Vorlesung 1

Die allgemeine Theorie des Drehimpulses

Eine Drehung des Quantensystems beschreibt man mit Hilfe des Drehimpulsoperators. Um den Drehimpulsoperator zu konstruieren, betrachten wir einen Vektor $|\Psi\rangle$ im Hilbertraum, der den Zustand unseres Quantensystem beschreibt. Die Wellenfunktion des Systems ist

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\Psi\rangle. \tag{1}$$

Nach der Drehung des Systems ist der neue Zustandsvektor

$$|\Psi_R\rangle = \hat{R}|\Psi\rangle, \tag{2}$$

wobei $\hat{R}$ den Drehoperator bezeichnet. Die Wellenfunktion nach der Drehung ist

$$\Psi_R(\vec{r}) = \langle r|\Psi_R\rangle = \langle r|\hat{R}|\Psi\rangle = \langle \hat{R}^{-1}\vec{r}|\Psi_R\rangle = \Psi(\hat{R}^{-1}\vec{r}). \tag{3}$$

Dabei haben wir benutzt, dass $\hat{R}$ ein unitärer Operator ist

$$\hat{R}^\dagger \hat{R} = 1. \tag{4}$$

Andererseits können wir für eine infinitesimale Drehung

$$\Psi_R(\vec{r}) = \left[1 - i(\vec{J}\cdot\vec{n})\frac{\delta\alpha}{\hbar}\right]\Psi(\vec{r}), \tag{5}$$

schreiben, wobei die drei Operatoren $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ die Generatoren der Drehung sind, $\vec{n}$ ein Vektor, welcher die Richtung der Drehachse beschreibt ($\vec{n}^2 = 1$), und $\delta\alpha \ll 1$ der Drehwinkel um diese Achse. Wir vergleichen Gl. (3) und Gl. (5) und erhalten

$$\Psi(\hat{R}^{-1}\vec{r}) = \left[1 - i\frac{\delta\alpha}{\hbar}(\vec{n}\cdot\vec{J})\right]\Psi(\vec{r}). \tag{6}$$

Bei einer Drehung um die $\vec{n}$-Achse um den Winkel α ändert sich der Ortsvektor zu

$$\hat{R}\vec{r} = \vec{r} + \delta\alpha[\vec{n}\times\vec{r}]. \tag{7}$$

Die inverse Drehung ist die Drehung um den Winkel $-\delta\alpha$, d.h.

$$\hat{R}^{-1}\vec{r} = \vec{r} - \delta\alpha\,[\vec{n}\times\vec{r}]\,. \tag{8}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}\Psi_R(\vec{r}) &= \Psi(\hat{R}^{-1}\vec{r}) = \Psi(\vec{r} - \delta\alpha[\vec{n}\times\vec{r}]) \approx \Psi(\vec{r}) - \delta\alpha\vec{n}\cdot[\vec{r}\times\vec{\partial}]\Psi(\vec{r})\\ &= \left(1 - i\frac{\delta\alpha}{\hbar}\vec{n}\cdot[\vec{r}\times\vec{p}]\right)\Psi(\vec{r}) = \left(1 - i\frac{\delta\alpha}{\hbar}\vec{n}\cdot\vec{L}\right)\Psi(\vec{r}),\end{aligned} \tag{9}$$

wobei $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$ der Bahndrehimpuls ist. Wir vergleichen Gl. (6) und Gl. (9) und stellen fest, dass

$$\vec{J} = \vec{L} \tag{10}$$

ist. D.h. $\vec{L}$ ist der Generator der räumlichen Drehungen.

Eine endliche Drehung bekommen wir als Grenzwert von vielen infinitesimalen Drehungen

$$\hat{R}(\alpha, \vec{n}) = \lim_{N\to\infty} \left(1 - i\frac{\alpha}{N\hbar}\, \vec{n} \cdot \vec{J}\right)^N = e^{-i\vec{n}\cdot\vec{J}/\hbar}. \tag{11}$$

Die Gleichung $\vec{J} = \vec{L}$ stimmt nicht immer. Der Grund dafür sind mögliche "interne" Drehungen eines Quantensystems. Als Beispiel stellen wir uns vor, dass die Wellenfunktion unseres Systems ein Vektor $\vec{V}$ sei, der unabhängig vom Ortsvektor $\vec{r}$ ist. Falls wir den Quantenzustand rotieren, ändert sich $\vec{V}$ wie

$$\hat{R}\vec{V} = \vec{V}' = \vec{V} + \delta\alpha \left[\vec{n} \times \vec{V}\right]. \tag{12}$$

