

Zusammenfassung zur Vorlesung Gruppentheorie in der Physik I

Yanick Sebastian Kind
yanick.kind@udo.edu

03.03.2023

Inhaltsverzeichnis

1	Ergänzen	4
2	Abstrakte Gruppentheorie	4
2.1	Definition: Gruppe	4
2.1.1	endliche Gruppe	4
2.2	Multiplikationstabelle	4
2.2.1	Rearrangement Theorem	5
2.3	Zyklische Gruppe	5
2.4	Untergruppen und Nebenklassen	5
2.4.1	Satz: Disjunktheit oder Gleichheit	5
2.4.2	Satz: Index einer Untergruppe	5
2.5	Konjugierte Elemente und Klassen	5
2.5.1	Konjugationsklasse	6
2.6	Normalteiler und Faktorgruppen	6
2.6.1	Definition: Normalteiler	6
2.6.2	Einschub: Komplexe	6
2.6.3	Satz: Nebenklasse einer invarianten Untergruppe	6
2.6.4	Definiton: Faktorgruppe	6
3	Darstellungstheorie	6
3.1	Definition: Darstellung	7
3.2	Definition: Äquivalente Darstellung	7
3.3	(Ir)reduzibilität	7
3.4	Satz: unitäre Darstellungen	7
3.5	Schur'sches Lemma	7
3.5.1	Alternative Formulierung	8
3.6	Orthogonalitätstheorem	8
3.7	Satz von Burnside	8
3.8	Definition: Charakter	8
3.9	Satz: Zeilenorthogonalität	9
3.10	Charaktertafel	9
3.11	Satz: Spaltenorthogonalität	9
3.12	Dekomposition von reduziblen Darestellungen	9
3.13	Reguläre Darstellung	10
4	Symmetrioperationen in der Quantenmechanik	10
4.1	Wirkung der Symmetrioperationen auf Wellenfunktionen	11
4.2	Symmetrie des Hamiltonoperators	11
4.3	Die Gruppe der Schrödingergleichung	11
4.4	Bestimmung einer Darstellung der Symmetriegruppe	11
4.5	Unitarität der Darstellung	11

List of Theorems

1 Ergnzen

- Iso/Homomorphismus
- Permutationsgruppe
- triviale Darstellung als Isomorphismus
- vll. noch Kristallstruktur und Blochtheorem

2 Abstrakte Gruppentheorie

2.1 Definition: Gruppe

Eine Menge $\mathcal{G} = \{A_2, A_3, \dots\}$ bildet eine Gruppe, wenn mit einer Gruppenverknpfung $*$ folgende vier Eigenschaften erfllt sind:

1. **Abgeschlossenheit:** Mit $A_i, A_j \in \mathcal{G}$ folgt $A_i * A_j = A_k \in \mathcal{G}$, d.h. die Verknpfung zweier Elemente ergibt wieder ein Element der Gruppe.
2. **Assoziativitt:** Es gilt mit $A_i, A_j, A_k \in \mathcal{G}$, dass $(A_i * A_j) * A_k = A_i * (A_j * A_k)$.
3. **Neutrale Element:** Es exestiert ein eindeutiges Element $E \in \mathcal{G}$ mit $E * A_i = A_i * E = A_i$.
4. **Inverse Element:** Zu jedem Element $A_i \in \mathcal{G}$ exestiert ein eindeutiges inverses Element A_i^{-1} , so dass $A_i^{-1} * A_i = A_i * A_i^{-1} = E$ gilt.

2.1.1 endliche Gruppe

Eine Gruppe mit einer endlichen Anzahl an Elementen heit endliche Gruppe. Eine Gruppe $\mathcal{G} = \{E, A_2, \dots, A_h\}$ ist eine endliche Gruppe der Ordnung h . Man schreibt auch $|\mathcal{G}| = h$.¹

2.2 Multiplikationstabelle

Die Multiplikationstabelle gibt einfach an, welche Verknpfungen welches Gruppenelement ergeben. Bsp. Symmetrische Gruppe S_3 :

	e	a	a^2	b	c	d
e	e	a	a^2	b	c	d
a	a	a^2	e	c	d	b
a^2	a^2	e	a	d	b	c
b	b	d	c	e	a^2	a
c	c	b	d	a	e	a^2
d	d	c	b	a^2	a	e

¹Im Folgenden wird das Symbol der Verknpfung und die Angabe, dass ein Element ein Element einer Gruppe ist, weggelassen, sofern es eindeutig ist.

