Stand 07.05.2004

Kap.2 Darstellungstheorie (allgemein)

2.0 Begriffe

Lineare Darstellung D einer Gruppe G:
Jedem Gruppenelement ist eine lineare Abbildung eines Vektorraums V (in der Regel über $\mathbb{C}$) zugeordnet, wobei die Darstellungsbedingung $D(g_2 g_1) = D(g_2)D(g_1)$ gilt.
$(\Rightarrow D(e) = \mathbb{1}, \quad D(g^{-1}) = D(g)^{-1})$
i.a. Worten:

> Darstellung D ist ein Homomorphismus von G in die Gruppe der invertierbaren linearen Abbildungen eines Vektorraums V

Wählt man eine Basis in V dann werden die linearen Abbildungen durch Matrizen dargestellt.
In Basis $e_i, (i = 1, .., d) \quad D(g)e_i = e_j D(g)_{j,i}$

Äquivalente Darstellungen :
Zwei Darstellungen D, D' gleicher Dimension d werden als *äquivalent* bezeichnet falls sie durch einen "Basiswechsel" auseinander hervorgehen, d.h. falls es eine lineare Abbildung S von V nach V' gibt so dass $D'(g) = SD(g)S^{-1}$
Die Darstellungsmatrizen sind identisch wenn korrespondierende Basen genommen werden, d.h. $e'_i = Se_i$
Bemerkung: Dieser Äquivalenzbegriff deckt sich mit dem in 1.5 eingeführten Äquivalenzbegriff für Untergruppen, sofern man D und D' als Untergruppen der allgemeinen linearen Gruppe $GL(d)$ auffasst.
$(GL(d) = \{d \times d \text{ Matrizen } A \text{ mit } det(A) \neq 0\})$

Eine Klassifikation der Darstellungen einer Gruppe ist natürlich auf die verschiedenen inäquivalenten Darstellungen gerichtet.

Treue Darstellung: $g \rightarrow D(g)$ ist ein-eindeutig, d.h. jedes g ist durch eine andere lineare Abbildung dargestellt. In diesem Fall handelt es sich bei der Darstellung also um eine Realisierung der Gruppe durch lineare Abbildungen bzw. Matrizen.
Das Ausmass zu dem eine Darstellung D eventuell nicht treu ist, ist nach 1.4 durch den Kern der Zuordnung $g \rightarrow G(g)$ gegeben.
D ist damit in jedem Fall eine treue Darstellung der Faktorgruppe $G/Kern(D)$.
Einfache Gruppen (e.g. $SO(3)$) haben keine echten Normalteiler. Alle nichtrivialen Darstellungen sind daher notwendigerweise treu.

Äquivalenz als besondere Form einer Isomorphie.

Betrachten wir die Gesamtheit $\tilde{G} = \{D, D', ..\}$ aller treuen linearen Darstellungen einer Gruppe G. Jede solche Darstellung ist für sich genommen eine Matrixgruppe die

per Definition isomorph ist zu G. Alle diese Matrixgruppen sind daher untereinander isomorph(über den Umweg von$G$), d.h. $\tilde{G}$ ist die Menge der zueinander isomorphen Matrixgruppen die durch G charakterisiert sind. In $\tilde{G}$ wird nach Äquivalenzen sortiert. Matrixgruppen die nach obiger Definition äquivalent sind sehen wir als "gleich" an. Das Augenmerk richtet sich also auf die verschiedenen inäquivalenten Darstellungen.
Elemente von $\tilde{G}$ mit unterschiedlicher Dimension sind sicher inäquivalent. Nicht alle Elemente gleicher Dimension sind jedoch zueinander auch äquivalent. Es ist ein zentrales Anliegen der Darstellungstheorie eine komplette Übersicht über die verschiedenen inäquivalenten Elemente von $\tilde{G}$ zu erhalten.

2.1 Beispiel: Quantenmechanik, SO(3)

Betrachte ein spinloses Teilchen. Die Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}) =< \vec{r}|\psi >$ bilden einen linearen Vektorraum über $\mathbb{C}$.