D.h., dass

$$V_i' = V_i + \delta\alpha\, \epsilon_{ijk} n_j V_k = V_i - i\frac{\delta\alpha}{\hbar} \left(\vec{n} \cdot \vec{S}\right)_{ik} V_k \tag{13}$$

gilt, wobei wir

$$(S_i)_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk} \tag{14}$$

einführen. Explizit bedeutet dies

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Die Generatoren der internen Drehungen nennen wir Spinoperatoren.

Falls die Wellenfunktion $\vec{V}$ auch vom Ortsvektor abhängt, können wir den Gesamteffekt der Drehung durch den Gesamtdrehimpulsoperator

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{16}$$

beschreiben. Es sollte klar sein, dass $\vec{L}$ und $\vec{S}$ immer miteinander kommutieren und dass die Vertauschungsrelationen für die Komponenten des gesamten Drehimpulsoperators durch

$$[J_i, J_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} J_k \tag{17}$$

gegeben sind.

Wir wollen jetzt die Folgen der Gl. (17) studieren. Als erste Schritt führen wir einen weiteren Operator

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{18}$$

ein. Der Operator $\vec{J}^2$ kommutiert mit $\vec{J}$. In der Tat ergibt sich

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_i] &= [J_k J_k, J_i] = J_k[J_k, J_i] + [J_k, J_i]J_k \\ &= i\hbar(\epsilon_{kim} J_k J_m + \epsilon_{kim} J_m J_k) = i\hbar(\epsilon_{kim} J_k J_m - \epsilon_{mik} J_m J_k) = 0. \end{aligned} \tag{19}$$

Weil $\vec{J}^2$ mit allen $\vec{J}$-Komponenten kommutiert, kann man $\vec{J}^2$ und z.B. J_z simultan diagonalisieren. Wir schreiben

$$\vec{J}^2|j,m\rangle = \hbar^2\alpha_j\;|j,m\rangle, \quad J_z|j,m\rangle = \hbar m\;|j,m\rangle. \tag{20}$$

Die Bedeutung dieser Quantenzahlen ist: $\sqrt{\alpha_j}$ – die Länge des Drehimpulses und m – die Projektion des Drehimpulses auf die z-Achse. Im Folgenden werden wir, um die Gleichungen übersichtlich zu halten, Vorkommen von $\hbar$ unterdrücken und nicht explizit ausschreiben. Im Allgemeinen lassen sich die Stellen, wo $\hbar$ vorkommen muss, auf Basis von Gl. (17) und Gl. (20) mit Hilfe einer Dimensionsanalyse rekonstruieren.

Es ist wichtig dass die Projektion des Drehimpulses auf die z-Achse nicht beliebig groß sein kann, weil die Länge des Drehimpulses $\sqrt{\alpha_s}$ fixiert ist. Wir bezeichnen den maximalen Wert von m als j, sodass

$$-j \leq m \leq j. \tag{21}$$

Wir müssen jetzt den Zusammenhang zwischen α_j und j finden.

Nun führen wir zwei zusätzliche Operatoren $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ ein und berechnen die Vertauschungsrelationen

$$[J_+, J_+] = [J_-, J_-] = 0, \quad [J_+, J_-] = 2J_z, \quad [J_\pm, J_z] = \mp J_\pm. \tag{22}$$

Eine weitere nützliche Formel ist

$$\vec{J}^2 = J_+J_- + J_z^2 - J_z = J_-J_+ + J_z^2 + J_z. \tag{23}$$

Wir nehmen nun einen Zustandsvektor $|j,m\rangle$ und wenden den Operator J_+ auf ihn an. Dann ist

$$J_zJ_+|j,m\rangle = ([J_z, J_+] + J_+J_z)\,|j,m\rangle = (J_+ + mJ_+)|j,m\rangle = (m+1)J_+|j,m\rangle. \tag{24}$$

