



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT
GÖTTINGEN



Universität Hamburg
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

BACHELORARBEIT

Das Wigner-Eckart-Theorem für Beliebige Symmetriegruppen

von

Nicolas Hamel

aus Hamburg

am I. Institut für theoretische Physik
in Hamburg

Erstgutachter: Prof. Dr. Michael Potthoff

Zweitgutachter: Prof. Dr. Fabian Heidrich-Meisner

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
2. Mathematische Grundlagen: Symmetrien, Darstellungen und Drehimpulse	2
2.1. Gruppen und Darstellungen	2
2.2. Drehimpulsdarstellungen von Drehgruppen	4
2.3. Tensorprodukte und Drehimpulskopplung	6
2.4. Sphärische Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem	8
2.5. Beispiel: Der Elektrische Dipoloperator	9
3. Ein allgemeiner Beweis des Wigner-Eckart-Theorems	11
3.1. Verallgemeinerte Tensoroperatoren	11
3.2. Mathematische Voraussetzungen des allgemeinen Beweis	11
3.3. Allgemeiner Beweis	12
3.4. Wigner-Eckart-Theorem als Spezialfall	14
4. Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems auf die Symmetriegruppe S3	15
4.1. Tight-Binding-Modell mit S3-Symmetrie	15
4.2. Irreduzible Darstellung des Hilbertraums	16
4.3. Tensoroperatorraum	17
4.4. Tensorproduktraum	18
4.5. Adjungierte Einbettung und Clebsch-Gordan-Koeffizienten	19
4.6. Reduzierte Matrixelemente und Wigner-Eckart-Theorem	20
4.7. Anwendung: Diagonalisierung des Hamiltonoperators	21
5. Zusammenfassung und Diskussion	25
5.1. Zentrale Ergebnisse des allgemeinen Beweises	25
5.2. Anwendung auf die Symmetriegruppe S3	26
5.3. Symmetrische Struktur des Hamiltonoperators	27
6. Anhang	29
6.1. Basis des Zustandsraums $U^{(3)}$	29
6.2. Basis des Tensoroperatorraums $T^{(3)}$	30
6.3. Berechnung der Unterräume W_4, W_5 und W_6	31
6.4. Adjungierte Einbettung	33
6.5. Clebsch-Gordan-Koeffizienten	34
6.6. Reduzierte Matrixelemente γ_{ij}^k	35
6.7. Reduzierte Matrixelemente δ_{ij}^1	37
Referenzen	I

1. Einleitung

Die Berechnung von Matrixelementen spielt in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle, da sich aus ihnen unter anderem Übergangsamplituden und damit Übergangswahrscheinlichkeiten bestimmen lassen. Das Wigner-Eckart-Theorem (benannt nach Eugene Wigner und Carl Eckart) dient als Hilfsmittel, um Matrixelemente von Tensoroperatoren zu berechnen. Insbesondere bei Tensoroperatoren mit einer großen Anzahl von Matrixelementen kann das Wigner-Eckart-Theorem den Rechenaufwand erheblich reduzieren. Da das Wigner-Eckart-Theorem Matrixelemente mit Clebsch-Gordan-Koeffizienten verknüpft, lassen sich aus den verschwindenden Koeffizienten außerdem Auswahlregeln unmittelbar ableiten.

In den gängigen Lehrbüchern der fortgeschrittenen Quantenmechanik wird das Wigner-Eckart-Theorem ausschließlich im Kontext sphärischer Tensoroperatoren formuliert, die ein bestimmtes Transformationsverhalten bezüglich einer Drehgruppe aufweisen (vgl. [1], [2]). Daher ist das Theorem in erster Linie in Zusammenhang mit der Quantenmechanik des Drehimpulses bekannt. In den Jahren zwischen seiner Veröffentlichung 1927 und dem Jahr 1980 wurde das Theorem auf weitere Klassen von Tensoroperatoren und Symmetriegruppen erweitert [3]. Die dabei verwendeten Voraussetzungen und Beweisführungen waren jedoch jeweils an die betrachtete Gruppe beziehungsweise den betrachteten Tensoroperator angepasst. Daher unterscheiden sich die Beweisführungen je nach betrachteter Symmetriegruppe und Tensoroperator.

Im Jahr 1980 gelang dem Mathematiker und Physiker Vishnu Agrawala ein gruppenunabhängiger Beweis des Wigner-Eckart-Theorems, der nicht auf den spezifischen Eigenschaften einer bestimmten Symmetriegruppe beruht [3]. Damit zeigte er, dass sich das Wigner-Eckart-Theorem unter allgemeinen Voraussetzungen unabhängig von den spezifischen Eigenschaften der betrachteten Gruppe formulieren lässt und erweiterte damit seinen Gültigkeitsbereich. Für den Beweis genügten zwei Voraussetzungen: Das Lemma von Schur (i) und die Tensorproduktzerlegung in irreduzible Darstellungsräume (ii).

Durch den Beweis von Agrawala wird deutlich, dass Clebsch-Gordan-Koeffizienten nicht auf die Kopplung von Drehimpulsdarstellungen beschränkt sind, sondern allgemein bei der Zerlegung von Tensorprodukten irreduzibler Darstellungen auftreten. Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist zunächst eine didaktische Aufbereitung und ausführliche Erklärung des Beweises von Agrawala. Danach soll eine konkrete Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems auf ein quantenmechanisches System mit S_3 -Symmetrie erfolgen, für welches entsprechende Beschreibungen in der gängigen Literatur nicht zu finden sind.

2. Mathematische Grundlagen: Symmetrien, Darstellungen und Drehimpulse

Symmetrien spielen in der modernen Physik eine zentrale Rolle. So stellt zum Beispiel das Noether-Theorem einen direkten Zusammenhang zwischen kontinuierlichen Symmetrien und physikalischen Erhaltungsgrößen her. Auch beim Wigner-Eckart-Theorem trägt die Symmetrie des quantenmechanischen Systems maßgeblich zur Vereinfachung der Berechnung von Matrixelementen bei.

2.1. Gruppen und Darstellungen

Symmetrien lassen sich mathematisch durch Transformationen beschreiben, welche die relevanten physikalischen Eigenschaften eines Systems unverändert lassen. Die Menge dieser Transformationen besitzt eine natürliche algebraische Struktur, die durch den Begriff der Gruppe erfasst wird. Die Theorie der Gruppen bildet daher die mathematische Grundlage der Symmetriebeschreibung.

Definition 1 Eine Gruppe ist eine Menge G zusammen mit einer inneren Verknüpfung $\cdot : G \times G \rightarrow G$, die die folgenden Axiome erfüllt [4]:

- Für alle $g_1, g_2, g_3 \in G$ gilt:
 $(g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$
- Es gibt ein eindeutiges neutrales Element $e \in G$, für das für alle $g \in G$ gilt:
 $g \cdot e = e \cdot g = g$
- Zu jedem $g \in G$ existiert ein eindeutiges inverses Element $g^{-1} \in G$ mit
 $g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$

Um tatsächliche Transformationen beschreiben zu können, betrachtet man einen Vektorraum V , auf den die Gruppenelemente als lineare Abbildungen wirken. Dieser Vektorraum wird als Darstellungsraum der Gruppe bezeichnet. Die Gruppenelemente nehmen dann zum Beispiel die Gestalt von Operatoren oder Matrizen an. Diese Gestalt bezeichnet man als die Darstellung der Gruppe.

Definition 2 Als Darstellung einer Gruppe G auf dem Vektorraum V bezeichnet man eine Funktion $\rho : G \rightarrow \text{Aut}(V)$, die die folgende Eigenschaft erfüllt [3]:

$$\rho(g_1 \cdot g_2) = \rho(g_1) \cdot \rho(g_2) \quad (2.1)$$

Diese Eigenschaften garantieren, dass die Gruppenstruktur erhalten bleibt. Der Raum V ist in diesem Fall der Darstellungsraum der Gruppe G . Die Wirkung der Gruppenelemente $g \in G$ auf die Elemente $v \in V$ ist dann definiert als [3]

$$g \cdot v = \rho(g)(v) \quad (2.2)$$

Ist eine Gruppe von Symmetrietransformationen und ein Darstellungsraum, auf den diese Transformationen wirken, gegeben, so kann man das Transformationsverhalten der Elemente des Darstellungsraums unter der Gruppenwirkung untersuchen. Bei den Elementen des Darstellungsraums kann es sich zum Beispiel um Größen oder Funktionen handeln, die ein physikalisches System beschreiben. Von besonderem Interesse sind dabei Unterräume, die unter der Gruppenwirkung invariant bleiben. Daher definiert man die sogenannten irreduziblen Darstellungsräume:

Definition 3 Als irreduzibel bezeichnet man einen Darstellungsraum W , wenn der Nullraum $\{0\} \subset W$ und W selbst die einzigen Unterräume von W sind, die unter der Gruppenwirkung invariant sind [4]. Eine Darstellung, die auf einem irreduziblen Darstellungsraum wirkt, wird ebenfalls als irreduzibel bezeichnet.

Beispiel Ein Beispiel für eine Symmetriegruppe mit einer endlichen Anzahl von irreduziblen Darstellungen ist die Gruppe S_3 , die sich beschreiben lässt als Gruppe der sechs Kongruenzabbildungen eines gleichseitigen Dreiecks (s. Abb. 2.1). Neben der identischen Abbildung e gibt es 5 weitere Kongruenzabbildungen: Zunächst die Rotation d des Dreiecks um 120° , bei der die Eckpunkte (1,2,3) des Dreiecks im Uhrzeigersinn permutieren. Außerdem eine Rotation d^2 um 240° , bei der die Eckpunkte gegen den Uhrzeigersinn permutieren. Sowie drei Spiegelungen s_1 , s_2 und s_3 , bei der jeweils zwei Eckpunkte vertauscht werden.

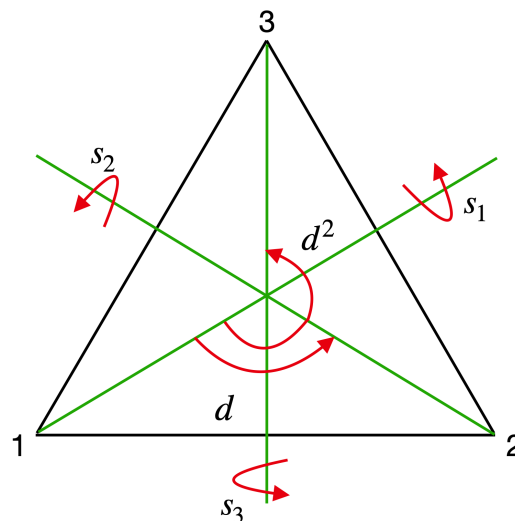


Abbildung 2.1: Die Kongruenzabbildungen eines gleichseitigen Dreiecks als Visualisierung der Gruppenelemente von S_3

Die Drehung d um 120° und die Spiegelung s_1 sind die erzeugenden Gruppenelemente von S_3 , da sich alle weiteren Gruppentransformationen als Verknüpfungen von d und s_1 auffassen lassen. Die Drehung d^2 um 240° entspricht zum Beispiel

einfach einer zweimaligen Drehung d um 120° , während die Spiegelung s_2 einer Drehung d und anschließenden Spiegelung s_1 entspricht.

Die Gruppe S_3 besitzt genau drei irreduzible Darstellungen [5]:

1. Die eindimensionale triviale Darstellung definiert durch

$$\rho^{(1)} : S_3 \rightarrow \mathbb{R}^{1 \times 1}, \rho^{(1)}(d) = 1, \rho^{(1)}(s_1) = 1 \quad (2.3)$$

2. Die eindimensionale Signum-Darstellung definiert durch

$$\rho^{(2)} : S_3 \rightarrow \mathbb{R}^{1 \times 1}, \rho^{(2)}(d) = 1, \rho^{(2)}(s_1) = -1 \quad (2.4)$$

3. Die zweidimensionale Standard-Darstellung definiert durch

$$\rho^{(3)} : S_3 \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}, \rho^{(3)}(d) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \rho^{(3)}(s_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Auch in dieser Arbeit werden irreduzible Darstellungsräume und Homomorphismen zwischen diesen eine wichtige Rolle spielen. Relevant für die Herleitung des Wigner-Eckart-Theorems wird dabei das Lemma von Schur sein, das gleich zwei Aussagen über Darstellungshomomorphismen (sog. Intertwiner) macht. Als Intertwiner bezeichnet man eine lineare Abbildung, die mit der Gruppenwirkung verträglich ist.

