Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem

Seminarvortrag

Daniel Siegel

Freiburg, den 18. November 2008

1 Einleitung

Das Wigner-Eckart-Theorem ist in vielen Bereichen der Physik von Bedeutung und besitzt zahlreiche Anwendungen, da es mithilfe der Gruppen- und Darstellungstheorie das Berechnen von Matrixelementen von sogenannten Tensoroperatoren erheblich vereinfacht. In diesem Vortrag soll das Wigner-Eckart-Theorem für beliebige endliche Gruppen und kompakte Lie-Gruppen bewiesen werden. Dies erfordert einige Vorbereitungen, denen der erste Teil gewidmet ist. Im zweiten Teil werden dann Tensoroperatoren definiert und das Theorem bewiesen. Der letzte Teil befasst sich mit einer interessanten Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems für Auswahlregeln bei Übergängen in Atomen.

2 Vorbereitungen

Da die Clebsch-Gordan-Zerlegung und damit Tensorprodukträume für den Beweis des Wigner-Eckart-Theorems von zentraler Bedeutung sind, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit Tensorprodukten von Vektorräumen, Tensorproduktdarstellungen und schließlich der Clebsch-Gordan-Zerlegung von Tensorproduktdarstellungen.
Die folgende Definition mag zunächst recht abstrakt und konstruiert erscheinen, doch tatsächlich lassen sich viele physikalische Systeme durch das Konzept des Tensorproduktes von Vektorräumen beschreiben. Beispielsweise können die gekoppelten Zustände von Drehimpulsen als Elemente des Tensorproduktraumes der entkoppelten Zustandsräume aufgefasst werden.

Definition 2.1. *Seien V_1 und V_2 K-Vektorräume der Dimension d_1 und d_2, wobei auch $d_1 = \infty$ und $d_2 = \infty$ erlaubt sei. Seien darüber hinaus ψ_i $(i = 1, \dots, d_1)$ und ϕ_j $(j = 1, \dots, d_2)$ Basen von V_1 bzw. V_2. Dann sei das* ***direkte Produkt*** *oder* ***Tensorprodukt*** *$V_1 \otimes V_2$ der beiden Räume definiert als das lineare Erzeugnis der Basisvektoren $\psi_i \otimes \phi_j$:*

$$V_1 \otimes V_2 := \left\{ \sum_{i=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} a_{ij} \psi_i \otimes \phi_j \mid a_{ij} \in K \right\} . \tag{1}$$

Das direkte Produkt zweier Elemente $\psi = \sum_{i=1}^{d_1} b_i \psi_i \in V_1$ und $\phi = \sum_{j=1}^{d_2} c_j \phi_j \in V_2$ sei definiert durch

$$\psi \otimes \phi := \sum_{i=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} b_i c_j \psi_i \otimes \phi_j \ . \tag{2}$$

Durch diese Forderungen wird $V_1 \otimes V_2$ zu einem Vektorraum. Sind V_1 und V_2 endlichdimensional, so gilt insbesondere $\dim(V_1 \otimes V_2) = d_1 d_2$.

Bemerkung 2.2. In der Algebra definiert man Tensorprodukte von Räumen normalerweise mittels einer sog. universellen Eigenschaft. Der Formalismus hierfür kann aber an dieser Stelle nicht entwickelt werden; er liefert aber identische Eigenschaften.

Bemerkung 2.3. Handelt es sich bei den Vektorräumen in Def. 2.1 um Matrizenräume mit quadratischen Matrizen, d.h. $V_1 = M(n \times n, K)$ und $V_2 = M(m \times m, K)$, so lassen sich die Basisvektoren $\mathbf{E}^i \otimes \mathbf{E}^j$ $(i = 1, \dots, n^2)$, $(j = 1, \dots, m^2)$ wieder als $mn \times mn$ Matrizen schreiben, wobei die Einträge durch

$$(\mathbf{E}^i \otimes \mathbf{E}^j)_{p,q} := (\mathbf{E}^i \otimes \mathbf{E}^j)_{ab,kl} := E^i_{ak} E^j_{bl} \tag{3}$$

definiert seinen, mit $p = n(j-1)+s$ und $q = n(k-1)+t$. Mit den Basisvektoren $\mathbf{E}^i$ sind die Elementarmatrizen gemeint, die nur einen von Null verschiedenen Eintrag 1 besitzen. Die angegebene Indizierung durch p und q ist eine Konvention und entspricht einer Nummerierung nach der Größe der zweistelligen Zahlen ab (für Zeilen) bzw. kl (für Spalten). Für allgemeine Matrizen $\mathbf{A} \in V_1$ und $\mathbf{B} \in V_2$ ergibt sich nun nach (2):

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{ab,kl} = A_{ak}B_{bl} \; . \tag{4}$$

Für $n = m = 2$ erhält man beispielsweise:

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{pmatrix} (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{11,11} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{11,12} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{11,21} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{11,22} \\ (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{12,11} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{12,12} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{12,21} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{12,22} \\ (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{21,11} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{21,12} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{21,21} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{21,22} \\ (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{22,11} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{22,12} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{22,21} & (\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{22,22} \end{pmatrix} . \tag{5}$$

Lemma 2.4. *In Situation von Bemerkung 2.3 gilt:*

(i) Für $\mathbf{A}, \mathbf{A}' \in V_1$ und $\mathbf{B}, \mathbf{B}' \in V_2$ gilt $(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})(\mathbf{A}'\otimes\mathbf{B}') = (\mathbf{A}\mathbf{A}')\otimes(\mathbf{B}\mathbf{B}')$.

(ii) Gilt $K = \mathbb{C}$ und sind $\mathbf{A} \in V_1$ und $\mathbf{B} \in V_2$ unitär, dann ist auch $\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}$ unitär.

