

8. Spin und Addition von Drehimpulsen

8.1 Direktes Produkt

Heben wir es mit mehreren Teilchen zu tun, oder hat ein Teilchen neben seinem Ort weitere intrinsische Eigenschaften (z.B. Eigendrehimpuls), dann ist die Beschreibung durch die Ortswellenfunktion in n Dimensionen nicht mehr ausreichend.

Sind $|\xi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ Hilbertraumvektoren, dann definieren wir das Tensorprodukt

$$|\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\xi_N\rangle \equiv |\xi_1\rangle |\xi_2\rangle \dots |\xi_N\rangle \equiv |\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N\rangle \\ \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

Im Produktraum wirken die Operatoren folgendermaßen:

$$A_1 \otimes \dots \otimes A_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle = |A_1 \xi_1, \dots, A_N \xi_N\rangle$$

Das Skalarprodukt ist gegeben durch

$$\langle \xi_1, \dots, \xi_N | \xi_1, \dots, \xi_N \rangle = \langle \xi_1 | \xi_1 \rangle \dots \langle \xi_N | \xi_N \rangle$$

Beispiel: Zweiteilchenzustand

$\vec{u}, \vec{v}$: Ort des ersten bzw. zweiten Teilchens

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle$$

Zweiteilchenortswellenfunktion:

$$\psi(\vec{u}, \vec{v}) = (\langle \vec{u} | \otimes \langle \vec{v} |) |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \psi_1(\vec{u}) \psi_2(\vec{v})$$

Zu dem Beispiel der Kombination verschiedener Eigenschaften (Ort und Spin) kommen wir im Folgenden.

8.2 Intrinsischer Drehimpuls (Spin 1)

Gesucht:

- * Effektive Beschreibung von Systemen mit Bahndrehimpuls als punktförmige Teilchen (z.B. e^- -Mesonen),
- * oder Beschreibung eines punktförmigen Elementarteilchens mit Drehimpuls als intrinsischer Eigenschaft: Spin.

Die nichtrelativistische Quantenmechanik (ebenso wie die Mechanik) soll invariant unter Galilei-Transformationen sein.

→ Benötige Größen, die kovariant transformieren:
Skalare, Vektoren & Tensoren:

Skalar:

$$S' = S$$

Vektor:

$$\vec{A}' = e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}} \vec{A}$$

Tensor:

$$T'_{ij\dots} = \sum_{i'j'\dots} [e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}]_{ii'} [e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}]_{jj'} \dots T_{i'j'\dots}$$

Bisher: Wellenfunktion als skalare Größe.

Nun: Vektoren

Wir erinnern dazu an die Drehimpulsalgebra

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

und daran, daß die L_i Erzeugende von Drehungen sind:

$$\psi'(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{L}} \psi(\vec{x})$$

Für eine vektorwertige Wellenfunktion, definiere die Polarisationszustände $|\varepsilon_i\rangle$ durch die Zuordnung
 $\hat{e}_i \leftrightarrow |\varepsilon_i\rangle \Rightarrow \langle \varepsilon_i | \varepsilon_j \rangle = \hat{e}_i^\dagger \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij}$

Diese Basisvektoren spannen den Hilbertraum $\mathbb{R}^3$ auf.

Wellenfunktion: $\vec{\psi}(\vec{x}) = \sum_{i=x,y,z} \psi_i(\vec{x}) \hat{e}_i$

Zustand: $|\vec{\psi}\rangle = \int d^3x \sum_{i=x,y,z} \psi_i(\vec{x}) \underbrace{|\vec{x}\rangle \otimes |\varepsilon_i\rangle}_{\text{direktes Produkt } L^2 \otimes \mathbb{R}^3}$

Transformation:

$$\hat{e}' = e^{\vec{\varphi} \cdot \vec{L}} \hat{e} = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot (i\hbar \vec{L})} \hat{e}$$

$$\vec{\psi}'(\vec{x}) = \sum_{i=x,y,z} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{L}} \psi_i(\vec{x}) \right) \sum_j \left[e^{\vec{\varphi} \cdot \vec{L}} \right]_{ij} \hat{e}_j$$

Bezeichne $\mathcal{D}^{(spin)}(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot (i\hbar \vec{L})}$ und $\mathcal{D}^{(Bahn)}(\vec{\varphi}) = \mathcal{D}(\vec{\varphi})$

$$\rightarrow |\vec{\psi}'\rangle = \mathcal{D}^{(Bahn)}(\vec{\varphi}) \otimes \mathcal{D}^{(spin)}(\vec{\varphi}) |\vec{\psi}\rangle$$

Außerdem hatten wir bereits bemerkt, daß

$$[i\hbar L_i, i\hbar L_j] = \varepsilon_{ijk} (i\hbar)^2 L_k$$

die Drehimpulsalgebra erfüllt.

Wir postulieren nun, daß Operatoren, welche Drehungen erzeugen, Drehimpulsoperatoren sind. Der Beweis dafür läßt sich letztlich in der Quantenfeldtheorie mit Hilfe des Noether Theorems führen. Wir werden aber nun sehen, daß dieses Postulat zu einer Beschreibung des Spins im Einklang mit den allgemeinen Eigenschaften des quantenmechanischen Drehimpuls führt.

→ Definiere den Spinoperator für ein Vektorteilchen:

$$\vec{S}_V = i\hbar \vec{L}$$

Wir erinnern an die explizite Form

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \vec{S}_V^2 = 2\hbar^2 \underline{1} = \hbar^2 s_V(s_V+1) \underline{1} \Rightarrow s_V = 1$$

$\rightarrow$

Vektorkteilchen haben einen Drehimpuls vom Betrag $\hbar s_V = \hbar$, man sagt auch „Spin-1“.

Insbesondere gilt dies auch für Photonen, wobei allerdings das hier geführte Argument relativistisch verallgemeinert werden muß.

Eigenwerte von $S_{V_z} = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$:

$\pm\hbar$ ($m_V = \pm 1$): mit Eigenvektoren $\frac{\hat{e}_1 \pm i\hat{e}_2}{\sqrt{2}}$

0 ($m_V = 0$): mit Eigenvektor $\hat{e}_3$

$\rightarrow -s_V \leq m_V \leq s_V$ und $m_V \in \mathbb{Z}$ wie für Bahndrehimpuls.

8.3 Stern-Gerlach-Experiment

Energie eines magnetischen Dipols im Feld:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$\rightarrow$ Kraft $\vec{F} = -\vec{\nabla} H = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$

Im Versuch von Stern & Gerlach (1922) wurde ein inhomogenes Feld mit einem Magneten mit asymmetrischen Polen erzeugt.

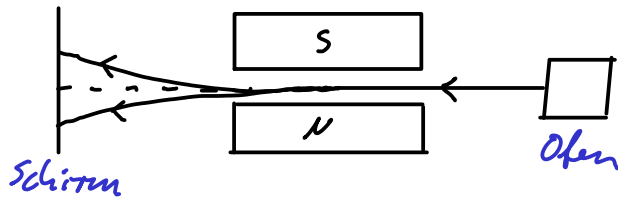


durch dieses Feld werden längs (in Papierebene) Silberatome gesendet.

Neben abgeschlossenen Schalen haben diese Atome ein Elektron im s-Orbital ($l=0, m=0$).

$\rightarrow$ Aufgrund des verschwindenden Bahndrehimpulses

erwarten wir $\vec{\mu} = 0$ und damit keine Ablenkung im Feld.



Stattdessen wird eine Aufspaltung in zwei Linien gefunden. Dies kann mit einem intrinsischen Spin des Elektrons erklärt werden – allerdings nicht mit Spin 1, da die Linie ohne Ablenkung für $m_l = 0$ nicht auftritt.

→ Benötige stattdessen $s_l = \frac{1}{2}$, so daß mit $-s_l \leq m_l \leq s_l$ und $\Delta m_l \in \mathbb{Z}$ nur $m_l = \pm \frac{1}{2}$ erlaubt ist.

→ Würde auch das Auftreten einer geraden Zahl an Linien im anomalen Zeeman-Effekt erklären.

B.4 Spin $\frac{1}{2}$

Gesucht ist also ein Spinoperator $\vec{S}$,

* welcher die Drehimpulsalgebra erfüllt,

* mit Eigenwerten $\frac{1}{2} s(s+1) = \frac{3}{4} \frac{1}{2} \rightarrow s = \frac{1}{2}$ von $\vec{S}^2$,

* mit Eigenwerten $\pm \frac{1}{2}$ von S_i .

Wir lösen dieses Problem mit einem konstruktiven Ansatz. Dazu betrachten wir o.B.d.A. Eigenzustände von S_3 mit der Eigenschaft

$$S_3 |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_3 |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle.$$

Da S_3 hermitisch ist, müssen die Eigenzustände orthogonal sein:

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$$

Normierung: $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$.

