

Gruppentheorie in der Physik

Alexander Weiße

Institut für Physik, Universität Greifswald, Germany

Freitags, 8:30 – 10 Uhr, Raum A 202

Inhalt I

Grundlagen & Einführung

- Motivation

- Definition einer Gruppe & einfache Beispiele

- Einfache Punktgruppen

- Die Symmetrische Gruppe

Allgemeine Eigenschaften von Gruppen & Abbildungen

- Konjugation und Klassen

- Untergruppen

- Normalteiler

- Homomorphismen

Darstellungen

- Definition & einfache Beispiele

- Symmetrie-Transformation von Wellenfunktionen

- Äquivalenz von Darstellungen; Charaktere; Reduzibilität

- Gruppen & Vektorräume

- Skalarprodukt; Unitäre Darstellungen; Theorem von Maschke

Irreduzible Darstellungen

Inhalt II

Die Schurschen Lemmata

Fundamentaltheorem zur Orthogonalität

Orthogonalität von Charakteren

Konstruktion der Charaktertafel

Direkte Produkte von Darstellungen und ihre Zerlegung

Physikalische Anwendungen

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Molekülschwingungen (H_2O)

Aufhebung von Entartung

Kristallographische Raumgruppen

Definition und Eigenschaften der Raumgruppen

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppen

Kontinuierliche Gruppen – $\text{SO}(N)$

$\text{SO}(2)$

$\text{SO}(3)$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Inhalt III

Weitere Anwendungen der Gruppentheorie

Energieniveaus von Atomen in Hartree-Fock-Näherung
„Zufällige“ Entartung beim H-Atom und $SO(4)$

$SU(N)$ & etwas Teilchenphysik

Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$

$SU(2)$

$SU(3)$

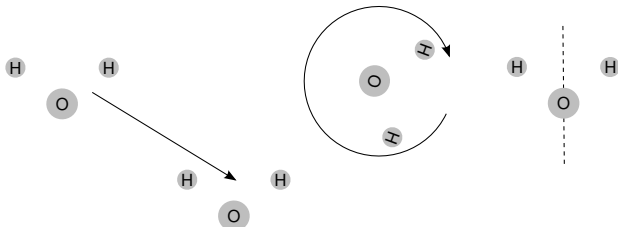
$SU(N)$ & Young-Tableaux

- ▶ H.F. Jones: Groups, Representations & Physics (IoP Publishing)
- ▶ R. Kochendörfer: Lehrbuch der Gruppentheorie unter besonderer Berücksichtigung der endlichen Gruppen (Geest & Portig)
- ▶ H.W. Streitwolf: Gruppentheorie in der Festkörperphysik (Geest & Portig)
- ▶ ...

1 Grundlagen & Einführung

1.1 Motivation

- ▶ Viele physikalische Systeme besitzen **Symmetrien**
 - **Erhaltungssätze**
 - vereinfachte Lösung der Bewegungsgleichungen
- ▶ Bsp.: Wassermolekül



- ▶ Energie ist unabhängig von
 - ▶ Position im Raum (sofern keine äußeren Felder)
 - ▶ Drehwinkel
 - ▶ Spiegelung

$$V(|r_1 - r_2|, |r_2 - r_3|, |r_1 - r_3|)$$

Motivation

- ▶ Verschiedene Symmetrioperationen können kombiniert (nacheinander ausgeführt) werden und ergeben neue Symmetrioperationen: Translation + Drehung, Drehung + Spiegelung, ...
 - ▶ Symmetrioperationen können rückgängig gemacht werden
 - ▶ Es gibt eine Operation „Nichtstun“
- ⇒ Die Menge der Operationen mit diesen Eigenschaften bildet eine Gruppe (Axiome später)
- ▶ Den abstrakten Operationen (z.B. Drehung) kann eine konkrete Form gegeben werden: Matrizen
 - ▶ Diese Matrizen beschreiben Transformationen der Koordinaten oder das Transformationsverhalten von Basisfunktionen eines Vektorraumes
- ⇒ Neuer Begriff: Darstellung

Motivation

- ▶ Unter den vielen Darstellungen einer Gruppe gibt es besondere: die **irreduziblen** Darstellungen:



- ▶ Solche Zerlegungen in einfacherere Teilprobleme sind wichtig für Quantenmechanik:



- ▶ Lösungen können anhand der Symmetrie klassifiziert werden → Quantenzahlen
- ▶ Entartungsgrad kann bestimmt werden, und wie sich das Spektrum bei reduzierter Symmetrie verändert

1.2 Definition

Eine Gruppe G ist eine Menge von Elementen $\{a, b, c, \dots\}$ die folgenden Bedingungen genügt:

G0 Jedem geordneten Paar $x, y \in G$ ist ein Objekt xy (Produkt) zugeordnet, das ebenfalls zu G gehört

G1 Diese Multiplikation ist assoziativ:

$$(xy)z = x(yz)$$

G2 Es gibt ein Einselement $e \in G$, so daß für alle $x \in G$ gilt:

$$ex = xe = x$$

G3 Zu jedem Element $x \in G$ existiert ein inverses Element $x^{-1} \in G$, so daß gilt:

$$xx^{-1} = x^{-1}x = e$$

- ▶ Die Multiplikation ist im Allgemeinen **nicht** kommutativ, d.h. $ab \neq ba$
- ▶ Falls $ab = ba \forall a, b \in G$, so heißt die Gruppe **abelsch**. Diese Gruppen besitzen eine besonders einfache Struktur

Einfache Beispiele

Gruppe G	Operation	Ordnung	Anmerkung
$C_2 = \{e, a\}$ mit $a^2 = e$	nicht spezifiziert	2	einfachstes nicht-triviales Beispiel; abelsch
S_n : alle Permutationen von n Objekten	Nacheinander-Ausführung	$n!$	i.A. nicht-abelsch
Z_n : Ganze Zahlen modulo n	Addition mod n	n	abelsch, $Z_2 = C_2$
Positive rationale Zahlen	Multiplikation	∞	abelsch

- ▶ Die **Ordnung** ist die Zahl der Elemente in G . Notation: $[G]$ oder $|G|$
- ▶ Die die Gruppe definierende „Multiplikation“ ist selten eine echte Multiplikation. Bei Symmetrieoperationen ist meist die Hintereinanderausführung gemeint.

Gegenbeispiele

Menge	Operation	Ordnung	Anmerkung
$\mathbb{Z}$: Ganze Zahlen	Multiplikation	∞	$\frac{1}{n} \notin \mathbb{Z}$
$\mathbb{R}$: Reelle Zahlen	Multiplikation	∞	0 hat keine Inverse

1.3 Einfache Punktgruppen

- ▶ Punktgruppen beschreiben die Symmetrien endlicher starrer Körper (Drehungen, Spiegelungen & Inversion)
- ▶ Da bei diesen Operationen mindestens ein Punkt unverändert bleibt, heißen die so gebildeten Gruppen **Punktsymmetriegruppen** oder kurz **Punktgruppen**

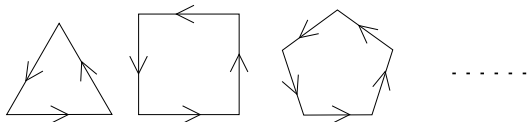
⇒ Wichtig z.B. für Molekülphysik

- ▶ Zusammen mit diskreten Translationen führen die Punktgruppen auf **Raumgruppen**, den Symmetriegruppen eines Kristalls

⇒ Wichtig für Festkörperphysik, Kristallographie,...

Die zyklische Gruppe C_n

- Die Symmetriegruppe der Drehungen eines regulären Vielecks mit gerichteten Seiten heißt zyklische Gruppe C_n



- Elemente dieser Gruppe sind alle Drehungen um den Winkel $2\pi r/n$ um eine senkrechte Achse durch den Mittelpunkt des n -Ecks, wobei $r = 0, 1, \dots, (n-1)$
- Diese Elemente C_n^r lassen sich alle aus der kleinsten Drehung $c \equiv C_n^1$ gewinnen: $C_n^r = ccc \dots = c^r$
- Nach n Anwendungen von c gelangt man wieder zur Ausgangsposition, d.h. $c^n = e$
- Offenbar hat die Gruppe genau n Elemente aus c erzeugen lassen, $C_n = \{e, c, c^2, \dots, c^{n-1}\}$ oder $C_n = \text{gp}\{e, c\}$ mit $c^n = e$

Die zyklische Gruppe C_n

- ▶ Die Gruppe C_n ist abelsch, da $c^r c^s = c^{r+s} = c^{s+r} = c^s c^r$
- ▶ Außerdem ist C_n isomorph zur Gruppe Z_n (ganze Zahlen modulo n). Insbesondere gilt die 1:1 Korrespondenz

$$c^r \in G \leftrightarrow r \in Z_n$$

(Die Exponenten werden mod n addiert, da $c^n = c^0 = e$)

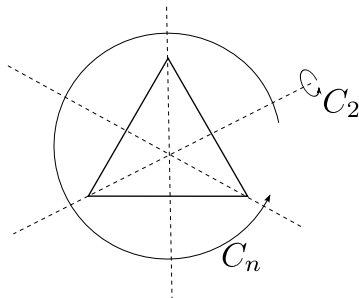
- ▶ Eine andere Möglichkeit, endliche Gruppen zu definieren, ist die **Gruppentafel**. Hier für C_3 :

	e	c	$b \equiv c^2$
e	e	c	b
c	c	b	e
b	b	e	c

In einer solchen Tabelle taucht jedes Element in jeder Zeile und jeder Spalte genau **einmal** auf.

Die Diedergruppe D_n

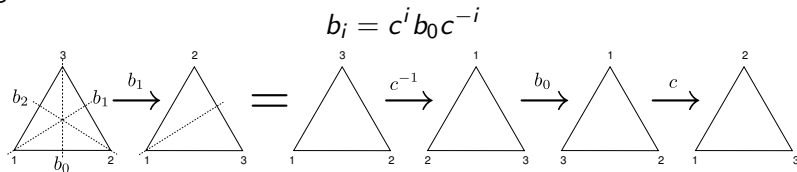
- Die Gruppe der Drehungen eines ungerichteten n -Ecks heißt Diedergruppe D_n (engl. dihedral group)



- Die Gruppe enthält die Drehungen C_n um den Mittelpunkt des Polygons, $C_n = \{e, c, c^2, \dots, c^{n-1}\}$
- Hinzu kommen 2-zählige Drehungen um Seitenhalbierende (was die bei C_n festgelegten Richtungen bricht). Diese Drehungen seien mit $b_0, b_1, \dots, b_{n-1}$ bezeichnet

Die Diedergruppe D_n

- ▶ Offenbar gilt $b_i^2 = e$
- ▶ Außerdem können die b_i unter Zuhilfenahme von c aus einem einzigen b abgeleitet werden:



- ▶ Die Diedergruppe wird also von 2 Elementen erzeugt ($b \equiv b_0$):

$$D_n = gp\{c, b\} \text{ mit } c^n = b^2 = e$$

- ▶ Allerdings ist diese Definition nicht vollständig. Um alle $2n$ Elemente von d_n in der Form $b^n c^m$ schreiben zu können, benötigen wir soetwas wie Vertauschungsrelationen, d.h. Regeln die aus $c^n b$ etwas wie bc^m machen.
- ▶ Es zeigt sich, daß $b_i = bc^i$. Zusammen mit obiger Formel folgt $c^i b = bc^{2i}$, und insbesondere $(bc)^2 = e$.

Die Diedergruppe D_n

- ▶ Die vollständige Charakterisierung von D_n ist also:

$$D_n = gp\{c, b\} \text{ mit } c^n = b^2 = (bc)^2 = e$$

- ▶ Die $2n$ Elemente von D_n sind $\{e, c, c^2, \dots, c^{n-1}, b, bc, \dots, bc^{n-1}\}$
- ▶ Offenbar sind alle Elemente von C_n in D_n enthalten. C_n ist eine Untergruppe von D_n (eine genauere Definition folgt später)

1.4 Die Gruppe der Permutationen S_n

(Symmetrische Gruppe)

- ▶ Die Gruppe S_n enthält alle $n!$ Permutationen von n Objekten. Mit Multiplikation von zwei Elementen ist die Nacheinanderausführung gemeint.
- ▶ Physikalische Bedeutung hat die Gruppe für die Beschreibung von Systemen identischer Teilchen (Fermionen, Bosonen)
- ▶ Außerdem spielt sie eine wichtige Rolle in der Theorie endlicher Gruppen: Jede endl. Gruppe der Ordnung n entspricht einer Untergruppe von S_n (später mehr)
- ▶ Die Notation:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

beschreibt, auf welches Objekt p_i das Objekt i abgebildet wird.

Die Gruppe der Permutationen S_n

- Allgemein gilt $PQ \neq QP$. Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

- Die Identität ist

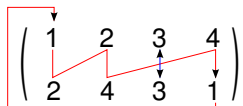
$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix}$$

- Die Inverse ist:

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix}$$

Zyklen-Notation

- ▶ Eine andere nützliche Schreibweise beruht auf der Beobachtung, daß es bei jeder Permutation unabhängige Gruppen von Indizes gibt, die jeweils aufeinander abgebildet werden
- ▶ Bsp.:


$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 4 & 3 \\ 2 & 4 & 1 & 3 \end{array} \right) = (2\ 4\ 1)(3)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 8 & 4 & 9 & 5 & 2 & 6 & 3 & 1 & 10 & 7 \end{pmatrix} = (1\ 8)(2\ 4\ 5)(3\ 9\ 10\ 7)(6)$$

- ▶ Zyklen mit einem Element werden meist nicht aufgeschrieben
- ▶ Aus obigem Beispiel wird

$$(23)(132) = (12) \neq (132)(23) = (13)$$

- ▶ S_2 besteht aus der Identität und der Vertauschung zweier Objekte, $S_2 = \{(), (12)\}$. S_2 ist identisch zur Gruppe $C_2 = \{e, c\}$ mit $c^2 = e$
- ▶ S_3 hat $3! = 6$ Elemente und ist isomorph zu D_3 ,

$$S_3 = \{(), (12), (23), (13), (123), (132)\}$$

$$D_3 = \{e, b, bc, bc^2, c, c^2\}$$

- ▶ S_4 hat bereits $4! = 24$ Elemente, die Zyklen der Form $(.)$, $(..)$, $(..)(..)$, $(...)$, $(....)$ entsprechen:

$$\begin{aligned} S_4 = \{ & (), (12), (13), (14), (23), (24), (34), \\ & (12)(34), (13)(24), (14)(23), \\ & (123), (132), (124), (142), (134), (143), (234), (243), \\ & (1234), (1243), (1324), (1342), (1423), (1432) \} \end{aligned}$$

Theorem von Cayley

⇒ Jede endliche Gruppe der Ordnung n kann als Untergruppe von S_n aufgefaßt werden (ist isomorph zu einer Untergruppe).

- Das Theorem beruht auf der Beobachtung, daß die Multiplikation aller Elemente der Gruppe $G = \{g_1, \dots, g_n\}$ mit einem Element g einer Permutation entspricht:

$$\{gg_1, \dots, gg_n\} = \{g_{\pi_1}, \dots, g_{\pi_n}\}$$

Jedem Element entspricht also genau eine Permutation $\Pi(g)$:

$$g \rightarrow \Pi(g) = \begin{pmatrix} 1 & \dots & n \\ \pi_1 & \dots & \pi_n \end{pmatrix}$$

- Es handelt sich tatsächlich um echte Permutationen, d.h. jeder Index π_i tritt genau einmal auf:

$$\text{aus } gg_j = gg_k \text{ folgt } g_j = g_k$$

$$\text{umgekehrt aus } gg_j = g'g_j \text{ folgt } g = g',$$

d.h. eine Permutation $\Pi(g)$ kann nicht von g' stammen

Theorem von Cayley

- ▶ Es besteht eine 1:1 Korrespondenz zwischen $g \leftrightarrow \Pi(g)$, die die Gruppenstruktur respektiert. Insbesondere gilt

$$g_1 g_2 \leftrightarrow \Pi(g_1) \Pi(g_2)$$

- ▶ Im Prinzip haben wir lediglich die Multiplikationstabelle der Gruppe (Gruppentafel) mit Hilfe von Permutationen ausgedrückt (jede Zeile oder Spalte entspricht einer Permutation)

Die alternierende Gruppe A_n

- ▶ Die einfachste Permutation ist die Vertauschung (Transposition) zweier Objekte, d.h. ein 2-Zyklus (ij) .
- ▶ Jede beliebige Permutation kann als Produkt mehrerer Transpositionen geschrieben werden. Für einen r -Zyklus benötigt man $(r - 1)$ überlappende 2-Zyklen:

$$(n_1, n_2, \dots, n_r) = (n_1 n_2)(n_2 n_3) \dots (n_{r-1} n_r)$$

Angewandt auf die nicht-überlappenden Zyklen einer beliebigen Permutation ergibt sich deren Zerlegung

- ▶ Die Anzahl der für eine Zerlegung benötigten Transpositionen bestimmt das Vorzeichen der Permutation: Gerade = +1, Ungerade = -1
 - ▶ Man kann alle Permutationen in S_n auch durch $n \times n$ Matrizen ausdrücken, die nur 0 oder 1 enthalten. Das Vorzeichen der Permutation entspricht dann der Determinante der zugehörigen Matrix.
- ⇒ Das Produkt zweier gerader Permutationen ist wieder gerade. Die geraden Permutationen bilden deshalb eine Gruppe, die **alternierende Gruppe A_n**

2 Allg. Eigenschaften von Gruppen & Abbildungen

2.1 Konjugation und Klassen

- ▶ **Definition:** Zwei Elemente $a, b \in G$ heißen **konjugiert**, wenn es ein Element $g \in G$ gibt, so daß $a = gbg^{-1}$.
- ▶ Die Eigenschaft der **Konjugation** haben wir bereits bei der Diedergruppe D_n gesehen: $b_i = c^i b_0 c^{-i}$
- ▶ Außerdem ist $c = b_0 c^2 b_0^{-1}$, statt b_0 können hier aber auch $b_1 = b_0 c$ und $b_2 = b_0 c^2$ verwendet werden.
- ▶ Das konjugierende Element hängt von a und b ab, muß aber nicht eindeutig sein
- ▶ Die Konjugation ist Beispiel für eine **Äquivalenzrelation**, einem der elementarsten Konzepte der Mathematik

Äquivalenz

- **Definition:** Eine **Äquivalenzrelation** ist eine Beziehung zwischen zwei Elementen a und b einer Menge M (geschrieben $a \sim b$), die folgende Bedingungen erfüllt:

1. Reflexivität – jedes Element a ist zu sich selbst äquivalent:

$$a \sim a$$

2. Symmetrie – wenn a äquivalent zu b , dann b äquivalent zu a :

$$a \sim b \Rightarrow b \sim a$$

3. Transitivität – wenn a äquivalent zu b und b äquivalent zu c , dann auch a äquivalent zu c :

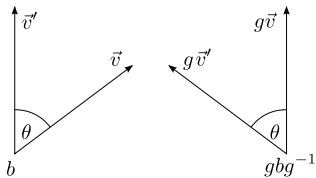
$$a \sim b \text{ und } b \sim c \Rightarrow a \sim c$$

- Beispiele: Geschwister, Nationalität (Wann gilt Äquivalenz nicht?)

Konjugation = Äquivalenzrelation

- ▶ Mit Hilfe der Gruppenaxiome kann man leicht prüfen, daß die Konjugation von zwei Gruppenelementen eine Äquivalenzrelation darstellt:
 1. $a \sim a$: Wegen G2 gilt $a = eae^{-1}$
 2. $a \sim b \Rightarrow b \sim a$: Sei $a = gbg^{-1}$ ($a \sim b$). Multiplikation mit den inversen Elementen (G3) liefert $g^{-1}ag = g^{-1}gbg^{-1}g = b$, also $b \sim a$ mit konjugierendem Element g^{-1}
 3. Mit $a \sim b \rightarrow a = gbg^{-1}$ und $b \sim c \rightarrow b = hch^{-1}$ folgt $a = g(hch^{-1})g^{-1} = (gh)c(gh)^{-1}$, d.h. $a \sim c$ mit konjugierendem Element $gh \in G$ (G0 & G1)
- ▶ **Beispiel:** Wir hatten bereits gesehen, daß die b_i aus D_n äquivalent sind. Dies gilt auch allgemeiner für Drehungen um den gleichen Winkel aber verschiedene Achsen:

Wenn $b\vec{v} = \vec{v}'$, dann
 $(gbg^{-1})(g\vec{v}) = gb\vec{v} = g\vec{v}'$, d.h.
 gbg^{-1} entspricht b im um g
gedrehten Raum.



Konjugationsklassen

- ▶ Jede Äquivalenzrelation führt zu einer Aufteilung einer Menge M in elementfremde (disjunkte) Klassen, den Äquivalenzklassen.
- ▶ **Definition:** Die Äquivalenzklasse des Elements $a \in M$ umfaßt alle Elemente $b \in M$, die zu a äquivalent sind, $(a) = \{b \mid b \sim a\}$.
- ▶ Die Zerlegung einer Menge M in Äquivalenzklassen funktioniert ähnlich wie die Zyklenzerlegung einer Permutation:
 - ▶ Wähle beliebiges Element a und bestimme (a) .
 - ▶ Wiederhole die Prozedur mit den übrig gebliebenen Elementen (sofern noch welche da)
- ▶ Mit der Konjugation als Äquivalenzrelation kann jede Gruppe G in **Konjugationsklassen** (kurz **Klassen**) zerlegt werden:

$$(a) = \{b \mid b = gag^{-1} \text{ für irgendein } g \in G\}$$

Beispiele für Konjugationsklassen

- ▶ C_n : Jedes Element a bildet eine eigene Klasse, da $gag^{-1} = agg^{-1} = a \ \forall g \in G$.
Dieses Ergebnis gilt allgemein für abelsche Gruppen.
- ▶ $D_3 = gp\{c, b\}$ mit $c^3 = b^2 = (bc)^2 = e$ hat die Klassen:
 - ▶ (e) , da in jeder Gruppe $e = geg^{-1} \ \forall g \in G$
 - ▶ (c, c^2) , da z.B. $bc b^{-1} = b(cb) = b(bc^2) = c^2$
 - ▶ $(b, bc, bc^2) = (b_0, b_1, b_2)$, wie vorher diskutiert

Beispiele für Konjugationsklassen

- ▶ Bei S_n besteht eine 1:1 Korrespondenz zwischen Klassen und der Zyklenstruktur:
 - ▶ Jede Permutation P kann als Produkt unterschiedlich langer Zyklen geschrieben werden,

$$P = (a_1 a_2 \dots a_{l_1})(b_1 b_2 \dots b_{l_2})(c_1 c_2 \dots c_{l_3}) \dots$$

- ▶ Die sortierten Längen $l_1 \geq l_2 \geq l_3 \dots$ bilden eine Partition von n , d.h. $l_1 + l_2 + l_3 + \dots + l_r = n$.
 - ▶ Die Zyklenlängen sind invariant bzgl. Konjugation, d.h. QPQ^{-1} hat die selbe Zyklenstruktur wie P .
 - ▶ Die Zahl der Partitionen von n ergibt die Zahl der Konjugationsklassen.
- ▶ Beispiel S_3 :

Partition	Klasse	Entsprechung in D_3
1+1+1	()	e
1+2	(23),(13),(12)	b_0, b_1, b_2
3	(123),(132)	c, c^2

2.2 Untergruppen

- ▶ **Definition:** Eine Untergruppe H von G ist eine Teilmenge von G , die unter der Multiplikations-Operation von G selbst eine Gruppe bildet (d.h. die Axiome G0-G3 erfüllt)
- ▶ Triviale Untergruppen sind $\{e\}$ und G . Alle anderen Untergruppen heißen echte Untergruppen von G , geschrieben $H < G$
- ▶ **Beispiel:** $C_2 = \{e, b\}$ und $C_3 = \{e, c, c^2\}$ sind echte Untergruppen von D_3
- ▶ Zu einer gegebenen Untergruppe $H = \{h_1, \dots, h_r\}$ und einem Element $g \in G$ definiert man die **linke Nebenklasse** gH als:

$$gH := \{gh_1, \dots, gh_r\}$$

(analog dazu gibt es auch rechte Nebenklassen)

- ▶ Die Nebenklassen ergeben eine weitere Zerlegung einer Gruppe, die auf folgender Äquivalenzrelation basiert:

$$a \sim b \text{ falls } b \in aH$$

- ▶ **Begründung:**

1. Reflexivität: Gilt $a \in aH$? Ja, denn $a = ae$ und $e \in H$
 2. Symmetrie: Gilt $b \in aH \Rightarrow a \in bH$? Ja, denn $b \in aH \rightarrow \exists h \in H$ mit $b = ah$. Also $a = bh^{-1}$ mit $h^{-1} \in H \rightarrow a \in bH$
 3. Transitivität: Gilt $b \in aH$ und $c \in bH \Rightarrow c \in aH$? Ja, denn $b = ah$ und $c = bh'$ für bestimmte $h, h' \in H$, also $c = ahh'$ mit $hh' \in H$
- ▶ Die Gruppe G kann also in disjunkte Äquivalenzklassen zerlegt werden, die gerade mit den **unterschiedlichen** Nebenklassen übereinstimmen.
 - ▶ Für endliche Gruppen können die Nebenklassen numeriert werden, z.B. $g_1H, \dots, g_sH$. Die Menge der Nebenklassen wird auch mit G/H bezeichnet (später mehr dazu)

Theorem von Lagrange

- ▶ Bei endlichen Gruppen enthält jede Nebenklasse die gleiche Anzahl r von Elementen, die gerade der Ordnung von H entspricht, $r = [H]$.
- ▶ Jedes der $[G]$ Elemente von G gehört zu genau einer der s Nebenklassen mit je $r = [H]$ Elementen. Es gilt also

$$[G] = s[H],$$

d.h. die Ordnung einer Untergruppe H ist ein Teiler der Ordnung von G (Theorem von Lagrange)

- ▶ Es folgt unmittelbar, daß Gruppen mit primärer Ordnung keine echten Untergruppen besitzen
- ▶ Beispiel: D_3 hat drei C_2 Untergruppen $\{e, b_i\}$. Die Nebenklassen von $H = \{e, b_0 \equiv b\}$ sind:

$$eH = H = \{e, b\}$$

$$cH = \{c, cb\} = \{c, bc^2\}$$

$$c^2H = \{c^2, c^2b\} = \{c^2, bc\}$$

2.3 Normalteiler

- ▶ Untergruppen und Konjugationsklassen haben normalerweise wenig miteinander zu tun. Eine spezielle Art von Untergruppen verbindet beide Konzepte: **Normalteiler** = **invariante Untergruppen**
- ▶ Eine Untergruppe heißt Normalteiler, falls

$$gHg^{-1} = H \quad \forall g \in G$$

- ▶ Multiplikation von rechts mit g zeigt $gH = Hg$, woraus eine alternative Definition folgt: Ein Normalteiler ist eine Untergruppe für die rechte und linke Nebenklassen übereinstimmen.
- ▶ **Beispiel:** $C_3 = \{e, c, c^2\}$ ist ein Normalteiler von D_3 , $C_2 = \{e, b\}$ dagegen nicht.

Die Faktorgruppe

- ▶ Eine bemerkenswerte Eigenschaft von Normalteilern ist, daß die Menge der Nebenklassen G/H ihrerseits eine Gruppenstruktur besitzt
- ▶ **Definition:** Das Produkt zweier Nebenklassen g_1H und g_2H ist definiert als die Nebenklasse g_1g_2H ,

$$(g_1H)(g_2H) := g_1g_2H$$

- ▶ Sind die Gruppenaxiome erfüllt?

G0 $g_1g_2H \in G/H$, da $g_1g_2 \in G$

G1 folgt aus der Assoziativität von G

G2 Als Einselement fungiert $eH = H$,

$$(eH)(gH) = (eg)H = gH$$

G3 Die inverse Nebenklasse von gH ist $g^{-1}H$,

$$(gH)(g^{-1}H) = (gg^{-1})H = eH = H$$

Die Faktorgruppe

- ▶ **Konsistenztest:** Das oben definierte Produkt zweier Nebenklassen sollte unabhängig von der Wahl des Repräsentanten von g_iH sein, d.h. für $g'_1 \in g_1H$ und $g'_2 \in g_2H$ sollte $g_1g_2H = g'_1g'_2H$ gelten.
- ▶ Diese Bedingung ist gerade erfüllt, wenn H ein Normalteiler ist:
 $g'_1 \in g_1H \rightarrow \exists h_1 \in H$ mit $g'_1 = g_1h_1$ und analog $g'_2 = g_2h_2$.
Also $g'_1g'_2H = g_1h_1g_2h_2H = g_1h_1g_2H$.
Wegen $gH = Hg$ folgt $g_1h_1g_2H = g_1Hg_2 = g_1g_2H$
- ▶ **Beispiel:** Der Normalteiler $H = \{e, c, c^2\}$ von D_3 führt auf die Nebenklassen

$$E := eH = H = \{e, c, c^2\}$$

$$B := bH = \{b, bc, bc^2\}$$

die eine zu $C_2 = \{e, b\}$ isomorphe Gruppe bilden

Das direkte Produkt

- ▶ Das letzte Beispiel zeigte, daß $D_3/C_3 = C_2$ (bis auf Isomorphismus). Man könnte also auf die Idee kommen, ein Produkt $D_3 = C_2 \times C_3$ zu erfinden. Für D_3 ist dies nicht sinnvoll, es gibt aber folgende Möglichkeit:
- ▶ **Definition:** Die Gruppe G ist das **direkte Produkt** ihrer Untergruppen A und B (bezeichnet mit $G = A \times B$), falls:
 1. alle Elemente von A mit denen von B kommutieren,
 2. und jedes Element $g \in G$ auf **eindeutige** Weise als $g = ab$ geschrieben werden kann.

Das direkte Produkt

► Daraus folgt:

- Das Produkt zweier Elemente $g_1 = a_1 b_1$ und $g_2 = a_2 b_2$ ergibt sich durch komponentenweise Multiplikation:

$$g_1 g_2 = (a_1 b_1)(a_2 b_2) = (a_1 a_2)(b_1 b_2)$$

- Die beiden Gruppen A und B sind Normalteiler:

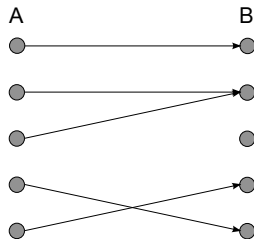
$$g a_i g^{-1} = a b a_i b^{-1} a^{-1} = a a_i a^{-1} \in A \quad \forall a_i \in A$$

und analog für B . Insbesondere besteht eine 1:1 Korrespondenz zwischen den Faktorgruppen G/A , G/B und B , A : Die Nebenklassen $b_j A$ sind alle disjunkt, d.h. ihre Multiplikation entspricht genau derjenigen der b_j

- **Beispiel:** Die Gruppe $D_2 = gp\{a, b\}$ mit $a^2 = b^2 = (ab)^2 = e$ hat zwei zu C_2 isomorphe Normalteiler $A = gp\{a\}$ und $B = gp\{b\}$, und es gilt $D_2 = C_2 \times C_2$.