Beweis. Zu *(i)*: Der (ab, kl)-te Eintrag der linken Seite ist:

$$\sum_{u=1}^{n}\sum_{v=1}^{m}(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{ab,uv}(\mathbf{A}'\otimes\mathbf{B}')_{uv,kl} = \sum_{u=1}^{n}\sum_{v=1}^{m} A_{au}B_{bv}A'_{uk}B'_{vl} \; ;$$

der (ab, kl)-te Eintrag der rechten Seite ist:

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}')_{ak}(\mathbf{B}\mathbf{B}')_{bl} = \sum_{u=1}^{n}\sum_{v=1}^{m} A_{au}A'_{uk}B_{bv}B'_{vl} \; .$$

Es gilt offentsichtlich Gleichheit.
Zu *(ii)*: Dies folgt aus *(i)*:

$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})(\mathbf{A}^\dagger\otimes\mathbf{B}^\dagger) = (\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)\otimes(\mathbf{B}\mathbf{B}^\dagger) = \mathbf{1}_{V_1}\otimes\mathbf{1}_{V_2} = \mathbf{1}_{V_1\otimes V_2} \; .$$

Somit ist $(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger\otimes\mathbf{B}^\dagger$ und $(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})$ ist unitär. □

Satz 2.5. *Seien D^p und D^q zwei unitäre Darstellungen einer Gruppe G der Dimension d_p bzw. d_q auf den K-Vektorräumen V^p bzw. V^q. Dann definiert*

$$D : \begin{cases} G & \to \quad GL(V^p\otimes V^q) \cong GL_{d_pd_q}(K) \\ g & \mapsto \quad \mathbf{D}(g) \end{cases}$$

mit

$$\mathbf{D}(g) := \mathbf{D}^p(g)\otimes\mathbf{D}^q(g) \tag{6}$$

eine unitäre d_pd_q-dimensionale Darstellung von G auf $V^p\otimes V^q$. Dies wird die sog. ***Kronecker****- bzw.* ***Tensorproduktdarstellung*** *$D = D^p\otimes D^q$ von G genannt.*

Beweis. Für g_1 und g_2 aus G folgt nach (6), Lemma 2.4*(i)* und der Tatsache, dass D^p und D^q Darstellungen von G sind:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(g_1)\mathbf{D}(g_2) &= (\mathbf{D}^p(g_1)\otimes\mathbf{D}^q(g_1))(\mathbf{D}^p(g_2)\otimes\mathbf{D}^q(g_2)) \\ &= (\mathbf{D}^p(g_1)\mathbf{D}^p(g_2))\otimes(\mathbf{D}^q(g_1)\mathbf{D}^q(g_2)) \\ &= \mathbf{D}^p(g_1g_2)\otimes\mathbf{D}^q(g_1g_2) \\ &= \mathbf{D}(g_1g_2) \end{aligned}$$

Darüber hinaus ist jedes $\mathbf{D}(g)$ nach Lemma 2.4*(ii)* unitär. Somit ist D also eine $d_p d_q$-dimensionale unitäre Darstellung von G. □

Bemerkung 2.6. Im Allegemeinen ist die Tensorproduktdarstellung $D = D^p \otimes D^q$ aus Satz 2.5 reduzibel, selbst wenn beide Darstellungen D^p und D^q irreduzibel sind.

Im folgenden werden vier Sätze aus der Darstellungstheorie benötigt, die jedoch nur zietiert und deren Beweise hier nicht angegeben werden können; diese lassen sich aber in jedem Buch über Darstellungstheorie nachlesen (siehe auch Vortrag von Benjamin Lang).

Satz 2.7. *Sei G eine endliche Gruppe oder eine kompakte Lie-Gruppe. Dann ist jede Darstellung von G äquivalent zu einer unitären Darstellung.*

Satz 2.8. *Jede reduzible unitäre Darstellung einer beliebigen Gruppe G ist vollständig reduzibel. Insbesondere ist (mit dem vorherigen Satz) jede reduzible Darstellung einer endlichen Gruppe H oder kompakten Lie-Gruppe vollständig reduzibel.*

Satz 2.9. *Sei G eine endliche Gruppe. Dann ist die Anzahl der inäquivalenten irreduziblen Darstellungen gleich der Anzahl der Konjugationsklassen von G.*

Satz 2.10. *Sei G eine kompakte Lie-Gruppe. Dann ist die Anzahl der inäquivalenten irreduziblen Darstellungen unendlich aber abzählbar.*

Satz 2.11. *Seien D und D' zwei äquivalente Darstellungen einer Gruppe G mit zugeordneten Matrizen $\mathbf{D}$ und $\mathbf{D}'$, die durch die Ähnlichkeitstransformation*

$$\mathbf{D}'(g) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{D}(g)\mathbf{S}$$

für alle $g \in G$ miteinander verbunden sind. Falls $\mathbf{S}$ und $\mathbf{D}(g)$ unitäre Matrizen sind für alle $g \in G$, dann ist auch $\mathbf{D}'(g)$ unitär und D' eine unitäre Darstellung. Sind D und D' beide unitäre Darstellungen, d.h. sind $\mathbf{D}(g)$ und $\mathbf{D}'(g)$ für alle $g \in G$ unitär, so ist auch $\mathbf{S}$ unitär.