Lemma von Schur Seien U, V und W irreduzible Darstellungsräume und $s \in \text{Hom}(U, V)$, $t \in \text{Hom}(W, W)$ jeweils Darstellungshomomorphismen (Intertwiner). Dann ist [3]

- (I) s genau dann keine Nullabbildung, wenn s ein Isomorphismus ist und
- (II) t ein Vielfaches des Identitätsoperators $\mathbf{1}$.

Das Lemma von Schur (I) kann auch wie folgt formuliert werden: *Jeder Homomorphismus zwischen zwei irreduziblen Darstellungsräumen U und V ist entweder ein Isomorphismus oder die Nullabbildung.*

Das Lemma von Schur (II) kann wie folgt formuliert werden: *Jeder Homomorphismus auf einem irreduziblen Darstellungsraum W ist ein Vielfaches des Identitätsoperators.*

2.2. Drehimpulsdarstellungen von Drehgruppen

Eine bekannte Symmetriegruppe ist die Gruppe $SO(3)$, die Rotationen im dreidimensionalen Raum beschreibt. Die Gruppe $SO(3)$ kann zum Beispiel standardmäßig auf dem euklidischen Raum $V = \mathbb{R}^3$ dargestellt werden. Die Gruppenelemente nehmen dann die Form der 3×3 -Rotationsmatrizen

$$R_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha_1) & -\sin(\alpha_1) \\ 0 & \sin(\alpha_1) & \cos(\alpha_1) \end{pmatrix} \quad R_2 = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_2) & 0 & \sin(\alpha_2) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha_2) & 0 & \cos(\alpha_2) \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$R_3 = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_3) & -\sin(\alpha_3) & 0 \\ \sin(\alpha_3) & \cos(\alpha_3) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

an ([1], Kap. 27.4). $SO(3)$ besitzt neben der dreidimensionalen Standarddarstellung weitere Darstellungen auf Vektorräumen unterschiedlicher Dimension. Die allgemeinen Darstellungsmatrizen R_i lassen sich in Exponentialform als

$$R_i(\alpha_i) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha_i J_i\right), \quad (2.8)$$

schreiben. Dabei bezeichnet J_i die hermiteschen Generatoren der entsprechenden Darstellung. Bezüglich der Standarddarstellung von $SO(3)$ auf dem euklidischen Raum $V = \mathbb{R}^3$ erhält man für die Generatoren zum Beispiel die folgenden drei Matrizen [1]:

$$J_1 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_2 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_3 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Die Generatoren J_1, J_2 und J_3 erzeugen somit die Standarddarstellung von $SO(3)$. Sie erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[J_1, J_2] = i\hbar J_3 \quad [J_2, J_3] = i\hbar J_1 \quad [J_3, J_1] = i\hbar J_2 \quad (2.10)$$

und bilden dadurch selbst eine Darstellung der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ [1]. Diese Kommutatorrelationen werden aber nicht nur von den dreidimensionalen Generatoren J_1, J_2, J_3 erfüllt. Auch in anderen Dimensionen existieren Matrizen, die diese Kommutatorrelationen erfüllen. In zwei Dimensionen sind dies zum Beispiel die Pauli-Spinmatrizen, die eine zweidimensionale Darstellung derselben Lie-Algebra bilden. Wenn man die Pauli-Matrizen als Generatoren exponentiert, erhält man allerdings nicht die Darstellungsmatrizen R_i von $SO(3)$, sondern stattdessen eine Darstellung der Symmetriegruppe $SU(2)$ ([4], Kap. 6, 8).

Die verschiedenen Darstellungen dieser Lie-Algebra werden durch eine Zahl $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ klassifiziert. Zu jeder Darstellung gehört ein Darstellungsraum der Dimension $2j+1$. Für ganzzahlige Werte von j erhält man eine $2j+1 = 1, 3, 5, 7, \dots$ dimensionale Darstellung von $SO(3)$, während man für halbzahlige Werte von j eine $2j+1 = 2, 4, 6, 8, \dots$ dimensionale Darstellung von $SU(2)$ erhält ([4], Kap. 6, 8).

Zudem zeigt sich, dass ein Hamiltonoperator genau dann rotationsinvariant, wenn er mit allen Generatoren J_i der Drehgruppe kommutiert ([1], Kap. 27). Das bedeutet, dass der Drehimpuls in diesem Fall eine Erhaltungsgröße ist, und die Generatoren J_i die Operatoren des Drehimpulses sind. Die Generatoren J_1, J_2 und J_3 bilden dann zum Beispiel eine Darstellung mit dem Wert $j = 1$ der Lie-Algebra in drei Dimensionen.

Vielfache des Operators $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ sind die einzigen Operatoren, die mit allen drei Drehimpulsoperatoren J_i kommutieren ([1], Kap. 27). Daher haben zum Beispiel die Operatoren J_3 und J^2 eine gemeinsame Eigenbasis $|jm\rangle$ mit $m = -j, -j+1, \dots, j$. Die Eigenwerte der Operatoren J^2 und J_3 berechnet man durch die Definition von geeigneten Leiteroperatoren. Damit erhält man ([1], Kap. 27)

$$J_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \quad J^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \quad (2.11)$$

Den Wert j nennt man die Drehimpulsquantenzahl, die gleichzeitig die Dimension des Darstellungsraums V_j klassifiziert. Die Generatoren in 2.9 sind also die Operatoren des Drehimpulses im dreidimensionalen Darstellungsraum $V_{j=1}$ der Spin-1-Zustände mit den Eigenzuständen $|jm\rangle = |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$.

2.3. Tensorprodukte und Drehimpulskopplung

Betrachtet man zwei Drehimpulse $|j_1 m_1\rangle \in V_{j_1}$ und $|j_2 m_2\rangle \in V_{j_2}$, so bilden die Produktzustände $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle := |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$ eine Basis des gekoppelten Produktraums $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ ([4], Kap. 6). Dieser Produktraum ist ebenfalls ein Darstellungsraum der Drehgruppe $SO(3)$ oder $SU(2)$ bezüglich der Gruppenwirkung [3]

$$g \cdot (|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle) = \rho_{V_{j_1}}(g) |j_1 m_1\rangle \otimes \rho_{V_{j_2}}(g) |j_2 m_2\rangle. \quad (2.12)$$

Da $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ selbst ein Darstellungsraum von $SO(3)$ oder $SU(2)$ ist, stellt sich die Frage, ob dieser Raum irreduzibel ist. Im Allgemeinen ist dies nicht der Fall. Vielmehr zerfällt das Tensorprodukt in eine direkte Summe irreduzibler Unterdarstellungen ([4], Kap. 6)

$$V_{j_1} \otimes V_{j_2} = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} V_J \quad (2.13)$$

Der Index $J = |j_1-j_2|, \dots, j_1+j_2$ bezeichnet die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses des gekoppelten Systems. Die Räume V_J sind Unterräume des Produktraums. Jeder dieser Unterräume trägt eine irreduzible Darstellung mit Gesamtdrehimpuls J und besitzt eine Basis $|JM\rangle$ mit der Quantenzahl J und der magnetischen Quantenzahl $M = -J, \dots, J$ des Gesamtdrehimpuls ([4] App. B).

Da $V_J \subset V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ kann jeder Basisvektor $|JM\rangle \in V_J$ wie folgt als Linearkombination der Produktbasis geschrieben werden:

$$|JMj_1j_2\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1m_1; j_2m_2\rangle \langle j_1m_1; j_2m_2|JM\rangle. \quad (2.14)$$

Dabei bezeichnet $|JMj_1j_2\rangle$ den Vektor $|JM\rangle$ in der Basis des Produktraums. Die Koeffizienten $\langle j_1m_1; j_2m_2|JM\rangle$ werden Clebsch-Gordan-Koeffizienten genannt ([1], [3]).

Die Vektoren $|j_1m_1; j_2m_2\rangle \in V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ und $|JM\rangle \in V_J$ gehören zunächst unterschiedlichen Darstellungsräumen an. Das Skalarprodukt zwischen ihnen ist also nur dann sinnvoll definiert, wenn einer der beiden Vektoren in den jeweils anderen Darstellungsraum eingebettet bzw. projiziert wird. Die obige Notation der Clebsch-Gordan-Koeffizienten setzt bereits stillschweigend voraus, dass der Vektor $|JM\rangle \in V_J$ in den Produktraum $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ eingebettet ist. Eigentlich müssten die Clebsch-Gordan-Koeffizienten also geschrieben werden als

$$\langle j_1m_1; j_2m_2|Q_J|JM\rangle, \quad (2.15)$$

wobei $Q_J : V_J \rightarrow V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ die Einbettung des irreduziblen Unterraums in den Produktraum bezeichnet. Für die Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten (wie sie beispielhaft in Kapitel 4 durchgeführt wird) ist es notwendig, die Einbettung Q_J zunächst zu bestimmen.

Mit der adjungierten Einbettung $Q_J^\dagger : V_{j_1} \otimes V_{j_2} \rightarrow V_J$ gilt außerdem

$$\langle j_1m_1; j_2m_2|Q_J|JM\rangle = \langle JM|Q_J^\dagger|j_1m_1; j_2m_2\rangle. \quad (2.16)$$

2.4. Sphärische Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem

Das Wigner-Eckart-Theorem für Drehimpulse macht eine Aussage über die Matrixelemente von sogenannten sphärischen Tensoroperatoren. Ein sphärischer Tensoroperator vom Rang k ist eine Menge von $2k + 1$ linearen Operatoren $T_q^k : U \rightarrow V$ $q = -k, \dots, k$ deren Komponenten sich unter Rotationen wie die Basisvektoren der irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe mit $j = k$ transformieren. Ein Sphärischer Tensoroperator transformiert unter der Wirkung der Drehgruppe wie folgt ([2] Kap. 3.11):

$$R \cdot T_q^k = U(R)T_q^kU(R)^\dagger = \sum_{q'=-k}^k D_{q'q}^k(R)T_{q'}^k \quad (2.17)$$

Dabei ist $U(R)$ der unitäre Operator, der eine Rotation R der Drehgruppe darstellt. Dieses Transformationsverhalten zeigt, dass der von den Komponenten T_q^k aufgespannte Raum unter der Gruppenwirkung invariant ist. Das zeigt sich darin, dass die Komponenten eines Operators unter einer Rotation wieder in eine Linearkombination derselben Komponenten transformiert werden.

Das Transformationsverhalten bezüglich der Wirkung der Drehgruppe lässt sich mit dem eines Drehimpulseigenzustands $|jm\rangle$ vergleichen ([2] Kap. 3.11):

$$R \cdot |jm\rangle = U(R) |jm\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^j(R) |jm'\rangle \quad (2.18)$$

Auch der Darstellungsraum der Drehimpulseigenzustände $|jm\rangle$ bildet einen irreduziblen Darstellungsraum der Drehgruppe $SO(3)$ oder $SU(2)$. Der Vergleich zeigt, dass ein sphärischer Tensoroperator T_q^k unter der Wirkung der Drehgruppe wie ein Drehimpulseigenzustand $|j=k, m=q\rangle$ transformiert. Der Rang k und die Komponente q eines sphärischen Tensoroperators ergibt sich also über sein Transformationsverhalten. Dies wird im nächsten Abschnitt anhand des Dipoloperators konkret veranschaulicht.

Das Wigner-Eckart-Theorem besagt, dass sich Matrixelemente von sphärischen Tensoroperatoren über das Produkt von einem reduzierten Matrixelement, das unabhängig von der magnetischen Quantenzahl m ist, und einem Clebsch-Gordan-Koeffizienten berechnen lassen. Da das reduzierte Matrixelement unabhängig von der Quantenzahl m ist, lassen sich viele Matrixelemente durch die zugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten einfach bestimmen, ohne für jeden einzelnen Drehimpulszustand das Matrixelement über ein individuelles Integral berechnen zu müssen.