2.2.1 Rearrangement Theorem

Sallop gesagt: In jeder Zeile und Spalte einer Multiplikationstabelle kann ein Gruppenelement nur einmal auftreten.

Mathematisch: In der Sequenz $EA_k, A_2A_k, \dots, A_hA_k$ kommt jedes Element A_i nur einmal vor.

2.3 Zyklische Gruppe

Bei einer zyklischen Gruppe kann jedes Element durch mehrfacher Multiplikation eines Elements reproduziert werden, so dass sich jede zyklische Gruppe \mathcal{G} als

$$\mathcal{G} = \{X, X^2, \dots, X^n = E\}$$

schreiben lässt, wobei die Ordnung die Periode der zyklischen Gruppe ist (Bsp.: Translationsgruppe eines Kristalls)

2.4 Untergruppen und Nebenklassen

Sei $\mathcal{S} = \{E, S_2, \dots, S_g\}$ eine Untergruppe der Ordnung g der Gruppe \mathcal{G} der Ordnung h , dann ist

$$\mathcal{S}X = \{EX, S_2X, \dots, S_gX\}$$

eine rechte Nebenklasse von \mathcal{S} (linke Nebenklasse analog). Wäre $X \in \mathcal{S}$, dann wäre $\mathcal{S}X$ wieder \mathcal{S} selbst und damit enthält eine Nebenklasse kein einziges Element der Untergruppe.

2.4.1 Satz: Disjunktheit oder Gleichheit

Zwei (linke oder rechte) Nebenklassen $\mathcal{S}X, \mathcal{S}Y$ einer Untergruppe \mathcal{S} sind entweder disjunkt oder gleich.

2.4.2 Satz: Index einer Untergruppe

Die Ordnung einer Untergruppe \mathcal{S} von \mathcal{G} , wobei $|\mathcal{S}| = g$ und $|\mathcal{G}| = h$ gilt, muss ein ganzzahliger Teiler von h sein, so dass

$$\frac{h}{g} = l \in \mathbb{Z}$$

gilt. Dabei wird l der Index der Untergruppe \mathcal{S} in \mathcal{G} genannt.

2.5 Konjugierte Elemente und Klassen

Zwei Elemente A, B sind zueinander konjugiert, wenn

$$B = XAX^{-1}$$

gilt. Damit folgt, dass wenn C und B zu A konjugiert sind, dass auch B und C zueinander konjugiert sind.

2.5.1 Konjugationsklasse

Alle Elemente einer Gruppe \mathcal{G} die zueinander konjugiert sind bilden eine Konjugationsklasse

$$\mathcal{G}A = \{BAB^{-1} | B \in \mathcal{G}\},$$

wobei A ein beliebiges Element der Konjugationsklasse ist.

2.6 Normalteiler und Faktorgruppen

2.6.1 Definition: Normalteiler

Eine Untergruppe \mathcal{S} einer Gruppe \mathcal{G} , die nur aus kompletten Klassen besteht, heißt **Normalteiler** oder **invariante Untergruppe**. Mit einer komplette Klasse meint man, dass, wenn A in \mathcal{S} liegt, alle Elemente XAX^{-1} in \mathcal{S} liegen, selbst wenn $X \in \mathcal{G}$ nicht in \mathcal{S} liegt. Solche eine Untergruppe heißt invariant, da es unter Konjugation mit einem beliebigen Element von \mathcal{G} invariant ist.

2.6.2 Einschub: Komplexe

Ein Komplex

$$\mathcal{K} = \{K_1, \dots, K_n\}$$

ist eine Menge von Gruppenelementen unter Vernachlässigung der Reihenfolge. Eine Multiplikation mit einem beliebigen Element X ist durch $\mathcal{K}X = \{K_1X, \dots, K_nX\}$ gegeben. Die Multiplikation zweier Komplexe $\mathcal{K} = \{K_1, \dots, K_n\}$ und $\mathcal{K}' = \{K'_1, \dots, K'_m\}$ ist durch $\mathcal{K}\mathcal{K}' = \{K_1K'_1, K_2K'_1, \dots, K_1K'_2, K_1K'_3, \dots, K_nK'_m\}$ gegeben. Doppelte Elemente werden, wie es bei einer Menge üblich ist, nicht mitgezählt.

2.6.3 Satz: Nebenklasse einer invarianten Untergruppe

Aus der Definition 2.6.1 folgt

$$XSX^{-1} = \mathcal{S} \iff XS = SX,$$

womit die rechte gleich der linken Nebenklasse einer invarianten Untergruppe ist.

