\end{aligned}$$

Das sind die 3 Basisvektoren zu  $T = 1$  und  $M_T = 1, 0, -1$

$$\begin{aligned}\hat{T}_z\psi_1 &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\psi_1, \\ \hat{T}_z\psi'_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)|n_1\rangle|p_2\rangle + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)|p_1\rangle|n_2\rangle\right] = 0, \\ \hat{T}_z\psi_3 &= \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\psi_3 = -\psi_3.\end{aligned}$$

Diese 4 Zustände entsprechen 4 Zuständen des Deuterons

$$\mathcal{H}_{\text{sww}} = \hat{1}f(\mathbf{r})$$

$$T = 0 \text{ Isosinglet} \quad Q = e \quad \text{Grundzustand } \psi'_3 \quad M_T = 0, \quad \text{Deuteron}$$

$$\mathcal{H}_{\text{sww}} = \hat{1}f(\mathbf{r}) + 2g(\mathbf{r})$$

|                     |           |          |            |            |
|---------------------|-----------|----------|------------|------------|
| $T = 1$ Isotriplett | $\psi_1$  | $Q = 2e$ | $M_T = 1$  | Di-Proton  |
|                     | $\psi'_2$ | $Q = e$  | $M_T = 0$  |            |
|                     | $\psi_4$  | $Q = 0$  | $M_T = -1$ | Di-Neutron |

Instabilität des Triplets:  $f(\mathbf{r})$  attraktiv,  $f + 2g$  repulsiv.

Entartung?  $T = 0$  Zustand antisymmetrisch unter Teilchen-Austausch, muß mit geraden Zuständen in den Bahn- und Spinkoordinaten kombiniert werden.

Umgekehrt muß  $T = 1$  Zustand mit ungeraden Zuständen in Bahn- und Spinkoordinaten kombiniert werden.

$$\Phi_{\text{Deuteron}} = P_{kl}(r)[Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \times \chi_{sm_s}]^{[J, M]}|T, M_T\rangle$$

$$r \text{ Relativkoordinaten, } \hat{\mathcal{H}}_{\text{sww}} = \hat{1}f(\mathbf{r}) + g(\mathbf{r})\hat{\mathbf{T}}^2.$$

Da die Coulombwechselwirkung die Isospinsymmetrie bricht (aber im Vergleich zur starken Wechselwirkung sehr schwach ist), kann man ihren Effekt störungstheoretisch studieren.

$$\begin{aligned}V_c &= \sum_{\substack{i < j \\ (\text{protonen})}}^i \frac{e^2}{r_{ij}} = \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \left(\frac{1}{2} + \hat{t}_z(i)\right) \left(\frac{1}{2} + \hat{t}_z(j)\right) \\ &= \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{2}(\hat{t}_z(i) + \hat{t}_z(j)) + \hat{t}_z(i)\hat{t}_z(j)\right]\end{aligned}$$

$\frac{1}{2}(\hat{t}_z(i) + \hat{t}_z(j))$  wirkt wie Zeeman-Aufspaltung.

**Hadronen** (Teilchen, die der Starken Wechselwirkung unterliegen)

**Erhaltungsgrößen:**  $B$ =Baryonenzahl,  $Y$ =Hyperladung

$$Y = 2(Q - M_T), \quad Q = M_T + \frac{1}{2}Y$$

(Spin halbzahlig)  $B = 1$  (= -1 für Antiteilchen)

Table 11.1 Properties of the lighter hadrons

(a) BARYONS

| Particle      | Mass (MeV)        | Spin            | Charge | Isospin $T$   | $M_T$          | Hypercharge $Y$ | Mean life $\tau$ (sec) | Principal decay modes                       |
|---------------|-------------------|-----------------|--------|---------------|----------------|-----------------|------------------------|---|
| $p$           | 938.28            | $\frac{1}{2}^+$ | 1      | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | 1               | $\infty$               | Stable                                      |
| $n$           | 939.57            | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | 1               | $1.0(10)^3$            | $p + e^- + \bar{\nu}$                       |
| $\Lambda$     | 1115.6            | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | 0             | 0              | 0               | $2.5(10)^{-10}$        | $p + \pi^-$ (65%), $n + \pi^0$ (35%)        |
| $\Sigma^+$    | 1189.4            | $\frac{1}{2}^+$ | 1      | 1             | 1              | 0               | $0.8(10)^{-10}$        | $p + \pi^0$ (53%), $n + \pi^+$ (47%)        |
| $\Sigma^0$    | 1192.5            | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | 1             | 0              | 0               | $< (10)^{-14}$         | $\Lambda + \gamma$                          |
| $\Sigma^-$    | 1197.4            | $\frac{1}{2}^+$ | -1     | 1             | -1             | 0               | $1.7(10)^{-10}$        | $n + \pi^-$                                 |
| $\Xi^0$       | 1315              | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | -1              | $2.9(10)^{-10}$        | $\Lambda + \pi^0$                           |
| $\Xi^-$       | 1321              | $\frac{1}{2}^+$ | -1     | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | -1              | $1.7(10)^{-10}$        | $\Lambda + \pi^-$                           |
| $\Delta^{++}$ | 1232 <sup>†</sup> | $\frac{3}{2}^+$ | 2      | $\frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}$  | 1               | $5(10)^{-24}$          | $p + \pi^+$                                 |
| $\Delta^+$    |                   | $\frac{3}{2}^+$ | 1      | $\frac{3}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | 1               |                        | $p + \pi^0, n + \pi^+$                      |
| $\Delta^0$    |                   | $\frac{3}{2}^+$ | 0      | $\frac{3}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | 1               |                        | $p + \pi^-, n + \pi^0$                      |
| $\Delta^-$    |                   | $\frac{3}{2}^+$ | -1     | $\frac{3}{2}$ | $-\frac{3}{2}$ | 1               |                        | $n + \pi^-$                                 |
| $\Sigma^{*+}$ | 1385 <sup>†</sup> | $\frac{1}{2}^+$ | 1      | 1             | 1              | 0               | $1(10)^{-23}$          | $\Lambda + \pi$ (88%), $\Sigma + \pi$ (12%) |
| $\Sigma^{*0}$ |                   | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | 1             | 0              | 0               |                        |   |
| $\Sigma^{*-}$ |                   | $\frac{1}{2}^+$ | -1     | 1             | -1             | 0               |                        |   |
| $\Xi^{*0}$    | 1532              | $\frac{1}{2}^+$ | 0      | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | -1              | $(10)^{-22}$           | $\Xi + \pi$                                 |
| $\Xi^{*-}$    | 1535              | $\frac{1}{2}^+$ | -1     | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | -1              |                        |   |
| $\Omega^-$    | 1672              | $\frac{3}{2}^+$ | -1     | 0             | 0              | -2              | $1.1(10)^{-10}$        | $\Xi + \pi, \Lambda + K^-$                  |

Mesonen (Spin ganzzahlig)  $B = 0$

Table 11.1 (continued)

