Invarianz führt wieder auf einen erweiterten Satz vertauschbarer Operatoren.

11. Drehimpulsdarstellungen

hermitesche Matrix!

11.1 Lie-Algebra $[L_i, L_k] = \hbar i L_\ell \, \epsilon_{ik\ell}$

$[M_i, M_k] = i \, \epsilon_{ik\ell} M_\ell$

Strukturkonstante

Math. oben ✓ ohne i !

(i) gilt für 3×3 Matrizen: $M_i^{3\times3} = \frac{-1}{i} \epsilon_i = i \, \epsilon_i$

Matrix mit Elementen $\epsilon_{ik\ell}$

$+(\delta\vec{\varphi} \times \vec{x})_\ell = +\epsilon_{ik\ell} \, \delta\varphi_i \, x_k = +\delta\varphi_i \, \epsilon_{ik\ell} x_k$

$= -\delta\varphi_i \, \epsilon_{i\ell k} x_k$

Matrizenmultipl.

„große" Drehung:

$\vec{x}' = \exp\{\underbrace{\tfrac{i}{i}\vec{\varphi} \times}_{i\left(\frac{-1}{i}\varphi_i \, \epsilon_i\right)}\} \, \vec{x} = \exp\{i \varphi_i M_i\} \, \vec{x}$

↑ Matrix!

Bem. habe i herausgezogen, um herm. Op. zu bekommen!

(ii) gilt für Operatoren im Raum der Zustandsfunktionen ($\sim$ Hilbert-Raum)

... nicht mehr endlich dimensional!

bilde:

$M_\pm := M_1 \pm i M_2$

$[M_3, M_\pm] = \pm M_\pm \quad , \quad [\vec{M}^2, M_\pm] = 0$ (*)

nützlich bei der Berechnung der E.V. und E.W. von M^2, M_3

Ann. ex. E.V. $\psi_{\lambda,\mu}$ mit

$$\vec{M}^2 \psi_{\lambda,\mu} = \lambda \psi_{\lambda,\mu}$$

$$M_3 \psi_{\lambda,\mu} = \mu \psi_{\lambda,\mu}$$

(rechne nach $\vec{M}^2 = M_+ M_- + M_3^2 - M_3$ (**)
$= M_- M_+ + M_3^2 + M_3$ üb.)

(*) p.72

$$\vec{M}^2 (M_\pm \psi_{\lambda,\mu}) = M_\pm \vec{M}^2 \psi_{\lambda,\mu} = \lambda M_\pm \psi_{\lambda,\mu}$$

$$M_3 (M_\pm \psi_{\lambda,\mu}) = M_\pm M_3 \psi_{\lambda,\mu} \pm M_\pm \psi_{\lambda,\mu}$$

$$= (\mu \pm 1) M_\pm \psi_{\lambda,\mu}$$

nun $\lambda \geq \mu^2$ da $(\psi, \vec{M}^2 \psi) = (\psi, M_3^2 \psi)$ + pos.

d.h. (wieder!) $M_\pm$-Reihe muss abbrechen

- $M_+ \psi_{\lambda,l} = 0$ mit $M_3 \psi_{\lambda,l} = l \psi_{\lambda,l}$

(**) s.o. $\vec{M}^2 \psi_{\lambda,l} = (M_3^2 + M_3) \psi_{\lambda,l} = l(l+1) \psi_{\lambda,l}$

d.h. $\lambda = l(l+1)$

- $M_- \psi_{\lambda,l'} = 0$

$\vec{M}^2 \psi_{\lambda,l'} = (M_3^2 - M_3) \psi_{\lambda,l'} = l'(l'-1) \psi_{\lambda,l'}$

d.h. $\lambda = l'(l'-1)$

wobei l', l um ganze Zahlen differieren:

$l(l+1) = l'(l'-1) \rightarrow l' = -l$, dann $l - l' = 2l$ ganz

"Darstellungen" (Moduln) durch l charakterisiert, wobei $2l$ ganz

$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2} \ldots$ (oft hier $l \to j$)