2.6.4 Definiton: Faktorgruppe

Eine invariante Untergruppe \mathcal{S} einer Gruppe G bildet mit all ihren $l - 1$ Nebenklassen eine Faktorgruppe

$$\mathcal{G}/\mathcal{S} = \{\mathcal{S}, SX_1, SX_2, \dots, SX_{l-1}\},$$

Moodle Diese Veranstaltung verfügt über einen Moodle wobei die invariante Untergruppe \mathcal{S} das Einselement bildet. Die Ordnung der Faktorgruppe entspricht $|\mathcal{G}|/|\mathcal{S}|$.

3 Darstellungstheorie

Wir haben uns ausschließlich mit Matrizendarstellungen beschäftigt.

3.1 Definition: Darstellung

Bei einer Darstellung Γ wird jedem Gruppenelement eine quadratische Matrix zugeordnet:

$$\Gamma(A) : V \rightarrow V$$

mit dem Vektorraum V als Darstellungsraum mit $\dim(V) = d$ als Dimension der Darstellung. Eine lineare Darstellung $\Gamma(A)$ von \mathcal{G} ist ein Homomorphismus der Gruppe $GL(V)$

$$\Gamma(A)\Gamma(B) = \Gamma(AB), \quad A, B \in \mathcal{G}.$$

Das Einselement wird durch die Einheitsmatrix dargestellt.

3.2 Definition: Äquivalente Darstellung

Eine andere Darstellung lässt sich durch eine Ähnlichkeitstransformation gewinnen

$$\Gamma'(A) = S^{-1}\Gamma(A)S \implies \Gamma'(A)\Gamma'(B) = \Gamma'(AB).$$

Die Darstellungen Γ und Γ' sind äquivalent.

3.3 (Ir)reduzibilität

Die direkte Summe von zwei Darstellungen

$$\Gamma(A) = \begin{pmatrix} \Gamma^1(A) & 0 \\ 0 & \Gamma^2(A) \end{pmatrix}, \quad \Gamma(A) = \Gamma^1(A) \oplus \Gamma^2(A)$$

ist eine weitere Form von Redundanz. Lässt sich eine Darstellung durch eine globale Ähnlichkeitstransformation auf eine Blockdiagonale bringen, ist sie reduzibel, sonst irreduzibel.

3.4 Satz: unitäre Darstellungen

Jede Darstellung lässt sich mit Hilfe einer Ähnlichkeitstransformation auf eine unitäre Darstellung abgebildet werden. Vorgehen: Konstruiere hermitesche Matrix $\mathbf{H} = \sum_i^h \Gamma(A_i)\Gamma(A_i^\dagger)$. Dann diese diagonalisieren mit unitärer Trafo $\mathbf{d} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$. Somit ist die Darstellung

$$\Gamma'(A_j) = \mathbf{d}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{U}^{-1}\Gamma(A_j)\mathbf{U}\mathbf{d}^{\frac{1}{2}}$$

unitär.

3.5 Schur'sches Lemma

Jede Matrix, welche mit allen Matrizen einer irreduziblen Darstellung kommutiert, muss ein Vielfaches von der Einheitsmatrix (sog. konstante Matrix) sein. Wenn somit eine nicht-konstante Matrix mit mindestens einer Matrix einer Darstellung kommutiert, ist diese Darstellung reduzibel.

3.5.1 Alternative Formulierung

Gegeben seien zwei Darstellungen mit $\text{Dim}(\Gamma^1(A_i)) = d_1$ und $\text{Dim}(\Gamma^2(A_i)) = d_2$. Wenn dann mit einer beliebigen Matrix \mathbf{M}

$$\mathbf{M}\Gamma^1(A_i) = \Gamma^2(A_i)\mathbf{M}$$

gilt, dann muss (i) bei $d_1 \neq d_2$ $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ oder (ii) bei $d_1 = d_2$ entweder $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ oder $|\mathbf{M}| \neq 0$ gelten. Aus letzterem folgt $\Gamma^1(A_i) = \mathbf{M}\Gamma^2(A_i)\mathbf{M}^{-1}$, womit die Darstellungen äquivalent sind.