(b) MESONS

| Particle    | Mass (MeV) | Spin  | Charge  | Isospin $T$   | $M_T$             | Hypercharge $Y$ | Mean life $\tau$ (sec) | Principal decay modes                            |
|-------------|------------|-------|---------|---------------|-------------------|-----------------|------------------------|--|
| $\pi^\pm$   | 139.6      | $0^-$ | $\pm 1$ | 1             | $\pm 1$           | 0               | $2.6(10)^{-8}$         | $\mu + \bar{\nu}$                                |
| $\pi^0$     | 135.0      | $0^-$ | 0       | 1             | 0                 | 0               | $0.9(10)^{-16}$        | $\gamma + \gamma$                                |
| $K^\pm$     | 493.7      | $0^-$ | $\pm 1$ | $\frac{1}{2}$ | $\pm \frac{1}{2}$ | $\pm 1$         | $1.2(10)^{-8}$         | $\mu + \nu$ (64%), $2\pi$ (21%), $3\pi$ (7%)     |
| $\bar{K}^0$ | 497.7      | $0^-$ | 0       | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$    | 1               | $0.9(10)^{-10}$        | $\pi^+ + \pi^-$ (68%), $\pi^0 + \pi^0$ (32%)     |
| $K^0$       | 497.7      | $0^-$ | 0       | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$     | -1              |                        | $5.3(10)^{-8}$                                   |
| $\eta^0$    | 549        | $0^-$ | 0       | 0             | 0                 | 0               | $3(10)^{-19}$          | $2\gamma$ (42%), $3\pi$ (51%), $2\pi\gamma$ (6%) |

### 4.6.3 Der Isospin in der Elementarteilchenphysik

Vergleiche Teilchenmassen und Verhalten bei Stößen  $\rightarrow \exists$  Isospinnukleonen mit  $T \neq 1/2$  (Tabelle auf Seite 116)

$\rightarrow$  **Alle Hadronen treten in Isospinmultiplets auf.**

Teilchen hat nun Masse, Spin, Ladung, Isospin ... Es gilt **nicht** mehr der einfache Zusammenhang  $\hat{Q} = e(\frac{1}{2} + \hat{T}_z)$ . Führe als neue Größe die **Hyperladung**  $Y = 2(Q - M_T)$  ein.

Betrachte z.B. den Zusammenstoß zwischen einem  $\pi$ -Meson ( $t = 1$ ) und einem Nukleon ( $t = 1/2$ )  $\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{t}}^\pi + \hat{\mathbf{t}}^N$ . Ist  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{T}}] = 0$ , dann lassen sich die Zustände des Gesamtsystems nach dem Gesamtisospin  $T$  und seinen Projektionen  $M_T$  klassifizieren.

Sei  $|T, M_T\rangle$  der allgemeine Zustandsvektor, dann ist

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |\pi^+\rangle|p\rangle$$

und durch Anwendung von  $\hat{T}_- = \hat{t}_-^\pi + \hat{t}_-^N$

$$T = \frac{3}{2} \quad \begin{aligned} |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^+\rangle|n\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0\rangle|p\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0\rangle|n\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^-\rangle|p\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= |\pi^-\rangle|n\rangle \end{aligned}$$

$$T = \frac{1}{2} \quad \begin{aligned} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^+\rangle|n\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^0\rangle|p\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^0\rangle|n\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^-\rangle|p\rangle \end{aligned}$$

Streuprozesse, die durch den gleichen Gesamtisospin charakterisiert werden, sollten gleiche Querschnitte haben, z.B.  $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p$  oder  $\pi^- + n \rightarrow \pi^- + n$ . Dagegen gilt dies für  $\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$  und  $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p$  nicht mehr, da  $|\pi^-\rangle|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{2}{\sqrt{3}}|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  2 Zustände mit verschiedenem Teilchen enthält.

## 4.7 Die SU(3)-Gruppe

Tabelle zeigt, dass sich Hadronen in Isospin-Multiplets zusammenfassen lassen. Allerdings wird die einfache Zuordnung  $Q = e(\frac{1}{2} + M_T)$  verletzt, sie wird durch

$$Q = e \left( M_T + \frac{1}{2} Y \right)$$

(“Gell–Mann–Nishijama–Relation” (1953)) ersetzt, dieser Regel genügen alle Hadronen.

$Y$  ist die sogenannte **Hyperladung**, die bei allen Prozessen der Starken Wechselwirkung erhalten bleibt (nicht bei Schwachen Wechselwirkung). (Empirisch: erwartete Prozesse mit Änderung von  $Y$  fanden nicht statt.)

Weitere erhaltene Größe: die **Baryonenzahl**  $B$  (immer erhalten), Strangeness  $S = Y - B$ . (**Baryon**: Hadron mit halbzahligen Spin, **Meson**: Hadron mit ganzzahligen Spin.) Daneben existieren Teilchen, die nicht an starker Wechselwirkung teilhaben: die **Leptonen** ( $s = 1/2$ ,  $B = 0$ : Elektron, Myon, Neutrino).

Zur Klassifizierung der Hadronen suchen wir nach einer Symmetriegruppe, bei der 2 Darstellungsmatrizen gleichzeitig auf Diagonalform gebracht werden können, da die Zustände (Teilchen) durch 3 Quantenzahlen ( $T, M_T, Y$ ) beschrieben werden:  $SU(3)$ .

### 4.7.1 Die Gruppe $SU(3)$ und ihre irreduziblen Darstellungen

$\sim$  Gruppe der unitären  $3 \times 3$  Matrizen mit der Determinante 1.

$$\underline{\underline{U}} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$$

$a, b, \dots, i$  komplex, i.a.  $9 \times 2$  reelle Parameter.

$$\begin{aligned} U^\dagger U = 1 &\rightarrow aa^* + bb^* + cc^* = 1 \\ &dd^* + ee^* + ff^* = 1 \\ &gg^* + hh^* + ii^* = 1 \\ &ad^* + be^* + cf^* = 0 \quad \text{etc.} \end{aligned}$$

$\rightarrow$  9 Bedingungen für  $U$  aus  $\text{Det } U = 1$  folgt noch eine Bedingung.

(Allgemein  $SU(N)$  hat  $N^2 - 1$  Parameter und damit Generatoren:  $2N^2$  Parameter –  $(N(N - 1) + N + 1)$  Nebenbedingungen.)

$\rightarrow U$  durch  $18 - 9 - 1 = 8$  Parameter bestimmt (unsere  $a_q$ !). Da die entsprechenden infinitesimalen Operatoren  $\hat{X}_q$  (vergleiche 4.3)

$$a_q \ll 1 \quad \underline{\underline{\hat{U}}}(\mathbf{a}) \approx \underline{\underline{1}} + \sum_q a_q \hat{\underline{\underline{X}}}_q$$

antihermitesch ( $\hat{Y}_q = -i\hat{X}_q$  hermitesch) sein müssen und die Spur 0 haben, kann man zunächst von der Pauli–Matrizen ausgehen ( $i\hat{\tau}_q$ ), und dann die verbleibende

Zeile bzw. Spalte ergänzen:

$$\begin{aligned}
 X_1 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & X_2 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & X_3 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 X_4 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & X_5 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 X_6 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & X_7 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\
 X_8 &= - \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

$$2iX_l = \lambda_l \quad \text{“Gell-Mann Matrizen”}$$

Die infinitesimalen Operatoren der SU(3).

