

# Gruppentheorie und Quantenmechanik

G.Roepstorff

Ausarbeitung einer an der RWTH Aachen  
im Sommersemester 1988 gehaltenen  
Vorlesung

10. Januar 2002

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Grundzüge der Quantenmechanik</b>	<b>7</b>
1.1	Die Schrödinger-Gleichung für ein spinloses Teilchen . . .	7
1.2	Der Hilbertraum der Quantenmechanik . . . . .	8
1.3	Das Problem mehrerer Elektronen . . . . .	11
1.4	Der Spin der Elektronen . . . . .	13
1.5	Symmetrien und Erhaltungssätze . . . . .	16
1.5.1	Translationen . . . . .	16
1.5.2	Translationen im homogenen Magnetfeld . . . . .	18
1.5.3	Infinitesimale Translationen . . . . .	19
1.5.4	Rotationen . . . . .	21
1.5.5	Infinitesimale Rotationen . . . . .	22
1.5.6	Parität und Zeitumkehr . . . . .	25
1.5.7	Symmetrien im engeren Sinn . . . . .	29
1.5.8	Symmetrien im weiteren Sinne . . . . .	32
<b>2</b>	<b>Darstellungen von Gruppen</b>	<b>35</b>
2.1	Homomorphismen . . . . .	35
2.2	Lineare Darstellungen . . . . .	39
2.3	Unitäre Darstellungen . . . . .	43
2.4	Reduzibilität . . . . .	45
2.5	Zwei Sätze von Schur . . . . .	50
2.6	Orthogonalitätsrelationen . . . . .	56
2.7	Der Charakter einer Darstellung . . . . .	58
<b>3</b>	<b>Die Theorie der SU(2)</b>	<b>61</b>
3.1	Wie dreht man den Spin? . . . . .	61
3.2	Parametrisierung der SU(2) . . . . .	66

3.3	Die invariante Integration . . . . .	69
3.4	Konstruktion irreduzibler Darstellungen . . . . .	72
3.5	Eine Realisierung durch Bose-Operatoren . . . . .	79
3.6	Harmonische Polynome . . . . .	81
3.7	Multipole . . . . .	84
<b>4</b>	<b>Kopplung von Drehimpulsen</b>	<b>89</b>
4.1	Motivation und Problemstellung . . . . .	89
4.2	Die Clebsch-Gordan-Reihen der $SU(2)$ . . . . .	95
4.3	Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten . . . . .	98
4.4	Das Wigner-Eckart-Theorem . . . . .	103
4.5	Wirkungen des Pauli-Prinzips . . . . .	108
4.6	Die Elektronenkonfiguration . . . . .	113
<b>5</b>	<b>Spezielle Potentiale</b>	<b>119</b>
5.1	Das $1/r$ -Potential . . . . .	119
5.1.1	Bindungszustnde . . . . .	119
5.1.2	Der Lenz-Runge-Vektor . . . . .	121
5.1.3	Die $SO(4)$ -Symmetrie . . . . .	124
5.2	Das $r^2$ -Potential . . . . .	126
<b>6</b>	<b>Strahlungsübergänge</b>	<b>131</b>
6.1	Die Rayleigh-Entwicklung . . . . .	131
6.2	Die Wechselwirkung mit ebenen Wellen . . . . .	133
6.3	Übergangsströme . . . . .	137
6.4	Elektrische Dipolübergänge . . . . .	140
6.5	Spontane Emission . . . . .	141
6.6	Verbotene Übergänge . . . . .	144

## Einleitung

Im Jahre 1928 erschien die erste Ausgabe des Buches *Gruppentheorie und Quantenmechanik* von H.Weyl, einem Göttinger Mathematiker. Nach Vorlesungen, die er über den gleichen Gegenstand in Princeton 1928-29 hielt, erschien 1930 eine überarbeitete zweite Auflage, der 1931 die englische Übersetzung folgte. Ebenfalls im Jahre 1931 veröffentlichte E.P.Wigner das Buch *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Theorie der Atomspektren*. Beide Bücher blieben Standardwerke auf diesem Gebiet für Generationen von Studierenden. In ihnen wurde zum erstenmal die Bedeutung der Darstellungstheorie von Gruppen für die Quantenmechanik dem Physiker sichtbar vor Augen geführt. Der Begriff der Symmetrie gehörte von da an zu den Grundlagen des physikalischen Weltbildes. Im einzelnen setzte sich folgende Erkenntnis durch:

- Jedem quantenmechanischen System liegt eine Symmetriegruppe zugrunde, die bereits durch ihre bloße Existenz das Verhalten des Systems weitgehend festlegt. Das Auffinden dieser Gruppe ist der erste Schritt bei der theoretischen Analyse eines vorgelegten Modells.
- Es ist typisch für die Quantenmechanik, daß, abgesehen von einigen Ausnahmen, alle Gruppen als konkrete Transformationsgruppen linearer Räume realisiert sind. Man spricht in diesem Zusammenhang von *unitären Darstellungen* der abstrakten Gruppen. Ausnahmen finden wir bei den diskreten Gruppen. Hier ist es möglich, daß eine Symmetrietransformation auch einmal *anti-unitär* dargestellt wird, wie dies zum Beispiel bei der Zeitumkehr der Fall ist.

- Eine Transformationsgruppe ist genau dann eine Symmetriegruppe, wenn der Hamilton-Operator des Systems mit allen unitären Operatoren der Darstellung kommutiert.
- Es besteht ein enger Zusammenhang zwischen Symmetriegruppen und Erhaltungsgrößen. Für eine kontinuierliche Gruppe bedeutet dies den Übergang zu der Lie-Algebra dieser Gruppe.
- Gelingt es, die einem Problem innewohnenden Symmetrien zu erkennen, so kann eine den Symmetrien angepaßte mathematische Behandlung zu entscheidenden Vereinfachungen führen.
- Die statistische Interpretation der Quantenmechanik (i.e. eine räumlich konstante Phase der Wellenfunktion ist nicht meßbar) macht es notwendig, den allgemeineren Begriff der *projektiven Darstellung* einer Symmetriegruppe einzuführen. Dieser Begriff führt zwangsläufig auf mathematische Konstruktionen an den Gruppen selbst, wie etwa die Bildung von *zentralen Erweiterungen* und *Überlagerungen* einer Symmetriegruppe. Am bekanntesten ist in diesem Zusammenhang der Übergang von der orthogonalen Gruppe  $SO(3)$  zu der unitären Gruppe  $SU(2)$ , mit deren Hilfe man erst in der Lage ist, das Auftreten halbzahliger Spins in der Natur zu verstehen.
- Manchmal trifft die Natur eine Auswahl unter der Vielzahl der möglichen Darstellungen einer Gruppe, wie etwa bei den n-Teilchensystemen ununterscheidbarer Teilchen: Die Dichotomie *Bose-Fermi* ist eine solche Einschränkung in bezug auf die Permutationsgruppe.

In viel radikalerer Weise, als es in der Quantenmechanik möglich ist, wurde in der modernen Physik der Elementarteilchen der Symmetriebegriff als Leitidee an den Anfang gestellt. Das heute gültige Standardmodell, mit dem wir die fundamentalen Wechselwirkungen beschreiben, beruht entscheidend auf dem Konzept der *lokalen Eichsymmetrie*. Hierbei bleibt jedoch ungeklärt, wo der tiefere Grund für das Auftreten bestimmter Eichgruppen zu suchen ist. Es gibt Anzeichen dafür, daß der Grund in einer verborgenen geometrischen Struktur unserer Welt liegt,

einer Struktur, die sich erst bei extrem kleinen Abständen zu erkennen gibt.

Diese Vorlesung hat sich zum Ziel gesetzt, die Strukturen der Quantenmechanik und der in ihrem Rahmen formulierten Modelle aufzuzeigen. Dabei werden Anleihen bei der bestehenden Mathematik gemacht. Es wird nicht versucht, unter Umgehung der etablierten mathematischen Begriffsbildungen, eigene, angeblich "physikerfreundliche" Bezeichnungen und Benennungen an ihre Stelle zu setzen. Dies wäre schlechter Stil und sollte in einer von Verantwortung getragenen Ausbildung der Studenten keinen Platz haben.

Die benutzte Mathematik wird allerdings auf ein Minimum begrenzt. Gruppentheorie sowie Darstellungstheorie der Gruppen stehen im Vordergrund. Nicht behandelt wird die Spektraltheorie von Hilbertraum-Operatoren, die Theorie der selbstadjungierter Erweiterungen von symmetrischen Operatoren und die Maßtheorie. Überhaupt wird mit unbeschränkten Operatoren sehr lässig umgegangen: die zugehörigen Definitionsbereiche werden nicht explizit genannt oder konstruiert. Bei allen Ableitungen werden die nötigen Differenzierbarkeits-Annahmen implizit vorausgesetzt. Der Gewissenhafte kann solche technischen Details leicht ergänzen; in dem vorliegenden Manuskript sind sie weggelassen, weil sie den Blick auf das Wesentliche verstellen, auf die *algebraische Struktur* der Quantenmechanik.



# Kapitel 1

## Grundzüge der Quantenmechanik

### 1.1 Die Schrödinger-Gleichung für ein spinloses Teilchen

Die einfachste Situation, auf die der Formalismus der Quantenmechanik Anwendung findet, ist die Bewegung eines Elektrons unter Vernachlässigung seines Spins. Bewegt sich das Elektron vermöge seiner elektrostatischen Wechselwirkung in einem Potential  $V(x)$ , so lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$\left[-\frac{1}{2m}\Delta + V(x)\right]\psi(x, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) \quad (1.1)$$

Die Maßeinheiten sind so gewählt, daß  $\hbar = 1$  gilt;  $m$  bezeichnet die Masse des Elektrons und  $\Delta$  den Laplace-Operator;  $x \in \mathbf{R}^3$  ist der Ortsvektor und  $t$  die Zeit.

Partielle Differentialgleichungen kommen in allen Bereichen der Physik vor. Jedoch unterscheidet sich die Schrödinger-Gleichung in einem wesentlichen Punkt von allen bekannten klassischen Gleichungen: Die Wellenfunktion  $\psi$  ist komplexwertig. Damit hängt zusammen, daß nach unserer heutigen Auffassung die Wellenfunktion selbst keine beobachtbare (d.h. meßbare) Größe darstellt, obwohl das Absolutquadrat  $|\psi|^2$  je-

denfalls im Prinzip der Beobachtung zugänglich ist<sup>1</sup>. Die Normierungsbedingung

$$\int d^3x |\psi(x, t)|^2 = 1 \quad (1.2)$$

übernimmt die Rolle einer Randwertbedingung im Unendlichen: Sie begrenzt das Wachstumsverhalten von  $\psi$  für große  $|x|$ . Nur durch Hinzunahme einer solchen Bedingung werden bestimmte Energieniveaus ausgezeichnet (etwa beim harmonischen Oszillator oder dem H-Atom). Bekanntlich folgt aus der Realität von  $V(x)$ , daß die Normierungsbedingung für  $\psi$  für alle Zeiten erfüllt ist, wenn sie nur für eine feste Zeit (etwa  $t = 0$ ) gültig ist.

Von den elektromagnetischen Wechselwirkungen, denen das Elektron unterworfen ist, haben wir bislang nur den elektrostatischen Fall betrachtet. In der allgemeinen Situation, wo das Elektron (Ladung  $-e$ ) mit einem *äußeren*<sup>2</sup> elektromagnetischem Feld  $F_{\mu\nu} = \partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu$  wechselwirkt und wir auch noch zulassen, daß das Viererpotential  $A_\mu = (A_0, -c\mathbf{A})$  zeitabhängig ist, müssen wir von der allgemeinen Schrödinger-Gleichung

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 - eA_0 \right] \psi = i \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (1.3)$$

ausgehen. Dies setzt allerdings voraus, daß wir alle relativistischen Effekte vernachlässigen dürfen.

## 1.2 Der Hilbertraum der Quantenmechanik

Die Normierungsbedingung für Wellenfunktionen (zu einer festen Zeit, sodaß wir den Zeitparameter nun unterdrücken können) führt zu dem

---

<sup>1</sup>Die genaue Analyse zeigt, daß es nur eine räumlich konstante, aber möglicherweise zeitlich variable Phase der Wellenfunktion ist, die sich der Beobachtung entzieht.

<sup>2</sup>Man spricht von einem äußeren Feld dann, wenn die Rückwirkung des Elektrons auf dieses Feld vernachlässigt wird: im allgemeinen baut eine bewegte Ladung ein eigenes el.magn. Feld auf, was wir hier außer acht lassen.

Begriff der Norm:

$$\|\phi\|^2 = \int d^3x |\phi(x)|^2 \quad (1.4)$$

Für die Gesamtheit der Funktionen  $\phi(x)$  mit  $\|\phi\| < \infty$  benutzen man das Symbol  $L^2(\mathbf{R}^3)$ . Es handelt sich hier, wie wir bereits wissen, um einen Hilbertraum mit dem Skalarprodukt<sup>3</sup>

$$(\phi_1, \phi_2) = \int d^3x \overline{\phi_1(x)} \phi_2(x) \quad (1.5)$$

Dies ist, strenggenommen, nicht der Raum der Zustände, wie man meinen könnte; vielmehr übernimmt diese Rolle der zugehörige projektive Raum<sup>4</sup>. Das liegt darin begründet, daß wir den Zustand  $\phi$  von dem Zustand  $c\phi$  nicht unterscheiden können, wobei  $c \neq 0$  aber im übrigen eine beliebige komplexe Zahl sein kann. Jeder Hilbertraum ist zuallererst ein Vektorraum: diese Struktur ergibt sich in unserem Fall aus dem Superpositionsprinzip für Wellenfunktionen. Wir werden daher auch von  $\phi$  als von einem *Vektor* des Hilbertraumes sprechen. Eine konkrete Wellenfunktion  $\phi$  (einen Vektor also) werden wir stets als einen *Repräsentanten* des Zustandes ansehen. Der eigentliche Sinn der Schrödinger-Gleichung ist, daß sie die zeitliche Entwicklung, also gewissermaßen den Pfad eines Zustandes beschreibt, d.h., indem wir  $\phi_t(x) = \psi(x, t)$  setzen, wird  $\phi_t \in L^2(\mathbf{R}^3)$  zum Repräsentanten des Zustandes zur Zeit  $t$ . Die Struktur der Schrödinger-Gleichung wird besser sichtbar, wenn wir schreiben

$$H\phi_t = i\dot{\phi}_t \quad (1.6)$$

mit der formalen Lösung  $\phi_t = e^{-itH}\phi_0$ . Hier heißt  $H$  der *Hamilton-Operator*. Seine konkrete Gestalt ist modellabhängig. In der einfachsten Situation haben wir

$$[H\phi](x) = \left( -\frac{1}{2m}\Delta + V(x) \right) \phi(x) \quad (1.7)$$

---

<sup>3</sup>In der Physik ist ein Skalarprodukt linear im zweiten, antilinear im ersten Argument.

<sup>4</sup>Selbst der projektive Raum reicht im Grunde nicht aus, um *alle* Zustände zu beschreiben. Er enthält nur die 'reinen' Zustände. Daneben existieren noch 'gemischte Gesamtheiten', die wir durch Dichteoperatoren  $\rho$  mit  $\rho > 0$  und  $\text{Spur}\rho = 1$  beschreiben.

und es ist leicht, anhand einer solchen konkreten Gestalt des Hamilton-Operators die Eigenschaft

$$(\phi_1, H\phi_2) = (H\phi_1, \phi_2),$$

gültig für alle  $\phi_1, \phi_2 \in L^2(\mathbf{R}^3)$  nachzuweisen<sup>5</sup>.

Einen Operator mit dieser Eigenschaft nennt man *selbstadjungiert*. Die Eigenschaft hat zur Folge, daß Erwartungswerte  $(\phi, H\phi)$  grundsätzlich reell sind und daß das Spektrum eines solchen Operators reell ist. Beides ist vom physikalischen Standpunkt notwendig, weil es gerade diese Größen sind, die gemessen werden können. Wie auch immer der Hamilton-Operator konstruiert sein mag, diese Forderung darf er auf keinen Fall verletzen:  $H$  muß selbstadjungiert sein<sup>6</sup>.

Wesentliche Größen in der Quantenmechanik werden durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben, z.B.

- der Impuls  $\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3)$  durch  $[P_k\phi](x) = \frac{1}{i}\nabla_k\phi(x)$
- der Ort  $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, Q_3)$  durch  $[Q_k\phi](x) = x_k\phi(x)$
- der Bahndrehimpuls  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  (Vektorprodukt)
- die kinetische Energie  $H_0$  durch  $[H_0\phi](x) = -\frac{1}{2m}\Delta\phi(x)$
- die potentielle Energie  $V$  durch  $(V\phi)(x) = V(x)\phi(x)$

Eine nicht ganz unproblematische Verallgemeinerung besagt, daß alle selbstadjungierten Operatoren auf dem Hilbertraum eines quantenmechanischen Systems meßbare Größen beschreiben. Wir wollen sie deshalb in der Folge als *Observablen* ansprechen, ganz gleich, ob wir nun zu jedem s.a.Operator die Meßvorschrift kennen oder nicht. Es ist wichtig

---

<sup>5</sup>Streng genommen, kann eine solche Eigenschaft, da  $H$  ein unbeschränkter Operator ist, nur für eine dichte Menge von Vektoren des Hilbertraumes richtig sein.

<sup>6</sup>Wie man weiß, ist diese Forderung identisch mit der Annahme, daß  $e^{-itH}$  für reelles  $t$  eine stark stetige unitäre Gruppe beschreibt. Man nennt  $e^{-itH}$  den *Evolutionsoperator*. Seine Unitarität bewirkt die zeitliche Konstanz von  $\|\phi_t\|$ , eine Eigenschaft, die unverzichtbar für die statistische Interpretation der Quantenmechanik ist. Die genannte Stetigkeit besagt, daß  $\|\phi_t - \phi_s\| \rightarrow 0$  für  $|t - s| \rightarrow 0$ : *natura non facit saltus*.

sich klar zu machen, daß alle *Meßwerte* durch geeignet gewählte Erwartungswerte  $(\phi, A\phi)$  mit  $\|\phi\| = 1$  ausdrückbar<sup>7</sup> sind. Sie bilden die Brücke zwischen dem mathematischen Formalismus der Quantenmechanik und dem Experiment. Spezielle Erwartungswerte erhalten wir, wenn  $A$  ein Projektor ist. Sie interpretieren wir als bedingte Wahrscheinlichkeiten. Konkret: Unter der Annahme, es liege der Zustand  $\phi$  vor, berechnet man die Wahrscheinlichkeit dafür, den Zustand  $\psi$  zu finden, als<sup>8</sup>

$$w(\psi|\phi) = (\phi, P_\psi\phi) = |(\psi, \phi)|^2 \quad (1.8)$$

Hier sind  $\psi$  und  $\phi$  normiert und  $P_\psi\phi = (\psi, \phi)\psi$ .

Spezielle Lösungen der Schrödinger-Gleichung haben die Gestalt

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-itE} \quad (1.9)$$

für ein reelles  $E$ . Sie heißen *stationäre Lösungen*. In diesem Fall beschreibt  $\phi$  einen Eigenvektor des Hamilton-Operators zu dem Eigenwert  $E$ :

$$H\phi = E\phi \quad (1.10)$$

### 1.3 Das Problem mehrerer Elektronen

Das wichtigste Anliegen der theoretischen Atomphysik ist die Bestimmung der Energieniveaus für ein Atom oder auch für ein Ion. In erster Näherung ist dies das Problem von  $n$  Elektronen unter der Wirkung ihrer gegenseitigen Coulomb-Kräfte und der Coulomb-Anziehung durch einen (als unendlich schwer angenommenen) Kern der Kernladungszahl  $Z$ . Sei  $x^{(i)}$  der Ortsvektor des  $i$ -ten Elektrons und  $\Delta^{(i)}$  der zugehörige Laplace-Operator, so können wir für den Hamilton-Operator schreiben:

$$H \hat{=} \sum_i \left( -\frac{1}{2m} \Delta^{(i)} - \frac{Ze^2}{|x^{(i)}|} \right) + \sum_{i < k} \frac{e^2}{|x^{(i)} - x^{(k)}|} \quad (1.11)$$

<sup>7</sup>Wird der Zustand durch einen statistischen Operator  $\rho$  beschrieben, so ist der Erwartungswert einer Observablen  $A$  durch  $Spur(\rho A)$  gegeben.

<sup>8</sup>Auch diese Formel erlaubt eine Verallgemeinerung: es gilt nämlich  $w(\rho_1|\rho_2) = Spur(\rho_1\rho_2)$  für zwei statistische Operatoren  $\rho_1$  und  $\rho_2$ . Bemerkenswert ist hier die Symmetrie dieses Ausdruckes unter der Vertauschung der Indizes.

Als Hilbertraum, auf dem dieser Operator definiert ist, muß der Raum  $L^2(\mathbf{R}^{3n})$  gewählt werden. Dieser umfaßt alle Wellenfunktionen

$$\phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)}),$$

die auf dem Konfigurationsraum  $\mathbf{R}^{3n}$  von  $n$  Teilchen quadratintegabel sind. In diesem Raum sind die Eigenwerte  $E$  und die Eigenfunktionen  $\phi$  zu bestimmen:  $H\phi = E\phi$ . Der im Laboratorium zu beobachtende Übergang von einem stationären Zustand zu einem anderen ist nur durch Emission oder Absorption von Photonen möglich, deren Beschreibung unser Hamilton-Operator noch nicht vorsieht.

Eine explizite und vollständige Lösung des Eigenwertproblems ist uns versagt. Für die schweren Atome (großes  $Z$ ) ist jedoch die *Zentralfeld-Approximation* sinnvoll. Diese nimmt an, daß sich jedes Elektron der Atomhülle in einem Zentralpotential  $V(r)$  bewegt, das von dem Kern und allen anderen Elektronen im Mittel erzeugt wird. Man geht hierbei von der folgenden Aufspaltung des Hamilton-Operators aus:

$$H = H_0 + H_1 \quad (1.12)$$

mit

$$H_0 \hat{=} \sum_i \left( -\frac{1}{2m} \Delta^{(i)} + V(r_i) \right) \quad , \quad r_i = |x^{(i)}| \quad (1.13)$$

und

$$H_1 \hat{=} \sum_{i < k} \frac{e^2}{|x^{(i)} - x^{(k)}|} - \sum_i \left( \frac{Ze^2}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (1.14)$$

Diese Aufspaltung ist streng und kann noch keinen Fehler verursachen. Die Annahme besteht vielmehr darin, daß ein Potential  $V$  gewählt werden kann, für das der Operator  $H_1$  nur noch eine kleine Störung darstellt, die man in nullter Näherung vernachlässigt: Man löst also zunächst das Problem  $H_0\phi = E\phi$  mit  $\|\phi\| = 1$ . In erster Näherung nimmt man dann die Ersetzung  $E \rightarrow E + (\phi, H_1\phi)$  vor, so wie es die Schrödingersche Störungsrechnung vorschreibt. Um nun einen geeigneten Ausdruck für das Zentralpotential  $V$  zu gewinnen, gibt es im wesentlichen zwei Verfahren:

- Die Berechnung im Rahmen des statistischen Modells von Thomas und Fermi.

- Die Bestimmung durch Lösung eines Variationsproblems in einem Raum spezieller Wellenfunktionen (Hartree-Fock-Funktionen).

Worin liegt nun die Vereinfachung, wenn wir die Eigenwerte von  $H_0$  (anstelle von  $H$ ) aufsuchen? Antwort:  $H_0$  ist eine Summe von Einteilchen-Operatoren. Wir haben also das Einteilchenproblem nur *einmal* zu lösen, um alle Eigenwerte von  $H_0$  zu kennen:

$$E = E_1 + E_2 + \cdots + E_n \quad (1.15)$$

wobei die  $E_i$  beliebige Energie-Eigenwerte des Elektrons in dem Zentralpotential  $V$  sind. Unsere Vorstellung, daß die Elektronen eines Atoms in Schalen angeordnet sind, sowie unsere Vorstellung vom dem Aufbau dieser Schalen und die atomtheoretische Deutung des Periodensystems der Elemente beruht entscheidend auf der Korrektheit der Zentralfeld-Approximation, der angenommenen Proportionalität  $V(r) \propto r^{-1}$  und dem Pauli-Prinzip.

## 1.4 Der Spin der Elektronen

Bislang haben wir unberücksichtigt gelassen, daß die Elektronen einen Spin besitzen. Eine konsistente Beschreibung des Elektrons, die den Spin mit einbezieht, ist nur auf der Basis der Dirac-Gleichung möglich. Diese Gleichung gibt zugleich eine lorentz-kovariante Formulierung des Problems. Obwohl es scheinen mag, daß relativistische Effekte bei der Bindung von Elektronen in Atomen keine Rolle spielen, zeigen die Tatsachen ein anderes Bild. Die korrekte Beschreibung der Feinstruktur der Ein-Elektron-Atome folgt einzig aus der Dirac-Gleichung und nicht aus der Schrödinger-Gleichung. Ferner: die Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung in den Hamilton-Operator, wie wir sie gleich weiter unten vornehmen wollen, stellt eine Korrektur dar, die aus einer Approximation der Dirac-Gleichung folgt. Diese Spin-Bahn-Wechselwirkung spielt, wie wir wissen, eine wichtige Rolle bei der Bestimmung der Energieniveaus. Dennoch: aus Platzmangel können wir auf die Dirac-Gleichung nicht eingehen.

Es gibt genau zwei Basiszustände für die Polarisation des Elektrons: bezüglich einer beliebig vorgegebenen Richtung (meistens die

3-Richtung) kann der Spin so  $\uparrow$  oder so  $\downarrow$  gerichtet sein. Wenn wir nun alle weiteren Freiheitsgrade des Elektrons außer acht lassen, so haben wir es hier mit einem zweidimensionalen Hilbertraum zu tun, den wir den *Spinorraum* nennen (seine Elemente heißen *Spinoren*) und den wir kurz mit  $\mathbf{C}^2$  bezeichnen<sup>9</sup>. Die vollständige Beschreibung des Ein-Elektron-Hilbertraumes wird erreicht, wenn wir nun Funktionen  $\phi$  auf dem Konfigurationsraum einführen mit Werten im Spinorraum:

$$\phi : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{C}^2, \quad \|\phi\|^2 = \int d^3x \|\phi(x)\|^2 < \infty \quad (1.16)$$

Der Hilbertraum dieser Funktionen wird mit  $L^2(\mathbf{R}^3, \mathbf{C}^2)$  bezeichnet. In dieser erweiterten Theorie des Elektrons beschreibt  $\|\phi(x)\|^2$  die Dichte für den Aufenthalt des Teilchens und  $\|\phi(x)\|^{-1}\phi(x)$  die Polarisation am Ort  $x$ , sofern dort  $\|\phi(x)\|$  nicht verschwindet.

Mit Hilfe der Paulischen Spinmatrizen  $\sigma_k$  definieren wir jetzt den Spinoperator  $\mathbf{S} = (S_1, S_2, S_3)$  durch

$$[S_k \phi](x) = \frac{1}{2} \sigma_k \phi(x) \quad (1.17)$$

Zur Beschreibung eines Zustandes zieht man manchmal die beiden Eigenwerte  $\mu = \pm \frac{1}{2}$  von  $S_3$  heran, indem man Wellenfunktionen  $\phi(x, \mu)$  mit Werten in  $\mathbf{C}$  benutzt. Die Verbindung zu den vorigen Überlegungen kann durch

$$\phi(x) = \left\{ \phi(x, \frac{1}{2}), \phi(x, -\frac{1}{2}) \right\}$$

hergestellt werden.

Eine geeignete Beschreibung eines Zustandes von  $n$  Elektronen geschieht nun durch Angabe einer Wellenfunktion  $\phi(1, 2, \dots, n)$  (mit Werten in  $\mathbf{C}$ ), wobei die Zahl  $i$  für das Paar  $(x^{(i)}, \mu^{(i)})$  steht, also für den Ort und die Spinvariable des  $i$ -te Teilchens. Das *Pauli-Prinzip* fordert nun die totale Antisymmetrie eines solchen Zustandes. Es gilt also für jedes  $i$

$$\phi(1, \dots, i, i+1, \dots, n) = -\phi(1, \dots, i+1, i, \dots, n) \quad (1.18)$$

---

<sup>9</sup>Hiermit meinen wir den Vektorraum aller Paare  $z = \{z_1, z_2\}$  gebildet aus komplexen Zahlen unter dem Skalarprodukt  $(z, z') = \bar{z}_1 z'_1 + \bar{z}_2 z'_2$ . Die Vektoren  $\{1, 0\}$  und  $\{0, 1\}$  formen eine Basis und entsprechen den beiden Polarisationszuständen  $\uparrow$  und  $\downarrow$ . Die allgemeinste Situation wird jedoch durch eine Polarisationsmatrix  $\rho$  beschrieben: dies ist eine komplexe  $2 \times 2$ -Matrix mit  $\rho \geq 0$  und  $\text{Spur} \rho = 1$ . Ein Elektron heißt *unpolarisiert*, wenn  $2\rho = 1$  (Einheitsmatrix) gilt.

Diese Eigenschaft ist charakteristisch für identische Teilchen mit halbzahligem Spin. Man nennt sie Fermionen. Diese Besonderheit, die uns bei den identischen Teilchen begegnet, wollen wir ein wenig beleuchten.

Sind  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  zwei Hilberträume, mit denen wir zwei verschiedene (d.h. unterscheidbare) physikalische Systeme hinsichtlich der für sie möglichen Zustände beschreiben, so gibt es stets einen Hilbertraum, der alle Zustände des vereinigten Systems, sozusagen die *gemeinsamen* Zustände und nur diese, umfaßt. Der gesuchte Raum ist das Tensorprodukt  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Ist also  $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3, \mathbf{C}^2)$  etwa der Hilbertraum eines einzelnen Elektrons, so würde man erwarten, daß die Wellenfunktionen von  $n$  Elektronen in dem  $n$ -fachen Tensorprodukt

$$\bigotimes_{i=1}^n \mathcal{H} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H} \quad (n \text{ Faktoren}) \quad (1.19)$$

zu suchen sind. Für unterscheidbare Teilchen wäre dies richtig. Elektronen sind jedoch identische Teilchen, und das Pauliprinzip sagt uns, daß die Zustände von  $n$  Elektronen in einem Unterraum liegen, den man das  $n$ -fache alternierende Produkt der Ein-Teilchen-Räume nennt:

$$\bigwedge_{i=1}^n \mathcal{H} = \mathcal{H} \wedge \mathcal{H} \wedge \cdots \wedge \mathcal{H} \quad (n \text{ Faktoren}) \quad (1.20)$$

Ein genäherter Hamilton-Operator für ein  $n$ -Elektronen-Atom, der die genannte Spin-Bahn-Wechselwirkung mit einbezieht, ist  $H = H_0 + H_1 + H_2$  mit

$$H_2 = \sum_{i=1}^n \xi^{(i)} \mathbf{L}^{(i)} \cdot \mathbf{S}^{(i)} \quad (1.21)$$

wobei

$$[\xi^{(i)} \phi](\dots x^{(i)} \dots) = \xi(|x^{(i)}|) \phi(\dots x^{(i)} \dots) \quad (1.22)$$

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}(r) \quad (1.23)$$

Hier bezeichnen  $\mathbf{L}^{(i)}$  und  $\mathbf{S}^{(i)}$  den Bahndrehimpuls- bzw. den Spinoperator des  $i$ -ten Elektrons und  $\mathbf{L}^{(i)} \cdot \mathbf{S}^{(i)}$  deren Skalarprodukt.

## 1.5 Symmetrien und Erhaltungssätze

### 1.5.1 Translationen

Wir wollen bekannte Transformationen aus der klassischen Mechanik auf die Quantenmechanik übertragen und beginnen mit dem einfachsten Beispiel, nämlich der Translation:

$$x' = x + a \quad , \quad a \in \mathbf{R}^3$$

Wir können zwei grundsätzlich verschiedene Vorstellungen mit einer solchen Transformation verbinden.

- Passive Auffassung (ein System, zwei Beobachter):  
die Translation beschreibt die relative Position zweier Bezugssysteme,  $K$  und  $K'$ , von denen aus *ein* physikalisches System (d.h. sein Zustand) beurteilt wird. Ist in dem System  $K$  der Zustand durch die Wellenfunktion  $\phi$  beschrieben, so wird der *gleiche* Zustand in  $K'$  durch die Wellenfunktion  $\phi'$  beschrieben, wobei die Tatsache, daß es sich um den gleichen Zustand handelt, durch

$$\phi'(x') = \phi(x)$$

ausgedrückt ist.

- Aktive Auffassung (zwei Systeme, ein Beobachter):  
die Translation beschreibt einen Vorgang, bei dem ein physikalisches System als Ganzes um einen Vektor  $a$  verschoben wird. War der ursprüngliche Zustand durch eine Wellenfunktion  $\phi$  beschrieben, so kann der neue Zustand durch eine Wellenfunktion  $\phi'$  beschrieben werden, wobei die benutzten Ortskoordinaten unverändert bleiben und durch  $x$  bezeichnet werden. Der Zusammenhang ist dann durch

$$\phi'(x) = \phi(x - a)$$

gegeben.

Beide Auffassungen sind mathematisch äquivalent: gilt nämlich  $\phi'(x + a) = \phi(x)$  für alle  $x$ , so gilt auch  $\phi'(x) = \phi(x - a)$  für alle  $x$  und umgekehrt. Es wird deshalb in Zukunft nicht nötig sein, den Unterschied,

der in den beiden Bildern besteht, zu betonen. Es ist wichtig für das Verständnis, daß mit der Einführung einer Transformation (wie hier der Translation) überhaupt keine Symmetrie verbunden sein muß: dies bleibt eine gesonderte Forderung an die Physik des zugrundegelegten Systems. Welche Auffassung wir dabei vertreten, die aktive oder passive, ist wiederum irrelevant.

Der nächste Schritt in unserer Analyse der Situation besteht darin, daß wir den Operator  $U(a) : L^2(\mathbf{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbf{R}^3)$  einführen<sup>10</sup>:

$$[U(a)\phi](x) = \phi(x - a) \quad (1.24)$$

Dieser Operator hat eine Reihe von Eigenschaften<sup>11</sup>

1.  $U(a)$  ist ein linearer Operator, d.h. er respektiert Superpositionen von Wellenfunktionen.
2. Es gilt  $\|U(a)\phi\| = \|\phi\|$  für alle  $\phi$ , d.h.  $U(a)$  ist *unitär* und respektiert damit nicht nur die Normierung einer Wellenfunktion, sondern erhält auch alle Wahrscheinlichkeiten  $w = |(\phi, \psi)|^2$  (sofern  $\phi$  und  $\psi$  der gleichen Transformation unterworfen werden).<sup>12</sup>
3. Es gilt  $U(a)U(b) = U(a + b)$ . Da wir hier den Vektor  $a$  als eine Variable betrachten, sagt dies, daß die Gesamtheit der Operatoren  $U(a)$  eine Gruppe von unitären Operatoren, kurz, eine *unitäre Gruppe* definiert.