2.4 Homomorphismen

- ▶ Ein Homomorphismus $f : A \rightarrow B$ ist eine Abbildung f von einer Menge A auf eine andere Menge B , die eine bestimmte Struktur erhält.
- ▶ Jedem Element $a \in A$ ist ein eindeutiges Element $b \in B$ zugeordnet, $b = f(a)$. Die Umkehrung muss nicht gelten. Insbesondere
 1. kann $b \in B$ das Bild verschiedener Elemente aus A sein,
 2. oder es gibt gar kein a dessen Bild b ist.
- ▶ Der zweite Fall kann vermieden werden, indem man B auf das Bild von f beschränkt. Aus einer injektiven Abbildung wird so eine surjektive.
- ▶ **Beispiel:** $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$ mit $f(n) = n \bmod 2$



Gruppen-Homomorphismen

- ▶ Ein **Gruppen-Homomorphismus** $f : A \rightarrow B$ ist eine Abbildung, die die Gruppenstruktur respektiert, genauer:

$$f(a_i a_j) = f(a_i) f(a_j) \quad \forall a_i, a_j \in A$$

- ▶ $f(A)$ bildet eine Untergruppe von B
- ▶ Eine weitere wichtige Untergruppe (von A) ist der **Kern von f** :

$$\text{Ker } f := \{a \in A \mid f(a) = e \in B\}$$

also die Menge aller Elemente von A , die auf $e \in B$ abgebildet werden

- ▶ Es gilt sogar, daß $\text{Ker } f$ ein **Normalteiler** von A ist. Für $k \in \text{Ker } f$ gilt:

$$f(gkg^{-1}) = f(g)f(k)f(g^{-1}) = f(g)ef(g)^{-1} = e$$

- ▶ Diese Eigenschaften des Kerns stellen gewisse Anforderungen an die Form des Homomorphismus f

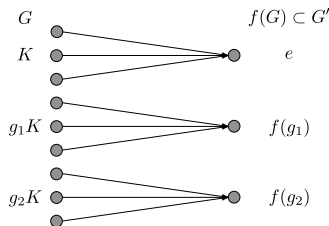
Gruppen-Homomorphismen

- Ist $f : G \rightarrow G'$ ein Homomorphismus von G nach G' mit Kern K , dann besteht eine 1:1 Korrespondenz zwischen $\text{Im}(f)$ und der Faktorgruppe G/K , genauer:

$$f(g) \leftrightarrow gK,$$

d.h. jedem Element g entspricht die Nebenklasse gK

- Für endliche Gruppen folgt: Homomorphe Bilder von G können nur die Ordnung $|G|/r$ haben, wobei r die Ordnung eines Normalteilers von G ist.
- Wichtige Spezialfälle sind
 - $K = G$, also die triviale Abbildung $f(g) = e \ \forall g \in G$
 - $K = e$. Die Abbildung ist in diesem Fall ein **Isomorphismus**, es besteht also eine 1:1 Korrespondenz zwischen G und G' , die die von der Multiplikation erzeugte Struktur erhält



Gruppen-Homomorphismen

- ▶ **Weitere Nomenklatur:** G' muß nicht unbedingt eine andere Gruppe sein. Ein Homomorphismus mit $G' = G$ heißt **Endomorphismus**, ein Isomorphismus mit $G' = G$ heißt **Automorphismus**.
- ▶ **Beispiel:** Die Gruppe D_3 hat eine echte Untergruppe $C_3 = \{e, c, c^2\}$, die der Kern eines Homomorphismus sein könnte. Sein Bild bestünde aus zwei Elementen E und B mit einer zu $D_3/C_3 = C_2$ isomorphen Struktur

$$\begin{aligned}\{e, c, c^2\} &\rightarrow E \\ \{b, b, bc^2\} &\rightarrow B\end{aligned}$$

3 Darstellungen

3.1 Beispiel & Definition

- ▶ Bisher hatten wir die Elemente der Punktgruppen C_n , D_n , etc. meist als abstrakte Objekte angesehen. Sie entsprechen aber auch Drehungen in 3D um feste Winkel, die sich als Matrizen schreiben lassen.
- ▶ **Beispiel:** Allg. Drehung um die z-Achse:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{R(\theta)} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Aus den abstrakten Elementen von $C_3 = \{e, c, c^2\}$ werden mit $\theta = 0, 2\pi/3, 4\pi/3$ die Matrizen:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(e)=R(0)}, \quad \underbrace{\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(c)=R(2\pi/3)} \quad \text{und} \quad \underbrace{\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(c^2)=R(4\pi/3)}$$

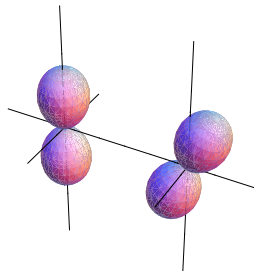
Darstellung einer Gruppe

- ▶ **Definition:** Eine Darstellung ist ein Homomorphismus $D : G \rightarrow GL(n, \mathbb{C})$ von der abstrakten Gruppe G auf die Gruppe der invertierbaren, komplexen $n \times n$ -Matrizen
- ▶ Wie üblich erhält D die Gruppenstruktur, also $D(g_1 g_2) = D(g_1) D(g_2)$.
- ▶ GL steht für “general linear group”, d.h. die allgemeine lineare Gruppe. Die Matrizen müssen invertierbar sein, da $D(g^{-1}) = D(g)^{-1}$ gelten soll.
- ▶ Für Rotationen genügt eine Untergruppe von $GL(n)$:
 - ▶ Skalarprodukte $\vec{a} \vec{b}$ sind invariant unter Drehungen, insbesondere:
$$|\vec{r}'|^2 = r'^T r' = (r^T R^T)(Rr) \stackrel{!}{=} r^T r = |\vec{r}|^2 \Rightarrow R^T R = 1,$$

d.h. die Matrizen R sind **orthogonal**
 - ▶ Außerdem erfüllen Drehmatrizen $\det(R) = 1$ (echte Rotation)
 - ▶ Die entsprechende Gruppe heißt **spezielle orthogonale Gruppe $SO(n)$**
- ▶ Falls D ein Isomorphismus ist (d.h. $\text{Ker} D = e \in G$), heißt die Darstellung **treu**

3.2 Transformation von Wellenfunktionen

- ▶ Beim vorangegangenen Bsp. waren Darstellung und abstrakte Gruppenoperation direkt und anschaulich miteinander verknüpft.
- ▶ Interessanter und etwas indirekter wird der Zusammenhang zwischen Darstellung und Symmetrieoperation in der **Quantenmechanik**
- ▶ Aus der Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ wird unter Drehung des Systems die neue Funktion $\psi'(\vec{r})$
- ▶ Offenbar gilt $\psi'(\vec{r}') = \psi'(R\vec{r}) = \psi(\vec{r})$,
bzw. $\psi'(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$
- ▶ Die Drehung des Systems induziert also eine Transformation im Raum der Wellenfunktionen



Transformation von Wellenfunktionen

- ▶ Die Wellenfunktionen $\psi(\vec{r})$, $\psi'(\vec{r})$ können nach Basisfunktionen $\phi_i(\vec{r})$ entwickelt werden

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \alpha_i \phi_i(\vec{r})$$

$$\psi'(\vec{r}) = \sum_i \alpha'_i \phi_i(\vec{r})$$

- ▶ Die Symmetrieoperation (z.B. Drehung) äußert sich nun in einem Zusammenhang zwischen α_i und α'_i :

$$\alpha'_i = \sum_j D_{ij}(R) \alpha_j$$

- ▶ Wenn R zu einer Gruppe G von Symmetrieoperationen gehört, dann bilden die $D_{ij}(R)$ eine Darstellung von G , d.h. $D(R_1 R_2) = D(R_1) D(R_2)$
- ▶ Meist wirken die Symmetrieoperationen nur auf endlich-dimensionale Unterräume des Hilbertraumes $\rightarrow$ endlich-dimensionale Darstellungen

Bsp. Wasserstoff-Wellenfunktionen

- ▶ Die Eigenfunktionen des Wasserstoffs $u_{nlm}(\vec{r})$ hängen von drei Quantenzahlen n, l, m ab.
- ▶ n bestimmt die Energie $E_n = E_1/n^2$. Da $H = \vec{p}^2/(2m) + V(r)$ invariant unter Drehungen ist, bleibt n unverändert.
- ▶ l charakterisiert $\vec{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Dieses Betragsquadrat eines Vektors ist invariant unter Drehungen, also auch l .
- ▶ Einzige von Drehungen beeinflusste Größe ist m ,

$$u'_{nlm} = \sum_{m'=-l}^l D_{m'm}^l(R) u_{nlm'}$$

- ▶ Wir erhalten $(2l+1)$ -dimensionale Darstellungen der Gruppe der Drehungen R

Bsp. Wasserstoff-Wellenfunktionen

- Konkret: $u_{nlm}(\vec{r}) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ mit $n = 2$, $l = 1$ und

$$Y_{1,1} = -\sqrt{3/(8\pi)} \sin \theta e^{i\phi} = -\sqrt{3/(8\pi)}(x + iy)/r$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{3/(4\pi)} \cos \theta = \sqrt{3/(4\pi)}z/r$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{3/(8\pi)} \sin \theta e^{-i\phi} = \sqrt{3/(8\pi)}(x - iy)/r$$

- Drehungen um die z-Achse um Winkel β sind trivial

$$Y'_{1,m} = e^{im\beta} Y_{1,m}$$

- Drehungen um die y-Achse um Winkel β liefert:

$$\begin{pmatrix} Y'_{1,1} \\ Y'_{1,0} \\ Y'_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} & \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ -\frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} & \cos(\beta) & \frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} \\ \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} & \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{1,1} \\ Y_{1,0} \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix}$$

und analog für Drehungen um x

Motivation der Darstellungstheorie

Für ein allgemeines Quanten-System und eine allgemeine Gruppe von Symmetrieoperationen wollen wir:

- ▶ die möglichen Darstellungen charakterisieren und abzählen,
- ▶ verschiedene Darstellungen kombinieren (Analogie zur Addition von Drehimpulsen; Clebsch-Gordan Koeffizienten)
- ▶ Darstellungen von Untergruppen mit Darstellungen der übergeordneten Gruppe in Beziehung setzen (wichtig für die Auflösung von Entartungen)

3.3 Äquivalente Darstellungen; Charaktere; Reduzibilität

- ▶ **Definition:** Zwei Darstellungen $D^{(1)}$ und $D^{(2)}$ einer Gruppe G sind äquivalent, wenn es eine von $g \in G$ unabhängige Ähnlichkeitstransformation S gibt, so daß

$$D^{(1)}(g) = S D^{(2)}(g) S^{-1} \quad \forall g \in G$$

- ▶ Die Matrizen einer Darstellung D entsprechen linearen Abbildungen in einem Vektorraum, deren Eigenschaften unabhängig von der Wahl der Basis sind. S vermittelt eine Basistransformation, d.h. äquivalente Darstellungen beschreiben das gleiche Objekt.
- ▶ Zur Unterscheidung inäquivalenter Darstellungen kann der **Charakter** herangezogen werden

- ▶ **Definition:** Der Charakter χ einer Darstellung D der Gruppe G ist die Menge der Spuren der Darstellungsmatrizen $D(g)$,

$$\chi = \{\chi(g) := \text{Tr}[D(g)] | g \in G\}$$

- ▶ Wegen der zyklischen Eigenschaft der Spur haben äquivalente Darstellungen den gleichen Charakter,

$$\chi^{(1)}(g) = \text{Tr}[D^{(1)}(g)] = \text{Tr}[SD^{(1)}(g)S^{-1}] = \text{Tr}[D^{(2)}(g)] = \chi^{(2)}(g)$$

- ▶ Es gilt auch die Umkehrung: Darstellungen mit gleichem Charakter sind äquivalent

- ▶ Alle Matrizen der anfangs diskutierten Darstellung von C_3 haben die Block-Form

$$R(c^n) = \begin{pmatrix} \begin{array}{cc|c} \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \end{pmatrix}$$

- ▶ Der Ortsvektor kann auf zwei Unterräume aufgeteilt werden, $\vec{r} = \vec{u} + \vec{v}$ mit $\vec{u} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$ und $\vec{v} = z\vec{e}_z$, die durch die Matrizen $R(c^n)$ nicht gemischt werden
- ▶ Die Darstellung R zerfällt in zwei unabhängige Darstellungen $D^{(1)}$ und $D^{(2)}$, die auf Unterräumen operieren,

$$R(c) = D^{(1)} \oplus D^{(2)}$$

- ▶ $D^{(1)}$ entspricht der trivialen Darstellung $D^{(1)}(g) = 1 \ \forall g \in G$, $D^{(2)}$ ist eine 2-dimensionale Darstellung von C_3

- ▶ **Definition:** Eine $(n + m)$ -dimensionale Darstellung heißt reduzibel, wenn die Matrizen $D(g)$ von der Form

$$D(g) = \begin{pmatrix} A(g) & C(g) \\ 0 & B(g) \end{pmatrix} \quad \forall g \in G$$

sind, mit A , B und C Matrizen der Dimensionen $m \times m$, $n \times n$ und $m \times n$.

- ▶ Diese Struktur bleibt unter der Multiplikation der Gruppe erhalten
- ▶ $\{A(g)\}$ und $\{B(g)\}$ bilden selbst Darstellungen von G
- ▶ Für endliche Gruppen kann $C(g)$ durch eine Ähnlichkeitstransformation zum Verschwinden gebracht werden (Theorem von Maschke). Entsprechende Darstellungen heißen **vollständig reduzibel** bzw. **zerlegbar**,

$$D(g) = A(g) \oplus B(g)$$

- ▶ $\{A(g)\}$ und $\{B(g)\}$ können ihrerseits zerlegbar sein. Der Prozeß endet mit **irreduziblen Darstellungen**

3.4 Gruppen & Vektorräume

- ▶ Es wurde bereits angedeutet, daß die Matrizen einer n -dimensionalen Darstellung linearen Transformationen in einem n -dimensionalen Vektorraum entsprechen.
- ▶ Man kann also inäquivalente Darstellungen als Abbildungen einer Gruppe G auf eine Gruppe linearer Transformationen in einem Vektorraum auffassen
- ▶ Der Begriff des Vektorraums sollte bekannt sein, es folgt eine kurze Zusammenfassung

- ▶ Ein Vektorraum V (über den komplexen Zahlen) ist eine Menge $\{\vec{v}\}$ für die die Operationen Addition und Multiplikation mit einem Skalar mit folgenden Eigenschaften definiert sind:

$$A0 \quad \vec{u} + \vec{v} \in V \quad \forall \vec{u}, \vec{v} \in V$$

$$A1 \quad \vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$$

$$A2 \quad \exists \vec{0} \in V \text{ mit } \vec{u} + \vec{0} = \vec{u}$$

$$A3 \quad \exists (-\vec{u}) \in V \text{ mit } \vec{u} + (-\vec{u}) = \vec{0}$$

$$A4 \quad \vec{u} + \vec{v} = \vec{v} + \vec{u}$$

$$B0 \quad a\vec{u} \in V \quad \forall \vec{u} \in V, a \in \mathbb{C}$$

$$B1 \quad a(\vec{u} + \vec{v}) = a\vec{u} + a\vec{v}$$

$$B2 \quad (a + b)\vec{u} = a\vec{u} + b\vec{u}$$

$$B3 \quad (ab)\vec{u} = a(b\vec{u})$$

$$B4 \quad 1\vec{u} = \vec{u}$$

- ▶ Beispiele: Gewöhnliche Vektoren in 3D, Räume von Funktionen, ...

- Lineare Unabhängigkeit:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i \vec{e}_i = \vec{0} \rightarrow \lambda_i = 0 \quad \forall i$$

- Basis: Linear unabh. Vektoren $\{\vec{e}_i\}$ bilden eine **Basis** von V falls

$$\vec{u} = \sum_{i=1}^n u_i \vec{e}_i \quad \forall \vec{u} \in V$$

Die dafür nötige Zahl von Vektoren n heißt Dimension von V

Lineare Transformationen

- ▶ Lineare Transformation $T : V \rightarrow V$:

$$T(\alpha \vec{u} + \beta \vec{v}) = \alpha T(\vec{u}) + \beta T(\vec{v}) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \text{ und } \vec{u}, \vec{v} \in V$$

- ▶ Matrixdarstellung: Aus $T(\vec{e}_j) = D_{ij} \vec{e}_i$ folgt

$$T(u) = T\left(\sum_j u_j \vec{e}_j\right) = u_j T(\vec{e}_j) = u_j D_{ij} \vec{e}_i$$

- ▶ Ähnlichkeit: Die Matrix D hängt von der Basis $\{\vec{e}_i\}$ ab, für eine andere Basis $\{\vec{f}_i\}$ mit $\vec{e}_i = S_{ji} \vec{f}_j$ gilt $T(\vec{f}_j) = D'_{ij} \vec{f}_i$ mit $D' = SDS^{-1}$

- ▶ Mit Hilfe von linearen Transformationen auf Vektorräumen kann der Darstellungs-Begriff verallgemeinert werden: Eine Darstellung der Gruppe G ist ein Homomorphismus von G auf die Gruppe der invertierbaren linearen Transformationen T eines Vektorraums V , $g \rightarrow T(g)$ mit

$$T(gg') = T(g)T(g')$$

- ▶ Ein Vektorraum in dem eine Gruppe G so operiert, heißt **G-Modul**
- ▶ Die Menge der linearen Operatoren $\{T(g)\}$ entspricht einer ganzen Äquivalenzklasse von Matrix-Darstellungen
- ▶ **Reduzibilität** bedeutet in dieser Sprache die Existenz eines Untermoduls, d.h. eines Unterraumes U von V der unter der Wirkung der Gruppe G abgeschlossen ist,

$$\vec{u} \in U \subset V \rightarrow T(g)\vec{u} \in U \quad \forall g \in G$$

- ▶ Zurück übersetzt in Matrix-Darstellung erhalten wir die ursprüngliche Definition

3.5 Skalarprodukt; Unitäre Darstellungen; Theorem von Maschke

- ▶ **Skalarprodukt:** Abbildung $V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ die einem geordneten Paar $\vec{u}, \vec{v} \in V$ eine Zahl $(\vec{u}, \vec{v})$ zuordnet mit:
 - S1 $(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{v}, \vec{u})^*$
 - S2 $(\vec{w}, \alpha\vec{u} + \beta\vec{v}) = \alpha(\vec{w}, \vec{u}) + \beta(\vec{w}, \vec{v})$
 - S3 $(\vec{u}, \vec{u}) \geq 0$ mit $(\vec{u}, \vec{u}) = 0$ genau dann wenn $\vec{u} = \vec{0}$
- ▶ Beispiele: Gewöhnliches Skalarprodukt in 3D, Produkt von Funktionen $(f, g) = \int f^*(x)g(x)dx$, etc.
- ▶ **Norm:** $||\vec{u}||^2 = (\vec{u}, \vec{u})$
- ▶ **Orthogonalität:** $(\vec{u}, \vec{v}) = 0$
- ▶ **Orthonormale Basis:** Eine Basis $\{\vec{e}_i\}$ mit

$$(\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \delta_{ij}$$

folgt aus einer beliebigen Basis $\{\vec{f}_i\}$ mit dem **Gram-Schmidt-Verfahren**

- ▶ Eine lineare Transformation T heißt **unitär**, falls

$$(T\vec{u}, T\vec{v}) = (\vec{u}, \vec{v}) \quad \forall \vec{u}, \vec{v} \in V$$

- ▶ Im Falle von Darstellungen sind alle $T(g)$ invertierbar, Unitarität ist dann äquivalent zu

$$(T\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{u}, T^{-1}\vec{v})$$

- ▶ Wird T bezüglich einer orthonormalen Basis als Matrix D ausgedrückt, gilt: $D_{ij}^* = (D^{-1})_{ji}$, also $D^\dagger = (D^*)^T = D^{-1}$
- ▶ Erwähnt sei auch noch der Begriff **Hermiteisch**:

$$(T\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{u}, T\vec{v}) \quad \forall \vec{u}, \vec{v} \in V,$$

$$\text{d.h. } D^\dagger = D$$

Unitäre Darstellungen

- ▶ Reduzibilität bedeutet die Existenz eines Untermoduls U , also eines Unterraumes $U \subset V$ mit $\vec{u} \in U \rightarrow T(g)\vec{u} \in U$
- ▶ Eine orthonormale Basis $\{\vec{e}_i\}$, $i = 1 \dots m$, von U kann mit $\{\vec{e}_i\}$, $i = m+1 \dots (m+n)$ zu einer orthonormalen Basis von V ergänzt werden. Jeder von den zusätzlichen Vektoren aufgespannte Vektor $\vec{w}$ gehört zum orthogonalen Komplement von U ,

$$W = \{\vec{w} \in V \mid (\vec{w}, \vec{u}) = 0 \ \forall \vec{u} \in U\}$$

- ▶ Für unitäre Darstellungen mit

$$(T(g)\vec{w}, \vec{u}) = (\vec{w}, T^{-1}(g)\vec{u})$$

ist W unter $T(g)$ abgeschlossen, denn $T^{-1}(g)\vec{u} = T(g^{-1})\vec{u} = \vec{u}' \in U$, also

$$(T(g)\vec{w}, \vec{u}) = (\vec{w}, \vec{u}') = 0,$$

d.h. $T(g)\vec{w} = \vec{w}' \in W$

- ▶ Unitäre Darstellungen sind also vollständig reduzibel bzw. zerlegbar

Theorem von Maschke

- ▶ Unitäre Darstellungen sind vollständig reduzibel.
- ▶ Für endliche bzw. kompakte Gruppen können alle anderen Darstellungen durch Wahl eines geeigneten Skalarprodukts unitär gemacht werden:

$$\{\vec{v}, \vec{v}'\} := \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} (T(g)\vec{v}, T(g)\vec{v}')$$

mit $\vec{v}, \vec{v}' \in V$

- ▶ Tatsächlich gilt:

$$\begin{aligned} \{T(h)\vec{v}, T(h)\vec{v}'\} &= \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} (T(h)T(g)\vec{v}, T(h)T(g)\vec{v}') \\ &= \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} (T(hg)\vec{v}, T(hg)\vec{v}') \\ &= \frac{1}{[G]} \sum_{g' \in G} (T(g')\vec{v}, T(g')\vec{v}') = \{\vec{v}, \vec{v}'\}, \end{aligned}$$

d.h. T ist unitär bzgl. des Skalarprodukts $\{.,.\}$

Theorem von Maschke

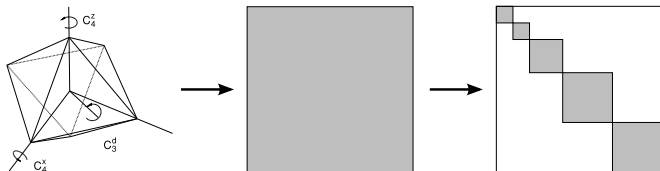
- ▶ Vollständig reduzible Matrixdarstellungen $D'(h)$ erhält man, indem man $T(h)$ in einer bzgl. $\{.,.\}$ orthonormalen Basis $\{\vec{f}_i\}$ ausdrückt.
- ▶ $D'(h)$ ist mit dem ursprünglichen $D(h)$ über eine Ähnlichkeitstransformation S verbunden, $D'(h) = SD(h)S^{-1}$
- ▶ Die Konstruktion von $\{.,.\}$ basierte auf der Summe über die Gruppe G , $\sum_{g \in G}$. Für unendliche Gruppen benötigt man ein konvergentes Integral $\int d\mu(g)$

4 Irreduzible Darstellungen

4.1 Schursche Lemmata

Status

- ▶ Darstellungen endlicher & kompakter Gruppen sind irreduzibel oder vollständig reduzibel
- ▶ Matrizen reduzibler Darstellungen können durch Ähnlichkeitstransformationen auf Block-Diagonalform gebracht werden



Fragen

- ▶ Welche Eigenschaften haben diese elementaren Blöcke?
- ▶ Wie findet man sie?

Das erste Schursche Lemma

Lemma:

Eine Matrix, die mit allen Matrizen einer **irreduziblen Darstellung** einer Gruppe G kommutiert, ist ein Vielfaches der Einheitsmatrix, i.e.

$$BD(g) = D(g)B \quad \forall g \in G \implies B = \lambda E$$

bzw. in der Sprache linearer Operatoren $U \rightarrow U$

$$\hat{B}T(g) = T(g)\hat{B} \quad \forall g \in G \implies \hat{B} = \lambda \hat{E}$$

Beweis:

- Sei $\vec{b}$ ein Eigenvektor von $\hat{B}$ mit Eigenwert λ , d.h. $\hat{B}\vec{b} = \lambda\vec{b}$, dann gilt

$$\hat{B}(T(g)\vec{b}) = T(g)\hat{B}\vec{b} = T(g)\lambda\vec{b} = \lambda(T(g)\vec{b})$$

- $T(g)\vec{b}$ ist also Eigenvektor von $\hat{B}$ zum **gleichen** Eigenwert λ . Alle solchen Eigenvektoren bilden einen Unterraum V des Vektorraumes U .

Das erste Schursche Lemma

- ▶ Wegen obiger Gleichung ist der Raum V abgeschlossen unter der Gruppe G , also ein G -Modul.
- ▶ Irreduzibilität heißt, daß der Raum U keinen echten Untermodul besitzt. Die einzigen erlaubten Untermodule sind
 - (a) der volle Raum U selbst, und
 - (b) der Nullvektor $\vec{0}$
- ▶ Fall (b) kann **ausgeschlossen** werden, da jeder lineare Operator $\hat{B}$ mindestens einen echten Eigenwert hat. Die charakteristische Gleichung $\det(B - \lambda E) = 0$ hat mindestens eine Lösung mit zugehörigem Eigenvektor $\vec{b}$.
- ▶ Es bleibt Fall (a), der besagt, daß der Eigenraum V von λ der gesamte Raum U ist, d.h. $\hat{B}\vec{u} = \lambda\vec{u}$ für ein beliebiges $\vec{u} \in U$. Daher $\hat{B} = \lambda\hat{E}$.

Das zweite Schursche Lemma

Lemma:

Seien $D(g)$ und $D'(g)$ zwei inäquivalente Darstellungen der Gruppe G , und B eine Matrix (linearer Operator) die zwischen den Vektorräumen U und U' vermittelt, auf denen D und D' operieren. Dann gilt:

$$BD(g) = D'(g)B \quad \forall g \in G \implies B = 0$$

bzw. in der Sprache von Operatoren (mit $\hat{B} : U \rightarrow U'$, $T^{(i)} : U^{(i)} \rightarrow U^{(i)}$)

$$\hat{B}T(g) = T'(g)\hat{B} \quad \forall g \in G \implies \hat{B} = \hat{0}$$

wobei $\hat{0} : U \rightarrow U'$ mit $\hat{0}\vec{u} = \vec{0} \quad \forall \vec{u} \in U$

Beweis:

► Anhand der Dimensionen n, n' von U, U' unterscheiden wir drei Fälle:

- (1) $n < n'$
- (2) $n > n'$
- (3) $n = n'$

Das zweite Schursche Lemma

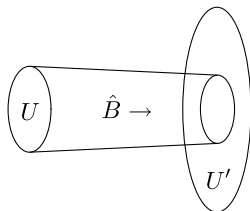
- Fall (1), $n < n'$: Man betrachte die Wirkung von $T'(g)\hat{B}$ auf einen beliebigen Vektor $\vec{u} \in U$,

$$T'(g)\hat{B}\vec{u} = \hat{B}T(g)\vec{u}$$

- Da U ein G -Modul ist, gilt $T(g)\vec{u} \in U$, und damit

$$T'(g)(\hat{B}\vec{u}) \in \hat{B}U$$

- Das heißt $\hat{B}U = \text{Im}(\hat{B})$ ist ein **Untermodul** von U' (siehe Bild). Da aber U' irreduzibel ist, muß $\hat{B}U$ entweder (a) der ganze Raum U' , oder (b) der Nullvektor $\vec{0}$ sein.
- Fall (a) widerspricht der Annahme $n < n'$: Für die Dimension m des Bildes $\hat{B}U$ gilt $m \leq n < n'$, d.h. $\hat{B}U$ kann nicht der ganze Raum U' sein.
- Fall (b) entspricht gerade der Behauptung, $\hat{B} = \hat{0}$.



Das zweite Schursche Lemma

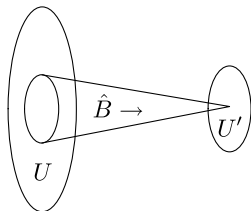
- Fall (2), $n > n'$: Wir betrachten den Kern K von $\hat{B}$ (siehe Bild),

$$K := \{\vec{k} \in U \mid \hat{B}\vec{k} = \vec{0}'\}$$

- Dieser Vektorraum ist ein Untermodul von U , denn

$$\hat{B}(T(g)\vec{k}) = T'(g)\hat{B}\vec{k} = \vec{0}'$$

- Die Irreduzibilität von U erfordert: K ist entweder (a) der ganze Raum U , oder (b) der Nullvektor $\vec{0}$. Der Kern K von $\hat{B}$ muß aber nicht-trivial ($\neq \vec{0}$) sein, da $\hat{B}$ die Raumdimension reduziert, $n > n'$. Damit bleibt nur Fall (a), d.h. $\hat{B}\vec{u} = \vec{0}' \forall \vec{u} \in U$, also $\hat{B} = \hat{0}$
- Fall (3), $n = n'$: Wieder ist K ein Untermodul von U . Der Fall (b) $K = \vec{0}$ entfällt nun wegen der Inäquivalenz von T und T' : Ein trivialer Kern bedeutete, daß $\hat{B}$ eine 1:1 Abbildung wäre und $\hat{B}\vec{u} = \hat{B}\vec{v} \Rightarrow \vec{u} - \vec{v} \in K$. $\hat{B}$ wäre also invertierbar, und $T'(g) = \hat{B}T(g)\hat{B}^{-1}$ (Äquivalenz). Es bleibt Fall (a), also $\hat{B} = \hat{0}$.



4.2 Fundamentaltheorem zur Orthogonalität

- ▶ Seien U_ν und U_μ zwei G -Module die inäquivalente irreduzible Darstellungen $T^{(\nu)}$ und $T^{(\mu)}$ tragen, und $\hat{A}$ eine beliebige lineare Abbildung $U_\nu \rightarrow U_\mu$. Wir definieren den Operator:

$$\hat{B} := \sum_{g \in G} T^{(\mu)}(g) \hat{A} T^{(\nu)}(g^{-1})$$

- ▶ $\hat{B}$ erfüllt die Voraussetzungen der Schurschen Lemmata, denn

$$\begin{aligned} T^{(\mu)}(h) \hat{B} &= \sum_{g \in G} T^{(\mu)}(h) T^{(\mu)}(g) \hat{A} T^{(\nu)}(g^{-1}) \\ &= \sum_{g \in G} T^{(\mu)}(hg) \hat{A} T^{(\nu)}(g^{-1}) \\ &= \sum_{g' \in G} T^{(\mu)}(g') \hat{A} T^{(\nu)}((g')^{-1}h) \\ &= \left(\sum_{g' \in G} T^{(\mu)}(g') \hat{A} T^{(\nu)}((g')^{-1}) \right) T^{(\nu)}(h) = \hat{B} T^{(\nu)}(h) \end{aligned}$$

Fundamentaltheorem zur Orthogonalität

- ▶ Wegen $T^{(\mu)}(h)\hat{B} = \hat{B}T^{(\nu)}(h)$ gilt:
$$\hat{B} = \begin{cases} \hat{0} & \text{falls } \nu \neq \mu \\ \lambda \hat{E} & \text{falls } \nu = \mu \end{cases}$$

- ▶ Übersetzt in Matrixform ergibt sich:

$$B := \sum_{g \in G} D^{(\mu)}(g) A D^{(\nu)}(g^{-1}) = \lambda_A^{(\mu)} \delta^{\mu\nu} E$$

- ▶ Die Konstante λ hängt von der betrachteten Darstellung μ und von der Abbildung A ab. Mit der speziellen Wahl $A_{lm} = \delta_{lr} \delta_{ms}$ (d.h. $A_{rs} = 1$, alle anderen 0) ergibt sich für das Matricelement ij

$$\sum_{g \in G} D_{ir}^{(\mu)}(g) D_{sj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \lambda_{rs}^{(\mu)} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij}$$

- ▶ Nun kann $\lambda_{rs}^{(\mu)}$ durch Spurbildung bestimmt werden:

$$\sum_{g \in G} (D^{(\mu)}(g^{-1}) D^{(\mu)}(g))_{sr} = n_\mu \lambda_{rs}^{(\mu)}$$

wobei n_μ die Dimension von $D^{(\mu)}$ bezeichnet

Fundamentaltheorem zur Orthogonalität

- Für jedes $g \in G$ gilt

$$(D^{(\mu)}(g^{-1})D^{(\mu)}(g))_{sr} = (D^{(\mu)}(g^{-1}g))_{sr} = (D^{(\mu)}(e))_{sr} = \delta_{sr}$$

deshalb folgt

$$[G]\delta_{rs} = n_{\mu}\lambda_{rs}^{(\mu)}$$

und schließlich:

Fundamentale Orthogonalitätsbeziehung für die Matrizen irreduzibler Darstellungen:

$$\sum_{g \in G} D_{ir}^{(\mu)}(g) D_{sj}^{(\nu)}(g^{-1}) = \frac{[G]}{n_{\mu}} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{rs}$$

Schranken für die Zahl irreduzibler Darst.