Untergruppen SU(2) von SU(3) werden durch

$$\{X_1, X_2, X_3\}, \quad \{X_4, X_5, \frac{1}{2}(X_3 + \frac{1}{2}X_8)\}, \quad \{X_6, X_7, \frac{1}{2}(-X_3 + \frac{1}{2}X_8)\}$$

gebildet. Da  $\hat{X}_8$  mit  $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3$  kommutiert, bilden diese eine Untergruppe SU(2)  $\times$  U(1).

“T-Spin”:

$$\begin{aligned}
 T_+ &= i(X_1 + iX_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & T_- &= i(X_1 - iX_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 \hat{T}_z &= i\hat{X}_3
 \end{aligned}$$

Leiteroperatoren für Untergruppe.

“U-Spin”:

$$\begin{aligned}
 U_+ &= i(X_6 + iX_7) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & U_- &= i(X_6 - iX_7) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 \hat{U}_z &= -\frac{i}{2} \left( -\hat{X}_3 + \frac{1}{2}\hat{X}_8 \right) = -\frac{1}{2}\hat{T}_z + \frac{3}{4}\hat{Y}.
 \end{aligned}$$

“V-Spin”:

$$\begin{aligned}
 V_+ &= i(X_4 - iX_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & V_- &= i(X_4 + iX_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 V_z &= -\frac{i}{2} \left( \hat{X}_3 + \frac{1}{2}\hat{X}_8 \right) = -\frac{1}{2}\hat{T}_z - \frac{3}{4}\hat{Y}.
 \end{aligned}$$

$[\hat{T}_z, \hat{U}_z] = [\hat{T}_z, \hat{V}_z] = 0$ , es existieren zwei diagonale Operatoren:

$$T_z = iX_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \frac{1}{3}iX_8 = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & -2/3 \end{pmatrix}$$



Operatoren-Algebra:

$$\begin{aligned} [\hat{T}_+, \hat{T}_-] &= 2\hat{T}_z, & [\hat{T}_z, \hat{T}_\pm] &= \pm\hat{T}_\pm \\ [\hat{U}_+, \hat{U}_-] &= 2\hat{U}_z, & [\hat{U}_z, \hat{U}_\pm] &= \pm\hat{U}_\pm, & [\hat{T}_\pm, \hat{Y}] &= 0 \\ [\hat{V}_+, \hat{V}_-] &= 2\hat{V}_z, & [\hat{V}_z, \hat{V}_\pm] &= \pm\hat{V}_\pm, & [\hat{T}_z, \hat{Y}] &= 0 \end{aligned}$$

Unabhängig von der Darstellung gilt:

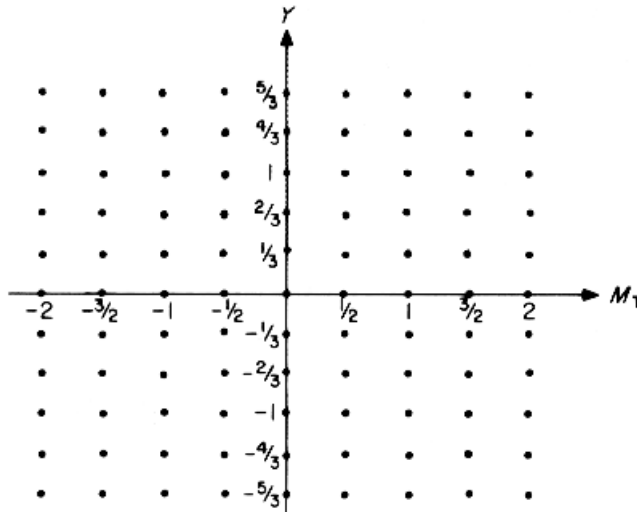
$$\begin{aligned} [\hat{T}_z, \hat{U}_\pm] &= \mp\frac{1}{2}\hat{U}_\pm, & [\hat{Y}, \hat{U}_\pm] &= \pm\hat{U}_\pm \\ [\hat{T}_z, \hat{V}_\pm] &= \mp\frac{1}{2}\hat{V}_\pm, & [\hat{Y}, \hat{V}_\pm] &= \mp\hat{V}_\pm \\ [\hat{T}_+, \hat{U}_-] &= [\hat{T}_-, \hat{U}_+] = [\hat{T}_+, \hat{V}_-] = 0 \\ [\hat{T}_-, \hat{V}_+] &= [\hat{U}_+, \hat{V}_-] = [\hat{U}_-, \hat{V}_+] = 0 \\ [\hat{V}_-, \hat{U}_-] &= \hat{T}_+, & [\hat{U}_+, \hat{V}_+] &= \hat{T}_-, & [\hat{U}_-, \hat{T}_-] &= \hat{V}_+ \\ [\hat{T}_+, \hat{U}_+] &= \hat{V}_-, & [\hat{T}_-, \hat{V}_-] &= \hat{U}_+, & [\hat{V}_+, \hat{T}_+] &= \hat{U}_- \end{aligned}$$

$\hat{T}_z, \hat{U}_z, \hat{V}_z$  sind Standard-SU(2) Operatoren mit den Eigenwerten  $0, \pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2, \dots$

$\rightarrow \hat{Y} = \frac{2}{3}(\hat{U}_z - \hat{V}_z) \rightarrow$  Eigenwerte  $0, \pm 1/3, \pm 2/3, \pm 1, \pm 4/3, \dots$

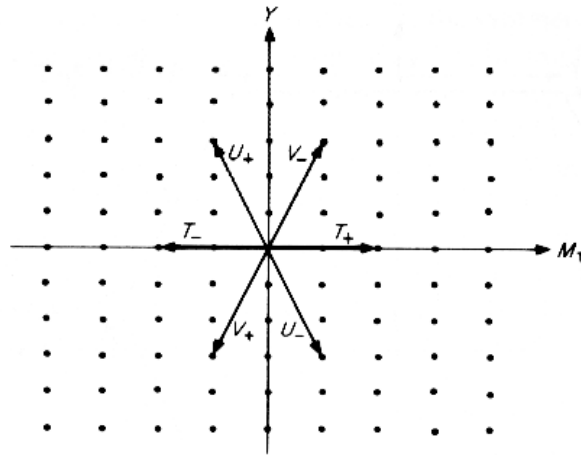
$(U_z = \frac{n}{2}, V_z = \frac{m}{2}, Y = \frac{1}{3}(n - m))$

Seien Eigenwerte von  $\hat{T}_z : M_T$  und von  $\hat{Y} : Y \rightarrow$  füllen dieses Gitter