Der Hamilton-Operator eines einzelnen kräftefreien Teilchens ist  $H = -\Delta/2m$ . Für alle  $\phi$  im Definitionsbereich von  $H$  gilt  $[U(a)H\phi](x) = [HU(a)\phi](x)$ , wie man durch eine leichte Rechnung bestätigt. Also gilt  $U(a)H = HU(a)$ , kurz:  $[U(a), H] = 0$ , und wir haben hier die charakterisierende Eigenschaft einer Symmetrie vor uns. In Worten: der unitäre Operator  $U(a)$  vertauscht mit dem Hamilton-Operator. Beachte: dies ist mit der Aussage  $U(a)^{-1}HU(a) = H$  identisch.

<sup>10</sup>Wir schreiben hier  $[U(a)\phi](x)$  anstelle von  $U(a)\phi(x)$ , um unmißverständlich deutlich zu machen, daß  $U(a)$  auf die Funktion  $\phi$  und *nicht* auf den Funktionswert  $\phi(x)$  wirkt.

<sup>11</sup>Wichtig auch hier: diese Eigenschaften allein machen aus  $U(a)$  noch keine Symmetrieoperation.

<sup>12</sup>Ein *linearer* Operator auf einem Hilbertraum, der die Norm erhält, erhält auch das Skalarprodukt. Dies folgt aus der Darstellung  $4(\phi, \psi) = \sum \lambda \|\psi + \lambda\phi\|^2$  (Summation über die vier Wurzeln der Gleichung  $\lambda^4 = 1$ ).

### 1.5.2 Translationen im homogenen Magnetfeld

Das nächste Beispiel ist komplizierter aber lehrreich. Wir wählen als physikalisches System ein Elektron (Ladung  $-e$ ), das sich in einem räumlich wie zeitlich konstanten Magnetfeld  $B$  bewegt. Es ist anschaulich klar, daß ein solches System translationsinvariant ist. Die klassische Hamilton-Funktion

$$H_{kl}(p, q) = \frac{1}{2m} \left( p - \frac{e}{2} q \times B \right)^2 \quad (1.25)$$

drückt diese Symmetrie durch

$$H_{kl}(p + \frac{e}{2} a \times B, q + a) = H_{kl}(p, q) \quad (1.26)$$

aus. Das zugehörige quantenmechanische Problem wird durch den Hamilton-Operator

$$[H\phi](x) = \frac{1}{2m} \left( \frac{1}{i} \nabla - \frac{e}{2} x \times B \right)^2 \phi(x) \quad (1.27)$$

definiert. Der unitäre Operator  $U(a)$ , der eine Symmetrietransformation auf dem Hilbertraum ausführen soll, muß hier anders gewählt, d.h. der neuen Situation angepaßt werden:

$$[U(a)\phi](x) = \phi(x - a) \exp(i\frac{e}{2}[aBx]) \quad (1.28)$$

Neu ist das Auftreten einer  $x$ -abhängigen Phase<sup>13</sup>. Die Änderung gegenüber dem ursprünglichen Ausdruck für  $U(a)$ , so können wir sagen, wird durch eine *Eichtransformation* bewirkt. Setzen wir

$$[\mathbf{P}\phi](x) = \left( \frac{1}{i} \nabla - \frac{e}{2} x \times B \right) \phi(x) \quad (1.29)$$

so findet man leicht  $\mathbf{P}U(a) = U(a)\mathbf{P}$  und deshalb

$$HU(a) = U(a)H \quad (1.30)$$

in offensichtlicher Analogie zur klassischen Situation. Ein nicht-klassischer Effekt besteht nun darin, daß die so definierten Translationen i.a. nicht miteinander kommutieren. Vielmehr gilt für zwei Vektoren  $a$  und  $B$

$$U(a)U(b) = U(a + b) \exp(i\frac{e}{2}[aBb]) \quad (1.31)$$

---

<sup>13</sup>Mit  $[aBx]$  bezeichnen wir das Spatprodukt aus den drei Vektoren  $a$ ,  $B$  und  $x$ .

Es gilt jedoch weiterhin  $U(0) = 1$  und  $U(a)^{-1} = U(-a)$ , sodaß

$$U(a)U(b)U(-a)U(-b) = \exp(ie[aBb]) \quad (1.32)$$

mit der folgenden Konsequenz: ein Teilchen der Ladung  $e$ , das in einem Magnetfeld  $B$  entlang der Berandung eines Parallelogramms, aufgespannt von den Vektoren  $a$  und  $b$ , verschoben wird, kehrt zwar zu seinem Ursprung zurück. Jedoch nimmt seine Wellenfunktion den konstanten Phasenfaktor  $\exp(-ieF \cdot B)$  auf, wobei  $F = a \times b$  der Vektor der umfahrenen Fläche ist. Wir erkennen in  $M = F \cdot B$  den magnetischen Fluß durch das Parallelogramm. Da eine beliebige Fläche durch eine Summe von Rechtecken approximiert werden kann, ist die Aussage allgemein: bei dem Umfahren einer Fläche erhält die Wellenfunktion einen konstanten Phasenfaktor der Form  $\exp(-ieM)$ , wobei  $M$  den magnetischen Fluß durch diese Fläche bezeichnet.<sup>14</sup>

Wir lernen an diesem Beispiel, daß die Symmetrie eines Systems, wenn sie klassisch durch eine abelsche Gruppe beschrieben ist, quantenmechanisch betrachtet, sehr wohl nichtabelsche Züge haben kann. Die Verletzung der Kommutativität zeigt sich stets im Auftreten von Phasenfaktoren und beruht auf der Tatsache, daß konstante Phasen physikalisch bedeutungslos sind.

### 1.5.3 Infinitesimale Translationen

Wir kehren zu der Situation zurück, in der eine Translation durch

$$[U(a)\phi](x) = \phi(x - a)$$

dargestellt wird. Wir nehmen an, daß  $\phi(x - a)$  bezüglich  $a$  in eine konvergente Taylorreihe entwickelt werden kann:

$$\phi(x - a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-a \cdot \nabla)^n \phi(x)$$

Indem wir hier den Impuls  $\mathbf{P} = -i\nabla$  einführen, wird

$$U(a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-ia \cdot \mathbf{P})^n = e^{-ia\mathbf{P}}$$

---

<sup>14</sup>Man vergleiche hierzu den bekannten Aharonov-Bohm-Effekt in der Quantenmechanik der Elektronen.

Wir nennen dies die *Exponentialkonstruktion* der unitären Gruppe  $U(a)$ . Die Gruppe hat drei Generatoren, nämlich die Komponenten von  $\mathbf{P}$ . Wir haben gesehen, wie man  $U(a)$  aus  $\mathbf{P}$  konstruiert. Wir können aber auch den umgekehrten Weg gehen:

$$-ia \cdot \mathbf{P} = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} [U(ta) - 1] \quad (1.33)$$

Wir nennen  $-ia \cdot \mathbf{P}$  die *infinitesimale Transformation*<sup>15</sup> der einparametrischen Schar  $U(ta)$ ,  $t \in \mathbf{R}$ .

Unsere Betrachtungen lassen sich leicht auf n-Teilchensysteme übertragen. Hier bewirkt eine Translation, daß alle Koordinaten gemeinsam um einen Vektor  $a$  verschoben werden:

$$[U(A)\phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \phi(x^{(1)} - a, \dots, x^{(n)} - a) \quad (1.34)$$

Eine Taylorentwicklung ergibt

$$\phi(x^{(1)} - a, \dots, x^{(n)} - a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( - \sum_{j=1}^k a \cdot \nabla^{(j)} \right)^k \phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) \quad (1.35)$$

Also gilt auch hier  $U(a) = \exp(-ia \cdot \mathbf{P})$ , wobei  $\mathbf{P}$  den *Gesamtimpuls* bezeichnet:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(1)} + \dots + \mathbf{P}^{(n)}, \quad \mathbf{P}^{(j)} = -i\nabla^{(j)}$$

Wie in der klassischen Mechanik können wir definieren: Ein System heißt *abgeschlossen*, wenn es translationsinvariant ist, d.h. wenn

$$[U(a), H] = 0$$

für alle  $a \in \mathbf{R}^3$  gilt. Dies ist mit der Aussage äquivalent, daß die Generatoren von  $U(a)$  mit dem Hamilton-Operator vertauschen:

$$[\mathbf{P}, H] = 0$$

---

<sup>15</sup>Man beachte den begrifflichen Unterschied zwischen Generatoren und infinitesimalen Transformationen (i.Tn.). Es gibt nur drei Generatoren der Translationen, jedoch unendlich viele i.Tn.: sie formen nämlich einen 3-dimensionalen Vektorraum, der von  $iP_1$ ,  $iP_2$  und  $iP_3$  aufgespannt wird. Generatoren sind selbstadjungiert, die i.Tn. sind es nicht.

Selbstadjungierte Operatoren wie  $\mathbf{P}$ , die mit  $H$  vertauschen, nennen wir *Erhaltungsgrößen*. Ein Beispiel für viele: das System von  $n$  Elektronen unter der Wirkung ihrer gegenseitigen Coulomb-Abstoßung ist abgeschlossen. Formal folgt dies aus der Tatsache, daß die potentielle Energie nur von den Differenzen  $x^{(i)} - x^{(k)}$  abhängt. Als Konsequenz davon ist der Gesamtimpuls der Elektronen eine Erhaltungsgröße.

### 1.5.4 Rotationen

Wir wollen uns nun den Rotationen zuwenden und ihren Zusammenhang mit dem Drehimpuls untersuchen. Wir gehen dabei von dem geometrischen Begriff aus. Sei  $R = (R_{ik})$  eine reelle  $3 \times 3$ -Matrix. Die durch sie vermittelte Transformation des  $\mathbf{R}^3$ ,  $x' = Rx$ , heißt *orthogonal* (wir sagen auch,  $R$  sei eine orthogonale Matrix), wenn die Länge der Vektoren erhalten bleibt:  $|Rx| = |x|$ . Bekanntlich ist dies mit der Aussage  $R^T R = 1$  identisch, wenn man mit  $R^T$  die transponierte Matrix bezeichnet. Wir erinnern an die Regeln für Determinanten:

$$\begin{aligned}\det(RS) &= (\det R)(\det S) \\ \det(R^T) &= \det R \\ \det 1 &= 1\end{aligned}$$

Aus  $R^T R = 1$  folgt  $(\det R)^2 = 1$  und somit  $\det R = \pm 1$ : orthogonale Matrizen sind nichtsingulär<sup>16</sup> und erfüllen  $R^{-1} = R^T$ . Die orthogonalen Transformationen bilden eine Gruppe, die man die *orthogonale Gruppe* nennt und mit  $O(3)$  bezeichnet. Die Untergruppe

$$SO(3) = \{R \in O(3) \mid \det R = 1\}$$

heißt *spezielle orthogonale Gruppe* oder kurz *Drehgruppe*. Ist  $R \in SO(3)$ , so ist  $-R$  in der Nebenklasse derjenigen Matrizen, deren Determinante  $-1$  ist. Die Matrix  $-1$  ist ein Element dieser Nebenklasse und beschreibt

---

<sup>16</sup>Diese sehr einfache Tatsache wird falsch in unendlich-dimensionalen Räumen. Eine Isometrie im Hilbertraum,  $\|U\phi\| = \|\phi\|$  erfüllt zwar  $U^*U = 1$  aber nicht notwendigerweise  $U^{-1} = U^*$ : nicht jeder isometrische Operator ist unitär. Der Defekt tritt immer dann auf, wenn  $U$  nicht invertierbar ist.

eine Spiegelung:  $x' = -x$ . Jede orthogonale Matrix  $R \in O(3)$  ist also entweder speziell orthogonal (eine Drehung) oder das Produkt einer Drehung (nämlich  $-R$ ) und der Spiegelungsmatrix  $-1$ .

Auch in der Quantenmechanik gibt eine Drehung  $R$  Anlaß zu einem Wechsel des Bezugssystems. Für die Wellenfunktion eines Teilchens lautet die Transformationsformel:

$$\phi'(x') = \phi(x) \quad (1.36)$$

$$x' = Rx \quad (1.37)$$

In  $\phi'(Rx) = \phi(x)$  können wir  $x$  durch  $R^{-1}x$  ersetzen und die Bezeichnung  $U(R)\phi = \phi'$  einführen. Dann gilt:

$$[U(R)\phi](x) = \phi(R^{-1}x) \quad (1.38)$$

Der hierdurch eingeführte Operator ist unitär<sup>17</sup>. Es gilt:

$$U(R)^{-1} = U(R)^* = U(R^{-1}) = U(R^T) \quad (1.39)$$

$$U(R)U(S) = U(RS) \quad (1.40)$$

$$U(1) = 1 \quad (1.41)$$

Auch hier gilt: diese Eigenschaften allein machen aus  $SO(3)$  noch keine Symmetriegruppe.

Viele Einteilchenprobleme sind rotationssymmetrisch. Sei etwa

$$[H\phi](x) = [-\Delta/2m + V(x)]\phi(x) \quad (1.42)$$

der Ausdruck für den Hamilton-Operator. Dann sind die folgenden beiden Aussagen äquivalent:

- Das Potential ist dreihinvariant:  $V(x) = V(Rx)$ , d.h.  $V$  hängt nur von  $r = |x|$  ab.
- Der Hamilton-Operator vertauscht mit  $U(R)$ , d.h.  $[U(R), H] = 0$ .

---

<sup>17</sup>Der Grund ist sehr einfach: das Volumenelement  $d^3x$ , mit dem wir  $|\phi|^2$  integrieren, ist invariant gegenüber Drehungen. Für diese Eigenschaft würde es ausreichen anzunehmen, daß  $|\det R| = 1$  ist.

### 1.5.5 Infinitesimale Rotationen

Wir betrachten Drehungen  $R(t)$ , die stetig differenzierbar von einem reellen Parameter  $t$  abhängen und  $R(0) = 1$  erfüllen. Differenzieren wir nun die Relation  $R(t)^T R(t) = 1$  auf beiden Seiten an der Stelle  $t = 0$ , so erkennen wir, daß jede infinitesimale Rotation  $A = (dR/dt)(0)$  die Bedingung

$$A^T + A = 0 \quad (1.43)$$

erfüllt, d.h.  $A$  ist antisymmetrisch. Tatsächlich bekommen wir alle reellen antisymmetrischen Matrizen auf diese Weise; denn sei  $A$  eine solche Matrix, so beschreibt  $R(t) = \exp(tA)$  eine geeignete einparametrische Schar von Drehungen<sup>18</sup>.

Der Vorteil der Beschreibung durch  $A$  liegt nun darin, daß antisymmetrische Matrizen sich leicht parametrisieren lassen:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

so daß  $Ax = a \times x$  mit  $a = (a_1, a_2, a_3)$  für alle  $x \in \mathbf{R}^3$  ist. Die charakteristische Gleichung  $\det(A - \lambda) = 0$  einer solchen Matrix hat stets die Form  $\lambda^3 + \omega^2 \lambda = 0$  mit

$$\omega^2 = -\text{Spur}A^2/2 = |a|^2.$$

Das Theorem von Caley-Hamilton sagt, daß die Matrix  $A$  ihre eigene charakteristische Gleichung erfüllt, also

$$A^3 + \omega^2 A = 0 \quad (1.45)$$

Mit Hilfe dieser Matrixidentität läßt sich die Exponentialreihe leicht aufsummieren,

$$e^A = 1 + \frac{\sin \omega}{\omega} A + \frac{1 - \cos \omega}{\omega^2} A^2 \quad (1.46)$$

---

<sup>18</sup>Dies folgt aus  $[\exp(tA)]^T = \exp(tA^T) = \exp(-tA) = [\exp(tA)]^{-1}$  und der Stetigkeit der Funktion  $f(t) = \det \exp(tA)$ : da  $f(0) = 1$  und  $f(t)^2 = 1$ , ist  $f(t) = 1$ . Es gilt jedoch noch mehr:  $R(t) = \exp(tA)$  stellt eine einparametrische Untergruppe von  $SO(3)$  dar und jedes Element  $R \in SO(3)$  liegt in einer solchen Untergruppe.

und auf diese Weise haben wir eine Parametrisierung der Drehgruppe gewonnen. Wegen der Periodizität der trigonometrischen Funktionen können wir den Vektor  $a$  so einschränken, daß  $|a| \leq \pi$  erfüllt ist.

Aus  $x \parallel a$  folgt  $e^A x = x$ , und aus  $x \perp a$  mit  $|x| = 1$  folgt  $x e^A x = \cos |a|$ . Deshalb ist für die Rotation  $R = e^A$

$$a/|a| = \text{Richtung der Drehachse, } \omega = |a| = \text{Drehwinkel.}$$

Wir betrachten die einparametrische Gruppe  $U(e^{tA})$  und berechnen die zugehörige infinitesimale Transformation:

$$\begin{aligned} [U(e^{tA})\phi](x) &= \phi(x - ta \times x + O(t^2)) \\ &= (1 - t[ax \nabla] + O(t^2))\phi(x) \\ &= (1 - ita \cdot \mathbf{L} + O(t^2))\phi(x) \end{aligned}$$

mit  $\mathbf{L} = x \times (-i\nabla)$ , dem Drehimpulsoperator. Die infinitesimale Transformation ist also  $-ia \cdot \mathbf{L}$ , und die von ihr erzeugte einparametrische Untergruppe gewinnen wir durch die Exponentialkonstruktion:

$$U(e^{tA}) = e^{-ita\mathbf{L}} \quad (1.47)$$

Auf eine Wellenfunktion von  $n$  Teilchen (ohne Spin) wirkt eine Rotation in analoger Weise:

$$[U(R)\phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \phi(R^{-1}x^{(1)}, \dots, R^{-1}x^{(n)}) \quad (1.48)$$

Es ist offensichtlich, in welchen Situationen die so eingeführte Transformationsgruppe zu einer Symmetrie wird. Lassen wir nämlich die Teilchen so miteinander wechselwirken, daß die Zweikörperpotentiale nur von den Abständen  $|x^{(i)} - x^{(k)}|$  abhängen, hat der Hamilton-Operator die Eigenschaft  $[U(R), H] = 0$ . Die Generatoren von  $U(R)$  sind die drei Komponenten des *Gesamtdrehimpulses*

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \dots + \mathbf{L}^{(n)} \quad (1.49)$$

Nur er (und nicht jeder Einteilchen-Drehimpuls separat) hat die Eigenschaft, eine Erhaltungsgröße zu sein:  $[\mathbf{L}, H] = 0$ . Haben die Teilchen zudem noch Spinfreiheitsgrade, so müssen diese ebenfalls der Drehung unterworfen werden, damit eine Symmetrie entsteht. Dies führt

dazu, daß man in die Summe aller Drehimpulse auch noch die Spins der einzelnen Teilchen mit einbeziehen muß. Die genaue Beschreibung dieser Situation erfolgt später.

Es ist aus dem Gesagten klar, daß man Einzeldrehimpulse (ebenso wie die zugehörigen partiellen Drehungen) zwar definieren kann, sie aber i.a. keine Erhaltungsgrößen darstellen, weil die Wechselwirkung der Teilchen untereinander dies nicht zuläßt. Damit können partielle Drehungen auch keine Symmetrien beschreiben. In einer wichtigen Situation ist es jedoch möglich, eine partielle Drehgruppe einzuführen, die gleichzeitig Symmetriegruppe ist. Betrachten wir etwa ein abgeschlossenes System von zwei Teilchen, die vermöge eines Potentials  $V(r)$  miteinander wechselwirken, das nur von dem Abstand  $r = |x^{(1)} - x^{(2)}|$  abhängt. Hier ist es zweckmäßig, zunächst Schwerpunkts- und Relativkoordinaten einzuführen:

$$\xi = \frac{m_1 x^{(1)} + m_2 x^{(2)}}{m_1 + m_2} \quad , \quad x = x^{(1)} - x^{(2)}$$

Eine Symmetriegruppe ist dann durch

$$[U(a, R)\phi](\xi, x) = \phi(\xi - a, R^{-1}x) \quad , \quad a \in \mathbf{R}^3, R \in SO(3) \quad (1.50)$$

erklärt. Die hier enthaltenen Translationen führen zur Erhaltung des Gesamtimpulses (klassisch: die Bewegung des Schwerpunktes mit konstanter Geschwindigkeit). Die Drehungen der Relativkoordinaten können wir anschaulich auffassen als Drehungen der Teilchenkoordinaten um den bewegten Schwerpunkt als Zentrum. Sie führen zur Erhaltung des *relativen Bahndrehimpulses*  $\mathbf{L}_{rel} = -ix \times \nabla_x$ .

Natürlich läßt sich die Vorstellung von Drehungen im mitbewegten Bezugssystem übertragen auf das  $n$ -Körperproblem, wobei  $\xi = (\sum m_i)^{-1} \sum m_i x^{(i)}$ :

$$[U(R)\phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \phi(\xi + R^{-1}(x^{(1)} - \xi), \dots, \xi + R^{-1}(x^{(n)} - \xi)) \quad (1.51)$$

Durch Übergang zu infinitesimalen Drehungen finden wir leicht die Generatoren: es sind die Komponenten von

$$\mathbf{L}_{rel} = \mathbf{L} - \mathbf{Q} \times \mathbf{P} \quad (1.52)$$

wobei  $\mathbf{L}$  den Gesamtdrehimpuls,  $\mathbf{Q}$  den Ortsoperator des Schwerpunktes<sup>19</sup> und  $\mathbf{P}$  den Gesamtimpuls bezeichnet.

### 1.5.6 Parität und Zeitumkehr

In der Gruppe  $O(3)$  finden wir außer den Drehungen auch die Spiegelungstransformation  $x \mapsto -x$ . In der klassischen Mechanik führt eine Invarianz des Systems gegenüber Spiegelungen zu keiner neuen Erhaltungsgröße. Dies ist anders in der Quantenmechanik: die neue Erhaltungsgröße  $P$  heißt *Parität*:

$$[P\phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \phi(-x^{(1)}, \dots, -x^{(n)}) \quad (1.53)$$

Die Situation ist dadurch speziell, daß der Operator  $P$  zugleich unitär und selbstadjungiert ist: wir können damit  $P$  als Symmetrietransformation und zugleich auch als Erhaltungsgröße auffassen. Offensichtlich gilt  $P^2 = 1$ , d.h.  $P$  besitzt die Eigenwerte  $\pm 1$  (und nur diese). Jede Wellenfunktion läßt sich in einen Anteil positiver Parität und einen Anteil negativer Parität zerlegen. Die Zerlegung ist eindeutig und wird durch Anwendung der Projektoren  $\frac{1}{2}(1 \pm P)$  erreicht. Bekanntlich haben die Kugelfunktionen  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , die als Drehimpuls-Eigenfunktionen eine wichtige Rolle spielen, eine definierte Parität, nämlich  $(-1)^l$ .

Viele Hamilton-Operatoren, die  $SO(3)$ -invariant sind, besitzen automatisch die volle  $O(3)$ -Symmetrie. Dies gilt für die kinetische Energie, Einteilchenpotentiale, die nur von  $r_i = |x^{(i)}|$ , und Zweiteilchenpotentiale, die nur von  $r_{ik} = |x^{(i)} - x^{(k)}|$  abhängen. Es ist jedoch nicht schwierig, ad hoc  $SO(3)$ -invariante Operatoren zu konstruieren, die nicht  $O(3)$ -invariant sind:

$$[x^{(1)}x^{(2)}x^{(3)}], \quad x^{(1)} \cdot \mathbf{L}^{(2)}, \quad \mathbf{P} \cdot \mathbf{S} \quad u.s.w.$$

Alle diese Größen haben eines gemeinsam: sie lassen sich als Skalarprodukte eines polaren Vektors mit einem Axialvektor darstellen. Solche Größen wollen wir *Pseudoskalare* nennen. Wie die beiden Typen von Vektoren in der Quantenmechanik zu unterscheiden sind, ist leicht auszumachen:

<sup>19</sup>d.h.  $[\mathbf{Q}\phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = (\sum m_i)^{-1} (\sum m_i x^{(i)}) \phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)})$ .

**Definition 1** Ein System von drei Operatoren  $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$  heißt Vektor, wenn gilt<sup>20</sup>:

$$U(R)^{-1}A_iU(R) = \sum_{k=1}^3 R_i^k A_k \quad , \quad R \in SO(3) \quad (1.54)$$

**Definition 2** Ein Vektor  $A$  heißt polar, wenn gilt:  $PAP = -A$ . Er heißt axial, wenn gilt<sup>21</sup>:  $PAP = A$ .

Typischerweise entstehen Axialvektoren als Vektorprodukte von polaren Vektoren. Damit ist auch jeder Drehimpuls  $\mathbf{L}$  ein Axialvektor. Es gibt aber auch Axialvektoren, die nicht durch Produktbildung entstehen, z.B. den Spin  $\mathbf{S}$  (also den Eigendrehimpuls) eines Teilchens.

Wir wenden uns nun der Zeitumkehr zu und erläutern sie anhand der kräftefreien Bewegung eines Teilchens:  $(-\Delta/2m)\psi(x, t) = i\dot{\psi}(x, t)$ . Fragen wir hier, ob mit  $\psi(x, t)$  auch  $\psi(x, -t)$  eine Lösung ist, so lautet die Antwort *nein*. Man erkennt jedoch sofort, daß durch  $\overline{\psi(x, -t)}$  eine neue Lösung beschrieben wird. Dies führt uns dazu, den Operator  $T$  der Zeitumkehr durch

$$[T\phi](x) = \overline{\phi(x)} \quad , \quad \phi \in L^2(\mathbf{R}^3) \quad (1.55)$$

zu definieren, also durch eine einfache komplexe Konjugation der Wellenfunktion. Ist nämlich  $\psi(x, t)$  die zeitliche Entwicklung des Anfangszustandes  $\phi(x) = \psi(x, 0)$ , so ist  $\overline{\psi(x, -t)}$  die zeitliche Entwicklung des Anfangszustandes  $\overline{\phi(x)}$ . Die Eigenschaften der so eingeführten Zeitumkehr sind:

1. Der Operator  $T$  ist *antilinear*, d.h.

$$T(c\phi + c'\phi') = \bar{c}T\phi + \bar{c}'T\phi' \quad , \quad c, c' \in \mathbf{C} \quad (1.56)$$

<sup>20</sup>Wir sehen hier, daß der Vektorcharakter nur in bezug auf eine bestimmte Darstellung  $U(R)$  der Drehgruppe definiert werden kann.

<sup>21</sup>Die weitere Differenzierung unter den Vektoren beruht offenbar darauf, daß eine bestimmte Darstellung  $U(R)$  der orthogonalen Gruppe  $O(3)$  vorgegeben ist, so daß  $U(R)^{-1}\mathbf{A}U(R) = R\mathbf{A}$  für polare Vektoren, hingegen  $U(R)^{-1}\mathbf{A}U(R) = (\det R)R\mathbf{A}$  für axiale Vektoren gilt.

2. Der Operator  $T$  invertiert das Skalarprodukt:

$$(T\phi, T\phi') = (\phi', \phi) \quad (1.57)$$

Operatoren mit den Eigenschaften 1. und 2. heißen *antiunitär*<sup>22</sup>.

3. Ist der Grundzustand  $\phi$  eines Hamilton-Operators  $H$  mit  $[T, H] = 0$  nicht entartet, so gilt  $T\phi = c\phi$  mit  $|c| = 1$ . Dies heißt: nach Wahl einer geeigneten Phase wird der Grundzustand durch eine reelle Wellenfunktion beschrieben, so etwa der Grundzustand des Wasserstoffatoms.
4. Ist  $\phi_p(x) = e^{ipx}$  eine ebene Welle mit dem Impuls  $p$ , so gilt  $T\phi_p = \phi_{-p}$ . Man nennt daher auch  $T$  den Operator der Bewegungsumkehr, und diese Bezeichnung ist vielleicht sogar klarer und dem Begriff *Zeitumkehr* vorzuziehen. Impulse und Drehimpulse ändern ihr Vorzeichen:  $T\mathbf{P}T = -\mathbf{P}$ ,  $T\mathbf{L}T = -\mathbf{L}$ . Ortsoperatoren bleiben unverändert:  $T\mathbf{Q}T = \mathbf{Q}$ . Deshalb gilt: Skalarprodukte vom Typ  $\mathbf{Q}\cdot\mathbf{P}$  und  $\mathbf{Q}\cdot\mathbf{L}$ , ebenso wie Hamilton-Operatoren, die von solchen Größen in linearer Weise abhängen, sind nicht zeitumkehrinvariant.
5. Bewegt sich ein Teilchen in einem Potential  $V(x)$ , so gilt für den Hamilton-Operator  $H$  die Beziehung  $[T, H] = 0$  genau dann, wenn das Potential *reell* ist. Die Einführung komplexer Potentiale<sup>23</sup> verstößt gegen die Forderung nach Invarianz gegenüber der Zeitumkehr (ganz abgesehen davon, daß ein solcher Hamilton-Operator dann nicht mehr selbstadjungiert wäre).

Der antilineare Charakter der Zeitumkehr ist, was seinen Gültigkeitsbereich betrifft, nicht auf die Schrödinger-Theorie beschränkt. Um dies

---

<sup>22</sup>Man kann leicht zeigen, daß jeder antiunitäre Operator  $A$  als Produkt  $A = TU$  der Konjugation  $T$  und eines unitären Operators  $U$  geschrieben werden kann: man hat nur  $U = TA$  zu setzen und  $T^2 = 1$  auszunutzen.

<sup>23</sup>Eine beliebte Methode in der Theorie der Streuung von Neutronen an einem Kern besteht darin, mit Hilfe komplexer Potentiale die Absorption der Neutronen durch den Kern mitzubeschreiben, in Analogie zu dem optischen Verhalten eines Festkörpers, den wir durch einen komplexen Brechungsindex charakterisieren. Eine solche Theorie verletzt wesentliche Prinzipien der Quantentheorie.

einzusehen, denken wir uns irgendeine relativistische Theorie der Elementarteilchen mit unitärer Zeitevolution  $U(t) = \exp(-itH)$ . In relativistischen Theorien gilt grundsätzlich  $H \geq 0$ . Eine Zeitumkehr  $T$  muß, wenn sie diesen Namen verdient, die Eigenschaft  $TU(t) = U(-t)T$  besitzen. Gehen wir hier zu infinitesimalen Zeitverschiebungen über, so folgt  $TiH = iHT$ . Damit haben wir die folgende Alternative: entweder gilt

$$TH = HT \quad \text{und} \quad Ti = -iT$$

oder

$$TH = -HT \quad \text{und} \quad Ti = iT.$$

Im ersten Fall ist  $T$  antilinear, im zweiten Fall linear. Ist  $\phi$  ein Zustand positiver Energie, so ist  $T\phi$  ein Zustand positiver Energie im ersten, ein Zustand negativer Energie im zweiten Fall. Der zweite Fall verletzt die Bedingung  $H \geq 0$  und scheidet für uns aus. Es bleibt nur die Möglichkeit, daß  $T$  antilinear ist.

Es gilt zwar  $T^2 = 1$  in der Quantenmechanik, doch wäre es falsch, von einer *Observablen*  $T$  mit den Eigenwerten  $\pm 1$  zu sprechen. Der Grund:  $T$  ist nicht selbstadjungiert. Dies bewirkt, daß mit einer solchen Symmetrie keine Erhaltungsgröße verbunden ist. Dennoch sind mit der Invarianz gegenüber Zeitumkehr viele Auswahlregeln verknüpft, z.B. kann ein neutrales Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (etwa das Neutron) kein elektrisches Dipolmoment besitzen.

E.P. Wigner hat gezeigt, daß eine allgemeine Transformation des Zustandsraumes, die alle Wahrscheinlichkeiten  $w(\psi|\phi) = |(\psi, \phi)|^2$  (siehe den Abschnitt 2.2) invariant läßt, entweder *unitär* oder *antiunitär* ist. Es ist bemerkenswert, daß die Natur von der zweiten Möglichkeit, eine Symmetrie darzustellen, wenigstens in einem bekannten Fall Gebrauch gemacht hat.

### 1.5.7 Symmetrien im engeren Sinn

Wir wollen nun nach der Diskussion einiger Beispiele in den vorangegangenen Abschnitten den Begriff der Symmetriegruppe allgemein fassen. Wir denken uns ein physikalisches System. Es benennen heißt

seinen Zustandsraum  $\mathcal{H}$  und seinen Hamilton-Operator  $H$  kennen. Sei  $G$  eine abstrakte Gruppe und  $U(g) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  für jedes  $g \in G$  entweder unitär oder antiunitär, so daß

$$U(g)U(g') = U(gg') \quad , \quad U(e) = 1 \quad (1.58)$$

für alle  $g, g' \in G$  erfüllt ist<sup>24</sup>. Ist  $U(g)$  für jedes  $g \in G$  unitär, so nennen wir die Abbildung  $g \mapsto U(g)$  eine *unitäre Darstellung* der Gruppe  $G$ . Die individuellen Operatoren  $U(g)$  der Darstellung  $U$  heißen die *Darsteller*. Für den Fall, daß die schwächere Bedingung

$$U(g)U(g') = c(g, g')U(gg') \quad (1.59)$$

mit  $c(g, g') \in \mathbf{C}$  und  $|c(g, g')| = 1$  erfüllt ist, sprechen wir von einer *projektiven Darstellung* der Gruppe  $G$ .

**Definition 3** . Gilt  $[U(g), H] = 0$  für alle  $g \in G$ , so heißt  $G$  eine Symmetriegruppe im engeren Sinn für das physikalische System und  $g \mapsto U(g)$  ihre Darstellung.

Die Existenz einer Symmetriegruppe hat die folgende offensichtliche Konsequenz:

Ist  $\phi \in \mathcal{H}$  ein stationärer Zustand, d.h. gilt  $H\phi = E\phi$ , so sind auch alle Zustände  $U(g)\phi$  ( $g \in G$ ) stationär und zwar zum gleichen Eigenwert  $E$ .

Da Eigenlösungen zum gleichen Eigenwert einen linearen Raum<sup>25</sup> bilden, können wir sagen, daß  $U(g)$  auf diesem Raum operiert, ohne ihn zu verlassen:

$\mathcal{H}_E = \{\phi \mid H\phi = E\phi\}$  ist ein invarianter Unterraum für die Darstellung  $U$  der Symmetriegruppe  $G$ .

---

<sup>24</sup>Wir schreiben allgemein  $gg'$  für das Gruppenprodukt und bezeichnen mit  $e$  das neutrale Element in  $G$ .

<sup>25</sup>Die Dimension eines solchen Raumes kann endlich oder unendlich sein. Im allgemeinen stellt sich die Dimension jedoch als endlich heraus.

Die Einschränkung von  $U(g)$  auf den invarianten Unterraum  $\mathcal{H}_E$  beschreibt eine *Teildarstellung*  $U_E$  von  $U$ , wobei sich die Darsteller  $U_E(g)$  von  $U(g)$  nur dadurch unterscheiden, daß ihr Wirkungsbereich über  $\mathcal{H}_E$  nicht hinaus geht.