Diese Forderungen lassen sich realisieren mit der konkreten Spinor-Repräsentation

$$|\uparrow\rangle = |s=\frac{1}{2}, m=+\frac{1}{2}\rangle \longleftrightarrow \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = |s=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}\rangle \longleftrightarrow \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{und } S_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Lickoperatoren sind dann gegeben durch

$$|l, m \pm 1\rangle = \frac{L_{\pm} |l, m\rangle}{\hbar \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}}$$

$$\rightarrow \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\hbar} S_{\pm} \left| \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\text{und außerdem } S_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, S_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$\rightarrow$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} S_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Mit } L_{\pm} = L_x \pm i L_y \iff S_x = \frac{1}{2} (S_+ + S_-), S_y = \frac{1}{2i} (S_+ - S_-)$$

$$\rightarrow S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Wir führen nun die Pauli-Matrizen ein:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Mit diesen läßt sich der Spin-Operator schreiben als:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

In der Tat ist die Drehimpulsalgebra erfüllt:

$$[S_i, S_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

Z.B. folgt dies aus dem Kommutator der Pauli-Matrizen, welchen wir gemeinsam mit weiteren nützlichen Eigenschaften notieren:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z \text{ und zyklisch} \Leftrightarrow [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$\{\sigma_x, \sigma_y\} = 0 \text{ und zyklisch}$$

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i \mathbb{1}$$

$$\text{tr } \sigma_x = \text{tr } \sigma_y = \text{tr } \sigma_z = 0$$

$$\det \sigma_x = \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

Der Zusammenhang zwischen einem allgemeinen Spin-Ket $|\alpha\rangle$ und den Spinoren ist gegeben durch

$$|\alpha\rangle = \alpha_+ |\uparrow\rangle + \alpha_- |\downarrow\rangle \Leftrightarrow \chi_\alpha = \chi_+ \langle \uparrow | \alpha \rangle + \chi_- \langle \downarrow | \alpha \rangle$$

$$|\alpha\rangle = |\uparrow\rangle \chi_+^\dagger \cdot \chi_\alpha + |\downarrow\rangle \chi_-^\dagger \cdot \chi_\alpha$$

Entsprechend dem Fall für Spin-1 schreiben wir den Produktzustand als

$$|\Psi\rangle = \int d^3x [\psi_+(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \psi_-(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \otimes |\downarrow\rangle]$$

Nützlich ist die konkrete Darstellung der Wellenfunktion als Spinor

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} = \chi_+ \langle \vec{x}, \uparrow | \Psi \rangle + \chi_- \langle \vec{x}, \downarrow | \Psi \rangle \Leftrightarrow$$

$$|\Psi\rangle = \int d^3x [\chi_+^\dagger \Psi(\vec{x}) |\vec{x}, \uparrow\rangle + \chi_-^\dagger \Psi(\vec{x}) |\vec{x}, \downarrow\rangle]$$

Die Normierung des Zustands hat dann die Form

$$\langle \underline{\Psi} | \underline{\Psi} \rangle = \int d^3x (|\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2) = 1$$

8.5 Magnetisches Moment

Zur Erklärung des Stern-Gerlach Versuchs muß der Spin ans Magnetfeld koppeln. In Kapitel 7 haben wir für den Bahndrehimpuls $\vec{L}$ folgenden Zusammenhang mit dem magnetischen Moment gefunden:

$$\vec{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Analog ist hier

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2mc} \vec{S}, \quad g: \text{gyromagnetischer Faktor / Landé-Faktor}$$

Die Dirac-Gleichung sagt für das Elektron $g=2$ voraus, und die experimentelle Bestätigung dieser Vorhersage ist ein wesentlicher Erfolg der relativistischen Quantenmechanik.

Tatsächlich ist $g = 2 * (1 + \mathcal{O}(\alpha))$. Der Vergleich der Korrekturen mit der Rechnung aus der Quantenelektrodynamik führt zum genauesten Test dieser Theorie.

$$\left[\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ (Sommerfeldkonstante)} \right]$$

Für die Wechselwirkung im Magnetfeld haben wir also den folgenden Beitrag zum Hamiltonoperator:

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{2mc} (\underbrace{\vec{L} \otimes \underline{1}}_{\text{im Spinraum}} + g \underbrace{\underline{1} \otimes \vec{S}}_{\text{im Ortsraum}}) \cdot \vec{B} \equiv \frac{e}{2mc} (\vec{L} + g \vec{S}) \cdot \vec{B}$$

Dabei wird wie angedeutet die eigentlich erforderliche Produktschreibweise unterdrückt, da klar ist, in welchem Hilbertraum $\vec{L}$ bzw. $\vec{S}$ wirken.

Schließlich merken wir noch an, daß $g_{\text{Proton}} = 5,58$, während fürs Neutron $\vec{\mu}_{\text{Neutron}} = -3,83 \frac{e_0}{2m_n c}$ ist — selbst neutrale Teilchen können also ein magnetisches Moment haben.

8.6 Drehungen von Spinoren

Spinoren werden mittels folgender Operatoren gedreht:

$$D^{(\frac{1}{2})}(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}}$$

Da $\vec{S}$ hermitisch ist, ist $D^{(\frac{1}{2})}$ unitär.

Außerdem gilt für diagonalisierbares A : $\text{tr} \log(A) = \log \det(A)$,

$$\log \det(A) = \log \det(S^{-1} A_D S) = \log \left(\underbrace{\det S^{-1} \det S}_{=1} \prod_i A_{Dii} \right)$$

$\hookrightarrow \text{diagonal}$

$$= \sum_i \log A_{Dii} = \text{tr} \log A_{Dii} = \text{tr} \log(A)$$

$\hookrightarrow \text{Spur zyklisch, } \dots A_D A_D \dots = S A S^{-1} S A S^{-1} \dots$

$$\longrightarrow \det A = e^{\text{tr} \log A} \quad \longrightarrow \text{tr} A_D^n = \text{tr} A^n$$

$$\text{Mit } A = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}} \implies \det D^{(\frac{1}{2})}(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \text{tr} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}} = e^{-\frac{i}{2} * 0} = 1$$

Die $D^{(\frac{1}{2})}(\vec{\varphi})$ bilden also die Gruppe der unitären 2×2 Matrizen mit Einheitsdeterminante, genannt $SU(2)$.

Es stellt sich die Frage, ob diese Gruppe isomorph

zur Drehgruppe $SO(3)$ ist. Wir betrachten dazu die Drehung eines Spin-Kets $|\alpha\rangle$ um den Winkel 2π um die z -Achse

$$e^{-\frac{i}{\hbar} S_z 2\pi} |\alpha\rangle = |\uparrow\rangle \chi_+^T \underbrace{e^{-\frac{i}{2} \sigma_z 2\pi}}_{= e^{-i\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} = -1} \chi_\alpha + |\downarrow\rangle \chi_-^T e^{-\frac{i}{2} \sigma_z 2\pi} \chi_\alpha$$

$$= -|\uparrow\rangle \chi_+^T \chi_\alpha - |\downarrow\rangle \chi_-^T \chi_\alpha = -|\alpha\rangle$$

Bei einer Drehung um 2π geht also $|\alpha\rangle$ in $-|\alpha\rangle$ über. Für $|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$ ist dagegen ein Vielfaches von 4π nötig.

Die Gruppen $SU(2)$ und $SO(3)$ sind also nur lokal isomorph, d.h. die Abbildung

$$\mathcal{D}^{(\text{Spin } \frac{1}{2})}(\vec{\varphi}) \rightarrow \mathcal{D}^{(\text{Spin } 1)}(\vec{\varphi})$$

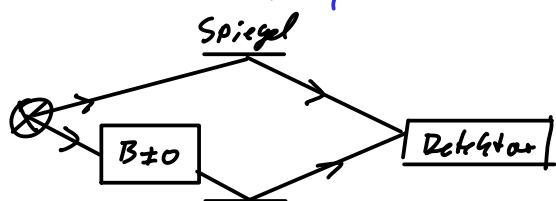
ist nur ein lokaler Isomorphismus, da

$$\mathcal{D}^{(\text{Spin } \frac{1}{2})}(\vec{\varphi}) \neq \mathcal{D}^{(\text{Spin } \frac{1}{2})}\left(\vec{\varphi} + 2\pi \frac{\vec{\varphi}}{|\vec{\varphi}|}\right),$$

beide jedoch auf das gleiche Element in $SO(3)$ abbilden.

Der Effekt ist tatsächlich physikalisch: Neutronen lassen sich aufgrund ihres magnetischen Moments mittels Spin-Präzession im Magnetfeld drehen.

Präzessionsfrequenz: $\omega = g_n \frac{e\hbar B}{4m_n c}$ mit $g_n = -1,91$



Sei T die Zeit, welche die Neutronen benötigen, die $B \neq 0$ Region zu durchlaufen.

Variiert man das Magnetfeld, dann findet man zwischen zwei Interferenzmaxima:

$$\Delta \omega T = g_n \frac{e_0 \Delta B}{\hbar m_n c} = 4\pi \implies \Delta B = \frac{4\pi \hbar m_n c}{e_0 g_n},$$

Entsprechende Experimente wurden 1975 tatsächlich durchgeführt und sind eine glänzende Bestätigung von Paulis Spinorentheorie.

Neben dreidimensionalen Vektoren und aus diesen gebildeten Tensoren, welche schon aus der klassischen Physik bekannt sind, gibt es in der Quantenmechanik zusätzlich Spinoren (und daraus gebildete Tensoren, welche wir in dieser Vorlesung nicht betrachten), und diese sind auch in der Natur realisiert. Als komplexe Objekte tauchen diese in der klassischen Physik nicht auf. Vektoren, Spinoren und daraus abgeleitete Objekte (Tensoren) erschöpfen die Darstellungen der Drehgruppe.