Sei im folgenden G eine endliche Gruppe oder eine kompakte Lie-Gruppe. Dann ist nach Satz 2.7 jede Darstellung äquivalent zu einer unitären Darstellung und nach Satz 2.8 ist jede Darstellung entweder irreduzibel oder vollständig reduzibel. Seien ferner D^p und D^q d_p- bzw. d_q-dimensionale Darstellungen von G auf den Vektorräumen V^p und V^q. Dann ist also die Tensorproduktdarstellung $D = D^p \otimes D^q$ auf $V^p \otimes V^q$ entweder irreduzibel oder vollständig reduzibel. Seien $\{D^r\}$ die nach Satz 2.9 und 2.10 höchstens abzählbar vielen irreduziblen Darstellungen von G, die nun als unitär angenommen werden können. Nach Definition der vollständigen Reduzibilität existiert also eine Ähnlichkeitstransformation, die durch eine invertierbare $d_p d_q \times d_p d_q$ Matrix $\mathbf{C}$ beschrieben werden kann, sodass man, angewandt auf $\mathbf{D}^p \otimes \mathbf{D}^q$, eine äquivalente Darstellung von G als direkte Summe der unitären irreduziblen Darstellungen $\mathbf{D}^r$ erhält, die jeweils n^r_{pq}-fach in der direkten Summe vorkommen. In Formeln erhält man also:

$$\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}^p \otimes \mathbf{D}^q)\mathbf{C} = \bigoplus_r n^r_{pq}\mathbf{D}^r \ . \tag{7}$$

Es sei erwähnt, dass (7) für jedes $g \in G$ gilt. Die rechte Seite von (7) wird **Clebsch-Gordan-Reihe** für $\mathbf{D}^p \otimes \mathbf{D}^q$ und die Einträge der Matrix $\mathbf{C}$ die zugehörigen **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** genannt. Die Clebsch-Gordan-Reihe bzw. die Clebsch-Gordan-Koeffizienten beschreiben also allgemein die Zerlegung einer reduziblen Darstellung von G in die irreduziblen Darstellungen von G. Anschaulich kann also nach (7) jede beschreibende Matrix $\mathbf{D}^p(g) \otimes \mathbf{D}^q(g)$ der Darstellung $D^p \otimes D^q$ mithilfe von $\mathbf{C}$ in eine Matrix in Blockdiagonalform gebracht werden, wobei die Blöcke durch Untermatrizen $\mathbf{D}^r(g)$ gebildet werden, die jeweils n^r_{pq}-fach vorkommen:

$$\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}^p \otimes \mathbf{D}^q)\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}^1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & 0 & \\ & & \mathbf{D}^2 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & 0 & & & & \mathbf{D}^r & \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{8}$$

Falls $n^r_{pq} \neq 0$, gibt es n^r_{pq} linear unabhängige Familien von Basisvektoren $\Theta^{r,\alpha}_l$ ($\alpha = 1, \ldots, n^r_{pq}$), ($l = 1, \ldots, d_r$) für die Unterräume $U^r \subseteq V^p \otimes V^q$, in welchen die $\mathbf{D}^r$ operieren. Da sich $V^p \otimes V^q$ als direkte Summe der U^r darstellen lässt (vgl. (7)), ist $B = \{\Theta^{r,\alpha}_l\}$ eine Basis von $V^p \otimes V^q$. Diese lässt sich natürlich auch durch die kanonische Basis $B_K = \left\{\psi^p_j \otimes \psi^q_k\right\}$ ausdrücken (vgl. Definition 2.1). Da nun aber $\mathbf{C}$ nach (7) gerade diese Transformation bewerkstelligt, werden die entsprechenden Koeffizienten gerade durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten gegeben, d.h. man erhält den Zusammenhang

$$\Theta^{r,\alpha}_l = \sum_{j=1}^{d_p} \sum_{k=1}^{d_q} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ j & k & l & \end{array} \right) \psi^p_j \otimes \psi^q_k \,, \tag{9}$$

wobei (j,k) mit $j = 1, \ldots, d_p$ und $k = 1, \ldots, d_q$ die Zeilen und (r, α, l) die Spalten von $\mathbf{C}$ nummerieren, wobei r nur auftritt, falls $n^r_{pq} \neq 0$ ist.
Natürlich lässt sich auch die inverse Gleichung formulieren:

$$\psi^p_j \otimes \psi^q_k = \sum_r \sum_{\alpha=1}^{n^r_{pq}} \sum_{l=1}^{d_r} \left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k \end{array} \right) \Theta^{r,\alpha}_l \tag{10}$$

für $j = 1, \ldots, d_p$ und $k = 1, \ldots, d_q$, wobei r über alle irreduziblen Darstellungen D^r läuft, die in der Zerlegung von $D^p \otimes D^q$ vorkommen, d.h. für die $n^r_{pq} \neq 0$ ist. Die Koeffizienten bilden wieder eine $d_p d_q \times d_p d_q$ Matrix deren Zeilen nun aber durch (r, α, l) und deren Spalten durch (j,k) indiziert werden. Es ist anschaulich klar, dass dies gerade die Matix $\mathbf{C}^{-1}$ sein muss.
Für unitäre Darstellungen D^p und D^q ist auch $D^p \otimes D^q$ eine unitäre Darstellung (siehe Satz 2.5) und da die D^r als unitär angenommen werden können (s.o.) ist nach Satz 2.11 auch die Transformationsmatrix $\mathbf{C}$ unitär, d.h. es gilt für die Einträge:

$$\left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ j & k & l & \end{array} \right)^* . \tag{11}$$

Im folgenden soll nun noch eine Identität für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten abgeleitet werden, welche später im Beweis des Wigner-Eckard-Theorems benötigt wird. Hierfür sind allerdings einige Schritte notwendig. Zu Beginn steht eine Bemerkung.