Ein selbstadjungierter Operator  $A$  auf  $\mathcal{H}$  wird eine Erhaltungsgröße genannt, wenn  $[A, H] = 0$  gilt. Es besteht ein wichtiger Zusammenhang zwischen diesem Konzept und dem Begriff der Symmetrie: Sei nämlich  $A$  eine Erhaltungsgröße, so beschreibt  $U(s) = \exp(isA)$  mit  $s \in \mathbf{R}$  eine einparametrische unitäre Gruppe von Symmetrietransformationen; denn es gilt  $[U(s), H] = 0$  für alle  $s \in \mathbf{R}$ . Umgekehrt führt jede einparametrische Symmetriegruppe durch Übergang zu der infinitesimalen Transformation auf eine Erhaltungsgröße.

Die Existenz einer Erhaltungsgröße  $A$  erlaubt einige Folgerungen:

- Sei  $\phi_t$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung  $H\phi_t = i\dot{\phi}_t$ , so daß  $A\phi_0 = a\phi_0$  ( $A$  nimmt zur Zeit  $t = 0$  den Eigenwert  $a$  an). Dann gilt  $A\phi_t = a\phi_t$  für alle Zeiten  $t$ .
- Sei  $\phi_t$  irgendeine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Dann ist der Erwartungswert  $(\phi_t, A\phi_t)$  unabhängig von der Zeit  $t$ . Diese Aussage läßt sich noch verschärfen. Zu  $\phi_t$  mit  $\|\phi_t\| = 1$  und  $A$  existiert eine zeitlich konstante Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte von  $A$ , d.h. es gibt ein W-Maß  $\mu$  auf  $\mathbf{R}$ , so daß<sup>26</sup>

$$(\phi_t, e^{isA}\phi_t) = \int d\mu(a) e^{isa}$$

für alle  $s \in \mathbf{R}$  unabhängig von  $t$  erfüllt ist. Ein Beispiel: in einem abgeschlossenen System ist nicht nur der Erwartungswert des Impulses zeitlich konstant, sondern auch die gesamte Impulsverteilung.

- Mit  $A$  ist auch jedes Polynom  $P_n(A)$  mit reellen Koeffizienten eine Erhaltungsgröße. Mit der gebotenen mathematischen Vorsicht kann man sogar behaupten, daß jede Funktion  $f(A)$  eine Erhaltungsgröße ist. Das Problem besteht lediglich darin, dem Symbol

---

<sup>26</sup>Die hier beschriebene Funktion von  $s$  ist die Fourier-Transformierte des Maßes  $\mu$ . Sie wird auch *die charakteristische Funktion* des W-Maßes genannt.

$f(A)$  eine Bedeutung zu geben. Wir wollen auf dieses Problem hier nicht eingehen.

- Sei  $E$  ein Energie-Eigenwert und  $\mathcal{H}_E$  der Raum der zugehörigen Eigenlösungen. Dann gilt  $A\mathcal{H}_E \subset \mathcal{H}_E$ . Allgemeiner: Jeder invariante Unterraum von  $H$  ist auch ein invarianter Unterraum von  $A$  und umgekehrt. Hätten wir es hier mit gewöhnlichen Matrizen  $H$  und  $A$  zu tun, so ließe sich der Sachverhalt auch so ausdrücken:  $H$  und  $A$  haben ein gemeinsames System von Eigenfunktionen, sind also "gemeinsam diagonalisierbar".
- Für die Theorie des Meßprozesses bedeutet die Relation  $[A, H] = 0$ , daß Messungen der Observablen  $H$  und  $A$  *kompatibel* sind, d.h. sie sich nicht gegenseitig beeinflussen. Insbesondere können  $H$  und  $A$  zugleich mit beliebiger Genauigkeit gemessen werden; es existiert keine Unschärfe-Relation für kommutierende Größen.

Die hier aufgeführten Behauptungen sind so elementar, daß es dem Leser überlassen wird, sie im einzelnen zu verifizieren.

### 1.5.8 Symmetrien im weiteren Sinne

Das bisher benutzte Symmetriekonzept gibt der Zeit eine Sonderstellung unter den vier Koordinaten der Raum-Zeit. Dies ist auf jeden Fall dann nicht wünschenswert, wenn wir zu einer relativistischen Theorie der Teilchen übergehen wollen. Zu einer allgemeineren Begriffsbildung innerhalb der Schrödinger-Theorie gelangen wir, wenn wir die Bedingung  $[U(g), H] = 0$  aufgeben.

Sei  $(\mathcal{H}, H)$  ein physikalisches System und  $g \mapsto U(g)$  eine *beliebige* unitäre Darstellung einer Gruppe  $G$  auf  $\mathcal{H}$ . Wir definieren

$$U_t(g) = e^{-itH} U(g) e^{itH} \quad (1.60)$$

abhängig von der Zeit  $t$ . Dann gilt: ist  $\phi_t$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung  $H\phi_t = i\dot{\phi}_t$ , so auch  $\phi_t^g = U_t(g)\phi_t$  für jedes  $g \in G$ . Auch hier gilt, daß die Gruppe  $G$  auf dem Raum der (zeitabhängigen) Lösungen operiert, jedoch ist ihre Wirkung selbst zeitabhängig und kann deshalb nicht zu Erhaltungsgrößen führen. Der Nutzen des neuen Konzeptes ist daher sehr begrenzt. Wir betrachten zwei Beispiele.

**Galilei-Transformationen.**

Für eine beliebige Geschwindigkeit  $v$ , die wir als Relativgeschwindigkeit zweier Bezugssysteme interpretieren, führt der Ansatz

$$|\phi'(x', t')| = |\phi(x, t)| \quad (1.61)$$

$$x' = x + vt \quad (1.62)$$

$$t' = t \quad (1.63)$$

auf

$$\phi'(x, t) = e^{if(x,t)} \phi(x - vt, t)$$

mit einer zunächst beliebigen reell-wertigen Funktion  $f$ . Wir wollen annehmen, daß  $\phi(x, t)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit  $H = -\Delta/2m$  darstellt. Dann ist die transformierte Wellenfunktion  $\phi'(x, t)$  genau dann eine Lösung derselben Gleichung, wenn die folgenden beiden Differentialgleichungen erfüllt sind:

$$\nabla f(x, t) = mv \quad (1.64)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = -\frac{1}{2}mv^2 \quad (1.65)$$

Mit der Festsetzung  $f(0, 0) = 0$  wird die Lösung eindeutig:

$$f(x, t) = mv \cdot x - \frac{1}{2}mv^2 t \quad (1.66)$$

Schreiben wir nun

$$[U_t(v)\phi_t](x) = \phi_t(x - vt, t)e^{if(x,t)} \quad (1.67)$$

so gilt in der Tat  $U_t(v) = \exp(-itH)U(v)\exp(itH)$  mit

$$[U(v)\phi](x) = \phi(x)e^{imvx} \quad (1.68)$$

oder  $U(v) = \exp(imv \cdot \mathbf{Q})$ . Die Generatoren der Darstellung  $U$  sind die drei Komponenten von  $m\mathbf{Q}$ . Obwohl der Ortsoperator  $\mathbf{Q}$  keine Erhaltungsgröße ist, haben wir dennoch mit seiner Hilfe die Galilei-Transformationen in dem Raum  $L^2(\mathbf{R}^3)$  beschrieben.

Galilei-Invarianz finden wir bei allen abgeschlossenen  $n$ -Teilchensystemen. Die genaue Gestalt des Hamilton-Operators  $H$  ist irrelevant. Entscheidend ist nur, daß sich der Schwerpunkt mit konstanter Geschwindigkeit bewegt:

$$e^{-itH} \mathbf{Q} e^{itH} = \mathbf{Q} + t\mathbf{P}/m \quad (1.69)$$

Hier bezeichnet  $m$  die Gesamtmasse,  $\mathbf{Q}$  den Ortsoperator des Schwerpunktes und  $\mathbf{P}$  den Operator des Gesamtimpulses. Genau wie vorher, sind auch hier die Komponenten von  $m\mathbf{Q}$  die Erzeuger der Darstellung  $U$ . An der Gestalt der Funktion  $f(x, t)$  ändert sich nichts; wir müssen darin nur  $m$  als die Gesamtmasse und  $x$  als die Koordinaten des Schwerpunktes interpretieren.

### Translationen im homogenen $E$ -Feld.

Das Problem eines Elektrons im homogenen  $E$ -Feld ist translationsinvariant. Gesucht ist eine geeignete Beschreibung der Translationen. Sei also

$$[H\phi](x) = (-\Delta/2m - ex \cdot E)\phi(x) \quad (1.70)$$

der Hamilton-Operator. Wir gehen aus von  $[U(a)\phi](x) = \phi(x - a)$ . Da dies keine Symmetrietransformationen sind, konstruieren wir

$$\begin{aligned} U_t(a) &= e^{-itH}U(a)e^{itH} \\ &= \exp\left(-ie^{-itH}a \cdot \mathbf{P}e^{itH}\right) \\ &= \exp(-ia \cdot \mathbf{P} - t[H, a \cdot \mathbf{P}]) \\ &= e^{ieaEt}U(a) \end{aligned}$$

Hierbei haben wir ausgenutzt, daß  $[H, \mathbf{P}] = -ieE$  und  $[H, [H, \mathbf{P}]] = 0$  gilt. Als Resultat erhalten wir die Symmetrietransformationen

$$[U_t(a)\phi_t](x) = \phi_t(x - a)e^{ieaEt} \quad (1.71)$$

Obwohl die Translationen damit auf dem Raum der Lösungen der Bewegungsgleichung operieren, können wir aus dieser Wirkung keine vektorielle Erhaltungsgröße ableiten. Jedoch gilt hier, daß  $U_t(a)$  genau dann unabhängig von  $t$  ist, wenn  $a \perp E$  gilt: für solche  $a$  ist  $a \cdot \mathbf{P}$  eine Erhaltungsgröße. Wählen wir etwa  $E = (0, 0, E_3)$ , so sind  $P_1$  und  $P_2$  zeitlich konstant, und diese beiden Operatoren erzeugen eine Symmetriegruppe im engeren Sinn.

# Kapitel 2

## Darstellungen von Gruppen

In welchem sich zeigt, daß einer, so er nur gelernt hat, den rechten Glauben von den Irrlehren zu scheiden, durchaus imstande ist, auch über Dinge zu reden, von denen er keine Ahnung hat.

Stefan Heym, *Ahasver*

### 2.1 Homomorphismen

Die Untersuchung der Struktur von Gruppen, ihrer Beziehungen untereinander und ihrer Darstellungen beruht auf einem zentralen Begriff, dem des *Homomorphismus*, aus dem weitere wichtige Begriffe ableitbar sind.

**Definition 4** . *Eine Abbildung  $f : H \rightarrow G$  zwischen Gruppen  $G$  und  $H$  wird ein Homomorphismus genannt, wenn sie die Gruppenstruktur respektiert, d.h. wenn für alle  $h, h' \in H$  gilt:*

$$f(hh') = f(h)f(h')$$

*Unter Kern und Bild eines Homomorphismus  $f$  verstehen wir die Mengen*

$$\text{Ker } f = \{h \in H : f(h) = e\} \quad (2.1)$$

$$\text{Im } f = \{f(h) : h \in H\} \quad (2.2)$$

wobei  $e$  das neutrale Element in  $G$  bezeichnet.

Es ist leicht, die folgenden Aussagen zu beweisen:

1.  $\text{Ker} f$  und  $\text{Im} f$  sind Untergruppen von  $H$  bzw.  $G$ .  $\text{Ker} f$  ist sogar eine invariante Untergruppe<sup>1</sup> von  $H$ , und jede invariante Untergruppe ist Kern eines Homomorphismus. In einer abelschen Gruppe ist jede Untergruppe invariant.
2.  $\text{Ker} f$  ist trivial (besteht nur aus einem Element) genau dann, wenn  $f$  injektiv ist;  $f$  wird surjektiv genannt, wenn  $\text{Im} f = G$  gilt. Also ist  $f$  bijektiv oder ein *Isomorphismus* genau dann, wenn sowohl  $\text{Ker} f$  trivial ist als auch  $\text{Im} f = G$  gilt. Wir schreiben dann  $H \cong G$ .
3. Bezeichnen wir mit  $1$  die triviale Gruppe (sie besteht nur aus einem Element), so sind für jede Gruppe  $G$  die Homomorphismen  $1 \rightarrow G$  und  $G \rightarrow 1$  eindeutig.

Ist  $f : H \rightarrow G$  ein Homomorphismus und  $K = \text{Ker} f$  die zugehörige invariante Untergruppe von  $H$ , so ist es möglich, eine *Faktorgruppe*  $H/K$  auf folgende Weise zu konstruieren: Zu  $h \in H$  betrachten wir die Nebenklasse  $hK \subset H$ . Da  $K$  invariant in  $H$  ist, gilt  $hK = Kh$  (Rechts- und Linksnebenklassen sind identisch). Für zwei Teilmengen  $A, B \subset H$  schreiben wir  $AB = \{ab : a \in A, b \in B\}$ . Das Produkt zweier Nebenklassen ist wieder eine Nebenklasse:

$$(hK)(h'K) = h(Kh')K = h(h'K)K = (hh')(KK) = (hh')K$$

Bezüglich der so erklärten Multiplikation bilden die Nebenklassen eine Gruppe, in der  $K$  die Rolle des neutralen Elementes übernimmt.

**Satz 1** (Kanonische Zerlegung eines Homomorphismus.) *Jeder Homomorphismus  $f : H \rightarrow G$  besitzt eine eindeutige Darstellung der Art*

$$H \xrightarrow{f_1} H/\text{Ker} f \xrightarrow{f_2} \text{Im} f \xrightarrow{f_3} G$$

wobei  $f_1$  surjektiv,  $f_2$  bijektiv und  $f_3$  injektiv ist. Setzen wir  $K = \text{Ker} f$ , so gilt  $f_1(h) = hK$  und  $f_2(hK) = f(h)$ ;  $f_3$  ist die kanonische Einbettung einer Untergruppe.

---

<sup>1</sup>Eine Untergruppe  $K \subset H$  heißt *invariant*, wenn  $hkh^{-1} \in K$  für alle  $h \in H$  und  $k \in K$  gilt.

Die wichtigste Eigenschaft von Homomorphismen ist, daß sie sich verketteten lassen, wobei wieder Homomorphismen entstehen. Eine Sequenz von zwei Homomorphismen

$$G \xrightarrow{f} G' \xrightarrow{f'} G''$$

definiert einen Homomorphismus  $f' \circ f : G \rightarrow G''$ . Das hierdurch definierte Verknüpfungsgesetz ist assoziativ. Oft begegnen wir umfangreicheren Sequenzen:

$$\cdots \xrightarrow{f_{n-2}} G_{n-1} \xrightarrow{f_{n-1}} G_n \xrightarrow{f_n} G_{n+1} \xrightarrow{f_{n+1}} \cdots$$

Eine solche Sequenz heißt *exakt an der Stelle  $n$* , wenn gilt:  $\text{Im} f_{n-1} = \text{Ker} f_n$ . Sie heißt *exakt*, wenn sie an jeder Stelle exakt ist. Die verschiedenen Situationen, die wir schon früher diskutiert haben, lassen sich auch durch exakte Sequenzen charakterisieren:

$$1 \rightarrow K \xrightarrow{f} H \quad : f \text{ ist injektiv.}$$

$$H \xrightarrow{f} G \rightarrow 1 \quad : f \text{ ist surjektiv.}$$

$$1 \rightarrow K \xrightarrow{f} G \rightarrow 1 \quad : f \text{ ist bijektiv.}$$

$$1 \rightarrow K \rightarrow H \xrightarrow{f} G \rightarrow 1 \quad : K \cong \text{Ker} f \text{ und } G \cong H/\text{Ker} f.$$

Etwas vereinfachend:  $K$  ist eine invariante Untergruppe von  $H$  und  $G$  ist ihre Faktorgruppe.

$1 \rightarrow \text{Ker} f \rightarrow H \rightarrow \text{Im} f \rightarrow 1$  : diese Sequenz ist exakt für alle Homomorphismen  $f : H \rightarrow G$ .

**1.Beispiel.** Alle Vielfachen der ganzen Zahl  $n$  formen eine Untergruppe  $n\mathbf{Z}$  der additiven Gruppe der ganzen Zahlen. Die Faktorgruppe  $\mathbf{Z}_n = \mathbf{Z}/n\mathbf{Z}$  heißt *zyklische Gruppe* der Ordnung  $n$ :

$$1 \rightarrow n\mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{Z} \xrightarrow{\text{mod } n} \mathbf{Z}_n \rightarrow 1$$

Man kann  $\mathbf{Z}_n$  ebensogut identifizieren mit der multiplikativen Gruppe der  $n$ -ten Einheitswurzeln (Lösungen der Gleichung  $z^n = 1$ ) oder auch mit den Drehungen eines regulären  $n$ -Ecks.

**2.Beispiel.** Wir können die ganzen Zahlen als Untergruppe der reellen Zahlen auffassen; die Faktorgruppe  $\mathbf{R}/\mathbf{Z}$  ist das Einheitsintervall

mit Endpunkten identifiziert. Diese Gruppe beschreibt man am bequemsten als die unitäre Gruppe in einer Dimension,  $U(1) = \{\exp(i2\pi t) : 0 \leq t < 1\}$ :

$$1 \rightarrow \mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{R} \xrightarrow{\text{mod } 1} U(1) \rightarrow 1$$

**3. Beispiel.** Sei  $O(n)$  die Gruppe der orthogonalen  $n \times n$ -Matrizen. Für jedes  $R \in O(n)$  gilt  $\det R = \pm 1$ , und die Determinante beschreibt einen Homomorphismus in die Gruppe  $\mathbf{Z}_2$ :

$$1 \rightarrow SO(n) \rightarrow O(n) \xrightarrow{\det} \mathbf{Z}_2 \rightarrow 1$$

**4. Beispiel.** Sei  $U(n)$  die Gruppe aller unitären  $n \times n$ -Matrizen  $Q$ , so ist  $\det Q$  eine komplexe Zahl vom Betrag 1. Alle  $Q \in U(n)$  mit  $\det Q = 1$  bilden eine invariante Untergruppe, so daß

$$1 \rightarrow SU(n) \rightarrow U(n) \xrightarrow{\det} U(1) \rightarrow 1$$

**5. Beispiel.** Sei  $GL(n, \mathbf{C})$  die Gruppe aller komplexen nichtsingulären  $n \times n$ -Matrizen  $A$ , so gilt  $\det A \neq 0$ , d.h. die Determinante beschreibt hier einen Homomorphismus in die multiplikative Gruppe<sup>2</sup>  $\exp \mathbf{C} = \{e^z : z \in \mathbf{C}\}$ . Alle Matrizen mit Determinante 1 bilden wiederum eine invariante Untergruppe:

$$1 \rightarrow SL(n, \mathbf{C}) \rightarrow GL(n, \mathbf{C}) \xrightarrow{\det} \exp \mathbf{C} \rightarrow 1$$

**6. Beispiel.** Die euklidische Gruppe  $E(n)$  in  $n$  Dimensionen besteht aus allen Transformationen  $x \mapsto Rx + a$  des  $\mathbf{R}^n$  mit  $R \in O(n)$  und  $a \in \mathbf{R}^n$ . Die Translationen  $x \mapsto x + a$  bilden hier eine invariante Untergruppe, die wir mit der additiven Gruppe  $\mathbf{R}^n$  identifizieren. Es ist nicht sinnvoll, die  $O(n)$  als eine Untergruppe von  $E(n)$  aufzufassen. Grund: es gibt viele Untergruppen isomorph zu  $O(n)$ , und keine ist in irgendeiner Weise ausgezeichnet. Vielmehr ist hier die  $O(n)$  als Faktorgruppe aufzufassen:

$$1 \rightarrow \mathbf{R}^n \rightarrow E(n) \rightarrow O(n) \rightarrow 1$$

---

<sup>2</sup>Während die multiplikative Gruppe  $\exp \mathbf{R}$  isomorph zur additiven Gruppe  $\mathbf{R}$  ist, gilt dies nicht, wenn wir hier  $\mathbf{R}$  durch  $\mathbf{C}$  ersetzen; denn  $\exp(i2\pi) = 1$ . Dies zeigt aber, daß die Exponentialabbildung die folgende Sequenz exakt macht:  $1 \rightarrow i2\pi\mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{C} \rightarrow \exp \mathbf{C} \rightarrow 1$ .

## 2.2 Lineare Darstellungen

Jeder lineare Raum  $L$  (auch Vektorraum genannt) ist in natürlicher Weise mit einer Gruppe verknüpft. Dies ist die Gruppe  $\text{Aut}(L)$  der Automorphismen von  $L$ , also die Gruppe der linearen Abbildungen  $A : L \rightarrow L$ , die umkehrbar sind. Jede physikalische Theorie, in der ein Superpositionsprinzip wirksam ist, benutzt einen reellen oder komplexen Vektorraum zur Beschreibung ihrer Zustände. Da wir allen unseren Betrachtungen die Quantentheorie zugrunde legen, wollen wir stets voraussetzen, daß  $L$  ein komplex-linearer Raum ist. Ist  $L$  endlich-dimensional und ist seine Dimension  $n$ , so kann dieser Raum nach Wahl einer Basis mit dem Raum  $\mathbf{C}^n$  und jede Transformation  $A : L \rightarrow L$  mit einer komplexen  $n \times n$ -Matrix  $(A_{ik})$  identifiziert werden<sup>3</sup>, wobei  $\det A \neq 0$  gilt. Wir sehen so, daß  $\text{Aut}(\mathbf{C}^n)$  mit  $GL(n, \mathbf{C})$  übereinstimmt.

**Definition 5** . Ein Homomorphismus  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  heißt lineare Darstellung oder auch kurz Darstellung der Gruppe  $G$  auf dem Darstellungsraum  $L$ . Die Darstellung heißt treu, wenn

$$1 \rightarrow G \xrightarrow{D} \text{Aut}(L)$$

exakt ist.

Ist der Darstellungsraum endlich-dimensional und  $n$  seine Dimension, so sprechen wir von einer  $n$ -dimensionalen Darstellung der Gruppe. Die einfachste Darstellung ist die *triviale Darstellung*: sie ordnet jedem Element einer Gruppe die identische Transformation des eindimensionalen Raumes  $\mathbf{C}$  zu. Um diese Situation anzudeuten, schreiben wir einfach  $D(g) = 1$  für alle  $g \in G$  oder auch  $D = 1$ . Diese Darstellung ist nicht treu, wenn  $G$  nicht nur aus einem Element besteht. Die Frage entsteht, ob jede Gruppe eine treue Darstellung besitzt. Darauf können wir eine partielle Antwort geben.

**Satz 2** Jede endliche<sup>4</sup> Gruppe besitzt eine treue  $n$ -dimensionale Darstellung mit  $n = |G|$ . Diese durch die folgende Konstruktion ausgezeich-

<sup>3</sup>Bei Vorgabe einer Basis  $\{e_i\}$  wird eine lineare Transformation  $A$  durch  $Ae_k = \sum_i A_{ik} e_i$  erklärt. Ist  $x = \sum_i x_i e_i$  ein allgemeiner Vektor mit den Komponenten  $x_i \in \mathbf{C}$ , so gilt  $Ax = \sum_i x'_i e_i$  mit  $x'_i = \sum_k A_{ik} x_k$ .

<sup>4</sup>Eine Gruppe heißt *endlich*, wenn sie endlich viele Gruppenelemente besitzt. Die Zahl der Elemente wird die *Ordnung* der Gruppe  $G$  genannt und mit  $|G|$  bezeichnet.

nete Darstellung  $D_{reg}$  heißt die reguläre Darstellung einer endlichen Gruppe.

Konstruktion. Sei  $V(G)$  der freie Vektorraum über der Gruppe  $G$ : dies ist der Raum aller Funktionen  $f : G \rightarrow \mathbf{C}$ . Identifizieren wir jedes  $g \in G$  mit der Funktion  $g : G \rightarrow \mathbf{C}$ ,  $g(h) = 1$ , falls  $g = h$ , und  $g(h) = 0$ , falls  $g \neq h$ , so besitzt jedes  $f \in V(G)$  die Darstellung

$$f = \sum_{h \in G} f(h)h$$

d.h. wir betrachten  $V(G)$  als einen Vektorraum mit der Basis  $G$ . Auf diesem Vektorraum wirkt die Gruppe  $G$  durch Multiplikation von links:

$$D_{reg}(g)f = \sum_{h \in G} f(h)gh \quad (2.3)$$

Offensichtlich handelt es sich hier um eine Darstellung mit der Dimension  $n = |G|$ . Um zu entscheiden, ob sie treu ist, bestimmen wir den Kern von  $D_{reg}$ , also alle  $g \in G$  mit  $D_{reg}(g)f = f$  für alle  $f \in V(G)$ . Dies führt auf  $gh = h$  (alle  $h$ ), also auf  $g = e$ , d.h. die Darstellung ist treu.  $\square$

Durch Konstruktion besitzt  $V(G)$  eine ausgezeichnete Basis. Bezüglich dieser Basis haben die Darstellungsmatrizen  $D_{reg}(G)$  eine spezielle Struktur: ihre Elemente sind entweder 0 oder 1:

$$D_{reg}(g)_{hh'} = \begin{cases} 1 & h = gh' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.4)$$

**1.Beispiel.** Die zyklische Gruppe  $\mathbf{Z}_n = (a, a^2, \dots, a^n = e)$  hat ein erzeugendes Element  $a$ . Zur Beschreibung der regulären Darstellung genügt es, für dieses Element die Darstellungsmatrix anzugeben:

$$D_{reg}(a) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Nun ist es ohne weiteres möglich, daß eine Gruppe eine  $n$ -dimensionale treue Darstellung besitzt mit  $n < |G|$ . Dies demonstrieren die nächsten drei Beispiele.

**2.Beispiel.** Da die zyklische Gruppe  $\mathbf{Z}_n$  Drehungen des regulären  $n$ -Ecks beschreibt, können wir das erzeugende Element dieser Gruppe durch

$$D_2(a) = \begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi}{n} & -\sin \frac{2\pi}{n} \\ \sin \frac{2\pi}{n} & \cos \frac{2\pi}{n} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

darstellen. Wir erhalten so eine 2-dimensionale treue Darstellung der Gruppe  $\mathbf{Z}_n$ . Ihre Matrizen haben allerdings nicht mehr die Eigenschaft, nur aus den Zahlen 0 und 1 aufgebaut zu sein. Da es uns erlaubt ist, auch komplexe Matrizen als mögliche Darstellungsmatrizen in Betracht zu ziehen, können wir noch einen Schritt weitergehen und die eindimensionale Darstellung

$$D_1(a) = \exp(i2\pi/n) \quad (2.6)$$

der Gruppe  $\mathbf{Z}_n$  einführen, die ebenfalls treu ist.

**3.Beispiel.** Die Permutationen  $\sigma$  von  $1, \dots, n$  bilden eine Gruppe  $S_n$ , die *symmetrische* Gruppe der Ordnung  $n!$ . Eine  $n$ -dimensionale treue Matrixdarstellung finden wir, indem wir setzen:

$$D(\sigma)_{ik} = \begin{cases} 1 & i = \sigma(k) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad i, k = 1, \dots, n \quad (2.7)$$

Auch diese Matrizen sind nur aus den Zahlen 0 und 1 aufgebaut. Man nennt sie Permutationsmatrizen, und für viele Zwecke ist es bequem, sie mit den Gruppenelementen selbst zu identifizieren: damit wird  $S_n$  zu einer Matrixgruppe. Für die  $n \times n$ -Matrix  $\sigma$  hat  $\det \sigma$  den Wert  $+1$  oder  $-1$ , je nachdem, ob  $\sigma$  eine gerade oder ungerade Permutation beschreibt. Da die Determinante für alle Matrixgruppen einen Homomorphismus definiert, haben wir die folgende exakte Sequenz:

$$1 \rightarrow A_n \rightarrow S_n \xrightarrow{\det} \mathbf{Z}_2 \quad (2.8)$$

Die invariante Untergruppe  $A_n$  aller geraden Permutationen wird die *alternierende* Gruppe genannt. Es gilt  $|A_n| = n!/2$ .

**4.Beispiel.** Wir betrachten alle Decktransformationen eines gleichseitigen Dreiecks. Die hierdurch beschriebene Gruppe wird erzeugt durch

zwei Elemente:  $a =$  Drehung um  $2\pi/3$ ,  $b =$  Spiegelung an einer Seitenhalbierenden. Dies liefert uns die Darstellung

$$D(a) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D(b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Jede Permutation der drei Ecken ist so erreichbar. Tatsächlich haben wir also eine 2-dimensionale Darstellung der symmetrischen Gruppe  $S_3$  konstruiert, wobei irrationale Zahlen unter den Matrixelementen auftreten. Dies läßt sich vermeiden. Dieselben Decktransformationen können wir nämlich auch anders beschreiben. Seien  $e_1, e_2$  und  $e_3$  die drei Vektoren vom Mittelpunkt zu den Eckpunkten des Dreiecks. Es gilt  $e_1 + e_2 + e_3 = 0$ , und die Gruppe  $S_3$  permutiert diese Vektoren. Je zwei dieser Vektoren bilden eine Basis aller Vektoren der Ebene. Wir wählen  $e_1$  und  $e_2$  und

$$a : e_1 \mapsto e_2, e_2 \mapsto e_3, e_3 \mapsto e_1$$

$$b : e_1 \mapsto e_2, e_2 \mapsto e_1, e_3 \mapsto e_3$$

In Matrixschreibweise:

$$D'(a) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad D'(b) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Auf diese Weise haben wir erreicht, daß alle Darstellungsmatrizen nur *ganzzahlige* Matrixelemente besitzen. Für die Kristallographie ist eine solche Darstellung von großem Vorteil. Obwohl die Darstellungen  $D$  und  $D'$  an sich verschieden sind (die Matrizen sind verschieden), beschreiben beide Darstellungen dennoch *dieselben* linearen Transformationen der Ebene (in verschiedenen Koordinaten). Man würde sie damit als äquivalent empfinden. Was wir nun brauchen, ist ein allgemeiner Äquivalenzbegriff.

**Definition 6** Zwei Darstellungen  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  und  $D' : G \rightarrow \text{Aut}(L')$  mit  $\dim(L) = \dim(L') = n$  heißen äquivalent, wenn eine lineare und umkehrbare Abbildung  $T : L \rightarrow L'$  existiert, so daß

$$TD(g) = D'(g)T$$

für alle  $g \in G$  gilt.

Nachdem wir in beiden Räumen eine Basis gewählt haben und wir somit  $D(g)$  und  $D'(g)$  als Matrizen auffassen dürfen, besagt diese Definition gerade, daß eine nichtsinguläre  $n \times n$ -Matrix  $T$  existiert, so daß  $TD(g) = D'(g)T$  gilt, wobei wir es hier mit einer gewöhnlichen Matrixmultiplikation zutun haben.

## 2.3 Unitäre Darstellungen

In der Quantenmechanik ist man vorwiegend an Darstellungen einer Gruppe durch unitäre Operatoren auf einem Hilbertraum interessiert. Wir werden deshalb annehmen, daß der Darstellungsraum  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum ist, und werden mit  $\text{Aut}(\mathcal{H})$  die Gruppe aller invertierbaren linearen Transformationen  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  bezeichnen, die das Skalarprodukt invariant lassen. Damit ist  $\text{Aut}(\mathcal{H})$  als die Gruppe aller unitären Operatoren  $U$  auf  $\mathcal{H}$  gekennzeichnet. Nach Wahl einer Basis<sup>5</sup> wird  $U$  zu einer endlichen oder unendlichen Matrix.

**Definition 7** *Ein Homomorphismus  $D : G \rightarrow \text{Aut}(\mathcal{H})$  heißt unitäre Darstellung der Gruppe  $G$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ .*

Man könnte nun meinen, daß durch die Forderung der Unitarität der Spielraum stark eingeschränkt ist. Daß diese Besorgnis für endliche (oder auch kompakte) Gruppen unberechtigt ist, zeigt das folgende klassische (A.Hurwitz zugeschriebene) Ergebnis.

**Satz 3** *Jede lineare Darstellung einer endlichen Gruppe auf einem Vektorraum endlicher Dimension ist bezüglich eines geeignet gewählten Skalarproduktes unitär.*

Zum Beweis betrachten wir eine Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$ , wobei  $L$  lediglich ein linearer Raum ist, dessen Dimension wir als endlich annehmen. Das Skalarprodukt auf  $L$  wird in zwei Schritten konstruiert:

1. Wähle eine Basis  $\{e_i\}$  in  $L$  und definiere mit ihrer Hilfe ein vorläufiges Skalarprodukt  $\langle x, y \rangle = \sum \bar{x}_i y_i$ , wobei  $x = \sum x_i e_i$  und  $y = \sum y_i e_i$  beliebige Vektoren in  $L$  sind.

---

<sup>5</sup>Unter einer Basis in einem Hilbertraum verstehen wir stets ein orthonormiertes vollständiges System von Vektoren.

2. Definiere das endgültige Skalarprodukt als

$$(x, y) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \langle D(g)x, D(g)y \rangle$$

Es besitzt durch Konstruktion die Eigenschaft

$$(D(g)x, D(g)y) = (x, y)$$

für jedes  $g \in G$ .  $\square$

Bemerkung: Die Art des Beweises zeigt, daß der Satz verallgemeinerungsfähig ist. Ist nämlich  $G$  eine kompakte Gruppe, so existiert auf ihr ein invariantes Maß  $\mu$  mit  $\mu(G) = 1$ , das man das Haarsche Maß nennt. Zur Konstruktion des Skalarproduktes können wir dann ein Integral an die Stelle der Summe setzen:

$$(x, y) = \int d\mu(g) \langle D(g)x, D(g)y \rangle$$

Das ursprüngliche Skalarprodukt  $\langle x, y \rangle$  könnte vorgegeben sein: Wir beginnen also mit einer linearen und stetigen Darstellung der kompakten Gruppe  $G$  durch beschränkte (nicht notwendig unitäre) Operatoren auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Durch eine Änderung des Skalarproduktes kann erreicht werden, daß diese Darstellung unitär wird.

Viele Gruppen, die man in der Physik betrachtet, sind nicht kompakt, wohl aber lokalkompakt: So etwa die Gruppe der Translationen, die euklidische Gruppe, die Galilei-Gruppe und die Lorentz-Gruppe. Auch für eine lokalkompakte (nichtkompakte) Gruppe  $G$  existiert stets ein invariantes Maß  $\mu$ . Es ist jedoch nicht normierbar<sup>6</sup>:  $\mu(G) = \infty$ . In dieser Situation kann nicht bewiesen werden, daß das Integral in der Formel für  $(x, y)$  wohldefiniert ist, und der Beweis versagt. Für die Klasse der lokalkompakten Gruppen genügt es also nicht, sich auf das Studium der unitären Darstellungen zu beschränken.