Betrachte jetzt Wirkung von

$$\begin{aligned} \hat{T}_\pm \text{ auf Zustand } |M_T, Y\rangle : & \rightarrow \hat{T}_\pm |M_T, Y\rangle = c |M_T \pm 1, Y\rangle \\ \hat{U}_\pm \text{ auf Zustand } |M_T, Y\rangle : & \rightarrow \hat{U}_\pm |M_T, Y\rangle = c' |M_T \mp \frac{1}{2}, Y \pm 1\rangle \quad (4.21) \\ \hat{V}_\pm \text{ auf Zustand } |M_T, Y\rangle : & \rightarrow \hat{V}_\pm |M_T, Y\rangle = c'' |M_T \mp \frac{1}{2}, Y \mp 1\rangle \end{aligned}$$



Innerhalb einer irreduziblen Darstellung lassen sich alle Basisvektoren aus einem gewählten ableiten, indem man die infinitesimale Operatoren wirken läßt. Auf grund der Konstruktion sind aber nur bestimmte Basisvektoren (4.21) zugelassen.

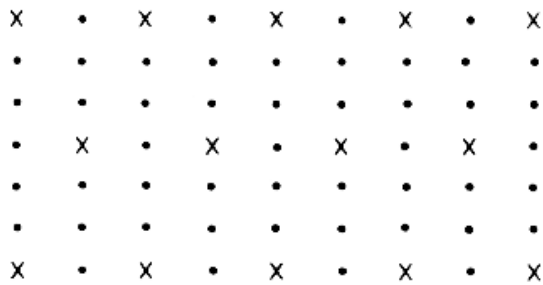
Lage des Nullpunktes?

(i)  $\times$  bei  $(0,0)$ .

(ii)  $\times$  bei  $(0,2/3)$ .

(iii)  $\times$  bei  $(0,-2/3)$ .

Nullpunkt bei  $(0, \pm 1/3)$  ist ausgeschlossen, da dann Eigenwerte  $\pm 1/4$  für  $\hat{U}_z$ .



Betrachte wieder Basisvektor  $|\psi\rangle$  mit dem "größten Gewicht" in der irreduziblen Darstellung  $\hat{D}$ : Vektor mit größtem  $Y$  und für dieses  $Y$  mit dem größten  $M_T$ . Mit

(4.21)

$$\begin{aligned}
\rightarrow \hat{T}_+|\psi\rangle &= \hat{U}_+|\psi\rangle = \hat{V}_-|\psi\rangle = 0 \\
\rightarrow \hat{T}_z|\psi\rangle &= M_T|\psi\rangle \\
\hat{U}_z|\psi\rangle &= M_U|\psi\rangle & M_U &= \frac{3}{4}Y - \frac{1}{2}M_T \\
\hat{V}_z|\psi\rangle &= -M_V|\psi\rangle & -M_V &= \frac{3}{4}Y + \frac{1}{2}M_T.
\end{aligned}$$

Notation:

$$|\psi\rangle = |\lambda = 2M_T, \mu = 2M_U\rangle$$

oder

$$\boxed{M_T = \frac{\lambda}{2}, \quad Y = \frac{1}{3}(\lambda + 2\mu)}$$

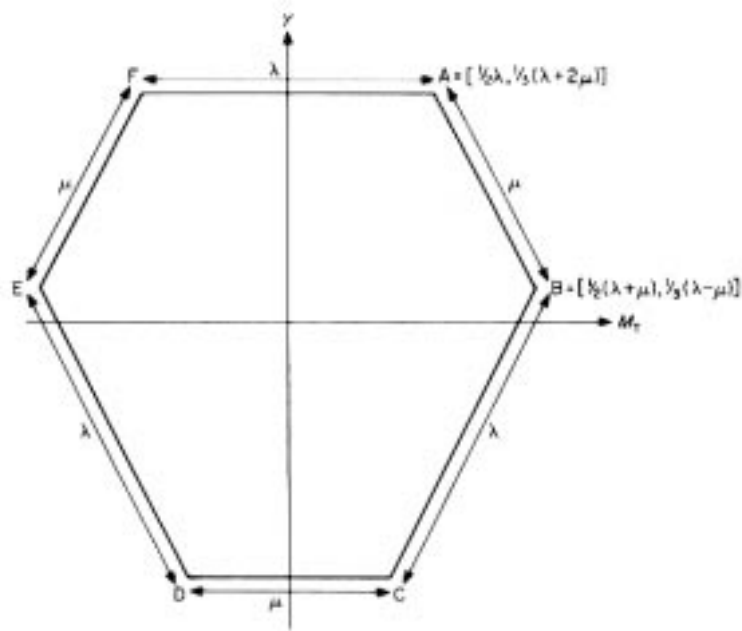
Durch Anwendung der  $\hat{U}, \hat{V}, \hat{T}$ -Leiteroperatoren läßt sich die Gesamtheit der Basisvektoren generieren, und damit die Darstellung  $\hat{D}^{(\lambda, \mu)}$  der  $SU(3)$ -Gruppe finden.

**Neues Problem:** Einige Punkte im Hexagon können zu mehreren Basisvektoren gehören (für  $SO(3)$  gezeigt, dass dem nicht so ist!). Es kann gezeigt werden, dass für **Punkte auf dem Rand des Hexagons** nur ein Basisvektor existiert.

Zu jedem Punkt, der dem Rand benachbart ist, gehören 2 Basisvektoren. Diese Punkte formen ein kleineres Sechseck, u.s.w. Die Zahl der Basisvektoren steigt um 1, wenn man weiter nach innen fortschreitet, bis aus dem 6-Eck ein 3-Eck wird. Geht man weiter nach innen, bleibt die Zahl der Basisvektoren pro Punkt gleich.