8.7 Drehmatrizen

Sei nun $\vec{J}$ ein allgemeiner Drehimpulsoperator (Spin, Bahn oder Kombinationen aus diesen) mit Eigenwerten und -Zuständen

$$\vec{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

Dann definieren wir die Wigner-D-Matrix als

$$D^{(j)}_{m'm}(R(\vec{\varphi})) = \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\varphi}} | j, m \rangle$$

Da $[\vec{J}, \vec{J}^2] = 0$ lassen Drehungen J unverändert, weshalb Matrixelemente zu verschiedenen J automatisch verschwinden. $D_{m'm}^{(j)}$ ist eine $(2j+1) \times (2j+1)$ Matrix.

Wirkt der Drehoperator nicht wie hier angenommen auf Drehimpulseigenzustände, dann kann man gruppentheoretisch zeigen, daß sich die Matrixelemente durch eine Basistransformation auf eine blockdiagonale Form bringen lassen:

$$\begin{pmatrix} \boxed{\text{///}} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{\text{///}} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{\text{///}} \end{pmatrix}$$
 Die Blöcke entsprechen dabei den $D^{(j)}$ und lassen sich nicht weiter in kleinere Blöcke transformieren. Man sagt: Die $D^{(j)}$ sind $(2j+1)$ -dimensionale irreduzible Darstellungen der Drehgruppe.

Kugelflächenfunktionen und Drehmatrizen

Betrachte Drehung des Einheitsvektors $|\hat{z}\rangle$ zunächst um den Winkel ϑ um die y -Achse und dann um den Winkel φ um die z -Achse (vgl. Skizze in Abschnitt 5.4).

$$\rightarrow |\hat{z}\rangle \rightarrow |\hat{n}\rangle = D(R(\vartheta, \varphi)) |\hat{z}\rangle = \sum_l \sum_m D(R(\vartheta, \varphi)) |l, m\rangle \langle l, m | \hat{z}\rangle$$

$$\rightarrow \underbrace{\langle l, m' | \hat{n}\rangle}_{= Y_l^{m'*}(\vartheta, \varphi)} = \sum_m D_{m'm}^{(l)}(R(\vartheta, \varphi)) \langle l, m | \hat{z}\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle l, m | \hat{z}\rangle &= Y_l^m(\vartheta=0, \varphi \text{ beliebig}) \delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \overset{P_{l0}=P_l}{\underset{\downarrow}{P_l(\cos\vartheta)}} \Big|_{\vartheta=0} \delta_{m0} \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \\ &\quad \downarrow \\ &Y_l^m(0, \varphi) = 0 \text{ für } m \neq 0 \end{aligned}$$

Dabei haben wir benutzt, daß $L_z |\vec{z}\rangle = 0 |\vec{z}\rangle$,
 d.h. $|\vec{z}\rangle$ ist Eigenvektor von L_z zum Eigenwert $m=0$.

$$\longrightarrow D_{m'0}^{(\ell)}(R(\vartheta, \varphi)) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell}^{m'*}(\vartheta, \varphi)$$

8.8 Addition von Drehimpulsen: Problemstellung

Klassisch: Drehimpulse addieren sich vektoriell

Quantenmechanisch: $[J^i, J^j] = i\hbar \varepsilon^{ijk} J^k \longrightarrow$ nicht alle
 Vektorkomponenten lassen sich simultan festlegen $\longrightarrow$
 bestimmte Basistransformation zwischen den Basissystemen
 der einzelnen Drehimpulse und Basissystem für
 Gesamtdrehimpuls.

Konkret verdeutlichen wir die Problemstellung am Fall
 von Spin $\frac{1}{2}$ & Bahndrehimpuls.

Da wir $s = \frac{1}{2}$ wählen, unterdrücke Notation von s und
schreibe die Spineigenzustände als

$$|s, m_s\rangle = \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \left(\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\uparrow\rangle, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \right)$$

also

$$\vec{S}^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$S_z \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar m_s \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

Ort/Spin-Produktzustand: $|\vec{x}\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = |\vec{x}; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$

Gesamt Drehimpuls: $\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S} \equiv \vec{L} + \vec{S}$,

wobei wir im letzten Ausdruck die Notation der Identitätsoperatoren unterdrücken.

Drehoperator:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}^{(\text{Bahn})}(R) \otimes \mathcal{D}^{(\text{Spin } \frac{1}{2})}(R) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\varphi}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{\varphi}}$$

Wellenfunktion:

$$\psi_{\pm}(\vec{x}) = \langle \vec{x}; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | \Psi \rangle = \sum_{n, l, m} \langle \vec{x}; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | n, l, m; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle \langle n, l, m; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | \Psi \rangle$$

$$= \sum_{n, l, m} \psi_{n, l, m}(\vec{x}) \langle n, l, m; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | \Psi \rangle$$

→ Problemstellung:

Entwickle statt in $|l, m; s, m_s\rangle$ in $|j, m_j, l, s\rangle$

oder allgemein: Wenn $\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2 \equiv \vec{J}_1 + \vec{J}_2$,

dann entwickle statt in $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ in $|j, m_j, j_1, j_2\rangle$

wobei $J_{1,2} \geq |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle = \hbar m_{1,2} |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle$

$$\vec{J}_{1,2}^2 |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle = \hbar^2 j_{1,2}(j_{1,2}+1) |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle$$

und $J_z |j, m_j, j_1, j_2\rangle = \hbar m_j |j, m_j, j_1, j_2\rangle$

$$\vec{J}^2 |j, m_j, j_1, j_2\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j, j_1, j_2\rangle$$

Die Entwicklungskoeffizienten

$$\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle$$

nennt man Clebsch-Gordan Koeffizienten.

Dabei bilden $\vec{J}_1^2, J_{1z}$ und $\vec{J}_2^2, J_{2z}$ einen vollständigen Satz, da dies für die jeweiligen Paare gilt und die entsprechenden Unterräume unabhängig sind.

Andererseits kommutieren $\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ untereinander, da $[J_z, \vec{J}_{1,2}^2] = [J_{1z} + J_{2z}, \vec{J}_{1,2}^2] = 0$ und $[\vec{J}^2, \vec{J}_{1,2}^2] = 0$

wie man sieht anhand von

$$\vec{J}^2 = \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2 \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + J_{1z} J_{2z} + J_{1+} J_{2-} + J_{1-} J_{2+}$$

Wir werden sehen, daß wir jeden Basisvektor

$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ in den Zuständen $|j, m_j, j_1, j_2\rangle$ entwickeln können, so daß auch $\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ einen vollständigen Satz bilden.

Wichtig ist allerdings in Erinnerung zu behalten, daß trotz $[\vec{J}^2, J_z] = 0$ i. A. $[\vec{J}^2, J_{1,2z}] \neq 0$.

Bevor wir die allgemeine Lösung angehen, betrachten wir den Fall $\vec{J}_1 = \vec{S}_1$, $\vec{J}_2 = \vec{S}_2$ mit $\vec{S}_{1,2}$ zwei Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren $\rightarrow \vec{J} = \vec{S} = \vec{S}_1 \otimes \underline{1} + \underline{1} \otimes \vec{S}_2 = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$

Notation: $j \rightarrow S$, $j \rightarrow S \rightarrow$

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |s_1, m_1, s_2, m_2\rangle$$

$$|j, m_j, j_1, j_2\rangle = |S, m_S, s_1, s_2\rangle$$

Dies beschreibt z.B. zwei-Elektronen-Systeme wie das Heliumatom.

Da $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ und $m_{1,2} = \pm \frac{1}{2}$, ist die Basis $|s_1, m_1, s_2, m_2\rangle$ vierdimensional.

In der Basis $|S, m_S, s_1, s_2\rangle$ existieren folgende Möglichkeiten: $S = \begin{cases} 0 \rightarrow m_S = 0 \\ 1 \rightarrow m_S = -1, 0, 1 \end{cases}$, d.h. auch diese Basis ist vierdimensional.

Der Zustand mit minimalem m_S ist offenbar

$$|1, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

Wir erzeugen daraus $m_S = 0, 1$ mit dem Leiteroperator

$$S_+ = S_x + i S_y = S_{1x} + i S_{1y} + S_{2x} + i S_{2y} = S_{1+} + S_{2+}$$

$$\equiv S_{1+} \otimes \underline{1} + \underline{1} \otimes S_{2+}$$

$$\rightarrow \frac{1}{\hbar} S_+ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$\rightarrow$ Mit der korrekten Normierung ist

$$|1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle)$$

Nochmalige Anwendung:

$$\frac{1}{\hbar} S_+ |1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} 2 |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

→ korrekt normiert ist

$$|1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

Der Zustand zu $s=0$ wird orthogonal zu diesen dreien gewählt:

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

Wir können nun für dieses Beispiel explizit die nichtverschwindenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten angeben:

	j	j	...
	m_j	m_j	...
m_1	m_2	Koeffizienten	
m_1	m_2		
...			

		1		
	+1	1	0	
$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	1	0	0
$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	1
$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	-1
	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	

Notation: vgl. PDG

8.9 Addition allgemeiner Drehimpulse und Bestimmung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Entwicklung der Zustände in der Gesamtdrehimpulsbasis durch Zustände in der Basis der beiden Einzeldrehimpulse:

$$|j, m_j, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan Koeff.}}$$

Dabei ist $\sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2| = \mathbb{1}$

im Unterraum der Zustände mit gegebenen j_1 & j_2 .