---

<sup>6</sup>Man sieht dies am besten an der Gruppe der Translationen, die formal mit der additiven Gruppe  $\mathbf{R}^3$  übereinstimmt. Hier stimmt das Haarsche Maß mit dem Lebesgueschen Maß überein:  $d\mu(x) = dx_1 dx_2 dx_3$ .

## 2.4 Reduzibilität

Wir kehren zur allgemeinen Situation einer linearen Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  zurück. Mitunter ist es möglich, eine solche Darstellung in einfachere Bestandteile zu zerlegen.

**Definition 8** Ein Teilraum  $L_1 \subset L$  heißt invariant, wenn  $D(g)L_1 \subset L_1$  für alle  $g \in G$  gilt. Ist  $L_1$  ein echter<sup>7</sup> Teilraum von  $L$ , so heißt die Darstellung  $D$  reduzibel. In einem solchen Fall definiert die Einschränkung aller Darsteller  $D(g)$  auf  $L_1$  eine Teildarstellung  $D_1 : G \rightarrow \text{Aut}(L_1)$ , und wir schreiben  $D_1 \subset D$ . Eine Darstellung, die keinen echten invarianten Teilraum besitzt, heißt irreduzibel.

Wir wollen nun annehmen, daß  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  reduzibel sei mit  $\dim(L) = n$  und  $\dim(L_1) = n_1 < n$ . Wir können dann durch eine geeignete Wahl der Basis in  $L$  erreichen, daß alle darstellenden Matrizen die folgende Blockstruktur annehmen:

$$D(g) = \left( \begin{array}{c|c} D_1(g) & Q(g) \\ \hline 0 & D_2(g) \end{array} \right) \quad (2.9)$$

Für beliebige  $g, h \in G$  gilt  $D(gh) = D(g)D(h)$ . Dies ist äquivalent den Bedingungen:

$$\begin{aligned} D_i(gh) &= D_i(g)D_i(h) \quad , \quad i = 1, 2 \\ Q(gh) &= D_1(g)Q(h) + Q(g)D_2(h) \end{aligned}$$

Hieraus wird deutlich, daß sowohl  $D_1$  als auch  $D_2$  Matrixdarstellungen der Gruppe  $G$  sind, wobei  $D_1 \subset D$  gilt. Für  $D_2 \subset D$  ist jedoch  $Q = 0$  notwendig<sup>8</sup>.

**Definition 9** Die Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  zerfällt und ist direkte Summe zweier Teildarstellungen  $D_1$  und  $D_2$ , wenn nach Wahl einer geeigneten Basis in  $L$  eine Blockstruktur (2.9) erreicht werden kann, so daß darin  $Q = 0$  gilt. Wir schreiben dann abkürzend  $D = D_1 \oplus D_2$  und sagen,  $D$  sei die direkte Summe der Darstellungen  $D_1$  und  $D_2$ .

<sup>7</sup>Ein Teilraum  $L_1 \subset L$  soll *echt* heißen, wenn weder  $L_1 = 0$  noch  $L_1 = L$  gilt. Es ist üblich, den trivialen Raum  $\{0\}$ , der nur aus dem Nullvektor besteht, selbst mit  $0$  zu bezeichnen.

<sup>8</sup> $Q(g)$  ist eine  $n_1 \times (n - n_1)$ -Matrix. Wie bei Funktionen üblich, schreibt man  $Q = 0$ , falls  $Q(g) = 0$  für alle  $g \in G$  gilt.

Nehmen wir an, wir hätten bereits einen invarianten Teilraum einer gegebenen Darstellung gefunden. Die entscheidende Frage lautet dann: Zerfällt die Darstellung? Die Frage läßt sich nicht dadurch beantworten, daß man für irgendeine Basis, die auf die Dreiecksblockstruktur (2.9) führt, nachprüft, ob hierin  $Q = 0$  gilt. Im allgemeinen wird dies nicht erfüllt sein. Vielmehr muß untersucht werden, ob es überhaupt eine Basis gibt, für die die Bedingung  $Q = 0$  erfüllt ist. Diese schwierige Arbeit wird uns abgenommen, wenn  $D : G \rightarrow \text{Aut}(\mathcal{H})$  eine unitäre Darstellung auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist: Haben wir nämlich in  $\mathcal{H}_1$  einen (abgeschlossenen) invarianten Teilraum von  $\mathcal{H}$  gefunden, so ist auch sein orthogonales Komplement  $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1^\perp$  ein (abgeschlossener) invarianter Teilraum, wie man sehr leicht beweist. Es gilt sodann  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$  und  $D = D_1 \oplus D_2$ . Mit anderen Worten:

**Satz 4** *Jede reduzible unitäre Darstellung zerfällt.*

In der allgemeinen Situation einer linearen (nicht notwendig unitären) Darstellung kommt uns der Satz 3 zu Hilfe, der uns gestattet, bei endlichen Gruppen und endlich-dimensionalen Räumen, eine Hilbertraumstruktur zu finden, durch die die Darstellung unitär wird. Deshalb haben wir das wichtige Ergebnis:

**Satz 5** *Jede reduzible Darstellung einer endlichen Gruppe zerfällt.*

Bemerkung: Auch dieser Satz kann sinngemäß auf kompakte Gruppen ausgedehnt werden. Dazu beachte man die Bemerkung im vorigen Abschnitt.

Daß lokalkompakte (aber nichtkompakte) Gruppen reduzible nicht-zerfallende Darstellungen besitzen, zeigen wir nun an drei markanten Beispielen.

**1. Beispiel** Durch

$$D(z) = \begin{pmatrix} 1 & z \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad z \in \mathbf{C} \quad (2.10)$$

wird eine zweidimensionale reduzible Darstellung der additiven Gruppe der komplexen Zahlen beschrieben. Sie zerfällt nicht; denn für jedes  $z \neq 0$  besitzt die Matrix  $z^{-1}D(z)$  Jordan-Gestalt. Aus der Algebra ist

bekannt, daß eine Jordan-Matrix der Dimension  $n > 1$  nicht diagonalisierbar ist.

**2.Beispiel** Durch

$$D(a, R) = \begin{pmatrix} R & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R \in O(n), \quad a \in \mathbf{R}^n \quad (2.11)$$

wird eine  $(n + 1)$ -dimensionale Darstellung der euklidischen Gruppe  $E(n)$  beschrieben (s.S.26). Sie besitzt die Teildarstellung  $D_1(a, R) = R$ , zerfällt aber nicht.

**3.Beispiel** Die nichtrelativistischen Transformationen von Raum und Zeit

$$\begin{aligned} x' &= Rx + vt + a \\ t' &= t + \tau \end{aligned} \quad R \in O(3), \quad v, a \in \mathbf{R}^3, \quad \tau \in \mathbf{R} \quad (2.12)$$

bilden die *volle Galilei-Gruppe*. Eine treue 5-dimensionale Darstellung dieser Gruppe ist, wie man sich leicht überzeugt, durch

$$D(\tau, a, v, R) = \begin{pmatrix} R & v & a \\ 0 & 1 & \tau \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

gegeben. Sie zerfällt nicht, obwohl sie zwei Teildarstellungen<sup>9</sup> enthält.

Wir haben diskutiert, welche Vereinfachungen sich ergeben, wenn eine Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  einen invarianten Teilraum besitzt. Möglicherweise besitzt eine Darstellung mehrere invariante Teilräume, und das Verfahren der Vereinfachung läßt sich solange fortsetzen, bis die Darsteller nach Wahl einer diesen Teilräumen angepaßten Basis alle die Blockdreiecksgestalt

$$D(g) = \begin{pmatrix} D_1(g) & \bullet & \cdots & \bullet \\ 0 & D_2(g) & \ddots & \bullet \\ \vdots & \ddots & \ddots & \bullet \\ 0 & \cdots & 0 & D_n(g) \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

---

<sup>9</sup>Die Darsteller sind  $R$  bzw.  $\begin{pmatrix} R & v \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .

annehmen, wobei die Reduktion notwendigerweise dadurch ein Ende findet, daß schließlich alle Darstellungen  $D_i$  irreduzibel werden (also keine echten invarianten Teilräume mehr besitzen). Können wir die Basis sogar so einrichten, daß alle Blöcke oberhalb der Blockdiagonale verschwinden, so zerfällt die Darstellung  $D$  vollständig in irreduzible Teildarstellungen  $D_i$ , und wir schreiben dann kurz  $D = D_1 \oplus D_2 \oplus \cdots \oplus D_n$  oder auch

$$D = \bigoplus_{i=1}^n D_i \quad (2.15)$$

Sind in dieser Zerlegung einige Teildarstellungen äquivalent, so fassen wir sie zusammen und schreiben

$$D = m_1 D_1 \oplus m_2 D_2 \oplus \cdots \quad (2.16)$$

wobei jede Zahl  $m_i$  die Vielfachheit<sup>10</sup> angibt, mit der  $D_i$  in  $D$  vorkommt. Wir nennen auch  $m_i$  die *Multiplizität* von  $D_i$  in  $D$ .

**Definition 10** *Eine Darstellung, die direkte Summe irreduzibler Darstellungen oder selbst irreduzibel ist, heißt vollreduzibel oder diskret reduzibel.*

Wir haben gelernt, daß unitäre Darstellungen automatisch zerfallen, wenn sie reduzibel sind. Sind die (unitären) Teildarstellungen reduzibel, zerfallen sie wiederum, und so weiter. Es mag scheinen, daß durch diesen Vorgang man schließlich die gewünschte Zerlegung der Darstellung in irreduzible Bestandteile erreicht. Dies ist aber in  $\infty$ -dimensionalen Räumen im allgemeinen nicht garantiert. Ein Ende der Zerlegung ist nur abzusehen, wenn es *minimale* invariante Teilräume gibt. Diese brauchen jedoch nicht zu existieren, wie wir uns an einem sehr einfachen Beispiel klar machen können. Die Darstellung (1.24) der Translationen für ein Schrödinger-Teilchen besitzt viele invariante Teilräume. Jeder dieser Räume kann beschrieben werden als Gesamtheit aller Wellenfunktionen, deren Impulsspektrum in einer festen Teilmenge  $B$  des Impulsraumes beheimatet ist:

$$\phi(x) = \int_B d^3 p e^{ipx} \tilde{\phi}(p) \quad (2.17)$$

---

<sup>10</sup>Da wir zulassen, daß die Dimension des Darstellungsraumes abzählbar unendlich ist, wollen wir auch  $m_i = \infty$  als möglichen Wert zulassen.

Die Menge  $B \subset \mathbf{R}^3$  muß meßbar sein und ein positives Maß besitzen. Minimale Mengen dieser Art gibt es aber nicht; die Darstellung ist nicht diskret reduzibel. Tatsächlich leistet das Fourierintegral hier die Zerlegung in irreduzible Bestandteile: Ein Integral tritt an die Stelle der Summe, und diese Erscheinung ist charakteristisch für viele nicht-kompakte Gruppen.

Für kompakte Gruppen ist die Situation günstiger. Insbesondere können wir im Spezialfall der endlichen Gruppen aufgrund der Ergebnisse des letzten Abschnittes feststellen:

**Satz 6** *Jede endlich-dimensionale Darstellung einer endlichen Gruppe ist diskret reduzibel.*

In Hinblick auf die Anwendungen in der Quantenmechanik bedeutsamer ist jedoch das Pendant dazu:

**Satz 7** (Peter-Weyl) *Jede unitäre Darstellung einer kompakten Gruppe ist diskret reduzibel, und die irreduziblen unitären Darstellungen haben alle endliche Dimension.*

Bemerkung: Natürlich läßt das Peter-Weyl-Theorem die Möglichkeit zu, daß in der Zerlegung  $D = D_1 \oplus D_2 \oplus \dots$  unendlich viele Summanden auftreten. Wichtig ist nur die Aussage, daß die Zerlegung in Form einer Summe und nicht in Form eines Integrals geschieht<sup>11</sup>. Dieses fundamentale Theorem ebnet den Weg zur Behandlung wichtiger Gruppen in der Quantenphysik, so der  $SO(n)$ -Gruppen, der  $SU(n)$ -Gruppen und anderer.

Eine Besonderheit der endlichen Gruppen soll hier noch ohne Beweis mitgeteilt werden: Die Anzahl  $k$  der Klassen zueinander inäquivalenten irreduziblen Darstellungen einer endlichen Gruppe  $G$  ist endlich. Bezeichnen wir die Dimensionen dieser Darstellungen mit  $n_1, n_2, \dots, n_k$  und setzen

$$n(G, s) = n_1^s + n_2^s + \dots + n_k^s \quad (2.18)$$

---

<sup>11</sup>Ein Problem, das hier nicht näher erörtert wird, ist die Eindeutigkeit der Zerlegung (bis auf Äquivalenz). Auch diese Frage kann positiv entschieden werden für die hier betrachteten Gruppen. Dies ist aber keinesfalls selbstverständlich, wie aus Gegenbeispielen hervorgeht, die man bei einigen nichtkompakten Gruppen und Integralzerlegungen ihrer Darstellungen findet.

so haben wir auf diese Weise charakteristische Zahlen  $n(G, s)$  ( $s=0,1,2,\dots$ ) der Gruppe  $G$  definiert. Für gewisse Werte von  $s$  haben diese Zahlen eine elementare Bedeutung<sup>12</sup>:

**Satz 8** (Burnside)

$$n(G, 0) = k = \text{Anzahl der Klassen von } G \quad (2.19)$$

$$n(G, 2) = |G| = \text{Ordnung von } G. \quad (2.20)$$

Für eine endliche Gruppe ist es daher möglich, eine Liste aller irreduzibler Darstellungen anzulegen (also eine Liste endlich vieler Matrizen) und anhand des Relations des Burnside-Theorems zu überprüfen, ob diese Liste vollständig ist.

**Beispiel** Die symmetrische Gruppe  $S_3$  enthält 6 Elemente in 3 Klassen. Die Relation  $6 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$  besitzt nur eine Lösung:  $n_1 = n_2 = 1, n_3 = 2$ . Die drei irreduziblen Darstellungen mit den Dimensionen 1,1,2 sind uns bereits bekannt. Es handelt sich um die triviale Darstellung  $D_1 = 1$ , die alternierende Darstellung  $D_2 = \pm 1$  (siehe (2.8)) und die Darstellung, die durch die Decktransformationen eines gleichseitigen Dreiecks (siehe S.29) beschrieben wird. Diese Liste ist vollständig; jede weitere irreduzible Darstellung muß zu einer Darstellung in dieser Liste äquivalent sein.

## 2.5 Zwei Sätze von Schur

Zerfällt eine gegebene Darstellung in Teildarstellungen, so können wir, ohne auf die invarianten Teilräume eingehen zu müssen, den Zerfall auch rein algebraisch charakterisieren. Grob gesprochen: je mehr Operatoren mit einer gegebenen Darstellung vertauschen, umso "reduzibler" erweist sie sich.

Wir beginnen mit der einfachsten Situation: Die Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  habe die invarianten Teilräume  $L_1$  und  $L_2$  und es gelte  $L = L_1 \oplus L_2$ . Die Darstellung ist damit blockdiagonal, d.h. sie zerfällt. Ein Operator  $P : L \rightarrow L$  mit  $0 \neq P^2 = P \neq 1$  heißt *Projektor*. Jede

---

<sup>12</sup>Zwei Gruppenelemente  $g_1$  und  $g_2$  gehören zur selben Klasse, wenn sie konjugiert zueinander sind, d.h. wenn ein Element  $h$  in der Gruppe existiert, so daß  $g_1 h = h g_2$  gilt.

Zerlegung  $L = L_1 \oplus L_2$  gibt Anlaß zu einem Projektor  $P$  (er annulliert Vektoren in  $L_2$ ). Umgekehrt definiert jeder Projektor in eindeutiger Weise eine Aufspaltung des Raumes  $L$  in zwei direkte Summanden. In unserer Situation genügt also die Angabe eines Projektors  $P$  mit der Eigenschaft<sup>13</sup>

$$D(g)P = PD(g) \quad \text{für alle } g \in G \quad (2.21)$$

Wir wollen nun annehmen, daß die Darstellung  $D$  diskret reduzibel ist und in  $n$  irreduzible Bestandteile zerfällt. In dieser Situation existieren *minimale* Projektoren  $P_1, \dots, P_n$ , so daß

$$P_i P_k = 0 \quad (i \neq k) \quad (2.22)$$

$$P_1 + \dots + P_n = 1 \quad (2.23)$$

$$D(g)P_i = P_i D(g) \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2.24)$$

Daraus folgt unmittelbar, daß *alle Operatoren*  $A$ , deren Spektralzerlegung die Form

$$A = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \dots + \lambda_n P_n \quad (\lambda_i \in \mathbf{C}) \quad (2.25)$$

annimmt, mit der Darstellung  $D$  vertauschen:  $D(g)A = AD(g)$ . Unter Umständen hat man auf diese Weise alle Operatoren  $A$  konstruiert, die mit  $D$  vertauschen. Ist dies der Fall, so formen die mit  $D$  vertauschbaren Operatoren eine abelsche Algebra. Es kann aber durchaus sein, daß weitere Operatoren  $A$  mit  $D(g)A = AD(g)$  existieren, die nicht die Form (2.25) besitzen. Dies wird immer dann der Fall sein, wenn zwei irreduzible Teildarstellungen von  $D$  zueinander äquivalent sind: Operatoren  $A$ , die lediglich eine Permutation solcher Teildarstellungen bewirken, haben nicht die Gestalt (2.25). Hier verliert die Algebra der Operatoren  $A$  mit  $D(g)A = AD(g)$  die Eigenschaft abelsch zu sein; sie sind dann nicht mehr gemeinsam diagonalisierbar. Der Verlust dieser Eigenschaft ist verknüpft mit dem Auftreten einer *Multiplizität*  $> 1$ , d.h. einer Vielfachheit, mit der die irreduziblen Teildarstellungen in  $D$  auftreten. Wenn nämlich in der Zerlegung (2.16)  $m_i > 1$  für wenigstens

---

<sup>13</sup>Es ist trivial, daß die gleiche Relation für den komplementären Projektor  $Q = 1 - P$  gilt, wenn sie für  $P$  erfüllt ist. Man mache sich folgendes klar: Die schwächere Bedingung  $PD(g)P = D(g)P$  besagt, daß die Darstellung reduzibel ist, d.h. sie besitzt die Blockdreiecksgestalt (2.9).

ein  $i$  gilt, so ist die Darstellung nicht multiplizitätsfrei. Wir kommen nun zu dem allgemeinen Begriff.

**Definition 11** Seien  $D$  und  $D'$  Darstellungen der gleichen Gruppe  $G$  auf linearen Räumen  $L$  und  $L'$ , so bezeichnen wir mit  $\mathcal{R}(D, D')$  den linearen Raum aller linearen Abbildungen<sup>14</sup>  $A : L \rightarrow L'$  mit  $D'(g)A = AD(g)$  für alle  $g \in G$ . Für  $D = D'$  ist  $\mathcal{R}(D, D)$  ist eine Algebra. Die Darstellung  $D$  heißt multiplizitätsfrei, wenn  $\mathcal{R}(D, D)$  abelsch ist.

Was ist gewonnen, wenn wir, statt von Teilräumen zu reden, nur noch von Abbildungen sprechen, die zwei Darstellungen  $D$  und  $D'$  miteinander verbinden? Die erste erfreuliche Nachricht kommt uns von einem Satz (der oft das 1.Schursche Lemma genannt wird):

**Satz 9** (Schur) Sind  $D$  und  $D'$  irreduzible Darstellungen einer Gruppe  $G$  auf (endlich-dimensionalen) Räumen  $L$  und  $L'$ , so ist jedes  $A \in \mathcal{R}(D, D')$  entweder ein Isomorphismus oder es gilt  $A = 0$ .

Beweis. Sei  $A \in \mathcal{R}(D, D')$  und  $A \neq 0$ . Offenbar sind

$$\text{Ker}(A) = \{x \in L : Ax = 0\} \quad (2.26)$$

$$\text{Im}(A) = \{Ax \in L' : x \in L\} \quad (2.27)$$

invariante Teilräume bezüglich  $D$  bzw.  $D'$ . Da aber beide Darstellungen nach Voraussetzung keine echten Teilräume besitzen, kommen nur vier Fälle in Betracht:

$$\text{Ker}(A) = 0, \text{Im}(A) = 0 \quad \implies \quad T = 0$$

$$\text{Ker}(A) = L, \text{Im}(A) = 0 \quad \implies \quad T = 0$$

$$\text{Ker}(A) = 0, \text{Im}(A) = L' \quad \implies \quad T = \text{Isomorphismus}$$

$$\text{Ker}(A) = L, \text{Im}(A) = L' \quad \implies \quad \text{Widerspruch} \quad \square$$

Dieser Satz hat eine bemerkenswerte Konsequenz, wenn wir hierin  $D = D'$  setzen (bekannt als 2.Schursches Lemma):

---

<sup>14</sup>In der englischsprachigen Literatur heißen solche Abbildungen *intertwining maps*, also etwa "Verflechtungsabbildungen".

**Satz 10** (Schur) *Ist  $D$  eine irreduzible Darstellung einer Gruppe  $G$  auf einem Raum  $L$  endlicher Dimension, so gilt  $\mathcal{R}(D, D) = \{\lambda 1 : \lambda \in \mathbf{C}\}$ . In Worten: Nur die Vielfachen des Einheitsoperators vertauschen mit einer irreduziblen Darstellung.*

Beweis: Sei  $A \in \mathcal{R}(D, D)$ . Nach Wahl einer Basis in  $L$  können wir  $A$  als Matrix auffassen. Der Fundamentalsatz der Algebra garantiert, daß  $\det(A - \lambda 1) = 0$  eine Lösung  $\lambda \in \mathbf{C}$  besitzt. Für dieses  $\lambda$  ist  $A - \lambda 1$  nicht invertierbar, also kein Isomorphismus. Andererseits gilt  $A - \lambda 1 \in \mathcal{R}(D, D)$ . Deshalb folgt  $A - \lambda 1 = 0$  aufgrund des vorhergehenden Satzes.  $\square$

Dieser Satz endlich hat viele bedeutende Anwendungen. Eine davon betrifft die abelschen Gruppen.

**Satz 11** *Jede irreduzible Darstellung einer abelschen Gruppe ist eindimensional.*

Beweis: Aus  $gh = hg$ , gültig in abelschen Gruppen, folgt  $D(g)D(h) = D(h)D(g)$  in einer Darstellung  $D$ . Ist  $D$  irreduzibel, so folgt aus dem vorhergehenden Satz  $D(h) = \lambda(h)1$ . Für eine solche Darstellung ist *jeder* Teilraum invariant, aber nur der eindimensionale Raum besitzt keine echten Teilräume. Folglich ist der Darstellungsraum eindimensional.  $\square$

Eine andere Anwendung betrifft die Physik unmittelbar.

**Satz 12** *Der Hamilton-Operator nimmt in irreduziblen Darstellungen von Symmetriegruppen einen Eigenwert an.*

Zum besseren Verständnis sei daran erinnert, daß der Hamilton-Operator  $H$  die Symmetriegruppe<sup>15</sup>  $G$  besitzt, wenn  $U(g)H = HU(g)$  mit  $g \in G$  für eine unitäre Darstellung  $U$  gilt, wobei alle Operatoren auf dem gleichen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  definiert sind. Nun kann  $U$  immer in irreduzible Bestandteile zerlegt werden:

$$U = U_1 \oplus U_2 \oplus \dots$$

---

<sup>15</sup>Damit die folgenden Betrachtungen mathematisch korrekt sind, wollen wir annehmen, daß  $G$  eine kompakte Gruppe ist. Mit etwas mehr Aufwand ist es möglich, auch nichtkompakte Gruppen und die damit verbundenen Integralzerlegungen in die Betrachtung einzubeziehen.

Betrachten wir etwa den Teilraum  $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$ , auf dem die Darstellung  $U_1$  wirkt, so gilt  $H\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$ ; denn  $H$  und  $U(g)$  sind gemeinsam diagonalisierbar. Die Einschränkung des Hamilton-Operators auf den Teilraum  $\mathcal{H}_1$  wollen wir mit  $H_1$  bezeichnen. Es gilt  $H_1 \in \mathcal{R}(U_1, U_1)$  und damit  $H_1 = E_1 1$  für ein reelles  $E_1$ , den Energie-Eigenwert von  $H$  in der Darstellung  $U_1$ . Sei  $n = \dim(\mathcal{H}_1)$ , so nennt man  $n$  die *Multipizität* oder den *Entartungsgrad* des Eigenwertes  $E_1$ . Man sagt auch der Eigenwert sei  $n$ -fach entartet.

In der Quantenphysik ist die Entartung von Energie-Eigenwerten eine häufig beobachtete Erscheinung. Es gehört zu den festen Glaubenssätzen des Physikers, daß eine Entartung stets ihren Ursprung in einer (möglicherweise verborgenen) Symmetrie des Problems hat, so daß der Entartungsgrad  $n$  als Dimension einer irreduziblen Darstellung erklärt werden kann. Als Folge dieser Auffassung gibt es keine "zufällige" Entartung. Eine Störung dieser Symmetrie kann die Entartung dann auch wieder aufheben. So führt das Einschalten eines Magnetfeldes bekanntlich zum Zeeman-Effekt.

Es gibt weitere Gründe, warum die algebraische Betrachtungsweise nützlich ist, warum lineare Abbildungen und Operatoren Vorrang vor Vektoren und Teilräumen haben. Ein wichtiges Argument ist, daß wir  $\mathcal{R}(D, D')$  konstruieren können, wie wir nun zeigen wollen.

**Satz 13** *Sei  $G$  eine endliche (allgemeiner: kompakte) Gruppe,  $D$  und  $D'$  zwei Darstellungen von  $G$  auf den Räumen  $L$  und  $L'$ . Für eine beliebige lineare Abbildung  $A : L \rightarrow L'$  sei  $A_0 : L \rightarrow L'$  durch*

$$A_0 = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} D'(g) A D(g^{-1}) \quad (2.28)$$

*definiert. Dann ist  $A_0 \in \mathcal{R}(D, D')$  und jedes Element von  $\mathcal{R}(D, D')$  kann auf diese Weise erhalten werden. Ist  $G$  eine kompakte Gruppe mit dem Haarschen Maß  $\mu$ , so lautet die (2.28) analoge Formel:*

$$A_0 = \int d\mu(g) D'(g) A D(g^{-1}) \quad (2.29)$$

Beweis: Durch unmittelbare Rechnung bestätigt man  $D'(g)A_0 = A_0D(g)$ , also  $A_0 \in \mathcal{R}(D, D')$ . Ist nun  $A$  bereits in  $\mathcal{R}(D, D')$ , so zeigt die Konstruktion, daß  $A = A_0$  gilt.  $\square$

Diese so nützliche Mittelung über die Gruppe kann in verschiedenen physikalischen Situationen eingesetzt werden. Sei etwa  $U : G \rightarrow \text{Aut}(\mathcal{H})$  eine unitäre Darstellung einer Gruppe  $G$ , die nur "näherungsweise" als eine Symmetriegruppe für den Hamilton-Operators  $H$  (mit dem Zustandsraum  $\mathcal{H}$ ) aufgefaßt werden kann. Wir definieren dann den symmetrischen Anteil von  $H$  als

$$H_0 = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} U(g) H U(g^{-1}) \quad (2.30)$$

bzw.

$$H_0 = \int d\mu(g) U(g) H U(g^{-1}) \quad (2.31)$$

Ist  $H$  selbstadjungiert, so auch  $H_0$ . Wir schreiben sodann

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.32)$$

und nennen  $H_1$  den *symmetrieverletzenden Anteil* des Energie-Operators. In günstigen Situationen ist  $H_0$  durch Ausnutzung der Symmetrie leicht zu diagonalieren und  $H_1$  so beschaffen, daß eine störungstheoretische Behandlung möglich ist.

**1.Beispiel.** In (2.53) wurde der Paritätsoperator  $P$  eingeführt. Ein Hamilton-Operator  $H$ , der nicht mit  $P$  vertauscht, wird *paritätsverletzend* genannt. Ein solcher Operator besitzt die kanonische Zerlegung  $H = H_0 + H_1$  in einen paritätserhaltenden Anteil,

$$H_0 = \frac{1}{2}(H + PHP), \quad (2.33)$$

und in einen Anteil,

$$H_1 = \frac{1}{2}(H - PHP), \quad (2.34)$$

der die Parität eines Zustandes umkehrt. Man nennt  $H_0$  auch einen *skalaren* und  $H_1$  einen *pseudoskalaren* Operator aufgrund dieses Verhaltens unter  $P$ .

**2.Beispiel.** Ein asymmetrischer Kreisel wird durch den Hamilton-Operator

$$H = \frac{J_1^2}{2\Theta_1} + \frac{J_2^2}{2\Theta_2} + \frac{J_3^2}{2\Theta_3} \quad (2.35)$$

beschrieben, wobei  $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)$  der körperfesten Drehimpuls ist. Der Operator besitzt die Zerlegung  $H = H_0 + H_1$  in einen rotations-symmetrischen Anteil,

$$H_0 = \frac{\mathbf{J}^2}{2\Theta} \quad , \quad \frac{1}{\Theta} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\Theta_1} + \frac{1}{\Theta_2} + \frac{1}{\Theta_3} \right) \quad (2.36)$$

und einen symmetriebrechenden Term

$$H_1 = \epsilon_1 J_1^2 + \epsilon_2 J_2^2 + \epsilon_3 J_3^2 \quad , \quad \epsilon_i = \frac{1}{\Theta_i} - \frac{1}{\Theta} \quad (2.37)$$

mit  $\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 = 0$ .

## 2.6 Orthogonalitätsrelationen

In diesem Abschnitt betrachten wir nur Darstellungen, die irreduzibel sind. Wir wollen die fundamentalen Sätze von Schur auf sie anwenden und zeigen, daß wir aus ihnen weitere interessante Relationen herleiten können. Wir müssen zuvor die folgende Frage beantworten: Wenn zwei Darstellungen  $D$  und  $D'$  äquivalent sind, was läßt sich über den Raum  $\mathcal{R}(D, D')$  sagen? Offensichtlich gilt: Jedes Element  $A \in \mathcal{R}(D, D')$  mit  $A \neq 0$  ist ein Isomorphismus (1.Lemma von Schur). Sind  $A$  und  $A'$  zwei nichtverschwindende Elemente in  $\mathcal{R}(D, D')$ , so sind sie linear abhängig:  $A = \lambda A'$ . Denn  $A^{-1}A' \in \mathcal{R}(D, D)$ , also  $A^{-1}A' = \lambda 1$  (2.Lemma von Schur). Damit gilt:

$$\dim \mathcal{R}(D, D') = \begin{cases} 1 & D \text{ und } D' \text{ sind äquivalent} \\ 0 & D \text{ und } D' \text{ sind inäquivalent} \end{cases} \quad (2.38)$$

Das Ergebnis ist einer Orthogonalitätsrelation schon sehr ähnlich. Haben wir ein weiteres Werkzeug, die Mittelung über die Gruppe, zur Verfügung, so können wir daraus Orthogonalitätsrelationen für die Matrizen von irreduziblen Darstellungen ableiten. Wir wollen zunächst annehmen, die Gruppe  $G$  sei endlich.

**1.Fall.**  $D$  und  $D'$  sind äquivalent, gleichbedeutend mit  $\mathcal{R}(D, D') = \{\lambda I : \lambda \in \mathbf{C}\}$  für einen gewissen Isomorphismus  $I : L \rightarrow L'$ . Sei  $\{e_i\}$  eine Basis in  $L$  und  $\{Ie_i\}$  die korrespondierende Basis in  $L'$ . Dann sind

die darstellenden Matrizen in beiden Darstellungen gleich, und es ist nicht länger nötig, sie voneinander zu unterscheiden. Für eine beliebige Matrix  $A$  gilt dann

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} D(g)AD(g^{-1}) = \lambda 1 \quad (2.39)$$

wobei es gelingt,  $\lambda$  durch Spurbildung auf beiden Seiten zu berechnen:  $\text{Spur}A = n\lambda$  ( $\dim L = \dim L' = n$ ). Sei speziell  $A$  diejenige Matrix, die an der Stelle  $(j, k)$  eine 1 und sonst nur Nullen aufweist, so ist  $\text{Spur}A = \delta_{jk}$  und somit

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} D_{ij}(g)D_{k\ell}(g^{-1}) = \frac{1}{n} \delta_{i\ell} \delta_{jk} \quad (2.40)$$

**2.Fall.**  $D$  und  $D'$  sind inäquivalent, gleichbedeutend mit  $\mathcal{R}(D, D') = \{0\}$ . Wir wählen eine beliebige Basis  $\{e_i\}$ ,  $i = 1, \dots, n$  in  $L$  und eine beliebige Basis  $\{e'_j\}$ ,  $j = 1, \dots, n'$  in  $L'$ . Für eine beliebige  $n' \times n$ -Matrix  $A$  ist  $\sum_g D(g)AD'(g) = 0$  und somit

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} D_{ij}(g)D'_{k\ell}(g^{-1}) = 0 \quad (2.41)$$

Selbstverständlich können die Orthogonalitätsrelationen (2.40-41) in einer solchen Weise verallgemeinert werden, daß sie für eine beliebige kompakte Gruppe  $G$  mit dem Haarschen Maß  $\mu$  Gültigkeit haben<sup>16</sup>:

$$\int d\mu(g) D_{ij}(g)D'_{k\ell}(g^{-1}) = \begin{cases} (1/n)\delta_{i\ell}\delta_{jk} & D = D' \\ 0 & D \neq D' \end{cases} \quad (2.42)$$

Erinnern wir uns daran, daß es keine Einschränkung bedeutet, wenn wir annehmen,  $D$  und  $D'$  seien *unitäre* Darstellungen: durch eine geeignete Wahl der Basis in  $L$  und  $L'$  ist also erreichbar, daß die Darsteller der Gruppe  $G$  unitäre Matrizen sind. In diesem Fall können wir in den obigen Formeln  $D'_{k\ell}(g^{-1})$  durch  $\overline{D'_{\ell k}(g)}$  ersetzen.

<sup>16</sup>Wir schreiben hier vereinfachend  $D \neq D'$ , falls  $D$  und  $D'$  nicht äquivalent sind.

## 2.7 Der Charakter einer Darstellung

Wir stellen nun die Frage nach den Invarianten: das sind Größen, die in äquivalenten Darstellungen gleich sind und somit die Äquivalenzklasse charakterisieren. Die wichtigste Invariante gewinnen wir durch Spurbildung:

**Definition 12** *Die komplexwertige Funktion*

$$\chi(g) = \text{Spur}D(g) \quad (2.43)$$

heißt Charakter der Darstellung  $D$ . Er wird primitiv genannt, wenn  $D$  irreduzibel ist.