Den infin. Drehungen sind Matrizen $(2l+1)(2l+1)$ zugeordnet (hermitesch). Es handelt sich um irreduzible Darstellungen, der Darstellungsraum kann nicht weiter eingeschränkt werden, ist völlig durch Drehungen verbunden.

speziell $l = 1$: 3×3 Matrizen: gibt die üblichen Drehungen in 3-Dim. (sphärische Basis)

11.2 Kugelkoordinaten: (für Drehungen natürlich)

$$x_1 = r \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$x_2 = r \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$x_3 = r \cos\vartheta$$

orthogon. krummlinige Koordinaten

$$\vec{e}_r = \underbrace{\underbrace{b_r^{-1}}_{1} \frac{\partial \vec{r}}{\partial r}}_{= (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta) = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}} , \quad \vec{e}_\vartheta = \underbrace{b_\vartheta^{-1}}_{\frac{1}{r}} \overbrace{\frac{\partial \vec{r}}{\partial \vartheta}}^{(\cos\vartheta\cos\varphi, \cos\vartheta\sin\varphi, -\sin\vartheta)} , \quad \vec{e}_\varphi = \underbrace{b_\varphi^{-1}}_{\frac{1}{r\sin\vartheta}} \overbrace{\frac{\partial \vec{r}}{\partial \varphi}}^{(-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)}$$

$$\vec{\nabla} \rightarrow \left(\vec{e}_r \cdot \vec{\nabla}, \vec{e}_\vartheta \cdot \vec{\nabla}, \vec{e}_\varphi \cdot \vec{\nabla}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta}, \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$$

$$\vec{M} = \frac{1}{i}\vec{r} \times \vec{\nabla} = \frac{1}{i} r \left(\vec{e}_r \times \vec{\nabla}\right) = \frac{1}{i} r \left(\vec{e}_\varphi \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$$

(75

$$= \frac{1}{i} \left\{ \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \begin{pmatrix} \cot\vartheta\cos\varphi \\ \cot\vartheta\sin\varphi \\ -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\}$$

$$M_\pm = M_1 \pm i M_2 = \frac{1}{i} e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\vartheta} + i \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$M_3 = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\vec{M}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) - \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

- wirken (wie erwartet) nur auf Winkel ϑ, φ

$$M_3 f(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} f(\vartheta,\varphi) = \mu f(\vartheta,\varphi)$$

$$\rightarrow f(\vartheta,\varphi) = \frac{e^{i\mu\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(\vartheta)$$

soll eindeutige Funktion sein $\rightarrow$ μ ganz

- $f(\vartheta,\varphi)$: Kugelflächenfunktionen

$$\vec{M}^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$M_3 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = m Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad m = -l, \dots +l$$

Normierung $\quad (M_+ \psi_{l(l+1),m}, M_+ \psi_{l(l+1),m})$

$$= (\psi, M_- M_+ \psi) = (\psi, (\vec{M}^2 - M_3^2 - M_3)\psi)$$

$$= (\psi,\psi) \big(\underbrace{l(l+1) - m^2 - m}_{(l+m+1)(l-m)} \big)$$

Phasenkonvention

$L_+ \psi_{l,m} = N_{lm} \psi_{l,m+1}$

N_{lm} positiv

(76

$$M_\pm Y_{\ell,m} = \{(\ell \pm m+1)(\ell \mp m)\}^{1/2} Y_{\ell,m\pm 1}$$

$$\int \underset{d\varphi\, d\cos\vartheta}{\underset{\shortparallel}{d\Omega}}\ Y^*_{\ell m}(\vartheta,\varphi)\, Y_{\ell' m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{\ell,\ell'}\,\delta_{m,m'}$$

Orthonormal!