- Wir hatten gesehen, daß jede Darstellung endl. Gruppen unitär gemacht werden kann. Es gilt dann

$$\sum_{g \in G} D_{ir}^{(\mu)}(g)(D_{js}^{(\nu)}(g))^* = \frac{[G]}{n_\mu} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{rs}$$

- Sei $\mu = \nu$. Die linke Seite kann dann als Skalarprodukt der Vektoren $\{D_{ir}^{(\mu)}(g_1), \dots, D_{ir}^{(\mu)}(g_{[G]})\}$ und $\{D_{js}^{(\mu)}(g_1), \dots, D_{js}^{(\mu)}(g_{[G]})\}$ aufgefaßt werden. Die kombinierten Indizes ij und js können n_μ^2 Werte annehmen, d.h. zu jedem μ gibt es n_μ^2 orthogonale Vektoren.
- Außerdem sind die Vektoren zu $\mu \neq \mu'$ orthogonal. Insgesamt führen die Darstellungen $D^{(\mu)}$ auf $\sum_\mu n_\mu^2$ orthogonale Vektoren, die in einen $[G]$ dimensionalen Raum passen müssen. Es gilt also:

$$\sum_\mu n_\mu^2 \leq [G]$$

- Wir zeigen später, daß Gleichheit gilt ($\sum_\mu n_\mu^2 = [G]$). Außerdem ist $n_\mu > 0$, d.h. die **Zahl der irreduziblen Darstellungen ist beschränkt.**

4.3 Orthogonalität von Charakteren

- ▶ In Kapitel 3.3 wurde der Begriff Charakter eingeführt:

$$\chi = \{\chi(g) := \text{Tr}[D(g)] \mid g \in G\}$$

Die wichtigsten Eigenschaften sind:

- ▶ Äquivalente Darstellungen ($D'(g) = S D(g) S^{-1}$) haben den gleichen Charakter χ
- ▶ Konjugierte Elemente ($D(hgh^{-1}) = D(h)D(g)D(h)^{-1}$) haben den gleichen Charakter χ
- ▶ Für unitäre Darstellungen ($D^{-1} = D^\dagger$) gilt

$$\chi(g^{-1}) = \text{Tr}[D(g)^{-1}] = \text{Tr}[D(g)^\dagger] = \chi(g)^*$$

- ▶ Aus der fundamentalen Orthogonalitätsbeziehung erhält man durch Spurbildung eine **Orthogonalitätsbeziehung für Charaktere**:

$$\frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \chi^{(\mu)}(g) \chi^{(\nu)}(g^{-1}) = \delta^{\mu\nu}$$

Orthogonalität von Charakteren

- Für unitäre Darstellungen wird daraus:

$$\frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \chi^{(\mu)}(g) \chi^{(\nu)}(g)^* = \delta^{\mu\nu}$$

was als **Skalarprodukt** zwischen den Vektoren $\{\chi^{(\mu)}(g_1), \dots, \chi^{(\mu)}(g_{[G]})\}$ und $\{\chi^{(\nu)}(g_1), \dots, \chi^{(\nu)}(g_{[G]})\}$ aufgefaßt werden kann

- Wir definieren deshalb:

$$\langle \phi, \chi \rangle := \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \phi(g) \chi(g^{-1}) = \langle \chi, \phi \rangle$$

- In dieser Sprache sind also die Charaktere inäquivalenter irreduzibler Darstellungen **orthonormal**:

$$\langle \chi^{(\mu)}, \chi^{(\nu)} \rangle = \delta^{\mu\nu}$$

2. Schranke für die Zahl irreduzibler Darst.

- ▶ Der Charakter konjugierter Elemente von G ist gleich. Zerfällt G in k Konjugationsklassen K_i mit je k_i Elementen und Charakter χ_i , gilt also:

$$\frac{1}{[G]} \sum_{i=1}^k k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu),*} = \delta^{\mu\nu}$$

- ▶ Dies kann wiederum als Orthogonalität der Vektoren $\{\sqrt{k_1}\chi_1^{(\mu)}, \dots, \sqrt{k_k}\chi_k^{(\mu)}\}$ in einem k -dimensionalen Raum aufgefaßt werden, von denen es aber höchstens k Stück gibt
- ▶ Daraus folgt eine weitere Schranke für die Anzahl r irreduzibler Darstellungen, $r \leq k$
- ▶ Da auch die Orthogonalitätsbeziehung

$$\frac{1}{[G]} \sum_{\mu=1}^r k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_j^{(\mu),*} = \delta_{ij}$$

bewiesen werden kann, handelt es sich um echte Gleichheit:

$$r = k$$

Zerlegung reduzibler Darstellungen

- ▶ Wie bereits mehrfach angedeutet, können reduzible Darstellungen D endlicher bzw. kompakter Gruppen als direkte Summe irreduzibler Darstellungen $D^{(\nu)}$ geschrieben werden,

$$D = \sum_{\oplus} a_{\nu} D^{(\nu)}$$

Der Koeffizient $a_{\nu} \in \mathbb{N}_0$ gibt an, wie oft die irreduzible Darstellung $D^{(\nu)}$ in der Summe auftritt.

- ▶ Wie bestimmt man die a_{ν} ? Spurbildung und Ausnutzung der Orthogonalitätsbeziehungen!

$$\chi(g) = \sum_{\nu} a_{\nu} \chi^{(\nu)}(g)$$

$$\sum_{g \in G} \chi^{(\mu)}(g^{-1}) \chi(g) = \sum_{\nu} a_{\nu} \sum_{g \in G} \chi^{(\mu)}(g^{-1}) \chi^{(\nu)}(g) = [G] \sum_{\nu} a_{\nu} \delta^{\mu\nu}$$

$$a_{\mu} = \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \chi(g) \chi^{(\mu)}(g^{-1}) = \langle \chi^{(\mu)}, \chi \rangle$$

Die Reguläre Darstellung

- Die einfachste (reduzible) Darstellung endlicher Gruppen ergibt sich direkt aus der Gruppentafel bzw. aus dem Isomorphismus zwischen endlichen Gruppen und Untergruppen der symmetrischen Gruppe $S_{[G]}$:

$$gg_i = \sum_{j=1}^{[G]} D_{ji}(g) g_j$$

- Die $[G] \times [G]$ Permutations-Matrizen $D_{ji}(g)$ bilden eine $[G]$ -dimensionale Darstellung von G , die **reguläre Darstellung**
- So wie in der Gruppentafel jedes Element in jeder Zeile und Spalte genau einmal auftritt, enthalten die Matrizen $D_{ji}(g)$ in jeder Zeile und Spalte genau eine 1 und sonst nur 0
- $D(e)$ ist die Einheitsmatrix, für alle anderen gilt $\text{Tr}[D(g \neq e)] = 0$, d.h.

$$\chi(g) = \begin{cases} 0 & g \neq e \\ [G] & g = e \end{cases}$$

Die Reguläre Darstellung

- Die Koeffizienten für die **Zerlegung der regulären Darstellung** in irreduzible Darstellungen ergeben sich damit zu:

$$a_\mu = \frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \chi(g) \chi^{(\mu)}(g^{-1}) = \langle \chi^{(\mu)}, \chi \rangle = \chi^{(\mu)}(e) = n_\mu$$

- Die Beziehung

$$\chi(g) = \sum_{\nu} a_\nu \chi^{(\nu)}(g)$$

führt mit $g = e$ auf die zuvor angekündigte Gleichung

$$[G] = \sum_{\nu} n_\nu^2$$

4.4 Konstruktion der Charaktertafel

- ▶ Nach langer Vorbereitung haben wir die Darstellungstheorie nun weit genug entwickelt, um die **irreduziblen Darstellungen einer endlichen Gruppe bestimmen** zu können.
- ▶ Als **Werkzeug** stehen uns zur Verfügung:
 1. Anzahl irred. Darst. = Anzahl Konjugationsklassen, $r = k$
 2. $\sum_{\mu} n_{\mu}^2 = [G]$
 3. Orthogonalität: $\sum_i k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)*} = [G] \delta^{\mu\nu}$
 4. Alle anderen verfügbaren Informationen(!)
- ▶ Unter 4. fällt z.B. die Tatsache, daß für eindimensionale Darstellungen Charakter und Matrix zusammenfallen. Die Charaktere erfüllen dann die Multiplikationseigenschaften der Gruppe. Dies ist wichtig für Abelsche Gruppen, deren Darstellungen sämtlich eindimensional sind.

Charaktertafel von C_3

- ▶ $C_3 = \{e, c, c^2\}$ ist abelsch, d.h. jedes Element bildet seine eigene Konjugationsklasse. Es gibt also $r = k = [G] = 3$ irreduzible Darstellungen.
- ▶ Die einzige Lösung von $\sum_{\mu=1}^{[G]} n_{\mu}^2 = [G]$ ist $n_{\mu} = 1 \ \forall \mu$.
- ▶ Da $n_{\mu} = 1$, müssen die Charaktere die Multiplikationsregeln der Gruppe erfüllen, also $\chi^{(\mu)}(c)^3 = \chi^{(\mu)}(e) = 1$ (Einheitswurzel). Mit $\omega = \exp(2\pi i / 3)$ ergibt sich die Charaktertafel:

C_3	e	c	c^2
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	ω	ω^2
$D^{(3)}$	1	ω^2	$\omega^4 = \omega$

- ▶ $D^{(1)}$ ist die triviale Darstellung und wird meist mit A bezeichnet.
- ▶ $D^{(2)}$ und $D^{(3)}$ sind komplex konjugiert zueinander, und die zugehörigen Energieniveaus sind meist entartet. Sie werden deshalb oft zu einer zweidimensionalen Darstellung E zusammengefaßt.

Charaktertafel von C_3

- ▶ Orthonormalität der Charaktere folgt sofort aus der Verwandtschaft mit diskreter Fouriertransformation, $\langle \chi^{(\mu)}, \chi^{(\nu)} \rangle = \delta^{\mu\nu}$
- ▶ Eine Zerlegung der Darstellung aus 3.1,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(e)=R(0)}, \underbrace{\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(c)=R(2\pi/3)} \text{ und } \underbrace{\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(c^2)=R(4\pi/3)}$$

ergibt $\chi = \{3, 0, 0\}$ und $a_\nu = \langle \chi, \chi^{(\nu)} \rangle = \chi^{(\nu)}(e) = 1$, d.h.

$$D = D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(3)}$$

- ▶ Ein Satz von Basisfunktionen, die sich gemäß der Darstellungen $D^{(\nu)}$ transformieren, ist $z, x + iy, x - iy$.

C_3		Basis	e	c	c^2
$D^{(1)}$	A	z	1	1	1
$D^{(2)}$	E	$x + iy$	1	ω	ω^2
$D^{(3)}$		$x - iy$	1	ω^2	$\omega^4 = \omega$

Charaktertafel von D_3

- Die Konjugationsklassen K_i von D_3 sind (e) , (c, c^2) und (b, bc, bc^2) , es gibt also $r = k = 3$ irreduzible Darstellungen
- Die Dimensionen der Darstellungen ergeben sich aus der Gleichung $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = [G] = 6$, deren einzige ganzzahlige Lösung $n_1 = n_2 = 1$, $n_3 = 2$ ist (und Permutationen davon).
- Die eindimensionalen Darstellungen müssen die Gruppeneigenschaften widerspiegeln, also $\chi(b)^2 = \chi(b^2) = \chi(e) = 1 \Rightarrow \chi(b) = \chi_3 = \pm 1$. Außerdem $\chi(bc) = \chi(b)\chi(c) = \chi_3 \Rightarrow \chi(c) = \chi_2 = 1$.
- Damit enthält die Charaktertafel nur noch 2 Unbekannte:

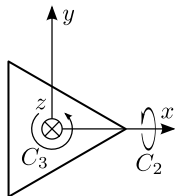
D_3	K_1	K_2	K_3
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	-1
$D^{(3)}$	2	α	β

- α und β folgen aus der Orthogonalitätsbeziehung $\langle \chi^{(\mu)}, \chi^{(\nu)} \rangle = \delta^{\mu\nu}$

$$\begin{aligned}\langle \chi^{(3)}, \chi^{(1)} \rangle &= (2 + 2\alpha + 3\beta)/6 = 0 \\ \langle \chi^{(3)}, \chi^{(2)} \rangle &= (2 + 2\alpha - 3\beta)/6 = 0\end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \alpha = -1, \beta = 0$$

Charaktertafel von D_3

- Die übliche Notation für die drei Darstellungen ist:
 $D^{(1)} = A_1$, $D^{(2)} = A_2$ (1-dim.) und $D^{(3)} = E$ (2-dim.)
- Da die Elemente der Konjugationsklassen jeweils Drehungen erzeugen, schreibt man außerdem: $K_1 = E$, $K_2 = 2C_3$ und $K_3 = 3C_2$
- D_3 läßt sich auch durch Drehung der Koordinaten $\{x, y, z\}$ darstellen:



$$D(c) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad D(b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Aus $\chi = \{3, 0, -1\}$ folgt dann $D = A_2 \oplus E$ sowie Basisfunktionen $\{z\}$ und $\{x, y\}$

D_3	Basis	E	$2C_3$	$3C_2$
A_1	1	1	1	1
A_2	z	1	1	-1
E	x, y	2	-1	0

4.5 Direkte Produkte von Darstellungen und ihre Zerlegung

- ▶ Betrachtet sei ein System von zwei Teilchen, deren Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{x})$, $\phi_b(\vec{x})$ sich gemäß der Darstellungen $D^{(\mu)}$ und $D^{(\nu)}$ transformieren

$$\psi'_a(\vec{x}) = D_{ba}^{(\mu)}(g)\psi_b(\vec{x})$$

$$\phi'_c(\vec{x}) = D_{dc}^{(\nu)}(g)\phi_d(\vec{x})$$

- ▶ Für die Produktwellenfunktion $\psi_{ac} := \psi_a\phi_c$ gilt dann:

$$\psi'_{ac} = D_{ba}^{(\mu)}(g)D_{dc}^{(\nu)}(g)\psi_{bd}$$

- ▶ Indexpaare können als neue Indizes im $n_\mu \times n_\nu$ -dimensionalen Raum aufgefaßt werden, $A := (ac)$, $B := (db)$. Mit

$$D_{bd;ac}^{(\mu \times \nu)}(g) := D_{ba}^{(\mu)}(g)D_{dc}^{(\nu)}(g) \quad \text{gilt} \quad \psi'_A = D_{BA}^{(\mu \times \nu)}(g)\psi_B$$

Zerlegung von Produkt-Darstellungen

- ▶ Die Matrizen $D_{bd;ac}^{(\mu \times \nu)}(g)$ bilden eine **Produkt-Darstellung**, die mit $D^{(\mu)} \otimes D^{(\nu)}$ bezeichnet wird. Insbesondere läßt sich leicht nachprüfen, daß $D^{(\mu \times \nu)}(g_1 g_2) = D^{(\mu \times \nu)}(g_1) D^{(\mu \times \nu)}(g_2)$
- ▶ Besteht keine Wechselwirkung zwischen den Teilsystemen, könnten Gruppenoperationen g_1, g_2 unabhängig voneinander auf die Teile wirken. Die Matrix

$$D_{bd;ac}^{(\mu \times \nu)}((g_1; g_2)) := D_{ba}^{(\mu)}(g_1) D_{dc}^{(\nu)}(g_2)$$

beschreibt dann (gegebenenfalls nach Symmetrisierung) eine irreduzible Darstellung der Produkt-Gruppe $G \times G$.

- ▶ Im Normalfall wechselwirken die Teilsysteme, und es wirkt jeweils die gleiche Gruppenoperation $g = g_1 = g_2$. Die Darstellung $D^{(\mu \times \nu)}$ ist dann meist **reduzibel**.
- ▶ Die Zerlegung

$$D^{(\mu)} \otimes D^{(\nu)} = \sum_{\oplus} a_{\sigma} D^{(\sigma)}$$

wird auch **Clebsch-Gordan-Reihe** genannt

Zerlegung von Produkt-Darstellungen

- Die Koeffizienten a_σ ergeben sich aus den zuvor abgeleiteten Formeln:

$$\begin{aligned}\chi^{(\mu \times \nu)}(g) &= \text{Tr}[D^{(\mu \times \nu)}(g)] = \text{Tr}[D^{(\mu)}(g)] \text{Tr}[D^{(\nu)}(g)] \\ &= \chi^{(\mu)}(g) \chi^{(\nu)}(g)\end{aligned}$$

$$a_\sigma = \langle \chi^{(\sigma)}; \chi^{(\mu \times \nu)} \rangle = \langle \chi^{(\sigma)}; \chi^{(\mu)} \chi^{(\nu)} \rangle$$

- Beispiel:** $E \otimes E$ in D_3

Der Charakter von E ist $\chi^E = \{2, -1, 0\}$, also $\chi^{E \otimes E} = \{4, 1, 0\}$. Damit:

$$a_{A_1} = \langle \chi^{A_1}; \chi^{E \otimes E} \rangle = (1 \cdot 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1 \cdot 1 + 3 \cdot 1 \cdot 0)/6 = 1$$

$$a_{A_2} = \langle \chi^{A_2}; \chi^{E \otimes E} \rangle = (1 \cdot 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1 \cdot 1 + 3 \cdot (-1) \cdot 0)/6 = 1$$

$$a_E = \langle \chi^E; \chi^{E \otimes E} \rangle = (1 \cdot 2 \cdot 4 + 2 \cdot (-1) \cdot 1 + 3 \cdot 0 \cdot 0)/6 = 1$$

also

$$E \otimes E = A_1 \oplus A_2 \oplus E$$

5 Physikalische Anwendungen

5.1 Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Ferromagnetismus und Ferroelektrizität

- ▶ Kristalle sind sehr regelmäßige Objekte von hoher Symmetrie (Punktgruppe+Translationen=Raumgruppe). Diese Symmetrie überträgt sich auch auf ihre Eigenschaften
- ▶ Einfache Frage: Kann ein Kristall einer bestimmten Symmetrie ein permanentes magnetisches Moment $\vec{M}$ oder ein Dipolmoment $\vec{P}$ besitzen?
- ▶ Einschränkung: Wenn solche Größen auftreten, müssen sie invariant unter der **Punktgruppe** des Kristalls sein.
- ▶ Die **Magnetisierung** ist ein Vektor, dessen Koordinaten M_x, M_y, M_z sich unter Drehungen gemäß der früher definierten 3-dimensionalen Vektordarstellung D^V transformieren:

$$M'_i = D_{ij}^V(g) M_j$$

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Ferromagnetismus und Ferroelektrizität

- ▶ Zunächst sei angenommen, daß die Punktgruppe P des Kristalls nur Drehungen und keine Spiegelungen enthält. Wir beschränken D^V auf die zu P gehörigen Operationen
- ▶ Damit ein permanentes $\vec{M}$ existieren kann, muß $\vec{M}' = \vec{M} \forall g \in P$ gelten
- ▶ Die auf $g \in P$ beschränkte (reduzible) Darstellung D^V muß deshalb die *identische Darstellung* $A : g \rightarrow 1$ enthalten
- ▶ Für $P = C_3$ wurde gezeigt

$$D^V = D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(3)}$$

Die identische Darstellung $D^{(1)}$ ist einmal enthalten, es gibt also eine Richtung, in die $\vec{M}$ zeigen kann

- ▶ Für $P = D_3$ wurde gezeigt

$$D^V = A_2 \oplus E$$

A_1 ist also nicht enthalten, ein permanentes $\vec{M}$ kann *nicht* auftreten

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Ferromagnetismus und Ferroelektrizität

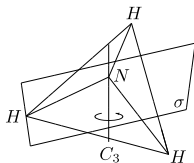
- ▶ Werden Spiegelungen und Inversion einbezogen, ist zu beachten, daß
 - ▶ Die Polarisation $\vec{P}$ ein echter (polarer) Vektor ist,

$$\vec{P} \rightarrow -\vec{P} \quad \text{für} \quad \vec{r} \rightarrow -\vec{r}$$

- ▶ Die Magnetisierung $\vec{M}$ ein axialer Vektor ist,

$$\vec{M} \rightarrow \vec{M} \quad \text{für} \quad \vec{r} \rightarrow -\vec{r}$$

- ▶ Kristalle deren Punktgruppe P Spiegelung oder Inversion enthalten, können deshalb entweder $\vec{P}$ oder $\vec{M}$ tragen, nicht beides
- ▶ **Beispiel:** Symmetrie C_{3v} = Symmetrie von $\text{NH}_3 \simeq D_3$



$$D(c) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad D(\sigma) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D = A_1 \oplus E \quad \Rightarrow \quad \vec{P} \text{ erlaubt, } \vec{M} \text{ nicht}$$

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Leitfähigkeitstensor

Leitfähigkeitstensor

- ▶ In einem anisotropen Medium, z.B. einem kristallinen Festkörper, ist der Strom $\vec{j}$ nicht unbedingt parallel zum angelegten Feld $\vec{E}$, sondern

$$j_i = \sigma_{ij} E_j$$

- ▶ Der Tensor σ_{ij} transformiert sich wie das Produkt der Komponenten zweier Vektoren

$$j = D^{-1} j' = \sigma E = \sigma D^{-1} E'$$

$$j' = D \sigma D^{-1} E' = \underbrace{D \sigma D^T}_{\sigma'} E' \text{ (wegen Orthogonalität)}$$

- ▶ Anders ausgedrückt: σ transformiert gemäß der Darstellung $D^V \otimes D^V$
- ▶ Außerdem gilt, daß σ wegen Zeitumkehrinvarianz **symmetrisch** ist

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Leitfähigkeitstensor – Symmetrie

- ▶ Jeder Tensor mit zwei Indizes kann in einen symmetrischen und einen anti-symmetrischen Anteil zerlegt werden:

$$T_{ij} = T_{\{ij\}} + T_{[ij]} \quad \text{mit} \quad T_{\{ij\}} = (T_{ij} + T_{ji})/2, \quad T_{[ij]} = (T_{ij} - T_{ji})/2$$

- ▶ Passend dazu können symmetrisierte Produktdarstellungen konstruiert werden:

$$\begin{aligned} D_{ij;kl}^{(V \otimes V) \pm} &= (D_{ik}^V D_{jl}^V \pm D_{il}^V D_{jk}^V)/2 \\ \chi^{(V \otimes V) \pm}(g) &= (D_{ii}^V(g) D_{jj}^V(g) \pm D_{ij}^V(g) D_{ji}^V(g))/2 \\ &= [(\chi^V(g))^2 \pm \chi^V(g^2)]/2 \end{aligned}$$

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Leitfähigkeitstensor – Beispiel D_3

- ▶ Beispiel: Symmetrie D_3

D_3	E	$2C_3$	$3C_2$
A_1	1	1	1
$(V \otimes V)_+$	6	0	2
$(V \otimes V)_-$	3	0	-1

damit

$$a_1 = \langle \chi^{A_1}, \chi^{(V \otimes V)_+} \rangle = \frac{1}{6} [1 \cdot 1 \cdot 6 + 2 \cdot 1 \cdot 0 + 3 \cdot 1 \cdot 2] = 2$$

- ▶ Die Darstellung A_1 ist also zweimal in $(V \otimes V)_+$ enthalten, d.h. es gibt zwei unter den Gruppenoperationen invariante Formen von σ
 - ▶ Wegen Invarianz von $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ funktioniert $\sigma = \delta_{ij}$
 - ▶ Wegen Invarianz von z^2 funktioniert $\sigma = \delta_{i3}\delta_{3j}$
- ▶ Die allgemeine unter D_3 erlaubte Form kann eine Linearkombination der beiden sein:

$$\sigma = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

Makroskopische Eigenschaften von Kristallen

Leitfähigkeitstensor – Beispiel T

- Ein anderes wichtiges Beispiel ist die **kubische Gruppe T** (Tetraedergruppe)

T	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
A_1	1	1	1	1
E_1	1	1	ω	ω^2
E_2	1	1	ω^2	ω
T	3	-1	0	0
$(V \otimes V)_+$	6	2	0	0

- Damit ergibt sich

$$a_1 = \langle \chi^{A_1}, \chi^{(V \otimes V)_+} \rangle = \frac{1}{12} [1 \cdot 1 \cdot 6 + 3 \cdot 1 \cdot 2 + 4 \cdot 1 \cdot 0 + 4 \cdot 1 \cdot 0] = 1$$

- Die Leitfähigkeit eines Kristalls mit Tetraedersymmetrie ist also isotrop,

$$\sigma_{ij} = \sigma \delta_{ij}$$

5.2 Molekülschwingungen I

Kleine Schwingungen & Normalmoden

Kleine Schwingungen & Normalmoden

- ▶ Wir betrachten kleine Schwingungen der Atome N eines Moleküls um ihre Gleichgewichtslagen. Mit x_i , $i = 1, \dots, 3N$ als Auslenkungen ist die kinetische Energie:

$$T = \frac{1}{2} \dot{x}_i M_{ij} \dot{x}_j = \frac{1}{2} \dot{\vec{x}}^T M \dot{\vec{x}}$$

- ▶ Die Massenmatrix M ist diagonal,
 $M = \text{diag}(m_1, m_1, m_1, m_2, m_2, m_2 \dots)$, wobei m_i die einzelnen Atommassen bezeichnet
- ▶ Analog gilt für die potentielle Energie:

$$V = \frac{1}{2} \vec{x}^T K \vec{x}$$

wobei K symmetrisch aber meist nicht diagonal ist (ansonsten wäre das Problem trivial)

5.2 Molekülschwingungen II

Kleine Schwingungen & Normalmoden

- ▶ Nach Reskalierung $y_{3i+j} = x_{3i+j}/\sqrt{m_i}$, $j = 0, 1, 2$ ergibt sich

$$H = T + V = \frac{1}{2}(\dot{\vec{y}}^T \dot{\vec{y}} + \vec{y}^T K' \vec{y})$$

mit $K' = M^{-1/2} K M^{-1/2}$

- ▶ Der Ansatz $\vec{y}(t) = \vec{y}(0) \exp(i \omega t)$ führt schliesslich auf das Eigenwertproblem

$$K' \vec{y}(0) = \omega^2 \vec{y}(0)$$

- ▶ Die Eigenwerte ω_α bestimmen die Frequenzen der Molekülschwingungen und die zugehörigen Eigenvektoren $\vec{v}_{\alpha,r}$ die Richtung der Auslenkungen. Wenn Eigenwerte entartet sind, gibt es mehrere zugehörige Eigenvektoren (Index r)

5.2 Molekülschwingungen III

Kleine Schwingungen & Normalmoden

- Die Eigenvektoren können orthonormal gewählt werden (auch die entarteten) und als Basis für eine Entwicklung dienen

$$\vec{y} = \sum_{\alpha,r} q_{\alpha r} \vec{v}_{\alpha r}$$

- Eingesetzt in die Bewegungsgleichung (Hamiltonfunktion) ergeben sich **entkoppelte** Gleichung für $3N$ Oszillatoren

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha r} (\dot{q}_{\alpha r}^2 + \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha r}^2)$$

bzw. mit $q_{\alpha r}(t) = q_{\alpha r}(0) \exp(i \omega_{\alpha} t)$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\alpha r} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha r}(0)^2$$

5.2 Molekülschwingungen IV

Kleine Schwingungen & Normalmoden

- ▶ Quantenmechanisch übersetzt sich dies auf

$$E = \sum_{\alpha r} \hbar \omega_{\alpha} (n_{\alpha r} + \frac{1}{2})$$

- ▶ In beiden Fällen ist das Eigenwertproblem für eine $3N \times 3N$ Matrix zu lösen, was leicht schwierig wird. Symmetrien und Gruppentheorie können das Problem vereinfachen.
- ▶ Symmetrieoperationen wirken auf $\vec{y}$ als

$$\vec{y}' = D(g)\vec{y}$$

Die kinetische Energie ist wegen der Orthogonalität von $D(g)$ unverändert. Ausserdem gilt

$$K' = D(g)^T K' D(g) \quad \text{oder} \quad [K', D(g)] = 0$$

da das Molekül im Gleichgewicht die durch G beschriebene Symmetrie hat

5.2 Molekülschwingungen V

Kleine Schwingungen & Normalmoden

- ▶ Die Eigenvektoren $\vec{v}_\alpha$ bilden also einen invarianten Unterraum

$$K'(D(g)\vec{v}_\alpha) = \omega_\alpha^2(D(g)\vec{v}_\alpha)$$

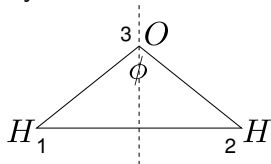
- ▶ Abgesehen von zufälliger Entartung sind diese Unterräume irreduzibel, es besteht deshalb eine 1:1 Korrespondenz zwischen den irreduziblen Darstellungen $D^{(\alpha)}$ der Symmetriegruppe und den Eigenwerten ω_α . Die Entartung entspricht gerade der Dimension der Darstellung $D^{(\alpha)}$

5.2 Molekülschwingungen I

Wasser – Zerlegung von $D^{(3n)}$

Wasser

- Symmetrien des Wassermoleküls:



- 2-zählige Drehung um die Achse durch O (a)
- Spiegelung an der Ebene zwischen den H (b)

- Diese bilden die Gruppe $C_{2v} = gp\{a, b\}$ mit $a^2 = b^2 = (ab)^2 = e$ (isomorph zu D_2)
- Die Operation a hat auf die Koordinaten die Wirkung:

$$\begin{aligned}a : (x_1, y_1, z_1) &\rightarrow (-x_2, y_2, -z_2) \\(x_2, y_2, z_2) &\rightarrow (-x_1, y_1, -z_1) \\(x_3, y_3, z_3) &\rightarrow (-x_3, y_3, -z_3)\end{aligned}$$

5.2 Molekülschwingungen II

Wasser – Zerlegung von $D^{(3n)}$

- Die Operation b hat auf die Koordinaten die Wirkung:

$$b : (x_1, y_1, z_1) \rightarrow (-x_2, y_2, z_2)$$

$$(x_2, y_2, z_2) \rightarrow (-x_1, y_1, z_1)$$

$$(x_3, y_3, z_3) \rightarrow (-x_3, y_3, z_3)$$

- Damit läßt sich eine $3N = 9$ dimensionale Darstellung konstruieren
- Die Charaktertafel von $D_2 = C_{2v}$ ist:

C_{2v}	e	a	b	ab
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1
$D^{(3N)}$	9	-1	1	3

- Es ergibt sich also die Zerlegung:

$$D^{(3N)} = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 3B_2$$

5.2 Molekülschwingungen I

Wasser – Elimination von Translation und Rotation

- ▶ Einige (genauer 6) der 9 Eigenmoden sind keine echten Schwingungen, sondern Drehungen oder Translationen des gesamten Moleküls. Die entsprechenden Eigenfrequenzen sind $\omega_\alpha = 0$
- ▶ Welchen Darstellungen entsprechen diese Moden?
- ▶ Eine Translation T_x in x -Richtung bedeutet $x_1 = x_2 = x_3 = q_{T_x}$. Da die x -Komponente unter a und b jeweils das Vorzeichen wechselt, gehört T_x zu B_2
- ▶ Auf analoge Weise ergibt sich, daß sich T_y gemäß A_1 und T_z gemäß B_1 transformieren.
- ▶ Drehungen um y , R_y , entsprechen dem Auslenkungsmuster $z_1 = -z_2 = q_{R_y}$, $x_1 = x_2 = x_3 = y_1 = y_2 = y_3 = 0$. Unter Anwendung von b (Spiegelung) kehrt sich das Muster um: $q_{R_y} \rightarrow -q_{R_y}$. Demnach transformiert sich R_y gemäß A_2
- ▶ Analog ergibt sich: $R_x \leftrightarrow B_1$ und $R_z \leftrightarrow B_2$

5.2 Molekülschwingungen I

Wasser – Vibrationen

- Für die echten Vibrationen bleibt also

$$D_{\text{vib}}^{(3N)} = 2A_1 \oplus B_2$$

d.h. drei mögliche Schwingungsfrequenzen

- Die zu diesen Darstellungen gehörigen Moden ergeben sich mit Hilfe des Projektionsoperators

$$P_{ij}^{(\sigma)} := \sum_{g \in G} D_{ij}^{(\sigma)}(g)^* T(g),$$

wobei $T(g)$ die zu g gehörige Symmetrieoperation bezeichnet

5.2 Molekülschwingungen II

Wasser – Vibrationen

- Für jedes $\vec{v} \in V$ und festes j transformiert sich $\vec{u}_i = P_{ij}^{(\sigma)} \vec{v}$ also gemäß $D^{(\sigma)}$, d.h. $T(g)\vec{u}_i = D_{ki}^{(\sigma)}(g)\vec{u}_k$. Beweis:

$$\begin{aligned} T(h)P_{ij}^{(\sigma)}\vec{v} &= \sum_{g \in G} D_{ij}^{(\sigma)}(g)^* T(h)T(g)\vec{v} \\ &= \sum_{g' \in G} D_{ij}^{(\sigma)}(h^{-1}g')^* T(g')\vec{v} \\ &= \sum_{g' \in G} D_{ik}^{(\sigma)}(h^{-1})^* D_{kj}^{(\sigma)}(g')^* T(g')\vec{v} \\ &= D_{ki}^{(\sigma)}(h) \left(\sum_{g' \in G} D_{kj}^{(\sigma)}(g')^* T(g')\vec{v} \right) \end{aligned}$$

also

$$T(h)\vec{u}_i = D_{ij}^{(\sigma)}(h)\vec{u}_k$$

5.2 Molekülschwingungen III

Wasser – Vibrationen

- In unserem Falle sind alle Darstellungen eindimensional, der Projektor vereinfacht sich also zu

$$P^{(\sigma)} = \sum_{g \in G} \chi^{(\sigma)}(g)^* T(g)$$

- Wir suchen Auslenkungen, die zu A_1 und B_2 passen. Sei $\vec{v}_{1x}$ eine kleine Auslenkung von Atom 1 in x-Richtung. Dann folgt:

$$\begin{aligned} P^{A_1} \vec{v}_{1x} &= \left(\chi^{A_1}(e)^* T(e) + \chi^{A_1}(a)^* T(a) \right. \\ &\quad \left. + \chi^{A_1}(b)^* T(b) + \chi^{A_1}(ab)^* T(ab) \right) \vec{v}_{1x} \\ &= 2(\vec{v}_{1x} - \vec{v}_{2x}) \end{aligned}$$

also eine Mode mit $x_1 = -x_2 = q_1$.