Aus der Definition folgt unmittelbar, daß äquivalente Darstellungen den gleichen Charakter haben, ferner, daß der Charakter eine *Klassenfunktion* ist<sup>17</sup>, d.h.  $\forall g, h \in G : \chi(hgh^{-1}) = \chi(g)$ . Es gilt

$$\chi(g^{-1}) = \overline{\chi(g)} \quad (2.44)$$

falls  $G$  kompakt ist. Grund: die darstellenden Matrizen können als unitär angenommen werden. Für kompakte Gruppen haben wir in dem Charakter bereits ein vollständiges Invariantensystem, d.h. zwei Darstellungen mit demselben Charakter sind äquivalent. Dies ist *nicht* richtig für nichtkompakte Gruppen. Ein Beispiel: Die Darstellungen

$$D(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad D'(x) = \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

der additiven Gruppe der reellen Zahlen haben den gleichen Charakter  $\chi(x) = 2$ , sind aber nicht äquivalent.

Wir wollen uns jetzt vorstellen,

$$D_1, D_2, D_3, \dots$$

sei eine Liste von inäquivalenten und irreduziblen Darstellungen einer kompakten Gruppe mit Dimensionen  $n_i$ . Der Zerlegung  $D = m_1 D_1 \oplus$

---

<sup>17</sup>Mit anderen Worten:  $\chi$  nimmt jeder Ähnlichkeitsklasse von  $G$  einen konstanten Wert an. Beweis:  $\text{Spur}(D(h)D(g)D(h)^{-1}) = \text{Spur}D(g)$ .

$m_2 D_2 \oplus \dots$  einer Darstellung  $D$  nach irreduziblen Bestandteilen<sup>18</sup> entspricht eine ebensolche Zerlegung ihres Charakters  $\chi$ :

$$\chi = m_1 \chi_1 + m_2 \chi_2 + \dots \quad (2.46)$$

d.h. Charaktere von reduziblen Darstellungen lassen sich stets in eindeutiger Weise in primitive Charaktere zerlegen, wobei die Koeffizienten  $m_i$  gerade die Multiplizitäten und damit natürliche Zahlen sind. Für primitive Charaktere  $\chi_i$  folgt eine Orthogonalitätsrelation direkt aus den Ergebnissen des vorigen Abschnittes (vgl.(2.42)):

$$\int d\mu(g) \chi_i(g) \overline{\chi_k(g)} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases} \quad (2.47)$$

Führen wir die *Norm* eines Charakters durch

$$\|\chi\|^2 = \int d\mu(g) |\chi(g)|^2$$

ein, so finden wir unter der Zerlegung (2.46)

$$\|\chi\|^2 = m_1^2 + m_2^2 + \dots \quad (2.48)$$

Der minimale Wert der rechten Summe ist 1. Er tritt genau dann auf, wenn die Darstellung  $D$  irreduzibel ist. Also:

**Satz 14** *Eine Darstellung ist genau dann irreduzibel, wenn ihr Charakter die Norm 1 besitzt.*

Ein Blick in die Resultate des vorigen Abschnittes lehrt (vgl.(2.42)):

$$\int d\mu(g) D_i(g) \overline{\chi_k(g)} = \begin{cases} (1/n_i) 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases} \quad (2.49)$$

Hier bezeichnet "1" eine  $n_i$ -dimensionale Einheitsmatrix. Hieraus folgt unmittelbar eine Aussage für eine allgemeine Darstellung  $D$ , in der die irreduzible Darstellung  $D_k$  (Dimension  $n_k$ ) mit der Multiplizität  $m_k$  vorkommt: Der Operator

$$P_k = n_k \int d\mu(g) D(g) \overline{\chi_k(g)} \quad (2.50)$$

---

<sup>18</sup>Wir setzen  $m_i = 0$ , wenn  $D_i$  in der Zerlegung von  $D$  nicht auftritt. Im übrigen gilt  $m_i \geq 1$ .

ist ein *Projektor* in  $\mathcal{R}(D, D)$ . Er projiziert auf den invarianten Unterraum, der zur Teildarstellung  $m_k D_k$  gehört (dieser Teilraum hat die Dimension  $m_k n_k$ ). Wir sehen auf diese Weise, daß es ausreicht, eine Liste aller primitiven Charaktere einer kompakten Gruppe zu besitzen, um jede beliebige Darstellung soweit ausreduzieren zu können, daß wir die Teildarstellungen  $m_k D_k$  als elementare Bausteine erhalten. Für die Zerlegung eines "Konglomerats"  $m_k D_k$  in seine  $m_k$  Bestandteile gibt es dann kein kanonisches Verfahren mehr: jede weitere Zerlegung ist der Willkür des Physikers überlassen.

Sind wir nur daran interessiert zu erfahren, mit welcher Multiplizität  $m_k$  die Darstellung  $D_k$  in einer vorgelegten Darstellung  $D$  auftritt, so berechnen wir einfach den Charakter  $\chi(g) = \text{Spur} D(g)$  und projizieren auf  $\chi_k$ :

$$m_k = \int d\mu(g) \chi(g) \overline{\chi_k(g)} \quad (2.51)$$

Dies wird im weiteren Verlauf unserer Untersuchungen vom großen Nutzen sein.

# Kapitel 3

## Die Theorie der $SU(2)$

### 3.1 Wie dreht man den Spin?

Bei der Beschreibung des Spins eines einzelnen Elektrons benutzt man, wie schon im Abschnitt 1.4 erwähnt, die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Jede dieser Matrizen wirkt als Operator auf dem Hilbertraum  $\mathbf{C}^2$ . Zugleich fassen wir sie als Basisvektoren eines reellen 3-dimensionalen Raumes auf, dem Raum der hermiteschen spurfreien  $2 \times 2$ -Matrizen. Dieser Raum ist dem gewöhnlichen 3-dimensionalen euklidischen Raum isomorph, und wir können deshalb untersuchen, welche Wirkung ein Basiswechsel hat, wenn er durch eine Drehung des Koordinatensystems hervorgerufen wird. Zu jedem  $R \in SO(3)$  erhalten wir die "gedrehten" Pauli-Matrizen als

$$\sigma'_k = \sum_i R_{ik} \sigma_i \quad (3.2)$$

Die Frage lautet: Entspricht dieser Drehung eine Transformation im Hilbertraum? Genauer: Gibt es zu jedem  $R \in SO(3)$  ein  $u \in SU(2)$ , so daß

$$u \sigma_k u^{-1} = \sum_i R_{ik} \sigma_i \quad (3.3)$$

erfüllt ist<sup>1</sup>? In diesem Fall würden wir sagen, daß jedes System (3.2) von "gedrehten" Pauli-Matrizen dem ursprünglichen System unitär äquivalent sei. Eine andere Sprechweise wäre, daß die Drehung  $R$  durch den Operator  $u$  auf dem Hilbertraum  $\mathbf{C}^2$  repräsentiert wird. Wir behaupten konkret:

**Satz 15** *Zu jedem  $u \in SU(2)$  existiert genau ein  $R \in SO(3)$ , so daß die Gleichung (3.3) erfüllt ist. Alle  $R \in SO(3)$  können auf diese Weise erzeugt werden. Die hierdurch vermittelte Abbildung  $f : SU(2) \rightarrow SO(3)$  ist ein Homomorphismus. Sie ist eine 2:1-Abbildung in dem Sinne, daß  $u$  und  $-u$  die gleiche Rotation  $R$  ergeben. Insbesondere gilt  $\text{Ker } f = \{1, -1\} = \mathbf{Z}_2$ .*

Die verschiedenen Teilaussagen dieses Satzes lassen sich in einer Aussage zusammenfassen: Die Sequenz

$$1 \longrightarrow \mathbf{Z}_2 \longrightarrow SU(2) \xrightarrow{f} SO(3) \longrightarrow 1 \quad (3.4)$$

ist exakt.

Beweis des Satzes. Für jedes  $x \in \mathbf{R}^3$  definieren wir

$$x\sigma = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Wir erhalten so jede hermitesche spurfreie  $2 \times 2$ -Matrix. Für jedes  $u \in SU(2)$  ist  $ux\sigma u^{-1}$  wieder eine solche Matrix, und folglich existiert  $x' \in \mathbf{R}^3$  mit  $x'\sigma = ux\sigma u^{-1}$ . Die hierdurch vermittelte Abbildung ist linear. Wegen

$$-|x'|^2 = \det x'\sigma = \det(ux\sigma u^{-1}) = \det x\sigma = -|x|^2$$

ist sie normerhaltend, also orthogonal:  $x' = Rx$  mit  $R = f(u) \in O(3)$ . Es gilt sogar  $R \in SO(3)$ . Grund: Als topologischer Raum ist  $SU(2)$  zusammenhängend (man kommt stetig von einem Punkt zum anderen), und die Abbildung  $u \mapsto \det f(u)$  ist stetig mit Werten in  $\{\pm 1\}$ . Der

---

<sup>1</sup>Es genügt die Matrizen in  $SU(2)$  statt in  $U(2)$  zu suchen; denn mit  $u \in U(2)$  leistet auch  $cu$  bei  $|c| = 1$  die gleichen Dienste, und durch  $\det(cu) = 1$  kann  $c$  geeignet festgelegt werden.

Wert  $+1$  tritt sicher auf (z.B. für  $u = 1$ ). Dann kann aus Stetigkeitsgründen  $-1$  als Wert nicht auftreten. Eine einfache Überlegung zeigt, daß  $f(uu') = f(u)f(u')$  und  $f(1) = 1$  erfüllt sind. Um nun zu zeigen, daß *jedes*  $R \in SO(3)$  erhältlich ist, erinnern wir daran, daß eine beliebige Rotation als  $R = \exp A$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix}$$

darstellt werden kann. Der infinitesimalen Rotation  $A$  ordnen wir die Matrix  $\hat{A} = -\frac{i}{2}a \cdot \sigma$  zu:

$$\hat{A} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2i}a\sigma$$

Dann lautet unsere Behauptung, daß  $u = \exp \hat{A}$  das Problem

$$\forall x \in \mathbf{R}^3 \quad : \quad ux\sigma u^{-1} = (Rx) \cdot \sigma$$

löst. Es genügt, die entsprechende Behauptung für infinitesimale Rotationen zu verifizieren:

$$\forall x \in \mathbf{R}^3 \quad : \quad [\hat{A}, x\sigma] = (Ax)\sigma$$

Diese Formel ist aber inhaltlich identisch mit den Vertauschungsrelationen der Pauli-Matrizen:  $[a\sigma, x\sigma] = 2i(a \times x)\sigma$ . Wir kommen nun zu der Behauptung, daß es sich bei  $f$  um eine 2:1-Abbildung handelt, bei der  $u$  und  $-u$  auf das gleiche  $R$  abgebildet werden. Angenommen, wir hätten zwei Lösungen  $u$  und  $u'$  zu gegebenem  $R$ . Definiere  $v = u'u^{-1}$ . Dann vertauscht  $v$  mit allen Matrizen  $x\sigma$  und folglich mit *allen* hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen: das leistet nur  $v = \lambda 1$ . Außerdem gilt  $v \in SU(2)$  und deshalb  $\det v = \lambda^2 = 1$ . Somit ergeben sich die beiden Lösungen

$$\begin{aligned} \lambda = 1 & \quad \Rightarrow \quad u' = u \\ \lambda = -1 & \quad \Rightarrow \quad u' = -u \end{aligned}$$

d.h. genau  $u$  und  $-u$  (und keine weiteren Matrizen) führen zum gleichen  $R$ . Das Zentrum der Gruppe  $SU(2)$  (das sind diejenigen Gruppenelemente, die mit jedem Gruppenelement vertauschen) besteht aus

1 und -1. Diese sind zugleich diejenigen Elemente der  $SU(2)$ , die auf  $R = 1$  abgebildet werden. Sie bilden den Kern des Homomorphismus  $f : SU(2) \rightarrow SO(3)$ .  $\square$

Der Satz 15 demonstriert die enge Verwandtschaft der beiden Gruppen  $SU(2)$  und  $SO(3)$ . In vier weiteren Anmerkungen soll diese Verwandtschaft näher beleuchtet werden.

1. Nach Division durch das Zentrum werden die beiden Gruppen isomorph:

$$SU(2)/\mathbf{Z}_2 \cong SO(3)$$

2.  $SU(2)$  und  $SO(3)$  sind *lokal isomorph*: Zu jedem  $u \in SU(2)$  existiert eine Umgebung<sup>2</sup> von  $u$ , die stetig und bijektiv auf eine Umgebung von  $R = f(u)$  in  $SO(3)$  abgebildet wird.
3.  $f : SU(2) \rightarrow SO(3)$  beschreibt eine 3-dimensionale Darstellung der Gruppe  $SU(2)$  (oder kann so aufgefaßt werden). Sie ist unitär und irreduzibel. Erläuterung: Normalerweise sind Drehungen orthogonale Transformationen eines *reellen* Raumes:  $x'_i = \sum_k R_{ik} x_k$ . Vermöge  $z'_i = \sum_k R_{ik} z_k$  können wir sie aber ebenso gut als spezielle unitäre Transformationen des Hilbertraumes  $\mathbf{C}^3$  auffassen, und damit gilt  $f : SU(2) \rightarrow \text{Aut}(\mathbf{C}^3)$ . Wir werden später sehen, daß diese Darstellung durch die Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 1$  charakterisiert ist.
4.  $SU(2)$  ist die *universelle Überlagerungsgruppe* der Drehgruppe  $SO(3)$ . Sie ist damit die "kleinste", bis auf Isomorphie eindeutige, einfach zusammenhängende Gruppe  $G$ , die "größer" als  $SO(3)$  ist.

In dem letzten Punkt wird ein wichtiges Konzept bei den topologischen Gruppen angesprochen, das wir kurz erläutern wollen. In einer exakten Sequenz

$$1 \rightarrow K \rightarrow G \xrightarrow{f} H \rightarrow 1 \quad (3.6)$$

---

<sup>2</sup>Gemeint ist eine Umgebung  $\mathcal{U}$  in der Gruppenmannigfaltigkeit; denn wenn wir einmal von der Gruppenstruktur absehen, so sind  $SU(2)$  und  $SO(3)$  topologische Räume, zu deren Beschreibung wir lokal drei reelle Parameter benötigen. Umgebungen in diesen Räumen können wir daher durch Umgebungen im  $\mathbf{R}^3$  beschreiben. Bei der Wahl von  $\mathcal{U}$  hat man nur Sorge zu tragen, daß  $\mathcal{U} \cap (-\mathcal{U}) = \emptyset$  erfüllt ist.

von stetigen Homomorphismen, wo  $H$  zusammenhängend,  $G$  einfach zusammenhängend und  $K$  diskret (also völlig unzusammenhängend) ist, heißt  $f$  eine *Überlagerungsabbildung* (ÜA), und eine *universelle* ÜA dann, wenn jede weitere ÜA

$$1 \rightarrow K' \rightarrow G' \xrightarrow{f'} H \rightarrow 1$$

die Eigenschaft hat, daß  $f'$  über  $f$  faktorisiert, d.h. wenn  $f' = f \circ e$  für ein  $e : G' \rightarrow G$  gilt. Jede der hier angesprochenen Gruppen  $G, G'$  usw. wird *Überlagerungsgruppe* (ÜG) von  $H$  genannt. Existenz und Eindeutigkeit (bis auf Isomorphie) der universellen ÜG kann *allgemein* bewiesen werden: Auf dieser Tatsache beruht Bedeutung und Tragweite des gesamten Konzeptes. Trivial ist, daß die universelle ÜG einer einfach zusammenhängenden Gruppe  $H$  mit  $H$  zusammenfällt. Weiterhin gilt, daß Gruppe und universelle ÜG immer lokal isomorph sind. In einer ÜA (3.6) gibt  $n = |K|$  (auch  $n = \infty$  möglich) die Zahl der "Blätter" an, mit der  $H$  überdeckt wird, ähnlich den Blättern einer Riemannschen Fläche, die die komplexe Ebene überdecken.

Wir zählen nun (ohne Beweis) wichtige Fälle von universellen ÜA's auf, die in der Physik eine Rolle spielen:

$$1 \rightarrow \mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{R} \longrightarrow U(1) \rightarrow 1 \quad (3.7)$$

$$1 \rightarrow \mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{R} \longrightarrow SO(2) \rightarrow 1 \quad (3.8)$$

$$1 \rightarrow \mathbf{Z}_2 \rightarrow SU(2) \longrightarrow SO(3) \rightarrow 1 \quad (3.9)$$

$$1 \rightarrow \mathbf{Z}_2 \rightarrow SU(2) \times SU(2) \longrightarrow SO(4) \rightarrow 1 \quad (3.10)$$

$$1 \rightarrow \mathbf{Z}_2 \rightarrow SL(2, \mathbf{R}) \longrightarrow LOG(3) \rightarrow 1 \quad (3.11)$$

$$1 \rightarrow \mathbf{Z}_2 \rightarrow SL(2, \mathbf{C}) \longrightarrow LOG(4) \rightarrow 1 \quad (3.12)$$

Hier bezeichnet  $LOG(n)$  die Lorentz-Gruppe<sup>3</sup> in  $n$  Dimensionen ( $n-1$  Raum- und eine Zeitdimension). Man stellt leicht fest, daß die Gruppe  $LOG(2)$ , im Gegensatz zu ihren höheren Schwestern, einfach zusammenhängend ist.

---

<sup>3</sup>Genau gesprochen, betrachten wir hier nur die Zusammenhangskomponente der Einheit: das sind diejenigen Lorentz-Transformationen, die stetig mit der  $4 \times 4$ -Einheitsmatrix durch einen Weg innerhalb der Gruppe aller Lorentz-Transformationen verbunden werden können.

## 3.2 Parametrisierung der $SU(2)$

Eine beliebige Matrix  $u \in SU(2)$  hat die Gestalt

$$u = \begin{pmatrix} \bar{d} & -b \\ \bar{b} & d \end{pmatrix}, \quad |d|^2 + |b|^2 = 1 \quad (3.13)$$

Umgekehrt gehört jede Matrix, die diese Gestalt hat, zur Gruppe  $SU(2)$ . Damit steht uns eine bequeme Parametrisierung der Gruppe durch zwei komplexe Zahlen, die einer einschränkenden Bedingung genügen, zur Verfügung. Von hier aus gelangt man zu einer Beschreibung durch vier reelle Größen  $c_0, c_1, c_2, c_3$ , die sog. *Caley-Parameter*, indem man

$$d = c_0 + ic_3 \quad (3.14)$$

$$b = c_2 + ic_1 \quad (3.15)$$

setzt und sie der Bedingung

$$c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1$$

unterwirft. Dies zeigt, daß die  $SU(2)$  als topologische Mannigfaltigkeit mit der 3-Sphäre  $S^3$ , also mit der Oberfläche einer Hyperkugel im  $\mathbf{R}^4$  vom Radius 1 identifiziert werden kann. Da die  $S^3$  einfach zusammenhängend und kompakt ist, gilt dies auch für die  $SU(2)$ .

In einem weiteren Schritt, durch die Überlagerungsabbildung  $SU(2) \rightarrow SO(3)$  nämlich, gelangt man zu einer Parametrisierung der Drehgruppe  $SO(3)$  durch die Caley-Parameter:

$$R = \begin{pmatrix} c_0^2 - c_1^2 - c_2^2 + c_3^2 & 2(c_0c_2 - c_1c_3) & 2(c_0c_1 + c_2c_3) \\ 2(-c_0c_2 - c_1c_3) & c_0^2 + c_1^2 - c_2^2 - c_3^2 & 2(c_0c_3 - c_1c_2) \\ 2(-c_0c_1 + c_2c_3) & 2(-c_0c_3 - c_1c_2) & c_0^2 - c_1^2 + c_2^2 - c_3^2 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Die  $SO(3)$  als Mannigfaltigkeit darf natürlich nicht unmittelbar mit der  $S^3$  identifiziert werden. Dazu ist nötig, daß wir zuvor gegenüberliegende Punkte auf der  $S^3$  identifizieren; denn  $(c_i)$  und  $(-c_i)$  führen zum gleichen  $R$ . Die so entstehende Mannigfaltigkeit ist nicht mehr einfach zusammenhängend (nicht jeder geschlossene Weg läßt sich auf einen Punkt zusammenziehen).

Nun haben wir schon bei dem Beweis des Satzes 15 gewisse  $u \in SU(2)$  kennengelernt, nämlich

$$u = \exp \hat{A} \quad , \quad \hat{A} = -\frac{i}{2} a \sigma \quad , \quad (3.17)$$

mit  $a = \{a_1, a_2, a_3\} \in \mathbf{R}^3$  und  $\omega = |a| \leq \pi$ . Wir fragen uns nun, ob durch diese Formel eine Parametrisierung der *gesamten*  $SU(2)$  erreicht werden kann. Die Beantwortung verlangt Sorgfalt von uns. Mit Hilfe der Matrixidentität

$$4\hat{A}^2 + \omega^2 1 = 0 \quad (3.18)$$

kann die Exponentialreihe aufsummiert werden:

$$\exp \hat{A} = \left(\cos \frac{\omega}{2}\right) 1 + \left(\frac{2}{\omega} \sin \frac{\omega}{2}\right) \hat{A} \quad (3.19)$$

Vergleiche hierzu die analoge Formel (1.46). Die Caley-Parameter lassen sich nun leicht durch den Vektor  $a$  ausdrücken:

$$c_0 = \cos \frac{\omega}{2} \quad (3.20)$$

$$c_i = \frac{a_i}{\omega} \sin \frac{\omega}{2} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.21)$$

Aber nun erkennen wir, daß die Einschränkung  $0 \leq \omega \leq \pi$  auf  $c_0 \geq 0$  führt, und damit erreichen wir nur die "Hälfte" von  $SU(2)$ , nämlich<sup>4</sup>

$$\{u \in SU(2) : \text{Spur } u \geq 0\}$$

Erst die Erweiterung  $0 \leq \omega \leq 2\pi$  und damit

$$0 \leq |a| \leq 2\pi \quad (3.22)$$

bringt das gewünschte Ergebnis: eine Überdeckung der gesamten  $SU(2)$ . Das Gebiet (3.22) stellt eine Kugel vom Radius  $2\pi$  dar, so daß den Punkten der Kugeloberfläche nur *ein* Element der Gruppe entspricht: die Matrix -1. Indem wir alle Punkte der Kugeloberfläche identifizieren, erhalten wir eine topologische Mannigfaltigkeit, die der Sphäre  $S^3$  isomorph ist, wie zu erwarten war.

---

<sup>4</sup>Es ist leicht einzusehen, daß dieser Teil der  $SU(2)$  keine Untergruppe ist; denn aus  $\text{Spur } u \geq 0$  und  $\text{Spur } v \geq 0$  folgt keineswegs immer  $\text{Spur } uv \geq 0$ .

Unser Ziel ist eine Parametrisierung der Sphäre  $S^3$  durch geeignete Winkelvariable: Wir wählen Polarkoordinaten für den Vektor  $a$  mit  $|a| \leq 2\pi$ :

$$a_1 = \omega \sin \theta \cos \phi$$

$$a_2 = \omega \sin \theta \sin \phi$$

$$a_3 = \omega \cos \theta$$

Dies können wir in (3.20-21) einsetzen:

$$c_0 = \cos \frac{\omega}{2} \quad (3.23)$$

$$c_1 = \sin \frac{\omega}{2} \sin \theta \cos \phi \quad (3.24)$$

$$c_2 = \sin \frac{\omega}{2} \sin \theta \sin \phi \quad (3.25)$$

$$c_3 = \sin \frac{\omega}{2} \cos \theta \quad (3.26)$$

Die drei Winkel  $\frac{\omega}{2}, \theta, \phi$  erweisen sich somit als Polarkoordinaten der  $S^3$ , wobei  $\theta, \phi$  Polarkoordinaten der  $S^2$  sind und die Richtung der Drehachse beschreiben. Der Bereich, über den die Winkel variieren, ist:

$$0 \leq \omega \leq 2\pi \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (3.27)$$

L.Euler, als er sich mit dem Verhalten des Kreisels befaßte, bevorzugte eine andere Parametrisierung (für ihn handelte es um Lagekoordinaten des Kreisels). Die nach ihm benannten Euler-Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$  sind bequeme Parameter der  $SO(3)$ , aber auch jedes Element  $u \in SU(2)$  kann so geschrieben werden:

$$u = u_3(\gamma)u_2(\beta)u_3(\alpha) \quad (3.28)$$

wobei

$$u_k(\omega) = e^{-i\omega\sigma_k/2} = \cos \frac{\omega}{2} - i(\sin \frac{\omega}{2})\sigma_k \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.29)$$

Diesen Gruppenelementen entsprechen in der Drehgruppe  $SO(3)$  Drehungen um die  $k$ -Achse mit dem Winkel  $\omega$ . Der Zusammenhang mit ursprünglichen Parametrisierung (3.13) ist leicht hergestellt:

$$d = \exp\left(i\frac{\alpha + \gamma}{2}\right) \cos \frac{\beta}{2} \quad (3.30)$$

$$b = \exp\left(i\frac{\alpha - \gamma}{2}\right) \sin \frac{\beta}{2} \quad (3.31)$$

Daraus ergeben sich die Caley-Parameter:

$$c_0 = \cos \frac{\alpha + \gamma}{2} \cos \frac{\beta}{2} \qquad c_2 = \cos \frac{\alpha - \gamma}{2} \sin \frac{\beta}{2} \quad (3.32)$$

$$c_1 = \sin \frac{\alpha - \gamma}{2} \sin \frac{\beta}{2} \qquad c_3 = \sin \frac{\alpha + \gamma}{2} \cos \frac{\beta}{2} \quad (3.33)$$

Eine genaue Inspektion dieser Darstellung zeigt, wie der Definitionsbereich zu wählen ist:

$$0 \leq \alpha \leq 4\pi \qquad 0 \leq \beta \leq \pi \qquad 0 \leq \gamma \leq 2\pi \quad (3.34)$$

Zur Parametrisierung der Gruppe  $SO(3)$  genügt es, wenn  $\alpha$  im Intervall  $[0, 2\pi]$  variiert.

### 3.3 Die invariante Integration

Wir wollen nun das Haarsche Maß  $\mu$  für die Gruppe  $SU(2)$  bestimmen. Voraussetzung ist, daß wir die Gruppe geeignet parametrisiert haben, so daß stetige Funktionen auf der Gruppe als stetige Funktionen in den Gruppenparametern angesehen werden können.

Was soll das Haarsche Maß leisten? Mit seiner Hilfe muß es möglich sein, jeder stetigen Funktion  $f : SU(2) \rightarrow \mathbf{R}$  ihren *Mittelwert* zuzuordnen,

$$\mathcal{M}[f] = \int d\mu(u) f(u) \quad , \quad (3.35)$$

so daß  $\mathcal{M}[f]$  einer Invarianzforderung genügt: Für alle  $v, v' \in SU(2)$  soll

$$\mathcal{M}[f] = \int d\mu(u) f(v'uv^{-1}) \quad (3.36)$$

gelten. Für festes  $v$  und  $v'$  heißt  $u \mapsto v'uv^{-1}$  eine *Translation* in der Gruppe. Indem wir jedes  $u \in SU(2)$  mit einem Punkt der Sphäre  $S^3$  identifizieren und die Caley-Parameter  $\{c_i\}$  zur Beschreibung heranziehen,

$$u = \begin{pmatrix} c_0 - ic_3 & -c_2 - ic_1 \\ c_2 - ic_1 & c_0 + ic_3 \end{pmatrix} \qquad c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1 \quad , \quad (3.37)$$

lassen sich die Translationen als Abbildungen

$$t_{v',v} : S^3 \rightarrow S^3 \quad , \quad u \mapsto v'uv^{-1} \quad (3.38)$$

der Sphäre interpretieren. Wir wollen jetzt zeigen, daß es sich, anschaulich gesprochen, um Drehungen der Sphäre handelt, wenn wir sie uns in den 4-dimensionalen Raum eingebettet denken. Der  $R^4$ , in den die Sphäre eingebettet ist, soll durch cartesische Koordinaten  $x_i = rc_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) ( $0 \leq r < \infty$ ) beschrieben werden. Jedem Punkt des  $R^4$  entspricht dann genau eine Matrix

$$ru = \begin{pmatrix} x_0 - ix_3 & -x_2 - ix_1 \\ x_2 - ix_1 & x_0 + ix_3 \end{pmatrix} \quad u \in SU(2) \quad , \quad r \geq 0 \quad (3.39)$$

Die durch (3.38) induzierten reell-linearen Abbildungen

$$t(v',v) : R^4 \rightarrow R^4 \quad , \quad ru \mapsto v'ruv^{-1} \quad (3.40)$$

transformieren jede Hyperkugel  $|x| = r = \text{const.}$  in sich und sind damit Elemente der orthogonalen Gruppe  $O(4)$ . Es gilt sogar  $t(v',v) \in SO(4)$ ; denn sowohl  $v$  als auch  $v'$  können in der  $SU(2)$  stetig in die  $2 \times 2$ -Einheitsmatrix überführt werden und es gilt  $t(1,1) = 1$ .

**Satz 16** Die Abbildung  $t : SU(2) \times SU(2) \rightarrow SO(4)$  ,  $(v',v) \mapsto t(v',v)$  ist ein Homomorphismus, dessen Kern aus genau zwei Elementen besteht:  $(1,1)$  und  $(-1,-1)$ . Die Produktgruppe  $SU(2) \times SU(2)$  ist die universelle  $\ddot{U}G$  der  $SO(4)$  und  $t$  die universelle  $\ddot{U}A$ . Die Sequenz

$$1 \rightarrow \mathbf{Z}_2 \rightarrow SU(2) \times SU(2) \xrightarrow{t} SO(4) \rightarrow 1 \quad (3.41)$$

ist exakt.

Die noch fehlenden Details zum Beweis dieses Satzes werden dem Leser überlassen. Für uns ist im Augenblick nur wichtig, daß es genau ein normiertes Maß  $\mu$  auf  $S^3$  gibt, das  $SO(4)$ -invariant ist, nämlich das Oberflächenmaß  $d\Omega_3$ , wenn wir es durch das Maß  $|S^3| = 2\pi^2$  der gesamten Oberfläche dividieren:

$$d\mu(u) = (2\pi^2)^{-1} d\Omega_3 \quad (3.42)$$

Das Oberflächenmaß steht mit dem Volumenmaß  $d^4x = dx_0 dx_1 dx_2 dx_3$  in einem einfachen Zusammenhang,

$$d^4x = r^3 dr d\Omega_3 \quad , \quad (3.43)$$

und die Jacobi-Determinante für den Übergang zu Polarkoordinaten ist leicht ausgerechnet:

$$\frac{\partial(x_0 x_1 x_2 x_3)}{\partial(r \omega \theta \phi)} = \frac{1}{4} r^3 (1 - \cos \omega) \sin \theta \quad (3.44)$$

Hierbei haben wir  $x_i = r c_i$  und (3.23-26) benutzt. Jetzt können wir schreiben:

$$d\Omega_3 = \frac{1}{4} (1 - \cos \omega) d\omega d\Omega_2 \quad (3.45)$$

$$d\Omega_2 = \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.46)$$

Wir interpretieren das Ergebnis anschaulich so: Eine Mittelung über die Gruppe  $SU(2)$  vollzieht sich in zwei Schritten, (1) Mittelung über die Sphäre  $S^2$  (d.h. über die möglichen Richtungen der Drehachse), (2) Mittelung über alle Werte des Drehwinkels  $\omega$  mit dem Gewicht  $1 - \cos \omega$ , wobei im Gegensatz zur  $SO(3)$  der "vergrößerte" Bereich  $0 \leq \omega \leq 2\pi$  zugrundegelegt werden muß.

**Satz 17** Für jede stetige Funktion  $f$  auf der Gruppe  $SU(2)$  ist das Mittel durch

$$\mathcal{M}[f] = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\omega (1 - \cos \omega) \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi f(\omega, \theta, \phi) \quad (3.47)$$

gegeben.

In den Anwendungen kommt es oft vor, daß  $f$  eine *Klassenfunktion* ist, also auf den auf den Konjugationsklassen konstant ist, d.h. es gilt

$$\forall u, v \in SU(2) \quad : \quad f(uv) = f(vu) \quad (3.48)$$

In einer solchen Situation vereinfacht sich die Vorschrift (3.47). Die Funktion  $f$  ist genau dann Klassenfunktion, wenn  $f$  invariant ist gegenüber allen Translationen  $t_{v,v}$ . Die Elemente  $(v, v)$  formen eine Untergruppe von  $SU(2) \times SU(2)$ , die sog. *Diagonalgruppe* des direkten

Produktes. Sie ist der Gruppe  $SU(2)$  isomorph. Das Bild der Diagonalgruppe unter  $t$  ist die Untergruppe  $SO(3) \subset SO(4)$ . Welche Untergruppe? Aus

$$\text{Spur}(vuv^{-1}) = \text{Spur } u \quad (3.49)$$

folgt, daß es sich bei  $t(v, v)$  um genau diejenigen  $SO(4)$ -Transformationen handelt, die den Caley-Parameter  $c_0$  und damit den Drehwinkel  $\omega$  erhalten. Sie formen eine Untergruppe  $\cong SO(3)$ . Klassenfunktionen sind also einfach Funktionen von  $\omega$ . Damit folgt:

**Satz 18** *Jedem  $u \in SU(2)$  ist ein Drehwinkel  $\omega \in [0, 2\pi]$  zugeordnet, der sich gemäß der Formel  $2 \cos \frac{\omega}{2} = \text{Spur } u$  berechnet. Klassenfunktionen auf der Gruppe sind Funktionen von  $\omega$  allein. Der Mittelwert einer Klassenfunktion ist durch*

$$\mathcal{M}[f] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (1 - \cos \omega) f(\omega) d\omega \quad (3.50)$$

gegeben.

Typische Klassenfunktionen sind Charaktere von Darstellungen.

Manchmal ist es nützlich, die Beschreibung des invarianten Integrals auch in der Parametrisierung der  $SU(2)$  durch die Euler-Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$  zu kennen. In diesem Fall erhält man eine andere Jacobi-Determinante:

$$\frac{\partial(x_0 x_1 x_2 x_3)}{\partial(r \alpha \beta \gamma)} = \frac{r^3}{8} \sin \beta \quad (3.51)$$

und damit die folgende Vorschrift für die Berechnung des Mittelwertes:

$$\mathcal{M}[f] = \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^{4\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin \beta \int_0^{2\pi} d\gamma f(\alpha, \beta, \gamma) \quad (3.52)$$

Für die Beschreibung von Klassenfunktionen sind die Euler-Winkel jedoch nicht besonders bequem.