→ Gesamtzahl der unabhängigen Basisvektoren = Dimension der Darstellung

$$d(\lambda\mu) = \frac{1}{2}(\lambda + 1)(\mu + 1)(\lambda + \mu + 2)$$



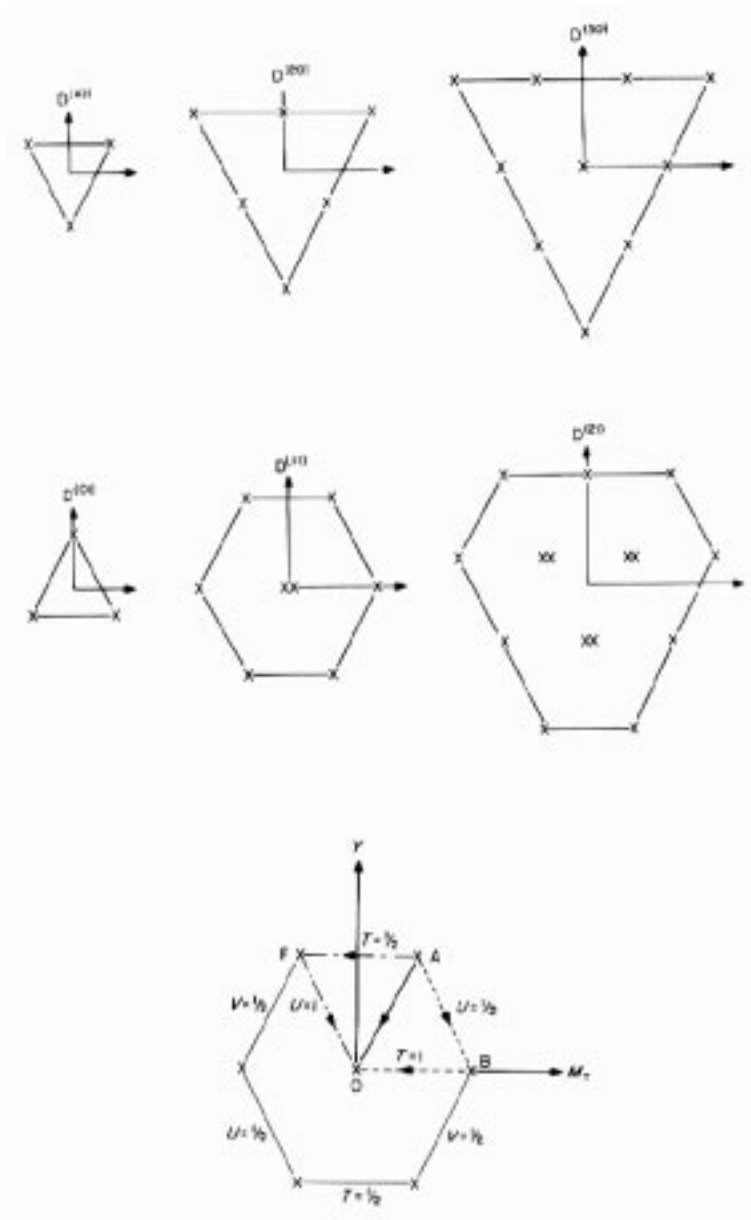
Per Konstruktion existieren außerhalb des 6-Ecks keine Zustände, z.B.  $\hat{T}_+ \hat{U}_-^n |\psi\rangle = \hat{U}_-^n \hat{T}_+ |\psi\rangle = 0$  entlang der Kante rechtsoben.

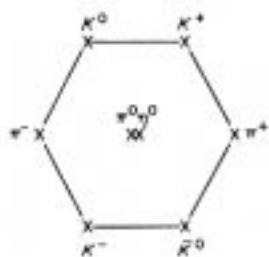
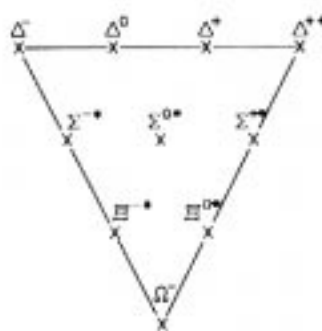
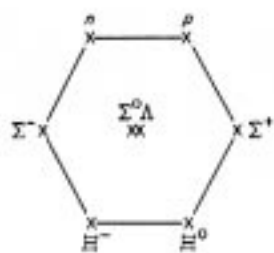
Der Rest des Hexagons folgt aus Symmetriegründen.

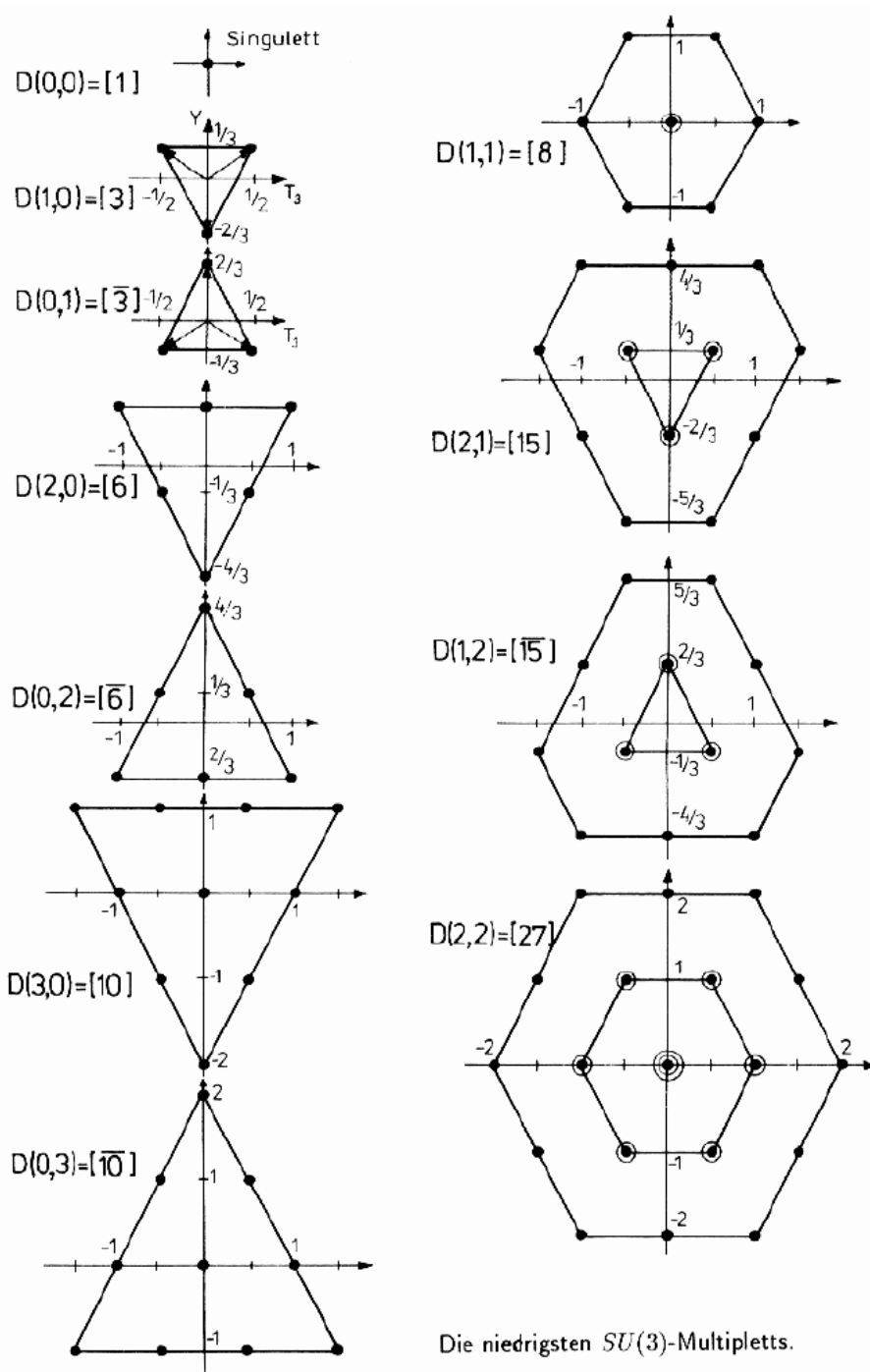
→ Alle Basisvektoren liegen auf oder im 6-Eck.