Das Theorem wird wie folgt formuliert [1]:

$$\gamma_{j_1 j_2}^k \langle j_2 m_2 j_1 k | j_1 m_1; k q \rangle = \langle j_2 m_2 | T_q^k | j_1 m_1 \rangle. \quad (2.19)$$

Dabei sind $|j_1 m_1\rangle$ und $|j_2 m_2\rangle$ Drehimpulseigenzustände mit den Quantenzahlen j_1, m_1 bzw. j_2, m_2 und T_q^k ein sphärischer Tensoroperator vom Rang k mit $2k+1$ Komponenten $q = -k, -k+1, \dots, k$. Der Faktor $\gamma_{j_1 j_2}^k$ ist das reduzierte Matrixelement, das nicht von den magnetischen Quantenzahlen m_1, m_2, q abhängt, aber vom Tensoroperator sowie von j_1, j_2 und k abhängen kann. $\langle j_2 m_2 j_1 k | j_1 m_1; k q \rangle$ ist der Clebsch-Gordan Koeffizient für die Kopplung des Drehimpulseigenzustands $|j_1 m_1\rangle$ mit einem weiteren Drehimpulseigenzustand $|k q\rangle$ um $|j_2 m_2 j_1 k\rangle$ zu erhalten.

2.5. Beispiel: Der Elektrische Dipoloperator

Ein Beispiel für einen sphärischen Tensoroperator ist der elektrische Dipoloperator [2]

$$\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}} \quad (2.20)$$

Wir können nun beispielsweise die Matrixelemente des Operators $\langle j_2 m_2 | \hat{d}_z | j_1 m_1 \rangle$ betrachten, die einen Dipolübergang bezüglich eines in z -Richtung polarisierten elektrischen Felds beschreiben.

Für die z -Komponente des Dipoloperators gilt in Kugelkoordinaten

$$\hat{d}_z = -e\hat{z} = -er \cos(\theta) = -er \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} = -er \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |10\rangle \quad (2.21)$$

Damit lässt sich $\hat{d}_z$ über den Drehimpulseigenzustand $|10\rangle$ ausdrücken und weist bezüglich der Drehgruppe daher dasselbe Transformationsverhalten wie dieser Zustand auf. Der Dipoloperator ist demnach ein sphärischer Tensoroperator vom Rang $k = 1$ und seine z -Komponente wird mit der sphärischen Komponente $q = 0$ identifiziert. Das Wigner-Eckart-Theorem besagt nun, dass die Matrixelemente $\langle j_2 m_2 | \hat{d}_z | j_1 m_1 \rangle$ proportional zu den Clebsch-Gordan Koeffizienten $\langle j_2 m_2 j_1 k | j_1 m_1; k q \rangle$ sind, wobei $k = 1$ und $q = 0$ ist. Also gilt für dieses Beispiel

$$\gamma_{j_1 j_2}^1 \langle j_2 m_2 j_1 1 | j_1 m_1; 10 \rangle = \langle j_2 m_2 | \hat{d}_z | j_1 m_1 \rangle \quad (2.22)$$

Legt man den Anfangszustand $|j_1 m_1\rangle$ zum Beispiel auf einen Drehimpuls mit $j_1 = 1$ fest, dann liefert die in Abbildung 2.1 dargestellte Tabelle die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Kopplung eines Drehimpulses $|1 m_1\rangle$ und $|10\rangle$ um einen Drehimpuls $|j_2 m_2 11\rangle$ zu erhalten. Da die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für nicht zulässige Kopplungen verschwinden, lassen sich daraus unmittelbar die Auswahlregeln für die Matrixelemente ablesen. Aus der Tabelle entnimmt man, dass es für einen Übergang von dem betrachteten Anfangszustand $|1 m_1\rangle$ in einen beliebigen Endzustand nur insgesamt vier Matrixelemente gibt. Alle anderen Übergänge sind demnach physikalisch nicht erlaubt. Da das reduzierte Matrixelement für die betrachteten Übergänge unabhängig von den magnetischen Quantenzahlen $m_{1/2}$ und q ist, genügt die Berechnung eines einzigen nichtverschwindenden Matrixelements. Die restlichen Matrixelemente ergeben sich aus den in der Tabelle 2.1 angegebenen Proportionalitäten.

Tabelle 2.1: Clebsch-Gordan-Koeffizienten für einen Dipolübergang in z -Richtung eines Spin-1 Zustands [6].

$m_1 \setminus j_2, m_2$	2, 2	2, 1	1, 1	2, 0	1, 0	2, -1	1, -1	2, -2	0, 0
1	0	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	0	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$
-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

3. Ein allgemeiner Beweis des Wigner-Eckart-Theorems

3.1. Verallgemeinerte Tensoroperatoren

Bisher wurde das Wigner-Eckart-Theorem nur für sphärische Tensoroperatoren formuliert. Tensoroperatoren lassen sich jedoch auch bezüglich anderer Symmetriegruppen über eine spezifische Gruppenwirkung definieren. Auf dieser Grundlage kann das Wigner-Eckart-Theorem jeweils für die betrachtete Gruppe hergeleitet werden [3]. Die Voraussetzungen für einen solchen gruppenspezifischen Beweis hängen dabei von den Eigenschaften der betrachteten Gruppe und des jeweiligen Tensoroperators ab. Bei der Betrachtung einer neuen Symmetriegruppe oder eines neuen Tensoroperators müssen daher jeweils die entsprechenden Voraussetzungen überprüft werden, bevor das Wigner-Eckart-Theorem angewendet werden kann. Im Jahr 1980 veröffentlichte Vishnu Agrawala einen gruppenunabhängigen Beweis des Wigner-Eckart-Theorems [3].

Anhand des Transformationsverhaltens sphärischer Tensoroperatoren in Gleichung 2.17 wurde bereits gezeigt, dass der von ihren Komponenten aufgespannte Raum einen irreduziblen Darstellungsraum der Drehgruppe bildet. Diesen Zusammenhang verallgemeinert Agrawala für beliebige Gruppen, indem er eine allgemeine Gruppenwirkung auf dem Raum $\text{Lin}(U, V)$ aller linearen Operatoren zwischen den Hilberträumen U und V definiert. Auf einen linearen Operator $t \in \text{Lin}(U, V)$ wirkt die Gruppe durch

$$g \cdot t = \rho_V(g)t\rho_U(g)^{-1}. \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet $\rho_U(g)$ beziehungsweise $\rho_V(g)$ das Bild des Gruppenelements g unter der Darstellung auf U beziehungsweise V . Agrawala definiert einen Tensoroperatorraum T als einen unter der Gruppenwirkung invarianten Unterraum von $\text{Lin}(U, V)$. Die Elemente des Tensoroperatorraums T bezeichnen wir mit t und nennen sie Tensoroperatoren.

Wählt man eine Basis $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ des Tensoroperatorraums T , so transformieren sich deren Elemente unter der Gruppenwirkung entsprechend den Basisvektoren eines äquivalenten Darstellungsraums (zum Beispiel U und V) der Gruppe.

3.2. Mathematische Voraussetzungen des allgemeinen Beweises

Bevor die einzelnen Beweisschritte von Agrawala betrachtet werden, wird zunächst das Wigner-Eckart-Theorem in seiner sphärischen Formulierung für Drehimpulseigenzustände erneut betrachtet:

$$\gamma_{j_1 j_2}^k \langle j_2 m_2 j_1 k | j_1 m_1; k q \rangle = \langle j_2 m_2 | T_q^k | j_1 m_1 \rangle. \quad (3.2)$$

Dabei sind $|j_1 m_1\rangle \in U$, $|j_2 m_2\rangle \in V$ Drehimpulseigenzustände, k bezeichnet den Rang des Tensoroperators T_q^k und q den zugehörigen Komponentenindex. Mit der zugehörigen adjungierten Einbettung $Q^\dagger : U \otimes T \rightarrow V$ und der Notation der Clebsch-Gordan-Koeffizienten aus Gleichung 2.16 lässt sich das Wigner-Eckart-Theorem auch in der Form:

$$\langle j_2 m_2 | \gamma_{j_1 j_2}^k Q_{j_2}^\dagger (|j_1 m_1\rangle \otimes |k q\rangle) = \langle j_2 m_2 | T_q^k |j_1 m_1\rangle \quad (3.3)$$

schreiben. Bezüglich einer beliebigen Gruppe und der verallgemeinerten Definition von Tensoroperatoren lautet das Wigner-Eckart-Theorem dann

$$v^* \gamma Q^\dagger (u \otimes t) = v^* t u. \quad (3.4)$$

Dabei bezeichnet $v^* \in V^*$ einen Vektor aus dem zu V dualen Darstellungsraum V^* und $u \in U$ einen Vektor aus dem Darstellungsraum U . $t \in T$ bezeichnet einen Tensoroperator im Darstellungsraum T . Da die Gleichung für alle $v^* \in V^*$ gilt, kann v^* auf beiden Seiten der Gleichung entfernt werden. Dann gilt

$$\underbrace{\gamma Q^\dagger (u \otimes t)}_{\phi: U \otimes T \rightarrow V} = \underbrace{t u}_{\in V}. \quad (3.5)$$

Auf der rechten Seite wird der Operator t auf den Zustand u angewandt, wodurch man einen Vektor $t u \in V$ im Darstellungsraum V erhält. Der Ausdruck auf der linken Seite beschreibt eine Projektion des Vektors $u \otimes t$ aus dem Produktraum $U \otimes T$ in den Darstellungsraum V .

Der zentrale Schritt des Beweises ist es, zunächst einen allgemeinen Homomorphismus $\phi \in \text{Hom}(U \otimes T, V)$ zu betrachten. Mithilfe der Tensorproduktzerlegung und Schur's Lemma leitet Agrawala die Beziehung $\phi = \gamma Q^\dagger$ her. Damit ist bewiesen, dass jeder Homomorphismus vom Darstellungsraum $U \otimes T$ in den irreduziblen Darstellungsraum V einer beliebigen Gruppe ein Vielfaches der adjungierten Einbettung $Q^\dagger$ ist. Das allgemeine Wigner-Eckart-Theorem folgt direkt aus dieser Behauptung für die spezielle Wahl von $\phi(u \otimes t) = t u$.

3.3. Allgemeiner Beweis

Der Beweis für die obige Behauptung lässt sich in zwei Schritte aufteilen: Die Tensorproduktzerlegung von $U \otimes T$ und die anschließende Anwendung von Schur's Lemma.