### 3.4 Konstruktion irreduzibler Darstellungen

Wir beginnen mit einer Vorüberlegung. Die  $SU(2)$  ist eine Matrixgruppe; ihre Matrizen wirken auf Spinoren  $z = (z_1, z_2) \in \mathbf{C}^2$ . Man kann den

Raum  $\mathbf{C}^2$ , in einer anderen Betrachtungsweise, auch als den Raum aller *linearen* Funktionen  $f(\zeta_1, \zeta_2)$  von zwei komplexen Variablen auffassen gemäß der Korrespondenz

$$(z_1, z_2) \iff f(\zeta_1, \zeta_2) = z_1\zeta_1 + z_2\zeta_2$$

Wir schreiben vereinfachend  $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2)$  und  $f(\zeta)$ . Der Wirkung von  $u \in SU(2)$  auf dem Raum  $\mathbf{C}^2$  entspricht eine Wirkung von  $u$  auf dem Funktionenraum:

$$[D^{1/2}(u)f](\zeta) = f(u^T\zeta) \quad (3.53)$$

Genau genommen ist diese Darstellung - wir haben sie  $D^{1/2}$  genannt - nichts anderes als die vertraute Darstellung der  $SU(2)$  auf  $\mathbf{C}^2$ . Denn, indem wir in dem Funktionenraum die Basis, bestehend aus den beiden Funktionen  $f_1(\zeta) = \zeta_1$  und  $f_2(\zeta) = \zeta_2$ , einführen, hat jede Funktion die Gestalt  $f = z_1f_1 + z_2f_2$ , d.h.  $z_1$  und  $z_2$  sind die Koordinaten von  $f$ , und bei dieser (natürlichen) Wahl der Koordinaten kann  $D_{1/2}$  mit der Matrix  $u$  identifiziert werden<sup>5</sup>.

Die folgende Konstruktion geht auf H.Weyl zurück. Sei  $L$  der Vektorraum aller<sup>6</sup> Polynome  $P(\zeta)$  von  $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2)$ . Eine Darstellung  $D : SU(2) \rightarrow \text{Aut}(L)$  erklären wir durch

$$[D(u)P](\zeta) = P(u^T\zeta) \quad , \quad u \in SU(2) \quad (3.54)$$

---

<sup>5</sup>Bekanntlich studiert man in der Theorie der Vektorräume den Dualraum  $L'$  eines (endlich-dimensionalen) Vektorraumes  $L$  und findet eine natürliche Isomorphie  $L'' \cong L$ . Davon haben wir hier Gebrauch gemacht. Jedem linearen Operator  $A : L \rightarrow L$  entspricht ein dualer Operator  $A' : L' \rightarrow L'$ . Es gilt  $(AB)' = B'A'$ . Eine Darstellung  $D$  einer Gruppe  $G$  auf  $L$  induziert immer eine Darstellung  $D^*$  auf  $L'$  durch die Vorschrift  $D^*(g) = D(g^{-1})'$  für alle  $g \in G$ . Man sagt,  $D^*$  sei *konjugiert* zu  $D$ . Nach Wahl einer Basis  $(e_i)$  in  $L$  und der zugeordneten dualen Basis  $(e'_i)$  mit  $e'_i(e_k) = \delta_{ik}$  in  $L'$  sind die Darsteller Matrizen, so daß  $D^*(g)_{ik} = D(g^{-1})_{ki}$  gilt, oder, wie wir auch schreiben können:  $D^*(g) = (D(g)^T)^{-1}$ . Natürlich induziert  $D^*$  wiederum eine Darstellung  $D^{**}$  auf dem Raum  $L''$ . Unter der Isomorphie  $L'' \cong L$  gilt aber  $D^{**} \cong D$ . In unserer Situation haben wir  $z \in \mathbf{C}^2$ ,  $\zeta \in (\mathbf{C}^2)'$  und  $f \in (\mathbf{C}^2)''$ . Gehen wir von der identischen Darstellung  $D(u) = u$  der  $SU(2)$  aus, so können wir - in der Matrixschreibweise - die konjugierte Darstellung durch  $D^*(u) = (u^T)^{-1}$  beschreiben;  $D^{**}(u) = u$  ist automatisch erfüllt. Anstelle von  $D^{**}$  haben wir  $D^{1/2}$  geschrieben.

<sup>6</sup>Gemeint sind selbstverständlich Polynome beliebigen Grades in zwei komplexen Variablen  $\zeta_1$  und  $\zeta_2$  mit komplexen Koeffizienten. Die Dimension des Raumes  $L$  ist abzählbar unendlich.

Mit Hilfe des Haarschen Maßes auf der Gruppe gelingt es, ein Skalarprodukt in  $L$  einzuführen, so daß  $D$  zu einer *unitären* Darstellung wird<sup>7</sup>:

$$(P, Q) = 2 \int d\mu(u) \overline{P(u\hat{\zeta})} Q(u\hat{\zeta}) \quad (3.55)$$

Die Wahl von  $\hat{\zeta}$  ist im Grunde irrelevant. Wir wählen  $\hat{\zeta} = (1, 0)$ . Invariante Teilräume sind leicht zu finden. Für die Werte

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad (3.56)$$

sind die Teilräume

$$L_j = \{P \in L : P(t\zeta) = t^{2j}P(\zeta)\} \quad (3.57)$$

alle invariant bezüglich  $D$ . Die Vektoren in  $L_j$  heißen *homogene Polynome* vom Grade  $2j$ . Mit  $D^j$  bezeichnen wir die Teildarstellung auf dem Raum  $L_j$ . Da jedes Polynom  $P \in L$  als Summe homogener Polynome geschrieben werden kann, und da eine unitäre Darstellung zerfällt, erhalten wir eine Zerlegung in Form einer direkten Summe:

$$L = \bigoplus_j L_j \quad , \quad D = \bigoplus_j D^j$$

Wir können nun eine Basis in  $L$  aus homogenen Polynomen  $P_{jm}$  so bestimmen, daß für festes  $j$  und  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$  gerade der Teilraum  $L_j$  aufgespannt wird:

$$P_{jm}(\zeta) = \left[ \frac{(2j+1)!}{2(j+m)!(j-m)!} \right]^{1/2} \zeta_1^{j+m} \zeta_2^{j-m} \quad (3.58)$$

Damit folgt  $\dim(L_j) = 2j+1$ . Die Matrizen der Darstellung  $D^j$  sind durch

$$P_{jm'}(u^T \zeta) = \sum_m P_{jm}(\zeta) D_{mm'}^j(u) \quad (3.59)$$

gegeben. Zum besseren Verständnis betrachten wir die einfachsten Fälle:

1. **Der Fall  $j=0$ .** Es ist  $P_{00}(\zeta) = 1$ ,  $\dim(L_0) = 1$  und  $D^0(u) = 1$  für alle  $u \in SU(2)$ . Es handelt sich hier offensichtlich um die *triviale* Darstellung  $D^0 = 1$  der  $SU(2)$ .

---

<sup>7</sup>Dies wurde auf den Seiten 30-31 ausführlich diskutiert.

2. **Der Fall  $j=1/2$ .** Es ist

$$P_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\zeta) = \zeta_1 \quad P_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(\zeta) = \zeta_2$$

Ein beliebiger Vektor in  $L_{1/2}$  hat die Gestalt  $z_1\zeta_1 + z_2\zeta_2$ , und aufgrund der eingangs angestellten Überlegungen kann man  $L_{1/2}$  mit dem Spinorraum  $\mathbf{C}^2$  identifizieren, von dem die gesamte Konstruktion ihren Ausgang nahm. Fazit: Bei der von uns gewählten Basis ist  $D^{1/2}(u) = u$ , d.h.  $D^{1/2}$  erweist sich als die *identische* Darstellung der  $SU(2)$ .

3. **Der Fall  $j=1$ .** Anstelle der Basis  $P_{11}, P_{10}, P_{1-1}$  kann man auch die Basis

$$Q_1(\zeta) = \frac{\sqrt{3}}{2}(\zeta_1^2 - \zeta_2^2) \quad (3.60)$$

$$Q_2(\zeta) = \frac{\sqrt{3}}{2i}(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) \quad (3.61)$$

$$Q_3(\zeta) = \sqrt{3}\zeta_1\zeta_2 \quad (3.62)$$

benutzen. Dann zeigt eine kleine Rechnung, daß

$$Q_k(u^T\zeta) = \sum_{i=1}^3 Q_i(\zeta)R_{ik} \quad (k = 1, 2, 3) \quad (3.63)$$

gilt, wobei  $R \in SO(3)$  die Gestalt (3.16) besitzt, wenn  $u \in SU(2)$  in der Form (3.37) vorliegt. Die Darstellung  $D^1$  ist also äquivalent zur Überlagerungsabbildung  $f : SU(2) \rightarrow SO(3)$ . Wir können schreiben:  $D^1(u) = Sf(u)S^{-1}$ , wobei  $S$  eine unitäre  $3 \times 3$ -Matrix ist, die sich aus dem Basiswechsel ergibt.

Wir kommen nun zu den allgemeinen Aussagen:

**Satz 19** *Die Polynome  $P_{jm}$  bilden eine orthonormierte Basis in  $L$ . Für jedes  $j$  sind die Darstellungsmatrizen  $D^j(u)$  unitär. Der Charakter der Darstellung  $D^j$  ist*

$$\chi_j(\omega) = \frac{\sin(2j+1)(\omega/2)}{\sin(\omega/2)} \quad (3.64)$$

( $\omega$ =Drehwinkel). Jede der Darstellungen  $D^j$  ist irreduzibel; sie sind paarweise inäquivalent zueinander und stellen eine vollständige Liste von irreduziblen Darstellungen dar, d.h. jede weitere irreduzible Darstellung der  $SU(2)$  ist äquivalent zu einer der Darstellungen  $D^j$ . Es gilt

$$D^j(-u) = (-1)^{2j} D^j(u) \quad (3.65)$$

Folglich sind Darstellungen mit ganzzahligem  $j$  zugleich auch unitäre Darstellungen der Gruppe  $SO(3)$ . Darstellungen mit halbzahligem  $j$  sind "zweiwertige", d.h. projektive Darstellungen der  $SO(3)$ .

Beweis. Wir wählen die Parametrisierung der  $SU(2)$  durch die Euler-Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$ . Wir setzen  $\zeta = u^T \hat{\zeta}$  für  $u \in SU(2)$  und  $\hat{\zeta} = (1, 0)$ , so daß

$$\zeta_1 = e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \quad (3.66)$$

$$\zeta_2 = -e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \quad (3.67)$$

Nun führen wir noch die Konstante

$$c_{jm} = \left[ \frac{(2j+1)!}{2(j+m)!(j-m)!} \right]^{1/2} \quad (3.68)$$

ein und erhalten so

$$P_{jm}(u^T \hat{\zeta}) = c_{jm} \zeta_1^{j+m} \zeta_2^{j-m} \quad (3.69)$$

$$= c_{jm} e^{-im\alpha} \left[ \cos \frac{\beta}{2} \right]^{j+m} \left[ -\sin \frac{\beta}{2} \right]^{j-m} e^{-ij\gamma} \quad (3.70)$$

Jetzt können wir das Skalarprodukt berechnen:

$$\begin{aligned} (P_{jm}, P_{j'm'}) &= \frac{2}{(4\pi)^2} \int_0^{4\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin \beta \int_0^{2\pi} d\gamma \overline{P_{jm}(u^T \hat{\zeta})} P_{j'm'}(u^T \hat{\zeta}) \\ &= |c_{jm}|^2 I_{jm} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (3.72)$$

wobei wir

$$\int_0^{4\pi} d\alpha e^{i(m'-m)\alpha} = 4\pi \delta_{mm'} \quad \int_0^{2\pi} d\gamma e^{i(j'-j)\gamma} = 2\pi \delta_{jj'}$$

ausnutzten und die Abkürzung

$$I_{jm} = \int_0^\pi d\beta \sin \beta \left[ \cos \frac{\beta}{2} \right]^{2(j+m)} \left[ \sin \frac{\beta}{2} \right]^{2(j-m)} \quad (3.73)$$

einführten. Indem wir  $\sin \beta = 2 \sin(\beta/2) \cos(\beta/2)$  setzen und sodann die neue Integrationsvariable  $\Theta = \beta/2$  einführen, kann  $I_{jm}$  auf ein bekanntes Integral zurückgeführt werden:

$$I_{jm} = 4 \int_0^{\pi/2} d\Theta [\cos \Theta]^{2(j+m)+1} [\sin \Theta]^{2(j-m)+1} = 2 \frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j+1)!} \quad (3.74)$$

Also gilt  $|c_{jm}|^2 I_{jm} = 1$  und damit

$$(P_{jm}, P_{j'm'}) = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (3.75)$$

Da wir nachgewiesen haben, daß die Basis in  $L$  orthonormiert ist, wird jeder unitäre Operator  $D^j(u)$  bezüglich der Basis  $\{P_{jm}, -j \leq m \leq j\}$  in  $L^j$  zu einer *unitären* Matrix: Die Darstellungen  $D^j$  sind unitär.

Wir berechnen nun den Charakter  $\chi_j$ . Da er als Klassenfunktion nur von dem Drehwinkel  $\omega$  abhängen kann, genügt es für jeden Wert von  $\omega$  einen Repräsentanten in der Klasse zu wählen, z.B.

$$u_3(\omega) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega/2} \end{pmatrix}$$

Dann ist

$$P_{jm}(u_3(\omega)^T \zeta) = c_{jm} [e^{-i\omega/2} \zeta_1]^{j+m} [e^{i\omega/2} \zeta_2]^{j-m} \quad (3.76)$$

$$= e^{-im\omega} P_{jm}(\zeta) \quad (3.77)$$

Also

$$D_{mm'}^j(u_3(\omega)) = e^{-im\omega} \delta_{mm'} \quad (-j \leq m, m' \leq j) \quad (3.78)$$

und

$$\chi_j(\omega) = \sum_{m=-j}^j e^{-im\omega} = \frac{\sin(2j+1)(\omega/2)}{\sin(\omega/2)} \quad (3.79)$$

Wir berechnen nun das Skalarprodukt der Charaktere zweier Darstellungen  $D^j$  und  $D^{j'}$  unter Benutzung von Satz 18:

$$\mathcal{M}[\bar{\chi}_j \chi_{j'}] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega (1 - \cos \omega) \frac{\sin(2j+1)\omega/2}{\sin \omega/2} \frac{\sin(2j'+1)\omega/2}{\sin \omega/2} \quad (3.80)$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\Theta \sin(2j+1)\Theta \sin(2j'+1)\Theta \quad (3.81)$$

$$= \delta_{jj'} \quad (\Theta = \omega/2) \quad (3.82)$$

Die Darstellung  $D^j$  ist irreduzibel, weil ihr Charakter die Norm 1 hat (Satz 14). Zwei Darstellungen  $D^j$  und  $D^{j'}$  mit  $j \neq j'$  sind inäquivalent, weil ihre Charaktere orthogonal zueinander sind. Die Liste  $\{D^j, j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots\}$  der irreduziblen Darstellungen ist vollständig; denn gäbe es eine weitere irreduzible Darstellung, so müßte für ihren Charakter  $\chi$  gelten:  $\forall j \mathcal{M}(\bar{\chi}_j \chi) = 0$ , d.h.

$$\int_0^\pi d\Theta \sin(2j+1)\Theta [\chi(2\Theta) \sin \Theta]$$

Weil das Funktionensystem  $\sin n\Theta$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) für den Raum aller stetigen Funktionen  $f(\Theta)$  auf dem Intervall  $[0, \pi]$  mit  $f(0) = f(\pi) = 0$  vollständig ist, folgt<sup>8</sup>  $\chi(2\Theta) \sin \Theta = 0$ , d.h.  $\chi = 0$ . Daraus folgt:  $\chi(0) = \text{Dimension der Darstellung} = 0$ , also ein Widerspruch. Da die Polynome  $P_{jm}$  homogen vom Grade  $2j$  sind, gilt  $P_{jm}(-u^T \zeta) = (-1)^{2j} P_{jm}(u^T \zeta)$  und somit  $D^j(-u) = (-1)^{2j} D^j(u)$ . Bei der Überlagerungsabbildung  $SU(2) \rightarrow SO(3)$  werden aber genau  $u$  und  $-u$  auf das gleiche  $R \in SO(3)$  abgebildet. Damit ergeben sich die restlichen Aussagen des Satzes.  $\square$ .

Jede (unitäre) Darstellung  $D$  der  $SU(2)$  hat ihre eigenen (selbstadjungierten) Generatoren  $\mathbf{J} = \{J_1, J_2, J_3\}$ . Definitionsgemäß gilt

$$D(e^{-ia\sigma/2}) = e^{-ia\mathbf{J}} \quad (3.83)$$

für  $a = \{a_1, a_2, a_3\}$  mit reellen Komponenten. In der Darstellung  $D = D^j$  bestätigt man leicht durch Übergang zu den infinitesimalen  $SU(2)$ -Transformationen die aus der Quantenmechanik bekannten Formeln:

$$(J_1 + iJ_2)_{mm'} = [(j - m + 1)(j + m)]^{1/2} \delta_{m, m'+1} \quad (3.84)$$

<sup>8</sup>Wir nutzen hier natürlich aus, daß die Darstellung stetig ist. Folglich ist der Charakter  $\chi$  eine stetige Funktion. Beachte, daß  $f(\theta) = \chi(2\Theta) \sin \Theta$  die Bedingung  $f(0) = f(\pi) = 0$  erfüllt.

$$(J_1 - iJ_2)_{mm'} = [(j + m + 1)(j - m)]^{1/2} \delta_{m, m'-1} \quad (3.85)$$

$$(J_3)_{mm'} = m \delta_{m, m'} \quad (3.86)$$

$$(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2)_{mm'} = j(j + 1) \delta_{m, m'} \quad (3.87)$$

In der irreduziblen Darstellung  $D^j$  nimmt der Operator  $\mathbf{J}^2$  - wie erwartet - den Eigenwert  $j(j + 1)$  an.

### 3.5 Eine Realisierung durch Bose-Operatoren

Wir variieren das Thema des vorangegangenen Abschnittes, indem wir eine Methode vorstellen, die von J.Schwinger in die Physik eingeführt wurde. Bekanntlich kann der eindimensionale quantenmechanische Oszillator dadurch behandelt werden, daß man seinen Hamilton-Operator in die folgende Form bringt:

$$H = \omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

Die Operatoren  $a$  und  $a^\dagger$ , die die Vertauschungsrelationen

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (3.88)$$

erfüllen, spielen auch in anderen Bereichen der Quantenphysik eine wesentliche Rolle und werden kurz *Bose-Operatoren* genannt. Es ist üblich den (normierten) Grundzustand des Oszillators mit dem Symbol  $|0\rangle$  zu belegen und alle angeregten Zustände  $|n\rangle$  daraus zu konstruieren:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Der Formalismus läßt sich ohne weiteres auf den  $d$ -dimensionalen harmonischen Oszillator ausdehnen, indem wir schreiben:

$$H = \sum_{i=1}^d \omega_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2})$$

Die Vertauschungsrelationen nehmen hier die Form an:

$$[a_i, a_k] = 0 \quad [a_i^\dagger, a_k^\dagger] = 0 \quad [a_i, a_k^\dagger] = \delta_{ik} \quad (3.89)$$

( $i, k = 1, \dots, d$ ). Der Grundzustand eines solchen Oszillators ist durch die Bedingungen  $a_i|0\rangle = 0$  und  $\langle 0|0\rangle = 1$  bis auf eine irrelevante Phase charakterisiert, während die Anregungszustände durch

$$\frac{(a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}\dots}{\sqrt{n_1!n_2!\dots}}|0\rangle \quad (3.90)$$

beschrieben sind. Die  $a_i^\dagger$  heißen *Erzeugungsoperatoren*, die  $a_i$  *Vernichtungsoperatoren*. Nun sei  $d = 2$  und

$$J_1 = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \quad (3.91)$$

$$J_2 = \frac{1}{2i}(a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1) \quad (3.92)$$

$$J_3 = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) \quad (3.93)$$

Dann erfüllen die so definierten Operatoren die Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten:

$$[J_k, J_\ell] = iJ_m \quad (k, \ell, m = 1, 2, 3 \text{ zyklisch})$$

Damit sind diese Operatoren die Erzeuger einer Darstellung der  $SU(2)$  auf dem Zustandsraum  $L$  des zweidimensionalen Oszillators. Analog der Einführung homogener Polynome (3.58) in der Weylschen Konstruktion, betrachtet Schwinger homogene Polynome in den beiden Erzeugungsoperatoren  $a_1^\dagger$  und  $a_2^\dagger$  und definiert die Zustände

$$|j, m\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle \quad (3.94)$$

( $-j \leq m \leq j$ ). Man findet durch bloße Anwendung der Vertauschungsrelationen (3.88) und der Bedingung  $a_i|0\rangle = 0$  die Wirkung der Drehimpulskomponenten auf die Basisvektoren:

$$(J_1 + iJ_2)|j, m\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j, m+1\rangle \quad (3.95)$$

$$(J_1 - iJ_2)|j, m\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j, m-1\rangle \quad (3.96)$$

$$J_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle \quad (3.97)$$

$$(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2)|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle \quad (3.98)$$

Ein Vergleich mit (3.82-85) lehrt, daß die Oszillatorzustände  $|j, m\rangle$  mit festem  $j$  einen invarianten Teilraum  $L_j$  aufspannen, auf dem die Darstellung  $D^j$  der  $SU(2)$  wirkt. Es ist auch klar, daß  $L$  in die direkte Summe der Räume  $L_j$  ( $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ ) zerfällt. Damit ist der Oszillatorraum von Schwinger dem Weylschen Raum der Polynome völlig isomorph.

Durch rekursive Anwendung der Formel (3.95) gelingt es, die Basiszustände  $|j, m\rangle$  zu festem  $j$  und variablem  $m$  aus einem Zustand, etwa  $|j, j\rangle$ , abzuleiten:

$$|j, m\rangle = \left[ \frac{(j+m)!}{(j-m)!(2j)!} \right]^{1/2} (J_1 - iJ_2)^{j-m} |j, j\rangle \quad (3.99)$$

Der Zustand  $|j, j\rangle$  entspricht - anschaulich gesprochen - der physikalischen Situation, in der der Drehimpuls in die 3-Richtung weist (der Eigenwert von  $J_3$  ist maximal).

## 3.6 Harmonische Polynome

Die Methode von Weyl, die Einführung homogener Polynome, besitzt viele interessante Varianten. Wir diskutieren eine weitere Variante.

Sei  $x = \{x_1, x_2, x_3\}$  der Ortsvektor eines Teilchens und  $r, \theta, \phi$  seine Polarkoordinaten:

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \theta \cos \phi \\ x_2 &= r \sin \theta \sin \phi \\ x_3 &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Kugelfunktionen  $Y_{\ell m}$  definieren wir

$$H_{\ell m}(x) = r^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (3.100)$$

( $-\ell \leq m \leq \ell$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ). Die Funktionen  $H_{\ell m}(x)$  erweisen sich als Polynome, homogen vom Grade  $\ell$ . Die einfachsten harmonischen

Polynome sind:

$\ell$	$m$	$\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}H_{\ell m}(x)$
0	0	1
1	0	$x_3$
1	$\pm 1$	$\mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 \pm ix_2)$
2	0	$\frac{1}{2}(2x_3^2 - x_1^2 - x_2^2)$
2	$\pm 1$	$\mp \sqrt{\frac{3}{2}}x_3(x_1 \pm ix_2)$
2	$\pm 2$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}(x_1 \pm ix_2)^2$

Die harmonischen Polynome wurden von J.C.Maxwell eingeführt, von ihm in seiner Theorie des Elektromagnetismus benutzt und heißen *harmonische Polynome*, weil sie Lösungen der Laplace-Gleichung  $\Delta H = 0$  sind. Zugleich beschreiben sie für festes  $\ell$  eine Basis in  $L_\ell$ , dem Raum aller harmonischen Polynome, die homogen vom Grade  $\ell$  sind.  $L_\ell$  ist Darstellungsraum der  $(2\ell+1)$ -dimensionalen Darstellung  $D^\ell$  der  $SO(3)$ . Ihre Darstellungsmatrizen sind durch

$$H_{\ell m'}(R^{-1}x) = \sum_m H_{\ell m}(x)D_{mm'}^\ell(R) \quad (3.101)$$

gegeben. Es handelt sich hier um die gleichen Matrizen, die wir schon früher (Abschnitt 3.4) konstruiert haben, mit dem Unterschied allerdings, daß nun das Argument nicht  $u$  sondern  $R$  heißt und  $\ell$  nur der Werte  $0, 1, 2, \dots$  fähig ist (vgl. die Aussage des Satzes 19). Dies wollen wir kurz begründen.

Ausgangspunkt ist der Bahndrehimpuls  $\mathbf{L} = x \times (-i\nabla)$ . Die Kugelfunktionen werden in der Quantenmechanik so eingeführt, daß gilt:

$$(L_1 + iL_2)Y_{\ell m} = \sqrt{(\ell + m + 1)(\ell - m)}Y_{\ell m+1} \quad (3.102)$$

$$(L_1 - iL_2)Y_{\ell m} = \sqrt{(\ell - m + 1)(\ell + m)}Y_{\ell m-1} \quad (3.103)$$

$$L_3Y_{\ell m} = mY_{\ell m} \quad (3.104)$$

$$(L_1^2 + L_2^2 + L_3^2)Y_{\ell m} = \ell(\ell + 1)Y_{\ell m} \quad (3.105)$$

Man erkennt: Es handelt sich hier um einen Spezialfall der Relationen (3.94-97) für ganzzahliges  $j$ . Die Kenntnis von  $Y_{\ell\ell}$  genügt, um  $Y_{\ell m}$  für

allgemeines  $m$  zu konstruieren (Gleichung (3.98)):

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} e^{i\ell\phi} \sin^\ell \theta \quad (3.106)$$

$$= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \left( \frac{x_1 + ix_2}{r} \right)^\ell \quad (3.107)$$

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(2\ell)!(\ell-m)!}} (L_1 - iL_2)^{\ell-m} Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) \quad (3.108)$$

Damit erhalten wir die folgende Darstellung für die harmonischen Polynome:

$$H_{\ell m}(x) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \left[ \frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \right]^{1/2} (L_1 - iL_2)^{\ell-m} (x_1 + ix_2)^\ell \quad (3.109)$$

An dieser Darstellung wird überhaupt erst deutlich, daß es sich um Polynome handelt<sup>9</sup>.

Für den Laplace-Operator kann man schreiben:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \quad (3.110)$$

Benutzen wir nun (3.99) und (3.104), so folgt in der Tat  $\Delta H_{\ell m} = 0$  für alle  $\ell$  und  $m$ .

Da die harmonischen Polynome  $H_{\ell m}$  homogen vom Grade  $\ell$  sind, gilt insbesondere  $H_{\ell m}(-x) = (-1)^\ell H_{\ell m}(x)$ . Dies wird gewöhnlich so ausgedrückt<sup>10</sup>: Die Kugelfunktionen  $Y_{\ell m}$  haben die Parität  $(-1)^\ell$ .

Wir fassen die Winkel  $\theta$  und  $\phi$  als Koordinaten der Sphäre  $S^2$  auf. Es ist bequem  $\Omega$  für dieses Winkelpaar zu schreiben. Das Oberflächenmaß ist durch

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\phi$$

gegeben. Mit der Sphäre  $S^2$  ist in natürlicher Weise ein Hilbertraum  $L^2(S^2)$  verknüpft:

$$L^2(S^2) = \{f : S^2 \rightarrow \mathbf{C} : \int d\Omega |f(\Omega)|^2 < \infty\}$$

<sup>9</sup>Beachte: Ist  $P(x)$  ein Polynom in  $x_1, x_2, x_3$ , so ist  $L_k P(x)$  wieder ein solches Polynom, wenn  $k = 1, 2$ , oder  $3$ . Ist  $P$  homogen vom Grade  $\ell$ , so auch  $L_k P$ .

<sup>10</sup>Entspricht  $x$  den Winkeln  $\theta, \phi$ , so  $-x$  den Winkeln  $\pi - \theta, 2\pi - \phi$ . Deshalb gilt  $Y_{\ell m}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ .

In diesem Hilbertraum bilden die Kugelfunktionen eine (orthonormierte) Basis. Dies bedeutet konkret zweierlei:

1. Orthogonalität und Normierung, d.h.

$$(Y_{\ell m}, Y_{\ell' m'}) \stackrel{\text{def}}{=} \int d\Omega \overline{Y_{\ell m}(\Omega)} Y_{\ell' m'}(\Omega) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (3.111)$$

2. Vollständigkeit, d.h. jede Funktion  $f \in L^2(S^2)$  kann nach Kugelfunktionen entwickelt werden:

$$f(\Omega) = \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_{\ell m}(\Omega) \quad (3.112)$$

$$c_{\ell m} = \int d\Omega \overline{Y_{\ell m}(\Omega)} f(\Omega) \quad (3.113)$$

Die erste Eigenschaft wird in den Vorlesungen über Quantenmechanik behandelt, die zweite Eigenschaft erfordert etwas Aufwand (insbesondere Methoden aus der Funktionalanalysis).

### 3.7 Multipole

In der Elektrostatik begegnet man den harmonischen Polynomen bei der Multipolentwicklung des Potentials. Der Weg zu einer solchen Entwicklung führt über die Legendre-Polynome  $P_{\ell}(\zeta)$ . Gewöhnlich werden die Legendre-Polynome durch ihre erzeugende Funktion definiert:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2u\zeta+u^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} u^{\ell} P_{\ell}(\zeta)$$

( $-1 \leq \zeta \leq 1$ ,  $0 \leq u < 1$ ). Für zwei Vektoren  $x, x' \in \mathbf{R}^3$ , die den Winkel  $\vartheta$  einschließen, gilt dann

$$\frac{1}{|x-x'|} = \frac{1}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (3.114)$$

( $|x| = r > r' = |x'|$ ). Eine andere Weise, Legendre-Polynome einzuführen, ist, sie als spezielle Kugelfunktionen aufzufassen:

$$P_{\ell}(\cos \vartheta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell 0}(\vartheta, 0) \quad (3.115)$$

Noch interessanter wird der Zusammenhang mit den Kugelfunktionen durch das folgende Resultat.

**Satz 20** (Additionstheorem für Kugelfunktionen) *Es seien  $(\theta, \phi)$  und  $(\theta', \phi')$  die Polarkoordinaten zweier Einheitsvektoren  $e$  und  $e'$  im  $\mathbf{R}^3$  mit  $e \cdot e' = \cos \vartheta$ . Dann gilt*

$$P_\ell(\cos \vartheta) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \overline{Y_{\ell m}(\theta', \phi')} \quad (3.116)$$

Beweis. Wir schreiben  $Y_{\ell m}(e)$  für  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ ,  $Y_{\ell m}(e')$  für  $Y_{\ell m}(\theta', \phi')$  und setzen

$$S_\ell(e, e') = \sum_m Y_{\ell m}(e) \overline{Y_{\ell m}(e')} \quad (3.117)$$

Aus der Unitarität der Darstellung  $D^\ell$  der Gruppe  $SO(3)$  folgt die Rotationsinvarianz dieses Ausdruckes, d.h.  $\forall R \in SO(3) : S_\ell(Re, Re') = S_\ell(e, e')$ , mit dem Resultat, daß  $S_\ell$  nur eine Funktion von  $e \cdot e' = \cos \vartheta$  ist. Wir berechnen sie, indem wir die Wahl  $e' = \{0, 0, 1\}$  treffen. In diesem Fall gilt  $\vartheta = \theta$  und

$$\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}(e') = \delta_{m0}$$

Somit

$$\frac{4\pi}{2\ell+1} S_\ell(e, e') = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell 0}(\theta, 0) = P_\ell(\cos \theta)$$

unter Ausnutzung von (3.114).  $\square$

Die Gleichungen (3.113), (3.115) und  $H_{\ell m}(x') = r'^\ell Y_{\ell m}(\theta', \phi')$  führen uns direkt zu dem nächsten Resultat.

**Satz 21** (Multipolentwicklung) *Sei  $\rho(x)$  eine Ladungsverteilung mit  $\rho(x) = 0$  für  $|x| > R$ . Dann existiert eine Entwicklung*

$$\int d^3x' \frac{\rho(x')}{|x - x'|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{f_\ell(\theta, \phi)}{r^{\ell+1}} \quad (r = |x| > R) \quad (3.118)$$

wobei  $(r, \theta, \phi)$  die Polarkoordinaten von  $x$  sind und

$$f_\ell(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{q_{\ell m}} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (3.119)$$

Die  $q_{\ell m}$  sind Integrale der harmonischen Polynome über die Ladungsverteilung:

$$q_{\ell m} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \int d^3x \rho(x) H_{\ell m}(x) \quad (3.120)$$

Die durch das Integral (3.119) eingeführten Größen nennt man die *Multipolmomente* der Ladungsverteilung:

$\ell = 0$	$q_{00} =$ Gesamtladung
$\ell = 1$	$q_{1m} =$ Dipolmoment
$\ell = 2$	$q_{2m} =$ Quadrupolmoment
$\ell = 3$	$q_{3m} =$ Oktupolmoment etc.

Die Übertragung dieser Formeln aus der Elektrostatik in die Quantenphysik ist nun sehr leicht. In verschiedenen Situationen (sphärisch asymmetrische Atomkerne, Ionen, Moleküle usw.) möchte man die Multipolmomente der Ladungsverteilung bestimmen, wenn die Wellenfunktion des Vielkörperproblems als bekannt vorausgesetzt wird. Wir stellen uns allgemein vor, ein solches System bestehe aus  $n$  Teilchen mit den Ladungen  $q_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ). Die normierte Wellenfunktion sei  $\Phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)})$ . Dann hat man in allen Formeln der Elektrostatik nur die Ladungsdichte<sup>11</sup>

$$\rho(x) = \int d^3x^{(1)} \dots \int d^3x^{(n)} \sum_{i=1}^n q_i \delta(x^{(i)} - x) |\Phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)})|^2 \quad (3.121)$$

einzusetzen. Ergebnis: Die Multipolmomente sind Erwartungswerte, d.h. es existieren Operatoren  $Q_{\ell m}$ , so daß

$$q_{\ell m} = (\Phi, Q_{\ell m} \Phi) \quad (3.122)$$

Anders ausgedrückt: In der Quantenmechanik sind die Multipolmomente *Operatoren*, deren Erwartungswerte mit den (statischen) Meßgrößen übereinstimmen. Die Gestalt dieser Operatoren folgt unmittelbar aus den Formeln (3.119) und (3.120):

$$[Q_{\ell m} \Phi](x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \sum_{i=1}^n q_i H_{\ell m}(x^{(i)}) \Phi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) \quad (3.123)$$

Unter Drehungen (s.(1.48)) zeigen diese Operatoren das folgende Verhalten:

$$U(R) Q_{\ell m'} U(R^{-1}) = \sum_m Q_{\ell m} D_{mm'}^\ell(R) \quad (3.124)$$

Dies ist eine Konsequenz des Transformationsverhaltens der harmonischen Polynome. Für festes  $\ell$  transformieren sich die Operatoren

<sup>11</sup>Hier bezeichnet  $\delta(x)$  die 3-dimensionale Diracsche Deltafunktion.

$\{Q_{\ell m}, -\ell \leq m \leq \ell\}$  wie die Basisvektoren einer irreduziblen Darstellung der Gruppe  $SO(3)$ . Wir nennen solche Operatoren in der Quantenmechanik deshalb *irreduzible Tensoroperatoren*. Wir kommen auf diesen Begriff im nächsten Kapitel noch einmal zurück.