Effekt einer Drehung R **:**

$$D(R) : \psi(\vec{r}) \to \psi'(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) =< \vec{r}|D(R)|\psi > \quad (\psi'(\vec{r}' = R\vec{r}) = \psi(\vec{r}))$$

D(R) ist linear :

$$\alpha_1\psi_1(\vec{r}) + \alpha_2\psi_2(\vec{r}) \to \alpha_1 D(R)\psi_1(\vec{r}) + \alpha_2 D(R)\psi_2(\vec{r})$$

D(R) erfüllt Darstellungsbedingung $D(R_2R_1) = D(R_2)D(R_1)$:

$$D(R_2R_1)\psi(\vec{r}) = \psi((R_2R_1)^{-1}\vec{r}) = \psi(R_1^{-1}R_2^{-1}\vec{r})$$

$$D(R_2)D(R_1)\psi(\vec{r}) = D(R_2)(D(R_1)\psi)(\vec{r}) = (D(R_1)\psi)(R_2^{-1}\vec{r}) = \psi(R_1^{-1}R_2^{-1}\vec{r})$$

D(R) is unitär :

$$D(R)_{rr'} = \delta(R^{-1}r - r') \quad \Rightarrow D(R)^*_{rr'} = \delta(R^{-1}r' - r) = \delta(r' - Rr)$$

$$\Rightarrow D^*(R)\psi(\vec{r}) = \psi(R\vec{r}) \quad \Rightarrow D(R)D(R)^* = D(R)D(R)^* = \mathbb{1}$$

Bahndrehimpuls L :

$L_z = \frac{\hbar}{i}\,(x\partial_y - y\partial_x)\,, \quad L_y, L_x$ durch zyklische Vertauschung.

D(R) $\leftrightarrow$ **L** :

$$D(R(\vec{\omega})) = exp(-i\vec{\omega}\vec{L}/\hbar)$$

Begründung:

Drehung um z-Achse: $R(\varphi\hat{z}) = \begin{pmatrix} cos\varphi & -sin\varphi & 0 \\ sin\varphi & cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$\psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi(xcos\varphi + ysin\varphi, ycos\varphi - xsin\varphi, z) = \psi(\vec{r}) + y\varphi\partial_x\psi(\vec{r}) - x\varphi\partial_y\psi(\vec{r}) + O(\varphi^2)$$

verträglich mit $exp(-i\varphi L_z) = \mathbb{1} - i\varphi L_z + O(\varphi^2)$

endliches φ: Sukzession von kleinen φ, $\lim(1 + x/n)^n = exp(x)$

ab jetzt $\hbar = 1$

Kugelfunktionen $Y_l^m(\Omega)$:

$D(R)$ wirkt nur auf die Winkelabhängigkeit einer Wellenfunktion.

Separationsansatz: $\psi(\vec{r}) = \psi(r)\psi(\Omega), \quad D(R)\psi(\vec{r}) = \psi(r)\psi(R^{-1}\Omega)$

Wirkung von L auf Polarwinkel θ und Azimutwinkel φ von Ω:

$$L_z = 1/i\partial_\varphi, \quad L_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i\frac{cos\theta}{sin\theta}\partial_\varphi\right), \quad L_- = L_+^*, \quad , L_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(L_x \pm iL_y)$$

Kugelfunktionen erfüllen: $L_z Y_l^m = mY_l^m, \quad L_\pm Y_l^m \sim Y_l^{m\pm1}, \quad \vec{L}^2 Y_l^m = l(l+1)Y_l^m$

$\Rightarrow D(R)Y_l^m = Y_l^{m'} D^{(l)}(R)_{m'm}, \quad m, m' = -l, .., l$

$D^{(l)}(R)$ ist $2l + 1$ dimensionale Darstellung von $SO(3)$
im linearen Raum aufgespannt durch $\{ Y_l^m, \quad m = -l, .., l\}$

Die dreidimensionale Darstellung $D^{(1)}$ ist äquivalent zur
Darstellung von $SO(3)$ durch sich selbst, d.h. $R \to R$.

Zusammenfassung der Eigenschaften von D :

- D lässt die $(2l + 1)$ dimensionalen Unterräume die durch $\{\psi(r)Y_l^m(\Omega), m = -l, .., l\}$ aufgespannt werden invariant, wobei $\psi(r)$ beliebig ist.
- in diesen Unterräumen ist D gegeben durch die Darstellungen $D^{(l)}$ mit $\vec{L}^2 = l(l+1)\mathbb{1}$.
- es gibt keine kleineren invarianten Unterräume.
- Nach Wahl einer Basis $\{\psi_n(r), n = 1, 2, .., \infty\}$ fuer die radialen Wellenfunktionen ψ stellt $\{\psi_n(r)Y_l^m(\Omega)\}$ eine Basis fuer den gesamten Raum der Zustände dar und D hat in dieser Basis eine blockdiagonale Form.