5.2 Molekülschwingungen IV

Wasser – Vibrationen

- ▶ Außerdem erhält man

$$P^{A_1} \vec{v}_{1y} = 2(\vec{v}_{1y} + \vec{v}_{2y})$$

$$P^{A_1} \vec{v}_{3y} = 4\vec{v}_{3y}$$

Dies sind zwei unabhängige Muster, die so zu kombinieren sind, daß der Schwerpunkt fest bleibt, also $y_1 = y_2 = -(m_O/(2m_H))y_3 = q_2$

- ▶ Schliesslich die Moden zu B_2 :

$$P^{B_2} \vec{v}_{1x} = 2(\vec{v}_{1x} + \vec{v}_{2x})$$

$$P^{B_2} \vec{v}_{1y} = 2(\vec{v}_{1y} - \vec{v}_{2y})$$

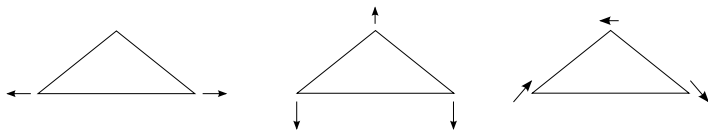
$$P^{B_2} \vec{v}_{3x} = 4\vec{v}_{3x}$$

Diese Moden müssen wieder so kombiniert werden, daß der Schwerpunkt fest bleibt, $x_1 = x_2 = -(m_O/(2m_H))x_3$. Außerdem sollte sich kein Gesamtdrehimpuls ergeben. Deshalb muß zusätzlich die dritte Mode einbezogen werden, $y_1 = -y_2 = x_1 \cot \phi = q_3$

5.2 Molekülschwingungen V

Wasser – Vibrationen

- Insgesamt ergeben sich folgende drei Schwingungsmuster:



- Die Berechnung der zugehörigen Frequenzen erfordert genauere Kenntnis des Potentials V (nicht nur seiner Symmetrien), ist also allein mit Gruppentheorie nicht möglich. Allerdings muß man nach Einsetzen obiger Moden in die Bewegungsgleichung nur drei entkoppelte Oszillatorgleichungen lösen, statt eines 9×9 Eigenwertproblems.

5.3 Aufhebung von Entartung

Entartung

Entartung von Eigenzuständen

- Wir betrachten einen Hamiltonoperator H_0 , der invariant unter einer Gruppe von Symmetrieoperationen G ist,

$$[H_0, U(g)] = 0,$$

wobei $U(g)$ der zur Operation g gehörende unitäre Operator ist

- Für einen Eigenzustand $|\psi^{(0)}\rangle$ mit $H_0|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle$ gilt dann

$$H_0 U(g) |\psi^{(0)}\rangle = U(g) H_0 |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} U(g) |\psi^{(0)}\rangle$$

d.h. $U(g)|\psi^{(0)}\rangle$ ist ein Eigenzustand zum gleichen Eigenwert $E^{(0)}$

- Die Eigenvektoren $|\psi_{\alpha,j}^{(0)}\rangle$ mit $j = 1 \dots r$ zu einem Eigenwert $E_{\alpha}^{(0)}$ spannen also einen G -Submodul auf und bilden die Basis für eine der irreduziblen Darstellungen $D^{(\mu)}$ von G
- Abgesehen von zufälliger Entartung entspricht der Entartungsgrad r der Dimension n_{μ} der irreduziblen Darstellung $D^{(\mu)}$

5.3 Aufhebung von Entartung

Beispiel

Beispiel: Zentralpotential

- ▶ Zur Symmetriegruppe $SO(3)$ eines Zentralpotentials $U(r)$ gehören alle Drehungen in 3D. Die irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ werden durch den Drehimpuls l charakterisiert und sind $(2l + 1)$ -dimensional
- ▶ Die Eigenwerte $E_{nl}^{(0)}$ werden durch l und eine zur Radialgleichung gehörende Quantenzahl n charakterisiert.
- ▶ Für $U(r) = -k/r$ tritt eine “zufällige” Entartung $E_{nl}^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)}$ mit $l < n$ auf, die einen Entartungsgrad $r = n^2$ ergibt
- ▶ Diese zusätzliche Entartung hängt mit der höheren Symmetrie $SO(4)$ des $1/r$ Potentials zusammen (siehe später)

5.3 Aufhebung von Entartung

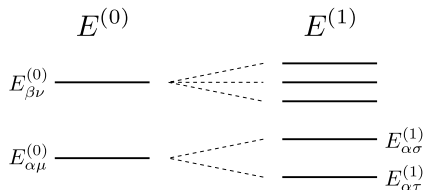
Einfluß zusätzlicher Wechselwirkungen niedrigerer Symmetrie

- ▶ Sei V eine Wechselwirkung die nur unter einer Untergruppe $H \subset G$ invariant ist. Die Eigenwerte von

$$H_1 = H_0 + V$$

werden dann durch die irreduziblen Darstellungen von H charakterisiert

- ▶ Eine Darstellung D von G führt automatisch zu einer Darstellung von H , indem man sich auf die Matrizen $D(h)$ mit $h \in H \subset G$ beschränkt. Diese Darstellung von H heißt **subduzierte Darstellung**
- ▶ Irreduzibilität von D bzgl. G bedeutet aber **nicht** Irreduzibilität bzgl. H ! Meist ist die subduzierte Darstellung reduzibel
- ▶ Deshalb spalten vormalig entartete Energieniveaus unter der Wirkung der als klein angenommenen Wechselwirkung V auf



Weitere Formeln zur Berechnung von Charakteren

- ▶ Die k Konjugationsklassen K_i bilden einen wichtigen Baustein bei der Berechnung der Charaktere irreduzibler Darstellungen. Durch Multiplikation von je zwei Elementen $a_i \in K_i$, $a_j \in K_j$ erhält man die Menge $K_i K_j$ mit den $k_i k_j$ (eventuell gleichen) Elementen $a_i a_j$.
- ▶ Jedes Element von $K_i K_j$ gehört zu einer der k Klassen. Die entsprechende Zerlegung liefert die Definition der **nicht-negativen, ganzzahligen Klassenmultiplikationskoeffizienten** c_{ijk} :

$$K_i K_j = \sum_l c_{ijl} K_l$$

- ▶ c_{ijl} gibt an, wie oft jedes Element von K_l in $K_i K_j$ vorkommt

- Berücksichtigt man, daß die Charaktere für alle k_i Elemente einer Klasse gleich sind und $\chi(a_i a_j) = \chi(a_i) \chi(a_j)$, so folgt:

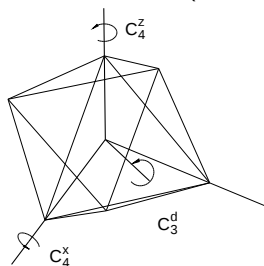
$$k_i k_j \chi_i^{(\mu)} \chi_j^{(\mu)} = n_\mu \sum_{l=1}^k c_{ijl} k_l \chi_l^{(\mu)}$$

- Neben

$$\sum_{i=1}^k k_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\mu),*} = [G]$$

hat man also k^2 weitere (z.T. redundante) Gleichungen zur Bestimmung der $\chi_i^{(\mu)}$

- **Beispiel:** Die kubische Gruppe O beschreibt die Symmetrie (nur Drehungen) eines Oktaeders oder eines Würfels. Man erhält die Charaktertafel (siehe Maxima code)



O	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	-1	1
T_2	3	0	-1	1	-1
$(V \times V)_+$	6	0	2	2	0

- Damit folgt auch, daß $\langle \chi^{(V \times V)_+}, \chi^{A_1} \rangle = 1$, d.h. der Leitfähigkeitstensor ist auch für Kristalle der (echt kubischen) Symmetrie O isotrop

5.3 Aufhebung von Entartung

Beispiel: Kubisches Kristallfeld

Beispiel: Aufspaltung von d -Niveaus im kubischen Kristallfeld

- Wir hatten gesehen, daß sich die Eigenfunktionen des Drehimpulses, Y_{lm} unter beliebigen Drehungen um die z -Achse transformieren wie:

$$Y'_{lm} = e^{i\phi m} Y_{lm}$$

- Damit ergibt sich für den Charakter der Drehung in der zu festem l gehörenden $(2l + 1)$ -dimensionalen Darstellung:

$$\chi^{(l)}(\phi) = \sum_{m=-l}^l e^{i\phi m} = \frac{\sin[\phi(l + 1/2)]}{\sin(\phi/2)}$$

- Das gleiche Ergebnis gilt auch für Drehungen um andere Achsen, da diese durch Ähnlichkeitstransformationen aus der z -Drehung hervorgehen

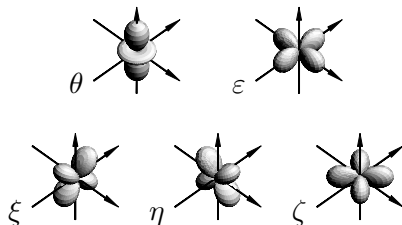
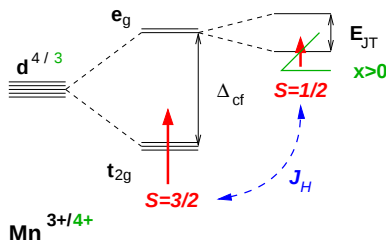
5.3 Aufhebung von Entartung

Beispiel: Kubisches Kristallfeld / Manganate

- Damit ergibt sich für den Charakter bzgl. der Klassen von O :
 $\chi^{(2)} = \{5, -1, 1, 1, -1\}$ und als Zerlegung folgt:

$$D^{(l=2)} = E \oplus T_2$$

- Diese Aufspaltung spielt bei vielen kubischen Übergangsmetall-Verbindungen eine Rolle, z.B. bei gemischtvalenten Manganaten $R_{1-x}A_xMnO_3$ ($R=La, Pr, Nd$; $A=Ca, Sr, Ba$)



5.3 Aufhebung von Entartung

Beispiel: Kubisches Kristallfeld / Manganate

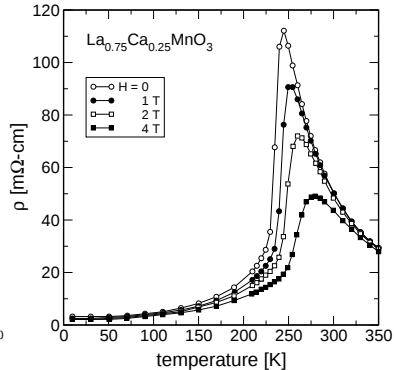
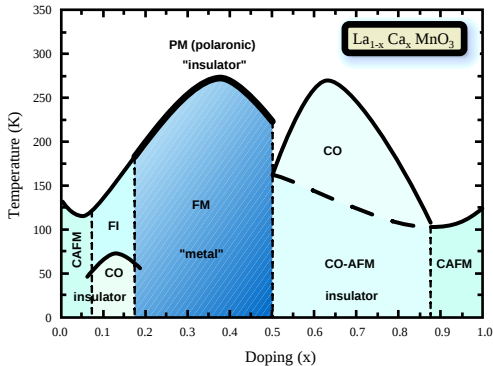
- Basisfunktionen für irr. Darstellungen von O und ihr Transformationsverhalten

Darstellg.	Basis	Bsp.	C_4^z	C_4^x	C_3^d
A_1	a_1	1	a_1	a_1	a_1
A_2	a_2	xyz	$-a_2$	$-a_2$	a_2
E	θ	$3z^2 - r^2$	θ	$-\frac{1}{2}\theta - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon$	$-\frac{1}{2}\theta + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon$
	ε	$x^2 - y^2$	$-\varepsilon$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\theta + \frac{1}{2}\varepsilon$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\theta - \frac{1}{2}\varepsilon$
T_1	x	x	y	x	y
	y	y	$-x$	z	z
	z	z	z	$-y$	x
T_2	ξ	yz	$-\eta$	$-\xi$	η
	η	zx	ξ	$-\zeta$	ζ
	ζ	xy	$-\zeta$	η	ξ

5.3 Aufhebung von Entartung

Beispiel: Kubisches Kristallfeld / Manganate

► Phasendiagramm und Magnetowiderstand von $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$



[Schiffer et al., PRL **75**, 3336 (1995), Urushibara et al., PRB **51**, 14103 (1995)]

6 Kristallographische Raumgruppen

6.1 Definition und Eigenschaften

Kristallsymmetrien

Kristallsymmetrien

- ▶ Kristallsymmetrien bilden die für die Festkörperphysik wichtigste Klasse von Symmetrien
- ▶ Kristalle bestehen aus Atomrümpfen und Elektronen. Bindungsenergie und Masse der Atomrümpfe sind groß gegen diejenigen der Valenzelektronen.
- ▶ In adiabatischer Näherung werden die Atomrümpfe (Kristallbausteine) als festes, regelmäßiges Gitter betrachtet, und nur das Elektronen-Problem in diesem symmetrischen Potential gelöst
- ▶ Zusätzlich werden evtl. kleine Schwingungen des Kristalls um die Ruhelage mit einbezogen (Phononen)

Die reelle affine Gruppe

- Die **reelle affine Gruppe** besteht aus allen Translationen und orthogonalen Transformationen des Raumes:

$$\vec{r}' = \alpha \vec{r} + \vec{a} \quad \text{oder kurz} \quad \vec{r}' = \{\alpha | \vec{a}\} \vec{r}$$

- Man unterscheidet **Translationsanteil** $\vec{a}$ und **Drehanteil** α , der aus reinen Drehungen mit $\det(\alpha) = 1$ oder Drehinversionen $\det(\alpha) = -1$ bestehen kann
- Offenbar bilden die $\{\alpha | \vec{a}\}$ eine Gruppe:

$$\vec{r}' = \alpha(\beta \vec{r} + \vec{b}) + \vec{a} = \alpha\beta \vec{r} + \alpha\vec{b} + \vec{a}$$

$$\{\alpha | \vec{a}\} \{\beta | \vec{b}\} = \{\alpha\beta | \alpha\vec{b} + \vec{a}\}$$

$$\{\alpha | \vec{a}\} \{\alpha^{-1} | -\alpha^{-1}\vec{a}\} = \{\epsilon | \vec{0}\}$$

- Die reinen Translationen $\{\epsilon | \vec{t}\}$ bilden einen Normalteiler der affinen Gruppe:

$$\{\alpha | \vec{a}\}^{-1} \{\epsilon | \vec{t}\} \{\alpha | \vec{a}\} = \{\epsilon | \alpha^{-1} \vec{t}\}$$

Raumgruppen

- ▶ **Raumgruppen** sind **diskrete Untergruppen** der reellen affinen Gruppe, deren reine Translationselemente einen Normalteiler T bilden und von folgender Form sind:

$$\{\epsilon | \vec{R} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{t}_i\} \quad \text{mit} \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

- ▶ Der Normalteiler T heißt Translationsgruppe und seine Elemente sind **ganzzahlige Linearkombinationen** von drei linear unabhängigen primitiven Basistranslationen $\vec{t}_i$
- ▶ Die Menge aller $\vec{R}$ wird auch (Bravais-)Gitter genannt
- ▶ Die Drehanteile α der Raumgruppenelemente $\{\alpha | \vec{a}\}$ bilden eine eigene Gruppe, die Punktgruppe G_0 des Kristalls
- ▶ Das Gitter einer Raumgruppe ist invariant unter den Elementen der zugehörigen Punktgruppe, d.h. wenn $\vec{R}$ ein Gitterpunkt ist, dann auch $\alpha^{-1} \vec{R}$.
- ▶ Diese Eigenschaft bildet eine **Einschränkung für** die Menge möglicher **Punktgruppen**

Bravais-Gitter – Allgemeines

- ▶ Das Gitter teilt den Raum in kongruente Bereiche, die **Elementarzellen**. Jede Elementarzelle enthält nur nicht-äquivalente Punkte. Dabei bedeutet Äquivalenz die Existenz eines $\vec{R}$, so daß $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}$.
- ▶ Die Form der Elementarzelle ist nicht eindeutig durch das Gitter bestimmt. Eine besonders ausgezeichnete Zelle ist die **symmetrische** bzw. **Wigner-Seitz-Zelle**: Sie besteht aus allen Raumpunkten die näher am Gitterpunkt $\vec{R}_0$ liegen, als an allen anderen Gitterpunkten $\vec{R} \neq \vec{R}_0$
- ▶ Ein gegebenes Gitter kann mit mehreren Punktgruppen kompatibel sein. Die Gruppe **aller** Drehungen und Drehinversionen, die ein Gitter invariant lassen, heißt **Holoedrie** des Gitters.
- ▶ Eine Raumgruppe besteht aus Gitter (Translationsgruppe) und Punktgruppe, die Punktgruppe ist Untergruppe der Holoedrie des Gitters.
- ▶ Im dreidimensionalen Raum gibt es **14 Gitter**, **7 Holoedrien** und **32 Punktgruppen**, die zusammen **230 Raumgruppen** ergeben
- ▶ Entsprechend der Holoedrien unterteilt man Kristalle in **7 Kristallsysteme**

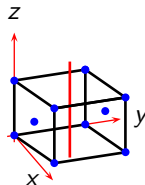
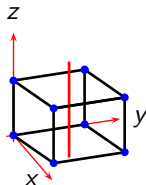
Die 14 Bravais-Gitter I

1. Triklines System (Γ_r)

- ▶ Die primitiven Vektoren $\vec{t}_i$ haben alle verschiedene Länge und schließen beliebige Winkel ein
- ▶ Es gibt *keine* Symmetrieebenen oder -achsen

2. Monoklines System

- ▶ Wie triklin, aber mit einem rechten Winkel
- ▶ Das System umfaßt 2 Gitter: einfach monoklin (Γ_m) und flächenzentriert monoklin (Γ'_m)
- ▶ Es gibt eine 2-zählige Achse



Die 14 Bravais-Gitter II

3. Orthorhombisches System

- ▶ Die Elementarzelle besteht aus einem Quader mit verschieden langen Kanten
- ▶ Das System umfaßt vier Gitter: einfach (Γ_v), einfach flächenzentriert (Γ'_v : zusätzliche Gitterpunkte auf 2 Flächenmitten), allseitig flächenzentriert (Γ''_v : zusätzliche Gitterpunkte auf allen Flächenmitten) und raumzentriert (Γ'''_v : zusätzlicher Gitterpunkt im Zentrum)
- ▶ Die Holoedrie enthält 3 inäquivalente 2-zählige Symmetrieachsen durch die Flächenmittelpunkte

4. Tetragonales System

- ▶ Die Elementarzelle entsteht aus der orthorhombischen, falls zwei der gegenüberliegenden Flächen Quadrate sind
- ▶ Das System enthält zwei Gitter: einfach (Γ_q) und raumzentriert (Γ'_q)
- ▶ Es gibt eine 4-zählige Symmetrieachse durch die Mittelpunkte der Quadrate und zwei inäquivalente 2-zählige Achsen senkrecht dazu durch die Kanten oder die Mittelpunkte der Seitenflächen des quadratischen Prismas

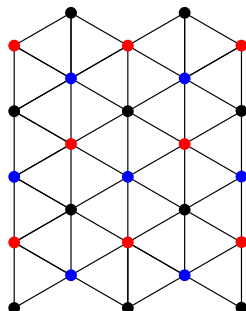
Die 14 Bravais-Gitter III

5. Kubisches System

- ▶ Die Elementarzelle ist ein Würfel
- ▶ Das System umfaßt 3 Gitter: einfach (Γ_c), flächenzentriert (Γ'_c) und raumzentriert (Γ''_c)
- ▶ Die Holoedrie wird gekennzeichnet durch: eine 2-zählige Achse ($\parallel$ Flächendiagonale), eine 3-zählige Achse (Raumdiagonale) und eine 4-zählige Achse ($\parallel$ Kanten)

6. Trigonales System

- ▶ Das trigonale (oder rhomboedrische) Gitter (Γ_{rh}) entsteht durch Streckung eines einfach kubischen Gitters entlang der Raumdiagonalen, oder durch Stapelung mehrerer Dreiecksgitter (siehe Bild)
- ▶ Die Holoedrie des Gitters wird durch eine 3-zählige Achse und eine dazu senkrechte 2-zählige Achse charakterisiert



7. Hexagonales System

- ▶ Das hexagonale Gitter (Γ_h) entsteht wie das trigonale durch das Stapeln von Dreiecksgittern, hier allerdings ohne Verschiebung, d.h. senkrecht übereinander
- ▶ Die Holoedrie wird von einer 6-zähligen Achse (c -Achse) und zwei 2-zähligen Achsen (z.B. x - und y -Achse) gebildet

Punktgruppen – Allgemeines

- ▶ Wir hatten früher bereits verschiedene Punktgruppen kennengelernt. Die zu einer Raumgruppe G gehörige Punktgruppe G_0 enthält die Menge der Drehanteile α der Raumgruppe. Diese Drehanteile lassen das Gitter invariant.
- ▶ Punktgruppen (in 3D) sind also dreidimensionale orthogonale Matrixgruppen, die ein Gitter invariant lassen
- ▶ Man kann Punktgruppen auch als treue dreidimensionale orthogonale Darstellungen von abstrakten Punktgruppen auffassen
- ▶ Punktgruppen 1. Art enthalten nur echte Drehungen, d.h. $\det(\alpha) = 1$
- ▶ Punktgruppen 2. Art enthalten auch Drehinversionen

Erlaubte Punktgruppen erster Art I

- Punktgruppen lassen das Gitter invariant, d.h.

$$\alpha \vec{R} = \alpha \sum_{i=1}^3 n_i \vec{t}_i = \sum_{i=1}^3 n_i \alpha \vec{t}_i \stackrel{!}{=} \sum_{i=1}^3 n'_i \vec{t}_i = \vec{R}'$$

- Transformiert man eine Drehmatrix von Kartesischen Koordinaten auf die Basis $\vec{t}_i$, so werden also ganzzahlige Koordinaten auf ganzzahlige Koordinaten abgebildet. Im Koordinatensystem $\{\vec{t}_i\}$ sind Drehmatrizen also *ganzzahlig*.
- Da die Spur einer Matrix unter Koordinatentransformationen erhalten bleibt, muss auch im alten System die Spur einer Drehung *ganzzahlig* sein, also

$$\text{Tr} \left[\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = 1 + 2 \cos \phi \in \mathbb{Z}$$

Erlaubte Punktgruppen erster Art II

- ▶ Erlaubt sind also nur $\phi = 0, \pi/3, \pi/2, 2\pi/3$ und π , d.h. 1-, 6-, 4-, 3- und 2-zählige Drehachsen mit Charakter 3, 2, 1, 0, -1
- ▶ **Hilfssatz:** Ist $P(x)$ ein Polynom mit ganzzahligen Koeffizienten und χ der Charakter einer Darstellung von G , so ist $\sum_{g \in G} P(\chi(g))$ durch die Gruppenordnung $[G]$ teilbar
- ▶ Beweis: Wir betrachten Polynome der Form $\sum_{g \in G} \chi(g)^n$. Der Fall $n = 0$ ist trivial. Für $n = 1$ werde die Darstellung reduziert, d.h.

$$\chi(g) = \sum_p n_p \chi^{(p)}(g)$$
$$\sum_{g \in G} \chi(g) = \sum_p n_p \sum_{g \in G} \chi^{(1),*}(g) \chi^{(p)}(g) = \sum_p n_p [G] \delta_{p1} = [G] n_1$$

Die Fälle $n > 1$ folgen analog, wenn man ausnutzt, daß $\chi(g)^n$ die Charaktere von Produktdarstellungen sind

Erlaubte Punktgruppen erster Art III

- ▶ Sei in unserem Falle $P(x) = (x + 1)x(x - 1)(x - 2)$. Dann folgt:

$$\sum_{g \in G_0} P(\chi(g)) = P(\chi(\varepsilon)) = P(3) = 24$$

ist durch die Gruppenordnung teilbar

- ▶ Die Punktgruppen können also nur folgende Ordnungen haben:

$$[G] = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12 \text{ und } 24$$

- ▶ Zu jeder Ordnung gibt es nur eine feste Anzahl nicht-isomorpher Gruppen, in diesem Fall insgesamt höchstens 32
- ▶ Wegen der vorher gezeigten Bedingungen an die Drehwinkel und Charaktere bleiben davon nur **11 abstrakte Punktgruppen 1. Art** übrig:

G_0	C_1	C_2	C_3	C_4	D_2	C_6	D_3	D_4	D_6	T	O
$[G_0]$	1	2	3	4	4	6	6	8	12	12	24

Weitere erlaubte Punktgruppen I

- ▶ Aus den 11 Punktgruppen 1. Art entstehen weitere abstrakte Punktgruppen durch Einbeziehung von Inversion und Spiegelungen
- ▶ Insgesamt ergeben sich **18 abstrakte Punktgruppen**
- ▶ Bestimmt man zu diesen abstrakten Gruppen alle treuen dreidimensionalen reellen inäquivalenten Darstellungen mit ganzzahligem Charakter, erhält man die **32 inäquivalenten Punktgruppen** eines 3D Kristalls:

Ordng.	Abstrakte Pkt.gr.	Pkt.Gr. 1.Art		Pkt.Gr. 2.Art mit $\bar{i}$		Pkt.Gr. 2.Art ohne $\bar{i}$	
1	C_1	C_1	1				
2	C_2	C_2	2	C_i	$\bar{1}$	C_s	m
3	C_3	C_3	3				
4	C_4	C_4	4			S_4	$\bar{4}$
4	$D_2 = C_2 \times C_2$	D_2	222	C_{2h}		S_4	$\bar{4}$
6	$C_6 = C_3 \times C_2$	C_6	6	S_6	$\bar{3}$	C_{3h}	$\bar{6}$
6	D_3	D_3	32			C_{3v}	3m

Weitere erlaubte Punktgruppen II

Ord.	Abstrakte Pkt.gr.	Pkt.Gr. 1.Art		Pkt.Gr. 2.Art mit i		Pkt.Gr. 2.Art ohne i	
8	D_4	D_4	422			C_{4v}, D_{2d}	4mm, $\bar{4}2m$
8	$C_4 \times C_2$			C_{4h}	$\frac{4}{m}$		
8	$D_2 \times C_2$			D_{2h}	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = mmm$		
12	$D_6 = D_3 \times C_2$	D_6	622	D_{3v}	$\bar{3} \frac{2}{m} = \bar{3}m$	C_{6v}, D_{3h}	6mm, $\bar{6}m2$
12	T	T	23				
12	$C_6 \times C_2$			C_{6h}	$\frac{6}{m}$		
16	$D_4 \times C_2$			D_{4h}	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = 4/mmm$		
24	O	O	432			T_d	$\bar{4}3m$
24	$D_6 \times C_2$			D_{6h}	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = 6/mmm$		
24	$T \times C_2$			T_h	$\frac{2}{m} \bar{3} = m\bar{3}$		
48	$O \times C_2$			O_h	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m} = m\bar{3}m$		

- ▶ Die Bezeichnungen C_x , D_x , T_x , S_x und O_x gehen auf Schoenflies zurück
 - ▶ S_{2n} sind Drehspiegelungen um Achsen gerader Ordnung $2n$
 - ▶ $C_{nh} = n$ -zählige Achse + horizontale Spiegelung, analog D_{nh}
 - ▶ $C_{nv} = n$ -zählige Achse + vertikale Spiegelung, analog D_{nv}
 - ▶ $D_{nd} = D_n +$ diagonale Spiegelebene
 - ▶ $T_d = T +$ Spiegelungen, $T_h = T +$ Inversion
 - ▶ $O_h = O +$ Inversion
- ▶ Alternativ wird auch die internationale Bezeichnungsweise verwendet
 - ▶ n bedeutet eine n -zählige Achse
 - ▶ $\bar{n}$ ist eine n -zählige Drehinversionsachse (zykl. Gruppe generiert durch $\mathbf{ic}_n$)
 - ▶ $\bar{2}$ ist eine Spiegelebene senkrecht zur Achse, deshalb alternativ m
 - ▶ n/m ist $\bar{n}$ vermehrt um Inversion (die für gerades n in $\bar{n}$ nicht enthalten ist)

Zusammenfassung Kristallklassen

Kristallsystem	Holoedrie	mgl. Punktgruppen	mgl. Gitter
triklin	C_i	C_1, C_i	Γ_r einfach
monoklin	C_{2h}	C_2, C_s, C_{2h}	Γ_m einfach Γ'_m eins. flächenz.
orthorhombisch	D_{2h}	C_{2v}, D_2, D_{2h}	Γ_v einfach Γ'_v eins. flächenz. Γ''_v alls. flächenz. Γ'''_v raumzentriert
tetragonal	D_{4h}	C_4, S_4, C_{4h}, D_4 C_{4v}, D_{2d}, D_{4h}	Γ_q einfach Γ'_q raumzentriert
kubisch	O_h	T, T_h, T_d, O, O_h	Γ_c einfach Γ'_c flächenz. Γ''_c raumzentriert
trigonal	D_{3v}	$C_3, S_6, D_3, C_{3v}, D_{3v}$	Γ_{rh} einfach
hexagonal	D_{6h}	C_6, C_{3h}, C_{6h} $D_6, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$	Γ_h einfach

Nicht-primitive Translationen I

- ▶ Die primitiven Translationen T sind Normalteiler der Raumgruppe G , d.h. man kann G in Nebenklassen nach T zerlegen.
- ▶ Elemente einer Nebenklasse haben den selben Drehanteil, Elemente verschiedener Klassen einen unterschiedlichen. Die Faktorgruppe G/T ist deshalb isomorph zur Punktgruppe G_0
- ▶ Die Nebenklassenzerlegung ist also

$$G = \sum_{\alpha \in G_0} T\{\alpha|\vec{v}_\alpha\}$$

wobei $\{\alpha|\vec{v}_\alpha\}$ einen Repräsentanten der Nebenklasse bezeichnet

- ▶ Ein beliebiges Element der Raumgruppe lässt sich also schreiben:

$$\{\alpha|\vec{a}\} = \{\varepsilon|\vec{R}\}\{\alpha|\vec{v}_\alpha\} = \{\alpha|\vec{v}_\alpha + \vec{R}\}$$

Nicht-primitive Translationen II

- ▶ Die Vektoren $\vec{v}_\alpha$ heißen **nicht-primitive Translationen**. Sie sind nicht eindeutig, sondern hängen von der Wahl des Ursprungs ab, durch den die Drehachsen gehen
- ▶ Raumgruppen, bei denen $\vec{v}_\alpha = 0 \forall \alpha \in G_0$ gewählt werden kann, heißen **symmorph**
- ▶ Von den 230 Raumgruppen sind 73 symmorph
- ▶ Allgemein werden die Raumgruppen bestimmt durch:
 - ▶ das Gitter der primitiven Translationen $\vec{R}$ bzw. die Translationsgruppe T ; durch das Gitter sind Bravais-Klasse und Kristallsystem (Holoedrie) festgelegt
 - ▶ die Punktgruppe G_0 ; sie muß Untergruppe der Holoedrie sein und legt die Kristallklasse fest
 - ▶ die nicht-primitiven Translationen $\vec{v}_\alpha$, die zu jedem Raumgruppenelement anzugeben sind (= 0 für symmorphe Gruppen)

6.2 Irreduzible Darstellungen der Raumgruppen

Subduzierte Darst. von Normalteilern; Orbits

- ▶ Ist H Normalteiler von G , so gilt $a^{-1}ba \in H \ \forall a \in G$ und $b \in H$
- ▶ Aus einer Darstellung D von H ergibt sich mit

$$D_a(b) = D(a^{-1}ba) \quad a \in G, b \in H$$

neue, **konjugierte Darstellung D_a** von H

- ▶ Die Darstellungen D und D_a haben gleiche Dimension
- ▶ Ist D irreduzibel, dann auch D_a
- ▶ D und D_a sind nicht notwendig inäquivalent
- ▶ Ist D_a äquivalent zu $D \ \forall a \in G$, heißt D selbstkonjugiert bzgl. G
- ▶ Ein maximaler Satz inäquivalenter irreduzibler konjugierter Darstellungen eines Normalteilers H von G heißt **Orbit $\mathcal{O}$ von H bzgl. G**

Subduzierte Darst. von Normalteilern; Orbits

- **Beispiel:** $C_3 = \{e, c, c^2\}$ als Normalteiler von D_3 hat die irred. Darst.