Bemerkung 2.12 (Notation)**.** Sei G eine Gruppe und $D : G \to GL(V) \cong GL(n, K)$ eine d-dimensionale Darstellung von G in einen K-Vektorraum V ($d < \infty$), wobei mit $\mathbf{D}(g)$ die darstellende Matrix von $D(g)$ bezeichnet sei und mit $D(g)_{ij}$ ihre Einträge. Seien ferner $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_d$ eine Basis von V. Um im folgenden Verwirrungen durch Notationen zu vermeiden, seien die linearen operatoren $D(g)$ auf V durch $\Phi(g)$ bezeichnet. Für diese gilt also nach Definition:

$$\Phi(g)\psi_n = \sum_{k=1}^{d} D(g)_{kn}\psi_k, \quad n = 1, \ldots, d \ , \tag{12}$$

d.h. „das Bild des n-ten Basisvektors unter $\Phi(g)$ ist die n-te Spalte von $\mathbf{D}(g)$“. Da D eine Darstellung ist, gilt insbesondere

$$\Phi(g_1 g_2) = \Phi(g_1)\Phi(g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in G \ . \tag{13}$$

In dieser Formulierung mit Operatoren spricht man eigentlich nicht von einer Darstellung, sondern von einem **G-Modul**. Die Begriffe Modul und Darstellung werden aber aus naheliegenden Gründen oft synonym verwendet.

Für die Produktdarstellung $D^p \otimes D^q$ auf $V^p \otimes V^q$ definiert man die in Bemerkung 2.12 eingeführten zugehörigen Operatoren durch

$$\Phi(g)(\psi_j^p \otimes \psi_s^q) := (\Phi^p(g)\psi_j^p) \otimes (\Phi^q(g)\psi_s^q) \ , \tag{14}$$

wobei $\Phi^p(g)$ und $\Phi^q(g)$ die linearen Operatoren der Darstellungen D^p und D^q auf V^p bzw. V^q seien. Mit (12) erhält man:

$$\begin{aligned} \Phi(g)(\psi_j^p \otimes \psi_s^q) &= \left(\sum_{k=1}^{d_p} D^p(g)_{kj}\psi_k^p\right) \otimes \left(\sum_{t=1}^{d_q} D^q(g)_{ts}\psi_t^q\right) \\ &\overset{(2)}{=} \sum_{k=1}^{d_p}\sum_{t=1}^{d_q} D^p(q)_{kj} D^q(g)_{ts}(\psi_k^p \otimes \psi_t^q) \end{aligned} \tag{15}$$

Nach (4) entspricht nun $D^p(q)_{kj}D^q(g)_{ts}$ aber gerade dem (kt, js)-ten Eintrag der Matrix der Produktdarstellung $D^p \otimes D^q$, d.h. man erhält für $\Phi(g)$ einen zu (12) analogen Ausdurck

$$\Phi(g)(\psi_j^p \otimes \psi_s^q) = \sum_{k=1}^{d_p}\sum_{t=1}^{d_q} (\mathbf{D}^p(g) \otimes \mathbf{D}^q(g))_{kt,js}(\psi_k^p \otimes \psi_t^q) \ . \tag{16}$$

Definition 2.13. *Sei D eine Darstellung einer endlichen Gruppe oder kompakten Lie-Gruppe G auf einem d-dimensionalen Vektorraum V und seien $\Phi(g)$ die nach Bemerkung 2.12 zugehörigen Operatoren. Sei D^r eine unitäre irreduzible Darstellung der Dimension d_r, die in der Zerlegung von D vorkommt. Dann seien die Projektionsoperatoren auf V definiert durch*

$$P_{mn}^r := \frac{d_r}{|G|} \sum_{g \in G} D^r(g)^*_{mn}\Phi(g) \tag{17}$$

im Falle einer endlichen Gruppe der Ordnung $|G|$ und

$$P_{mn}^r := d_r \int_G \mathrm{d}g \ D^r(g)^*_{mn}\Phi(g) \tag{18}$$

im Falle einer kompakten Lie-Gruppe.

Bemerkung 2.14. Da Lie-Gruppen die Struktur einer $\mathcal{C}^\infty$-Mannigfaltigkeit tragen, existieren lokale Kartendarstellungen der Gruppe, und so können die Gruppenelemente g (zumindest lokal) durch Parameter $y_1, \dots, y_n$ parametriesiert werden. Man kann zeigen, dass für jede stetige Funktion $f : G \to \mathbb{C}$ das Integral

$$\int_G f(g)\,\mathrm{d}g := \int_{a_1}^{b_1} \mathrm{d}y_1 \int_{a_2}^{b_2} \mathrm{d}y_2 \dots \int_{a_n}^{b_n} \mathrm{d}y_n\; f(g(y_1, y_2, \dots, y_n))\sigma(y_1, y_2, \dots, y_n) \quad (19)$$

existiert und endlich ist, wobei die Normalisierungsfunktion $\sigma(y_1, y_2, \dots, y_n)$ so gewählt ist, dass

$$\int_G \mathrm{d}g := \int_{a_1}^{b_1} \mathrm{d}y_1 \int_{a_2}^{b_2} \mathrm{d}y_2 \dots \int_{a_n}^{b_n} \mathrm{d}y_n\; \sigma(y_1, y_2, \dots, y_n) = 1\;. \quad (20)$$

Das Integral in Definition 2.13 ist also durch (19) und (20) definiert.

Satz 2.15 (Orthogonalitätsrelation)**.** *Seien D^p und D^q zwei unitäre irreduzible Darstellungen der Dimension d_p bzw. d_q einer endlichen Gruppe oder einer kompakten Lie-Gruppe G, die inäquivalent für $p \neq q$ sind und gleich für $p = q$. Dann gilt*

$$\sum_{g \in G} D^p(g)^*_{jk} D^q(g)_{st} = \frac{|G|}{d_p} \delta_{pq}\delta_{js}\delta_{kt} \quad (21)$$

im Falle einer endlichen Gruppe G der Ordnung $|G|$ und

$$\int_G D^p(g)^*_{jk} D^q(g)_{st}\,\mathrm{d}g = \frac{|G|}{d_p} \delta_{pq}\delta_{js}\delta_{kt} \quad (22)$$

im Falle der Lie-Gruppe.