Das bedeutet, dass $J_+|j,m\rangle$ ein Eigenzustand von J_z zum Eigenwert $(m+1)$ ist. Dementsprechend schreiben wir

$$J_+|j,m\rangle = \mu_+(j,m)|j,m+1\rangle. \tag{25}$$

Den Vorfaktor $\mu_+(j,m)$ müssen wir noch bestimmen. Wir benutzen

$$\langle j,m|\vec{J}^2|j,m\rangle = \alpha_j = \langle j,m|J_-J_+ + J_z^2 + J_z|j,m\rangle = \mu_+^2(j,m) + m^2 + m, \tag{26}$$

sodass

$$\mu_+(j,m) = \sqrt{\alpha_j - m(m+1)}. \tag{27}$$

Weil nur $m \leq j$ erlaubt sind, muss es so sein, dass

$$J_+|j,j\rangle = \mu_+(j,j)|j,j+1\rangle = 0, \;\Rightarrow\; \mu_+(j,j) = 0. \tag{28}$$

Es folgt

$$\alpha_j = j(j+1), \quad \mu_+(j,m) = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}. \tag{29}$$

Wir können das Gleiche mit dem J_--Operator machen; wir finden

$$J_-|j,m\rangle = \mu_-(j,m)|j,m-1\rangle, \quad \mu_-(j,m) = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \tag{30}$$

Wir haben jetzt ein Multiplett des Operators $\vec{J}^2$ konstruiert. Ein Multiplett charakterisieren wir mit einer Quantenzahl j und einer Menge von Quantenzuständen $|j,m\rangle$ mit $-j \leq m \leq j$. Die Anzahl der Zustände ist $2j+1$; diese Zahl muss natürlich eine ganze Zahl sein. Es folgt, dass j entweder ganz- oder halbzahlig sein muss, d.h.

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2... \tag{31}$$

Es ist nützlich, hier einmal verschiedene Matrixelemente zusammenzufassen

$$\begin{aligned}
&\langle j_1, m_1|j_2, m_2\rangle = \delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 m_2}, \quad \langle j_1, m_1|J_z|j_2, m_2\rangle = m_2\delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 m_2}, \\
&\langle j_1, m_1|J_x|j_2, m_2\rangle = \langle j_1, m_1|\frac{J_+ + J_-}{2}|j_2, m_2\rangle \\
&= \frac{1}{2}\delta_{j_1 j_2}\left[\mu_+(j_2, m_2)\delta_{m,m_2+1} + \mu_-(j_2, m_2)\delta_{m_1,m_2-1}\right], \\
&\langle j_1, m_1|J_y|j_2, m_2\rangle = \langle j_1, m_1|\frac{J_+ - J_-}{2i}|j_2, m_2\rangle \\
&= \frac{1}{2i}\delta_{j_1 j_2}\left[\mu_+(j_2, m_2)\delta_{m_1,m_2+1} - \mu_-(j_2, m_2)\delta_{m_1,m_2-1}\right].
\end{aligned} \tag{32}$$

Die Multipletts, die $j = 0, 1, 2$ usw. entsprechen sind bekannt – die Quantenzustände $|j,m\rangle$ kann man mit Kugelflächenfunktionen $Y_{jm}(\theta, \phi)$ beschreiben. Wir wollen jetzt die Multipletts mit halbzahligen Werten von j diskutieren. Der einfachste Fall ist $j = 1/2$.

Für $j = 1/2$ gibt zwei Zustände mit $m = \pm 1/2$. Der allgemeinste Quantenzustand mit $j = 1/2$ ist dann

$$|\Psi_j\rangle = \alpha_+|1/2, 1/2\rangle + \alpha_-|1/2, -1/2\rangle. \tag{33}$$

Alle möglichen Zustände beschreiben wir mit zwei Zahlen $\alpha_\pm$; diese zwei Zahlen können wir als Vektor mit zwei (komplexen) Komponenten darstellen

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Diese Vektoren nennt man Spinoren. Ein Quantenzustand muss normiert sein, d.h.

$$1 = \langle\Psi|\Psi\rangle = |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2, \tag{35}$$

sodass Spinoren auch normiert sein müssen.