C_3	e	c	c^2
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	ω	ω^2
$D^{(3)}$	1	ω^2	$\omega^4 = \omega$

Wegen $bc^n b = c^{-n}$ erhält man die Orbits $\mathcal{O}_1 = \{D^{(1)}\}$ und $\mathcal{O}_2 = \{D^{(2)}, D^{(3)}\}$

- **Satz:** Jede durch einen Normalteiler $H \subseteq G$ aus einer irreduziblen Darstellung D von G subduzierte Darstellung $D^{(s)}$ von H zerfällt in irreduzible Bestandteile, die alle zum gleichen Orbit gehören. Dabei kommt jede Darstellung und damit der ganze Orbit m -mal vor. m heißt Multiplizität des Orbits in der Darstellung D . **Beweis** siehe Streitwolf
- **Beispiel:** Die Basisfunktionen x, y spannen die 2-dimensionale irred. Darst. E von D_3 auf. Subduktion auf $H \equiv C_3$ ergibt eine 2-dim. Darst. von C_3 (Drehmatrizen um z -Achse), die mit der Basis $x \pm i y$ in die beiden irred. Darst. aus $\mathcal{O}_2$ zerfällt.

Induzierte Darstellungen; Kleine Gruppe I

- **Fragestellung:** Können die irreduziblen Darstellungen einer Gruppe G aus den irreduziblen Darstellungen eines Normalteilers H von G abgeleitet werden? Zunächst weitere Begriffe:
- **Induzierte Darstellung:** Ist $G' \subseteq G$ eine Untergruppe von G , so kann G in Linksnebenklassen nach G' zerlegt werden. Wählt man Repräsentanten $a_1 \dots a_{[G]/[G']}$ der $[G]/[G']$ Nebenklassen, gilt

$$G = \sum_{i=1}^{[G]/[G']} a_i G'$$

- Zu jeden $a \in G$ und $b \in G'$ bilden wir $[G]/[G']$ -dimensionale Matrizen $\sigma(a, b)$,

$$\sigma_{ij}(a, b) = \begin{cases} 1 & \text{falls } a_i b a_j^{-1} = a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{wobei } i, j = 1, \dots, [G]/[G']$$

Induzierte Darstellungen; Kleine Gruppe II

- Aus einer Darstellung D von G' erhalten wir mittels

$$D^{(J)}(a) = \sum_{b \in G'} \sigma(a, b) \otimes D(b)$$

eine Darstellung $D^{(J)}$ von G , die **induzierte Darstellung**

- $\sigma(a, b)$ ist eine Permutationsmatrix, also hat $\sigma(a, b) \otimes D(b)$ z.B. die Struktur:

$$\begin{pmatrix} D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D \\ 0 & D & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Die Dimension von $D^{(J)}$ ist das $[G]/[G']$ -fache der Dimension von D
- Die induzierte Darstellung $D^{(J)}$ hängt von der Wahl der Repräsentanten und ihrer Numerierung ab. Die verschiedenen Möglichkeiten sind durch Ähnlichkeitstransformationen verbunden.

Induzierte Darstellungen; Kleine Gruppe III

- ▶ **Kleine Gruppe:** Gegeben seien eine Gruppe G , ein Normalteiler H von G und eine irreduzible Darstellung D von H . Alle Elemente $a \in G$, die eine zu D äquivalente konjugierte Darstellung D_a liefern, bilden eine Gruppe L , die **kleine Gruppe** (zweiter Art) zu G , H und D .
- ▶ Es gilt $H \subseteq L$.
- ▶ D ist bezüglich L eine selbstkonjugierte Darstellung von H .
- ▶ Eine irreduzible Darstellung $D^{(e)}$ der zu G , H und D gehörigen kleinen Gruppe L heißt **erlaubt** genau dann, wenn die durch H aus $D^{(e)}$ subduzierte Darstellung in irreduzible Bestandteile zerfällt, die alle äquivalent zu D sind. Da D selbstkonjugiert bzgl. L ist, genügt es zu fordern, daß D in der aus $D^{(e)}$ subduzierten Darstellung vorkommt.

Irreduzible Darst. einer Gruppe mit Normalteiler

- ▶ Mit diesen Begriffen können wir nun einen Satz formulieren, der es erlaubt, alle irreduziblen Darstellungen einer Gruppe G aus den irreduziblen Darstellungen eines Normalteilers H von G abzuleiten.
- ▶ **Satz:** Gegeben sei eine Gruppe G mit einem Normalteiler $H \subset G$. Dann kann man die irreduziblen Darstellungen von H in Orbits bzgl. G einteilen. D sei eine Darstellung aus dem Orbit $\mathcal{O}$, L die zu G , H und D gehörige kleine Gruppe. Dann gilt:
 1. Jede erlaubte irreduzible Darstellung $D^{(e)}$ von L induziert eine irreduzible Darstellung von G , deren Orbit $\mathcal{O}$ ist.
 2. Man erhält jede irreduzible Darstellung von G genau einmal, wenn man aus jedem Orbit von H bzgl. G je eine irreduzible Darstellung nimmt, die zugehörigen kleinen Gruppen bildet und aus jeder irreduziblen erlaubten Darstellung $D^{(e)}$ dieser kleinen Gruppen eine (nach Teil 1 irreduzible) Darstellung von G induziert.

Beweis siehe Streitwolf

- ▶ Wir verwenden diesen Satz zur Konstruktion der irreduziblen Darstellungen der Raumgruppen, die die Translationsgruppe T als Normalteiler besitzen

Reziprokes Gitter I

- ▶ Zu dem von den Punkten $\vec{R} = \sum_i n_i \vec{t}_i$ (mit $n_i \in \mathbb{R}$) gebildeten (direkten) Gitter kann ein **reziprokes Gitter** definiert werden, das aus allen Vektoren $\vec{K}$ besteht, die $\vec{K} \vec{R} = 2\pi\mathbb{Z}$ erfüllen
- ▶ Das reziproke Gitter wird wie das direkte Gitter von ganzzahligen Linearkombinationen reziproker Basisvektoren $\vec{b}_i$ erzeugt,

$$\vec{K} = \sum_i h_i \vec{b}_i$$

- ▶ Die $\vec{b}_i$ erfüllen die Beziehung

$$\vec{t}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} ,$$

die sich eindeutig nach $\vec{b}_i$ auflösen läßt.

Reziprokes Gitter II

- ▶ Auch das reziproke Gitter kann in Elementarzellen unterteilt werden. Die symmetrische Elementarzelle heißt erste Brillouin-Zone, oder nur kurz Brillouin-Zone, und entspricht der Wigner-Seitz-Zelle des direkten Gitters.
- ▶ Das reziproke Gitter ist invariant unter bestimmten Punktgruppen. Ebenso gibt es eine Holoedrie als maximale Punktgruppe, unter der das Gitter invariant ist.
- ▶ Es gilt der **Satz**: Die Holoedrie des reziproken Gitters ist gleich der Holoedrie des zugehörigen direkten Gitters.
- ▶ **Beweis**: Gehört α zur Holoedrie des direkten Gitters, so auch α^{-1} . Da α orthogonal ist, gilt

$$(\alpha \vec{b}_j, \vec{t}_i) = (\vec{b}_j, \alpha^{-1} \vec{t}_i) = 2\pi \mathbb{Z}$$

Hier wurde benutzt, daß $\alpha^{-1} \vec{t}_i$ zum direkten Gitter gehört. Es zeigt sich also, daß $\alpha \vec{b}_j$ zum reziproken Gitter gehört. Die Umkehrung beweist man analog.

Reziprokes Gitter III

- ▶ Das reziproke Gitter gehört also zu einer der 14 Bravais-Klassen, und zwar zur selben wie das zugehörige direkte Gitter.
- ▶ Wie das direkte Gitter spiegelt das reziproke Gitter nur die Translationssymmetrie des Problems wieder
- ▶ **Beispiel:** Kubische Gitter

Einfach Γ_c

$$\vec{t}_1 = a(1, 0, 0)$$

$$\vec{t}_2 = a(0, 1, 0)$$

$$\vec{t}_3 = a(0, 0, 1)$$

Flächenzentriert Γ'_c

$$\vec{t}_1 = a(0, 1, 1)$$

$$\vec{t}_2 = a(1, 0, 1)$$

$$\vec{t}_3 = a(1, 1, 0)$$

Raumzentriert Γ''_c

$$\vec{t}_1 = a(-1, 1, 1)$$

$$\vec{t}_2 = a(1, -1, 1)$$

$$\vec{t}_3 = a(1, 1, -1)$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{2a}(-1, 1, 1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{2a}(1, -1, 1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{2a}(1, 1, -1)$$

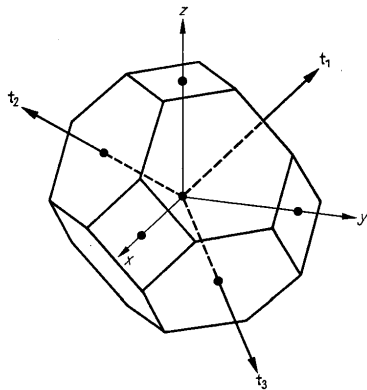
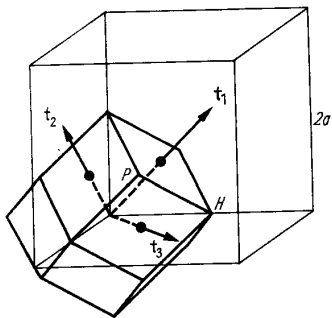
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{2a}(0, 1, 1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{2a}(1, 0, 1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{2a}(1, 1, 0)$$

Reziprokes Gitter IV

- Die symmetrischen Elementarzellen des flächenzentrierten und des raumzentrierten kubischen Gitters:



Irreduzible Darstellungen der Translationsgruppe I

- ▶ Die Translationsgruppe ist eine unendliche Gruppe, d.h. die bisher abgeleiteten Ergebnisse für endliche Gruppen lassen sich nicht ohne weiteres anwenden.
- ▶ Trick: Betrachte endliche Gitter mit periodischen Randbedingungen,

$$\{\epsilon, \vec{t}_i\}^N = \{\epsilon, \vec{0}\},$$

und mache später den Grenzübergang $L \rightarrow \infty$

- ▶ Die Translationsgruppe T wird dadurch zu einer endlichen Gruppe der Ordnung N^3 , ist abelsch und zerfällt in das direkte Produkt dreier **zyklischer** Untergruppen der Ordnung N :

$$T = T_1 \times T_2 \times T_2$$

- ▶ Zyklische Gruppen sind besonders einfach: sie besitzen nur eindimensionale Darstellungen, bei denen jedem Element der Gruppe eine der N -ten Einheitswurzeln zugeordnet ist.

Irreduzible Darstellungen der Translationsgruppe II

- ▶ Betrachtet man eine der Gruppen T_i , so ergeben sich alle N irreduziblen Darstellungen aus

$$D^{(p_i)}(\{\epsilon, \vec{t}_i\}) = e^{2\pi i p_i/N} \quad \text{mit} \quad p_i = 1, \dots, N$$

und Potenzen davon

- ▶ Für ein Element der vollen Gruppe T erhält man mit $\vec{R} = \sum_i n_i \vec{t}_i$ die Darstellungsmatrix (1-dimensional)

$$D^{(\vec{p})}(\{\epsilon, \vec{R}\}) = e^{2\pi i (p_1 n_1 + p_2 n_2 + p_3 n_3)/N}$$

- ▶ Die Komponenten von $\vec{p}$ durchlaufen N^3 Werte entsprechend den N^3 irreduziblen Darstellungen von T

Irreduzible Darstellungen der Translationsgruppe III

- ▶ Definiert man N^3 Vektoren durch

$$\vec{k} = \sum_i k_i \vec{b}_i \quad \text{mit} \quad k_i = -p_i/N$$

können wir die Darstellungen durch die Vektoren $\vec{k}$ charakterisieren und erhalten

$$D^{(\vec{k})}(\{\epsilon, \vec{R}\}) = e^{-i \vec{k} \vec{R}}$$

- ▶ Die Definition der k_i zeigt, daß $\vec{k}$ der durch $\vec{b}_i$ aufgespannten Elementarzelle zu entnehmen ist. Wird ein reziproker Gittervektor $\vec{K}$ zu $\vec{k}$ addiert, erhält man die gleiche Darstellung (da $e^{-i \vec{K} \vec{R}} = 1$)
- ▶ Als natürlichste Wahl verwendet man Vektoren $\vec{k}$ aus der Brillouin-Zone, sogenannte reduzierte $\vec{k}$ -Vektoren oder reduzierte Ausbreitungsvektoren
- ▶ Für $N \rightarrow \infty$ wird die Brillouin-Zone gleichmäßig mit $\vec{k}$ -Vektoren ausgefüllt

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe I

- ▶ Wie angekündigt, nutzen wir aus, daß die Raumgruppe G die Translationsgruppe T als Normalteiler hat, dessen irred. Darst. wir kennen. Wir müssen also zuerst die Darstellungen von T in Orbits bzgl G einteilen.
- ▶ Laut Definition gehören zum Orbit von $D^{(\vec{k})}$ alle Darstellungen $D^{(\vec{k}')}$, für die es ein $\{\alpha, \vec{a}\} \in G$ gibt, so daß

$$D^{(\vec{k}')}(\{\epsilon, \vec{R}\}) = D^{(\vec{k})}(\{\alpha, \vec{a}\}^{-1}\{\epsilon, \vec{R}\}\{\alpha, \vec{a}\})$$

- ▶ Wegen

$$\{\alpha, \vec{a}\}^{-1}\{\epsilon, \vec{R}\}\{\alpha, \vec{a}\} = \{\epsilon, \alpha^{-1}\vec{R}\}$$

muß für alle $\vec{R}$ gelten:

$$e^{-i\vec{k}'\vec{R}} = e^{-i(\vec{k}, \alpha^{-1}\vec{R})} = e^{-i(\alpha\vec{k}, \vec{R})} \quad \text{oder} \quad \vec{k}' = \alpha\vec{k} + \vec{K}$$

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe II

- ▶ $\vec{k}'$ muß in der Brillouin-Zone liegen, $\alpha\vec{k}$ kann aber – zumindest für Punkte auf der Oberfläche der BZ – auch außerhalb liegen. Dies gilt insbesondere, da nur die Hälfte der Oberfläche zur BZ gehört, der Rest zu benachbarten Zellen. In einem solchen Fall ist ein $\vec{K} \neq 0$ erforderlich
- ▶ Die Menge der Vektoren $\vec{k}'$, die man aus einem festen $\vec{k}$ erhält, wenn α alle Elemente der Punktgruppe durchläuft, heißt **Stern von $\vec{k}$** . Die Zahl der Elemente des Sterns („Zacken“) heißt Ordnung des Sterns.
- ▶ Ein Orbit von T bzgl. G besteht aus allen irred. Darstellungen $D^{(\vec{k})}$, die zu einem Stern gehören. Man kann alle $\vec{k}$ -Vektoren zu Sternen gruppieren und erhält so alle Orbits.
- ▶ Ein Stern kann höchstens die gleiche Ordnung wie die Punktgruppe haben. Man sagt dann, der Stern befinde sich in **allgemeiner Lage**. Je symmetrischer die Lage des Sterns ist, umso geringere Ordnung (weniger Zacken) hat er. Der Stern zu $\vec{k} = 0$ hat z.B. Ordnung 1.

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe III

- Nun suchen wir zur Raumgruppe G , Normalteiler T und Darstellung (von T) $D(\vec{k})$ die kleine Gruppe L . Sie besteht aus allen Elementen $\{\alpha, \vec{a}\}$ von G , die konjugierte Darstellungen $D(\vec{k})(\{\alpha, \vec{a}\}^{-1}\{\epsilon, \vec{R}\}\{\alpha, \vec{a}\})$ liefern, die zu $D(\vec{k})$ äquivalent sind, also

$$D(\vec{k})(\{\alpha, \vec{a}\}^{-1}\{\epsilon, \vec{R}\}\{\alpha, \vec{a}\}) = e^{i\phi} D(\vec{k})(\{\epsilon, \vec{R}\}) e^{-i\phi}$$

Dies führt auf die Bedingung $\vec{k} = \alpha\vec{k} + \vec{K}$, wobei höchstens für Oberflächenpunkte der BZ $\vec{K} \neq 0$

- Zur kleinen Gruppe $G_{\vec{k}}$ von $\vec{k}$ gehören also alle Elemente der Raumgruppe, deren Drehanteil α die Sternzacke $\vec{k}$ in sich selbst (oder falls $\vec{K} \neq 0$ in einen zur Zacke äquivalenten Punkt) überführt

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe IV

- ▶ Ist nun $D_{\vec{k}}$ eine erlaubte irreduzible Darstellung von $G_{\vec{k}}$, d.h. $D_{\vec{k}}$ ist eine irreduzible Darstellung von $G_{\vec{k}}$ mit

$$D_{\vec{k}}(\{\varepsilon, \vec{R}\}) = e^{-i\vec{k}\vec{R}} E,$$

so ist die induzierte Darstellung $D_{\vec{k}}^{(J)}$ eine irreduzible Darstellung der Raumgruppe

- ▶ Man erhält alle irred. Darstellungen von G , wenn man von jedem Stern eine Zacke $\vec{k}$ nimmt und aus allen inäquivalenten erlaubten irreduziblen Darstellungen $D_{\vec{k}}$ von $G_{\vec{k}}$ irreduzible Darstellungen von G induziert.
- ▶ Ist m die Dimension von $D_{\vec{k}}$ (=Multiplizität des Orbits) und s die Ordnung des Sterns von $\vec{k}$, so ist die Darstellung $D_{\vec{k}}^{(J)}$ (ms) -dimensional.
- ▶ Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe von der Form $D_{\vec{k}}^{(J)}$ heißen Standarddarstellungen

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe V

- Die Matrizen von $D_{\vec{k}}^{(J)}$ können in m -dimensionale Blöcke $D_{ij}(a)$ aufgeteilt werden. Geht man von einer Nebenklassenzerlegung

$$G = \sum_{i=1}^s a_i G_{\vec{k}_i}$$

aus, so sind nur Blöcke mit

$$\alpha_i^{-1} \alpha \alpha_j \vec{k} = \vec{k} + \vec{K}$$

von Null verschieden, und es ist

$$D_{ij}(a) = D_{\vec{k}}(a_i^{-1} a a_j)$$

- Ist $\vec{k}$ in allgemeiner Lage und g die Ordnung der Punktgruppe, dann hat der Stern von $\vec{k}$ genau g Zacken. Die Bestimmungsgleichung der kleinen Gruppe, $\alpha \vec{k} = \vec{k} + \vec{K}$, ist nur von ε erfüllt, d.h. $G_{\vec{k}} = T$

Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe VI

- ▶ Von allen irred. Darstellungen von T ist nur eine erlaubt, nämlich die zur gewählten Zacke. Jeder Stern in allgemeiner Lage liefert also genau eine irreduzible Darstellung der Raumgruppe $D(\vec{k}, J)$, die g -dimensional ist
- ▶ Die Darstellungsmatrizen der primitiven Translationen $\{\epsilon, \vec{R}\}$ sind diagonal mit Einträgen

$$e^{-i \vec{k}_i \vec{R}} \quad \text{und} \quad \vec{k}_i = \alpha_i \vec{k} + \vec{K}, \quad i = 1, \dots, g$$

- ▶ Die α_i durchlaufen alle Elemente der Punktgruppe und als Repräsentanten der Nebenklassenzerlegung wählen wir $\{\alpha_i, \vec{v}_i\}$
- ▶ Die Darstellungsmatrix eines allgemeinen Raumgruppenelements $\{\alpha, \vec{a}\}$ hat in jeder Zeile und Spalte nur ein von Null verschiedenes Element, dessen Position durch $\alpha_i^{-1} \alpha \alpha_j = \epsilon$ bestimmt ist. Das Matricelement ist gleich

$$e^{-i \vec{k}_i (\vec{a} + \alpha \vec{v}_j - \vec{v}_i)}$$

Irreduzible Darstellungen der kleinen Gruppe $G_{\vec{k}}$ I

- Um alle irred. Darst. der Punktgruppe zu bestimmen, brauchen wir die irred. Darst. der kleinen Gruppe $G_{\vec{k}}$.
- Unter der Bedingung, daß
 1. $\vec{k}$ im Inneren der BZ liegt (nicht auf der Oberfläche),
 2. $G_{\vec{k}}$ eine symmorphe Gruppe ist, d.h. ihre Elemente nur primitive Translationen enthalten

gestaltet sich die Berechnung der irred. Darstellungen von $G_{\vec{k}}$ relativ einfach: alle können aus den irred. Darstellungen der Punktgruppe $G_{0\vec{k}}$ von $\vec{k}$ abgeleitet werden, die alle Elemente der Punktgruppe G_0 umfaßt, die $\alpha\vec{k} = \vec{k}$ erfüllen

- Es gibt dann genauso viele inäquivalent erlaubte irreduzible Darstellungen $D_{\vec{k}}$, wie es inäquivalente irreduzible Darstellungen $D_{0\vec{k}}$ der Punktgruppe $G_{0\vec{k}}$ von $\vec{k}$ gibt, und es ist

$$D_{\vec{k}}(\{\beta, \vec{b}\}) = e^{-i\vec{k}\vec{b}} D_{0\vec{k}}(\beta)$$

Irreduzible Darstellungen der kleinen Gruppe $G_{\vec{k}}$ II

- Die Darstellungseigenschaft beweisen wir wie folgt: Für zwei Elemente $\{\beta, \vec{b}\}$ und $\{\beta', \vec{b}'\}$ von $G_{\vec{k}}$ gilt

$$\begin{aligned} D_{\vec{k}}(\{\beta, \vec{b}\}) D_{\vec{k}}(\{\beta', \vec{b}'\}) &= e^{-i \vec{k}(\vec{b} + \vec{b}')} D_{0\vec{k}}(\beta \beta') \\ D_{\vec{k}}(\{\beta, \vec{b}\} \{\beta', \vec{b}'\}) &= e^{-i \vec{k}(\beta \vec{b}' + \vec{b})} D_{0\vec{k}}(\beta \beta') \\ &= e^{-i(\vec{k} - \beta^{-1} \vec{k}) \vec{b}'} e^{-i \vec{k}(\vec{b} + \vec{b}')} D_{0\vec{k}}(\beta \beta') \end{aligned}$$

Offenbar stört in der letzten Zeile der Faktor $e^{-i(\vec{k} - \beta^{-1} \vec{k}) \vec{b}'}$, der aber wegen der beiden Voraussetzungen 1 ist.

- Da Punktgruppen relativ niedrige Ordnung haben, kennt man ihre Darstellungen sehr gut. Die irreduziblen Darstellungen der Raumgruppe können also im Falle

$$e^{-i(\vec{k} - \beta^{-1} \vec{k}) \vec{b}'} = 1$$

auf bekannte irreduzible Darstellungen zurückgeführt werden.

Irreduzible Darstellungen der kleinen Gruppe $G_k^{\vec{r}}$ III

- ▶ Schwieriger sind nicht-symmorphe Raumgruppen und einige Sterne auf der Oberfläche der BZ. Ein Teil dieser Fälle wird im Buch von Streitwolf behandelt.
- ▶ Bei solchen speziellen Oberflächenpunkten in **symmetrischer Lage** unterscheidet man die Fälle von Symmetriepunkten, Symmetriegeraden und Symmetrieebenen

7 Kontinuierliche Gruppen

7.1 $SO(2)$

- ▶ Bisher haben wir fast ausschliesslich endliche Gruppen betrachtet (oder unendliche Gruppen endlich gemacht), dabei insbesondere Drehungen um diskrete Winkel $2\pi/n$. Viele physikalische Systeme sind aber invariant unter der vollen Drehgruppe des 2- oder 3-dimensionalen Raums, die aus Drehungen um beliebige Winkel besteht.
- ▶ Diese Gruppen sind kompakte Gruppen, bei denen der Winkelparameter über einen endlichen Bereich $[0, \pi)$ oder $[0, 2\pi)$ variieren kann. Der früher entwickelte Mechanismus für Charaktere mit Summen über die volle Gruppe kann deshalb auch angewandt werden, indem Summen durch Integrale ersetzt werden.
- ▶ Es zeigt sich jedoch, daß für kontinuierliche (Lie) Gruppen ein anderes nützliches Konzept existiert, das von *infinitesimalen Generatoren* der Gruppe und ihrer Algebra (*Lie Algebra*). Dies führt z.B. auf die Drehimpulsoperatoren.

SO(2) I

- ▶ Die Gruppe $SO(2)$ umfaßt alle echten Drehungen in 2 Dimensionen.
- ▶ Wir hatten bereits gesehen, daß eine 2-dimensionale Darstellung durch die orthogonalen Matrizen

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

gegeben ist.

- ▶ Diese Darstellung ist treu und innerhalb der reellen Zahlen irreduzibel.
- ▶ Im Raum der komplexen Zahlen kann die Darstellung reduziert werden, denn es gilt

$$\begin{pmatrix} x' + i y' \\ x' - i y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x + i y \\ x - i y \end{pmatrix}$$

- ▶ Jede dieser beiden Darstellungen ist treu und besteht aus unitären 1×1 Matrizen, sie kann deshalb auch $U(1)$ genannt werden

SO(2) II

- Die Gruppe $SO(2)$ bzw. $U(1)$ ist abelsch, d.h. alle irreduziblen Darstellungen sind 1-dimensional mit

$$D^{(m)}(\phi) = e^{-i m \phi}$$

- Da $D^{(m)}(\phi + 2\pi) = D^{(m)}(\phi)$ gelten soll, muß m **ganzzahlig** sein
- Im Rahmen der Quantenmechanik zeigt sich, daß diese Forderung zu streng ist. Dort muß nur gelten, daß bilineare Objekte $\langle \chi | \varphi \rangle$ invariant unter der vollen Drehung sein müssen. Die Teile $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ können deshalb auch ein Vorzeichen aufsammeln und m darf dementsprechend auch **halbzahlige** Werte annehmen
- Wie erwähnt, werden Gruppenmittelwerte $1/[G] \sum_{g \in G}$ durch Integrale ersetzt. Damit sieht man auch sofort die Orthogonalität der Charaktere:

$$\langle \chi^{(m)}, \chi^{(m')} \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i m \phi} e^{-i m' \phi} = \delta_{mm'}$$

- ▶ Die Clebsch-Gordan Reihe für die Zerlegung eines Produkts zweier irred. Darstellungen ist sehr einfach:

$$D^{(m)} \otimes D^{(m')} = D^{(m+m')}$$

- ▶ Genauso leicht zeigt man die Zerlegung der Darstellung R in irreduzible Darstellungen:

$$a_m = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{im\phi} 2 \cos \phi = \delta_{m,1} + \delta_{m,-1}$$

also

$$R = D^{(1)} \oplus D^{(-1)}$$

Der infinitesimale Generator J_z I

- ▶ Wir führen den Generator einer stetigen (Lie) Gruppe ein, indem wir Gruppenelemente in der Nähe des Einheitselements betrachten. Es gilt:

$$R(\phi) = E - i\phi X + O(\phi^2)$$

oder auch

$$-iX = \left. \frac{dR(\phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0}$$

- ▶ X wird **infinitesimaler Generator** der Gruppe $SO(2)$ genannt, und hängt natürlich von der gewählten Darstellung R ab.
- ▶ Mit der 2-dimensionalen reellen Darstellung ergibt sich:

$$-iX = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Der infinitesimale Generator J_z II

- ▶ Man beachte, daß X der Pauli-Matrix σ_y entspricht und **Hermiteisch** ist. Letzteres ist eine Folge der Unitarität (Orthogonalität) von R ,

$$\begin{aligned} E &= R^\dagger(\phi)R(\phi) = (E + i\phi X^\dagger + \dots)(E - i\phi X + \dots) \\ &= E - i\phi(X - X^\dagger) + \dots \\ &\implies X = X^\dagger \end{aligned}$$

- ▶ Auf ähnliche Weise folgt, daß $\text{Tr}(X) = 0$, da R eine reine Drehmatrix mit $\det(R) = 1$ ist.
- ▶ Die wichtigste Eigenschaft von X besteht darin, daß alle echten Drehungen (d.h. alle die stetig mit E verbunden sind, aber nicht Spiegelungen) durch Potenzieren gebildet werden können:

$$R(\phi) = \exp(-i\phi X)$$

Der infinitesimale Generator J_z III

- Das Exponential einer Matrix ist dabei natürlich als Reihe zu verstehen

$$\exp(-i\phi X) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i\phi)^n X^n / (n!),$$

die sich wegen $X^2 = E$ leicht in Real- und Imaginärteil zerlegen läßt:

$$\exp(-i\phi X) = E \cos \phi - i X \sin \phi$$

- Der tiefere Grund, daß R als $\exp(-i\phi X)$ geschrieben werden kann, liegt in der Abelschen Form des Gruppenprodukts $R(\phi)R(\phi') = R(\phi + \phi')$. Ableiten nach ϕ' und $\phi' \rightarrow 0$ liefert die DGL.:

$$\frac{dR(\phi)}{d\phi} = -iXR(\phi),$$

deren Lösung die Exponentialfunktion ist.

Der infinitesimale Generator J_z IV

- Die Gleichungen

$$-iX = dD(\phi)/d\phi|_{\phi=0} \quad \text{und} \quad D(\phi) = \exp(-i\phi X)$$

gelten allgemein für jede Darstellung von $SO(2)$. Für die 1-dimensionalen Darstellungen erhält man die triviale Form $X^{(m)} = m$.

- In der Quantenmechanik wird der Generator auf etwas andere Art realisiert. Wie wir bereits gesehen hatten, wirken Symmetrieoperationen über

$$U_R \psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}),$$

das heißt in diesem Falle für kleine ϕ :

$$(E - i\phi X)\psi(r, \theta) = \psi(r, \theta - \phi).$$

- Der Operator X entspricht also der z-Komponente des Drehimpulses:

$$X = -i \frac{d}{d\theta} = \frac{J_z}{\hbar}$$

und die Wellenfunktionen $u_m(\theta) = e^{im\theta}$ zur Darstellung $D^{(m)}$ erfüllen $Xu_m = mu_m$.

7.2 $SO(3)$ bzw. $SU(2)$

- ▶ Die Gruppe $SO(3)$ besteht aus allen echten Drehungen im 3-dimensionalen Raum. Die definierende Darstellung wird von 3-dimensionalen Matrizen $R_{\vec{n}}(\phi)$ gebildet, die den Effekt einer Drehung für die kartesischen Koordinaten x , y , und z um eine Achse $\vec{n}$ beschreiben. Diese Matrizen bilden eine *treue* Darstellung.
- ▶ Wie schon erwähnt, sind die Matrizen $R_{\vec{n}}$ orthogonal mit Determinante eins.
- ▶ Die Drehung um die z -Achse ist gegeben durch

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und führt auf den Generator

$$-iX_z = \left. \frac{dR_z(\phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

der erneut Hermitesch und spurlos ist

$SO(3)$ – infinitesimale Generatoren I

- Die Matrixelemente von X_z lassen sich in kompakter Form schreiben als:

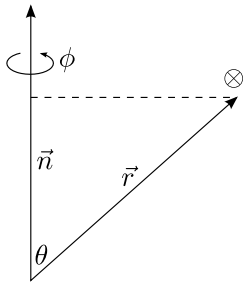
$$(X_z)_{ij} = -i \varepsilon_{ijz}$$

- Die Matrizen der Drehungen um die x- und y-Achse erhält man durch Permutation aus R_z , und das Ergebnis für den infinitesimalen Generator läßt sich verallgemeinern zu:

$$(X_k)_{ij} = -i \varepsilon_{ijk}$$

- Alternativ läßt sich dieses Ergebnis auch durch Betrachtung der von einer kleinen Drehung bewirkten Verschiebungen gewinnen:

$$\begin{aligned}\delta \vec{r} &= \vec{n} \times \vec{r} \phi \\ \vec{r}' &= \vec{r} + \phi(\vec{n} \times \vec{r}) \\ r'_i &= r_i + \phi \varepsilon_{ikj} n_k r_j \\ &= (\delta_{ij} - \phi \varepsilon_{ijk} n_k) r_j \\ &= (\delta_{ij} - i \phi (X_{\vec{n}})_{ij}) r_j\end{aligned}$$



$SO(3)$ – infinitesimale Generatoren II

- Hier wurde der Generator einer allgemeinen Drehung um die Achse $\vec{n}$ eingeführt:

$$(X_{\vec{n}})_{ij} = -i \varepsilon_{ijk} n_k = n_k (X_k)_{ij}$$
$$X_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{X}$$

- Mit Hilfe dieses verallgemeinerten Generators kann nun eine beliebige Drehung um die Achse $\vec{n}$ geschrieben werden als:

$$R_{\vec{n}}(\phi) = e^{-i\phi\vec{n}\cdot\vec{X}}$$

- Man beachte, daß auch der verallgemeinerte Generator Hermitesch und spurlos ist, so daß $R_{\vec{n}}$ orthogonal ist und Determinante eins hat.