Behauptung Für $m_j \neq m_1 + m_2$ verschwinden die Clebsch-Gordan Koeffizienten.

Beweis Offenbar gilt $\underbrace{(j_z - j_{1z} - j_{2z})}_{=0} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = 0$
Linksmultiplikation ergibt:

$(m_j - m_1 - m_2) \langle j, m_j, j_1, j_2 | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle = 0$, woraus die Behauptung folgt.

Behauptung Die Clebsch-Gordan Koeffizienten verschwinden, außer wenn $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$.

Identifizieren wir j und $j_{1,2}$ mit der Länge klassischer Vektoren, dann ist dies genau die Dreiecksungleichung.

Quantenmechanisch ist der Beweis etwas mühseliger. Wir übergehen diesen daher an dieser Stelle, zeigen aber als Konsequenz obiger Bedingung, daß beide Basen die gleiche Dimension haben:

Dimension der Basis $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$: $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$

Dimension der Basis $|j, m_j, j_1, j_2\rangle$:

Sei o. B. d. A. $j_1 \geq j_2 \rightarrow$

$$N = \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = 2 * \left(\frac{(j_1+j_2)(j_1+j_2+1)}{2} - \frac{(j_1-j_2-1)(j_1-j_2)}{2} \right) + j_1+j_2 - (j_1-j_2) + 1$$

$$= (4j_1j_2 + 2j_1) + 2j_2 + 1 = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

Zusammen mit der Tatsache, daß $\vec{j}^2, j_z, \vec{j}_1^2, \vec{j}_2^2$

kommutieren ist nun also klar, daß dieser Satz vollständig ist, da der vollständige Satz $\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z}$ ein Basissystem gleicher Größe besitzt, welches den gleichen Unterraum aufspannt.

Entsprechend der Eigenschaften von Transformationen zwischen Basissystemen (Kapitel 3.5) bilden die Clebsch-Gordan Koeffizienten eine unitäre Matrix. Darüberhinaus ergibt sich aus den im Folgenden besprochenen Rekursionsrelationen, daß die Koeffizienten reell gewählt werden können, so daß sie insgesamt eine orthogonale Matrix bilden. Es ergeben sich daraus folgende Relationen:

$$\sum_j \sum_{m_j} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle \langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle = \delta_{m, m'_1} \delta_{m, m'_2}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j', m'_j, j_1, j_2 \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m_j m'_j}$$

Mit $j' = j$ und $m'_j = m_j = m_1 + m_2$ erhalten wir die nützliche Normierungsbedingung

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle^2 = 1$$

An Stelle der Clebsch-Gordan Koeffizienten werden manchmal die Wigner-3-j-Symbole verwendet:

$$\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}$$

Rekursionsrelationen für Clebsch-Gordan Koeffizienten

Wir gehen aus von

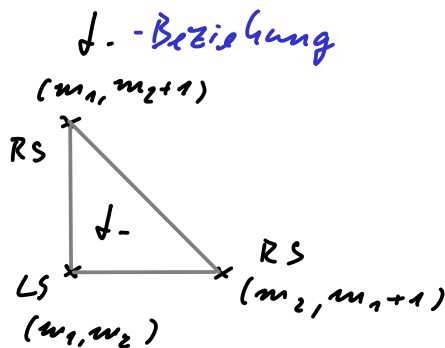
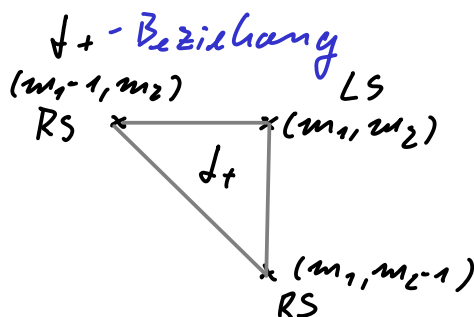
$$\begin{aligned}
 J_{\pm} |j, m_j, j_1, j_2\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle \\
 &= \hbar \sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)} |j, m_j \pm 1, j_1, j_2\rangle \\
 &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \hbar \left(\sqrt{(j_1 \mp m'_1)(j_1 \pm m'_1 + 1)} |j_1, m'_1 \pm 1, j_2, m'_2\rangle \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{(j_2 \mp m'_2)(j_2 \pm m'_2 + 1)} |j_1, m'_1, j_2, m'_2 \pm 1\rangle \right) \\
 &\quad * \langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle
 \end{aligned}$$

Multipliziere nun von links mit $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 |$

→ LS =

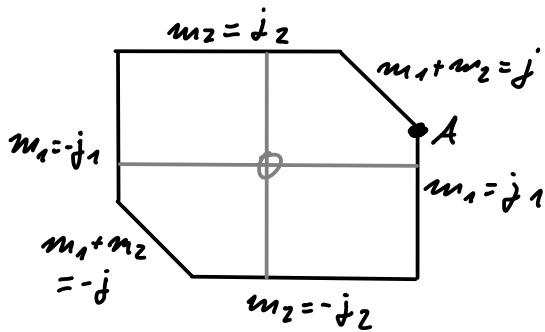
$$\begin{aligned}
 &\hbar \sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j \pm 1, j_1, j_2\rangle \\
 &= \hbar \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1, m_1 \mp 1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle \quad \begin{matrix} m'_1 = m_1 \mp 1 \\ m'_2 = m_2 \end{matrix} \\
 &+ \hbar \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 \mp 1 | j, m_j, j_1, j_2\rangle \quad \begin{matrix} m'_1 = m_1 \\ m'_2 = m_2 \mp 1 \end{matrix} \\
 &= RS
 \end{aligned}$$

Betrachte nun diese Rekursionsrelation in der m_1, m_2 -Ebene:



Zeichne nun die Grenzen der erlaubten Region, gegeben durch

$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2, \quad -j \leq m_1 + m_2 \leq j.$$



NB: Für $j_1 + j_2 = j$ haben wir ein Rechteck

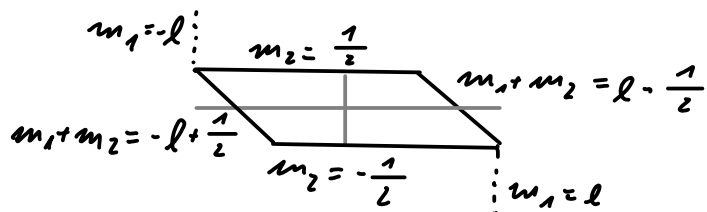
$$j_2 = 3 \quad j_1 = 4 \quad j = 5$$

Wählen wir als Ausgangspunkt A, so wählen wir als erste Rekursionsrelation ein j -Dreieck, wodurch wir den Koeffizienten B erhalten, da der dritte Eckpunkt einem verschwindenden verbotenen Koeffizienten entspricht. Es lassen sich dann mit den Rekursionsrelationen aus jeweils zwei bekannten Koeffizienten ein dritter konstruieren. Nutzt man dann die obige Normierungsbedingung für die m_1, m_2 Summe, dann sind die Koeffizienten bis auf einen Faktor gegeben. Es ist klar, daß sofern der Koeffizient am Punkt A reell ist, dies wie oben behauptet auch für alle anderen Koeffizienten gilt.

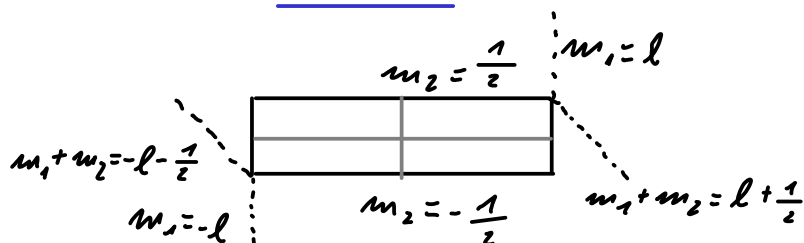
Ein einfaches und wichtiges praktisches Beispiel ist die Addition von Spin $\frac{1}{2}$ zu einem Bahndrehimpuls ($\rightarrow$ ganzzahliges l), also die Situation im Wasserstoffatom. In obiger allgemeinen Diskussion identifizieren wir dazu $j_1 = l \in \mathbb{N}$, $m_1 = m_l$, $j_2 = s = \frac{1}{2}$, $m_2 = m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Erlaubte j :
$$\begin{cases} j = l \pm \frac{1}{2} & \text{für } l > 0 \\ j = \frac{1}{2} & \text{für } l = 0 \end{cases}$$

$$j = l - \frac{1}{2}:$$



$$j = l + \frac{1}{2}:$$



Wir gehen zunächst aus vom Fall $j = l + \frac{1}{2}$ und benutzen in der Reihe $m_2 = +\frac{1}{2}$ die J_- Relationen. Dies hat den Vorteil, daß nur Beziehungen zwischen je zwei Koeffizienten verwendet werden müssen:

$$\begin{aligned} & \pm \sqrt{(l + \frac{1}{2} + m_j)(l + \frac{1}{2} - m_j + 1)} \langle l, m_1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j - 1, l, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \pm \sqrt{(l + m_1 + 1)(l - m_1)} \langle l, m_1 + 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle \\ & \quad m_1 = m_j - \frac{3}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \pm \sqrt{(l + \frac{1}{2} + m_j)(l + \frac{1}{2} - m_j + 1)} \langle l, m_j - \frac{3}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j - 1, l, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \pm \sqrt{(l + m_j - \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{3}{2})} \langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle \\ & \quad m_j \rightarrow m_j + 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1, l, \frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

Von einem bestimmten m_j ausgehend läßt sich dies iterieren, bis auf der rechten Seite $m_j + 1 = l + \frac{1}{2}$ erreicht wird:

$$\begin{aligned} & \langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{3}{2}}{l + m_j + \frac{5}{2}}} \cdots \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \langle l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, l, \frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

Es ist aber klar, daß $m_l = l$ und $m_s = +\frac{1}{2}$

für $m_j = l + \frac{1}{2}$ sein muß $\rightarrow$ Das Matrixelement auf der rechten Seite ist 1 (wobei wir eine bestimmte Phase gewählt haben). $\rightarrow$

$$\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} = \cos \alpha$$

Ein gegebenes Zustand in der Gesamtdrehimpulsbasis setzt sich aus höchstens zwei Zuständen in der Einzel = Drehimpulsbasis zusammen ($m_j = m_l \pm \frac{1}{2}$).