**Beispiel:**  $D^{(1,1)}$

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{1}{2}, & Y &= \pm 1 \\
 T &= 1, & Y &= 0 \\
 \lambda = 2M_T = 1 &\rightarrow T = 1/2 \\
 \mu = 1 &\rightarrow Y = \frac{1}{3}(1 + 2)
 \end{aligned}$$







### 4.7.2 Die Gell–Mann–Okubo Massenformel

Wäre die  $SU(3)$ -Symmetrie exakt, müßten alle Teilchen eines Multiplikts die gleiche Masse haben:

Experiment: mittlere Massenaufspaltung  $\frac{\Delta m}{m} \sim 10\%$ .

→ Läßt sich nicht auf elektromagnetische Wechselwirkung zurückführen (vernachlässi-

ge die im Weiteren)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}_D \psi, \quad H_D = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta$$

$$mc^2 = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \langle \hat{\mathcal{H}}_{ss} + \hat{\mathcal{H}}_{ms} \rangle, \quad \langle \hat{\mathcal{H}}_{ss} \rangle = c\bar{m}^2$$

$\hat{\mathcal{H}}_{ss}$  ist SU(3) invariant,  $\hat{\mathcal{H}}_{ms}$  Isospin-invariant.

$$[\hat{\mathcal{H}}_{ss}, \hat{X}_l] = 0 \quad l = 1 \dots 8$$

$$[\hat{\mathcal{H}}_{ms}, \hat{T}_z] = 0 \quad \rightarrow \quad \hat{Y}^m, \hat{\mathbf{T}}^{2n}, \text{ keine } \hat{T}_z\text{-Abhängigkeit}$$

**Ansatz:**  $\hat{\mathcal{H}}_{ms} = b\hat{Y} + c\hat{\mathbf{T}}^2 + d\hat{Y}^2$ .

Alternativ:  $\hat{\mathcal{H}}_{ms}$  transformiert sich wie  $D^{(1,1)}$  mit  $T, Y = 0$ .  $b, c, d$  Konstanten für ein Multipllett.

$$\hat{\mathcal{H}}_{ms} = \langle T, M_T, Y | b\hat{Y} + c\hat{\mathbf{T}}^2 + d\hat{Y}^2 | T, M_T, Y \rangle$$

$$= bY + cT(T+1) + dY^2$$

Anpassung an das Experiment:  $d = -c/4$

$$\boxed{\Delta m = bY + c \left[ T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2 \right]}$$

$$\Delta m_N = b + c \left[ \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \right] = b + \frac{c}{2} = m_N - m_\Lambda$$

$$\Delta m_\Xi = -b + \frac{c}{2} = m_\Xi - m_\Lambda \quad \rightarrow \quad b = m_\Lambda - m_\Xi + \frac{1}{4}(m_\Sigma - m_\Lambda)$$

$$\Delta m_\Sigma = 0 + c[2] = 2c = m_\Sigma - m_\Lambda$$

$$\Delta m_\Lambda = 0$$

$$m_N - m_\Lambda = m_\Lambda - m_\Xi + \frac{\lambda}{4}(m_\Sigma - m_\Lambda)$$

$$\boxed{\frac{1}{2}(m_N + m_\Xi) = \frac{3}{4}m_\Lambda + \frac{1}{4}m_\Sigma}$$

Test:

$$\frac{1}{2}(939 + 1318) \stackrel{?}{=} \frac{3}{4}1116 + \frac{1193}{4}$$

$$1128,5 \approx 1135$$

### 4.7.3 Casimir-Operatoren

Für jede Lie-Gruppe lassen sich ein oder mehrere Operatoren aus den Generatoren konstruieren, die mit allen Operatoren der Gruppe kommutieren. Auf Grund der Schurschen Lemmas sind diese Operatoren Vielfache des  $\hat{1}$ -Operators.

**Beispiele:**



1. SO(3):  $\hat{C}_1 = \hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x + \hat{J}_y + \hat{J}_z$  Eigenwerte  $J(J+1)$ .

2. SU(3):

$$\begin{aligned}\hat{C}_1 &= \sum_{i,j} \hat{A}_i^j \hat{A}_j^i \\ \hat{C}_2 &= \sum_{ijk} \hat{A}_j^k \hat{A}_i^j \hat{A}_k^i \quad i, j, k = 1, 2, 3\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{A}_1^2 &= \hat{T}_+, \quad \hat{A}_2^1 = \hat{T}_-, \quad \hat{A}_2^3 = \hat{U}_+, \quad \hat{A}_3^2 = \hat{U}_-, \quad \hat{A}_3^1 = \hat{V}_+, \quad \hat{A}_1^3 = \hat{V}_-, \quad \hat{A}_3^3 = -\hat{Y} \\ \hat{A}_1^1 - \hat{A}_2^2 &= 2\hat{T}_z, \quad \sum_i \hat{A}_i^i = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{C}_1|\psi\rangle &= \left\{ \frac{2}{3}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu) + 2(\lambda + \mu) \right\} |\psi\rangle \\ \left( \hat{C}_2 + \frac{3}{2}\hat{C}_1 \right) |\psi\rangle &= \frac{1}{9}(\lambda - \mu)(2\lambda + \mu + 3)(2\mu + \lambda + 3) |\psi\rangle\end{aligned}$$

i.e.: Zahl der Casimir-Operatoren = Rang der Gruppe

= Zahl der Parameter, die irreduzible Darstellungen bezeichnen.

= Zahl der gleichzeitig diagonalisierbaren Erzeugenden.

#### 4.7.4 Die Quarks und die SU(3) Gruppe

Bisher physikalisch:  $D^{(1,1)}$  und  $D^{(3,0)}$ , betrachte weitere Darstellungen:

a)  $D^{(0,0)}$  Singlett, triviale Darstellung

$$\begin{aligned}Y = M_T = 0 &\rightarrow Q = 0 && \Lambda^* \text{ Teilchen} \\ \hat{Q} = \hat{M}_T + \frac{1}{2}\hat{Y} &&& m = 1405 \text{ MeV.}\end{aligned}$$

b)  $D^{(1,0)}$  und  $D^{(0,1)}$  Triplets, kleinste nichttriviale Darstellung der SU(3). Vergleichbar mit  $D^{(1/2)}$  der SO(3)  $\rightarrow$  alle höheren Darstellungen lassen sich hieraus aufbauen (mit  $D^{(0)}$  nicht möglich)  $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2} = 1 + 0$ . Übergang zu neuer Basis mit Clebsch-Gordon Koeffizienten.

$D^{(1,0)}$  und  $D^{(0,1)}$  enthalten  $\hat{T}_-$ ,  $\hat{U}_-$  und  $\hat{V}_-$ -Spindubletts.