- ▶ Die Struktur einer Gruppe wird durch die Multiplikation zweier Elemente definiert, die zu einem neuen Element führt. Werden alle Elemente der Gruppe durch Generatoren erzeugt, so ergeben sich Multiplikationsregeln und damit die Struktur der Gruppe aus den Eigenschaften der Generatoren, genauer deren [Algebra](#).
- ▶ Eine Algebra ist (kurz gesagt) ein Vektorraum V mit einer linearen Operation $V \times V \rightarrow V$. Bei den hier betrachteten Lie-Algebren ist diese Operation der Kommutator $[X, Y]$ mit den Eigenschaften
 1. $[X, X] = 0$
 2. $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$ (Jacobi-Identität)

Vertauschungsrelationen II

- Die Generatoren für verschiedene Drehungen kommutieren, genauso wie die entsprechenden Drehungen, nicht miteinander. Ausgehend von der Definition $(X_k)_{ij} = -i \varepsilon_{ijk}$ findet man

$$\begin{aligned}[X_k, X_l] &= X_k X_l - X_l X_k \\&= -\varepsilon_{ink} \varepsilon_{njl} + \varepsilon_{inl} \varepsilon_{nj k} \\&= -(\delta_{il} \delta_{kj} - \delta_{ij} \delta_{kl}) + (\delta_{ik} \delta_{lj} - \delta_{ij} \delta_{kl}) \\&= \delta_{ik} \delta_{lj} - \delta_{il} \delta_{kj} = \varepsilon_{kln} \varepsilon_{ijn} = i \varepsilon_{kln} X_n\end{aligned}$$

- Diese Beziehung kann auch durch geometrische Überlegungen gezeigt werden.
- Bzgl. des Charakters der 3-dimensionalen Drehmatrizen hatten wir bereits früher gezeigt, daß

$$\chi^{3D}(\phi) = 2 \cos \phi + 1$$

Irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ I

- ▶ Da die Drehmatrizen durch die Generatoren bestimmt sind, verlagert sich das Problem von der Bestimmung irreduzibler Darstellungen der Gruppe auf die Bestimmung irreduzibler Operatoren X , die die Vertauschungsrelationen erfüllen.
- ▶ Dies führt auf ein Standardproblem der Quantenmechanik, nämlich die Bestimmung der Eigenfunktionen und Eigenvektoren der Drehimpulsoperatoren J_i , die bis auf einen Faktor $\hbar$ mit den Operatoren X übereinstimmen, $J_i = \hbar X_i$, und die selben Vertauschungsrelationen erfüllen.

Irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ II

- Die verschiedenen Darstellungen werden durch j charakterisiert, das den Eigenwert von $|\vec{J}|^2 = \hbar^2 j(j+1)$ festlegt. Eine solche Darstellung ist jeweils $(2j+1)$ -dimensional und die Matrixelemente lauten:

$$\langle jm' | X_z | jm \rangle = m \delta_{m',m}$$

$$\langle jm' | X_+ | jm \rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m',m+1}$$

$$\langle jm' | X_- | jm \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m',m-1},$$

wobei $X_{\pm} = X_x \pm i X_y$ und $m = -j, \dots, j$.

- Der Fall $j = 1$ entspricht den Matrizen $R(\phi)$, statt der kartesischen Basis x, y, z wird lediglich die sog. sphärische Basis $\mp(x \pm i y)/\sqrt{2}$, z benutzt
- Die Dimension der Darstellung, $(2j+1)$, muß jeweils ganzzahlig sein. Die Zahl j kann deshalb nur ganz-zahlig $(0, 1, 2, \dots)$ oder halb-zahlig $(1/2, 3/2, \dots)$ sein.

Irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ III

- ▶ Die halb-zahligen Werte ergeben echten Darstellungen der Gruppe $SO(3)$, da für volle Drehungen jeweils $D(2\pi) = -1$ statt 1 gilt. Außerdem gibt es in diesem Fall keine Entsprechung als Differentialoperatoren. Wir werden später sehen, daß die halb-zahligen Werte von j zu Darstellungen der übergeordneten Gruppe $SU(2)$ führen.
- ▶ Die Charaktere der Darstellungen wurden schon früher angegeben. Ausgangspunkt ist

$$X_z = \text{diag}(-j, -j + 1, \dots, j - 1, j)$$

also

$$R_z = e^{-i\phi X_z} = \text{diag}(e^{i\phi j}, e^{i\phi(j-1)}, \dots, e^{-i\phi j})$$
$$\chi^{(j)}(\phi) = \sum_{m=-j}^j e^{-i\phi m} = \frac{\sin[(j + 1/2)\phi]}{\sin[\phi/2]}$$

Irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ IV

- ▶ Drehungen um andere Achsen als z sind ähnlich zu R_z , haben also den gleichen Charakter
- ▶ Für praktische Rechnungen sind auch folgende reelle Summen günstig:

$$\chi^{(j)}(\phi) = 1 + 2 \sum_{m=1}^j \cos(m\phi) \quad j \text{ ganzzahlig}$$

$$\chi^{(j)}(\phi) = 2 \sum_{m=0}^{j-1/2} \cos[(m + 1/2)\phi] \quad j \text{ halbzahlig}$$

- ▶ Die Summen entsprechen ihrer Form nach diskreten Kosinus-Transformationen, oder nach der Variablentransformation $\phi = \arccos x$ Reihen in Chebyshev-Polynomen

- ▶ Wie bei $SO(2)$ müssen wir für die kontinuierliche Gruppe $SO(3)$ ein Analogon für die Gruppensummation $1/[G] \sum_{g \in G}$ finden, d.h. wir suchen ein Maß $d\mu(\phi)$ für die Ersetzung $1/[G] \sum_{g \in G} \rightarrow \int d\mu(\phi)$
- ▶ Es zeigt sich (man beachte die Verwandtschaft mit Fourier- und Chebyshev-Reihen), daß ein geeignetes Maß durch $d\mu(\phi) = (1 - \cos \phi)/(2\pi)$ gegeben ist, d.h. für $SO(3)$ gilt die Entsprechung:

$$\frac{1}{[G]} \sum_{g \in G} \rightarrow \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} (1 - \cos \phi)$$

- ▶ Mit $(1 - \cos \phi) = 2 \sin^2(\phi/2)$ läßt sich auch leicht die Orthogonalität der Charaktere beweisen:

$$\begin{aligned}\langle \chi^{(l)}, \chi^{(k)} \rangle &= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} 2 \sin^2(\phi/2) \frac{\sin[(l + 1/2)\phi]}{\sin[\phi/2]} \frac{\sin[(k + 1/2)\phi]}{\sin[\phi/2]} \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} [\cos(l - k)\phi - \cos(l + k + 1)\phi] = \delta_{kl}\end{aligned}$$

- ▶ Bereits früher hatten wir Clebsch-Gordan-Reihen als die Zerlegung eines direkten Produkts zweier irred. Darstellungen in irred. Darstellungen eingeführt. Im Falle $SO(3)$ entspricht dies gerade dem klassischen quantenmechanischen Problem der Addition von Drehimpulsen, wobei man sich in der QM mit den Operatoren $\vec{J}$ statt mit der Drehgruppe befaßt
- ▶ Man findet das bekannte Ergebnis:

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}{}^{\oplus} D^{(j)}$$

- Zum Beweis nehmen wir $j_1 \geq j_2$ an, und finden:

$$\begin{aligned}\chi^{(j_1)}\chi^{(j_2)} &= \frac{e^{i(j_1+1/2)\phi} - e^{-i(j_1+1/2)\phi}}{2i\sin[\phi/2]} \sum_{m=-j_2}^{j_2} e^{im\phi} \\ &= \frac{1}{2i\sin[\phi/2]} \sum_{m=-j_2}^{j_2} (e^{i(j_1+m+1/2)\phi} + e^{-i(j_1-m+1/2)\phi}) \\ &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \frac{\sin[(j+1/2)\phi]}{\sin[\phi/2]} \\ &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \chi^{(j)}(\phi)\end{aligned}$$

7.3 Clebsch-Gordan-Koeffizienten

- ▶ Mit der Basistransformation der Darstellungsmatrizen von $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ auf Block-Diagonal-Form, dann werden parallel die Eigenvektoren der Teile zu Eigenvektoren des Gesamtdrehimpulses $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ und seines Betrages kombiniert.
- ▶ Die in der entsprechenden Reihe auftretenden Koeffizienten heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C(\dots)$,

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \sum_{j,m} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) |jm\rangle_{(j_1 j_2)},$$

wobei $j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$ und $m = m_1 + m_2 = -j, \dots, j$

- ▶ Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten CG können mit Hilfe der Gruppenstruktur bestimmt werden. Allerdings ist ihre Wahl nur bis auf Phasenfaktoren eindeutig und in der Literatur sind verschiedene Konventionen gebräuchlich.

Clebsch-Gordan-Koeffizienten I

- Die obige Gleichung beschreibt eine Transformation zwischen verschiedenen orthonormalen Basen, d.h. es gilt:

$$\begin{aligned}\langle j_2 m'_2 | \langle j_1 m'_1 | j_1 m_1 \rangle | j_2 m_2 \rangle &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ (j_1 j_2) \langle j' m' | j m \rangle_{(j_1 j_2)} &= \delta_{j j'} \delta_{m m'} \\ C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) &= \langle j_2 m_2 | \langle j_1 m_1 | j m \rangle_{(j_1 j_2)}\end{aligned}$$

- Als Basistransformation kann $C(\dots)$ als orthogonale Matrix mit den Indexpaaren $(m_1 m_2)$ und $(j m)$ aufgefaßt werden. Es gilt deshalb

$$\begin{aligned}\sum_{m_1 m_2} C(j_1 j_2 j'; m_1 m_2 m') C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) &= \delta_{j j'} \delta_{m m'} \\ \sum_{j m} C(j_1 j_2 j; m'_1 m'_2 m) C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}\end{aligned}$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten II

- Man kann damit auch die Clebsch-Gordan-Zerlegung in die gewohntere Form bringen:

$$|jm\rangle_{(j_1 j_2)} = \sum_{m_1 m_2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

Da stets $m = m_1 + m_2$ gilt, handelt es sich eigentlich nur um eine einfache Summe.

- Die übliche Vorgehensweise um obige Zerlegung für festes j durchzuführen, ist die folgende:
 - Man sucht zuerst den Zustand mit maximalem $m = j$, der durch $J^+ |jj\rangle = 0$, d.h. $(J_1^+ + J_2^+) \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = 0$ gekennzeichnet ist.
 - Die Zustände mit kleinerem m ergeben sich dann durch Anwendung von $J^- = J_1^- + J_2^-$
- Beispiel:** $D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)} = D^{(1)} \oplus D^{(0)}$, d.h. wir koppeln zwei Drehimpulse $1/2$ zu Gesamtdrehimpuls 1 oder 0 .

Clebsch-Gordan-Koeffizienten III

- Für den Zustand mit maximalem m gilt trivialerweise

$$|1, 1\rangle = |1/2\rangle|1/2\rangle$$

und Anwendung von J^- liefert:

$$J^-|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle = |-1/2\rangle|1/2\rangle + |1/2\rangle|-1/2\rangle$$

$$J^-|1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, -1\rangle = \sqrt{2}|-1/2\rangle|-1/2\rangle$$

- Der Zustand zu $j = 0$ erlaubt nur $m = 0$, d.h. wir suchen eine Linearkombination

$$|0, 0\rangle = \alpha|-1/2\rangle|1/2\rangle + \beta|1/2\rangle|-1/2\rangle$$

die orthogonal zu $|1, 0\rangle$ sein muß. Dies führt auf

$$|0, 0\rangle = (|-1/2\rangle|1/2\rangle - |1/2\rangle|-1/2\rangle)/\sqrt{2}$$

Implizit haben wir damit alle CG-Koeffizienten bestimmt

Clebsch-Gordan-Koeffizienten IV

- ▶ Mit Hilfe der CG-Reihe können wir auch die Drehmatrizen für beliebige Werte von j konstruieren, indem wir von den einfachsten nichttrivialen Darstellungen $j = 1/2$ starten und sukzessive Drehimpulse addieren:

$$\begin{aligned} D_{mm'}^{(j)}(R) &= \langle jm' | U(R) | jm \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_1' m_2 m_2'} C(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m) C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \langle j_2 m_2' | \langle j_1 m_1' | U(R) | j_1 m_1 \rangle | j_2 m_2 \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_1' m_2 m_2'} C(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m) C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) D_{m_1' m_1}^{(j_1)}(R) D_{m_2' m_2}^{(j_2)}(R) \end{aligned}$$

Hierbei beschreibt $U(R)$ die durch R im Raum der Wellenfunktionen induzierte unitäre Transformation.

Wigner-Eckart Theorem I

- ▶ Wenn man experimentelle Größen quantenmechanisch berechnen will, braucht man Erwartungswerte und Matrixelemente der Form $\langle \phi | O | \psi \rangle$. $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ sind üblicherweise Eigenzustände eines ungestörten Hamiltonoperators H_0 und O die zu messende Größe (und Störung)
- ▶ Viele Eigenschaften des Matrixelements können aus der Symmetrie von H_0 und O abgeleitet werden. Hier interessiert uns in erster Linie das Transformations-Verhalten unter der Drehgruppe $SO(3)$
- ▶ **Einfaches Beispiel:** Wir betrachten einen skalaren Operator S , d.h. einen Operator der invariant unter Drehungen ist,

$$U(R) S U(R)^{-1} = S$$

Äquivalent dazu ist:

$$[\vec{X}, S] = 0$$

d.h. S vertauscht mit allen Komponenten des Drehimpulses

Wigner-Eckart Theorem II

- Aus der letzten Beziehung können wir unmittelbar **Auswahlregeln** ableiten: Die Eigenfunktionen von H_0 (drehinvariant) lassen sich alle nach Drehimpulsquantenzahlen charakterisieren, d.h. wir suchen das Matrixelement $\langle j' m' | S | j m \rangle$. Wegen der Drehinvarianz von S ist es nur dann von Null verschieden, wenn $j = j'$ und $m = m'$, und es hängt nur von j , nicht von m ab, also

$$\langle j' m' | S | j m \rangle = N_j \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

- Beweis: Es gilt $[S, \vec{X}^2] = 0$, deshalb:

$$\begin{aligned} j(j+1) \langle j' m' | S | j m \rangle &= \langle j' m' | S \vec{X}^2 | j m \rangle \\ &= \langle j' m' | \vec{X}^2 S | j m \rangle = j'(j'+1) \langle j' m' | S | j m \rangle \end{aligned}$$

oder

$$(j - j')(j + j' + 1) \langle j' m' | S | j m \rangle = 0$$

Der zweite Faktor ist immer positiv, also $j = j'$

Wigner-Eckart Theorem III

- ▶ Eine analoge Rechnung mit $[S, X_z] = 0$ zeigt $m = m'$. Außerdem gilt auch $[S, X_{\pm}] = 0$, deshalb:

$$\begin{aligned}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\langle jm|S|jm\rangle &= \langle jm|SX_+|jm-1\rangle \\ &= \langle jm|X_+S|jm-1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\langle jm-1|S|jm-1\rangle\end{aligned}$$

Das Matricelement hängt also nicht von m ab.

- ▶ Auf ähnliche Weise kann man auch die Auswahlregeln für Vektor- oder höhere Tensoroperatoren herleiten. Wesentlich eleganter geht es jedoch mit Darstellungstheorie und Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Dies führt auf das **Wigner-Eckart-Theorem**

Wigner-Eckart Theorem IV

- **Definition:** Ein (irreduzibler) Tensoroperator T_m^j ist ein Operator, der sich unter Drehungen wie folgt transformiert:

$$U(R)T_m^jU(R)^{-1} = D_{m'm}^{(j)}(R)T_{m'}^j$$

$U(R)$ beschreibt die Wirkung von R auf die Wellenfunktionen, $D_{m'm}^{(j)}(R)$ sind die Drehmatrizen für Drehimpulseigenfunktionen,

$$U(R)|jm\rangle = D_{m'm}^{(j)}(R)|jm'\rangle$$

- Dem skalaren Operator S entspricht in dieser Notation T_0^0 , und ein Vektoroperator ist ein Operator mit den **sphärischen** Komponenten T_m^1 , $m = \pm 1, 0$. Ein Beispiel sind die Generatoren $X_{\pm}/\sqrt{2}$, X_z :

$$\begin{aligned} e^{-iX_z\theta}X_+e^{iX_z\theta} &= X_x\cos\theta + X_y\sin\theta + i(X_y\cos\theta - X_x\sin\theta) \\ &= X_+(\cos\theta - i\sin\theta) = e^{-i\theta}X_+ \\ &= D_{11}^{(1)}(R_z(\theta))X_+ \end{aligned}$$

Wigner-Eckart Theorem V

- ▶ In dieser Rechnung wurden die Vertauschungsrelationen $[X_i, X_j] = i \varepsilon_{ijk} X_k$ benutzt, die auch ganz allgemein zur Definition eines Vektoroperators $\vec{V}$ herangezogen werden können:

$$[X_i, V_j] \stackrel{!}{=} i \varepsilon_{ijk} V_k$$

- ▶ Wir kommen nun zum Wigner-Eckart-Theorem und betrachten die Matrixelemente $\langle j' m' | T_M^J | j m \rangle$ eines Tensoroperators T_M^J :
- ▶ Der Zustand $T_M^J | j m \rangle$ transformiert sich gemäß der Produktdarstellung $D^{(J)} \otimes D^{(j)}$, also

$$\begin{aligned} U(R)(T_M^J | j m \rangle) &= U(R) T_M^J U(R)^{-1} U(R) | j m \rangle \\ &= D_{M' M}^{(J)}(R) D_{m' m}^{(j)}(R) (T_{M'}^J | j m' \rangle) \end{aligned}$$

Wigner-Eckart Theorem VI

- ▶ Mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten können wir nun auf den Zustand $|j'm'\rangle$ projizieren:

$$N_{Jjj'}|j'm'\rangle = \sum_{m,M} C(Jjj'; Mmm') T_M^J |jm\rangle$$

Die Proportionalitätskonstante $N_{Jjj'}$ hängt von den drei Drehimpulswerten J, j, j' ab, nicht jedoch von den m 's.

- ▶ Inversion dieser Gleichung liefert:

$$T_M^J |jm\rangle = N_{Jjj''} \sum_{m'',j''} C(Jjj''; Mmm'') |j''m''\rangle$$

und nach Ausführung des Skalarprodukts erhalten wir für das Matricelement

$$\langle j'm' | T_M^J | jm \rangle = N_{Jjj'} C(Jjj'; Mmm')$$

Wigner-Eckart Theorem VII

- ▶ Die gesamte m -Abhängigkeit steckt jetzt im Clebsch-Gordan-Koeffizient. Den Vorfaktor $N_{Jjj'}$ bezeichnet man meist als **reduziertes** oder **Doppelstrich**-Matrixelement, $N_{Jjj'} \equiv \langle j' || T^J || j \rangle$.
- ▶ Das Wigner-Eckart-Theorem schreibt sich mit dieser Notation:

$$\langle j' m' | T_M^J | j m \rangle = \langle j' || T^J || j \rangle C(J j j'; M m m')$$

Anwendungen des Theorems I

- ▶ **Dipolauswahlregeln:** Elektrische Dipolübergänge in Atomen hängen vom Matrixelement von $(\vec{E} \cdot) \vec{x}$ ab. Genauer gesagt, ist die Übergangsrate proportional zum Betragsbetrag des Matrixelements. Erlaubte Übergänge sind also solche, für die das Matrixelement von Null verschieden ist. Alle anderen Übergänge sind **verboten** und können höchstens durch höhere Multipolterme des Feldes induziert werden.
- ▶ Das Wigner-Eckart-Theorem besagt:

$$\langle n' l' m' | x_M | n l m \rangle = \langle n' l' || \vec{x} || n l \rangle C(1 l l'; M m m')$$

es gelten also die Auswahlregeln:

1. $\Delta l \equiv l - l' = 0, \pm 1$
 2. $\Delta m \equiv m - m' = 0$ für $\vec{E}$ in z-Richtung, d.h. $\vec{E} \cdot \vec{x} \propto x_0$, und $\Delta m = \pm 1$ für $\vec{E}$ entlang der anderen beiden Achsen, da $x_{\pm 1} \propto x \pm i y$
- ▶ Es stellt sich heraus, daß $\Delta l = 0$ ebenfalls nicht erlaubt ist, da $\vec{x}$ über $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ mit dem Drehimpuls verknüpft ist, was auf $\vec{x} \cdot \vec{L} = 0$ führt.

Anwendungen des Theorems II

- Betrachtet man $\langle lm | \vec{x} \cdot \vec{L} | lm \rangle = 0$ und benutzt, daß für zwei Vektoren $\vec{A}, \vec{B}$ in sphärischer Basis gilt

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_M (-1)^M A_M B_{-M}$$

erhält man nach Einfügung eines kompletten Basissatzes in das Matricelement:

$$0 = \sum_M (-1)^M \sum_{l'm'} C(1l'l'; Mmm') C(1'l'l; -Mm'm) \langle l || \vec{x} || l' \rangle \langle l' || \vec{L} || l \rangle$$

Anwendungen des Theorems III

- ▶ Es gilt $\langle I' || \vec{L} || I \rangle \propto \delta_{I'I'}$ und die m -Werte sind additiv, also:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle Im | \vec{x} \cdot \vec{L} | Im \rangle \\ &= \left[\sum_M (-1)^M C(1I; Mm(M-m)) C(1I; -M, -(m+M), m) \right] \langle I || \vec{x} || I \rangle \langle I || \vec{L} || I \rangle \end{aligned}$$

Die CG Summe ist von Null verschieden, da sie in gleicher Form auch in der Zerlegung von $\langle Im | \vec{L} \cdot \vec{L} | Im \rangle$ auftritt. Da auch $\langle I || \vec{L} || I \rangle \neq 0$, muß offenbar $\langle I || \vec{x} || I \rangle = 0$ gelten.

- ▶ Ein etwas einfacherer Beweis nutzt aus, daß $\vec{x}$ von ungerader Parität ist. Das Matricelement zwischen Zuständen gleicher Parität muß daher verschwinden. Da der Paritätsoperator nicht zu $SO(3)$ gehört, wurde hier der etwas kompliziertere Beweis gewählt.

Anwendungen des Theorems IV

- ▶ **Landéscher g -Faktor bei Spin-Bahn-Kopplung:** Wir betrachten das magnetische Moment eines Wasserstoff-Elektrons mit Bahndrehimpuls L und Spin $1/2$, oder auch einen Mehr-Elektronen-Zustand mit Gesamtdrehimpuls L und Gesamtspin S . Die Zustände des gekoppelten Systems werden durch $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ charakterisiert.
- ▶ Will man das magnetische Moment $\vec{\mu}$ eines solchen Zustands berechnen, steht man vor dem Problem, daß sich die gyromagnetischen Verhältnisse für Bahndrehimpuls und Spin um einen Faktor 2 unterscheiden:

$$\vec{\mu}_l = \frac{e}{2m_e} \vec{L}$$
$$\vec{\mu}_s = \frac{e}{m_e} \vec{S}$$

- ▶ Wir suchen den Erwartungswert:

$$\vec{\mu} \equiv \langle \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s \rangle = \frac{e}{2m_e} \langle \vec{L} + 2\vec{S} \rangle = \frac{e}{2m_e} \langle \vec{J} + \vec{S} \rangle$$

Anwendungen des Theorems V

- Der Erwartungswert von $\vec{J}$ ist leicht zu berechnen, da wir mit Eigenzuständen von $\vec{J}$ arbeiten. Schwieriger ist der von $\vec{S}$. Wie $\vec{x}$ ist $\vec{S}$ ein Vektoroperator, wir können deshalb wie oben den Erwartungswert $\langle jm | \vec{J} \cdot \vec{S} | jm \rangle$ zerlegen und finden:

$$\frac{\langle jm | \vec{J} \cdot \vec{S} | jm \rangle}{\langle jm | \vec{J}^2 | jm \rangle} = \frac{\langle j | | \vec{J} \cdot \vec{S} | | j \rangle}{\langle j | | \vec{J}^2 | | j \rangle} = \frac{\langle j | | \vec{S} | | j \rangle}{\langle j | | \vec{J} | | j \rangle}$$

Man beachte, dass dies nur für diagonale Matrixelemente von $\vec{S}$ funktioniert

Anwendungen des Theorems VI

- ▶ Mit dem Wigner-Eckart-Theorem folgt:

$$\frac{\langle jm|S_M|jm\rangle}{\langle jm|J_M|jm\rangle} = \frac{\langle j||\vec{S}||j\rangle}{\langle j||\vec{J}||j\rangle}$$

also

$$\langle jm|\vec{S}|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}|jm\rangle \frac{\langle j||\vec{J} \cdot \vec{S}||j\rangle}{\langle j||\vec{J}^2||j\rangle}$$

- ▶ Es bleibt die Berechnung von $\langle j||\vec{J} \cdot \vec{S}||j\rangle$, wofür sich wegen

$$\vec{S} \cdot \vec{J} = (\vec{S}^2 + \vec{J}^2 - \vec{L}^2)/2$$

ergibt:

$$\langle j||\vec{J} \cdot \vec{S}||j\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2[s(s+1) + j(j+1) - l(l+1)]$$

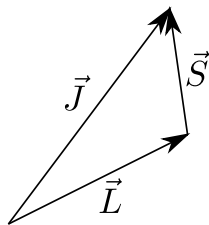
Anwendungen des Theorems VII

- Damit finden wir für das magnetische Moment:

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2m_e} \langle \vec{J} \rangle$$

mit dem Landéschen g -Faktor:

$$g = 1 + \frac{s(s+1) + j(j+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$



8 Weitere Anwendungen der Gruppentheorie

8.1 Atome in Hartree-Fock-Näherung

- Das einfachste (Näherungs-) Verfahren zur Berechnung der Energieniveaus von Atomen mit mehreren Elektronen ist das Hartree-Fock-Verfahren. Es basiert darauf, daß n -Elektron-Eigenfunktionen durch je ein antisymmetrisiertes Produkt von Ein-Elektron-Wellenfunktionen approximiert werden,

$$\psi(\vec{r}_1 s_1; \dots; \vec{r}_n s_n) = \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1 s_1) & \dots & \phi_n(\vec{r}_1 s_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(\vec{r}_n s_n) & \dots & \phi_n(\vec{r}_n s_n) \end{vmatrix}$$

- Die damit erhaltenen Energien genügen, um die Struktur des Periodensystems zu einem großen Teil zu verstehen.

Atome in Hartree-Fock-Näherung I

- ▶ Minimiert man den Erwartungswert $\langle \psi | H | \psi \rangle$ bezüglich der Ein-Elektron-Funktionen ϕ_i (Orbitale), erhält man die Gleichung:

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \frac{Z\bar{e}^2}{r_i} + \sum_{i \neq j} \int \phi_j^*(\rho_j) \frac{\bar{e}^2}{r_{ij}} \phi_j(\rho_j) d^3 \vec{r}_j \right] \phi_i(\rho_i) - \sum_{i \neq j} \int \phi_j^*(\rho_j) \frac{\bar{e}^2}{r_{ij}} \phi_i(\rho_j) d^3 \vec{r}_j \phi_j(\rho_i) = E_i \phi_i(\rho_i)$$

wobei $\bar{e}^2 = e^2/(4\pi\epsilon_0)$, $r_i = |\vec{r}_i|$, $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ und $\rho_i = (\vec{r}_i, s_i)$.

- ▶ Der erste Wechselwirkungsterm repräsentiert die elektrostatische Abstoßung durch die anderen Elektronen, der zweite Term ist die Austauschwechselwirkung.

Atome in Hartree-Fock-Näherung II

- ▶ Um das Problem handhabbar zu machen, werden die Wechselwirkungsterme über die Richtung von $\vec{r}_i$ gemittelt, d.h. sie werden kugelsymmetrisch. Die Gleichungen werden dann solange iteriert, bis eine selbstkonsistente Lösung erreicht ist.
- ▶ Gruppentheorie kommt in Spiel, wenn man beachtet, daß die Gleichungen mit diesen Näherungen invariant unter unabhängigen Drehungen der einzelnen Koordinaten $\vec{r}_i$ sind. Die Symmetriegruppe ist also $SO(3)^n$. Da wir bisher auch Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt haben, entspricht jeder Faktor sogar $SO(3)_l \times SO(3)_s$.
- ▶ Die Entartung eines n -Elektronen-Zustands aus Orbitalen mit den Quantenzahlen l_i ist also $\prod_{i=1}^n 2(2l_i + 1)/n!$, wobei einige der Zustände durch Antisymmetrisierung entfallen können.

Atome in Hartree-Fock-Näherung III

- ▶ Diese hohe Entartung ist ein Artefakt der Näherung durch ein selbst-konsistentes Feld. Wird das ursprüngliche Potential zumindest in Störungsrechnung einbezogen, reduziert sich die Symmetrie auf $SO(3)_l \times SO(3)_s$. Nach Einbeziehung von Spin-Bahn-Kopplung sogar auf $SO(3)$ (d.h. gemeinsame Drehung aller Koordinaten und Spins).
- ▶ Die Energieniveaus (Terme) werden dann durch den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ charakterisiert.

Beispiel Kohlenstoff:

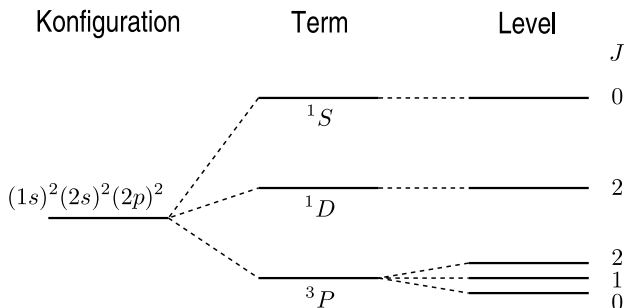
- ▶ Kohlenstoff hat 6 Elektronen in der Konfiguration $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$, das heißt je zwei Elektronen in S-Wellenfunktionen ($l = 0$) mit unterschiedlichem Radialteil, und zwei Elektronen in P-Wellenfunktionen.
- ▶ Die S-Schalen sind weitgehend abgeschlossen und wir können uns auf die 2 Valenzelektronen in der P-Schale konzentrieren. Bei $2 \times 3 = 6$ Zuständen und 2 Elektronen gibt es $\binom{6}{2} = 15$ Möglichkeiten

Atome in Hartree-Fock-Näherung IV

- ▶ Im ungemittelten Potential ohne Spin-Bahn-Kopplung werden die Energieniveaus durch Gesamtbahndrehimpuls L und Gesamtspin S charakterisiert.
- ▶ Aus den beiden Elektronen mit $l = 1$ kann man gemäß der Clebsch-Gordon-Reihe die Werte $L = 0, 1, 2$ erzeugen, in spektroskopischer Notation S, P, D. Die Entartungen sind 1, 3, 5.
- ▶ Die beiden Spins können zu einem Singulett oder einem Triplett kombiniert werden, $S = 0, 1$. Die Entartungen sind 1, 3.
- ▶ Kombiniert man alle Entartungen, ergeben sich mit $4 \times 9 = 36$ zuviele Zustände. Dies liegt daran, daß die Antisymmetrisierung noch nicht berücksichtigt wurde. $S = 0$ und $L = 1$ sind antisymmetrisch, $S = 1$, $L = 0, 2$ sind symmetrisch.
- ▶ Es sind also nur die Kombinationen $S = 0$ mit $L = 0, 2$ und $S = 1$ mit $L = 1$ erlaubt, d.h. in spektroskopischer Notation mit ^{2S+1}L die Zustände 1S , 1D und 3P . Die Summe der Entartungsgrade ergibt $1 + 5 + 3 \times 3 = 15$ Zustände

Atome in Hartree-Fock-Näherung V

- ▶ Wird schließlich Spin-Bahn-Wechselwirkung berücksichtigt, spaltet der Term 3P auf. Gemäß CG Reihe ergeben sich aus $S = L = 1$ die Werte $J = 0, 1, 2$.
- ▶ Insgesamt beobachtet man folgendes Termschema:



8.2 „Zufällige“ Entartung beim H-Atom und $SO(4)$

- ▶ Im Laufe der Vorlesung hatten wir bereits mehrfach gesehen, daß Entartungen häufig durch (z.T. nicht offensichtliche) Symmetrien des Problems verursacht werden. Ein Beispiel bietet das **Wasserstoff-Atom im nicht-relativistischen Fall**.
- ▶ Ein gewöhnliches Zentral-Potential hat wegen seiner Rotationsinvarianz die Symmetrie $SO(3)$. Das Potential $1/r$ hat jedoch eine weitere Symmetrie, die seine Symmetriegruppe auf $SO(4)$ erweitert. Letztere ist lokal isomorph zu $SO(3) \times SO(3)$.
- ▶ Diese erweiterte Symmetrie führt einerseits dazu, daß Eigenwerte zu gleicher Hauptquantenzahl n und unterschiedlichem Drehimpuls l entartet sind (insgesamt n^2). Andererseits kann die Symmetrie zur **algebraischen** Berechnung der Spektren benutzt werden.
- ▶ Der Hamiltonoperator des Wasserstoff-Problems ist:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\kappa}{r}$$

Kepler-Problem & Runge-Lenz-Vektor I

- Die Rotationsinvarianz zeigt sich in

$$[\vec{L}, H] = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{L} = \hbar \vec{X},$$

d.h. $\vec{L}$ ist zeitlich konstant

- Im klassischen Fall ergibt sich das gleiche Resultat,

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right) \times \vec{p} + \vec{r} \times \left(\frac{d\vec{p}}{dt} \right) = 0,$$

aus den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{p}}{dt} &= -\frac{\kappa}{r^3} \vec{r} \\ \frac{d\vec{r}}{dt} &= \frac{\vec{p}}{m} \end{aligned}$$

Kepler-Problem & Runge-Lenz-Vektor II

- ▶ Erhaltung des Drehimpulses (eine vektorielle Größe) bedeutet, daß die Bewegung in einer Ebene normal zu $\vec{L}$ abläuft. Beim Potential $1/r$ gibt es einen weiteren Erhaltungssatz: Die Ellipsen gebundener Bahnen liegen fest, d.h. es gibt keine Periheldrehung. Man erwartet deshalb, daß es eine Erhaltungsgröße gibt, die mit der Lage der Ellipsen verbunden ist.
- ▶ Tatsächlich gibt es eine solche Größe: den **Runge-Lenz-Vektor**

$$\vec{M} = \vec{v} \times \vec{L} - \frac{\kappa \vec{r}}{r},$$

der parallel zur Hauptachse der Ellipsenbahn ist.