Aufgrund der Orthogonalitätsrelation ergibt sich also:

$$|l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2}\rangle = \cos \alpha |l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sin \alpha |l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

Orthogonal dazu:

$$|l - \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2}\rangle = -\sin \alpha |l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \cos \alpha |l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

Zu begründen ist noch, daß das relative Vorzeichen im Einklang mit den Rekursionsrelationen ist.

$$\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2} \rangle > 0, \text{ da}$$

$|l + \frac{1}{2}, m_j, l, \frac{1}{2}\rangle$ durch wiederholte Anwendung von J_- auf $|l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, l, \frac{1}{2}\rangle$ erzeugt werden kann, wobei die dabei auftretenden Faktoren größer gleich Null sind.

Mit

$$\sin^2 \alpha = 1 - \frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} = \frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}$$

ergibt sich folgende Tabelle:

		j	j	...
		m_j	m_j	...
m_1	m_s	Koeffizienten		
m_1	m_s			
...				

		$l + \frac{1}{2}$	$l - \frac{1}{2}$
		m_j	m_j
$m_j - \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}$	$-\sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}$
$m_j + \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}$	$\sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}$

Wir geben noch explizit die Spin-Kugelflächenfunktionen (Eigenfunktionen von $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, $\vec{J}^2$ und J_z) an:

$$\begin{aligned}
 Y_l^{j=l \pm \frac{1}{2}, m_j} &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j = m_j - \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \chi_{\pm} \\
 &\quad + \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j = m_j + \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \chi_{\mp} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m_j + \frac{1}{2}} Y_l^{m_j - \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ \sqrt{l \mp m_j + \frac{1}{2}} Y_l^{m_j + \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Diese sind wichtig für die Lösung der Dirac-Gleichung im Zentralpotential, welche zur quantitativen korrekten Erklärung der Feinstruktur durch die Spin-Bahn-Kopplung führt. In der Tat sind dies auch Eigenfunktionen von

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$$

mit den Eigenwerten

$$\frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] = \frac{\hbar^2}{2} * \begin{cases} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Wir merken noch an, daß sich mehr als zwei Drehimpulse addieren lassen, indem man die hier vorgestellten Methoden sukzessive anwendet, d.h. z.B.

durch die Addition von $\vec{j}_1, \vec{j}_2, \vec{j}_4$ und $\vec{j}_5$ werden folgende Eigenzustände gebildet:

$$|((j_1, j_2) j_3, (j_4, j_5) j_6) j_g m_g\rangle$$

Die dabei auftretenden Matrixelemente werden Racah-Koeffizienten bzw. Wigner-3nj-Symbole genannt.

8.10 Tensoroperatoren

Wir haben bereits gesehen, daß eine Wellenfunktion, die wie ein dreidimensionaler Vektor transformiert, ein Teilchen mit Spin-1 beschreibt.

Welcher Spin ist man Tensoren zuzuordnen?

Diese Frage ist von Bedeutung

- * bei der Auswertung von Matrixelementen in der Atom- und Kernphysik,
- * in der Quantenfeldtheorie bei der Beschreibung von Elementarteilchen mit Spin
- * aber auch in der klassischen Fluiddynamik, wo eine Entwicklung in sphärischen Multipolmomenten sinnvoll sein kann (z.B. beim Problem der Strukturformierung im frühen Universum).

Wir erinnern wieder an die Transformations Eigenschaft von kartesischen Vektoren und Tensoren unter Drehungen:

Vektor: $A_i' = \sum_{ii'} [e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}]_{ii'} A_{i'}$

Tensor: $T_{ij'...} = \sum_{ii'...} [e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}]_{ii'} [e^{-\vec{\varphi} \cdot \vec{L}}]_{jj'} \dots \cdot T_{i'j'...}$

Betrachten wir als Beispiel einen Tensor 2. Stufe T_{ij} . Da einem Tensoren höherer Stufe selten begegnet, ist dies bereits von einiger allgemeiner Bedeutung.

Zerlegen wir nun T_{ij} in

* seine (normierte) Spur $E = \frac{1}{3} \sum_i T_{ii} = \frac{1}{3} \text{tr } T$,

* seinen antisymmetrischen Anteil $A_{ij} = \frac{1}{2} (T_{ij} - T_{ji})$

* seinen spurfreien, symmetrischen Anteil $S_{ij} = \frac{1}{2} (T_{ij} + T_{ji}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sum_k T_{kk}$

Zahl der Freiheitsgrade:

$T \rightarrow 9, E \rightarrow 1, A \rightarrow 3, S \rightarrow 5$ (NB $1+3+5=9$).

Unter Drehungen ist E invariant, während A und S wiederum auf symmetrische bzw. antisymmetrische Tensoren abbilden:

$$T'_{ij} = R_{it} R_{js} T_{ts}$$

$$E' = \frac{1}{3} R_{it} R_{is} T_{ts} = \frac{1}{3} \text{tr} [R T R^{-1}] = \frac{1}{3} \text{tr } T$$

$$S'_{ij} = R_{it} R_{js} S_{ts} \rightarrow S'_{ji} = R_{jt} R_{is} S_{ts} = R_{jt} R_{is} S_{st} \\ = R_{js} R_{it} S_{ts} = S'_{ij}$$

$$A'_{ij} = R_{it} R_{js} A_{ts} \rightarrow A'_{ji} = R_{jt} R_{is} A_{ts} = -R_{jt} R_{is} A_{st} \\ = -R_{js} R_{it} A_{ts} = -A'_{ij}$$

Wir behaupten, daß der antisymmetrische Tensor durch einen Vektor $\vec{V}$ dargestellt werden kann,

$$A_{ij} = \varepsilon_{ijk} V_k \rightarrow V_k = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijl} V_l = \delta_{kl} V_l = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} A_{ij},$$

wobei $V_i' = R_{ij} V_j$ ist.

Dies folgt in der Tat aus dem Transformationsverhalten von $A_{ij} = R_{ii'} R_{jj'} A_{i'j'} \longrightarrow$

$$\begin{aligned} V_k' &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} R_{ir} R_{js} \varepsilon_{rst} V_t \\ &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} R_{ir} R_{js} \delta_{lk} \varepsilon_{rst} V_t \\ &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} R_{ir} R_{js} R_{lm} R_{mk}^{-1} \varepsilon_{rst} V_t \\ &= \frac{1}{2} \det R \underbrace{\varepsilon_{rsm} \varepsilon_{rst}}_{= 2 \delta_{mt}} R^{-1}_{mk} V_t \\ &= \det R R_{kt} V_t = R_{kt} V_t \end{aligned}$$

Dabei haben wir benutzt, daß

$$\varepsilon_{ijk} M_{ir} M_{js} M_{kt} = \det M \varepsilon_{rst}$$

E transformiert also wie ein Skalar und A wie ein Vektor. Die Zahl der Freiheitsgrade entspricht also der $2j+1$ -dimensionalen Darstellung der Drehgruppe mit $j=0$ bzw. $j=1$. Es liegt nun nahe zu vermuten, daß S_{ij} mit fünf Freiheitsgraden gemäß der $l=2$ Darstellung transformiert.

Um dies zu sehen, gehen wir von kartesischen zu sphärischen Tensoren über.

Sphärische Tensoren lassen sich allgemein über ihre Transformationseigenschaften definieren. Es gibt aber folgenden Zusammenhang mit den Kugelflächenfunktionen:

$T_q^{(k)} = Y_{\ell=k}^{m=q}(\vec{V})$ ist ein sphärischer Tensor k -ter Stufe
 Dabei ist $\vec{V} = \vec{V}(|\vec{V}|, \vartheta, \varphi)$ und $Y_{\ell}^m(\vec{V}) = |\vec{V}| Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$
 (Allerdings hat umgekehrt nicht jeder sphärische Tensor die Form einer Kugelflächenfunktion.)

Beispiele:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta$$

$$\cos \vartheta = \frac{z}{r}, \quad \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} = \frac{x \pm iy}{r}$$

$$\vec{V} = (V_x, V_y, V_z) \equiv (x, y, z)$$

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \longrightarrow T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r} \longrightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (V_x \pm i V_y)$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{r^2} \longrightarrow T_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (V_x \pm i V_y)^2$$

Die $T_q^{(k)}$ transformieren in der $2k+1$ -dimensionalen irreduziblen Darstellung der Drehgruppe, ebenso wie die $Y_{\ell=k}^m$.