Basisvektoren für  $D^{(1,0)} = [3]$  sind  $\psi_1, \psi_2, \psi_3$ .

Basisvektoren für  $D^{(0,1)} = [3]$  sind  $\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_3$ . "Antivektor-Antiteilchen".

$$\begin{aligned}\psi_i &= |M_T, Y, \alpha\rangle && \hat{Q}\psi_i = Q_i\psi_i \\ &&& \hat{Q}\bar{\psi}_i = -Q_i\bar{\psi}_i\end{aligned}$$

|           |   |                      |
|-----------|---|----------------------|
| “up”      | $\psi_1 = \left  \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \alpha \right\rangle = u$  | $Q_1 = +\frac{2}{3}$ |
| “down”    | $\psi_2 = \left  -\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \alpha \right\rangle = d$ | $Q_2 = -\frac{1}{3}$ |
| “strange” | $\psi_3 = \left  0, -\frac{2}{3}, \alpha \right\rangle = s$           | $Q_3 = -\frac{1}{3}$ |

Teilchen haben drittelzahlige Ladungen. Bisher nicht als freie Teilchen gefunden.

Zweig 1964, Gell-Mann: quarks (from James Joys: Finnegans Wake).

$$\alpha : \quad B, S_z, \text{Colour}, \quad s_z = \pm \frac{1}{2}$$

Die Transformationseigenschaften der Quarkzustände sind uns schon bekannt:

$$\begin{aligned} \hat{T}_- &= |d\rangle \\ \hat{U}_- &= |s\rangle \quad \text{etc.}, \end{aligned}$$

d.h. die Generatoren in dieser “fundamentalen” Darstellung werden durch  $3 \times 3$  Matrizen repräsentiert, die wir schon früher angegeben hatten. Allgemein kann man aus den  $\hat{Y}_l = i\hat{X}_l$  die unitäre Operatoren

$$\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-\sum_l i a_l (\hat{X}_l)}$$

konstruieren, sie stellen die Gruppenoperatoren der SU(3) dar.

#### Komplex konjugierte Darstellung:

$$\begin{aligned} \psi'_i &= \hat{U}(\mathbf{a})\psi_i \sum_j \hat{U}_{ji}(\mathbf{a})\psi_j \\ \psi'^*_i &= \hat{U}^*(\mathbf{a})\psi^*_i \quad \hat{U}^*(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a}(\hat{\mathbf{X}}i)^*} \equiv e^{-i\mathbf{a}(\hat{\mathbf{X}}i)} \end{aligned}$$

$\hat{\mathbf{X}}^*$  sind die Generatoren der Darstellung  $[\bar{3}]$ . In dieser Darstellung haben die Operatoren  $\hat{T}_3$  und  $\hat{Y}$  die negativen Eigenwerte der Darstellung  $[\bar{3}]$ .

Die Darstellungen  $[3]$  und  $[\bar{3}]$  (Triplet und Antitriplet) sind **verschiedene** Darstellungen, die durch keine Transformation ineinander überführt werden können.

**Annahme des Gegenteils:**  $\hat{S}\hat{X}_l\hat{S}^{-1} = \hat{X}_l = \hat{X}_l^*$

$$\hat{S}\hat{X}_l\psi_i = \hat{S}p\psi_j = \hat{S}\hat{X}_l\hat{S}^{-1}\hat{S}\psi_i$$

$p$  ist Eigenwert,  $\hat{S}\psi_i = \psi'_i$ , dann

$$p\psi'_i = \hat{S}\hat{X}_l\hat{S}^{-1}\psi'_i$$

und

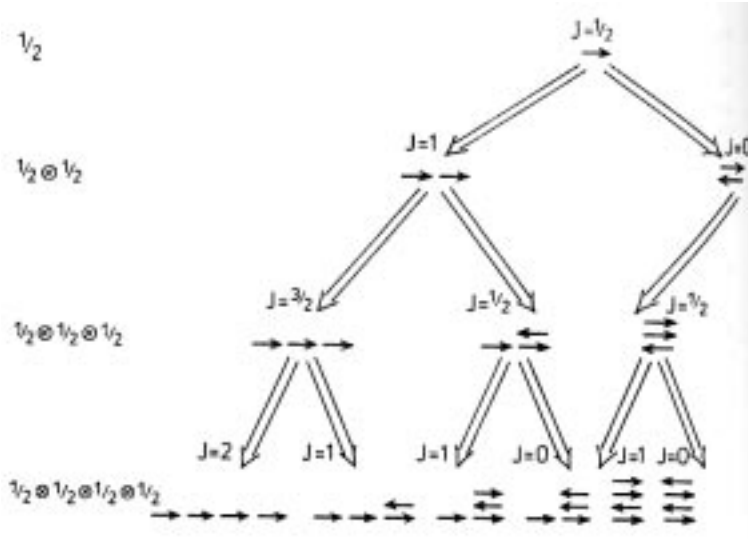
$$\hat{X}_l^*\psi'_i = p\psi'_i.$$

Die Operatoren  $\hat{X}_l$  müssen die gleichen Eigenwerte haben wie die Operatoren  $\hat{X}_l^*$ .  
Eigenwerte von

$$\begin{aligned} \hat{X}_3 &: \left\{-\frac{i}{2}, \frac{i}{2}, 0\right\}, & \hat{X}_8 &: \{-i, -i, 2i\} \\ \hat{X}_3^* &: \left\{\frac{i}{2}, -\frac{i}{2}, 0\right\}, & \hat{X}_8^* &: \{i, i, -2i\} \end{aligned}$$

→ Annahme falsch.

**Konstruktion von SU(3) Multipletts aus den elementaren Darstellungen [3] und  $\bar{[3]}$ :**

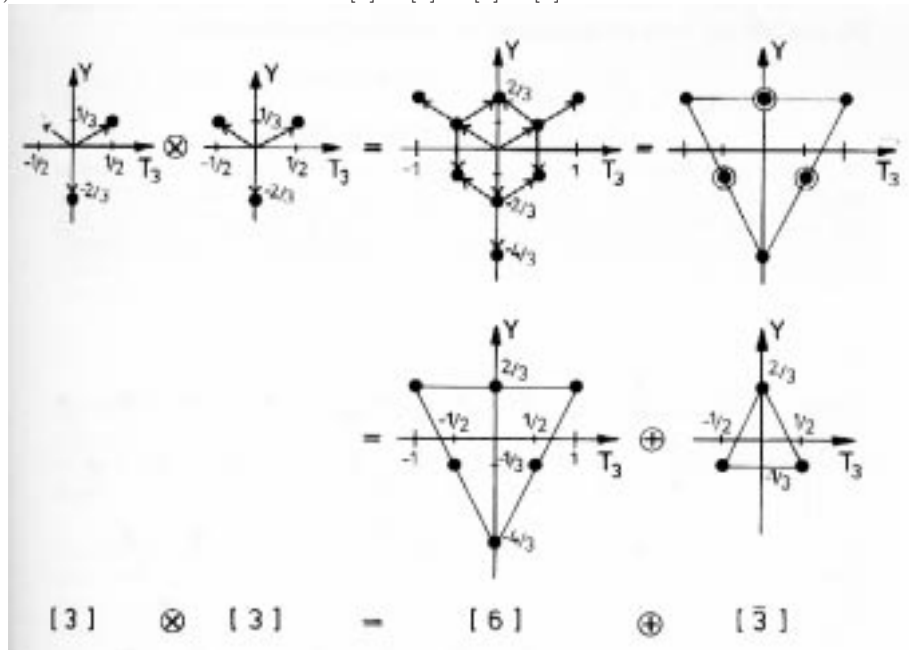


SO(3): Vielfache Kopplung von Spin 1/2 zu verschiedenen Gesamtspin  $J$ .