Ganz allgemein gilt

$$|\Psi\rangle = \sum_m c_m|j,m\rangle. \tag{36}$$

Dann ergibt die Anwendung des Drehimpulsoperators

$$\vec{J}_k|\Psi\rangle = \sum_m c_m \vec{J}_k|j,m\rangle = \sum_m c'_m|j,m\rangle, \tag{37}$$

sodass

$$c'_{m'} = \sum_m \langle j,m'|\vec{J}_k|j,m\rangle\; c_m \tag{38}$$

Wir bezeichnen $\langle j,m'|\vec{J}_k|j,m\rangle = \mathcal{J}^k_{m'm}$ und schreiben die obige Gleichung um als

$$\vec{c}' = \mathcal{J}^k \vec{c}. \tag{39}$$

Diese Diskussion zeigt, wie wir die Matrixdarstellung der Drehungs-Generatoren erhalten können. Wir berechnen die entsprechenden Matrixelemente für $j = 1/2$ mit Hilfe von Gl. (32) und finden

$$J_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{40}$$

Wir schreiben

$$\vec{J} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}, \tag{41}$$

und bezeichnen die Matrizen $\vec{\sigma}$ als die Pauli-Matrizen.

Die Pauli-Matrizen erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \tag{42}$$

die aus den allgemeinen Vertauschungsrelationen für die $\vec{J}$-Komponenten folgen, und darüber hinaus eine weitere Relation:

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\hat{1}. \tag{43}$$

Wir können die explizite Form der Matrizen benutzen, um zu überprüfen, dass

$$\mathrm{Tr}(\sigma_i) = 0, \quad \mathrm{Tr}(\sigma_i\sigma_j) = 2\delta_{ij} \tag{44}$$

gilt. Das bedeutet, dass alle 2×2 Matrizen als

$$\hat{Q} = x\hat{1} + \vec{y}\cdot\vec{\sigma} \tag{45}$$

dargestellt werden können, wobei

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{Q}\right] = x, \quad \mathrm{Tr}\left[\hat{Q}\sigma_i\right] = y_i. \tag{46}$$

Den Drehoperator um die Achse $\vec{n}$ um den Winkel α im $j = 1/2$ Hilbertraum können wir als

$$U_{\vec{n},\alpha} = e^{-i\alpha/2\;\vec{\sigma}\cdot\vec{n}} \tag{47}$$

schreiben, wobei sich dieser Ausdruck noch vereinfachen lässt. Die wichtigste Beobachtung ist

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = \sigma_i\sigma_j n_i n_j = \frac{1}{2}\left(\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i\right)\ n_i n_j = \hat{1}\delta_{ij}n_i n_j = \hat{1}. \tag{48}$$

D.h.

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^{2m} = \hat{1}, \quad (\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^{2m+1} = \vec{\sigma}\cdot\vec{n}, \quad m = 0,1,2,3... \tag{49}$$

Wir erhalten dann

$$\hat{U} = \sum_{m=0}^{\infty}(-i)^m\frac{\alpha^m}{2^m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^m = \sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2m} + \vec{\sigma}\cdot\vec{n}\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2m+1} \tag{50}$$

Diese zwei Summen sind bekannt

$$\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2m} = \cos\frac{\alpha}{2}, \qquad \sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{2}\right)^{2m+1} = -i\sin\frac{\alpha}{2}. \tag{51}$$

Es folgt

$$U_{\vec{n},\alpha} = \cos\frac{\alpha}{2}\ \hat{1} - i\sin\frac{\alpha}{2}\ \vec{\sigma}\cdot\vec{n}. \tag{52}$$

Als letztes Thema konstruieren wir die Spinoren, die eine bestimmte Projektion des Spins auf eine gegebene Achse $\vec{n}$ haben. D.h. wir suchen nach zwei Spinoren $\chi_{\vec{n}}^{\pm}$ welche die folgende Gleichung erfüllen

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\,\chi_{\vec{n}}^{\pm} = \pm\chi_{\vec{n}}^{\pm}. \tag{53}$$

Wir parametrisieren $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$, sodass

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{n} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{54}$$

Damit schreiben wir dann z.B.

$$\chi_{\vec{n}}^{\pm} = \begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm \end{pmatrix}, \tag{55}$$

berechnen $\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\chi_{\vec{n}}^{\pm} = \pm\chi_{\vec{n}}^{\pm}$, lösen nach $a_\pm$ und $b_\pm$ und verwenden die Normierungsbedingung. So erhalten dann

$$\chi_{\vec{n}}^{+} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \chi_{\vec{n}}^{-} = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} \\ -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (\chi_{\vec{n}}^{\pm})^{+}\cdot\chi_{\vec{n}}^{\mp} = 0. \tag{56}$$