Daher betrachten wir das Transformationsverhalten der Kugelflächenfunktionen nun etwas genauer.

Mit der Definition eines Einheitsvektors $\hat{n} = \hat{n}(\vartheta, \varphi)$ und des zugehörigen Eigenkets $|\hat{n}\rangle$ schreiben wir

$$Y_{\ell}^m(\hat{n}) = \langle \hat{n} | \ell, m \rangle$$

Transformation von $|\hat{n}\rangle$: $|\hat{n}'\rangle = D(R) |\hat{n}\rangle$ ($\langle \hat{n}' | = \langle \hat{n} | D(R^\dagger)$)

Wir notieren die Definition der Drehmatrix für Drehimpuls-eigenzustände

$$D_{m'm}^{(\ell)}(R) = \langle \ell m' | D(R) | \ell m \rangle$$

→

$$D(R^{-1}) |l m\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) |l m'\rangle$$

linksmultiplikation mit $\langle \hat{n} | \rightarrow$

$$Y_l^m(\hat{n}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{n}) D_{m'm}^{(l)}(R^{-1})$$

Wir erinnern an das Transformationsverhalten von Operatoren:

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \psi' | A' | \varphi' \rangle = \langle \psi | D^\dagger(R) A' D(R) | \varphi \rangle \rightarrow A' = D(R) A D^\dagger(R)$$

Wir definieren daher einen Tensoroperator k -ter Stufe durch das Transformationsverhalten

$$D^\dagger(R) T_q^{(k)} D(R) = \sum_{q'=-k}^k D_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)}$$

oder äquivalent dazu:

$$D(R) T_q^{(k)} D^\dagger(R) = \sum_{q'=-k}^k D_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)}$$

Man beachte, daß mit dieser Definition klar ist, daß die $Y_l^m(\vec{V})$ als sphärische Tensoren aufgefaßt werden können – allerdings haben umgekehrt nicht alle sphärischen Tensoren die Gestalt von Kugelflächenfunktionen.

Infinitesimal ergibt sich

$$\left(1 - \frac{i \vec{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1 + \frac{i \vec{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar}\right) = \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle k q' | 1 - \frac{i \vec{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar} | k q \rangle$$

$$[\vec{J} \cdot \hat{n}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle k q' | \vec{J} \cdot \hat{n} | k q \rangle$$

Wählen wir nun $\hat{n} = \vec{z}$ sowie $\hat{n} = \vec{x} \pm i \vec{y}$, dann folgt:

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}$$

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}$$

wobei wir

$$|j, m \pm 1\rangle = \frac{j \pm |j, m\rangle}{\hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}}$$

benutzt haben.

Diese Kommutatorrelationen können als alternative Definition sphärischer Tensoren aufgefaßt werden.

Sphärische Tensoroperatoren haben damit die vorteilhafte Eigenschaft, in einer bestimmten irreduziblen Darstellung der Drehgruppe zu transformieren.

Tensor 1. Stufe

Ein kartesischer Tensoroperator 1. Stufe ist ein Vektoroperator, d.h. es gilt

$$[J_j, V_i] = -i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k \longrightarrow$$

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y, [J_z, V_y] = -i\hbar V_x, [J_z, V_z] = 0$$

Ansatz für sphärischen Tensor:

$$V_q^{(1)} = a_{qx} V_x + a_{qy} V_y + a_{qz} V_z$$

$$[J_z, V_0^{(1)}] = \hbar q V_0^{(1)} \xRightarrow{q=0} V_0^{(1)} = V_z \iff a_{0z}=1, a_{0x}=a_{0y}=0$$

$$[J_z, V_{\pm}^{(1)}] = a_{\pm x} i\hbar V_y - a_{\pm y} i\hbar V_x = \pm \hbar (a_{\pm x} V_x + a_{\pm y} V_y)$$

$$\implies a_{\pm x} = \mp i a_{\pm y} \iff a_{\pm y} = \pm i a_{\pm x}, a_{\pm z} = 0$$

$$[J_{\pm}, V_0^{(1)}] = \hbar \sqrt{2} V_{\pm}^{(1)} = \hbar \sqrt{2} a_{\pm x} (V_x \pm i V_y)$$

$$= [J_x \pm i J_y, V_z] = -i\hbar V_y \mp \hbar V_x = \mp \hbar (V_x \pm i V_y)$$

$$\longrightarrow a_{\pm x} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow V_+^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (V_x + i V_y), \quad V_-^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x - i V_y)$$

Bis auf die Normierung stimmen diese Resultate mit den Kugelflächenfunktionen als sphärischen Tensoren überein.

Tensor 2. Stufe

Man kann $T_q^{(k)}$ wieder mit zunächst unbekannten Koeffizienten als Summe aus Komponenten des kartesischen Tensors ausdrücken und dann aus den Kommutatorrelationen Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten herleiten.

Für den allgemeinen Tensor 2. Stufe findet man

$$T_0^{(0)} = -\sqrt{3} E$$

$$T_0^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}} S_{zz}$$

$$T_0^{(1)} = -i\sqrt{2} A_{xy}$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \mp (S_{zx} \pm i S_{zy})$$

$$T_{\pm 1}^{(1)} = \pm i (A_{yz} \pm i A_{zx})$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} (S_{xx} - S_{yy} \pm 2i S_{xy})$$

Dieses Resultat ist allgemeiner als die entsprechenden Kugelflächenfunktionen, schließt diese aber bei bestimmter Wahl von T^{ij} mit ein (siehe unten).

8.11 Produkte Sphärischer Tensoren

Clebsch-Gordan-Reihe

Das Produkt $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ ist reduzibel, da

$$\begin{aligned} D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} &= \begin{pmatrix} D^{(j_1+j_2)} & D^{(j_1+j_2-1)} & 0 \\ 0 & \ddots & D^{(j_1-j_2)} \end{pmatrix} \\ &= D^{(j_1+j_2)} \oplus D^{(j_1+j_2-1)} \oplus \dots \oplus D^{|j_1-j_2|} \end{aligned}$$

Dabei haben wir die direkte Summe orthogonaler Teilräume eingeführt als $A \oplus B = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$.

Wir können das Tensorprodukt daher in der Clebsch-Gordan-Reihe entwickeln:

$$D_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_m \sum_{m'} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle \\ * \langle j_1, m_1', j_2, m_2' | j, m', j_1, j_2 \rangle D_{m m'}^{(j)}(R)$$

Zum Beweis drücken wir die linke Seite zunächst folgendermaßen aus:

$$\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | D(R) | j_1, m_1', j_2, m_2' \rangle \\ = \langle j_1, m_1 | D(R) | j_1, m_1' \rangle \langle j_2, m_2 | D(R) | j_2, m_2' \rangle \\ = D_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R)$$

Andererseits folgt die rechte Seite ebenfalls aus diesem Matrixelement:

$$\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | D(R) | j_1, m_1', j_2, m_2' \rangle \\ = \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle \langle j, m, j_1, j_2 | D(R) | j', m', j_1, j_2 \rangle \\ * \langle j', m', j_1, j_2 | j_1, m_1', j_2, m_2' \rangle \\ = \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle D_{m m'}^{(j)}(R) \delta_{j j'} \\ * \langle j', m', j_1, j_2 | j_1, m_1', j_2, m_2' \rangle$$

Womit die Behauptung bewiesen ist.

Wir kommen nun zur Hauptaussage dieses Abschnitts über Produkte sphärischer Tensoren:

Theorem Seien $X_{q_1}^{(k_1)}$ und $Z_{q_2}^{(k_2)}$ irreduzible sphärische Tensoren von Rang k_1 bzw. k_2 . $\longrightarrow$

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1, q_1; k_2, q_2 | k, q, k_1, k_2 \rangle X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)}$$

ist ein irreduzibler sphärischer Tensor der Stufe k .

Beweis Zu berechnen ist das Transformationsverhalten

$$D^+(R) T_q^{(k)} D(R) = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1, q_1; k_2, q_2 | k, q, k_1, k_2 \rangle D^+(R) X_{q_1}^{(k_1)} D(R) \\ * D^+(R) Z_{q_2}^{(k_2)} D(R)$$

$$= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1, q_1; k_2, q_2 | k, q, k_1, k_2 \rangle X_{q'_1}^{(k_1)} D_{q'_1 q_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{q'_2}^{(k_2)} D_{q'_2 q_2}^{(k_2)}(R^{-1})$$

$$\stackrel{\substack{\text{c.g.-} \\ \text{Reihe}}}{=} \sum_{k''} \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q''} \sum_{q'} \langle k_1, q_1; k_2, q_2 | k, q, k_1, k_2 \rangle \\ * \langle k_1, q'_1; k_2, q'_2 | k'', q', k_1, k_2 \rangle \langle k_1, q_1; k_2, q_2 | k'', q'', k_1, k_2 \rangle \\ * D_{q' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)}$$

$$= \sum_{k''} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q''} \sum_{q'} \delta_{k k''} \delta_{q q''} \langle k_1, q'_1; k_2, q'_2 | k'', q', k_1, k_2 \rangle D_{q' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)}$$

$$= \sum_{q'} \left(\sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1, q'_1; k_2, q'_2 | k, q', k_1, k_2 \rangle X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)} \right) D_{q' q}^{(k)}(R^{-1})$$

$$= \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} D_{q' q}^{(k)}(R^{-1}) = \sum_{q'} D_{q q'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)}$$

Dabei haben wir die folgende Orthonormalitätsrelation benutzt:

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j', m'_j, j_1, j_2 \rangle = \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}$$

Ein einfaches Beispiel für ein kartesisches Tensorprodukt ist gegeben durch $T_{ij} = u_i v_j$ mit zwei Vektoren $\vec{u}$ und $\vec{v}$.