3.6 Orthogonalitätstheorem

Bei Betrachtung **nicht-äquivalenter**, unitärer, irreduziblen Darstellungen gilt

$$\sum_R \Gamma^i(R)_{\mu\nu} \Gamma^j(R)_{\alpha\beta} = \frac{h}{d_i} \delta_{ij} \delta_{\nu\alpha} \delta_{\mu\beta}.$$

Geometrische Interpretation: die Gruppenelemente $R = E, A_2, \dots, A_h$ spannen einen h -dimensionalen „Gruppenelement“-Vektorraum auf. Jeder Vektor in diesem Raum hat drei Indizes, i, μ, ν . Diese Vektoren sind orthogonal zueinander.

3.7 Satz von Burnside

Aus der geometrischen Interpretation des Orthogonalitätstheorems 3.6 folgt mit d_i als Dimension der i -ten irreduziblen Darstellung der Gruppe \mathcal{G} direkt

$$\sum_i d_i^2 = |\mathcal{G}|,$$

da zu jeder Darstellung Γ^i d_i^2 verschiedene Vektoren gibt. Das heißt in Summe existieren in diesem Vektorraum $\sum_i d_i^2$ verschiedene Vektoren. Da in einem h -dimensionalen Vektorraum nur maximal h zueinander orthogonale Vektoren existieren können, folgt $\sum_i d_i^2 \leq h = |\mathcal{G}|$. Die eindeutige Gleichheit wird z.B. im Tinkham bewiesen.

3.8 Definition: Charakter

Der Charakter einer Darstellung $\Gamma^i(R)$ ist die Menge der h Zahlen $\chi^i(E), \chi^i(A_2), \dots, \chi^i(A_h)$ mit

$$\chi^i(R) = \text{Tr}(\Gamma^i(R)) = \sum_j^{d_i} \Gamma^i(R)_{jj}.$$

Die Spur ist unter einer Ähnlichkeitstransformation invariant, so dass äquivalente Darstellungen und Elemente innerhalb einer Klasse denselben Charakter besitzen. Im Folgenden wird der Charakter für die k -te Klasse \mathcal{G}_k durch $\chi^i(\mathcal{G}_k)$ angegeben.

3.9 Satz: Zeilenorthogonalität

Wir das Orthogonalitätstheorem genutzt, kann

$$\sum_R \chi^i(R) \chi^j(R) = \sum_R \chi^i(\mathcal{G}_k) \chi^j(\mathcal{G}_k) N_k = h \delta_{ij}$$

gezeigt werden, wobei N_k die Anzahl an Elementen in der k -ten Klasse ist. Somit formen die Charaktere der verschiedenen irreduziblen Darstellungen eine Menge von orthogonalen Vektoren

$$\chi^i = \begin{pmatrix} \chi^i(E) \\ \chi^i(A_2) \\ \dots \\ \chi^i(A_h) \end{pmatrix}$$

im Gruppenelement-Vektorraum aufgespannt durch die Klassen \mathcal{G}_k . Da die Anzahl der orthogonalen Vektoren nicht die Dimension des Vektorraums übersteigen kann, darf die Anzahl der Klassen nicht die Anzahl der irreduziblen Darstellungen übersteigen. Es gilt sogar

$$\text{Anzahl Klassen} = \text{Anzahl irreduzible Darstellungen.}$$

3.10 Charaktertafel

In den Zeilen stehen die irreduziblen Darstellungen und in den Spalten die Klassen mit der Anzahl an Elementen in der jeweiligen Klasse.

Tabelle 1: Charaktertafel der S_3

	\mathcal{G}_1	$3\mathcal{G}_2$	$2\mathcal{G}_3$
Γ^1	1	1	1
Γ^2	1	-1	1
Γ^3	2	0	-1

3.11 Satz: Spaltenorthogonalität

$$\sum_i \chi^i(\mathcal{G}_k) \chi^i(\mathcal{G}_l) = \frac{h}{N_k} \delta_{kl}$$

3.12 Dekomposition von reduziblen Darstellungen

Bringe die Darstellung erst auf blockdiagonale Form:

$$\Gamma(R) = \begin{pmatrix} \Gamma^1(R) & & \\ & \Gamma^2(R) & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \Gamma(R) = \Gamma^1(R) \oplus \Gamma^2(R) \oplus \dots$$

mit den irreduziblen Darstellungen auf der Diagonale. Somit ist die Spur der reduziblen Darstellung die Summe der Spuren der irreduziblen Darstellungen

$$\chi_{\text{red}}(R) = \sum_i a_i \chi_{\text{irred}}^i(R),$$

wobei der Koeffizient a_i angibt, wie oft die i -te irreduzible Darstellung auf der Diagonale vorkommt. Durch Anwendung des Orthogonalitätstheorems 3.6, sind die Koeffizienten eindeutig durch den Charakter der reduziblen Darstellung bestimmt