Tensorproduktzerlegung von $U \otimes T$:

Wenn der Tensorproduktraum $U \otimes T$ in eine direkte Summe irreduzibler Darstellungsräume W_i gemäß

$$U \otimes T = \bigoplus_i W_i \quad (3.6)$$

zerfällt, dann lässt sich jeder Vektor $u \otimes t \in U \otimes T$ als Summe von Vektoren w_i der irreduziblen Unterräume W_i schreiben. Wichtig ist dabei zu beachten, dass die Vektoren w_i in den Raum $U \otimes T$ eingebettet sind. Um die Darstellung der Vektoren innerhalb des Unterraums W_i von ihrer Einbettung in den Produktraum $U \otimes T$ zu unterscheiden, wird im Folgenden zwischen $w_i \in W_i$ und seiner Einbettung $q_i w_i \in U \otimes T$ unterschieden. Dann gilt

$$u \otimes t = \sum_i q_i w_i \quad (3.7)$$

Zur Tensorproduktzerlegung gehören für jeden Unterraum W_i eine kanonische Projektion $p_i : U \otimes T \rightarrow W_i$ und eine kanonische Injektion $q_i : W_i \rightarrow U \otimes T$. Die Projektion p_i projiziert die Vektoren $u \otimes t$ aus dem Produktraum zunächst durch $p_i(u \otimes t) = w_i$ in den Unterraum W_i . Die Injektion q_i bettet die Vektoren w_i aus dem Unterraum W_i wieder in den Produktraum $U \otimes T$ ein. Der Homomorphismus ϕ lässt sich damit schreiben als

$$\phi(u \otimes t) = \phi\left[\sum_i q_i p_i(u \otimes t)\right] = \sum_i \phi q_i p_i(u \otimes t) \quad (3.8)$$

Anwendung von Schur's Lemma:

Nach Schur's Lemma (I) ist der Homomorphismus $\phi q_i : W_i \rightarrow V$ zwischen den irreduziblen Darstellungsräumen W_i und V nur dann keine Nullabbildung, wenn ϕq_i die beiden Räume isomorph aufeinander abbildet. Sei $J \subseteq I$ die Indexmenge der zu V isomorphen Unterräume W_i . Dann tragen nach Schur's Lemma nur diese Summanden zu ϕ bei:

$$\phi(u \otimes t) = \sum_i \phi q_i p_i(u \otimes t) = \sum_j \phi q_j p_j(u \otimes t) \quad (3.9)$$

Noch steckt die Proportionalitätskonstante γ in der Funktion ϕ , weshalb Agrawala eine elegante Umformung nutzt und die Summe durch einen Identitätsoperator wie folgt erweitert:

$$\phi(u \otimes t) = \sum_j \phi q_j \mathbf{1} p_j(u \otimes t) = \sum_j \phi q_j (f_j^{-1} f_j) p_j(u \otimes t) \quad (3.10)$$

Dabei ist $f_j \in \text{Iso}(W_j, V)$ ein beliebiger Isomorphismus zwischen den isomorphen Räumen W_j und V , sodass $\mathbf{1} = f_j^{-1} f_j$. Da ϕ, q_j und f_j jeweils Homomorphismen sind und somit der Operator $\phi q_j f_j^{-1} : V \rightarrow W_j \rightarrow U \otimes T \rightarrow V$ ebenfalls ein Homomorphismus auf dem Raum V ist, besagt Schur's Lemma (II), dass dieser Operator ein Vielfaches des Identitätsoperators $\mathbf{1}$ ist. Gleichung 3.10 vereinfacht sich also zu

$$\phi(u \otimes t) = \sum_j \gamma_j f_j p_j(u \otimes t). \quad (3.11)$$

Dabei bezeichnet γ_j die Proportionalitätskonstante, die als reduziertes Matrixelement interpretiert wird. Den Operator $f_j p_j \in \text{Hom}(U \otimes T, V)$ identifiziert man mit der bereits eingeführten adjungierten Einbettung $Q_j^\dagger$. Damit ist gezeigt, dass sich jeder Homomorphismus $\phi \in \text{Hom}(U \otimes T, V)$ als Vielfaches der adjungierten Einbettung $Q_j^\dagger$ schreiben lässt.

3.4. Wigner-Eckart-Theorem als Spezialfall

Wählt man für ϕ den Homomorphismus $\phi(u \otimes t) = tu$, ergibt sich das allgemeine Wigner-Eckart-Theorem:

$$\sum_j \gamma_j f_j p_j (u \otimes t) = tu. \quad (3.12)$$

Gleichung 3.12 stellt die allgemeine und basisunabhängige Formulierung des Wigner-Eckart-Theorems für beliebige Symmetriegruppen dar. Um aus dieser verallgemeinerten Form wieder die bekannte Form des Wigner-Eckart-Theorems für Drehimpulse zu erhalten, schreibt man den Vektor $u \in U$ und den Operator $t \in T$ wieder in der entsprechenden Eigenbasis. Wendet man zusätzlich von der linken Seite den Bra $\langle j_2 m_2 | \in V^*$ an, erhält man

$$\langle j_2 m_2 | \sum_j \gamma_j f_j p_j | j_1 m_1; kq \rangle = \sum_j \gamma_j \langle j_2 m_2 | Q_j^\dagger | j_1 m_1; kq \rangle = \langle j_2 m_2 | T_q^k | j_1 m_1 \rangle. \quad (3.13)$$

Im Fall der Drehimpulsdarstellungen tritt jede zulässige irreduzible Darstellung in der Clebsch-Gordan-Zerlegung mit Vielfachheit eins auf. Daher gibt es genau einen zu V isomorphen Summanden, sodass die Summe auf einen Term reduziert wird. Damit erhält man das Wigner-Eckart-Theorem in der Drehimpulsdarstellung:

$$\gamma_{j_1 j_2}^k \langle j_2 m_2 | Q_{j_1 j_2 k}^\dagger | j_1 m_1; kq \rangle = \langle j_2 m_2 | T_q^k | j_1 m_1 \rangle. \quad (3.14)$$

4. Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems auf die Symmetriegruppe S3

Um die allgemeine Form des Wigner-Eckart-Theorems für eine Symmetriegruppe jenseits der Drehgruppen konkret zu untersuchen, betrachten wir im Folgenden ein einfaches quantenmechanisches Modell mit S3-Symmetrie. Die Symmetriegruppe S3 mit ihren irreduziblen Darstellungen wurde bereits in Kapitel 2 vorgestellt.

4.1. Tight-Binding-Modell mit S3-Symmetrie

Wir betrachten im Folgenden ein einzelnes Teilchen, das sich auf drei äquivalenten Gitterplätzen auf den Eckpunkten eines gleichseitigen Dreiecks befinden kann. Der Zustandsraum U dieses Systems wird von den drei Basisvektoren $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ aufgespannt, wobei $|i\rangle$ den Zustand bezeichnet, bei dem sich das Teilchen auf dem i -ten Gitterplatz befindet. Damit gilt

$$U = \text{span}\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\} \quad (4.1)$$

Dieses Modell ist ein einfaches Beispiel eines Tight-Binding-Modells. In der Tight-Binding-Näherung wird angenommen, dass das Teilchen im Wesentlichen an einzelnen Gitterplätzen lokalisiert ist und sich durch sogenannte Hopping-Prozesse zwischen benachbarten Plätzen bewegen kann. Die Zustände $|i\rangle$ bilden dabei eine lokale Basis, während die Matrixelemente des Hamiltonoperators die Energie eines lokalisierten Teilchens sowie die Übergangsamplituden zwischen verschiedenen Gitterplätzen beschreiben. Für das gleichseitige Dreieck sind aufgrund der Symmetrie alle drei Gitterplätze äquivalent und jedes Paar von Gitterplätzen durch eine Kante des Dreiecks miteinander verbunden. Der Hamiltonoperator wird daher in der Form

$$H = \varepsilon \sum_{i=1}^3 |i\rangle \langle i| - t \sum_{i \neq j} |i\rangle \langle j| \quad (4.2)$$

gewählt. Der erste Term beschreibt die lokale Energie ε des Teilchens auf jedem der drei äquivalenten Gitterplätze. Der zweite Term beschreibt das Hopping zwischen den verschiedenen Plätzen mit der Hopping-Amplitude t . Die Gleichheit aller Diagonal- bzw. Hoppingparameter ergibt sich aus der angenommenen Symmetrie des Systems. In der lokalen Basis besitzt der Hamiltonoperator somit die Form

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & -t & -t \\ -t & \varepsilon & -t \\ -t & -t & \varepsilon \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

4.2. Irreduzible Darstellung des Hilbertraums

Das System weist eine Symmetrie bezüglich der Gruppe S_3 auf. Insbesondere bleibt der Hamiltonoperator unter der zyklischen Permutation d aller Gitterplätze und der zweimaligen Vertauschung s_1 der Gitterplätze 2 und 3 invariant. Um die Darstellung von S_3 auf dem Hilbertraum U zu bestimmen, betrachten wir die Wirkung der erzeugenden Gruppenelemente d und s_1 auf der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$:

Unter der zyklischen Permutation d der Gitterplätze transformiert die Basis durch

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} |3\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} |2\rangle \\ |3\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Bezüglich der Vertauschung s_1 transformiert dieselbe Basis durch

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{s_1} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |3\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{s_1} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Der dreidimensionale Hilbertraum U ist kein irreduzibler Darstellungsraum von S_3 , sondern zerfällt in eine direkte Summe irreduzibler Unterräume

$$U = U^{(1)} \oplus U^{(3)} \quad (4.6)$$

Der irreduzible Zustandsraum $U^{(1)} = \text{span}\{b_0^{(1)}\}$ ist durch die Wirkung

$$d \cdot b_0^{(1)} = \rho^{(1)}(d)b_0^{(1)} = b_0^{(1)} \quad s_1 \cdot b_0^{(1)} = \rho^{(1)}(s_1)b_0^{(1)} = b_0^{(1)} \quad (4.7)$$

definiert. Zustände dieses Raums transformieren also über die triviale Darstellung von S_3 . Eine Basis dieses Raums ist gegeben durch den Vektor

$$b_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \quad (4.8)$$

Der irreduzible Zustandsraum $U^{(3)} = \text{span}\{b_1^{(3)}, b_2^{(3)}\}$ ist durch die Wirkung

$$\begin{aligned} d \cdot b_1^{(3)} &= \rho^{(3)}(d)b_1^{(3)} = -\frac{1}{2}(b_1^{(3)} + \sqrt{3}b_2^{(3)}) \\ s_1 \cdot b_1^{(3)} &= \rho^{(3)}(s_1)b_1^{(3)} = -b_1^{(3)} \\ d \cdot b_2^{(3)} &= \rho^{(3)}(d)b_2^{(3)} = \frac{1}{2}(\sqrt{3}b_1^{(3)} - b_2^{(3)}) \\ s_1 \cdot b_2^{(3)} &= \rho^{(3)}(s_1)b_2^{(3)} = b_2^{(3)} \end{aligned} \quad (4.9)$$

definiert. Zustände dieses Raums transformieren also über die zweidimensionale Standard-Darstellung von S_3 . Eine Basis dieses Raums ist gegeben durch die Vektoren (siehe Anhang 6.1)

$$b_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) \quad b_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|2\rangle + |3\rangle - 2|1\rangle) \quad (4.10)$$

Die Signum-Darstellung $\rho^{(2)}$ tritt in der Zerlegung von U nicht auf. Damit ergibt sich die vollständige Zerlegung

$$U = \text{span}\{b_0^{(1)}, b_1^{(3)}, b_2^{(3)}\} \quad (4.11)$$

4.3. Tensoroperatorraum

Für die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems wird neben dem Zustandsraum U ein Raum von Tensoroperatoren benötigt, deren Matrixelemente zwischen den Zuständen von U untersucht werden sollen. In dem hier betrachteten Tight-Binding-Modell sind die lokalen Besetzungsoperatoren

$$n_i = |i\rangle \langle i| \quad (4.12)$$

besonders relevant. Der Operator n_i projiziert auf den Zustand, in dem sich das Teilchen am Gitterplatz i befindet. Seine Erwartungswerte geben somit die lokale Besetzung des jeweiligen Gitterplatzes an. Die drei Operatoren n_1, n_2 und n_3 bilden daher einen naheliegenden Tensoroperatorraum:

$$T = \text{span}\{|1\rangle \langle 1|, |2\rangle \langle 2|, |3\rangle \langle 3|\} \quad (4.13)$$

Jedes $t \in T$ ist dabei ein linearer Operator $t : U \rightarrow U$. Gleichzeitig besitzen diese Tensoroperatoren ein besonders einfaches Transformationsverhalten bezüglich der Gruppe S_3 . Da die Gruppenoperationen von S_3 die Gitterplätze permutieren, werden auch die Besetzungsoperatoren in Folge der Gruppenoperationen permutiert. Der Tensoroperatorraum T ist unter dieser Gruppenwirkung abgeschlossen und bildet damit selbst einen Darstellungsraum von S_3 . Die Tensoroperatoren t von T transformieren bezüglich der Gruppenoperationen d und s_1 wie folgt:

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \langle 1| \\ |2\rangle \langle 2| \\ |3\rangle \langle 3| \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} |3\rangle \langle 3| \\ |1\rangle \langle 1| \\ |2\rangle \langle 2| \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} |1\rangle \langle 1| \\ |2\rangle \langle 2| \\ |3\rangle \langle 3| \end{pmatrix} \xrightarrow{s_1} \begin{pmatrix} |1\rangle \langle 1| \\ |3\rangle \langle 3| \\ |2\rangle \langle 2| \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Der Tensoroperatorraum T ist kein irreduzibler Darstellungsraum von S_3 , sondern zerfällt ebenfalls in eine direkte Summe irreduzibler Unterräume:

$$T = T^{(1)} \oplus T^{(3)} \quad (4.15)$$

Der irreduzible Tensoroperatorraum $T^{(1)} = \text{span}\{t_0^{(1)}\}$ ist durch die Wirkung

$$d \cdot t_0^{(1)} = \rho^{(1)}(d)t_0^{(1)}\rho^{(1)}(d)^{-1} = t_0^{(1)} \quad s_1 \cdot t_0^{(1)} = \rho^{(1)}(s_1)t_0^{(1)}\rho^{(1)}(s_1)^{-1} = t_0^{(1)} \quad (4.16)$$

definiert. Tensoroperatoren dieses Raums transformieren also über die triviale Darstellung von S_3 . Eine Basis dieses Raums ist gegeben durch den Vektor

$$t_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3|) \quad (4.17)$$

Der irreduzible Tensoroperatorraum $T^{(3)} = \text{span}\{t_1^{(3)}, t_2^{(3)}\}$ ist durch die Wirkung

$$\begin{aligned} d \cdot t_1^{(3)} &= \rho^{(3)}(d)t_1^{(3)}\rho^{(3)}(d)^{-1} = -\frac{1}{2}(t_1^{(3)} + \sqrt{3}t_2^{(3)}) \\ s_1 \cdot t_1^{(3)} &= \rho^{(3)}(s_1)t_1^{(3)}\rho^{(3)}(s_1)^{-1} = -t_1^{(3)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} d \cdot t_2^{(3)} &= \rho^{(3)}(d)t_2^{(3)}\rho^{(3)}(d)^{-1} = \frac{1}{2}(\sqrt{3}t_1^{(3)} - t_2^{(3)}) \\ s_1 \cdot t_2^{(3)} &= \rho^{(3)}(s_1)t_2^{(3)}\rho^{(3)}(s_1)^{-1} = t_2^{(3)} \end{aligned}$$

definiert. Tensoroperatoren dieses Raums transformieren über die zweidimensionale Darstellung. Eine Basis dieses Raums ist gegeben durch (siehe Anhang 6.2)

$$t_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle\langle 2| - |3\rangle\langle 3|) \quad t_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - 2|1\rangle\langle 1|) \quad (4.19)$$

Der Tensoroperator $t_0^{(1)} \in T^{(1)}$ transformiert unter der Gruppenwirkung von S_3 also wie der Eigenzustand $b_0^{(1)} \in U^{(1)}$, während der Tensoroperator $t_1^{(3)} \in T^{(3)}$ bzw. $t_2^{(3)} \in T^{(3)}$ wie der Eigenzustand $b_1^{(3)} \in U^{(3)}$ bzw. $b_2^{(3)} \in U^{(3)}$ transformiert. Damit ist die Analogie zwischen Zustands- und Tensoroperatorraum explizit: Sowohl U als auch T zerfallen in eine triviale und eine zweidimensionale irreduzible Darstellung. Die Basisvektoren $b_n^{(i)}$ und $t_n^{(i)}$ tragen dabei jeweils dieselben Darstellungen von S_3 .

4.4. Tensorproduktraum

Nun kann der Tensorproduktraum $U \otimes T$ berechnet werden. Dieser ergibt sich aufgrund der Zerlegung von U und T zu

$$\begin{aligned} U \otimes T &= (U^{(1)} \oplus U^{(3)}) \otimes (T^{(1)} \oplus T^{(3)}) \\ &= (U^{(1)} \otimes T^{(1)}) \oplus (U^{(1)} \otimes T^{(3)}) \oplus (U^{(3)} \otimes T^{(1)}) \oplus (U^{(3)} \otimes T^{(3)}) \\ &:= W_1 \oplus W_2 \oplus W_3 \oplus (W_4 \oplus W_5 \oplus W_6) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die ersten drei Tensorprodukte sind bereits irreduzibel und werden mit W_1, W_2, W_3 bezeichnet. W_1 ist ein trivialer Darstellungsraum, während W_2 und W_3 jeweils zweidimensionale Darstellungsräume von S_3 sind. Das Tensorprodukt $U^{(3)} \otimes T^{(3)}$ ist dagegen reduzibel und zerfällt in eine direkte Summe der irreduziblen Unterräume W_4, W_5 und W_6 . Der Unterraum W_4 ist ein trivialer Darstellungsraum, der Raum

W_5 ein Signum-Darstellungsraum und W_6 ein zweidimensionaler Darstellungsraum von S_3 .

Mit den oben bestimmten Basen der Räume $U^{(i)}$ und $T^{(k)}$ lassen sich die Unterräume W_α berechnen. Für die Räume W_1, W_2, W_3 ergibt sich die Basis unmittelbar aus den Tensorprodukten der zuvor bestimmten Basen:

$$\begin{aligned} W_1 &= \text{span}\{b_0^{(1)} \otimes t_0^{(1)}\} \\ W_2 &= \text{span}\{b_0^{(1)} \otimes t_1^{(3)}, b_0^{(1)} \otimes t_2^{(3)}\} \\ W_3 &= \text{span}\{b_1^{(3)} \otimes t_0^{(1)}, b_2^{(3)} \otimes t_0^{(1)}\} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Da $U^{(3)} \otimes T^{(3)}$ in eine direkte Summe eines trivialen Darstellungsraums W_4 , eines Signum-Darstellungsraums W_5 und eines zweidimensionalen standard Darstellungsraums W_6 zerfällt, können die entsprechenden Basisvektoren durch die Transformationswirkungen und die Orthogonalitätsbedingungen gefunden werden. Für die Basis der eindimensionalen Unterräume W_4 bzw. W_5 sind zwei zueinander orthonormale Vektoren w der Form

$$w = \lambda_1(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_2(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \quad (4.22)$$

gesucht, die über die triviale Darstellung $\rho^{(1)}$ bzw. die Signum-Darstellung $\rho^{(2)}$ von S_3 transformieren. Für den zweidimensionalen irreduziblen Darstellungsraum W_6 sind zwei zueinander orthonormale Vektoren derselben Form gesucht, die über die zweidimensionale Darstellung $\rho^{(3)}$ von S_3 transformieren und zusätzlich auch orthonormal zu den Basisvektoren von W_4 und W_5 sind. Aus diesen Bedingungen berechnet man (s. Anhang 6.3)

$$\begin{aligned} W_4 &= \text{span}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)})\right\} \\ W_5 &= \text{span}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} - b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)})\right\} \\ W_6 &= \text{span}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} + b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}), \frac{1}{\sqrt{2}}(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} - b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)})\right\} \end{aligned} \quad (4.23)$$

4.5. Adjungierte Einbettung und Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Für den Endzustandsraum V wählen wir einen der beiden irreduziblen Unterräume des Zustandsraums U (s. [3]), also

$$V^{(1)} = \text{span}\{b_0^{(1)}\} \quad V^{(3)} = \text{span}\{b_1^{(3)}, b_2^{(3)}\} \quad (4.24)$$

Die eindimensionalen Räume W_1 und W_4 tragen die triviale Darstellung und sind somit isomorph zum eindimensionalen Endzustandsraum $V^{(1)}$. Der eindimensionale Raum W_5 trägt allerdings die Signum-Darstellung und ist somit nicht isomorph zu $V^{(1)}$. Die zweidimensionalen Räume W_2 , W_3 und W_6 tragen die zweidimensionale Darstellung von S3 und sind daher isomorph zum zweidimensionalen Endzustandsraum $V^{(3)}$. Damit ist bereits ohne Berechnung einzelner Matrixelemente festgelegt, welche Kopplungen überhaupt einen Beitrag zum Wigner-Eckart-Theorem liefern können: Nur solche Unterräume W_α , die zum Endzustandsraum V isomorph sind, können zu nichtverschwindenden Matrixelementen beitragen.

Für jeden zu $V^{(j)}$ isomorphen Unterraum W_α definiert die adjungierte Einbettung $Q_{\alpha j}^\dagger$ die Abbildung von $W_\alpha \subset U \otimes T$ in den Endzustandsraum $V^{(j)}$. Wegen der Beziehung $Q_{\alpha j}^\dagger = f_\alpha p_\alpha(u \otimes t)$ gilt zum Beispiel

$$Q_{63}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = f_1 p_1(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = f_1(\frac{1}{2}w_2^{(3)} \in W_6) = \frac{1}{2}b_2^{(3)} \quad (4.25)$$

Durch analoge Rechnungen ermittelt man auch die restlichen Beziehungen, die in Anhang 6.4 zu finden sind. Die im Wigner-Eckart-Theorem auftretenden Clebsch-Gordan Koeffizienten lauten

$$\langle b_m^{(j)} | Q_{\alpha j}^\dagger(b_n^{(i)} \otimes t_p^{(k)}) \rangle = \langle b_m^{(j)} | Q_{\alpha j}^\dagger | b_n^{(i)}; t_q^{(k)} \rangle := C_{inkp}^{j m} \quad (4.26)$$

Mit den Beziehungen aus 6.4 lassen sich die Clebsch-Gordan-Koeffizienten nun einfach berechnen. Diese sind in Anhang 6.5 aufgeführt.

4.6. Reduzierte Matrixelemente und Wigner-Eckart-Theorem

Um das Wigner-Eckart-Theorem für das betrachtete S3-symmetrische System vollständig zu bestimmen, müssen nun die reduzierten Matrixelemente γ_{ij}^k berechnet werden. Dafür wählen wir für die Räume $U^{(i)}$, $V^{(j)}$ und $T^{(k)}$ wieder die Basen aus Kapitel 4.2 und 4.3.

Für jeden der Blöcke 6.16 - 6.20 wird ein nichtverschwindender Clebsch-Gordan-Koeffizient ausgewählt und das zugehörige Matrixelement direkt berechnet (s. Anhang 6.6). Durch den Vergleich mit der Darstellung des Matrixelements nach dem Wigner-Eckart-Theorem ergeben sich die reduzierten Matrixelemente

$$\gamma_{11}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \gamma_{13}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \gamma_{33}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \gamma_{31}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \gamma_{33}^3 = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad (4.27)$$

Alle übrigen Kombinationen (i, j, k) führen aufgrund der S3-Symmetrie zu verschwindenden Matrixelementen und besitzen daher kein unabhängiges reduziertes Matrixelement. Damit hat das Wigner-Eckart-Theorem für das betrachtete S3-System die konkrete Form

$$\langle b_m^{(j)} | t_p^{(k)} | b_n^{(i)} \rangle = \gamma_{ij}^k C_{inkp}^{jkm} \quad \gamma_{ij}^k = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{3}} & i = j = k = 3 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.28)$$

Dabei beziehen sich die Indizes i, j, k auf den Darstellungstyp der irreduziblen Unterräume. Die Indizes n, m, p beziehen sich auf den entsprechenden Basisvektor im jeweiligen Raum.

4.7. Anwendung: Diagonalisierung des Hamiltonoperators

Der Raum der Tensoroperatoren beschränkte sich bisher auf die lokalen Besetzungsoperatoren $|i\rangle\langle i|$. Der Hamiltonoperator

$$H = \varepsilon \sum_{i=1}^3 |i\rangle\langle i| - t \sum_{i \neq j} |i\rangle\langle j| \quad (4.29)$$

des Systems, weist allerdings auch eine Abhängigkeit der außerdiagonalen Besetzungsoperatoren $|i\rangle\langle j|$ mit $i \neq j$ auf, die ebenfalls Tensoroperatoren von S3 sind. Der Tensoroperatorraum T kann daher auch um die außerdiagonalen Besetzungsoperatoren erweitert werden. Der gesamte Raum ist dann jedoch 9-dimensional und es treten weitere Kopien der irreduziblen Unterräume $T^{(1)}$ und $T^{(3)}$ in der Zerlegung von T auf. Neben des Tensoroperators

$$t_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3|) \quad (4.30)$$

existiert dann noch ein weiterer Tensoroperator

$$r_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 3| + |2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 2|), \quad (4.31)$$

der eine Linearkombination der außerdiagonalen Besetzungsoperatoren ist und ebenfalls über die triviale Darstellung transformiert. Außerdem existieren dann auch weitere Tensoroperatoren, die über die zweidimensionale Darstellung transformieren.