Vollständigkeit

$$\sum_{\ell,m} Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)\, Y^*_{\ell m}(\vartheta',\varphi') = \text{"}\delta_2(\Omega)\text{"}$$
$$= \delta(\varphi-\varphi')\,\delta(\cos\vartheta-\cos\vartheta')$$

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{\ell\ell} = \ell\, Y_{\ell\ell} \quad \sim \quad Y_{\ell\ell} = f(\vartheta)\, e^{i\ell\varphi}$$

$$e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_{\ell\ell} = 0$$

$$\sim \frac{df}{d\vartheta} - \ell \underbrace{\cot\vartheta}_{\frac{d\sin\vartheta}{d\vartheta}/\sin\vartheta} f = 0 \quad ; \quad \ln f = \ell \ln\sin\vartheta + \text{const.}$$

$$f = c\,(\sin\vartheta)^\ell$$

... dann Absteigen.

oder $Y_{\ell 0}$:
$$\vec{M}^2 Y_{\ell 0} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) Y_{\ell 0}$$
$$= \ell(\ell+1)\, Y_{\ell 0} \quad Y_{\ell 0} \sim P_\ell(\cos\vartheta)$$

Diff. Gl. für Legendre-Polynom

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\left(\frac{d}{dz}\right)^\ell (z^2-1)^\ell \; ; \quad \int_{-1}^{+1} dz\, P_{\ell'}(z)\, P_\ell(z) = \frac{2\delta_{\ell\ell'}}{2\ell+1}$$

Rem.

anderer Zugang: betrachte homogene Polynome vom Grade l : $x_1^{m_1} \, x_2^{m_2} \, x_3^{m_3}$

mit $m_1 + m_2 + m_3 = l$

führe sphärische Koordinaten ein

$$x_\pm = (x_1 \pm i x_2)/\sqrt{2} = r\sin\vartheta \frac{(\cos\varphi \pm i\sin\varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{r\, e^{\pm i\varphi}}{\sqrt{2}} \sin\vartheta$$

$$x_3 = x_3 = r\cos\vartheta$$

dann $r^l Y_{lm} = r^l \, \text{Norm.} \underbrace{P_l^m}_{\text{beigeordnete Legendre funktionen}} e^{im\varphi}$

Beispiele. (→ Computer-Ausdruck ?!)

$$Y_{00} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \; ; \quad Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\vartheta$$

s-Orbital

p-Orbitale

$$\underbrace{Y_{1\pm1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} e^{\pm i\varphi} \sin\vartheta \; \ldots}_{\text{sind Vektor!}}$$

$Y_{2,0}, Y_{2\pm1}, Y_{2\pm2} = \ldots$ d-Orbitale ..Tensoren..

$r\,Y_{10} = N\underbrace{r\cos\vartheta}_{x_3}$, $r\,Y_{1\pm1} = N r \sin\vartheta \, e^{\pm i\varphi}$ ... !

sind orthonormal..

Verhalten unter Spiegelungen : $x_i \to -x_i$

$$Y_{lm} \to (-1)^l \, Y_{lm}$$

11.3 Halbzahlige Darstellungen, Spin

speziell $l = \boxed{s = 1/2}$ „Spin" (allgemeiner: (Gesamt) Drehimpuls oft als j bezeichnet)

$s = 1/2$, $m_s = \pm 1/2$ ← „Spinoren"

$\vec S^2 |\uparrow\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|\uparrow\rangle$, $S_3|\uparrow\rangle = \hbar\frac{1}{2}|\uparrow\rangle$

$\vec S^2 |\downarrow\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|\downarrow\rangle$, $S_3|\downarrow\rangle = -\hbar\frac{1}{2}|\downarrow\rangle$

$\underbrace{(\uparrow),\quad(\downarrow)}$

↓ später ausführlicher!