- ▶ Tatsächlich gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} &= \left(\frac{d\vec{v}}{dt} \right) \times \vec{L} - \kappa \frac{d}{dt} \frac{\vec{r}}{r} \\ &= - \left(\frac{\kappa}{mr^3} \right) \vec{r} \times \vec{L} - \left(\frac{\kappa}{mr} \right) [\vec{p} - \vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{p})/r^2] = 0 \end{aligned}$$

Kepler-Problem & Runge-Lenz-Vektor III

- ▶ Außerdem ist $\vec{M}$ senkrecht zu $\vec{L}$, d.h. $\vec{L} \cdot \vec{M} = 0$.
- ▶ Daß $\vec{M}$ in Richtung der Hauptachse zeigt, erkennt man, wenn man das Skalarprodukt mit $\vec{r}$ bildet:

$$\vec{r} \cdot \vec{M} = (\vec{r} \times \vec{v}) \cdot \vec{L} - \kappa r = \vec{L}^2/m - \kappa r$$

Mit ϕ als Winkel zwischen $\vec{r}$ und $\vec{M}$ also:

$$r(\kappa + M \cos \phi) = \vec{L}^2/m,$$

was gerade der Bahngleichung in Polarkoordinaten entspricht,

$$r(\phi) = \frac{\vec{L}^2}{m(M \cos \phi + \kappa)}$$

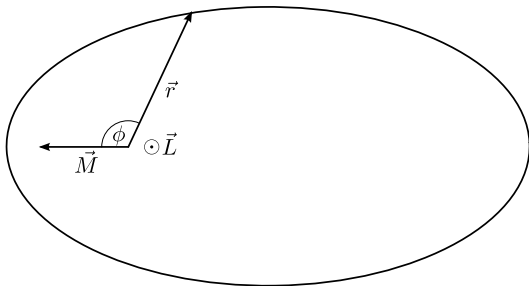
Kepler-Problem & Runge-Lenz-Vektor IV

- Der Betrag von $\vec{M}$,

$$M = \sqrt{2E\vec{L}^2/m + \kappa^2}$$

bestimmt also die Exzentrizität, $\varepsilon = M/(m\kappa)$.

- Das klassische Problem ist also gelöst, sobald man aus den Anfangsbedingungen die beiden Erhaltungsgrößen $\vec{M}$ und $\vec{L}$ bestimmt hat.



Wasserstoff-Atom algebraisch I

- Die quantenmechanische Fassung des Runge-Lenz-Vektors erhält man, indem man $\vec{v}$ durch $\vec{p}/m$ ersetzt. Da allerdings $\vec{p}$ nicht mit $\vec{L}$ vertauscht, muss noch symmetrisiert werden,

$$\vec{M} = \frac{\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}}{2m} - \frac{\kappa \vec{r}}{r}$$

- Nach länglicher aber einfacher Algebra erhält man unter Verwendung der kanonischen Vertauschungsrelation $[r_i, p_j] = i \hbar \delta_{ij}$ die folgenden Beziehungen:

$$[H, \vec{M}] = 0$$

$$[L_i, M_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} M_k$$

$$[L_i, L_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

$$[M_i, M_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} (-2H/m) L_k$$

Wasserstoff-Atom algebraisch II

- ▶ Wie erwartet, ist $\vec{M}$ eine Erhaltungsgröße und benimmt sich wie ein Vektor. Darüberhinaus sind die Vertauschungsrelationen der sechs Operatoren $\vec{L}$ und $\vec{M}$ abgeschlossen und bilden eine größere Algebra als $SO(3)$.
- ▶ Die Struktur dieser Algebra läßt sich durch einige Umdefinitionen klarer herausarbeiten. Sei zuerst

$$\vec{M}' = \frac{\vec{M}}{\sqrt{-2H/m}}$$

Hierbei nehmen wir an, daß uns nur die Bindungszustände des Wasserstoffproblems interessieren, daß also $E < 0$ ist und die Wurzel reell.

- ▶ Wir erreichen dadurch

$$[M'_i, M'_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

- Aus $\vec{L}$ und $\vec{M}'$ bilden wir die Operatoren

$$\vec{J}^{(1)} = (\vec{L} + \vec{M}')/2$$

$$\vec{J}^{(2)} = (\vec{L} - \vec{M}')/2$$

für die man die Vertauschungsrelationen

$$[J_i^{(1)}, J_j^{(1)}] = i \hbar \varepsilon_{ijk} J_k^{(1)}$$

$$[J_i^{(2)}, J_j^{(2)}] = i \hbar \varepsilon_{ijk} J_k^{(2)}$$

$$[J_i^{(1)}, J_j^{(2)}] = 0$$

beweisen kann.

Wasserstoff-Atom algebraisch IV

- ▶ Die Operatoren $\vec{J}^{(k)}$ erfüllen jeder für sich die $SO(3)$ -Algebra und sind unabhängig voneinander (=vertauschen). Wir haben es also mit einer Algebra $SO(3) \times SO(3)$ bzw. $SU(2) \times SU(2)$ zu tun, deren Eigenschaften wir leicht mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Reihe untersuchen können.
- ▶ Alternativ kann die Algebra auch als $SO(4)$ beschrieben werden, die durch folgende Operatoren erzeugt wird:

$$L_{\mu\nu} = x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu$$

Hierbei gilt $\mu, \nu = 1, \dots, 3$ und $[x_i, p_j] = i \hbar \delta_{ij}$.

Wasserstoff-Atom algebraisch V

- Neben der Algebra gibt es noch zwei weitere wichtige Beziehungen zwischen $\vec{M}$, $\vec{L}$ und H , die sich an das klassische Vorbild anlehnen. Wie dort, sind $\vec{M}$ und $\vec{L}$ orthogonal,

$$\vec{L} \cdot \vec{M} = \vec{M} \cdot \vec{L} = 0$$

Außerdem kann man zeigen, daß

$$\vec{M}^2 = (2H/m)(\vec{L}^2 + \hbar^2) + \kappa^2$$

was im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ ins klassische Ergebnis übergeht.

- Umformuliert ergibt sich:

$$-\frac{m\kappa^2}{2H} = (\vec{M}')^2 + \vec{L}^2 + \hbar^2 = 2(\vec{J}^{(1)})^2 + 2(\vec{J}^{(2)})^2 + \hbar^2,$$

wobei wir die Eigenzustände und insbesondere die Eigenwerte der rechten Seite sofort angeben können: $2\hbar^2(j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 1)$

Wasserstoff-Atom algebraisch VI

- ▶ Wegen der Orthogonalität von $\vec{M}$ und $\vec{L}$ gilt außerdem

$$\vec{M} \cdot \vec{L} = \vec{M}' \cdot \vec{L} = (\vec{J}^{(1)} - \vec{J}^{(2)}) \cdot (\vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}) = (\vec{J}^{(1)})^2 - (\vec{J}^{(2)})^2 = 0$$

d.h. es muß $j_1 = j_2 =: j$ gelten.

- ▶ Damit haben wir das Eigenwert-Problem des Wasserstoff-Atoms gelöst:

$$-\frac{m\kappa^2}{2E} = \hbar^2[4j(j+1) + 1] = \hbar^2(2j+1)^2$$

$$E_n = -\frac{m\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} \quad \text{mit} \quad n = (2j+1) = 1, 2, \dots$$

- ▶ Diese Energie hängt nicht vom Drehimpuls $\vec{L}$ ab und da jeder der beiden Drehimpulse $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}^{(2)}$ genau $(2j+1)$ Richtungen annehmen kann, ist die Entartung gerade $(2j+1)^2 = n^2$.

Wasserstoff-Atom algebraisch VII

- ▶ Mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Reihe können wir aus den entarteten Zuständen $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ Eigenzustände von $\vec{L} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$ konstruieren. Offensichtlich kann l dabei die Werte $j_1 - j_2 = 0$ bis $j_1 + j_2 = 2j$ annehmen.
- ▶ Wir erhalten also das bekannte Ergebnis $0 \leq l \leq n - 1$.

9 SU(N) & etwas Teilchenphysik

9.1 Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$

- ▶ Es wurde bereits mehrfach erwähnt, daß $SU(2)$ und $SO(3)$ eng miteinander verwandt sind. Nachfolgend soll dies näher ausgearbeitet werden:
- ▶ Die bekannten Vertauschungsrelationen der Generatoren von $SO(3)$,

$$[X_i, X_j] = i \varepsilon_{ijk} X_k$$

können über $X_i = \sigma_i/2$ mit folgenden 2×2 -Matrizen erfüllt werden:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dies sind die **Pauli Matrizen**. Natürlich können die Matrizen zyklisch vertauscht und mit anderen Phasenfaktoren versehen werden.

Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ I

- ▶ Bei den drei Generatoren $X_i = \sigma_i/2$ handelt es sich um Hermitesche, spur-freie Matrizen. Tatsächlich bilden die drei Matrizen sogar eine Basis für allgemeine Hermitesche, spur-freie Matrizen

$$H = \begin{pmatrix} c & a - i b \\ a + i b & -c \end{pmatrix} = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z$$

mit $a, b, c \in \mathbb{R}$.

- ▶ Durch Potenzieren erzeugen die X_i die gesamte Gruppe unitärer 2×2 -Matrizen mit Determinante eins, d.h. die *speziellen* unitären Matrizen, $SU(2)$. Ein beliebiges Element der Gruppe kann also geschrieben werden als:

$$U = \exp(-i \vec{\sigma} \cdot \vec{\alpha}/2)$$

Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ II

- ▶ Um eine Verbindung zu $SO(3)$ herzustellen, schreiben wir jeden infinitesimalen Generator $\vec{\alpha}$ als $\vec{\alpha} = \vec{n}\theta$, wobei wie früher $\vec{n}$ ein Einheitsvektor und θ ein Winkel ist.
- ▶ Wegen

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

kann obige Exponential-Reihe leicht ausgewertet werden und ergibt:

$$U = \cos \frac{\theta}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \sin \frac{\theta}{2}$$

- ▶ Die Gruppe $SO(3)$ kann genauso parametrisiert werden, d.h. zu jedem $\vec{n}$ und θ gibt es eine 3×3 -Drehmatrix

$$R_{\vec{n}}(\theta) = e^{-i\theta\vec{n}\cdot\vec{X}}$$

und zu jeder solchen Matrix ein Paar $\vec{n}$ und θ

Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ III

- ▶ Auf diese Weise erhalten wir einen **Homomorphismus** $M : SU(2) \rightarrow SO(3)$. Allerdings handelt es sich hier nicht um eine 1:1 Abbildung, denn ihr Kern ist nicht-trivial:
- ▶ An dieser Stelle tritt nämlich die unterschiedliche Periodizität 2π für $SO(3)$ vs. 4π für $SU(2)$ in Erscheinung. Mit $\theta = 2\pi$ ergibt sich $U(2\pi) = -1$, während man für die zugehörige $SO(3)$ -Matrix $R(2\pi) = 1 = R(0)$ erhält. Das heißt, zwei unterschiedliche Elemente von $SU(2)$, $U(0)$ und $U(2\pi)$, werden auf das gleiche Element von $SO(3)$, $R(0)$, abgebildet.
- ▶ Der Kern des Homomorphismus M ist also nicht-trivial und besteht aus den Elementen

$$K = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$$

Der Kern K ist gleichzeitig das **Zentrum Z** der Gruppe $SU(2)$, das von allen Elementen gebildet wird, die mit allen Gruppenelementen vertauschen, $Z = \{z \in G \mid zg = gz \ \forall g \in G\}$

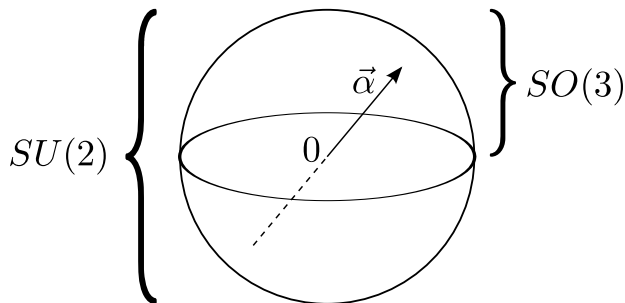
Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ IV

- ▶ K bildet eine normale Untergruppe $Z_2 \simeq C_2$, d.h. der genaue Zusammenhang zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ ist

$$SO(3) \simeq SU(2)/Z_2$$

- ▶ Die beiden Gruppen unterscheiden sich in ihren globalen Eigenschaften, werden aber von der gleichen Algebra erzeugt, die die Struktur der Gruppe in der Nähe des Einselements beschreibt.
- ▶ Der Zusammenhang kann auch graphisch dargestellt werden:

Die Beziehung zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$ V



Der Parameterraum $\vec{\alpha} = \vec{n}\theta$ von $SU(2)$ entspricht dem gesamten Inneren der Kugel vom Radius 2π , da $U_{\vec{n}}(\theta) = U_{-\vec{n}}(2\pi - \theta)$. Der Parameterraum von $SO(3)$ umfaßt dagegen nur die obere Hälfte der Kugel.

9.2 $SU(2)$

Quarks – Isospin als $SU(2)$

- ▶ Isospin $\vec{I}$ wurde von Heisenberg eingeführt, um folgende Symmetrien zu beschreiben:
 - ▶ Die Masse von Neutron und Proton (den Nukleonen) ist nahezu gleich. Bis auf ihre Ladung unterscheiden sich beide kaum.
 - ▶ Die Starke Wechselwirkung zwischen einem Paar von Nukleonen ist nahezu unabhängig davon, ob es sich um Neutronen oder Proton handelt
 - ▶ Die Masse der Pionen (positiv, negativ & neutral), die die starke Wechselwirkung vermitteln, ist nahezu gleich.
- ▶ In der Hochenergie-Physik entspricht Masse Energie, $E = mc^2$, d.h. Entartungen in der Masse sind wie Entartungen von Energie-Eigenwerten auf Symmetrien zurückzuführen.

Quarks – Isospin als $SU(2)$ I

- Die Nukleonen bestehen aus elementarerer Bausteinen, den Quarks, und es zeigt sich, daß die Symmetrien der Nukleonen und Pionen aus den Symmetrien-Eigenschaften von zwei „Flavours“ von Quarks abgeleitet werden können. Die sogenannten up- und down-Quarks (u und d) verhalten sich wie ein $SU(2)$ -Dublett:

$$q = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$$

d.h. u hat $I_z = 1/2$ und d hat $I_z = -1/2$

- Die Nukleonen entsprechen folgenden Quark-Kombinationen:

$$p = uud \quad (\text{Proton})$$

$$n = udd \quad (\text{Neutron})$$

Dies entspricht einem Term in der Clebsch-Gordan-Zerlegung des Dreifach-Produkts von Isospin-1/2, $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}$

Quarks – Isospin als $SU(2)$ II

- ▶ Man erhält diese Zerlegung, indem man erst zwei Spins, und dann den dritten mit der Summe koppelt. Der erste Term der Zerlegung ($3/2$) entspricht der sogenannten Δ -Resonanz.
- ▶ Die gleichen Überlegungen gelten auch für den gewöhnlichen Spin. Quarks sind Spin- $1/2$ Fermionen, d.h. Kombinationen von drei Quarks haben Spin $3/2$ (wie Δ) oder $1/2$ (wie Nukleonen)
- ▶ Die Pionen bestehen jeweils aus einem Quark und einem Anti-Quark, wobei die Anti-Quarks erneut ein $SU(2)$ -Dublett darstellen:

$$\bar{q} = \begin{pmatrix} -\bar{d} \\ \bar{u} \end{pmatrix}$$

Quarks – Isospin als $SU(2)$ III

- ▶ Die drei Ladungszustände des Pions sind

$$\pi^+ = -u\bar{d}$$

$$\pi^0 = (u\bar{u} - d\bar{d})/\sqrt{2}$$

$$\pi^- = d\bar{u}$$

Dies entspricht dem Isospin-1 Zustand aus der Zerlegung $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$. Der andere Zustand entspricht einem Teilchen namens η .

- ▶ Der Spin-0 der Pionen ergibt sich aus dem Singulett-Zustand der beiden Spins-1/2 der Quarks

$SU(2)$ -Tensoren I

- ▶ Nach den vorangegangenen Beispielen sollen nun die irreduziblen Darstellungen von $SU(2)$ genauer klassifiziert werden. Darüberhinaus sollen Produkte von Darstellungen in Clebsch-Gordan-Reihen zerlegt werden.
- ▶ Während wir uns bei $SO(3)$ auf die Darstellungs-Matrizen und ihre Spuren (Charaktere) konzentriert haben, ist es bei $SU(2)$ günstiger, mit den Vektorräumen zu arbeiten, in denen die Darstellungen „leben“
- ▶ Ähnlich wie beim Quark-Modell können diese Vektorräume in Form von Produkten aus den elementaren N -dimensionalen Darstellungen von $SU(N)$ aufgebaut werden

$SU(2)$ -Tensoren II

- Die fundamentalen 2-dimensionalen irreduziblen Darstellungen der $SU(2)$ wirken auf 2-komponentige **Spinoren** ψ_a mit $a = 1, 2$, die den beiden Spinrichtungen $m = \pm 1/2$ entsprechen. Die Spinoren bezeichnen die Matricelemente, nicht die Vektoren selbst, $\psi_a = \langle a | \psi \rangle$. Dementsprechend transformieren sie sich unter Anwendung einer Operation $U \in SU(2)$ wie

$$\psi'_a = U_{ab} \psi_b$$

- Im Falle der allgemeinen Gruppe $SU(N)$ gibt es zwei Arten von Spinoren, solche mit oberen und solche mit unteren Indizes. Die Spinoren mit oberen Indizes transformieren sich durch Multiplikation mit den konjugierten Matrizen $U^* = (U^{-1})^T$,

$$\psi'^a = U_{ab}^* \psi^b$$

d.h. ψ^a transformiert sich wie ψ_a^* . Die Abbildung $D(U) = U^*$ erhält die Gruppenmultiplikation, d.h. die Matrizen U^* bilden eine Darstellung.

$SU(2)$ -Tensoren III

- Für $SU(2)$ sind die beiden Darstellungen äquivalent. Dies beweist man mit Hilfe der Matrix

$$C = i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \in SU(2),$$

die antisymmetrisch und anti-Hermiteisch ist und $C^2 = -1$ erfüllt.

- Beschreibt man mit C eine Basistransformation, erhält man für die Pauli-Matrizen:

$$C\sigma_x C^{-1} = (i\sigma_y)\sigma_x(-i\sigma_y) = \sigma_y(i\sigma_z) = -\sigma_x$$

$$C\sigma_y C^{-1} = \sigma_y$$

$$C\sigma_z C^{-1} = -\sigma_z$$

Die Matrizen σ_x , σ_z sind reell, σ_y rein imaginär, die vorangegangenen Gleichungen können also zusammengefaßt werden zu

$$C\vec{\sigma}C^{-1} = -\vec{\sigma}^*$$

$SU(2)$ -Tensoren IV

- Für ein beliebiges Element $U = \exp(-i \vec{\sigma} \cdot \vec{\alpha}/2) \in SU(2)$ erhält man damit

$$CUC^{-1} = U^*$$

- Die Abbildung $D : U \rightarrow U^*$ ist also ein innerer Automorphismus der Gruppe, d.h. einer der durch Konjugation erzeugt wird. Wir erinnern uns, daß Äquivalenz von Darstellungen gerade bedeutete, daß die zugehörigen Matrizen durch (die selbe) Ähnlichkeitstransformation miteinander verbunden sind.
- Obige Gleichung kann auch umformuliert werden zu:

$$UCU^T = C \quad \text{bzw.} \quad U^T CU = C$$

- Faßt man C als Tensor statt als Matrix auf, dann bedeuten die letzten beiden Gleichungen, daß es sich um einen unter den Gruppenoperationen **invarianten** Tensor mit zwei Indizes handelt.

$SU(2)$ -Tensoren V

- ▶ Unter Verwendung des total antisymmetrischen Tensors mit zwei Indizes, ε_{ij} , können wir schreiben:

$$C_{ab} = \varepsilon_{ab} ,$$

und bei Anwendung einer Gruppenoperation gilt

$$\varepsilon'_{ab} := U_{ac} U_{bd} \varepsilon_{cd} = \varepsilon_{ab}$$

- ▶ Mit Hilfe von C können Spinoren mit unteren Indizes in Spinoren mit oberen Indizes überführt werden,

$$\psi^a = C_{ab} \psi_b$$

- ▶ Um zu beweisen, daß sich das neue Object tatsächlich mit U^* transformiert, schreiben wir:

$$\psi^{a'} = C_{ab} U_{bc} \psi_c = U_{ab}^* C_{bc} \psi_c = U_{ab}^* \psi^b$$

- ▶ Durch Bildung des komplex Konjugierten von $UCU^T = C$ findet man, daß C auch bzgl. der Matrizen U^* invariant ist, $U^*C(U^*)^T = C$. Man kann es deshalb auch als Tensor mit oberen Indizes auffassen, und gelangt zu einer aus der Relativitätstheorie bekannten Schreibweise

$$\psi^a = C^{ab}\psi_b,$$

bei der stets Summation über ein Paar gleicher oberer und unterer Indizes (=Kontraktion) angenommen wird. C ist also so etwas Ähnliches wie die Metrik $g^{\mu\nu}$.

- ▶ Wendet man diese Schreibweise konsequent an, dann tragen die Matrizen $U \in SU(2)$ stets einen oberen und einen unteren Index,

$$\psi'_a = U_a^b \psi_b$$

- ▶ Vor diesem Hintergrund können wir nun auch das Vorzeichen in der Definition der Anti-Quarks,

$$\bar{q} = \begin{pmatrix} -\bar{d} \\ \bar{u} \end{pmatrix},$$

erklären: In der Feldtheorie werden den Antiteilchen jeweils komplex konjugierte Wellenfunktionen zugeordnet. Ein Anti-Quark-Spinor sollte deshalb *obere* Indizes tragen, $\bar{q}^a$ mit $\bar{q}^1 = \bar{u}$ und $\bar{q}^2 = \bar{d}$. Bestehen wir jedoch auf unteren Indizes, müssen wir die Inverse von C anwenden,

$$\bar{q}_a = (C^{-1})_{ab} \bar{q}^b \quad \text{mit} \quad (C^{-1})_{ab} = -\varepsilon_{ab}$$

Ausgeschrieben in Komponenten ergibt sich genau $\bar{q}_1 = -\bar{d}$ und $\bar{q}_2 = \bar{u}$

$SU(2)$ -Tensoren VIII

- ▶ Die Verwendung der „relativistischen“ Schreibweise offenbart noch einen anderen Effekt: Objekte, bei denen ein oberer und ein unterer Index kontrahiert werden, transformieren sich jeweils so, als ob das betreffende Indexpaar nicht vorhanden wäre. Das heißt, jede **Kontraktion** über einen oberen und einen unteren Index **erzeugt** einen **invarianten Skalar**.
- ▶ Insbesondere gilt:

$$\begin{aligned}\psi'^a \phi'_a &= \varepsilon^{ab} \psi'_b \phi'_a = \varepsilon^{ab} U_b^d \psi_d U_a^c \phi_c \\ &= (U^T C U)^{cd} \psi_d \phi_c \\ &= \varepsilon^{cd} \psi_d \phi_c = \psi^c \phi_c\end{aligned}$$

- ▶ Die oberen und unteren Indizes komplizierterer Tensoren transformieren sich auf die gleiche Weise, d.h. jede Kontraktion eines Paares oberer und unterer Indizes ergibt einen Tensor niedrigerer Ordnung multipliziert mit einem invarianten Skalar.

$SU(2)$ -Tensoren IX

- ▶ Die obige Gleichung kann auch anders verstanden werden: Bei der Diskussion des Leitfähigkeitstensors hatten wir gesehen, daß sich die symmetrischen und die antisymmetrischen Anteile unabhängig voneinander transformieren, d.h. sie bilden jeweils invariante Unterräume (=Darstellungen).
- ▶ Ein allgemeines Produkt $\psi_a\phi_b$ kann in drei symmetrische ($\psi_1\phi_1$, $\psi_1\phi_2 + \psi_2\phi_1$, $\psi_2\phi_2$) und ein antisymmetrisches ($\psi_1\phi_2 - \psi_2\phi_1 \equiv \varepsilon^{ab}\psi_a\phi_b$) Element zerlegt werden. Da es nur ein antisymmetrisches Element gibt, muß es invariant unter den Gruppenoperationen sein.
- ▶ In der Sprache von Spins entspricht der antisymmetrische Zustand gerade dem durch Addition zweier Spin-1/2 gebildeten Singulett
- ▶ Betrachten wir nun, wie **höherdimensionale irreduzible Tensor-Darstellungen** systematisch aus den fundamentalen 2-dimensionalen Darstellungen aufgebaut werden können:

- Der erste Schritt, den wir bereits ausgeführt haben, ist die Zerlegung des Produkts $\psi_a\phi_b$ in seine irreduziblen Bestandteile, den symmetrischen und den antisymmetrischen. Formal führen wir folgende Schreibweisen ein:

$$\psi_a\phi_b = (\psi_{(a}\phi_{b)} + \psi_{[a}\phi_{b]})/2$$

mit

$$\psi_{(a}\phi_{b)} = \psi_a\phi_b + \psi_b\phi_a$$

$$\psi_{[a}\phi_{b]} = \psi_a\phi_b - \psi_b\phi_a$$

$SU(2)$ -Tensoren XI

- Diese Formeln können auch graphisch mit den später noch genauer zu erläuternden **Young-Tableaux** dargestellt werden

$$\boxed{a} \otimes \boxed{b} = \boxed{a \ b} \oplus \boxed{\begin{smallmatrix} a \\ b \end{smallmatrix}}$$

Horizontal angeordnete Kästchen bezeichnen dabei Symmetrisierung der betreffenden Indizes, vertikale die Antisymmetrisierung. Bezeichnet man die Darstellungen anhand ihrer Entartung $(2j + 1)$, so entspricht obige Zerlegung der bekannten Clebsch-Gordan-Reihe:

$$2 \otimes 2 = 3 \oplus 1$$

- Für zwei $SU(2)$ Spinoren sind damit alle Möglichkeiten ausgeschöpft, interessanter wird es erst mit mehr Spinoren:

- ▶ Als nächstes konstruieren wir einen 3-Index-Tensor aus dem symmetrischen Tensor $\psi_{(a}\phi_{b)}$ und einem weiteren Spinor χ_c . Der zusätzliche Index kann bzgl. der anderen beiden symmetrisiert oder mit einem der beiden antisymmetrisiert werden. Dementsprechend erhält man einen total symmetrischen Tensor $\xi_{(abc)}$ bzw. einen effektiven Spinor, da die Antisymmetrisierung (=Kontraktion) die Zahl der Indizes um 2 dezimiert.
- ▶ Die Zahl der unabhängigen symmetrischen Tensoren $\xi_{(abc)}$ ist *vier*: $\xi_{(111)}$, $\xi_{(112)}$, $\xi_{(122)}$ und $\xi_{(222)}$, d.h. die entsprechende Darstellung ist 4-dimensional
- ▶ Der aus der Antisymmetrisierung resultierende Spinor hat (wie für $SU(2)$ üblich) Dimension 2

$SU(2)$ -Tensoren XIII

- Insgesamt ergibt sich also die Clebsch-Gordan-Reihe

$$3 \otimes 2 = 4 \oplus 2$$

Oder graphisch mit Young-Tableaux

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$$

Im zweiten Term wurde die vertikale Spalte weggelassen, da die zugehörige Kontraktion ein invariantes Objekt ergibt.

- Ausgeschrieben entsprechen die obigen Gleichungen:

$$\begin{aligned} 3\psi_{(a}\phi_{b)}\chi_c &= (\psi_{(a}\phi_{b)}\chi_c + \psi_{(b}\phi_c)\chi_a + \psi_{(c}\phi_a)\chi_b) \\ &\quad + (\psi_{(a}\phi_{b)}\chi_c - \psi_{(c}\phi_b)\chi_a) + (\psi_{(a}\phi_{b)}\chi_c - \psi_{(a}\phi_c)\chi_b) \end{aligned}$$

Die letzten Terme können auch geschrieben werden als

$$\varepsilon_{ac}\eta_b \text{ und } \varepsilon_{bc}\eta_a \text{ mit } \eta_b := \psi_{(d}\phi_{b)}\chi^d$$

$SU(2)$ -Tensoren XIV

- ▶ Die vorangegangenen Beispiele können leicht auf n -Index-Tensoren erweitert werden. Man findet, daß die irreduziblen Darstellungen von $SU(2)$ von den Tensoren mit vollständig symmetrisierten unteren Indizes, $\phi_{(abc\dots)} = \boxed{}\boxed{}\boxed{}\cdots$, erzeugt werden.
- ▶ Die Dimension der zu einem Tensor mit n Indizes (n Kästchen) gehörenden Darstellung ist $n + 1$, da die Anzahl der in $\xi_{(11\dots 22)}$ auftretenden Einsen von 0 bis n laufen kann.
- ▶ Werden zwei Darstellungen ψ mit n und ϕ mit m Indizes multipliziert, ergibt sich eine *reduzible* Darstellung, die wieder in eine Clebsch-Gordan-Summe über irreduzible Darstellungen zerlegt werden kann. Invariante Unterräume ergeben sich, indem man jeweils über Paare von Indizes aus ϕ und ψ kontrahiert. Auf diese Weise reduziert sich die Dimension jeweils in Schritten von 2.