Beweis. Der Beweis dieses Satzes aus der Darstellungstheorie soll hier nicht durchgeführt werden. Er kann jedoch in jedem Buch über Darstellungsthoerie nachgelesen werden. Ein Beweis wurde auch im Vortrag von Benjamin Lang gegeben. □

Im folgenden Lemma wird klar, warum die in Definition 2.13 definierten Operatoren „Projektionsoperatoren“ heißen.

Lemma 2.16. *Die Projektionsoperatoren P^r_{mn} aus Definition 2.13 besitzen die Eigenschaften:*

(i) Ist ψ^q_j $(j = 1, \dots, d_q)$ eine Basis einer weiteren unitären irreduziblen Darstellung D^q von G, die in der Zerlegung von D vorkommt, dann gilt

$$P^r_{mn}\psi^q_j = \delta_{rq}\delta_{nj}\psi^r_m\;, \quad (23)$$

wobei ψ^r_m $(m = 1, \dots, d_r)$ eine Basis der Darstellung D^r sei.

(ii) Für ein Element $\psi = \sum_l \sum_{j=1}^{d_l} a^l_j \psi^l_j$ von V, wobei l die irreduziblen Darstellungen von G bezeichnet, die in der Zerlegung von D vorkommen, gilt:

$$P^r_{nn}\psi = a^r_n \psi^r_n\;. \quad (24)$$

Beweis. Zu (i):

$$\begin{aligned}
P^r_{mn}\psi^q_j &= \frac{d_r}{|G|}\sum_{g\in G} D^r(g)^*_{mn}\Phi(g)\psi^q_j \\
&\overset{(12)}{=} \frac{d_r}{|G|}\sum_{g\in G}\sum_{k=1}^{d_q} D^r(g)^*_{mn}D^q(g)_{kj}\psi^q_k \\
&\overset{(2.15)}{=} \sum_{k=1}^{d_q}\delta_{rq}\delta_{mk}\delta_{nj}\psi^q_k \\
&= \delta_{rq}\delta_{nj}\psi^r_m
\end{aligned}$$

Zu (ii):

$$\begin{aligned}
P^r_{nn}\sum_l\sum_{j=1}^{d_l} a^l_j\psi^l_j &= \sum_l\sum_{j=1}^{d_l} a^l_j P^r_{nn}\psi^l_j \\
&\overset{(i)}{=} \sum_l\sum_{j=1}^{d_l}\delta_{rl}\delta_{nj}a^l_j\psi^r_n \\
&= a^r_n\psi^r_n
\end{aligned}$$

Der Fall, dass G eine kompakte Lie-Gruppe ist, wird analog bewiesen. □

Im obigen Produktraum $V^p \otimes V^q$ ist der Projektionsoperator nach Definition 2.13 gegeben durch

$$P^r_{mn} = \frac{d_r}{|G|}\sum_{g\in G} D^r(g)^*_{mn}\Phi(g) \tag{25}$$

mit $\Phi(g)$ aus (16). Anwenden von P^r_{ul} auf (10) ergibt nach Lemma 2.16*(i)*:

$$P^r_{ul}(\psi^p_j\otimes\psi^q_k) = \sum_{\alpha=1}^{n^r_{pq}}\left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k\end{array}\right)\Theta^{r,\alpha}_u\,. \tag{26}$$

Durch Einsetztn von (9) erhält man:

$$P^r_{ul}(\psi^p_j\otimes\psi^q_k) = \sum_{s=1}^{d_p}\sum_{t=1}^{d_q}\sum_{\alpha=1}^{n^r_{pq}}\left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k\end{array}\right)\left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ s & t & u & \end{array}\right)\psi^p_s\otimes\psi^q_t\,. \tag{27}$$

Durch direktes Anwenden erhält man andererseits:

$$\begin{aligned}
P^r_{ul}(\psi^p_j\otimes\psi^q_k) &= \frac{d_r}{|G|}\sum_{g\in G} D^r(g)^*_{ul}\Phi(g)(\psi^p_j\otimes\psi^q_k) \\
&\overset{(14)(12)}{=} \frac{d_r}{|G|}\sum_{g\in G} D^r(g)^*_{ul}\left(\sum_{s=1}^{d_p} D^p(g)_{sj}\psi^p_s\right)\otimes\left(\sum_{t=1}^{d_q} D^q(g)_{tk}\psi^q_t\right) \\
&\overset{(2)}{=} \frac{d_r}{|G|}\sum_{s=1}^{d_p}\sum_{t=1}^{d_q}\sum_{g\in G} D^p(g)_{sj}D^q(g)_{tk}D^r(g)^*_{ul}(\psi^p_s\otimes\psi^q_t)\,. \qquad (28)
\end{aligned}$$

Gleichsetzen von (27) und (28) ergibt wegen der definitionsgemäßen linearen Unabhängigkeit der $(\psi_s^p \otimes \psi_t^q)$ nun schließlich die für den Beweis des Wigner-Eckart-Theorems benötigte Identität:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{pq}^r} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ s & t & u & \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k \end{array} \right) = \frac{d_r}{|G|} \sum_{g \in G} D^p(g)_{sj} D^q(g)_{tk} D^r(g)^*_{ul} \; . \quad (29)$$

Für eine kompakte Lie-Gruppe erhält man analog das Resultat:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{pq}^r} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ s & t & u & \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|cc} r, & \alpha & p & q \\ l & & j & k \end{array} \right) = d_r \int_G D^p(g)_{sj} D^q(g)_{tk} D^r(g)^*_{ul} \, \mathrm{d}g \; . \quad (30)$$