Den Prozess der Zerlegung in invariante Unterräume nennt man Ausreduktion. Das Ziel ist eine Zerlegung in die kleinstmöglichen Bestandteile.

Energiespektrum für sphärisch symmetrisches Potential :

Ein Hamilton-Operator von der Form : $H = -\Delta + V(r)$ zeichnet keine Raumrichtung aus.

dies kann formal ausgedrückt werden als : $D(R)HD(R)^{-1} = H$

d.h. einen Zustand zu drehen, H anzuwenden und dann wieder zurück zu drehen gibt das gleiche wie wenn H direkt angewandt wird.

Zusammenhang mit Drehimpulserhaltung:

benütze $D(R) = exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{L})$ und entwickle DHD^{-1} nach ω.

Bedingung zur Ordnung $O(\omega)$: $[H, \vec{\omega} \cdot \vec{L}] = 0$ d.h. $[H, L_k] = 0$

Radialgleichung für Energieniveaus zu festem l :

Für $\psi(\vec{r}) = \psi(r)Y_l^m(\Omega)$, $\psi(r) = u(r)/r$ reduziert sich $H\psi = E\psi$ auf:

$$\big(-(\tfrac{d}{dr})^2 + V(r) + \tfrac{l(l+1)}{r^2}\big)u_{n,l}(r) = E_{n,l}u_{n,l}(r)$$

Das Auftreten einer Radialgleichung mit einer $2l + 1$-fachen Entartung der Energie-Niveaus ist eine Konsequenz der oben beschriebenen Ausreduktion der Darstellung $D(R)$ wie wir in den nächsten Abschnitten sehen werden.

2.2 Ausreduktion von Darstellungen. Grundlagen.

Direkte Summe von Darstellungen:

Seien D_1, D_2 zwei Darstellungen der Gruppe G in den Räumen V_1, V_2.
Durch Bildung der *direkten Summe* $V_1 \bigoplus V_2 = \{(v_1, v_2), \quad v_i \in V_i\}$ der Räume V_1, V_2 kommt man zu einer neuen Darstellung von G : $D_1 \bigoplus D_2(g)(v_1, v_2) := (D_1(g)v_1, D_2(g)v_2)$

Die Bildung einer direkten Summe entspricht gerade der Umkehrung der Ausreduktion.
$D_1 \bigoplus D_2$ hat $\{(v_1, 0),\ v_1 \in V_1\}$ bzw. $\{(0, v_2),\ v_2 \in V_2\}$ als invariante Unterräume.
In einer Basis die diesem Umstand angepasst ist, d.h. aus Vektoren $\{(e_k, 0)\}$ und $\{(0, e_l)\}$ besteht ist $D_1 \bigoplus D_2$ blockdiagonal.

In einer allgemeinen Basis ist $D_1 \bigoplus D_2$ natürlich nicht blockdiagonal.
Es ist also die Äquivalenz zu einer blockdiagonalen Form die entscheidend ist.

Begriffe reduzibel, irreduzibel, vollreduzibel :

Eine Darstellung D in V heisst

reduzibel : wenn es invariante Unterräume gibt,
irreduzibel : wenn es keine invarianten Unterräume gibt,
vollreduzibel: wenn D äquivalent ist zu $D_1 \bigoplus D_2 \bigoplus ..$ mit irreduziblen D_i.

Bemerkungen:

- Vollreduzibilität bedeutet keinesfalls, dass alle D_i inäquivalent sein muessen. Im Fall der Darstellung $D(R)$ von Kapitel 2.2 kommt eine einzelne irreduzible Darstellung $D^{(l)}$ sogar unendlich oft vor , entsprechend der Freiheit die im Radialraum $\{\psi(r)\}$ besteht. Bei einer solchen Abzählung werden äquivalente irreduzible Darstellungen natürlich als gleich angesehen. Gleich oder äquivalent ist nur eine Frage der Basiswahl.
- Die Aussage, dass die auftretenden irreduziblen Darstellungen nicht von der Art und Weise abhängen wie ausreduziert wird ist von hohem Wert und keineswegs eine Selbstverständlichkeit.

Kriterium für Vollreduzibilität:

Eine Darstellung ist vollreduzibel wenn es zu jedem invarianten Unterraum V_1 ein invariantes Komplement V_2 gibt das V_1 im Sinne einer direkten Summe zu V ergänzt.