Dieses kann wie folgt zerlegt werden:

$$u_i v_j = \frac{\vec{u} \cdot \vec{v}}{3} \delta_{ij} + \underbrace{\frac{u_i v_j - v_j u_i}{2}}_{= \varepsilon_{ijk} (\vec{u} \times \vec{v})_k} + \left(\frac{u_i v_j + u_j v_i}{2} - \frac{\vec{u} \cdot \vec{v}}{3} \delta_{ij} \right)$$

1. Term: Skalar (rotationsinvariant) - 1 Freiheitsgrad

2. Term: Vektor - 3 Freiheitsgrade

Term in Klammer: Symmetrischer spurfreier Tensor - 5 Freiheitsgrade

Kurz läßt sich dieses Beispiel für die Zerlegung eines kartesischen in einen sphärischen Tensoren ausdrücken als $3 \otimes 3 = 1 \oplus 3 \oplus 5$.

Die sphärischen Komponenten sind nun

$$T_0^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} (u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z)$$

$$T_0^{(1)} = -i \frac{1}{\sqrt{2}} (u_x v_y - v_y u_x)$$

$$T_{\pm 1}^{(1)} = \pm \frac{i}{2} (u_y v_z - u_z v_y \pm i u_z v_x \pm i u_x v_z)$$

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (2u_z v_z - u_x v_x - u_y v_y)$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \mp \frac{1}{2} (u_x v_z + u_z v_x \pm i u_z v_y \pm i u_y v_z)$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} (u_x v_x - u_y v_y \pm i u_x v_y \pm i u_y v_x)$$

Offenbar ist dies ein Spezialfall des oben angegebenen Zerlegung eines allgemeinen kartesischen Tensors 2. Stufe.

Auch wenn die Behandlung von Quantenfeldern die Verallgemeinerung von der Drehgruppe zur Lorentzgruppe voraussetzt, merken wir bereits folgendes an:

- * Photonen haben als Vektorteilchen den Spin 1, was sowohl ausgehend von der Darstellung durchs Vektorpotential als auch durch den antisymmetrischen Feldstärketensor klar ist. Die Spineigenenzustände sind durch $V_{\pm}^{(1)}$ als Polarisationsvektoren gegeben und entsprechen genau zirkular polarisiertem Licht.
- * Gravitationswellen werden durch einen symmetrischen Tensor 2. Stufe beschrieben, so daß Gravitonen Spin 2 haben.

8.12 Das Wigner-Eckart-Theorem

Theorem

$$\langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = \langle j, m; k, q | j', m', j, k \rangle \frac{\langle \alpha'; j' || T^{(k)} || \alpha; j \rangle}{\sqrt{2j'+1}}$$

Das Matrix Element zerfällt also in zwei Faktoren:

- * einen Clebsch-Gordan-Koeffizienten (geometrischer Faktor) entsprechend der Addition der Drehimpulse von $|j, m\rangle$ und $|k, q\rangle$.
- * und einen dynamischen Faktor, welcher nur vom Gesamtdrehimpuls und weiteren Quantenzahlen α (z.B. Radialquantenzahl) abhängt, aber unabhängig von

den Magnetquantenzahlen m, m' und q ist.

Der Ausdruck $\langle \alpha'; j' || T^{(k)} || \alpha; j \rangle$ wird durch obige Relation also definiert. Man bezeichnet diesen als reduziertes Matrixelement. Um $\langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle$ zu berechnen, genügt also die Kenntnis eines dieses Matrixelemente. Aus diesem und aus den Clebsch-Gordan-Koeffizienten ergeben sich die Elemente für weitere m, m' und q .

Beweis

Wir gehen aus von

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}$$

→

$$\langle \alpha'; j', m' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | \alpha; j, m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha'; j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha; j, m \rangle$$

Mit $|j, m \pm 1\rangle = \frac{J_{\pm} |j, m\rangle}{\hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}}$ folgt daraus

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha'; j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle \\ &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \pm 1 \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha'; j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha; j, m \rangle \end{aligned}$$

Wir vergleichen dies mit der Rekursionsrelation für die Clebsch-Gordan Koeffizienten:

$$\begin{aligned} & \hbar \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j, m; k, q | j', m' \mp 1, j, k \rangle \\ &= \hbar \sqrt{(j \mp m + 1)(j \mp m)} \langle j, m \pm 1; k, q | j', m', j, k \rangle \\ &+ \hbar \sqrt{(k \pm q + 1)(k \mp q)} \langle j, m; k, q \pm 1 | j', m', j, k \rangle \end{aligned}$$

Diese Gleichungen haben die Form homogener, linearer Gleichungssysteme, um bei gegebenem j' sämtliche Clebsch-Gordan-Koeffizienten bei Addition der Drehimpulse von $|j, m\rangle$ und $|k, q\rangle$ wie in Abschnitt 8.9 diskutiert zu Erzeugen. Das Resultat ist bis auf die Normierung eindeutig, also

$$\frac{\langle \alpha'; j', m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha; j, m \rangle}{\langle \alpha'; j', \tilde{m}' | \tilde{T}_{\tilde{q}\pm 1}^{(k)} | \alpha; j, \tilde{m} \rangle} = \frac{\langle j, m; k, q \pm 1 | j', m', j, k \rangle}{\langle j, \tilde{m}; k, \tilde{q} \pm 1 | j', \tilde{m}', j, k \rangle}$$

$$\longrightarrow \frac{\langle \alpha'; j', m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha; j, m \rangle}{\langle j, m; k, q \pm 1 | j', m', j, k \rangle} = f(\alpha, \alpha', j, j')$$

$$\text{mit } f(\alpha, \alpha', j, j') = \frac{\langle \alpha'; j' || T^{(k)} || \alpha; j \rangle}{\sqrt{2j'+1}}.$$

Die Behauptung ist damit bewiesen.

Beispiel Dipolübergänge

Angeregte atomare Zustände zerfallen häufig unter Emission eines Photons in sogenannten elektrischen Dipolübergängen.

Die Rate ist dabei proportional zu $\langle n', l', m' | \vec{x} | n, l, m \rangle$.

Wir können also benutzen, daß

$$\langle n', l', m' | T_q^{(1)} | n, l, m \rangle \propto \langle l, m; 1, q | l', m', l, 1 \rangle$$

mit $q = 0, \pm 1$

$$\longrightarrow m' = m + q \implies \Delta m = m' - m = 0, \pm 1$$

Weiterhin folgt mit der Dreiecksrelation $l-1 \leq l' \leq l+1$

Die Paritätstransformation $\vec{x} \longrightarrow -\vec{x}$ entspricht

$$(\vartheta, \varphi) \longrightarrow (\pi - \vartheta, \pi + \varphi)$$

Wir sehen dann an der Definition der Kugelflächenfunktionen
 $Y_l^m(\vartheta, \varphi) \rightarrow Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

Für $l' = l$ hat der fürs Matrixelement auszuwertende
 Integrand also ungerade Parität, so daß

$$\langle n', l' = l, m' | \vec{x} | n, l, m \rangle = 0.$$

Insgesamt: $\Delta l = l' - l = \pm 1$

8.13 Elektrische Multipolmomente

Integral über drei Kugelflächenfunktionen

Da sphärische Tensoroperatoren die Gestalt von Kugelflächenfunktionen haben können, ist es für Anwendungen des Wigner-Eckart Theorems von Nutzen, eine Formel für Matrixelemente von diesen Funktionen herzuleiten.

Wir gehen dazu aus von der Clebsch-Gordan-Reihe

$$D_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_m \sum_{m'} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle$$

$$\cdot \langle j_1, m_1'; j_2, m_2' | j, m', j_1, j_2 \rangle D_{m m'}^{(j)}(R)$$

und setzen $j_1 \rightarrow l_1$, $j_2 \rightarrow l_2$, $j \rightarrow l'$, $m \rightarrow m'$,
 $m_1' \rightarrow 0$, $m_2' \rightarrow 0$:

$$D_{m_1 0}^{(l_1)}(R) D_{m_2 0}^{(l_2)}(R) = \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1, m_1; l_2, m_2 | l', m', l_1, l_2 \rangle$$

$$\cdot \langle l_1, 0; l_2, 0 | l', 0, l_1, l_2 \rangle D_{m' 0}^{(l')}(R)$$

Wir ersetzen dann

$$D_{m'0}^{(\ell)}(R(\vartheta, \varphi)) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell}^{m'*}(\vartheta, \varphi)$$

→

$$Y_{\ell_1}^{m_1}(\vartheta, \varphi) Y_{\ell_2}^{m_2}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}}{4\pi} \sum_{\ell'} \sum_{m'} \langle \ell_1, m_1; \ell_2, m_2 | \ell', m', \ell_1, \ell_2 \rangle$$

$$* \langle \ell_1, 0; \ell_2, 0 | \ell', 0, \ell_1, \ell_2 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell'+1}} Y_{\ell'}^{m'}(\vartheta, \varphi)$$

Wir multiplizieren nun mit $Y_{\ell}^{m*}(\vartheta, \varphi)$ und integrieren über die Kugelfläche, wobei wir die Orthonormalitätsrelation ausnutzen:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta d\vartheta Y_{\ell}^{m*}(\vartheta, \varphi) Y_{\ell_1}^{m_1}(\vartheta, \varphi) Y_{\ell_2}^{m_2}(\vartheta, \varphi)$$

$$= \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}} \langle \ell_1, 0; \ell_2, 0 | \ell, 0, \ell_1, \ell_2 \rangle \langle \ell_1, m_1; \ell_2, m_2 | \ell, m, \ell_1, \ell_2 \rangle$$

Entwicklung in elektrischen Multipolen

- * Neben den Energieniveaus geben elektrische Multipolmomente Auskunft über die Struktur von Kernen, Atomen und Molekülen.
- * Multipolmomente sind Konsequenz der internen Ladungsverteilung, welche im externen Feld gemessen werden kann.