# Kapitel 4

## Kopplung von Drehimpulsen

### 4.1 Motivation und Problemstellung

Aus der klassischen Mechanik wissen wir, daß Drehimpulse sich wie Vektoren addieren. Die analoge Aussage für die Quantenmechanik eines  $n$ -Körperproblems wurde in dem Abschnitt 1.5.5 diskutiert<sup>1</sup>: Es gilt die gleiche Regel, diesmal für die Operatoren:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)} + \dots + \mathbf{L}^{(n)}$$

Welche Drehimpulsoperatoren sind nun Erhaltungsgrößen? Aus der angenommenen  $SO(3)$ -Invarianz<sup>2</sup> folgt, daß nur der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  eine Erhaltungsgröße ist, und selbst diese Aussage bleibt korrekt nur so lange, wie wir den Spin vernachlässigen dürfen. Wegen der Existenz der Spin-Bahn-Kopplung (s. Abschnitt 1.4) ist selbst für ein *einzelnes* Elektron im rotationssymmetrischen Potential weder sein Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  noch sein Spin  $\mathbf{S}$  separat erhalten, sondern lediglich die Summe  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . In Formeln: Es gilt weder  $[\mathbf{L}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] = 0$  noch  $[\mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] = 0$ , wohl aber  $[\mathbf{L} + \mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] = 0$ .

Für ein System von  $n$  Elektronen wäre, unter Umständen, nur noch  $\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \dots + \mathbf{J}^{(n)}$  eine Erhaltungsgröße, weil die Elektronen in Wechselwirkung miteinander stehen. In einem solchen Fall ist die  $SU(2)$  eine

---

<sup>1</sup>Vergleiche hierzu insbesondere die Formeln (1.48) und (1.49).

<sup>2</sup>Die Annahme besteht konkret darin, daß der Hamilton-Operator invariant unter simultanen Drehungen aller in ihm auftretenden Vektoren ist.

Symmetriegruppe, und die Komponenten des Gesamtdrehimpulses  $\mathbf{J}$  sind die Erzeuger einer unitären Darstellung der  $SU(2)$  auf dem Hilbertraum der  $n$ -Teilchenzustände : Für jedes  $u \in SU(2)$  existiert also ein unitärer Operator  $U(u)$ , der mit dem Hamilton-Operator kommutiert (was hier immer angenommen werden soll und zu unseren Voraussetzungen gehört). Welche Wirkung der Operator  $U(u)$  auf eine Wellenfunktion hat, muß noch im Detail studiert werden.

Wir beginnen mit dem einfachsten physikalischen System, einem Elektron in einem Potential  $V(r)$  unter dem Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Hierbei könnte es sich etwa um das Valenzelektron eines Alkaliatoms handeln. Der zugrundeliegende Hilbertraum ist  $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3, \mathbf{C}^2)$  und die Wirkung der  $SU(2)$  wird durch

$$[U(u)\phi](x) = u\phi(R^{-1}x) \quad u \in SU(2) \quad R = f(u) \quad (4.1)$$

beschrieben, wobei  $f : SU(2) \rightarrow SO(3)$  die Überlagerungsabbildung ist. Der Hamilton-Operator

$$H = -\Delta/2m + V + \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

wurde schon im Abschnitt 1.3 vorgestellt. Es empfiehlt sich,  $H = H_0 + H_1$  mit  $H_1 = \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  zu schreiben. Der Sinn dieser Aufspaltung liegt darin, daß nun

$$[H_0, \mathbf{L}] = [H_0, \mathbf{S}] = 0$$

gilt, d.h. unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung sind sowohl der Spin  $\mathbf{S}$  als auch der Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  Erhaltungsgrößen. Dies bedeutet die Existenz einer Symmetriegruppe von der Art  $SU(2) \times SU(2)$ , also einer Produktgruppe<sup>3</sup>, die es ermöglicht, daß Spin und Ort *unabhängig* voneinander gedreht werden können<sup>4</sup>:

$$[U(u, v)\Phi](x) = u\Phi(R^{-1}x) \quad u, v \in SU(2) \quad R = f(v)$$

<sup>3</sup>Sind  $G$  und  $H$  Gruppen, so versteht man unter der Produktgruppe  $G \times H$  die Menge aller Paare  $(g, h)$  mit  $g \in G$  und  $h \in H$ . Durch die Verknüpfungsvorschrift  $(g, h)(g', h') = (gg', hh')$  wird  $G \times H$  zu einer Gruppe.

<sup>4</sup>Wir benutzen überall die Gruppe  $SU(2)$ , selbst dann, wenn sie einmal, wie bei den gewöhnlichen Drehungen eines Ortsvektors  $x$ , durch die Gruppe  $SO(3)$  ersetzt werden kann. Dies dürfen wir tun, weil jede Darstellung der  $SO(3)$  auch als eine Darstellung der  $SU(2)$  verstanden werden kann.

Wir betrachten nur gebundene Zustände des Elektrons. Ihnen entsprechen Eigenwerte der Energie. Auf jedem Eigenwertraum ist die Spin- $SU(2)$  durch die zweidimensionale Darstellung  $D^{1/2}$ , die Bahn- $SU(2)$  durch eine der Darstellungen  $D^\ell$  ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ) vertreten. Jedes Energieniveau ist daher mit einer irreduziblen Darstellung  $D^{s,\ell}$  von  $SU(2) \times SU(2)$  verknüpft und ist aus diesem Grund  $2(2\ell + 1)$ -fach entartet (von weiteren zufälligen Entartungen einmal abgesehen). Die  $2(2\ell + 1)$  Basiszustände, die den Eigenraum  $L_{s,\ell}$  aufspannen, sind

$$Y_{\ell m}(\Omega) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad Y_{\ell m}(\Omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (-\ell \leq m \leq \ell) \quad (4.2)$$

Nun studieren wir den vollen Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_1$  und bemerken eine *Reduktion der Symmetrie*: nicht die  $SU(2) \times SU(2)$ , sondern die Diagonalgruppe  $SU(2)$  beschreibt nunmehr die Symmetrie<sup>5</sup>. Die verminderte Symmetrie hat zur Folge, daß nur noch die Kombination  $\mathbf{L} + \mathbf{S}$  eine Erhaltungsgröße ist. Damit sind wir aufgefordert, die Darstellung  $D^{s,\ell}$  der Produktgruppe auf die Diagonalgruppe einzuschränken, die ja eine Untergruppe darstellt, und die so bestimmte Darstellung auszureduzieren; denn nur so erhalten wir die neuen Eigenwerträume, wenn auch nicht automatisch die neuen Energie-Eigenwerte.

Die Liste (4.2) der Basisvektoren zeigt die Struktur des Raumes  $L_{s,\ell}$ : Er ist ein Tensorprodukt  $L_s \otimes L_\ell$ , gebildet aus den vertrauten Darstellungsräumen  $L_j$  der Gruppe  $SU(2)$  (siehe die Abschnitte 3.4–5). In einer abstrakten Notation könnten wir die Basisvektoren (4.2) auch symbolisch durch  $|s\mu\rangle \otimes |\ell m\rangle$  kennzeichnen, wobei  $\mu = \pm\frac{1}{2}$  die Projektion des Spins auf die 3-Richtung beschreibt. Die hier gemachte Beobachtung läßt sich natürlich verallgemeinern:

**Satz 22** *Sind  $G$  und  $H$  zwei Gruppen, so hat jede irreduzible Darstellung  $D : G \times H \rightarrow \text{Aut}(L)$  die Gestalt eines Tensorproduktes, d.h. es existieren irreduzible Darstellungen  $D_1 : G \rightarrow \text{Aut}(L_1)$  und  $D_2 : H \rightarrow \text{Aut}(L_2)$ , so daß  $L \cong L_1 \otimes L_2$  und  $D(g, h) \cong D_1(g) \otimes D_2(h)$  für alle  $g \in G$  und  $h \in H$  gilt.*

---

<sup>5</sup>Zur Erinnerung: Ist  $(u, v)$  das allgemeine Element in  $SU(2) \times SU(2)$ , so haben alle Elemente der Diagonalgruppe die Form  $(u, u)$ .

Kurz, kennt man die irreduziblen Darstellungen von  $G$  und  $H$ , so kennt man sie von  $G \times H$ . Der formale Beweis dieser Tatsache bleibt dem Leser überlassen. Die wesentliche Voraussetzung für die Gültigkeit des Satzes ist die Irreduzibilität der Darstellung der Produktgruppe.

Die andere Beobachtung, die wir bei der Diskussion unseres Beispiels gemacht haben, war die Reduktion der Symmetrie durch bestimmte Anteile des Hamilton-Operators. Dem Verlust an Symmetrie korrespondiert ein sehr allgemeiner Begriff der Darstellungstheorie:

**Definition 13** Sei  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L)$  eine Darstellung und  $H \subset G$  eine Untergruppe, so bezeichnet man die Einschränkung des Homomorphismus  $D$  auf die Untergruppe  $H$  als Subduktion und nennt  $D : H \rightarrow \text{Aut}(L)$  eine subduzierte Darstellung von  $H$ .

Wir werden subduzierte Darstellungen, soweit Irrtümer ausgeschlossen sind, mit dem gleichen Buchstaben (etwa  $D$ ) kennzeichnen. Grob gesprochen: Subduzierte Darstellungen einer Gruppe  $H$  sind solche Darstellungen, die sich aus Darstellungen einer größeren Gruppe ergeben.

Bei unserem Beispiel gingen wir von

$$D^{s,\ell}(u, v) = D^s(u) \otimes D^\ell(v) \quad u, v \in SU(2)$$

aus, um schließlich durch die Einschränkung  $u = v$  eine subduzierte Darstellung der  $SU(2)$  zu erhalten. Wir stoßen somit auf einen besonderen Typ von Darstellungen, auf die *direkten Produkte*.

**Definition 14** Seien  $D_i \rightarrow \text{Aut}(L_i)$  ( $i = 1, 2$ ) zwei Darstellungen einer Gruppe  $G$ , so heißt die durch  $D(g) = D_1(g) \otimes D_2(g)$  bestimmte Darstellung  $D : G \rightarrow \text{Aut}(L_1 \otimes L_2)$  das direkte Produkt der Darstellungen  $D_1$  und  $D_2$ . Es wird mit  $D = D_1 \times D_2$  bezeichnet.

Anmerkung: Ist  $\dim(L_i) = n_i < \infty$ , so gilt  $\dim(L_1 \otimes L_2) = n_1 n_2$ , d.h.  $D_1 \times D_2$  ist eine  $n_1 n_2$ -dimensionale Darstellung.

Zurück zu unserem Beispiel: Für  $\ell > 0$  ist die Darstellung  $D^s \times D^\ell$  der  $SU(2)$  reduzibel. Zu jeder Teildarstellung  $D^j$  existiert ein Energieniveau  $E_{s\ell j}$  von  $H = H_0 + H_1$ : Dies ist der Inhalt des Satzes 12. Deshalb wird die Ausreduktion von Produktdarstellungen eines unserer Hauptprobleme sein.

Wir wollen ein weiteres Beispiel aus der Atomphysik heranziehen, um zu demonstrieren, daß der Verlust an Symmetrie sich immer nach dem gleichen Muster vollzieht. Es sei  $H = H_0 + H_1$  der Hamilton-Operator eines Zweielektronenatoms, wie in Gleichung (1.11) definiert, auf dem Hilbertraum  $L^2(\mathbf{R}^6)$  gegeben, d.h. wir vernachlässigen den Spin, berücksichtigen aber die Coulombabstoßung  $H_1$  der beiden Elektronen. Ohne  $H_1$  finden wir die Symmetriegruppe  $SU(2) \times SU(2)$ , weil die Ortsvektoren  $x^{(1)}$  und  $x^{(2)}$  unabhängig voneinander gedreht werden können. Konsequenz: sowohl  $\mathbf{L}^{(1)}$  als auch  $\mathbf{L}^{(2)}$  sind Erhaltungsgrößen. Den irreduziblen Darstellungen  $D^{\ell, \ell'}$  der Produktgruppe entsprechen  $(2\ell + 1)(2\ell' + 1)$ -fach entartete Energieniveaus  $E_{\ell, \ell'}$  des ungestörten Hamilton-Operators  $H_0$ . Die Basiszustände, die den Eigenraum  $L_\ell \otimes L_{\ell'}$  aufspannen, sind

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(\Omega_1)Y_{\ell' m'}(\Omega_2) & \quad -\ell \leq m \leq \ell \\ & \quad -\ell' \leq m' \leq \ell' \end{aligned}$$

( $\Omega_i =$  Winkelkoordinaten von  $x^{(i)}$ ). Wir werden diese Zustände auch symbolisch durch  $|\ell m\rangle \otimes |\ell' m'\rangle$  beschreiben. Der volle Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_1$  besitzt eine verminderte Symmetrie, entsprechend dem Übergang von der Produktgruppe zur Diagonalgruppe. Konsequenz: nur noch der Gesamtbahndrehimpuls  $\mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$  ist jetzt eine Erhaltungsgröße. Durch die Subduktion entstehen Produktdarstellungen der  $SU(2)$  vom Typ  $D^\ell \times D^{\ell'}$ , und jeder darin enthaltenen Teildarstellung  $D^j$  entspricht ein Eigenwert  $E_{\ell \ell' j}$  von  $H$ ; dies ist durch den Satz 12 garantiert. Die Beispiele motivieren uns, den zugrundeliegenden Gedanken allgemein zu formulieren:

**Definition 15** Ist  $\{D_a : a = 1, 2, \dots\}$  eine vollständige Liste von inäquivalenten, unitären und irreduziblen Darstellungen einer kompakten Gruppe  $G$ , so heißt die für jedes Wertepaar  $a, b$  existierende Zerlegung

$$D_a \times D_b \cong \bigoplus_c m_{abc} D_c \quad m_{abc} \in \{0, 1, 2, \dots\} \quad (4.3)$$

eine Clebsch-Gordan-Reihe der Gruppe  $G$ .

Wir haben somit in den Multiplizitäten  $m_{abc}$  weitere charakteristische Zahlen der Gruppe  $G$  gefunden. So wie wir die Clebsch-Gordan-Reihe

eingeführt haben, ist sie nur für *kompakte* Gruppen sinnvoll. Denn wir benutzten hierbei das Peter-Weyl-Theorem (Satz 7 auf Seite 34). Mitunter geschieht es, wie bei der  $SU(2)$ , daß alle Produktdarstellungen multiplizitätsfrei<sup>6</sup> sind. In einem solchen Fall ist  $m_{abc}$  nur der beiden Werte 0 oder 1 fähig, d.h. eine Darstellung  $D_c$  tritt oder tritt nicht in (4.3) auf. Dies ist nicht immer so: Schon im Falle der  $SU(3)$  findet man Multiplizitäten  $m_{abc} \geq 2$ .

Da wir  $G$  als kompakt vorausgesetzt haben, ist jede Darstellung  $D_a$  endlichdimensional. Damit ist es möglich, die Darsteller  $D_a(g)$  als  $n_a \times n_a$ -Matrizen aufzufassen. Die Tensorprodukte  $D_a(g) \otimes D_b(g)$  sind dann  $n \times n$ -Matrizen mit  $n = n_a n_b$ . Die Gleichung (4.3) sagt konkret, daß eine unitäre  $n \times n$ -Matrix  $C$  (abhängig von  $a$  und  $b$ ) existiert, derart daß

$$D_a(g) \otimes D_b(g) = C \left( \bigoplus_c m_{abc} D_c(g) \right) C^{-1} \quad (4.4)$$

für alle  $g \in G$  gilt.

**Definition 16** Die Matrix  $C$  heißt Clebsch-Gordan-Matrix, ihre Matrixelemente Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Die Matrix  $C$  ist leider nicht eindeutig, und es bedarf einiger Konventionen, um den Wert der Clebsch-Gordan-Koeffizienten festzulegen. Physikalische Aussagen bleiben von solchen Konventionen unberührt.

**Satz 23** Sei  $D = D_a \times D_b$  und  $C$  und  $C'$  zwei CG-Matrizen, die das Problem (4.4) lösen, so gilt  $C' = AC$ , wobei  $A$  eine unitäre Matrix in  $\mathcal{R}(D, D)$  ist. Ist umgekehrt  $A \in \mathcal{R}(D, D)$  unitär und  $C$  eine CG-Matrix, so beschreibt  $AC$  ebenfalls eine CG-Matrix. Ist  $D$  multiplizitätsfrei und sind  $P_c$  die minimalen Projektoren in  $\mathcal{R}(D, D)$ , so hat jedes unitäre  $A \in \mathcal{R}(D, D)$  die Form

$$A = \sum_{c: m_{abc}=1} e^{i\lambda_c} P_c \quad (\lambda_c \in \mathbf{R}) \quad (4.5)$$

Der Beweis folgt unmittelbar aus der Tatsache, daß die Matrix  $C'C^{-1}$  mit allen Darstellern  $D(g)$  vertauscht, somit in  $\mathcal{R}(D, D)$  liegt, und aus der Tatsache, daß  $\mathcal{R}(D, D)$  abelsch ist, wenn  $D$  multiplizitätsfrei

---

<sup>6</sup>Siehe die Ausführungen im Abschnitt 2.5.

ist (vergleiche die allgemeine Diskussion in Abschnitt 2.5). Wir sehen, daß es nötig ist, alle Phasen  $\lambda_c$  in Abhängigkeit von  $a$  und  $b$  festzulegen. Für die Gruppe  $SU(2)$  wurde dies erstmalig von E.U. Condon und G.H. Shortley 1935 in ihrem Monumentalwerk *The Theory of Atomic Spectra* durchgeführt. Die hier getroffene Konvention ist heute allgemein akzeptiert.

Es sind zwei Probleme, denen wir uns jetzt zuwenden wollen: (1) Bestimmung der CG-Reihen für die  $SU(2)$ , (2) Bestimmung der CG-Koeffizienten auf der Basis der Condon-Shortley-Konvention.

## 4.2 Die Clebsch-Gordan-Reihen der $SU(2)$

Aus der Vektorrechnung ist die Dreiecksungleichung bekannt:

$$||a| - |b|| \leq |a + b| \leq |a| + |b|$$

In der Theorie des Drehimpulses findet man interessante Parallelen, und wir wollen deshalb den folgenden Sprachgebrauch einführen: Drei Quantenzahlen  $j_1, j_2, j_3 \in \{0, 1/2, 1, 3/2, \dots\}$  erfüllen die *Dreiecksbeziehung*, wenn gilt

$$(1) \quad j_1 + j_2 + j_3 = 0 \pmod{1}$$

$$(2) \quad |j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$$

Es ist üblich, diesen Sachverhalt durch ein besonderes Symbol zum Ausdruck zu bringen:

$$\delta(j_1 j_2 j_3) = \begin{cases} 1, & \text{falls (1) und (2) gilt,} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.6)$$

Die so definierte Funktion  $\delta$  ist symmetrisch unter Permutationen ihrer Argumente, und es gilt

$$\sum_j \delta(j_1 j_2 j) = \min(2j_1 + 1, 2j_2 + 1) \quad (4.7)$$

$$\sum_j (2j + 1) \delta(j_1 j_2 j) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (4.8)$$

Wir zeigen nun, daß die Zahlen  $\delta(j_1 j_2 j)$  mit den Multiplizitäten der CG-Reihen übereinstimmen.

**Satz 24** Für die Darstellungen  $D^j$  ( $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ ) der  $SU(2)$  haben alle CG-Reihen die Gestalt

$$D^{j_1} \times D^{j_2} \cong \sum_j \delta(j_1 j_2 j) D^j \quad (4.9)$$

Insbesondere sind alle Produktdarstellungen multiplizitätsfrei.

Beweis. Wir fassen die Darsteller  $D^j(u)$ ,  $u \in SU(2)$ , als Matrizen auf und berechnen den Charakter der Produktdarstellung, wobei  $2 \cos(\omega/2) = \text{Spur } u$ :

$$\begin{aligned} \text{Spur} (D^{j_1}(u) \otimes D^{j_2}(u)) &= \text{Spur } D^{j_1}(u) \cdot \text{Spur } D^{j_2}(u) \\ &= \chi_{j_1}(\omega) \chi_{j_2}(\omega) \\ &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} e^{-i(m_1+m_2)\omega} \\ &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j e^{-im\omega} = \sum_j \delta(j_1 j_2 j) \chi_j(\omega) \end{aligned}$$

Dabei haben wir auf die Formel (3.79) zurückgegriffen. Die Multiplizität der Darstellung  $D^j$  in  $D^{j_1} \times D^{j_2}$  berechnen wir gemäß der Formel (2.51), indem wir den Charakter  $\chi = \chi_{j_1} \chi_{j_2}$  auf  $\chi_j$  projizieren und dabei (3.81) ausnutzen:

$$\mathcal{M}[\chi_{j_1} \chi_{j_2} \chi_j] = \delta(j_1 j_2 j) \quad (4.10)$$

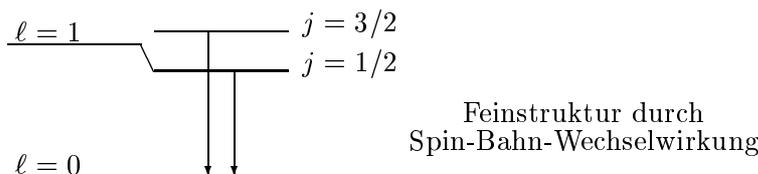
Damit ist der Satz bewiesen.  $\square$

Wir können jetzt die Diskussion unseres sehr einfachen Beispiels aus dem vorigen Abschnitt zu Ende führen und erinnern daran, daß die Spin-Bahn-Kopplung bei den Alkaliatomen (ein Elektron auf der äußeren Schale) oder auch bei dem Wasserstoffatom zur Feinstruktur führt. Diese wird nun charakterisiert durch die Zerlegung

$$D^s \times D^\ell \cong D^{\ell+s} \oplus D^{\ell-s} \quad s = \frac{1}{2}, \ell \geq 1$$

Sie erklärt auf einfache Weise die Dublettstruktur der Spektrallinien, soweit es sich um Übergänge in den Grundzustand ( $\ell = 0$ ) handelt. Diese Situation finden wir etwa bei den berühmten Natrium-D-Linien mit 5890 bzw. 5896 Ångström. Der Spin-Bahn-Term hat keinen Einfluß auf

den Grundzustand; die angeregten Niveaus ( $\ell \geq 1$ ) spalten in je zwei benachbarte Niveaus auf, die durch den Gesamtdrehimpuls  $j = \ell \pm \frac{1}{2}$  charakterisiert sind:



Die Aufspaltung ist erfahrungsgemäß klein, so daß man die Schrödingersche Störungstheorie in 1. Ordnung anwenden darf. Für festes  $\ell$  sei  $E$  die ungestörte Energie. Die beiden durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung daraus entstehenden Energien  $E_j$  ergeben sich als

$$E_j = E + \langle \xi \rangle \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle$$

unter Benutzung von (1.21-23). Die Mittelwerte von  $\xi$  und  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  sind bezüglich der Radialwellenfunktion des ungestörten Problems (abhängig von  $\ell$ ) und der Eigenfunktion des Gesamtdrehimpulses (abhängig von  $\ell$  und  $j$ ) zu bilden. Der zweite Mittelwert läßt sich ohne Aufwand bestimmen:

$$\begin{aligned} 2\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle &= \langle \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 \rangle \\ &= j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1) \\ &= \begin{cases} \ell & j = \ell + s \\ -\ell - 1 & j = \ell - s \end{cases} \quad (s = \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

Der erste Mittelwert ist schwieriger zubesimmen. Ist das Potential  $V(r)$  jedoch negativ und strebt es streng monoton gegen 0 für  $r \rightarrow \infty$ , so gilt  $V'(r) > 0$ , also  $\langle \xi \rangle > 0$  und damit

$$E_{\ell+s} - E_{\ell-s} = (\ell + \frac{1}{2}) \langle \xi \rangle > 0$$

in Übereinstimmung mit der Beobachtung. Über die Größenordnung des Effektes, in Einheiten  $mc^2$ , läßt sich ebenfalls eine allgemeine Aussage machen. Es gilt

$$\frac{\langle \xi \rangle}{mc^2} = O(\alpha^4) \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = (137,036 \dots)^{-1}$$

Die Konstante  $\alpha$ , die sich auf diese Weise in der Atomphysik bemerkbar macht, heißt darum auch die *Feinstrukturkonstante*. Sie erweist sich als die fundamentale Konstante für die Quantenelektrodynamik (QED). Für das H-Atom können alle Rechnungen selbstverständlich explizit durchgeführt werden mit dem Ergebnis:

$$\langle \xi \rangle = \frac{mc^2 \alpha^4}{n^3 \ell(\ell+1)(2\ell+1)} \quad n \geq 1 : \text{Hauptquantenzahl}$$

Vergleicht man dieses Ergebnis mit strenger Rechnung (Sommerfeld, Jordan und Pauli) für das H-Atom auf der Basis der Dirac-Gleichung,

$$E_{nj} = mc^2 \left[ 1 + \left( \frac{\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

( $j + \frac{1}{2} = 1, 2, \dots, n$ ;  $n$  = Hauptquantenzahl), so findet man durch eine Entwicklung nach  $\alpha$  völlige Übereinstimmung mit der nichtrelativistischen Rechnung bis zur Ordnung  $\alpha^4$ . Abweichungen stellen sich erst bei der Ordnung  $\alpha^6$  ein. Wie man sieht, führt die Dirac-Theorie auf Niveaus, die unabhängig von der Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  sind. Jedes Niveau  $E_{nj}$  ist  $2(2j+1)$ -fach entartet. Die Entartung bezüglich  $\ell$  wird erst durch die Wechselwirkung des Elektrons mit den Vakuumfluktuationen des Strahlungsfeldes aufgehoben (Lamb shift) und kann im Rahmen der Quantenelektrodynamik berechnet werden.

### 4.3 Die Clebsch-Gordon-Koeffizienten

Es ist bequem, die Basisvektoren in  $L_j$ , dem Vektorraum zur Darstellung  $D^j$ , wie im Abschnitt 3.5 geschehen, symbolisch mit  $|jm\rangle$  zu bezeichnen und für die Basisvektoren des Produktraumes  $L^{j_1} \otimes L^{j_2}$

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

zu schreiben. Wir betrachten die Quantenzahlen  $j_1$  und  $j_2$  als fest gewählt und setzen  $n = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . Aus dem Satz 24 folgt,

daß eine unitäre  $n \times n$ -Matrix  $C$  existiert, deren Elemente wir die CG-Koeffizienten nennen und mit

$$\left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right)$$

bezeichnen, so daß der durch

$$|jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (4.11)$$

beschriebene Basiswechsel die Produktdarstellung in irreduzible Bestandteile zerlegt. Aus der Definition folgt unmittelbar:

$$\delta(j_1 j_2 j) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) = 0$$

Durch Anwendung der Operatoren  $J_3 = J_3^{(1)} + J_3^{(2)}$  auf (4.11) unter Ausnutzung von (3.96) gewinnen wir die Aussage

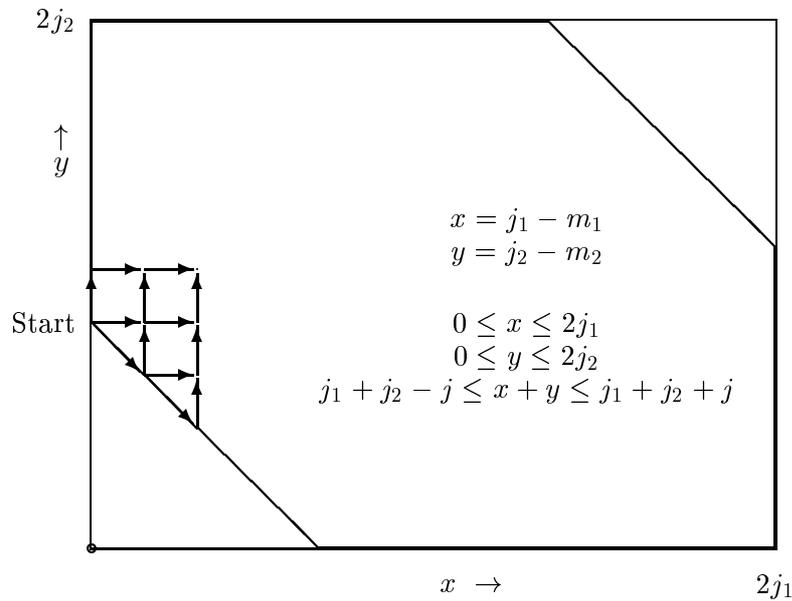
$$(m_1 + m_2 - m) \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) = 0 \quad (4.12)$$

Lassen wir andererseits die Operatoren  $J_1 \pm iJ_2 = (J_1^{(1)} \pm iJ_2^{(1)}) + (J_1^{(2)} \pm iJ_2^{(2)})$  auf (4.11) wirken und benutzen (3.94-95), so erhalten wir die Rekursionsformeln:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \pm 1 \end{array} \right) \\ = & \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 \mp 1 & m_2 & m \end{array} \right) \\ + & \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 \mp 1 & m \end{array} \right) \quad (4.13) \end{aligned}$$

Allen CG-Koeffizienten mit gegebenen  $j_1, j_2, j_3$  können wir Punkte eines zweidimensionalen Gitters  $\mathbf{Z}^2$  zuordnen, als dessen Koordinaten wir  $x = j_1 - m_1$  und  $y = j_2 - m_2$  wählen. Den nichtverschwindenden CG-Koeffizienten entsprechen Punkte  $(x, y) \in \mathbf{Z}^2$ , die entweder auf

dem Rande oder im Inneren eines Sechsecks liegen; gegenüberliegende Seiten sind parallel und gleichlang. Durch Rekursion sind alle Punkte miteinander verknüpft. Dies bedeutet, daß wir die CG-Koeffizienten alle aus *einem* Koeffizienten ableiten können. Es ist zweckmäßig, hierfür einen Eckpunkt auszusuchen. Wir wählen denjenigen, für den  $m_1 = j_1$ ,  $m_2 = j - j_1$  und  $m = j$  gilt (siehe die Abbildung: die Pfeile geben die Richtung an, in die die Rekursion verläuft). Ist der zugehörige Koeffizient reell, so sind alle Koeffizienten reell, und die CG-Matrix ist orthogonal:  $C^T C = 1$ .



Wir können noch über das Vorzeichen des ausgewählten Koeffizienten verfügen - also zwischen  $C$  und  $-C$  wählen - und verlangen

$$\left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ j_1 & j - j_1 & j \end{array} \right) \geq 0 \quad (4.14)$$

(=0 nur dann, wenn die Dreiecksbedingung verletzt ist). Dies ist der Inhalt der Konvention von Condon & Shortley. Nutzt man die Beziehung  $C^T C = 1$  zur Normierung der CG-Koeffizienten, so kommt man

nach einer längeren Rechnung auf den Ausdruck

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_1 & j - j_1 & j \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{(2j_1)!(2j+1)!}{(j_1 - j_2 + j)!(j_1 + j_2 + j + 1)!}} \delta(j_1 j_2 j) \quad (4.15)$$

aus dem man nun alle CG-Koeffizienten durch Rekursion berechnen kann. Mit dem Wissen, daß alle CG-Koeffizienten reell sind, können wir die Umkehrung von (4.11) in der folgenden Form angeben:

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{jm} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} |jm\rangle \quad (4.16)$$

Die CG-Koeffizienten besitzen eine Reihe von Symmetrien, die - wie E.Wigner erkannte, sich besser offenbaren, wenn man zu den sog. 3j-Symbolen übergeht:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \stackrel{def}{=} \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + m}}{\sqrt{2j+1}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Man kann den Sinn der Wigerschen 3j-Symbole auch darin sehen, daß mit ihrer Hilfe drei Drehimpulse mit den Quantenzahlen  $j_1, j_2, j_3$  zum Drehimpuls 0 gekoppelt werden:

$$|00\rangle = \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \otimes |j_3 m_3\rangle \quad (4.18)$$

Sie beschreiben somit die Projektion der Darstellung  $D^{j_1} \times D^{j_2} \times D^{j_3}$  auf die darin enthaltene Teildarstellung  $D^0$ .

Eine andere Schreibweise des 3j-Symbols hat T.Regge vorgeschlagen:

$$\begin{bmatrix} -j_1 + j_2 + j & j_1 - j_2 + j & j_1 + j_2 - j \\ j_1 - m_1 & j_2 - m_2 & j - m \\ j_1 + m_1 & j_2 + m_2 & j + m \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

Das Regge-Symbol hat überraschende Eigenschaften:

1. Alle neun Elemente des Regge-Symbols sind nichtnegative ganze Zahlen (d.h. anderenfalls ist es trivialerweise Null).

2. Es ist ein magisches Quadrat: Jede Zeile und jede Spalte hat die gleiche Summe  $j_1 + j_2 + j$ .
3. Es ändert nicht seinen Wert bei zyklischer Vertauschung von Zeilen oder Spalten.
4. Es ändert nicht seinen Wert bei Spiegelung an der Hauptdiagonalen. (Dies ist der Inhalt der sog. Regge-Symmetrie.)
5. Bei Vertauschung von zwei Zeilen oder zwei Spalten erhält das Regge-Symbol einen Faktor  $(-1)^{j_1+j_2+j}$ . Eine Folge davon ist, daß es verschwindet, wenn  $j_1 + j_2 + j$  ungerade ist und zwei Zeilen oder zwei Spalten gleich sind.
6. Das quadrierte Regge-Symbol ist immer eine rationale Zahl.