Die Eigenschaft ob vollreduzibel oder nicht ist eine Klasseneigenschaft d.h. gilt gleichermassen für alle äquivalenten Darstellungen.

2.3 Ausreduktion von unitären Darstellungen

Sei in V ein hermitisches positiv definites Skalarprodukt (u, v) gegeben d.h.:
$(.,.)$ linear im zweiten Argument, $(v, u) = \overline{(u, v)}$, $\quad (v, v) \geq 0$, $(v, v) = 0 \Leftrightarrow v = 0$

Die gegebene Darstellung D sei unitär, d.h. $(D(g)u, D(g)v) = (u, v)$

Eine solche Darstellung erfüllt das Kriterium der Vollreduzibilität.
Begründung:

> Sei V_1 ein invarianter Unterraum. Das orthogonale Komplement von V_1, d.h. die Vektoren $\{v_2\}$ mit der Eigenschaft $(v_2, v_1) = 0$ für alle $v_1 \in V_1$ ist wegen der Unitariät ebenfalls invariant.

Bemerkungen:

- Die Äquivalenz zu einer unitären Darstellung reicht nach 2.2 natürlich ebenfalls für Vollreduzibilität. Dies ist auch folgendermassen ersichtlich. Sei D äquivalent zu einer unitären Darstellung D', d.h. $D = SD'S^{-1}$. Mit $(u, v)_S := (S^{-1}w, S^{-1}v)$ wird in V ein neues hermitisches Skalarprodukt definiert bezüglich dessen D selbst unitär ist.

- Die Ausreduktion ist nicht nur im Zusammenhang von Darstellungen relevant, sondern ist ein allgemeines Problem der Blockdiagonalisierung eines vorgegebenen Satzes von linearen Abbildungen der nicht notwendig abgschlossen sein muss bezüglich der Produktbildung. Sie kann als Verallgemeinerung der gleichzeitigen Diagonalisierung von vertauschenden Operatoren auf den Fall nicht notwendig vertauschender Operatoren angesehen werden. Dabei ist zu beachten, dass im allgemeinen bei der Diagonalisierung komplexe Zahlen auftreten (komplexe Eigenwerte oder komplexe Eigenvektoren).
  Für abelsche Gruppen erwarten wir, dass die irreduziblen Darstellungen eindimensional sind. Dies wird sich als simple Konsequenz der weiter unten diskutierten Lemmas von Schur auch so ergeben.

Beispiele $SO(2)$, $O(2)$:

a) Darstellung von $SO(2)$ durch sich selbst ist reduzibel

$$SO(2) = \left\{ R = \begin{pmatrix} cos(\varphi) & -sin(\varphi) \\ sin(\varphi) & cos(\varphi) \end{pmatrix}, \varphi \in [0, 2\pi) \right\}$$

Darstellung durch sich selbst: $D(R) = R, \quad dim(D) = 2$
irreduzibel innerhalb der reellen Vektoren.
jedoch reduzibel im $\mathbb{C}^2$ wie man durch Diagonalisierung sieht:
Eigenwerte : $\lambda_\pm = exp(\mp i\varphi)$ Eigenvektoren: $|\pm >= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$

d.h. $R(\varphi)|\pm>=\lambda_\pm|\pm>$

b) Darstellung von $O(2)$ durch sich selbst ist irreduzibel

$O(2)=\{SO(2),\,\sigma_3 SO(2)\}, \quad \sigma_3 =$ Spiegelung an 1-Achse

Ausreduktion der Untergruppe $SO(2)$ führt auf die durch $|\pm>$
aufgespannten invarianten Unterräume $U_\pm$.
aber $\sigma_3|+>\sim|->$ d.h. $U_\pm$ sind nicht invariant unter Anwendung von σ_3.

Der tiefere Grund für die Irreduzibilität ist, dass $O(2)$ nicht abelsch ist.

Dies kommt auch darin zum Ausdruck dass $O(2)$ kein direktes,
sondern nur ein semidirektes Produkt zweier abelschen Gruppen ist.
In der Notation von Kapitel 1.5 : $O(2)\cong F\overset{s}{\otimes} N$
wobei $F=\{\sigma\in(1,\sigma_3)\}\cong Z_2, \quad N=SO(2), \quad T_\sigma(n)=\sigma n\sigma$

Nicht jede reduzible Darstellung ist vollreduzibel

Folgendes Beispiel der Darstellung der Poincaregruppe als 5-dimensionale Matrixgruppe zeigt, dass eine reduzible Darstellung nicht notwendigerweise vollreduzibel sein muss.
$D((\Lambda,a))=\begin{pmatrix}\Lambda & a\\ 0 & 1\end{pmatrix}$
Der Unterraum der Vektoren mit $x_5=0$ ist invariant, besitzt aber kein invariantes Komplement.
Die Darstellung ist also nicht vollreduzibel.
Wir werden in Kapitel 3 Bedingungen kennen lernen die garantieren, dass eine reduzible Darstellung vollreduzibel ist.