Potentielle Energie: $V(\vec{r}) = q U(\vec{r})$

Entwicklung von $U(\vec{r})$: $\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} f_{\ell m}(r) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$

Das externe Potential soll von Quellen weit entfernt von

der Testladungsverteilung erzeugt werden $\rightarrow \Delta U(\vec{r}) = 0$

Wir erinnern an den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten (Abschnitt 6.1): $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$

$$\Rightarrow \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_{lm}(r) = 0$$

$$\Rightarrow f_{lm}(r) = A r^l + B r^{-(l+1)}$$

Damit $U(\vec{r})$ endlich ist für $\vec{r} = \vec{0}$ wählen wir $B = 0$ und schreiben

$$f_{lm}(r) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} c_{lm} r^l$$

$\rightarrow$

$$V(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Q_l^m \quad \text{mit} \quad Q_l^m(\vec{r}) = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Quantenmechanisch definieren wir den Operator

$$\begin{array}{ccc} \langle \vec{r} | Q_l^m | \vec{r}' \rangle = Q_l^m(\vec{r}) \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\vartheta, \varphi) \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \\ \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\ \text{Operator} \quad \quad \text{Funktion} \end{array}$$

Die Operatoren Q_l^m nennt man elektrische Multipoloperatoren. Es ist offensichtlich, daß es sich um irreduzible sphärische Tensoroperatoren handelt, auf welche sich das Wigner-Eckart-Theorem anwenden läßt:

$$\langle \alpha'; l_1, m_1 | Q_l^m | \alpha; l_2, m_2 \rangle = \langle l_2, m_2; l, m | l_1, m_1, l_2, l \rangle \frac{\langle \alpha'; l_1 || Q_l || \alpha; l_2 \rangle}{\sqrt{2l+1}}$$

Explizit berechnen wir die linke Seite als

$$\langle \alpha'; l_1, m_1 | Q_l^m | \alpha; l_2, m_2 \rangle = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$\begin{aligned}
 & * Y_{l_1}^{m_1*}(\vartheta, \varphi) Y_{l_2}^m(\vartheta, \varphi) Y_{l_2}^{m_2}(\vartheta, \varphi) \tau^l R_{\alpha' l_1}^*(\tau) R_{\alpha l_2}(\tau) \\
 & = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l, 0; l_2, 0 | l_1, 0, l, l_2 \rangle \langle l, m; l_2, m_2 | l_1, m_1, l, l_2 \rangle \\
 & * q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_0^\infty d\tau \tau^{l+2} R_{\alpha' l_1}^*(\tau) R_{\alpha l_2}(\tau)
 \end{aligned}$$

→

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha'; l_1 \| Q_l \| \alpha; l_2 \rangle & = q \sqrt{2l_2+1} \langle l, 0; l_2, 0 | l_1, 0, l, l_2 \rangle \\
 & * \int_0^\infty d\tau \tau^{l+2} R_{\alpha' l_1}^*(\tau) R_{\alpha l_2}(\tau)
 \end{aligned}$$

Ohne Beweis merken wir folgende Symmetrieeigenschaft der Clebsch-Gordan-Koeffizienten an:

$$\langle j_1, -m_1; j_2, -m_2 | j, -m, j_1, j_2 \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle$$

Sind alle Magnetquantenzahlen gleich Null, dann verschwindet der Koeffizient also, wenn j_1+j_2-j ungerade ist. Für die obige Beziehung bedeutet dies, daß das reduzierte Matrixelement verschwindet, wenn $l+l_2-l_1$ bzw. $l+l_2+l_1$ ungerade ist.

Es gilt weiterhin die Dreiecksungleichung $|l-l_2| \leq l_1 \leq l+l_2$ für nichtverschwindende Matrixelemente. Wird ein bestimmtes System (Atom, Molekül oder Kern) betrachtet, dann ist $l_1=l_2$ und es folgt $l \leq 2l_1$.

→ Alle Multipolmomente mit $l > 2l_1$ verschwinden.

* Mit l_1+l_2+l gerade und $l_1=l_2$ folgt, daß

elektrische Multipolmomente für Drehimpulseigenzustände nur für gerade l nicht verschwinden.

- * Deuteron (Kern aus einem Proton & einem Neutron) hat im Grundzustand ein elektrisches Quadrupolmoment $\rightarrow$ der Grundzustand hat nichtverschwindenden Bahndrehimpuls.

8.14 Fermionen und Bosonen

- * Betrachte Tensorprodukt für Vielteilchenzustände:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_j\rangle \otimes \dots$$

- * Vertausche zwei identische Teilchen mit dem Permutationsoperator:

$$P_{ij} |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_j\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \dots$$

Fordere identische Teilchen, damit der Permutationsoperator in den gleichen Produkt-Hilbertraum abbildet.

- * $P_{ij} |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$, da beim Vertauschen zweier identischer Teilchen nur ein irrelevanter Phasenfaktor $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $|\lambda| = 1$ auftreten kann.

Mit $P_{ij}^2 = 1 \Rightarrow P_{ij}$ hat die Eigenwerte $\lambda = \pm 1$.

- * Betrachte $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle$ und $|\psi'\rangle = |\psi'_1\rangle \otimes |\psi'_2\rangle = |\psi'_1, \psi'_2\rangle$
 $\rightarrow \langle \psi | P_{12} P_{12}^\dagger | \psi' \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \langle \psi_1, \psi_2 | P_{12} | \vec{x}_1, \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | P_{12}^\dagger | \psi'_1, \psi'_2 \rangle$
 $= \int d^3x_1 d^3x_2 \langle \psi_1, \psi_2 | \vec{x}_2, \vec{x}_1 \rangle \langle \vec{x}_2, \vec{x}_1 | \psi'_1, \psi'_2 \rangle \rightarrow P_{12} P_{12}^\dagger = \mathbb{1} \iff P_{12}^\dagger = P_{12}$

- * Nehme man an, $\mathcal{O}$ sei hermitesch

Für ununterscheidbare Teilchen muß gelten:

$$\langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \langle P_{12} \psi | \mathcal{O} | P_{12} \psi \rangle = \langle \psi | P_{12}^\dagger \mathcal{O} P_{12} | \psi \rangle = \langle \psi | P_{12} \mathcal{O} P_{12} | \psi \rangle$$

Zerlege:

$$\langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle = \frac{1}{4} \{ \langle \varphi + \psi | \hat{O} | \varphi + \psi \rangle - \langle \varphi - \psi | \hat{O} | \varphi - \psi \rangle \\ + i \langle \varphi - i\psi | \hat{O} | \varphi - i\psi \rangle - i \langle \varphi + i\psi | \hat{O} | \varphi + i\psi \rangle \}$$

Für jeden dieser Terme gilt obige Identität, so daß allgemein: $\hat{O} = P_{12} \hat{O} P_{12} \Leftrightarrow [\hat{O}, P_{12}] = 0$

- * Ist $P_{ij} |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$, dann sagt man die Wellenfunktion ist symmetrisch bzw. antisymmetrisch unter Vertauschung des i -ten mit dem j -ten Teilchen.
- * Zustände, welche unter der Vertauschung zweier beliebiger Paare identischer Teilchen immer symmetrisch bzw. antisymmetrisch sind, heißen total symmetrisch bzw. total antisymmetrisch.

Spin Statistik Theorem

Identische Teilchen mit ganzzahligem Spin nehmen immer total symmetrische Zustände an und heißen Bosonen.

Identische Teilchen mit halbzahligem Spin nehmen immer total antisymmetrische Zustände an und heißen Fermionen.

Der Beweis kann unter der Voraussetzung der Kausalität in der Speziellen Relativitätstheorie in der Quantenfeldtheorie geführt werden.

Es folgt das für den Bau der Atome mit mehr als einem Elektron wesentliche

Pauli-Verbot

Zwei Fermionen können nicht gleichzeitig im selben Einteilchenzustand sein.

Für $|\bar{\psi}\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$ folgt

$$|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle = P_{12} |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle = -|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle = 0$$

Energieentartete Orbitale werden zunächst mit einzelnen Elektronen besetzt und anschließend mit jeweils einem zweiten Elektron mit entgegengesetztem Spin. Ein bestimmtes Orbital kann nicht mehr als zwei Elektronen enthalten.