Der Hamiltonoperator H lässt sich dann wie folgt als Linearkombination der Tensoroperatoren $t_0^{(1)}$ und $r_0^{(1)}$ schreiben:

$$H = \varepsilon\sqrt{3}t_0^{(1)} - t\sqrt{6}r_0^{(1)} \quad (4.32)$$

Damit lässt sich der Hamiltonoperator selbst als Tensoroperator interpretieren, der über die triviale Darstellung von S3 transformiert. Dieses Resultat war zu erwarten, da der Hamiltonoperator des betrachteten symmetrischen Systems unter der Wirkung von S3 invariant ist. Er transformiert daher über die triviale Darstellung.

Auf den Hamiltonoperator als Tensoroperator kann nun das Wigner-Eckart-Theorem angewendet werden:

$$\begin{aligned}
\langle b_m^{(j)} | H | b_n^{(i)} \rangle &= \langle b_m^{(j)} | \varepsilon \sqrt{3} t_0^{(1)} - t \sqrt{6} r_0^{(1)} | b_n^{(i)} \rangle \\
&= \varepsilon \sqrt{3} \langle b_m^{(j)} | t_0^{(1)} | b_n^{(i)} \rangle - t \sqrt{6} \langle b_m^{(j)} | r_0^{(1)} | b_n^{(i)} \rangle \\
&= \varepsilon \sqrt{3} \gamma_{ij}^1 C_{in10}^{jm} - t \sqrt{6} \delta_{ij}^1 C_{in10}^{jm} \\
&= (\sqrt{3} \varepsilon \gamma_{ij}^1 - \sqrt{6} t \delta_{ij}^1) C_{in10}^{jm}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Da sowohl $t_0^{(1)}$ als auch $r_0^{(1)}$ über die triviale Darstellung transformieren, besitzen beide dieselben Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Sie unterscheiden sich allerdings in ihren reduzierten Matrixelementen. Das reduzierte Matrixelement δ_{ij}^1 von $r_0^{(1)}$ wurde in Anhang 6.7 berechnet und beträgt

$$\delta_{ij}^1 = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{3}} & i = j = 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & i = j = 3 \end{cases} \tag{4.34}$$

Die Hamiltonmatrix lässt sich mit dem Wigner-Eckart-Theorem und den Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Symmetriegruppe S3 wie folgt schreiben:

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_{11} C_{1010}^{10} & \lambda_{12} C_{3110}^{10} & \lambda_{13} C_{3210}^{10} \\ \lambda_{21} C_{1010}^{31} & \lambda_{22} C_{3110}^{31} & \lambda_{23} C_{3210}^{31} \\ \lambda_{31} C_{1010}^{32} & \lambda_{32} C_{3110}^{32} & \lambda_{33} C_{3210}^{32} \end{pmatrix} \tag{4.35}$$

Die Koeffizienten λ_{xy} hängen von den reduzierten Matrixelementen γ_{ij}^k und δ_{ij}^k ab. Da die reduzierten Matrixelemente jedoch unabhängig von den konkreten Basisvektoren der betrachteten Darstellung sind und Clebsch-Gordan-Koeffizienten mit den Indizes $(i, j, k) = (3, 1, 1), (1, 3, 1)$ gar nicht erst auftreten, vereinfacht sich die Hamiltonmatrix wie folgt:

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_1 C_{1010}^{10} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 C_{3110}^{31} & \lambda_2 C_{3210}^{31} \\ 0 & \lambda_2 C_{3110}^{32} & \lambda_2 C_{3210}^{32} \end{pmatrix} \tag{4.36}$$

Die Blockdiagonalgestalt der Hamiltonmatrix folgt somit unmittelbar aus den Symmetrieeigenschaften des Systems ohne das dafür ein konkretes Matrixelement berechnet werden muss. Wenn man nun die Clebsch-Gordan-Koeffizienten einsetzt, vereinfacht sich die Hamiltonmatrix und nimmt in diesem Fall sogar vollständige Diagonalgestalt an:

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

Die zwei Basiszustände des irreduziblen Unterraums $U^{(3)}$ besitzen damit dieselbe Energie λ_2 , während der Zustand der trivialen Darstellung die Energie λ_1 besitzt. Die Entartung des zweidimensionalen Zustandsraums $U^{(3)}$ folgt somit unmittelbar aus der S3-Symmetrie. Die vollständige Diagonalisierung der Hamiltonmatrix reduziert sich damit im Wesentlichen auf die Berechnung der beiden Energieeigenwerte λ_1 und λ_2 . Es gilt

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= (\sqrt{3}\varepsilon\gamma_{11}^1 - \sqrt{6}t\delta_{11}^1) \\ &= (\sqrt{3}\varepsilon\frac{1}{\sqrt{3}} - \sqrt{6}t\sqrt{\frac{2}{3}}) \\ &= \varepsilon - 2t \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= (\sqrt{3}\varepsilon\gamma_{33}^3 - \sqrt{6}t\delta_{33}^3) \\ &= (\sqrt{3}\varepsilon\frac{1}{\sqrt{3}} - \sqrt{6}t(-\frac{1}{\sqrt{6}})) \\ &= \varepsilon + t \end{aligned} \quad (4.39)$$

Damit ergibt sich die vollständig diagonalisierte Hamiltonmatrix des Systems in der Basis $\{b_0^{(1)}, b_1^{(3)}, b_2^{(3)}\}$ zu

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon - 2t & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon + t & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon + t \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Die Blockdiagonalisierung des Hamiltonoperators ist nicht nur bei S3-Symmetrie möglich sondern lässt sich auf beliebige Symmetriegruppen erweitern. Da der Hamiltonoperator eines symmetrieeinvarianten Systems mit der Wirkung der Symmetriegruppe kommutiert, ist er ein skalarer Operator und kann als Tensoroperator aufgefasst werden, der über die triviale Darstellung der jeweiligen Symmetriegruppe transformiert. Die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems stellt damit einen direkten Zusammenhang zwischen den Matrixelementen des Hamiltonoperators und den Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Symmetriegruppe her. Für einen Tensoroperatorraum $T^{(1)}$, der die triviale Darstellung trägt, gilt

$$U^{(i)} \otimes T^{(1)} = W^{(i)} \cong U^{(i)}. \quad (4.41)$$

Der Produktraum zerfällt somit ausschließlich in einen irreduziblen Unterraum $W^{(i)}$, der zu $U^{(i)}$ isomorph ist. Ein Clebsch-Gordan-Koeffizient C_{inkp}^{jm} kann daher nur für $V^{(j)} \cong U^{(i)}$ von null verschieden sein. Für verschiedene irreduzible Darstellungstypen $i \neq j$ verschwinden die entsprechenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten und damit auch die zugehörigen Matrixelemente des Hamiltonoperators. In einer nach irreduziblen Darstellungen geordneten Basis besitzt der Hamiltonoperator folglich Blockdiagonalgestalt.

5. Zusammenfassung und Diskussion

Die vorliegende Arbeit zeigt, dass die für Drehimpulsoperatoren bekannte Form des Wigner-Eckart-Theorems nicht an die spezifischen Eigenschaften von Drehgruppen gebunden ist. Vielmehr folgt ihre Struktur aus allgemeinen Eigenschaften der Darstellungstheorie: der Zerlegung von Tensorprodukten in irreduzible Darstellungen und dem Lemma von Schur. Damit gilt das Theorem nicht nur im Zusammenhang mit Drehimpulsen und Drehgruppen, sondern auch in beliebigen anderen quantenmechanischen Zustandsräumen mit beliebigen Symmetrieeigenschaften.

5.1. Zentrale Ergebnisse des allgemeinen Beweises

Eine wesentliche Erkenntnis der Arbeit besteht darin, dass das Wigner-Eckart-Theorems als Spezialfall einer allgemeineren Aussage verstanden werden kann. Agrawala zeigte in seinem Beweis, dass die Struktur aller möglichen Homomorphismen von einem Produktraum $U \otimes T$ (aus einem Zustands- und einem Tensoroperatorraum) in einen weiteren Zustandsraum V stark eingeschränkt ist. So lässt sich jeder solcher Homomorphismen aufgrund der Tensorproduktzerlegung und Schur's Lemma als Vielfaches eines adjungierten Einbettungsoperators $Q^\dagger$ schreiben.

Der Operator $Q^\dagger$ legt bereits fest, welche Abbildungen symmetrieverträglich sind und welche Matrixelemente aufgrund der Symmetrie verschwinden müssen. Auswahlregeln sind damit eine unmittelbare Konsequenz der Darstellungstheorie. Der Operator $Q^\dagger$ enthält außerdem bereits alle relevanten Informationen der Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Diese Sichtweise verändert das Verständnis von Clebsch-Gordan-Koeffizienten generell. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind nicht grundsätzlich an die Addition von Drehimpulsen gebunden, sondern entstehen allgemein aus der Zerlegung eines Produktraums in irreduzible Darstellungsräume. Daher treten diese auch im Zusammenhang mit anderen Symmetriegruppen als Drehgruppen auf und lassen sich völlig unabhängig von den Matrixelementen eines Tensoroperators berechnen.

Ebenso ist das reduzierte Matrixelement keine spezielle Größe der Drehimpulsquantenzahlen, sondern ergibt sich aus der Tatsache, dass ein Homomorphismus zwischen entsprechenden irreduziblen Darstellungsräumen durch das Lemma von Schur stark eingeschränkt ist. Das reduzierte Matrixelement ist hingegen nicht unabhängig von den Matrixelementen eines Tensoroperators bestimmbar. Damit liegt der einzige physikalische Freiheitsgrad im reduzierten Matrixelement.

Die beiden Bestandteile des Wigner-Eckart-Theorems lassen sich daher als zwei unterschiedliche Informationsanteile interpretieren: Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten beschreiben die durch die Symmetrie festgelegte Struktur der Operatorwirkungen, während das reduzierte Matrixelement die verbleibende Information enthält, die durch die Symmetrie des Systems allein nicht festgelegt ist. Das Wigner-Eckart-

Theorem trennt gewissermaßen die symmetrieebedingte Information von den verbleibenden physikalischen Freiheitsgraden eines Matrixelements.

5.2. Anwendung auf die Symmetriegruppe S_3

Die allgemeine Aussage des Wigner-Eckart-Theorems wurde in Kapitel 4 an einem einfachen Tight-Binding-Modell mit S_3 -Symmetrie konkret untersucht. Dieses Beispiel ist deshalb von Bedeutung, weil es zeigt, dass die in der Drehimpulsquantentheorie bekannten Strukturen auch in einem System auftreten, dessen relevante Symmetrie nicht durch eine Drehgruppe beschrieben wird.

Der Zustandsraum des betrachteten Systems lässt sich in irreduzible Darstellungsräume der Gruppe S_3 zerlegen. Ebenso zerfällt der Tensoroperatorraum, der durch die symmetrischen Besetzungsoperatoren $|i\rangle\langle i|$ der drei Gitterplätze aufgespannt wird, in irreduzible Unterräume. Die anschließende Zerlegung des Tensorproduktraums $U \otimes T$ ermöglicht es, diejenigen irreduziblen Unterräume zu identifizieren, die zum jeweiligen Endzustandsraum isomorph sind.

Auf diese Weise können die adjungierten Einbettungen konstruiert und daraus die Clebsch-Gordan-Koeffizienten bestimmt werden. Schließlich lassen sich auch die reduzierten Matrixelemente berechnen und daraus ein Wigner-Eckart-Theorem für das hier betrachtete Tight-Binding-Modell mit S_3 -Symmetrie formulieren. Für das untersuchte Modell zeigt sich, dass nur bestimmte Kombinationen von Anfangszuständen, Tensoroperatoren und Endzuständen einen nichtverschwindenden Beitrag liefern. Die daraus resultierenden Auswahlregeln sind somit bereits durch die S_3 -Symmetrie des Systems eindeutig festgelegt.