2.4 Lemmas von Schur

A) Für die Darstellungen D, D' einer Gruppe G existiere eine lineare Abbildung $S : V \to V'$ mit der Eigenschaft $D'(g)S = SD(g)$, $\forall g \in G$.
Falls D irreduzibel ist dann ist entweder $S = 0$ oder $det(S) \neq 0$ d.h. D' ist äquivalent zu D.

B) Für die Darstellung D einer Gruppe G existiere eine lineare Abbildung $S : V \to V$ mit der Eigenschaft $D(g)S = SD(g)$, $\forall g \in G$.
Falls D irreduzibel ist dann ist $S \sim \mathbb{1}$. (Fall $S = 0$ ist uninteressant).

Beweise:
A) Die relevante Grösse ist der Kern von S, d.h. $\{v \in V, Sv = 0\}$, der ein Unterraum von V ist. Die Eigenschaft $D'(g)S = SD(g)$ impliziert, dass dieser Unterraum invariant ist unter D. Bei irreduziblem D sind die einzigen invarianten Unterräume V selbst oder $\{0\}$. Dies entspricht gerade den Fällen $S = 0$ und $det(S) \neq 0$.

B) Sei λ ein Eigenwert von S und v_λ ein zugehöriger Eigenvektor d.h. $Sv_\lambda = \lambda v_\lambda$. Wegen $D(g)S = SD(g)$ sind $\{D(g)v_\lambda\}$ auch Eigenvektoren zu λ und der von ihnen aufgespannte Unterraum V_λ ist invariant. Für letzteres geht ganz wesentlich die Gruppeneigenschaft ein. Bei irreduziblem D ist daher $V_\lambda = V$, d.h. alle Vektoren sind Eigenvektoren zum Eigenwert λ womit $S \sim \mathbb{1}$ gezeigt ist.

einfache Folgerungen aus B):

- Die irreduziblen Darstellungen einer abelschen Gruppe sind eindimensional, da jedes $D(g)$ die Rolle von S spielen kann.
- Die Matrizen einer irreduziblen Darstellung charakterisieren die Basis bis auf einen festen Faktor. So legen zum Beispiel die in 2.1 besprochenen Darstellungen $D^{(l)}$ die Kugelfunktionen als Basis bis auf einen Faktor fest.

2.5 Anwendung: Radialgleichung

Das Auftreten einer radialen Schrödingergleichung für sphärisch symmetrische Potentiale (siehe 2.1) kann rein gruppentheoretisch über die Lemmas von Schur aus der Drehinvarianz $D(R)H = HD(R)$ des Hamilton Operators H abgeleitet werden.

$D(R)$ wird nach 2.1 durch eine Basis der Form $\psi_n(r)Y_l^m(\Omega)$ ausreduziert.

Wir schreiben diese Zustände etwas allgemeiner als $|r, l, m>$ ohne nähere Festlegung über die Bedeutung von r (diskrete Basis für den Radialraum ($r = n$) oder eine kontinuierliche Basis wie es die Notation nahelegt).

Für die Matrixelemente $H_{m',m}^{(l,l')(r,r')} =< m', l', r'|H|r, l, m >$ ergibt sich folgendes:

Die bezüglich der Indizes m, m' definierte $(2l'+1)\times(2l+1)$ Matrix $S = H(l', l, r', r)$ erfüllt $D^{(l')}S = SD^{(l)}$.
Lemma A impliziert dass $H(l', l, r', r)$ diagonal sein muss in l', l und Lemma B impliziert dass $H(..)$ für $l' = l$ wie die Einheitsmatrix wirkt.

Wir erhalten also die Form:

$$< m', l', r'|H|r, l, m >= \delta_{m',m}\delta_{l',l}H_l(r', r)$$

mit einer von l abhängigen Matrix H_l in den radialen Indizes. Die Eigenwertgleichung von H_l stellt gerade die radiale Schrödingergleichung dar.

2.6 Anwendung: Kristallklassen