3 Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem

Sei nun wie im letzten Abschnitt G eine endliche Gruppe oder eine kompakte Lie-Gruppe. Seien ferner D^p und D^r d_p- bzw. d_r-dimensionale irreduzible Darstellungen von G auf den Vektorräumen V^p und V^r. Der Raum der linearen Abbildungen von V^p nach V^r, bezeichnet durch $L(V^p, V^r) = Hom(V^p, V^r)$, ist ein Vektorraum der Dimension $d_p d_r$. Für jedes $g \in G$ definiere einen Operator $\Phi'(g)$ auf $L(V^p, V^r)$ durch

$$\Phi'(g) : \begin{cases} L(V^p, V^r) & \rightarrow & L(V^p, V^r) \\ Q & \mapsto & \Phi'(g)Q := \Phi^r(g) Q \Phi^p(g)^{-1} \end{cases} \; . \quad (31)$$

Hierbei sind $\Phi^r(g)$ und $\Phi^p(g)$ die nach Bemerkung 2.12 zu den irreduziblen Darstellungen D^p und D^r auf V^p und V^r gehörenden linearen Operatoren.

Satz 3.1. *Die in (31) definierten Operatoren bilden eine $d_p d_r$-dimensionale Darstellung der Gruppe G. (Eigentlich spricht man in der Formulierung mit Operatoren von einem sog.* ***Modul*** *der Gruppe G).*

Beweis. Sei $g_1, g_2 \in G$ und $Q \in L(V^p, V^r)$ beliegig. Dann folgt unter Verwendung von (13):

$$\begin{aligned} \Phi'(g_1)\Phi'(g_2)Q &= \Phi^r(g_1)\Phi^r(g_2) Q \Phi^p(G_2)^{-1} \Phi^p(G_1)^{-1} \\ &= \Phi^r(g_1 g_2) Q \Phi^p(g_1 g_2)^{-1} \\ &= \Phi'(g_1 g_2) Q \; . \end{aligned}$$

Somit gilt also $\Phi'(g_1)\Phi'(g_2) = \Phi'(g_1 g_2)$. Die Dimensionalität folgt aus der Tatsache, dass $L(V^p, V^r)$ die Dimension $d_p d_r$ besitzt. □

Sei $\mathbf{D}'(g)$ die nach Bemerkung 2.12 $\Phi'(g)$ zugeordnete Matrix und die Darstellung sei mit D' bezeichnet. Da G eine endliche Gruppe bzw. eine kompakte Lie-Gruppe ist, ist D' nach Satz 2.8 entweder irreduzibel oder vollständig reduzibel. Im Allgemeinen wird für D' letzteres gelten. Sei also D^q eine irreduzible Darstellung von G, die in der Clebsch-Gordan-Zerlegung von D' auftritt und $Q_1^q, \ldots, Q_{d_q}^q$ eine Basis des entsprechenden d_q-dimensionalen Unterraums von $L(V^p, V^r)$. Dann gilt für alle $g \in G$ nach (12):

$$\Phi^r(g) Q_n^q \Phi^p(g)^{-1} = \Phi'(g) Q_n^q = \sum_{k=1}^{d_q} D^q(g)_{kn} Q_k^q, \quad n = 1, \ldots, d_q \; . \quad (32)$$

Dies liefert nun die Vorlage für folgende Definition.

Definition 3.2 (Tensoroperatoren)**.** *Sei G eine endliche Gruppe oder eine kompakte Lie-Gruppe. Seien D^p und D^r d_p- bzw. d_r-dimensionale irreduzible Darstellungen von G auf den Vektorräumen V^p und V^r und sei D^q eine weitere d_q-dimensionale irreduzible Darstellung von G. Seien ferner $Q_1^q, \ldots, Q_{d_q}^q \in L(V^p, V^r)$ eine Familie von linearen Operatoren, für die gilt:*

$$\Phi^r(g) Q_n^q \Phi^p(g)^{-1} = \sum_{k=1}^{d_q} D^q(g)_{kn} Q_k^q, \quad n = 1, \ldots, d_q\ , \tag{33}$$

*für alle $n = 1, \ldots, d_q$ und $g \in G$. Dann wird die Menge $\{Q_n^q\}$ irreduzibler **Tensoroperator** der irreduziblen Darstellung D^q von G genannt.*

Theorem 3.3 (verallgemeinertes Wigner-Eckart-Theorem)**.** *Sei G eine endliche Gruppe oder eine kompakte Lie-Gruppe. Seien D^p, D^q und D^r unitäre irreduzible Darstellungen von G auf den unitären Vektorräumen V^p, V^r bzw. einem beliebigen Vektorraum V^q der Dimension d_p, d_q bzw. d_r und seien ψ_j^p $(j = 1, \ldots, d_p)$ und ψ_l^q $(l = 1, \ldots, d_q)$ orthonormale Basen von V^p bzw. V^r bezüglich des jeweiligen Skalarproduktes $(\ ,\ )$ auf V^p bzw. V^r. Sei ferner Q_k^q $(k = 1, \ldots, d_q)$ ein irreduzibler Tensoroperator von D^q. Dann gilt:*

$$(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p) = \sum_{\alpha=1}^{n_{pq}^r} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ j & k & l & \end{array} \right)^* (r|Q^q|p)_\alpha \tag{34}$$

*für alle $j = 1, \ldots, d_p$, $k = 1, \ldots, d_q$ und $l = 1, \ldots, d_r$, wobei $(r|Q^q|p)_\alpha$ eine Menge von n_{pq}^r sog. **reduzierten Matrixelementen** bilden, die jeweils unabhängig sind von j, k und l.*