Die Bestimmung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Gruppe S_3 (s. 6.5) stellt ein eigenständiges Ergebnis der Arbeit dar. Sie sind unabhängig von den Matrixelementen konkreter Tensoroperatoren und legen fest, welche Kopplungen aufgrund der Symmetrie überhaupt möglich sind. Damit lassen sich durch diese nicht nur konkrete Matrixelemente einfacher berechnen, sondern geben zugleich unmittelbare Einblicke in die Struktur und Auswahlregeln quantenmechanischer Systeme mit S_3 -Symmetrie.

In dem hier untersuchten Tight-Binding-Modell verringert die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems aufgrund der geringen Dimension des Zustandsraums den Rechenaufwand nicht wesentlich. Die bestimmten Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind jedoch grundsätzlich auf andere quantenmechanische Systeme mit S_3 -Symmetrie übertragbar und könnten dort insbesondere bei größeren Zustandsräumen die Berechnung von Matrixelementen und Auswahlregeln vereinfachen.

5.3. Symmetrische Struktur des Hamiltonoperators

In Kapitel 4.7 wurde demonstriert, wie sich der Hamiltonoperator des S3-symmetrischen Systems mithilfe des Wigner-Eckart-Theorems blockdiagonalisieren und anschließend sogar vollständig diagonalisieren lässt. Im Anschluss wurde gezeigt, dass die Blockdiagonalisierung des Hamiltonoperators nicht nur in Zustandsräumen mit S3-Symmetrie, sondern auch in Zustandsräumen mit beliebigen anderen Symmetrieeigenschaften möglich ist.

Durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten bezüglich des Hamiltonoperators, der über die triviale Darstellung transformiert, kann unmittelbar bestimmt werden, welche seiner Matrixelemente aufgrund der Symmetrie verschwinden und in welcher Form die nicht verschwindenden Matrixelemente miteinander zusammenhängen. Die blockdiagonale Verteilung der Matrixelemente ergibt sich aus der Tatsache, dass ein Tensoroperator, der über die triviale Darstellung transformiert, keine Zustände koppeln kann, die unterschiedlichen Darstellungsräumen angehören, die nicht isomorph zueinander sind.

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten legen so die durch die Symmetrie vorgegebene Struktur der Matrixelemente fest, bestimmen jedoch nicht deren absolute Größe. Diese Information ist in den reduzierten Matrixelementen enthalten. Sie müssen daher aus den konkreten Eigenschaften des Hamiltonoperators bestimmt werden. Dabei ist insbesondere zu berücksichtigen, dass eine irreduzible Darstellung in einem Tensoroperatorraum mehrfach auftreten kann. Im vorliegenden Beispiel setzte sich der Hamiltonoperator aus den beiden Tensoroperatoren $t_0^{(1)}$ und $r_0^{(1)}$ zusammen, die jeweils einer unterschiedlichen Kopie desselben trivialen Darstellungsräume angehören. Obwohl für beide Tensoroperatoren dieselben Clebsch-Gordan-Koeffizienten verwendet werden können, unterscheiden sich im Allgemeinen ihre reduzierten Matrixelemente und müssen individuell berechnet werden.

Der Rechenaufwand für die Diagonalisierung des Hamiltonoperators wird in dem hier betrachteten Beispiel durch die Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems nicht wesentlich reduziert. Dies liegt jedoch vor allem daran, dass der Hamiltonoperator durch eine einfache 3×3 -Matrix dargestellt wird und somit leicht diagonalisiert werden kann. Der eigentliche Vorteil der Methode zeigt sich bei Hamiltonoperatoren mit wesentlich größeren Zustandsräumen. Sind die Symmetriegruppe und insbesondere ihre Clebsch-Gordan-Koeffizienten bekannt, kann die Symmetrie bereits vor der expliziten Diagonalisierung einen großen Teil der Matrixstruktur festlegen. Anstatt eine große Hamiltonmatrix vollständig zu diagonalisieren, kann sie zunächst entsprechend der irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe in kleinere Blöcke zerlegt werden. Im günstigsten Fall reduziert sich die Bestimmung der Eigenwerte damit auf die Diagonalisierung mehrerer wesentlich kleinerer Matrizen.

Das Wigner-Eckart-Theorem stellt somit nicht lediglich eine alternative Berechnungsmethode für einzelne Matrixelemente dar, sondern ermöglicht es, die durch

die Symmetrie vorgegebene Struktur des Hamiltonoperators bereits vor dessen expliziter Diagonalisierung auszunutzen.

6. Anhang

6.1. Basis des Zustandsraums $U^{(3)}$

Zu zeigen ist, dass die Vektoren

$$b_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) \quad b_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|2\rangle + |3\rangle - 2|1\rangle) \quad (6.1)$$

eine Basis des irreduziblen Darstellungsraums $U^{(3)}$ bilden. Dafür ist zu zeigen, dass dieser Raum unter der Wirkung der Gruppe S_3 invariant ist. Dazu genügt es nachzuweisen, dass das Bild jedes Basisvektors unter jeder Gruppenoperation wieder als Linearkombination der beiden Basisvektoren dargestellt werden kann.

Transformation des ersten Basisvektors $b_1^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \rho^{(3)}(d)b_1^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \\ &= -\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) - \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{\sqrt{6}}(|2\rangle + |3\rangle - 2|1\rangle) \\ &= -\frac{1}{2}(b_1^{(3)} + \sqrt{3}b_2^{(3)}) \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$\rho^{(3)}(s_1)b_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle - |2\rangle) = -b_1^{(3)}$$

Transformation des zweiten Basisvektors $b_2^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \rho^{(3)}(d)b_2^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle + |2\rangle - 2|3\rangle) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) - \frac{1}{2\sqrt{6}}(|2\rangle + |3\rangle - 2|1\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(\sqrt{3}b_1^{(3)} - b_2^{(3)}) \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\rho^{(3)}(s_1)b_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|3\rangle + |2\rangle - 2|1\rangle) = b_2^{(3)}$$

6.2. Basis des Tensoroperatorraums $T^{(3)}$

Analog soll nun gezeigt werden, dass die Operatoren

$$t_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle\langle 2| - |3\rangle\langle 3|) \quad t_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - 2|1\rangle\langle 1|) \quad (6.4)$$

eine Basis des Tensoroperatorraums $T^{(3)}$ bilden. Die Gruppenoperation $\rho^{(3)}(d)$ rotiert die Operatoren $|i\rangle\langle i|$ zyklisch gegen den Uhrzeigersinn. Die Gruppenoperation $\rho^{(3)}(s_1)$ vertauscht hingegen die Operatoren $|2\rangle\langle 2|$ und $|3\rangle\langle 3|$.

Transformation des ersten Basistensors $t_1^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \rho^{(3)}(d)t_1^{(3)}\rho^{(3)}(d)^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|) \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{2}}(|2\rangle\langle 2| - |3\rangle\langle 3|) - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{6}}(|2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - 2|1\rangle\langle 1|) \\ &= -\frac{1}{2}(t_1^{(3)} + \sqrt{3}t_2^{(3)}) \end{aligned}$$

$$\rho^{(3)}(s_1)t_1^{(3)}\rho^{(3)}(s_1)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle\langle 3| - |2\rangle\langle 2|) = -t_1^{(3)} \quad (6.5)$$

Transformation des zweiten Basistensors $t_2^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \rho^{(3)}(d)t_2^{(3)}\rho^{(3)}(d)^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| - 2|3\rangle\langle 3|) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(|2\rangle\langle 2| - |3\rangle\langle 3|) - \frac{1}{2\sqrt{6}}(|2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - 2|1\rangle\langle 1|) \\ &= \frac{1}{2}(\sqrt{3}t_1^{(3)} - t_2^{(3)}) \end{aligned}$$

$$\rho^{(3)}(s_1)t_2^{(3)}\rho^{(3)}(s_1)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|3\rangle\langle 3| + |2\rangle\langle 2| - 2|1\rangle\langle 1|) = t_2^{(3)} \quad (6.6)$$

6.3. Berechnung der Unterräume W_4, W_5 und W_6

Basis des Unterraums W_4

Gesucht ist ein Vektor

$$w^{(1)} = \lambda_1(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_2(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \quad (6.7)$$

mit der Wirkung $d \cdot w^{(1)} = w^{(1)}$ und $s_1 \cdot w^{(1)} = w^{(1)}$. Es gilt

$$\begin{aligned} s_1 \cdot w^{(1)} &= \lambda_1 s_1 \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_2 s_1 \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3 s_1 \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4 s_1 \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \\ &= \lambda_1(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) - \lambda_2(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) - \lambda_3(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \\ &\Rightarrow \lambda_2 = \lambda_3 = 0 \end{aligned} \quad (6.8)$$

Weiter berechnet man

$$\begin{aligned} d \cdot w^{(1)} &= \lambda_1 d \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4 d \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \\ &= \lambda_1 \left[-\frac{1}{2}(b_1^{(3)} + \sqrt{3}b_2^{(3)}) \otimes -\frac{1}{2}(t_1^{(3)} + \sqrt{3}t_2^{(3)}) \right] + \lambda_4 \left[\frac{1}{2}(\sqrt{3}b_1^{(3)} - b_2^{(3)}) \otimes \frac{1}{2}(\sqrt{3}t_1^{(3)} - t_2^{(3)}) \right] \\ &= \lambda_1 \left[\frac{1}{4}b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{4}b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{4}b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{3}{4}b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)} \right] \\ &\quad + \lambda_4 \left[\frac{3}{4}b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} - \frac{\sqrt{3}}{4}b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} - \frac{\sqrt{3}}{4}b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{1}{4}b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)} \right] \\ &\Rightarrow \lambda_1 = \lambda_4 \stackrel{!}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (6.9)$$

Damit erhält man

$$w^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \quad (6.10)$$

Basis des Unterraums W_5

Gesucht ist ein Vektor

$$w^{(2)} = \lambda_1(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_2(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \quad (6.11)$$

mit der Wirkung $d \cdot w^{(2)} = w^{(2)}$ und $s_1 \cdot w^{(2)} = -w^{(2)}$. Es gilt

$$\begin{aligned}
s_1 \cdot w^{(2)} &= \lambda_1 s_1 \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_2 s_1 \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3 s_1 \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4 s_1 \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \\
&= \lambda_1 (b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) - \lambda_2 (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) - \lambda_3 (b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) + \lambda_4 (b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \\
&\Rightarrow \lambda_1 = \lambda_4 = 0
\end{aligned} \tag{6.12}$$

Weiter berechnet man

$$\begin{aligned}
d \cdot w^{(2)} &= \lambda_2 d \cdot (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) + \lambda_3 d \cdot (b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) \\
&= \lambda_2 \left[-\frac{1}{2} (b_1^{(3)} + \sqrt{3} b_2^{(3)}) \otimes \frac{1}{2} (\sqrt{3} t_1^{(3)} - t_2^{(3)}) \right] + \lambda_3 \left[\frac{1}{2} (\sqrt{3} b_1^{(3)} - b_2^{(3)}) \otimes -\frac{1}{2} (t_1^{(3)} + \sqrt{3} t_2^{(3)}) \right] \\
&= \lambda_2 \left[-\frac{\sqrt{3}}{4} b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{1}{4} b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} - \frac{3}{4} b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{4} b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)} \right] \\
&\quad + \lambda_3 \left[-\frac{\sqrt{3}}{4} b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} - \frac{3}{4} b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} + \frac{1}{4} b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)} + \frac{\sqrt{3}}{4} b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)} \right] \\
&\Rightarrow \lambda_2 = -\lambda_3 \stackrel{!}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}
\end{aligned} \tag{6.13}$$

Damit erhält man

$$w^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} - b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) \tag{6.14}$$

Basis des Unterraums W_6

Die Basis des Unterraums W_6 ergibt sich nun aus den einzigen beiden orthonormalen Vektoren $w_1^{(3)}$ und $w_2^{(3)}$, die gleichzeitig orthonormal zu den Basisvektoren $w^{(1)}$ von W_4 und $w^{(2)}$ von W_5 sind. Dies sind die Vektoren

$$w_1^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)} + b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) \quad w_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)} - b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) \tag{6.15}$$

Mit den bereits hergeleiteten Transformationsbeziehungen für die Vektoren $b_i^{(3)}$ und $t_p^{(3)}$ kann gezeigt werden, dass die Vektoren $w_i^{(3)}$ tatsächlich über die zweidimensionale Darstellung von S3 transformieren, wobei $w_1^{(3)}$ ein analoges Transformationsverhalten zu $b_1^{(3)}$ aufweist, während $w_2^{(3)}$ ein analoges Transformationsverhalten zu $b_2^{(3)}$ aufweist.