- Graphisch ergibt sich folgende CG-Reihe:

$$\underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_m \cdots \otimes \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_n \cdots = \bigoplus_{l=|m-n|}^{m+n} \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_l \cdots$$

wobei die Summe über l die Schrittweite 2 hat

- Mit $m = 2j_1$ und $n = 2j_2$ entspricht dies gerade der bekannten Clebsch-Gordan-Zerlegung für $SO(3)$,

$$(2j_1 + 1) \otimes (2j_2 + 1) = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j + 1)$$

9.3 $SU(3)$

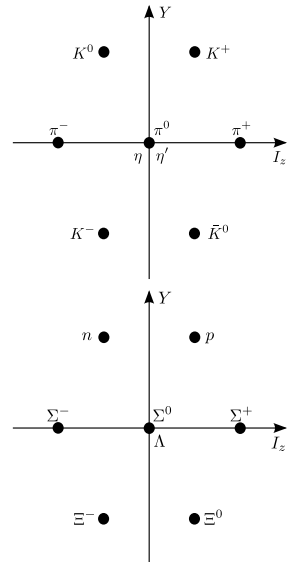
- ▶ Die Gruppe $SU(2)$ hatten wir am Beispiel von Isospin und den beiden Quark-Flavours u und d eingeführt. Außerdem hatten wir angedeutet, daß später noch weitere Quarks gefunden und die zugehörige Symmetrie zu $SU(N)$ erweitert wurde.
- ▶ Diese Erweiterungen erfolgten schrittweise und waren eng an die Erhöhung der in Beschleunigern verfügbaren Energie gekoppelt, die nach und nach zur Entdeckung eines „Zoos“ neuer Teilchen führte.
- ▶ Eine Klasse von Teilchen zeichnete sich durch relativ lange Lebensdauern von 10^{-8} bis 10^{-10} s aus, und die Produktionsraten dieser neuen Teilchen ließen auf die starke Wechselwirkung als zugrundeliegenden Mechanismus schließen. Wäre die starke Wechselwirkung auch für den Zerfall der Teilchen verantwortlich, hätte man allerdings nur sehr kurze Lebensdauern erwartet.
- ▶ Als Erklärung wurde deshalb eine neue additive Quantenzahl vorgeschlagen, die unter starker Wechselwirkung erhalten bleibt, nicht jedoch unter der schwachen: die sogenannte **Strangeness S**

- ▶ Die neuen Teilchen konnten damit leicht als Paare $S\bar{S}$ erzeugt werden, zerfielen aber einzeln nur langsam über die schwache Wechselwirkung
- ▶ Nach und nach konnten Multiplets von solchen Teilchen identifiziert werden, die sich in Isospin I und Strangeness S unterschieden, sich aber in Drehimpuls J und Parität P glichen. Wie schon die Baryonen und Pionen, hatten die neuen Teilchen innerhalb eines Multipletts ähnliche Massen, allerdings mit etwas größerer Streuung ($\sim 20\%$).

Strangeness II

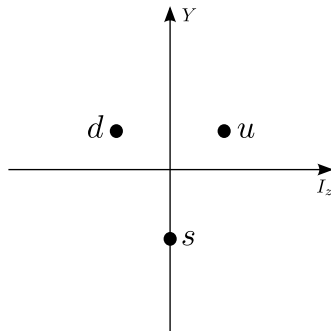
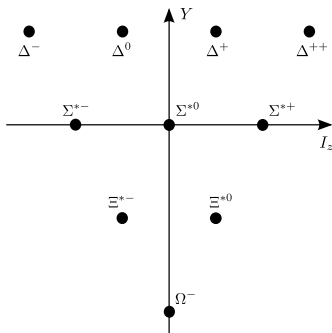
► Die am besten untersuchten Multipletts sind die folgenden:

- Pseudoskalare Mesonen P mit Spin-Parität $J^P = 0^-$: $\pi(\pi^+, \pi^0, \pi^-)$, $K(K^+, K^0)$, $\bar{K}(\bar{K}^0, K^-)$, η and η' , d.h. insgesamt 9 Teilchen. Zur Klassifikation kann man ein Diagramm (I_z, Y) verwenden, wobei Y die sogenannte Hyperladung bezeichnet, $Y = S - B$, mit B als Baryonen-Zahl ($=1$ für Nukleonen, $=0$ für Mesonen, die aus $q\bar{q}$ Paare sind)
- Neun Vektor Mesonen (Spin-1), bestehend aus $\rho(\rho^+, \rho^0, \rho^-)$, $K^*(K^{*+}, K^{*0})$, $\bar{K}^*(K^{*-}, \bar{K}^{*0})$, ω und ϕ , die das gleiche Muster wie die pseudoskalaren Mesonen bilden
- Acht Baryonen, bestehend aus den Nukleonen (n, p) sowie $\Sigma(\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-)$, $\Xi(\Xi^0, \Xi^-)$ und Λ^0



Strangeness III

- ▶ Zehn Spin-3/2 Zustände, bestehend aus den Δ -Resonanzen, den Anregungen Σ^* und Ξ^* von Σ und Ξ , sowie dem Ω^- , einem Teilchen das vor seiner Entdeckung auf Basis der $SU(3)$ -Symmetrie vorhergesagt wurde
- ▶ Auf dem Niveau der Quarks kommt einfach ein weiteres hinzu, das Strangeness trägt.



- ▶ Damit kann die Struktur der Multipletts verstanden werden: Die drei Quarks bilden einen $SU(3)$ -Spinor mit Komponenten u, d, s . Hierbei tragen u, d Isospin $I = \pm 1/2$ und $Y = +1/3$, s hingegen $I = 0$ und $Y = -2/3$. Die Multiplets entstehen, wenn Produkte dieser elementaren $SU(3)$ -Darstellungen in ihre irreduziblen Bestandteile zerlegt werden.
- ▶ Alle obigen Teilchen ergeben sich als Kombinationen $q\bar{q}$ oder qqq .
- ▶ Zu beachten ist noch, daß sich bei $SU(N)$ mit $N > 2$ die Darstellungen N und $\bar{N}$ (komplex konjugiert) unterscheiden. Mehr dazu später.

$SU(3)$ Tensoren I

- Die fundamentalen 3-dimensionalen Darstellungen der $SU(3)$ werden von den Spinoren ψ_a mit $a = 1, 2, 3$ getragen, die sich transformieren wie:

$$\psi'_a = U_a^b \psi_b \quad \text{mit} \quad U \in SU(3)$$

- Im Gegensatz zu $SU(2)$ gibt es keinen inneren Automorphismus, der U mit U^* verbindet, d.h. die konjugierten Darstellungen $\bar{3}$, die auf Spinoren mit oberen Indizes wirken, sind andere inäquivalente Darstellungen
- Der invariante Tensor der $SU(3)$ ist nun ein 3-Index-Objekt, nämlich der total antisymmetrische Tensor ε_{abc} . Tatsächlich gilt

$$\varepsilon'_{abc} = U_a^d U_b^e U_c^f \varepsilon_{def} = (\det U) \varepsilon_{abc} = \varepsilon_{abc}$$

$SU(3)$ Tensoren II

- ▶ Erneut kann der Tensor ε_{abc} als Symbol mit oberen oder unteren Indizes verstanden und zur Hebung von Indizes benutzt werden. Allerdings verbindet er nicht ein Paar von oberen und unteren Indizes, sondern konvertiert ein Paar antisymmetrischer unterer Indizes in einen einzelnen oberen,

$$\psi^a = \varepsilon^{abc} \phi_{[bc]}$$

- ▶ Nur der antisymmetrische Teil eines allgemeinen Tensors kann gehoben werden, der symmetrische trägt wegen der Antisymmetrie von ε^{abc} nicht bei.
- ▶ Skalare Invarianten können wieder durch Kontraktion eines oberen und unteren Index erzeugt werden. Beispielsweise ergibt sich aus einem unteren Spinor χ_a und einem unteren antisymmetrischen Tensor $\psi_{[bc]}$

$$S := \varepsilon^{abc} \chi_a \psi_{[bc]} = \chi_a \psi^a$$

$SU(3)$ Tensoren III

- ▶ Die Dimension höherer Tensoren mit mehr Indizes kann mit ähnlichen Kontraktionen verringert werden. Ein Multi-Index-Tensor kann also durch die Prozesse Symmetrisierung, Antisymmetrisierung und Kontraktion zwischen oberen und unteren Indizes in seine irreduziblen Bestandteile zerlegt werden.
- ▶ Um dies zu illustrieren, bilden wir zuerst das Produkt $3 \otimes \bar{3}$ der beiden fundamentalen Darstellungen 3 und $\bar{3}$, was gerade den vorher diskutierten Mesonen $q\bar{q}$ entspricht
- ▶ Die Aufspaltung in symmetrischen und antisymmetrischen Anteil liefert

$$\psi_a \bar{\psi}^b = (\psi_a \bar{\psi}^b - \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_c \bar{\psi}^c) + \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_c \bar{\psi}^c$$

Der letzte Term ist invariant unter $SU(3)$ -Transformationen (Singulett), während der erste als spurfreie 3×3 Matrix einer 8-dimensionalen Darstellung entspricht.

$SU(3)$ Tensoren IV

- Wir finden also die Clebsch-Gordan-Reihe:

$$3 \otimes \bar{3} = 8 \oplus 1$$

- Um das gleiche Ergebnis mit Young-Tableaux darzustellen, benutzen wir, daß ein unterer Spinor ψ_a einem einzelnen Kästchen $\square$ entspricht, während der obere Spinor $\bar{\psi}^b$ als gehobenes antisymmetrisiertes Paar $[de]$ dargestellt wird. Wie früher eingeführt, entspricht ein solches Paar dem Tableau

$$\bar{\psi}^b = \varepsilon^{bde} \bar{\phi}_{[de]} \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

- Das Produkt $3 \otimes \bar{3}$ schreibt sich also:

$$\square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

$SU(3)$ Tensoren V

- ▶ Der letzte Term entspricht wieder der total antisymmetrischen Kombination der drei Indizes, ist also invariant unter den Gruppenoperationen. Die Spalte kann also gestrichen werden und liefert einen Skalar = 1-dimensionale Darstellung = kein Kästchen
- ▶ Das erste Tableau konnte bei $SU(2)$ auf einen einzelnen Spinor reduziert werden und hatte Dimension 2. Bei $SU(3)$ bleibt es so stehen und entspricht (wie später noch gezeigt wird) einer 8-dimensionalen irreduziblen Darstellung
- ▶ Nach diesen Überlegungen können wir nun das Multiplett der Pseudoskalaren Mesonen verstehen: Ausgehend von $\psi = (u, d, s)$ wird die 8-dimensionale Darstellung von $P_a^b = \psi_a \bar{\psi}^b - \frac{1}{3} \delta_a^b \psi_c \bar{\psi}^c$ gebildet. Die Nicht-diagonal-Einträge entsprechen direkt Teilchen, z.B. $P_1^2 = u\bar{d} = \pi^+$. Die Diagonal-Einträge sind etwas komplizierter, z.B. gilt $P_1^1 = u\bar{u} - (u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s})/3$, was umzuschreiben ist auf $P_1^1 = \pi^0/\sqrt{2} + \eta_8/\sqrt{6}$ mit $\pi^0 = (u\bar{u} - d\bar{d})/\sqrt{2}$ und $\eta_8 = (u\bar{u} + d\bar{d} - 2s\bar{s})/\sqrt{6}$.

- Insgesamt ergibt sich

$$P = \begin{pmatrix} \pi^0/\sqrt{2} + \eta_8/\sqrt{6} & \pi^+ & K^+ \\ \pi^- & -\pi^0/\sqrt{2} + \eta_8/\sqrt{6} & K^0 \\ K^- & \bar{K}^0 & -2\eta_8/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

- Bisher nicht aufgetaucht sind die Teilchen η und η' . Diese ergeben sich erst wenn man berücksichtigt, daß schwache und elektromagnetische Wechselwirkung die $SU(3)$ Symmetrie brechen und insbesondere zu einer Mischung des $I = Y = 0$ Zustands im Oktett, η_8 , und des Singulett-Zustands $\eta_1 = (u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s})/\sqrt{3}$ führen. Die Mischung ist klein für pseudoskalare Mesonen P , aber stark für Vektor-Mesonen V .
- Kommen wir nun zu den Baryonen qqq , d.h. den irreduziblen Darstellungen die aus dem Dreifach-Produkt $3 \otimes 3 \otimes 3$ entstehen:

$SU(3)$ Tensoren VII

- Als ersten Schritt betrachten wir $3 \otimes 3$, d.h. Tensoren $\psi_a \phi_b$: Da nur zwei untere Indizes vorkommen, gibt es keine Möglichkeit zur Kontraktion. Wir können lediglich eine Aufspaltung in symmetrischen und antisymmetrischen Anteil vornehmen:

$$\psi_a \phi_b = (\psi_{(a} \phi_{b)} + \psi_{[a} \phi_{b]})/\sqrt{2}$$

Beide Teile transformieren sich irreduzibel. Der letzte Term entspricht, da antisymmetrisch, einem Tensor (Spinor) mit oberem Index und bildet damit eine 3-dimensionale Darstellung. Der symmetrische Term entspricht also einer Darstellung der Dimension $9 - 3 = 6$, und wir können schreiben:

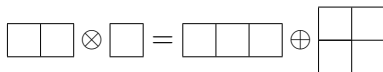
$$3 \otimes 3 = 6 \oplus \bar{3}$$

$$\square \otimes \square = \square \square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}$$

$SU(3)$ Tensoren VIII

- ▶ Im nächsten Schritt werde der symmetrische Anteil mit einem unteren Spinor χ_c multipliziert. Im Produkt $\psi_{(a}\phi_{b)}\chi_c$ kann der neue Index bzgl. der anderen beiden symmetrisiert oder antisymmetrisiert werden. Wie im $SU(2)$ -Fall erhalten wir einen total symmetrischen Tensor mit drei Indizes und einen gemischten Tensor.
- ▶ Der einzige Unterschied zu $SU(2)$ ist die Dimension der entstehenden Räume, da jeder Index nun 3 Werte annehmen kann. Statt 4 gibt es nun 10 total symmetrische 3-Index-Tensoren.
- ▶ Das verbleibende gemischte Objekt muß Dimension $6 \cdot 3 - 10 = 8$ haben. Es entspricht gerade dem oben berechneten Mesonen-Oktett
- ▶ Insgesamt gilt:

$$6 \otimes 3 = 10 \oplus 8$$


$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \square = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$$

$SU(3)$ Tensoren IX

- ▶ Was noch zu tun bleibt, ist die Multiplikation des antisymmetrischen Anteils von $\psi_a \phi_b$ mit dem Spinor χ_c . Dies ergibt aber gerade die vorher untersuchte CG-Reihe $3 \otimes \bar{3} = 8 \oplus 1$ für Mesonen.
- ▶ Damit ist die Zerlegung des Baryonen-Produkts qqq komplett,

$$3 \otimes 3 \otimes 3 = 10 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 1,$$

und die auftretenden Dimensionen entsprechen denen der beobachteten Multipletts.

- ▶ Die Teilchen können wieder den Symmetriezuständen zugeordnet werden. Beim Satz der 10 total symmetrischen Zustände (Dezett) enthalten die Δ kein s-Quark, also $D_{(111)} = uuu = \Delta^{++}$, $D_{(112)} = (uud + udu + duu)/3 = \Delta^+/\sqrt{3}$, etc. Die Σ^* enthalten jeweils ein s-Quark, die Ξ^* jeweils 2, und schließlich $D_{(333)} = sss = \Omega^-$.

$SU(3)$ Tensoren X

- Das Baryonen-Oktett kann als gemischter Tensor $B_{[ab]c}$ oder nach Hebung des antisymmetrischen Paares als B_c^d geschrieben werden:

$$B = \begin{pmatrix} \Sigma^0/\sqrt{2} + \Lambda/\sqrt{6} & \Sigma^+ & p \\ \Sigma^- & -\Sigma^0/\sqrt{2} + \Lambda/\sqrt{6} & n \\ \Xi^- & \Xi^0 & -2\Lambda/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

- Eine systematische Methode, die irreduziblen Tensoren (Darstellungen) der $SU(3)$ zu klassifizieren, wird im Buch

Sidney Coleman

Aspects of Symmetry

Cambridge University Press 1988

ISBN 978-0521318273

angegeben.

$SU(3)$ Tensoren XI

- Die kanonische Form dieser Tensoren ist

$$\hat{\phi}_{(ijk\dots)}^{(abc\dots)}$$

d.h. Tensoren mit m vollständig symmetrisierten oberen und n vollständig symmetrisierten unteren Indizes. Als zusätzliche Bedingung wird Spurfreiheit gefordert, sobald über ein beliebiges Paar oberer und unterer Indizes summiert wird,

$$\hat{\phi}_{(ajk\dots)}^{(abc\dots)} = 0$$

Dies wird durch den Hut symbolisiert.

- Wenn es sich bei diesen Tensoren um eine Basis handelt, kann jeder allgemeine Tensor $\phi_{ijk\dots}^{abc\dots}$ mittels Symmetrisierung, Antisymmetrisierung und Kontraktion in eine Linearkombination obiger Tensoren zerlegt werden. Ein allg. Beweis dieser Aussage führt hier zu weit.
- Stattdessen betrachten wir nur das Beispiel eines 4-Index-Tensors ϕ_{ij}^{ab} :

$SU(3)$ Tensoren XII

- ▶ Zuerst wird der Tensor spurfrei gemacht, d.h. ein Oktett der Form $\delta_i^a \phi_{cj}^{cb}$ subtrahiert.
- ▶ Es verbleibt ein Tensor $\hat{\phi}_{ij}^{ab}$, der bzgl. der oberen Indizes symmetrisiert und antisymmetrisiert werden kann,

$$\hat{\phi}_{ij}^{ab} = (\hat{\phi}_{ij}^{(ab)} + \hat{\phi}_{ij}^{[ab]})/2$$

- ▶ Das antisymmetrische Paar $[ab]$ kann zu einem unteren Index umgewandelt werden

$$\hat{\phi}_{ij}^{[ab]} = \varepsilon^{abk} \chi_{ijk}$$

Coleman bemerkte nun, daß χ_{ijk} bereits ein vollständig symmetrischer Tensor ist, d.h. in kanonischer Form vorliegt. Beweisen läßt sich dies durch Kontraktion mit ε^{pjk} , ε^{ipk} und ε^{ijp} , d.h. Antisymmetrisierung bzgl. (jk) , (ki) und (ij) . Alle diese Kontraktionen ergeben Null, d.h. χ_{ijk} ist symmetrisch.

- Zum Beweis betrachten wir $\varepsilon^{ijp}\chi_{ijk}$, das durch Einsetzen von

$$\varepsilon^{ijp}\varepsilon_{kcd} = \begin{vmatrix} \delta_k^i & \delta_c^i & \delta_d^i \\ \delta_k^j & \delta_c^j & \delta_d^j \\ \delta_k^p & \delta_c^p & \delta_d^p \end{vmatrix}$$

in die invertierte Definition von χ_{ijk} ,

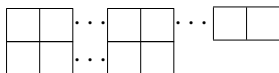
$$\chi_{ijk} = \varepsilon_{kcd}\hat{\phi}_{ij}^{[cd]}/2$$

ausgewertet wird. Die über δ s erzeugten Kontraktionen liefern jeweils Spuren von $\hat{\phi}$, die nach Voraussetzung Null sind. Ganz analog berechnet man auch die anderen Kontraktionen.

- ▶ Nachdem also gezeigt wurde, daß der antisymmetrische Anteil von $\hat{\phi}_{ij}^{ab}$ die kanonische Form hat, bleibt der symmetrische Anteil $\hat{\phi}_{ij}^{(ab)}$: Dieser kann bzgl. der beiden unteren Indizes symmetrisiert und antisymmetrisiert werden. Ersteres ergibt ein Objekt in kanonischer Form. Zweiteres liefert ein antisymmetrisches Paar unterer Indizes, bei dessen Hebung (analog zu obigem Fall) ein Tensor mit 3 vollständig symmetrischen Indizes entsteht.
- ▶ Der Beweis für einen allgemeinen Multi-Index-Tensor verläuft ähnlich.
- ▶ Es bleibt noch die Frage nach der Dimension einer durch kanonische Tensoren $\hat{\phi}_{(ajk\dots)}^{(abc\dots)}$ mit m oberen und n unteren Indizes erzeugten irreduziblen Darstellung. Man findet

$$\frac{1}{2}(m+1)(n+1)(m+n+2)$$

- Die zugehörigen Young-Tableaux haben die Gestalt



mit $n + m$ Kästchen oben und m Kästchen unten. Die n unteren Indizes werden also durch einfache, die m oberen durch 2 vertikal angeordnete Kästchen symbolisiert.

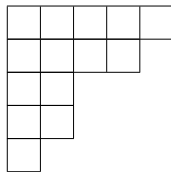
- Wir werden später Regeln zur Berechnung der Dimension der zu einem solchen Diagramm gehörenden Darstellung kennenlernen. Natürlich erhält man dabei das selbe Resultat.

9.4 $SU(N)$ & Young-Tableaux

- ▶ Für $SU(2)$ und $SU(3)$ konnten die irreduziblen Darstellungen mit relativ überschaubaren Tensor-Manipulationen konstruiert werden. Die entsprechende Algebra wird jedoch für $N > 3$ deutlich komplizierter. Hier entfalten die Young-Tableaux – benannt nach Alfred Young (1873–1940), einem englischen Mathematiker – ihren vollen Nutzen
- ▶ Jedes Tableau repräsentiert eine bestimmte Art der Symmetrisierung und Antisymmetrisierung der Indizes eines allgemeinen Tensors. Das Ergebnis ist ein Tensor, der sich gemäß der irreduziblen Darstellungen von $SU(N)$ transformiert.
- ▶ Es gibt allgemeine Regeln wie Young-Tableaux konstruiert werden und welche Terme einer Clebsch-Gordan-Reihe bei der Multiplikation zweier Tableaux entstehen können. Außerdem gibt es Formeln für die Dimension einer durch ein Tableau symbolisierten Darstellung.
- ▶ Nachfolgend werden die Eigenschaften und Rechenregeln für Young-Tableaux vorgestellt

Young-Tableaux I

- ▶ Ein Young-Tableau zu einem Tensor mit n Indizes ist eine Anordnung von n Kästchen von folgender allgemeiner Form:



Dabei gilt:

- ▶ Alle Kästchen sind linksbündig angeordnet.
- ▶ In keiner Zeile stehen mehr Kästchen, als in der darüberliegenden, d.h.



ist nicht erlaubt

Young-Tableaux II

- ▶ Tableaux für einen $SU(N)$ Tensor haben höchstens N Zeilen. Dies hängt damit zusammen, daß Spalten die Antisymmetrisierung von Indizes symbolisieren und die Indizes bei $SU(N)$ nur von 1 bis N laufen.
- ▶ Gegeben sei ein Tensor mit n unteren Indizes $\psi_{a_1 \dots a_n}$. Die Indizes werden der Reihe nach von links nach rechts in die Zeilen eines Young-Tableau mit n -Kästchen eingetragen, z.B.

a_1	a_2	a_3	a_4
.	.	.	
.	.	.	
.	.		
a_n			

- ▶ Der damit ausgedrückte Symmetrisierungs und Antisymmetrisierungs-Prozeß ist der folgende:
 - ▶ Der Operator $P = \sum p$ bezeichnet die Summe über alle Permutationen p der Indizes in einer Zeile und über alle Zeilen.

Young-Tableaux III

- ▶ Der Operator $Q = \sum \text{sign}(q) q$ bezeichnet die Summe über alle Permutationen q der Indizes in einer Spalte und über alle Spalten. Wegen des Vorzeichens von q werden die Indizes jeder Spalte antisymmetrisiert
- ▶ Insgesamt bedeutet das Young-Tableau die Operation $Y = QP$, d.h. erst Symmetrisierung der Zeilen, dann Antisymmetrisierung der Spalten. Die Symmetrie der Zeilen wird dabei zerstört.

▶ Beispiele:

a	b	c
-----	-----	-----

entspricht dem total symmetrischen Tensor $\psi_{(abc)}$

a
b
c

entspricht dem total antisymmetrischen Tensor $\psi_{[abc]}$, der nur für $N \geq 3$ existiert

a	b
c	

entspricht $(e - (ac))(e + (ab))\psi_{abc} = \psi_{abc} + \psi_{bac} - \psi_{cba} - \psi_{bca} =: \psi_{[ac]b}$

Young-Tableaux IV

- ▶ Eingeführt wurden die Young-Tableaux ursprünglich, um die irreduziblen Darstellungen der Symmetrischen Gruppe S_n zu klassifizieren. Ihre Verwendung in der Darstellungstheorie von $SU(N)$ ist also eher ein Nebeneffekt. Es besteht eine 1:1 Korrespondenz zwischen den irreduziblen Darstellungen von S_n und den Tableaux mit n Kästchen.
- ▶ Die obigen drei Tableaux entsprechen gerade den drei irreduziblen Darstellungen von S_3 , die wir über den Zusammenhang $D_3 \simeq S_3$ bereits kennengelernt haben: Zwei 1-dimensionale Darstellungen A_1 und A_2 , sowie eine 2-dimensionale Darstellung E . Tatsächlich gibt es wegen

$$\psi_{[ac]b} + \psi_{[ba]c} + \psi_{[cb]a} = 0$$

genau zwei nicht-äquivalente Tensoren der Form $\psi_{[ac]b}$ (d.h. zum letzten Tableau).

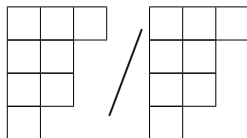
- ▶ In den letzten Abschnitten haben wir gesehen, daß die Prozesse Symmetrisierung und Antisymmetrisierung unter $SU(N)$ invariante Unterräume erzeugen. Dies ermöglicht die Zerlegung von beliebigen Tensoren in irreduzible Bestandteile.
- ▶ Im Gegensatz zu $SO(N)$ gibt es bei $SU(N)$ keine anderen Möglichkeiten zur Reduktion der Dimension von Tensoren, d.h. Tensoren von bestimmter Symmetrie sind irreduzibel.
- ▶ Bei $SO(N)$ können dagegen auch untere Indizes kontrahiert werden und ergeben ein invariantes Objekt wie das Skalarprodukt $\vec{a} \cdot \vec{b}$. Beispielsweise kann der symmetrische Teil des Leitfähigkeitstensors $\sigma_{(ij)}$ weiter zerlegt werden:

$$\sigma_{(ij)} = (\sigma_{(ij)} - \delta_{ij}\sigma_{(kk)}/3) + \delta_{ij}\sigma_{(kk)}/3$$

Die beiden Teile entsprechen den Darstellungen $l = 2$ und $l = 0$ der $SO(3)$.

Regeln zur Dimension von Darstellungen I

- Als Nächstes wollen die Dimension der durch ein bestimmtes Tableau gegeben Darstellung berechnen. Dafür bilden wir formal den Quotienten von zwei Kopien des Tableau:



- Im Zähler wird das Kästchen eines $SU(N)$ Tableau zuerst links oben mit N gefüllt. Nach rechts in einer Zeile fortschreitend wird jeweils 1 addiert, nach unten in einer Spalte absteigend jeweils 1 subtrahiert. In unserem Bsp. also

N	$N+1$	$N+2$
$N-1$	N	
$N-2$	$N-1$	
$N-3$		

Regeln zur Dimension von Darstellungen II

- Im Nenner trägt man in jedes Kästchen die Zahl der Kästchen zur Rechten plus die Zahl der Kästchen darunter plus 1 ein, in unserem Fall also

6	4	1
4	2	
3	1	
1		

- Nun werden die Zahlen in den Kästchen für Zähler und Nenner multipliziert und der Quotient beider Produkte gebildet. Es ergibt sich die Dimension der zum Tableau gehörenden Darstellung von $SU(N)$.
- Beschreibt ein Tableau Darstellungen der **symmetrischen Gruppe** S_n , so steht im Zähler einfach $n!$, während der Nenner wie beschrieben berechnet wird.

Beispiele I

- $SU(2)$: Die Dimension einer durch eine Zeile $\square \square \square \cdots$ von n Kästchen repräsentierten Darstellung ist

$$\frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 3 \\ \hline \end{array} \cdots \begin{array}{|c|} \hline n+1 \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|} \hline n & n-1 \\ \hline \end{array} \cdots \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array}} = n + 1$$

wie wir bereits früher berechnet hatten.

- $SU(3)$: Die Dimension der zu $\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}$ gehörenden Darstellung ist

$$\frac{\begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array}} = 8$$

Die von $\square \square \square$ ist

$$\frac{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 4 & 5 \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}} = 10$$

Beispiele II

Die von

 ist

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 3 & 4 & 5 & 6 \\ \hline 2 & 3 & & \\ \hline \end{array} / \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 5 & 4 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 1 & & \\ \hline \end{array} = 27$$

was gerade dem früher diskutierten Tensor $\hat{\phi}_{(ij)}^{(ab)}$ entspricht. Das Ergebnis stimmt $(n+1)(m+1)(m+n+2)/2 = 3 \cdot 3 \cdot 6/2 = 27$ überein.

- Für $SU(6)$ finden wir folgende Dimensionen:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 6 & 7 & 8 \\ \hline \end{array} / \begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array} = 56$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 6 & 7 \\ \hline 5 & \\ \hline \end{array} / \begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array} = 70$$

Die Gruppe $SU(6)$ hat eine gewisse Bedeutung für die Teilchenphysik, da das Niederenergie-Spektrum hadronischer Teilchen in die irreduziblen

Beispiele III

Darstellungen der $SU(6)$ zerfällt, die das Produkt $SU(3)_{I,Y} \times SU(3)_J$ enthält. Die Darstellung 56 enthält genau das Spin-1/2 Oktett (Multiplizität $8 \cdot 2 = 16$) und das Spin-3/2 Dezett (Multiplizität $10 \cdot 4 = 40$). Das pseudoskalare Oktett und das Nonett der Vektor-Mesonen fallen dagegen in die irreduzible Darstellung 35, die vom Tensor ϕ^α_β gebildet wird, d.h. dem Young-Tableau

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 6 & 7 \\ \hline 5 & \\ \hline 4 & \\ \hline 3 & \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \quad / \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 6 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline 3 & \\ \hline 2 & \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array} = 35$$

- Die Gruppe $SU(4) \supset SU(2)_I \times SU(2)_J$ ist von ähnlicher Bedeutung für die Kernphysik.

- Für die symmetrische Gruppe S_3 findet man die bereits angegebenen Dimensionen:

$$\overline{\begin{array}{|c|c|c|} \hline & 3! & \\ \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}} = 1$$

$$\overline{\begin{array}{|c|} \hline & 3! \\ \hline 3 \\ \hline 2 \\ \hline 1 \\ \hline \end{array}} = 1$$

$$\overline{\begin{array}{|c|c|} \hline & 3! & \\ \hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array}} = 2$$

Regeln für Produkte; CG-Reihen I

- Das Produkt zweier Tableaux T_1 und T_2 wird gebildet, indem zunächst im zweiten Tableau die Kästchen jeder Zeile mit dem selben Index a , b , c , ... gefüllt werden

$$T_1 \otimes T_2 = \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|c|} \hline a & a & a \\ \hline b & b & \\ \hline c & & \\ \hline \end{array}$$

- Nun werden die Kästchen $\boxed{a} \cdots \boxed{a}$, $\boxed{b} \cdots \boxed{b}$, $\boxed{c} \cdots$ *einzelnen* dem Tableau T_1 hinzugefügt. Dabei muß gelten:
 - Das erweiterte Tableau T_1 muß in jedem Schritt ein gültiges Young-Tableau sein
 - Kästchen mit gleichem Label (z.B. a) dürfen nicht in der selben Spalte auftauchen
 - Für jedes Kästchen sei n_x die Zahl der x -Kästchen zur rechten und darüber. Es muß dann für jedes Kästchen gelten $n_a \geq n_b \geq n_c \dots$

- ▶ Werden in diesem Prozeß Tableaux der gleichen Gestalt erzeugt, so werden nur diejenigen mit unterschiedlicher Verteilung der Indizes $a, b, c \dots$ als verschieden gezählt
- ▶ Spalten mit N Kästchen werden gestrichen, da sie der trivialen Darstellung von $SU(N)$ entsprechen

Regeln für Produkte; CG-Reihen III

► Beispiel: $8 \otimes 8$ in $SU(3)$:

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline a & a \\ \hline b & \\ \hline \end{array} &= \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & a \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline a & \\ \hline \end{array} \right) \otimes \begin{array}{|c|} \hline a \\ \hline b \\ \hline \end{array} \\
 &= \left(\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & & \\ \hline & & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline & a & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} \right) \otimes \begin{array}{|c|} \hline b \\ \hline \end{array} \\
 &+ \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline & a & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & a \\ \hline \end{array} \right) \otimes \begin{array}{|c|} \hline b \\ \hline \end{array} \\
 &+ \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & a \\ \hline \end{array} \right) \otimes \begin{array}{|c|} \hline b \\ \hline \end{array}
 \end{aligned}$$

Regeln für Produkte; CG-Reihen IV

$$\begin{aligned}
 &= \left(\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & a & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & a \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} \right) \otimes \begin{array}{|c|} \hline b \\ \hline \end{array} \\
 &= \left(\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & b & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & & \\ \hline & b & & \\ \hline \end{array} \right) + \left(\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & \\ \hline & a & b & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & a \\ \hline & & a & \\ \hline & b & & \\ \hline \end{array} \right) \\
 &+ \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & b & \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & a & \\ \hline a & b & \\ \hline \end{array} \\
 &= \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & b & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & a & a \\ \hline & & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & a & b \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & a \\ \hline a & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline & a \\ \hline b & \\ \hline \end{array} + 1
 \end{aligned}$$

Das heißt, wir erhalten die Clebsch-Gordan-Reihe

$$8 \otimes 8 = 27 \oplus 10 \oplus \bar{10} \oplus 8 \oplus 8 \oplus 1$$