Beweis. Da die Operatoren $\Phi^r(g)$ $(g \in G)$ unitär sind, folgt:

$$\begin{aligned}
(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p) &= (\Phi^r(g)\psi_l^r, \Phi^r(g) Q_k^q \psi_j^p) \\
&= (\Phi^r(g)\psi_l^r, \Phi^r(g) Q_k^q \Phi^p(g)^{-1} \Phi^p(g) \psi_j^p) \\
&\overset{(12)}{=} \sum_{u=1}^{d_r} D^r(g)_{ul}^* (\psi_u^r, \{\Phi^r(g) Q_k^q \Phi^p(g)^{-1}\} \Phi^p(g) \psi_j^p) \\
&\overset{(12),(33)}{=} \sum_{s=1}^{d_p} \sum_{t=1}^{d_q} \sum_{u=1}^{d_r} D^p(g)_{sj} D^q(g)_{tk} D^r(g)_{ul}^* (\psi_u^r, Q_t^q \psi_s^p)\ .
\end{aligned}$$

Summation über alle Gruppenelemente g ergibt:

$$|G|(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p) = \sum_{s=1}^{d_p} \sum_{t=1}^{d_q} \sum_{u=1}^{d_r} \sum_{g \in G} D^p(g)_{sj} D^q(g)_{tk} D^r(g)_{ul}^* (\psi_u^r, Q_t^q \psi_s^p)\ . \tag{35}$$

Wie in Satz 2.5 gezeigt, kann aus den Darstellungen D^p und D^q stets eine Produktdarstellung $D^p \otimes D^q$ von G konstruiert werden. Mithilfe dieser Produktdarstellung konnte aber in (29) gerade ein Zusammenhang zwischen den Clebsch-Gordan-Koeffizienten dieser Produktdarstellung und den Matrixelementen der Darstellungen D^p, D^q und D^r abgeleitet werden. Identifiziert man nun also die Matrixelemente auf der rechten Seite von (35) mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Produktdarstellung $D^p \otimes D^q$

gemäß (29), so ergibt sich mit (11), da D^p und D^q unitär sind:

$$(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p) = \frac{1}{d_r} \sum_{s=1}^{d_p} \sum_{t=1}^{d_q} \sum_{u=1}^{d_r} \sum_{\alpha=1}^{n_{pq}^r} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ j & k & l & \end{array} \right)^* \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ s & t & u & \end{array} \right) (\psi_u^r, Q_t^q \psi_s^p) \; . \tag{36}$$

Für eine Lie-Gruppe erhält man analog das gleiche Resultat unter Verwendung von (30). Definiert man nun noch die reduzierten Matrixelemente durch

$$(r|Q^q|p)_\alpha := \frac{1}{d_r} \sum_{s=1}^{d_p} \sum_{t=1}^{d_q} \sum_{u=1}^{d_r} \left(\begin{array}{cc|cc} p & q & r, & \alpha \\ s & t & u & \end{array} \right) (\psi_u^r, Q_t^q \psi_s^p) \; , \tag{37}$$

so hängen diese offensichtlich nicht von j, k und l ab, und die Aussage ist bewiesen. □

Bemerkung 3.4. In der für viele Anwendungen gebräuchlichen Bra-Ket-Notation lautet das Wigner-Eckart-Theorem:

$$\langle \psi_l^r | Q_k^q | \psi_j^p \rangle = \sum_{\alpha=1}^{n_{pq}^r} \langle \alpha, r, l(q,p) kj \rangle \langle r | Q^q | p \rangle \; . \tag{38}$$

Die Bedeutung des Wigner-Eckhart-Theorems liegt in der Tatsache, dass die Vielzahl an Matrixelementen auf der linken Seite ($d_p d_q d_r$ Elemente) nur durch n_{pq}^r reduzierte Matrixelemente auf der rechten Seite bestimmt wird. Die j, k, l-Abhängigkeit der $(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p)$ wird nur durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten gegeben (die im Allgemeinen in Tabellen nachgeschlagen werden können), d.h. die j, k, l-Abhängigkeit ist schon durch den formalen gruppentheoretischen Rahmen des betrachteten physikalischen Systems vorgegeben. Die Eigenschaften des Operators und der Zustände des Systems gehen nur in die reduzierten Matrixelemente ein. In vielen wichtigen physikalischen Anwendungen (z.B. dreidimensionale Rotationssymmetrie) kommt jede irreduzible Darstellung nur einmal in der Zerlegung der Tensorproduktdarstellung vor, d.h. $(\psi_l^r, Q_k^q \psi_j^p)$ hängt sogar nur von einem reduzierten Matrixelement ab. Darüber hinaus führt das Wigner-Eckart-Theorem durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten auf natürliche Weise zu Auswahlregeln für Operatoren (siehe z.B. auch nächster Abschnitt). Aufgrund dieser Vereinfachungen ist das Wigner-Eckart-Theorem von großer Bedeutung in vielen Bereichen der Physik und besitzt eine Vielzahl von Anwendungen.

4 Anwendung

Wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt, führt das Wigner-Eckart-Theorem durch die Clebsch-Gordan-Coeffizienten auf natürliche Weise zu Auswahlregeln. Ein naheliegendes Beispiel in diesem Zusammenhang sind die Auswahlregeln für elektromagnetische Übergänge in Atomen.

Bei einem elektromagnetischen Übergang innerhalb eines Atoms werde ein Photon mit Drehimpuls (s, λ) emittiert, im Atom findet dann ein Übergang vom Zustand $|j, m\rangle$ in den Zustand $|j', m'\rangle$ statt, wobei s, j, j' den Betrag des Gesamtdrehimpulses angibt und λ, m, m' die Komponente entlang einer beliebigen Quantisierugsachse, d.h. $\lambda = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$ (entsprechend für m, m'). Beispielhaft sei im folgenden der Fall $s = j = j' = 1$ betrachtet. Die a priori möglichen Übergänge und die entsprechenden Energieniveaus sind in Abb. 1 dargestellt.