$\binom{1}{0}, \binom{0}{1}$ in Basis — abstrakte Vektoren $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ bzw $|+\rangle, |-\rangle$

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

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

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

↑ Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$[\sigma_i, \sigma_k] = 2i\sigma_l\epsilon_{ikl}, \quad \det\sigma_i = -1$$

$$\left.\begin{aligned}\sigma_i\sigma_k &= \delta_{ik}\mathbb{1} + i\epsilon_{ikl}\sigma_l\\ (\vec\sigma\cdot\vec a)(\vec\sigma\cdot\vec b) &= \vec a\cdot\vec b\,\mathbb{1} + \vec\sigma\cdot(\vec a\times\vec b)\end{aligned}\right\}\quad (*)$$

„Wellenfunktion" für das Elektron (hat Spin 1/2! ...)

Stern-Gerlach-Exp.

$$\psi_+(\vec x,t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \psi_-(\vec x,t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

(Pauli) „χ_+" „χ_-"

Schrödinger-Gl. (siehe nächstes Kapitel!) enthält ein H mit zusätzlicher 2×2 Struktur!

<u>Drehung</u> von Spinoren (erinner: Hintereinanderanf. von infin. Drehungen)

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{S}\cdot\vec{\varphi}}\ \chi = e^{i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{2}}\ \chi$$

$$e^{i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{2}} = \underline{\mathbb{1}} + i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{2} + \underline{\frac{\left(i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{2}\right)^2}{2!}} + \frac{\left(i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{2}\right)^3}{3!} + \dots$$

$$= \left(\cos\frac{\varphi}{2}\right)\mathbb{1} + i\left(\sin\varphi/_2\right)\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}}{\varphi} \qquad \varphi = |\vec{\varphi}|$$

Benutze (*)
vorige Seite

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi})^2 = \varphi^2 \dots$$

Drehung um 2π gibt $-\mathbb{1}$!

deshalb keine Realisierung durch Kugelfunktionen!

$$\vec{\varphi} = \varphi\,\vec{e}_3 : \qquad \begin{pmatrix} \cos\varphi/_2 + i\sin\varphi/_2 & 0 \\ 0 & \cos\varphi/_2 - i\sin\varphi/_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/_2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/_2} \end{pmatrix}$$

Drehungen um 2π sollten keiner Drehung entsprechen ("1")

11.4 bei halbzahligem Spin : $\longrightarrow -1$!

$\rightsquigarrow$ Begriff der $\boxed{\text{Überlagerungsgruppe}}$:

bisher sprachen wir von Erzeugenden $\Rightarrow$ Lie Algebra

Bei Darstellungen der Überlagerungsgruppe: Eindeutigkeit der Matrizen auch für endliche Gruppenelemente

bei orthogonalen Transf. "SO(3)"

$$\vec{x}' = \underset{3\times 3}{O}\,\vec{x}$$

betrachte $\vec{\sigma}\cdot\vec{x}$: $x_i = \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,\sigma_i\,\vec{\sigma}\vec{x}$ $\quad \vec{\sigma}\vec{x} = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - i x_2 \\ x_1 + i x_2 & -x_3 \end{pmatrix}$

$$\boxed{\det \vec{\sigma}\cdot\vec{x} = -\vec{x}^2}$$

Nehme unitäre 2×2 Matrizen U mit $\det U = 1$ (sonst irrel. Parameter)

$$U^+\,\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\,U = \vec{\sigma}\cdot\vec{x}' \quad \text{gibt orthogon. Transf. von } \vec{x}:$$

(i) $\det(U^+\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\,U) = \det U^+ \det\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\,\det U = \det\vec{\sigma}\vec{x}$

(ii) $(U^+\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\,U)^+ = U^+\,\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\,U = (\vec{\sigma}\cdot\vec{x}')^+ \overset{!}{=} \vec{\sigma}\cdot\vec{x}'$

$\rightsquigarrow \vec{x}'$ reell !

"SU(2)" : "special unitary transf." $\quad U = e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{\varphi}/2}$

nun sind 2×2 Matrizen nicht eindeutige Darstellung dieser SU(2), also auch die übrigen bisher behandelten ganz- und halbzahligen Darstellungsmatrizen