6.4. Adjungierte Einbettung

Für die adjungierte Einbettung $Q_{\alpha j}^\dagger =: f_\alpha p_\alpha : U \otimes T \rightarrow W_\alpha \rightarrow V^{(j)}$ erhält man

$$Q_{11}^\dagger(b_0^{(1)} \otimes t_0^{(1)}) = b_0^{(1)}$$

$$Q_{23}^\dagger(b_0^{(1)} \otimes t_1^{(3)}) = b_1^{(3)} \quad Q_{23}^\dagger(b_0^{(1)} \otimes t_2^{(3)}) = b_2^{(3)}$$

$$Q_{33}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_0^{(1)}) = b_1^{(3)} \quad Q_{33}^\dagger(b_2^{(3)} \otimes t_0^{(1)}) = b_2^{(3)}$$

$$Q_{41}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = \frac{1}{2}b_0^{(1)} \quad Q_{41}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) = 0 \quad Q_{41}^\dagger(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = 0 \quad Q_{41}^\dagger(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) = \frac{1}{2}b_0^{(1)}$$

$$Q_{63}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = \frac{1}{2}b_2^{(3)} \quad Q_{63}^\dagger(b_1^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) = \frac{1}{2}b_1^{(3)} \quad Q_{63}^\dagger(b_2^{(3)} \otimes t_1^{(3)}) = \frac{1}{2}b_1^{(3)} \quad Q_{63}^\dagger(b_2^{(3)} \otimes t_2^{(3)}) = -\frac{1}{2}b_2^{(3)}$$

6.5. Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Nun werden die Clebsch-Gordan-Koeffizienten C_{inkp}^{jm} berechnet. Die Indizes i, j, k beziehen sich auf den Darstellungstyp der Räume $U^{(i)}$, $V^{(j)}$ und $T^{(k)}$. Die Indizes n, m, p bezeichnen den Basisvektor des entsprechenden Raums $U^{(i)}$, $V^{(j)}$, $T^{(k)}$.

$$C_{1010}^{10} := \langle b_0^{(1)} | Q_{11}^\dagger | b_0^{(1)}; t_0^{(1)} \rangle = 1 \quad (6.16)$$

$$C_{1n3p}^{3m} = \begin{cases} C_{1031}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{23}^\dagger | b_0^{(1)}; t_1^{(3)} \rangle = 1 \\ C_{1032}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{23}^\dagger | b_0^{(1)}; t_2^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{1031}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{23}^\dagger | b_0^{(1)}; t_1^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{1032}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{23}^\dagger | b_0^{(1)}; t_2^{(3)} \rangle = 1 \end{cases} \quad (6.17)$$

$$C_{3n10}^{3m} = \begin{cases} C_{3110}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{33}^\dagger | b_1^{(3)}; t_0^{(1)} \rangle = 1 \\ C_{3210}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{33}^\dagger | b_2^{(3)}; t_0^{(1)} \rangle = 0 \\ C_{3110}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{33}^\dagger | b_1^{(3)}; t_0^{(1)} \rangle = 0 \\ C_{3210}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{33}^\dagger | b_2^{(3)}; t_0^{(1)} \rangle = 1 \end{cases} \quad (6.18)$$

$$C_{3n3p}^{10} = \begin{cases} C_{3131}^{10} := \langle b_0^{(1)} | Q_{41}^\dagger | b_1^{(3)}; t_1^{(3)} \rangle = \frac{1}{2} \\ C_{3132}^{10} := \langle b_0^{(1)} | Q_{41}^\dagger | b_1^{(3)}; t_2^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3231}^{10} := \langle b_0^{(1)} | Q_{41}^\dagger | b_2^{(3)}; t_1^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3232}^{10} := \langle b_0^{(1)} | Q_{41}^\dagger | b_2^{(3)}; t_2^{(3)} \rangle = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (6.19)$$

$$C_{3n3p}^{3m} = \begin{cases} C_{3131}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_1^{(1)}; t_1^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3132}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_1^{(1)}; t_2^{(3)} \rangle = \frac{1}{2} \\ C_{3231}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_2^{(3)}; t_1^{(3)} \rangle = \frac{1}{2} \\ C_{3232}^{31} := \langle b_1^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_2^{(3)}; t_2^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3131}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_1^{(3)}; t_1^{(3)} \rangle = \frac{1}{2} \\ C_{3132}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_1^{(3)}; t_2^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3231}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_2^{(3)}; t_1^{(3)} \rangle = 0 \\ C_{3232}^{32} := \langle b_2^{(3)} | Q_{63}^\dagger | b_2^{(3)}; t_2^{(3)} \rangle = -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (6.20)$$

6.6. Reduzierte Matrixelemente γ_{ij}^k

Für die Berechnung der reduzierten Matrixelemente γ_{ij}^k werden nachfolgend einige exemplarische Matrixelemente berechnet und anschließend mit dem Ergebnis aus dem Wigner-Eckart-Theorem verglichen:

$$\begin{aligned}
 \langle b_0^{(1)} | t_0^{(1)} | b_0^{(1)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle \langle 1 | + |2\rangle \langle 2 | + |3\rangle \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \\
 &= \frac{1}{3\sqrt{3}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) (|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\
 &\stackrel{!}{=} C_{1010}^{10} \gamma_{11}^1 = \gamma_{11}^1 \Rightarrow \boxed{\gamma_{11}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}}}
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

$$\begin{aligned}
 \langle b_1^{(3)} | t_1^{(3)} | b_0^{(1)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 2 | - \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle \langle 2 | - |3\rangle \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (\langle 2 | - \langle 3 |) (|2\rangle - |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\
 &\stackrel{!}{=} C_{1031}^{31} \gamma_{13}^3 = \gamma_{13}^3 \Rightarrow \boxed{\gamma_{13}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}}}
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

$$\begin{aligned}
 \langle b_1^{(3)} | t_0^{(1)} | b_1^{(3)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 2 | - \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle \langle 1 | + |2\rangle \langle 2 | + |3\rangle \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle - |3\rangle) \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (\langle 2 | - \langle 3 |) (|2\rangle - |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\
 &\stackrel{!}{=} C_{3110}^{31} \gamma_{33}^1 = \gamma_{33}^1 \Rightarrow \boxed{\gamma_{33}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}}}
 \end{aligned} \tag{6.23}$$

$$\begin{aligned}
 \langle b_0^{(1)} | t_1^{(3)} | b_1^{(3)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle \langle 2 | - |3\rangle \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle - |3\rangle) \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) (|2\rangle + |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\
 &\stackrel{!}{=} C_{3131}^{10} \gamma_{31}^3 = \gamma_{31}^3 \Rightarrow \boxed{\gamma_{31}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}}}
 \end{aligned} \tag{6.24}$$

$$\begin{aligned}
\langle b_1^{(3)} | t_1^{(3)} | b_2^{(3)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 2 | - \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle \langle 2 | - |3\rangle \langle 3 |) \frac{1}{\sqrt{6}} (|2\rangle + |3\rangle - 2 |1\rangle) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{6}} (\langle 2 | - \langle 3 |) (|2\rangle - |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{6}} \\
&\stackrel{!}{=} C_{3231}^{31} \gamma_{33}^3 = \frac{1}{2} \gamma_{33}^3 \Rightarrow \boxed{\gamma_{33}^3 = \sqrt{\frac{2}{3}}} \tag{6.25}
\end{aligned}$$

6.7. Reduzierte Matricelemente δ_{ij}^1

Für die Berechnung des reduzierten Matricelements δ_{ij}^k werden nachfolgend zwei exemplarische Matricelemente bezüglich des Tensoroperators $r_0^{(1)}$ berechnet und im Anschluss mit dem Ergebnis aus dem Wigner-Eckart-Theorem verglichen.

$$\begin{aligned}
\langle b_0^{(1)} | r_0^{(1)} | b_0^{(1)} \rangle &= \frac{1}{3\sqrt{6}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) (| 1 \rangle \langle 2 | + | 1 \rangle \langle 3 | + | 2 \rangle \langle 1 | + | 2 \rangle \langle 3 | \\
&\quad + | 3 \rangle \langle 1 | + | 3 \rangle \langle 2 |) (| 1 \rangle + | 2 \rangle + | 3 \rangle) \\
&= \frac{1}{3\sqrt{6}} (\langle 1 | + \langle 2 | + \langle 3 |) (2 | 1 \rangle + 2 | 2 \rangle + 2 | 3 \rangle) \\
&= \frac{1}{3\sqrt{6}} (2 + 2 + 2) = \sqrt{\frac{2}{3}} \\
&\stackrel{!}{=} \delta_{11}^1 C_{1010}^{10} = \delta_{11}^1 \Rightarrow \boxed{\delta_{11}^1 = \sqrt{\frac{2}{3}}} \tag{6.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle b_1^{(3)} | r_0^{(1)} | b_1^{(3)} \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{6}} (\langle 2 | - \langle 3 |) (| 1 \rangle \langle 2 | + | 1 \rangle \langle 3 | + | 2 \rangle \langle 1 | + | 2 \rangle \langle 3 | \\
&\quad + | 3 \rangle \langle 1 | + | 3 \rangle \langle 2 |) (| 2 \rangle - | 3 \rangle) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{6}} (\langle 2 | - \langle 3 |) (| 1 \rangle - | 1 \rangle - | 2 \rangle + | 3 \rangle) = -\frac{1}{\sqrt{6}} \\
&\stackrel{!}{=} \delta_{33}^1 C_{3n10}^{3m} = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{6}} & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \\
&\Rightarrow \boxed{\delta_{33}^1 = -\frac{1}{\sqrt{6}}} \tag{6.27}
\end{aligned}$$

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit eigenständig verfasst habe. Alle verwendeten Quellen und Hilfsmittel wurden nach bestem Wissen und Gewissen angegeben. Im Rahmen der Erstellung dieser Arbeit habe ich das KI-System ChatGPT von OpenAI zu den folgenden zwei Zwecken verwendet:

1. Unterstützung bei der Bestimmung und Überprüfung von Basen der irreduziblen Unterräume:

Ein wesentlicher Arbeitsaufwand bestand darin, geeignete Basen für die irreduziblen Unterräume der betrachteten Darstellungen zu bestimmen. Um nicht wiederholt verschiedene mögliche Basen erraten und überprüfen zu müssen, habe ich ChatGPT gebeten, geeignete Basen vorzuschlagen. Die mathematischen Ergebnisse wurden anschließend von mir selbst überprüft.

2. Überprüfung und Korrektur der Arbeit während des Schreibprozesses:

Während der Anfertigung der Arbeit habe ich ChatGPT wiederholt genutzt, um einzelne Inhalte und Formulierungen zu besprechen sowie mögliche Fehler, Unklarheiten und Schwachstellen aufzudecken. Wenn sich dabei eine Struktur oder Formulierung als treffender erwiesen hat, habe ich diese gegebenenfalls übernommen. Sämtliche Vorschläge wurden von mir kritisch geprüft. Übernommen wurden nur solche Änderungen, die meiner eigenen Einschätzung nach der fachlichen Qualität und Verständlichkeit der Arbeit dienten.

Referenzen

1. Schiff, L. I. *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1986, 3rd Edition).
2. J. J. Sakurai, J. N. *Modern Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 2021, 3rd edition).
3. Agrawala, V. Wigner-Eckart theorem for an arbitrary group or Lie algebra. *Journal of Mathematical Physics* Vol. 21, 1562-1565 (1980).
4. Jones, H. F. *Groups, Representations and Physics* (Taylor & Francis Group, 1998, 2nd edition).
5. Serre, J. P. *Darstellungen endlicher Gruppen* (Vieweg, 1972).
6. Particle Data Group. 34. *Clebsch-Gordan Coefficients, Spherical Harmonics, and d Functions*
URL: <https://pdg.lbl.gov/2002/clebrpp.pdf>, (Besucht am 3. Aug. 2026).