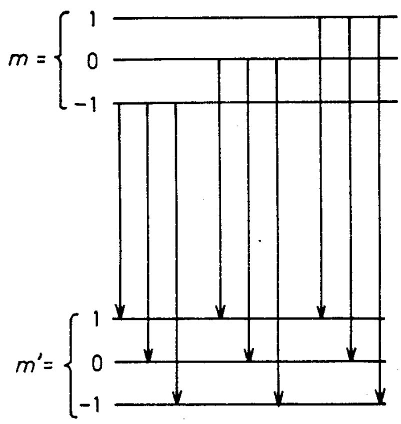

Abbildung 1: Prinzipiell mögliche Übergänge ohne Symmetriebetrachtung (aus [2]).

Die Übergangswahrscheinlichkeiten der einzelnen Übergänge sind proportional zu den Betragsquadraten der entsprechenden Matrixelemente $\langle j'm'|H^s_\lambda|jm\rangle$, wobei H^s_λ der sog. Multipol-Übergangsoperator ist (es lässt sich zeigen, dass dieser durch

$$H^{kh}_{s\lambda} = \int \mathrm{d}^3x \, \mathbf{J}(x) \cdot \mathbf{A}^{kh}_{s\lambda}(\mathbf{x}) \tag{39}$$

gegeben ist, wobei $\mathbf{A}^{kh}_{s\lambda}$ die Multipolentwicklung des Vektorpotentials und $\mathbf{J}$ den Operator des elektromagnetischen Stroms des Systems darstellt; k und h bezeichnen Wellenvektor und Helizität des Photons). Man kann zeigen, dass $H^{kh}_{s\lambda}$ invariant unter Drehungen der kompakten Lie-Gruppe SO(3) ist, d.h. $H^{kh}_{s\lambda}$ ist ein Tensoroperator bzgl. der Einsdarstellung von SO(3). Somit sind die Voraussetzungen für die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems erfüllt. Da für SO(3) jede irreduzible Darstellung nur einmal in der Zerlegung einer Produktdarstellung vorkommt (dazu vielleicht mehr in einem nachfolgenden Vortrag des Seminars), existiert nur ein reduziertes Matrixelement f_0, das alle neun Übergänge bestimmt, und das Wigner-Eckart-Theorem ergibt mit (38):

$$\langle j'm'|H^s_\lambda|jm\rangle = \langle j'm'(s,j)\lambda, m\rangle f_0 \, . \tag{40}$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind nur von Null verschieden, falls die Summe der magnetischen Quantenzahlen der ungekoppelten Zustände gleich der magnetischen Quantenzahl des gekoppelten Zusatandes ist, d.h.:

$$m' = m + \lambda \quad \text{oder} \quad \lambda = m - m' \, . \tag{41}$$

Im vorliegenden Fall müssen nun also die Koeffizienten

$$\langle 1, m'(1,1)m - m', m\rangle \tag{42}$$

ermittelt werden, die jedoch in Tabellen nachgeschlagen werden können. Aus Tabelle 1 wird nun ersichtlich, dass tatsächlich nur sieben der ursprünglich neun Übergänge eine nicht verschwindende Übergangswahrscheinlichkeit besitzen (siehe Abb. 2). Mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten können nun auch die relativen Intensitäten der Übergänge bestimmt werden (siehe Abb. 2).
Tatsächlich ist der Multipol-Übergangsoperator auch invariant unter Paritätstransformationen, d.h. er ist invariant unter der Gruppe O(3), die, wie sich zeigen lässt,

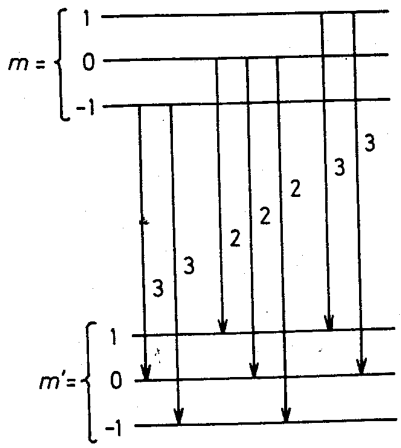

Abbildung 2: Erlaubte Übergänge und relative Intensitäten (aus [2]).

das direkte Produkt der Gruppe SO(3) und der Gruppe P mit den beiden Elementen *id* und $-id$ ist, $O(3) = SO(3) \otimes P$. Die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems auf diesen Fall erfordert jedoch noch wesentlich mehr Kenntnisse über die Gruppen SO(3), O(3) und der Paritätsgruppe (dazu vielleicht mehr in einem nachfolgenden Vortrag des Seminars). Es zeigt sich jedoch, dass einige weitere Übergänge verboten werden.

$m' \diagdown m$	-1	0	1
-1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0
0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

Tabelle 1: Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle 1, m'(1,1)m - m', m\rangle$.

Literatur

[1] J. F. Cornwell, *Group theory in physics*, Volume I, Academic Press, 1989

[2] Wu-Ki Tung, *Group theory in physics*, World Scientific Publishing, 1985

[3] H. F. Jones, *Groups, representations and physics*, IOP Publishing, 1990

[4] F. Iachello, *Lie Algebras and Applications*, Lecture Notes in Phyics 708, Springer-Verlag, 2006

[5] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics*, Second Edition, Springer-Verlag, Westview Press, 1999

[6] C. Cohen-Tannoudji et. al., *Quantenmechanik*, Teil 2, de Gruyter, 1997

[7] *Lexikon der Physik in sechs Bänden*, Spektrum Akademischer Verlag, 2000