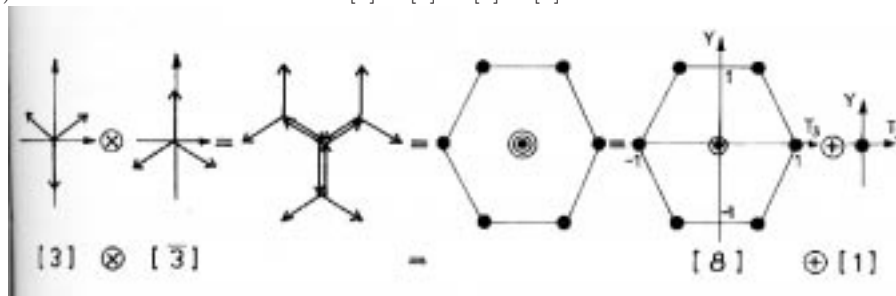
Grundregel für das Produkt von Darstellungen  $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}$ . Gruppe SO(3) war einfach reduzibel, es galt die Vektoradditionsregel.

$SU(3)$ :  $D^{(\lambda_1, \mu_1)} \times D^{(\lambda_2, \mu_2)} = \sum_{\lambda, \mu} c(\lambda, \mu) D^{(\lambda, \mu)}$ , komplizierter als  $SO(3)$ , nicht einfach reduzibel.

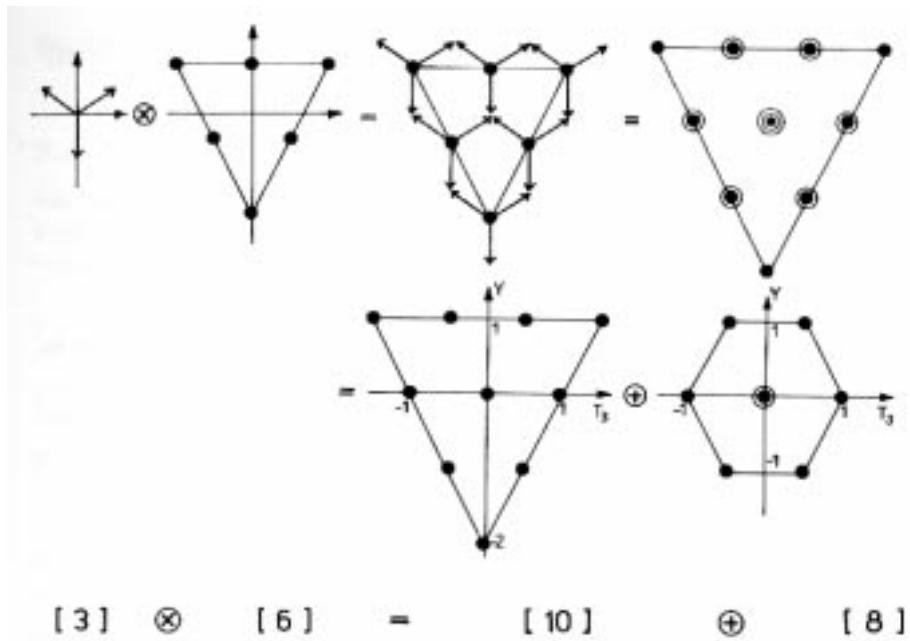
1.) Ausreduktion des Produkts  $[3] \otimes [3] = [6] \oplus [\bar{3}]$ :



2.) Ausreduktion des Produkts  $[3] \otimes [\bar{3}] = [8] \oplus [1]$ :



3.) Ausreduktion des Produkts  $[3] \otimes [6] = [10] \oplus [8]$ :



**Dekuplett:**

$\Delta^{++}$  Teilchen:  $s_z = 3/2 \quad |\Delta^{++}, s_z = 3/2\rangle = u^\uparrow(1)u^\uparrow(2)u^\uparrow(3)$ .  $T = 3/2, Y = 1$ .

Alle andere Zustände folgen aus Anwendung der  $\hat{T}_-, \hat{U}_-$ -Operatoren. Der Spin wird mit den Leiteroperatoren der  $SU(2) S_-$  vermindert.

$\Delta^-$  und  $\Omega^-$  Teilchen:

$$|\Delta^-, s_z = 3/2\rangle = d^\uparrow(1)d^\uparrow(2)d^\uparrow(3)$$

$$|\Omega^-, s_z = 3/2\rangle = s^\uparrow(1)s^\uparrow(2)s^\uparrow(3)$$

Die Gesamtwellenfunktion des  $\Omega^-$ -Teilchen ist dann

$$\Psi_{\Omega^-} = s^\uparrow(1)s^\uparrow(2)s^\uparrow(3) \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$$

$\phi(\dots)$  ist der Ortsanteil,  $s^\uparrow(i)$  sind die Spin-, Hyperladung- und Isospin-Anteil. Bei vernünftige Wechselwirkung-Potentiale im Grundzustand Bahndrehimpuls  $L = 0$ , Ortswellenfunktion symmetrisch. Das widerspricht dem Pauli-Prinzip!

Auswege? Para- statt Dirac-Statistik (Greenberg)

Colour Gell-Mann 1972, Fritsch 1973

$$u \rightarrow u_1, u_2, u_3$$

$$d \rightarrow d_1, d_2, d_3$$

$$s \rightarrow s_1, s_2, s_3$$

→ total antisymmetrische Wellenfunktion.

$$\rightarrow \Psi_{\Omega^-} = s_{\alpha}^{\uparrow}(1)s_{\beta}^{\uparrow}(2)s_{\gamma}^{\uparrow}(3) \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3).$$

Der neue Zustand ist invariant unter der Drehung im Farbraum:

$$\hat{U}_{q_{\alpha}} = \sum U_{\beta\alpha} q_{\beta}, \quad q_{\alpha} = u_{\alpha}, d_{\alpha}; s_{\alpha}, \quad \alpha, \beta = 1 \dots 3.$$

$U_{\beta\alpha}$  unitäre  $3 \times 3$  Matrizen mit Determinante 1.

Symmetriegruppe: (Farb)  $SU(3)$  (exakt!)