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_k N_k \chi_{\text{irred}}^i(\mathcal{G}_k) \chi_{\text{red}}(\mathcal{G}_k)$$

3.13 Reguläre Darstellung

Hier schiebt man einfach die Elemente in der Multiplikationstabelle so rum, so dass auf der Hauptdiagonalen das Einselement liegt. Wenn man nun die reguläre Darstellung eines Elements bestimmen möchte, schaut man in der Multiplikationstabelle, wo dieses Element als Resultat der Multiplikationen steht. Damit bekommt die Matrix der regulären Darstellung eine 1 als Eintrag an dieser Stelle.

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A^{-1}	A	E	D	F	B	C
B^{-1}	B	F	E	D	C	A
C^{-1}	C	D	F	E	A	B
D^{-1}	F	B	C	A	E	D
F^{-1}	D	C	A	B	F	E

$$\Gamma_{\text{reg}}(A) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Aus

$$\chi_{\text{reg}} \cdot \chi_{\text{irred}}^i = \begin{pmatrix} h \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d_i \\ x \\ \dots \end{pmatrix} = h d_i$$

folgt, dass die reguläre Darstellung **jede** irreduzible Darstellung genau d_i mal enthält (s. Gl. (3.12)).

4 Symmetrieoperationen in der Quantenmechanik

Ausgangspunkt ist die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\Psi_n = E_n^j \Psi_n$$

, dabei gibt j den Grad der Entartung an. Ziel ist es nun einen Zusammenhang zwischen den Symmetrioperationen und der Entartung der Energieniveaus zu finden.

4.1 Wirkung der Symmetrioperationen auf Wellenfunktionen

Sei \hat{P}_R eine Symmetrioperationen, somit wirkt diese auf eine Wellenfunktionen gemäß

$$\hat{P}_R \Psi(\vec{r}) = \Psi(\mathbf{R}^{-1} \vec{r}).$$

Somit kann entweder der Vektor um einen Winkel im mathematisch positiven Drehsinn oder das Koordinatensystem um diesen Winkel im mathematisch negativen Drehsinn gedreht werden. Die Symmetrioperatoren bilden eine Gruppe, die isomorph zu der Gruppe der Koordinatentransformationen ist.

4.2 Symmetrie des Hamiltonoperators

Wenn das System und damit auch der Hamiltonian invariant unter einer Symmetrioperationen ist, vertauscht der Hamiltonian mit dem Symmetrioperator und somit gilt

$$\hat{H}\Psi = E_n \Psi \iff \hat{P}_R \hat{H}\Psi = E_n \hat{P}_R \Psi \iff \hat{H} \hat{P}_R \Psi = \hat{H}\Psi' = E_n \Psi',$$

d.h. bei Symmetrien haben verschiedene Zustände die selbe Energie, womit Entartung vorliegt.

4.3 Die Gruppe der Schrödingergleichung

Sei nun ein Energieniveau E_n d_n -fach entartet. Dann wähle d_n orthonormale Eigenfunktionen, welche zu E_n gehören. Diese d_n Eigenfunktionen spannen den entarteten Unterraum $\mathcal{V} \in \mathcal{H}$ von dem gesamten Hilbertraum \mathcal{H} auf, welcher invariant unter den Symmetrioperationen, welche lineare Abbildungen

$$\hat{P}_R : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$$

sind, ist. Die Darstellung sind unitär, da in dem Raum \mathcal{V} kein invarianter Unterraum existiert.

4.4 Bestimmung einer Darstellung der Symmetriegruppe

Nach Abschnitt 4.3 erhält man durch Anwendung der Symmetrioperation auf eine Eigenfunktion des entarteten Unterraums eine Linearkombination aller Eigenfunktionen

$$\hat{P}_R \Psi_\nu^n = \sum_{\kappa} \Gamma^n(R)_{\kappa\nu} \Psi_\kappa^n$$

Die Matrixen $\Gamma^n(R)$ bilden dann eine irreduzible Darstellung zu der Symmetriegruppe, unter welcher der entartete Unterraum mit dem Energielevel E_n invariant ist.

4.5 Unitarität der Darstellung

Nur wenn die Eigenfunktionen orthornmiert gewählt werden, sind die Darstellungen unitär.

4.6 Entartungsgrad

Entartungsgrad = Dimension der irreduziblen Darstellung