Durch Ausnutzung der Symmetrien des Regge-Symbols ist es möglich das kleinste Element in die linke obere Ecke zu bringen. Dies hilft die CG-Koeffizienten in möglichst ökonomischer Weise zu berechnen. Man beginnt die Berechnung mit der Formel

$$\begin{bmatrix} 0 & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{bmatrix} = (-1)^{n_{23}+n_{32}} \left[ \frac{n_{12}!n_{21}!n_{13}!n_{31}!}{n!n_{22}!n_{33}!n_{23}!n_{32}!} \right]^{1/2} \quad (4.20)$$

( $n = j_1 + j_2 + j + 1$ ) und führt durch Rekursion alle Regge-Symbole darauf zurück:

$$\begin{aligned} \sqrt{n_{11}n} \begin{bmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{bmatrix} &= \sqrt{n_{23}n_{32}} \begin{bmatrix} n_{11} - 1 & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} - 1 \\ n_{31} & n_{32} - 1 & n_{33} \end{bmatrix} \\ &- \sqrt{n_{22}n_{33}} \begin{bmatrix} n_{11} - 1 & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} - 1 & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} - 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.21)$$

CG-Koeffizienten werden häufig benötigt, und manche davon haben sehr einfache Werte:

$$\left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ j_1 & j_2 & m \end{array} \right) = \delta_{j,j_1+j_2} \delta_{jm} \quad (4.22)$$

$$\begin{pmatrix} j' & 0 & | & j \\ m' & 0 & | & m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & j' & | & j \\ 0 & m' & | & m \end{pmatrix} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (4.23)$$

$$\begin{pmatrix} j & j' & | & 0 \\ m & -m' & | & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (4.24)$$

$$\begin{pmatrix} j & \frac{1}{2} & | & j + \frac{1}{2} \\ m & \pm \frac{1}{2} & | & m \pm \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{j \pm m + 1}{2j+1}} \quad (4.25)$$

$$\begin{pmatrix} j & \frac{1}{2} & | & j - \frac{1}{2} \\ m & \pm \frac{1}{2} & | & m \pm \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \mp \sqrt{\frac{j \mp m}{2j+1}} \quad (4.26)$$

Insbesondere kann man aus (4.24) ablesen, wie man aus Drehimpulszuständen  $|jm\rangle$  einen  $SU(2)$ -invarianten Zustand konstruiert:

$$|00\rangle = \sum_m \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} |jm\rangle \otimes |j-m\rangle \quad (4.27)$$

Aus (4.25-26) folgt, wie wir angesichts der Spin-Bahn-Wechselwirkung für das H-Atom oder für die Alkali-Atome den Elektronenzustand mit den Quantenzahlen  $j, m$  des Gesamtdrehimpulses konstruieren:

$$|jm\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}} Y_{\ell m - 1/2} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}} Y_{\ell m + 1/2} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & j = \ell + \frac{1}{2} \\ -\sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}} Y_{\ell m - 1/2} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}} Y_{\ell m + 1/2} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.28)$$

Eine oft benutzte Symmetrierelation der CG-Koeffizienten im Zusammenhang mit dem Pauli-Prinzip ist

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & | & j \\ m_1 & m_2 & | & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & | & j \\ m_2 & m_1 & | & m \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

## 4.4 Das Wigner-Eckart-Theorem

Es sei  $U$  eine unitäre Darstellung der  $SU(2)$  auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Im allgemeinen ist eine solche Darstellung reduzibel, und die irreduzible Darstellung  $D^j$  kommt oft mit hoher Multiplizität darin vor. Wir können deshalb davon ausgehen, daß es auf vielfache Weise möglich ist,

Vektoren  $\Phi_{jm} \in \mathcal{H}$  für gewisse Werte von  $j$  und für  $-j \leq m \leq j$  so anzugeben, daß

$$U(u)\Phi_{jm'} = \sum_m D_{mm'}^j(u)\Phi_{jm} \quad (4.30)$$

für alle  $u \in SU(2)$  erfüllt ist. Wenn wir auch noch zulassen, daß  $\Phi_{jm}$  gelegentlich der Nullvektor ist, so können wir o.B.d.A. annehmen, die Vektoren  $\Phi_{jm}$  seien für *alle*  $j$  und  $m$  definiert. Angesichts der Eigenschaft (4.30) hat sich folgender Sprachgebrauch eingebürgert: Man sagt, das System der Vektoren  $\Phi_{jm}$  mit festem  $j$  transformiert sich *wie die kanonische Basis der Darstellung  $D^j$* . Das darf nicht dazu verleiten anzunehmen, die Vektoren  $\Phi_{jm}$  bilden selbst eine Basis in  $\mathcal{H}$ : Wir haben nicht einmal vorausgesetzt, daß es sich um normierte Vektoren handelt. In den Anwendungen begegnet man solchen Vektoren auf vielfache Weise, und es bleibt die Struktur von Skalarprodukten zu untersuchen, wenn wir etwa einen zweiten Satz von Vektoren  $\Psi_{jm} \in \mathcal{H}$ , der genau die gleichen Eigenschaften - ausgedrückt in (4.30) - besitzt, vor uns haben.

**Satz 25** *Unter den genannten Bedingungen gilt*

$$(\Psi_{j'm'}, \Phi_{jm}) = c_j \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (4.31)$$

für gewisse komplexe Zahlen  $c_j$  unabhängig von  $m$ .

Beweis. 1.Fall:  $j \neq j'$ .  $\Phi_{jm}$  und  $\Psi_{j'm'}$  gehören orthogonalen Teilräumen  $\mathcal{H}_j$  und  $\mathcal{H}_{j'}$  an, weil die auf diesen Teilräumen operierenden Darstellungen der  $SU(2)$  inäquivalent sind.

2.Fall:  $j = j'$ ,  $m \neq m'$ .  $\Phi_{jm}$  und  $\Psi_{j'm'}$  gehören orthogonalen Teilräumen  $\mathcal{H}_{jm}$  und  $\mathcal{H}_{j'm'}$  an, weil die auf diesen Teilräumen operierenden Darstellungen der  $U(1)$  inäquivalent sind<sup>7</sup>.

3.Fall:  $j = j'$ ,  $m = m'$ . Wenn  $J_1, J_2, J_3$  die Erzeuger der Darstellung  $U$  sind, so gilt für  $-j \leq m < j$

$$(\Psi_{jm+1}, (J_1 + iJ_2)\Phi_{jm}) = ((J_1 - iJ_2)\Psi_{jm+1}, \Phi_{jm})$$

also unter Ausnutzung von (3.94-95)

$$\sqrt{(j+m+1)(j-m)}(\Psi_{jm+1}, \Phi_{jm+1}) = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}(\Psi_{jm}, \Phi_{jm})$$

<sup>7</sup>Gemeint ist diejenige Untergruppe  $U(1) \subset SU(2)$ , die den Drehungen um die 3-Achse entspricht.

Da die Wurzel ausdrücke ungleich Null sind, müssen die Zahlen  $c_j = (\Psi_{jm}, \Phi_{jm})$  unabhängig von  $m$  sein.  $\square$

Nicht nur Vektoren können sich wie die kanonische Basis einer irreduziblen Darstellung transformieren, auch Operatoren können diese Eigenschaft besitzen.

**Definition 17** Existiert für festes  $j$  ein Satz von Operatoren  $\{T_{jm} : -j \leq m \leq j\}$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , so daß für alle  $u \in SU(2)$

$$U(u)T_{jm'}U(u^{-1}) = \sum_m D_{mm'}^j(u)T_{jm} \quad (4.32)$$

erfüllt ist, so heißt  $T$  ein irreduzibler Tensoroperator oder kurz Tensoroperator vom Typ  $j$  unter der Darstellung  $U$ .

Bemerkung: Obwohl die Definition für die  $SU(2)$  vorgenommen wurde, ist es, wie man leicht sieht, ohne weiteres möglich eine ähnliche Definition für jede kompakte Gruppe zu geben. Zugleich ist diese Definition eine Verallgemeinerung des Konzeptes "Vektoroperator": Drei Operatoren  $A_1, A_2, A_3$  auf  $\mathcal{H}$  bilden einen Vektoroperator, wenn

$$U(u)A_kU(u^{-1}) = \sum_i R_{ik}A_i \quad (4.33)$$

mit  $R = f(u)$  gilt, wobei  $SU(2) \xrightarrow{f} SO(3)$  die Überlagerungsabbildung bezeichnet. Gehen wir hier zu infinitesimalen Transformationen über, so erhalten wir die äquivalente Formulierung

$$[A_j, J_k] = [J_j, A_k] = \begin{cases} iA_\ell & j, k, \ell = 1, 2, 3 \text{ zyklisch} \\ 0 & j = k \end{cases} \quad (4.34)$$

Auf diese Weise können viele bekannte Operatoren, wie der Ortsoperator  $\mathbf{Q}$ , der Impulsoperator  $\mathbf{P}$  und alle Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{J}$  etc. als Vektoroperatoren erklärt werden. Es ist nun leicht, aus den Komponenten  $A_1, A_2, A_3$  eines beliebigen Vektoroperators die kanonischen Komponenten  $A_{1m}$  ( $m = -1, 0, 1$ ) eines Tensoroperators vom Typ 1 im Sinne der Definition 13 zu formen:

$$A_{1m} = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_1 + iA_2) & m = 1 \\ A_3 & m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(A_1 - iA_2) & m = -1 \end{cases} \quad (4.35)$$

Zur Verifizierung kann man etwa (3.100) für  $\ell = 1$  heranziehen.

Wir studieren nun die Anwendung eines Tensoroperators vom Typ  $j_1$  auf Vektoren  $\phi_{j_2 m_2}$  ( $j_2$  fest):

$$T_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}$$

Die Gleichungen (4.30) und (4.32) zusammen ergeben, daß die so gewonnenen Vektoren einen invarianten Teilraum von  $\mathcal{H}$  aufspannen, auf dem  $U$  durch die Darstellung  $D^{j_1} \times D^{j_2}$  vertreten ist. Diese Darstellung kann in irreduzible Bestandteile zerlegt werden: Mit Hilfe der CG-Koeffizienten definieren wir Vektoren

$$\Phi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) T_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}$$

die, falls sie nicht verschwinden, die gewünschten Teilräume aufspannen. Die Relation läßt sich umkehren und wir erhalten

$$T_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2} = \sum_{jm} \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \Phi_{jm}$$

Diese Darstellung erlaubt es nun, die allgemeine Gestalt von Matrixelementen eines Tensoroperators zu bestimmen.

**Satz 26** (Wigner-Eckart-Theorem) *Seien  $\{\phi_{j_2 m_2}\}$  und  $\{\Psi_{jm}\}$  zwei Sätze von Vektoren mit dem durch (4.30) beschriebenen Transformationsverhalten und  $T$  ein Tensoroperator vom Typ  $j_1$ . Dann existieren komplexe Zahlen, unabhängig von  $m_1, m_2, m$ , die wir mit*

$$(\Psi_j \| T_{j_1} \| \phi_{j_2})$$

*bezeichnen und reduzierte Matrixelemente nennen, so daß*

$$(\Psi_{jm}, T_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}) = \left( \begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) (\Psi_j \| T_{j_1} \| \phi_{j_2}) \quad (4.36)$$

*gilt.*

**Beweis.** Die Behauptung folgt direkt aus der Gleichung (4.4) und Satz 25.  $\square$

Eine Konsequenz dieses Satzes: Unter den Observablen der Quantenmechanik können keine Tensoroperatoren vom halbzahligen Typ vorkommen, also keine vom Typ  $1/2$ ,  $3/2$  usw.; denn alle Erwartungswerte eines solchen Operators in Zuständen mit festem Drehimpuls würden verschwinden, weil der zugehörige CG-Koeffizient verschwindet. Wir müßten schon Erwartungswerte von solchen Zuständen betrachten, die aus Superpositionen von Wellenfunktionen mit halbzahligen und ganzzahligen Drehimpulsen hervorgehen. Aber solche Zustände gibt es nicht in der Natur<sup>8</sup>. In der Quantenfeldtheorie treten dagegen Tensoroperatoren vom Typ  $1/2$  auf: Jeder Erzeugungs- oder Vernichtungsoperator eines Elektrons mit  $\ell = 0$  ist ein solcher Operator.

Tensoroperatoren vom Typ 0 sind natürlich alle diejenigen Operatoren, die im herkömmlichen Sinne *invariant* genannt werden. Sie heißen auch *Skalare*. Ist also  $T$  ein skalarer Operator, so reduziert sich das Wigner-Eckart-Theorem auf die Aussage:

$$(\Psi_{jm}, T\phi_{j'm'}) = (\Psi_j || T || \phi_j) \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Tensoroperatoren vom Typ  $\ell$  ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ) haben wir bereits im Abschnitt 3.7 kennengelernt. Es handelt sich dabei um die Multipoloperatoren  $Q_{\ell m}$ . Aufgrund ihrer Definition haben diese Operatoren noch eine weitere entscheidende Eigenschaft: sie besitzen eine definierte Parität. Sei nämlich  $P$  der Paritätsoperator, so gilt

$$PQ_{\ell m}P = (-1)^\ell Q_{\ell m} \quad (4.37)$$

Dies folgt ganz einfach aus der Tatsache, daß die harmonischen Polynome eine definierte Parität besitzen. Damit ist nun klar, daß Erwartungswerte von  $Q_{\ell m}$  in Zuständen definierter Parität gleich Null sind, wenn  $\ell$  ungerade ist. Wir beobachten deshalb weder bei den Atomen, noch bei den Kernen, noch bei den Elementarteilchen statische elektrische Dipolmomente (oder Oktupolmomente etc.). Welchen Gesamtdrehimpuls  $j$  muß der Grundzustand eines Atoms (eines Kerns, eines Elementarteilchens im Ruhesystem) mindestens besitzen, damit ein elektrisches Quadrupolmoment beobachtet werden kann? Aus der Dreiecksbedingung  $\delta(j2j) = 1$  folgt  $j \geq 1$ . Für den Erwartungswert erhalten wir

---

<sup>8</sup>Dies ist der Inhalt einer sog. Superauswahlregel, die solche Superpositionen verbietet, als nicht realisierbar erklärt.

dann den Ausdruck

$$\langle j\mu' | Q_{2m} | j\mu \rangle = \begin{pmatrix} j & 2 & j \\ \mu' & m & \mu \end{pmatrix} (j \| Q_2 \| j) \quad (4.38)$$

d.h. das Quadrupolmoment ist durch *eine* Zahl vollkommen bestimmt, als die wir das reduzierte Matrixelement wählen, wobei wir die Normierung  $\langle j\mu' | j\mu \rangle = \delta_{\mu\mu'}$  voraussetzen.

## 4.5 Wirkungen des Pauli-Prinzips

Bei einem n-Körperproblem von identischen Teilchen tritt durch die Statistik<sup>9</sup> oft eine Reduktion der Symmetrie ein, gerade so, als ob ein symmetriebrechender Term im Hamilton-Operator vorhanden wäre. Wir betrachten ein einfaches Beispiel.

Zwei Elektronen ohne Berücksichtigung ihrer Spins werden durch eine antisymmetrische Ortsfunktion beschrieben:

$$\Phi(x^{(1)}, x^{(2)}) = -\Phi(x^{(2)}, x^{(1)})$$

Bewegen die Elektronen sich in einem Zentralpotential und bleibt die gegenseitige Coulomb-Abstoßung unberücksichtigt, so könnte man Symmetrietransformationen der Art

$$\Phi'(x^{(1)}, x^{(2)}) = \Phi(R_1^{-1}x^{(1)}, R_2^{-1}x^{(2)}) \quad R_1, R_2 \in SO(3)$$

vermuten, da man, ohne die Energie zu beeinflussen, die beiden Ortsvektoren unabhängig voneinander drehen kann. Daß dies dennoch nicht richtig ist, erkennt man daran, daß die so erhaltene Wellenfunktion  $\Phi'$  das Pauli-Prinzip verletzt:  $\Phi'$  ist nicht mehr antisymmetrisch, es sei denn  $R_1 = R_2$ . Mit anderen Worten, das Pauli-Prinzip vermindert die Symmetrie; von der größeren Gruppe  $SO(3) \times SO(3)$  bleibt nur die kleinere Diagonalgruppe übrig. Dies äußert sich so, daß nicht, wie zuvor erwartet, die Einzeldrehimpulse Erhaltungsgrößen sind, sondern nur

---

<sup>9</sup>Man unterscheidet Bosonen und Fermionen, je nachdem, ob die Teilchen der Bose-Einstein-Statistik oder der Fermi-Dirac-Statistik genügen. Im ersten Fall sind die Wellenfunktionen symmetrische im zweiten Fall antisymmetrische Funktionen der Teilchenkoordinaten.

noch deren Summe  $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$ : Das Pauli-Prinzip bewirkt eine Kopplung der Drehimpulse, so als ob die Elektronen miteinander in Wechselwirkung stünden.

Wir erweitern nun die Betrachtung durch Einbeziehung des Elektronenspins. Für den Raum  $\mathbf{C}^4 = \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$  der Spinzustände zweier Elektronen bilden die folgenden Vektoren eine Basis:

$$\phi_{sm} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & s = 0 \quad m = 0 \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & s = 1 \quad m = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & s = 1 \quad m = 0 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & s = 1 \quad m = -1 \end{cases}$$

Die hierbei auftretenden Linearkombinationen wurden mit Hilfe der CG-Koeffizienten bestimmt. Als Ergebnis erhalten wir antisymmetrische Spinfunktionen für den Gesamtspin  $s = 0$ , dagegen symmetrische für  $s = 1$ . Wird nun eine bestimmte Symmetrie erzwungen, z.B. durch das Pauli-Prinzip für die Gesamtwellenfunktion, tritt damit zugleich eine Kopplung der Elektronenspins ein und wir erhalten Zustände mit definiertem Gesamtspin  $s$ . Diesen Effekt sehen wir bei dem Heliumatom. Denn, insoweit wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung vernachlässigen und zufällige Entartungen ausschließen dürfen, ist hier jeder stationäre Zustand ein Produkt aus einer Orts- und einer Spinfunktion. Die Ortsfunktion ist entweder symmetrisch oder antisymmetrisch unter der Vertauschung<sup>10</sup> von  $x^{(1)}$  und  $x^{(2)}$ . Dies erzwingt die Antisymmetrie bzw. Symmetrie der Spinfunktion, und wir haben es mit Gesamtwellenfunktionen der folgenden Art zu tun:

$$\Phi_s(x^{(1)}, x^{(2)})\phi_{sm}$$

wobei

$$\Phi_s(x^{(1)}, x^{(2)}) = (-1)^s \Phi_s(x^{(2)}, x^{(1)})$$

<sup>10</sup>Formal entspricht der Vertauschung  $\sigma$  der Ortskoordinaten eine Symmetriegruppe, nämlich die symmetrische Gruppe  $S_2$ . Jedem Eigenwert der Energie entspricht eine irreduzible Darstellung dieser Gruppe, sofern keine zufällige Entartung vorliegt. Die beiden irreduziblen Darstellungen sind  $\sigma = 1$  und  $\sigma = -1$ .

gilt. Das Termschema des Heliumatoms besteht aus einem Singulett-Termsystem ( $s = 0$ ) und einem Triplett-Termsystem ( $s = 1$ ), die nicht interkombinieren, zwischen denen also keine Strahlungsübergänge beobachtet werden<sup>11</sup>. Man hat deshalb zunächst geglaubt, es gäbe zwei Arten von Helium-Atomen, und hat diese Parhelium und Orthohelium genannt. Der Grundzustand des Heliums ist ein Singulett-Zustand und wird mit  $1^1S$  bezeichnet. Das Zerfallen des Spektrums in Singulett- und Triplettserien findet man auch bei den Erdalkalien, bei Quecksilber, Cadmium und Zink sowie allen Ionen mit zwei äußeren Elektronen, ist also eine für alle Zweielektronensysteme typische Erscheinung.

Als nächstes Beispiel studieren wir ein 3-Elektronensystem, eine Situation also typisch für die Elemente der dritten Hauptgruppe des Periodensystems. Wir beginnen mit der Konstruktion der Spinfunktionen, die einem 8-dimensionalen Raum angehören, auf dem die Darstellung

$$D^{1/2} \times D^{1/2} \times D^{1/2} \cong 2D^{1/2} \oplus D^{3/2}$$

der  $SU(2)$  wirkt. Dem Teilraum mit  $s = 3/2$  gehören nur symmetrische Spinfunktionen an; er ist 4-dimensional und besitzt die kanonische Basis:

$$\phi_{sm} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & m = 3/2 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ \quad \left. + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & m = 1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right. \\ \quad \left. + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & m = -1/2 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & m = -3/2 \end{cases}$$

Hier ist dem Pauli-Prinzip Rechnung getragen, wenn die Ortsfunktion total antisymmetrisch ist. Die Energieniveaus, die zu  $s = 3/2$  gehören,

<sup>11</sup>Eine Untersuchung der Spektren bei hoher Auflösung ergibt, daß die Singulett-Zustände einfach, die Triplett-Zustände dagegen aus drei dicht beieinanderliegenden Niveaus bestehen, was durch die Spin-Bahn-Kopplung erklärt werden kann. Strahlungsübergänge zwischen Zuständen mit gleichgerichteten Spins ( $\uparrow\uparrow$ ) und Zuständen mit entgegengerichteten Spins ( $\uparrow\downarrow$ ) sind extrem unwahrscheinlich.

machen sich dadurch bemerkbar, daß sie bei genügender Auflösung eine Feinstruktur von vier dicht beieinander liegenden Niveaus zeigen. Man spricht dann von einem Quartett-Termsystem.

Außerdem beobachtet man ein Dublett-Termsystem entsprechend dem Gesamtspin  $s = 1/2$ . Die Symmetrie der zugehörigen Spinfunktionen ist ein wenig verwickelter. Für den 4-dimensionalen Vektorraum  $L_4$  der Darstellung  $D^{1/2} \oplus D^{1/2}$  wählen wir ein übervollständiges System von sechs Basisvektoren:

$$\begin{aligned} \phi_{sm}^1 &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & m = 1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & m = -1/2 \end{cases} \\ \phi_{sm}^2 &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} & m = 1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} & m = -1/2 \end{cases} \\ \phi_{sm}^3 &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} & m = 1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} & m = -1/2 \end{cases} \end{aligned}$$

Die verknüpfende Relation lautet

$$\phi_{sm}^1 + \phi_{sm}^2 + \phi_{sm}^3 = 0 \quad (m = \pm \frac{1}{2}) \quad (4.39)$$

durch die es im Prinzip möglich wäre zwei der Basisvektoren zu eliminieren. Die Willkür, die in einer solchen Prozedur steckt, hat ihre Ursache darin, daß die Darstellung  $D^s$  ( $s = \frac{1}{2}$ ) *zweifach* auftritt. Man findet für die Skalarprodukte die folgenden Werte:

$$(\phi_{sm'}^i, \phi_{sm}^k) = \begin{cases} \delta_{mm'} & i = k \\ -\frac{1}{2}\delta_{mm'} & i \neq k \end{cases} \quad (4.40)$$

Es ist nun möglich, die Beschreibung der genannten Situation übersichtlicher zu gestalten, indem man den Raum  $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$  zum Darstellungsraum der Gruppe  $G = SU(2) \times S_3$  erklärt, und zwar durch die folgende Wirkung der symmetrischen Gruppe  $S_3$ :

$$v_1 \otimes v_2 \otimes v_3 \mapsto v_{\sigma(1)} \otimes v_{\sigma(2)} \otimes v_{\sigma(3)}$$

wobei

$$v_i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma \in S_3$$

Auf die Vektoren  $\phi_{sm}^i$  angewandt, bewirkt eine Permutation  $\sigma$  die Transformation

$$\phi_{sm}^i \mapsto \det \sigma \phi_{sm}^{\sigma(i)}$$

Hierbei ist  $\det \sigma = \pm 1$  die Signatur der Permutation. Auf diese Weise wird deutlich, daß der Raum  $L_4$  ein invarianter Teilraum unter der Wirkung der Gruppe  $G$  ist. Wir schreiben diesen Raum als Tensorprodukt,  $L_4 = \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$ , indem wir den Basisvektoren die folgende Gestalt geben:

$$\phi_{sm}^i = \phi_{sm} \otimes e_i \quad (i = 1, 2, 3)$$

wobei die Vektoren  $\phi_{sm}$  mit  $s = \frac{1}{2}$  eine kanonische Basis für die identische Darstellung der  $SU(2)$  bilden; insbesondere gilt  $(\phi_{sm'}, \phi_{sm}) = \delta_{mm'}$ . Die Vektoren  $e_i$  dagegen erfüllen die Beziehungen

$$e_1 + e_2 + e_3 = 0$$

$$(e_i, e_k) = \begin{cases} 1 & i = k \\ -\frac{1}{2} & i \neq k \end{cases}$$

und können somit geometrisch-anschaulich als Vektoren interpretiert werden, die vom Zentrum eines gleichseitigen Dreiecks zu dessen Ecken führen. Eine Permutation  $\sigma \in S_3$  bewirkt nun die folgende Transformation:

$$e_i \mapsto \det \sigma e_{\sigma(i)}$$

Ein Vergleich mit den Ausführungen Abschnitt 2.2 (Beispiel 4) lehrt, daß die Gruppe  $G$  auf  $L_4$  irreduzibel und treu dargestellt ist, als  $D^s(u) \otimes \det \sigma D'(\sigma)$  mit  $(u, \sigma) \in G$ , wobei  $D'$  die zweidimensionale irreduzible Darstellung<sup>12</sup> der Gruppe  $S_3$  bezeichnet (siehe S.29).

Der nächste Schritt besteht nun darin, Gesamtwellenfunktionen für drei Elektronen mit dem Gesamtspin  $s = \frac{1}{2}$  als Summen über Produktfunktionen zu konstruieren:

$$\sum_{i=1}^3 \Phi_i(x) \phi_{sm} \otimes e_i \quad x = \{x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}\} \in \mathbf{R}^9 \quad (4.41)$$

<sup>12</sup>Setzen wir  $D''(\sigma) = \det \sigma D'(\sigma)$ , so gilt  $D'' \cong D'$ , wie man sich leicht klar macht. Diese Tatsache benötigen wir jedoch nicht.

Eine auf diese Weise konstruierte Gesamtwellenfunktion ist normiert, wenn gilt

$$\frac{1}{2}\|\Phi_1 - \Phi_2\|^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_2 - \Phi_3\|^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_3 - \Phi_1\|^2 = 1 \quad (4.42)$$

wobei  $\|\cdot\|$  die Norm in  $L^2(\mathbf{R}^9)$  bezeichnet. Eine Verschiebung  $\Phi_i \mapsto \Phi_i + \Psi$  verändert die Gesamtwellenfunktion nicht, so daß wir die Freiheit haben, die drei Ortsfunktionen durch die Relation

$$\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 = 0$$

miteinander zu verknüpfen. Weitere einschränkende Bedingungen folgen aus dem Pauli-Prinzip. Eine Permutation der Ortskoordinaten kann so beschrieben werden:

$$\sigma x = \{x^{(a)}, x^{(b)}, x^{(c)}\} \quad \begin{array}{l} a = \sigma(1) \\ b = \sigma(2) \\ c = \sigma(3) \end{array}$$

und eine unitäre Darstellung der  $S_3$  durch die Vorschrift, *alle* Teilchenkoordinaten zu permutieren:

$$\left[ U(\sigma) \sum_i \Phi_i \otimes \phi_{sm} \otimes e_i \right] (x) = \sum_i \Phi_i(\sigma^{-1}x) \phi_{sm} \otimes \det \sigma e_{\sigma(i)} \quad (4.43)$$

Die entscheidende Symmetriebedingung für die drei Ortsfunktionen ist

$$\forall \sigma \in S_3 \quad \Phi_i(x) = \Phi_{\sigma(i)}(\sigma x) \quad (4.44)$$

Denn nur so folgt  $U(\sigma) = \det \sigma 1$ , d.h. nur so ist dem Pauli-Prinzip Rechnung getragen.

## 4.6 Die Elektronenkonfiguration

In einem Atom mit mehr als einem Elektron wechselwirken alle Elektronen miteinander. Als Zustände eines solchen Systems kommen streng genommen nur Wellenfunktionen in Betracht, in denen alle Teilchenkoordinaten miteinander korreliert werden: Vom Zustand eines einzelnen Elektrons kann dabei nicht gesprochen werden, er bleibt undefiniert.

Dennoch zeigt es sich, daß man bei einem Atom in *Näherung* von den Zuständen der einzelnen Elektronen sprechen kann. Die Näherung, die eine solche Beschreibung möglich macht, ist die *Zentralfeldapproximation* (s. Abschnitt 1.3). Es handelt sich dabei um die stationären Zustände jedes einzelnen Elektrons in einem *effektiven* Potential, das von dem Kern und allen übrigen Elektronen im Mittel erzeugt wird. Im allgemeinen muß man sogar davon ausgehen, daß dieses Potential für 2s-Elektronen anders aussieht als für 4f-Elektronen. Die Gesamtwellenfunktion wird dann aus Produkten der Einteilchenwellenfunktionen aufgebaut unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips.

Zu den Annahmen gehört, daß das Potential rotationssymmetrisch ist. Deshalb wird jeder Einteilchenzustand durch einen bestimmten Wert des Bahndrehimpulses  $\ell$  charakterisiert. Die Zustände für festes  $\ell$  werden - in der Reihenfolge wachsender Energie - durch die Zahl  $n$  numeriert, die man die *Hauptquantenzahl* nennt. Wie beim H-Atom beginnt man die Zählung stets bei  $n = \ell + 1$ . Jedoch ist die Reihenfolge der Energieniveaus mit verschiedenem  $n$  und  $\ell$  im allgemeinen anders als bei dem H-Atom. Zum Beispiel hängt die Energie bei wasserstoffähnlichen Atomen überhaupt nicht von  $\ell$  ab: dies ist bei komplizierten Atomen nicht mehr der Fall. Beim Gang durch das Periodensystem kommt es vor, daß das Niveau mit  $n = 5, \ell = 0$  tiefer liegt als das Niveau mit  $n = 4, \ell = 2$ . Es gibt aber immer  $2(2\ell + 1)$  verschiedene Zustände mit gleichem  $n$  und  $\ell$  entsprechend den möglichen Einstellungen des Bahndrehimpulses und des Spins. Diese Zustände werden *äquivalent* genannt. Das Pauli-Prinzip gestattet nicht, daß mehr als  $2(2\ell + 1)$  Elektronen dieselben Werte von  $n$  und  $\ell$  haben. Sind daher alle Zustände mit gegebenen  $n$  und  $\ell$  besetzt, so spricht man von einer abgeschlossenen Schale. Die Verteilung der Elektronen über die Zustände mit verschiedenen  $n$  und  $\ell$  nennt man die *Elektronenkonfiguration*. So hat der Grundzustand des Aluminiums die Konfiguration

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$$

und es ist ersichtlich, daß hier die K-Schale ( $n = 1, \ell = 0$ ), die beiden L-Unterschalen ( $n = 2, \ell = 0$  und  $n = 2, \ell = 1$ ) sowie die M-Unterschale mit  $n = 3, \ell = 0$  abgeschlossen ist. Dabei wird unterstellt, der Gesamtspin von dem 3p-Elektron allein bestimmt wird: Der Grundzustand hat also  $s = \frac{1}{2}$ . Zugleich bietet das Aluminium ein

Beispiel für ein 3-Elektronensystem, wenn wir alle Valenzelektronen auf der M-Schale in die Rechnung einbeziehen. Die allgemeine Analyse eines solchen Systems, die wir in dem vorigen Abschnitt durchgeführt haben und die die Zentralfeldapproximation nicht benutzte, läßt auch eine Beschreibung des  $3s^23p$ -Zustandes zu, wobei der Approximation zufolge Produktwellenfunktionen gebildet aus der  $3s$ -Ortsfunktion  $u_0$  und der  $3p$ -Ortsfunktion  $u_1$  auftreten<sup>13</sup>:

$$\Phi_1 = u_0(1)\{u_0(2)u_1(3) - u_1(2)u_0(3)\}$$

$$\Phi_2 = u_0(2)\{u_0(3)u_1(1) - u_1(3)u_0(1)\}$$

$$\Phi_3 = u_0(3)\{u_0(1)u_1(2) - u_1(1)u_0(2)\}$$

Wir diskutieren nun das allgemeine Problem, Korrekturen zur ZF-Approximation zu erfassen. Zu berücksichtigen sind im wesentlichen zwei Anteile des Hamilton-Operators  $H = H_0 + H_1 + H_2$  :

1. Die Differenz  $H_1$  zwischen der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander und der mittleren Wechselwirkung, die bereits durch das Zentralfeld berücksichtigt wurde.
2. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung  $H_2$ .

**Das LS-Kopplungsschema.** Hier nimmt man an, daß der zu erwartende Effekt von  $H_1$  den von  $H_2$  überwiegt. In dieser Situation ist von allen Bahndrehimpulsen nur noch deren Summe  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}^{(i)}$  eine Erhaltungsgröße und damit auch  $\mathbf{J} - \mathbf{L} = \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}^{(i)}$ . Das Pauli-Prinzip verhindert, daß die individuellen Spinoperatoren  $\mathbf{S}^{(i)}$  Erhaltungsgrößen sind. Die Grobstruktur der beobachteten Niveaus kann also durch die Eigenwerte von  $\mathbf{L}^2$  und  $\mathbf{S}^2$  gut beschrieben werden. Die zugehörigen Eigenfunktionen werden näherungsweise als Linearkombinationen von Zuständen eines Energieniveaus von  $H_0$  berechnet (keine Konfigurationsmischung). Dies sind endlich viele Zustände (nämlich 2, 6, 10, 14 oder 18), und das Problem reduziert sich darauf, die Eigenwerte einer Matrix zu bestimmen. In einem zweiten Schritt berücksichtigt man  $H_2$ .

---

<sup>13</sup>Wir unterdrücken hier die Abhängigkeit von der Richtungsquantenzahl  $m$  des Drehimpulses  $\ell = 1$ . Ebenso benutzen wir  $i$  anstelle von  $x^{(i)}$  als Argument in den Einteilchenfunktionen. Die entstehenden Funktionen sind unnormiert.

Jetzt ist nur noch  $\mathbf{J}$  eine Erhaltungsgröße, und man beobachtet eine Kopplung von  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  in Form der Feinstruktur, deren Niveaus durch die Eigenwerte von  $\mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{S}^2$  und  $\mathbf{J}^2$ , also durch Quantenzahlen  $\ell, s, j$  charakterisiert werden. Die Näherung besteht darin, daß die wahren Eigenfunktionen als Linearkombinationen von Wellenfunktionen eines Energieniveaus von  $H_0 + H_1$  konstruiert werden, und dies ist wiederum ein Matrixproblem. Der Anwendungsbereich dieser Näherung ist beschränkt. Auf diese Weise können die Niveaus der leichten Atome bestimmt werden. Mit zunehmender Ordnungszahl oder bei stark angeregten leichten Atomen ist die Näherung nicht mehr anwendbar.

**Das jj-Kopplungsschema.** Hier nimmt man an, daß der zu erwartende Effekt überwiegend von  $H_2$  bestimmt wird. Die individuellen Bahndrehimpulse und Spins sind keine Erhaltungsgrößen, wohl aber deren Summe  $\mathbf{J}^{(i)} = \mathbf{L}^{(i)} + \mathbf{S}^{(i)}$ . Auch hier erlaubt man keine Konfigurationsmischung, um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten. Berücksichtigt man dann noch  $H_1$ , so bleibt nur  $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{J}^{(i)}$  als Erhaltungsgröße übrig. Bei der im letzten Schritt benutzten Näherung werden die Niveaus durch die Eigenwerte von  $\mathbf{J}^{(i)2}$  und  $\mathbf{J}^2$  charakterisiert und die wahren Eigenfunktionen als Linearkombinationen von Wellenfunktionen eines Energieniveaus von  $H_0 + H_2$  konstruiert. In Wirklichkeit tritt dieser Kopplungstyp in reiner Form überhaupt nicht auf. Bei sehr schweren Atomen beobachtet man Zwischenstufen zwischen der LS- und der jj-Kopplung. Für viele Atome ist weder die eine noch die andere Näherung brauchbar.

In ein konstantes Magnetfeld  $B$  gebracht, besitzt ein Atom eine zusätzliche Wechselwirkungsenergie

$$H_3 = \mu_B B \cdot (\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \quad g - 2 = 0,00231928 \dots$$

wobei  $\mu_B$  das Bohrsche Magneton bezeichnet. Die Abweichung von  $g = 2$  (der Vorhersage der Dirac-Theorie) wird einem *anomalen* magnetischen Moment des Elektrons zugeschrieben, das durch die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Strahlungsfeld hervorgerufen wird und mit Hilfe der Quantenelektrodynamik berechenbar ist.

Die  $SU(2)$ -Symmetrie wird durch die Anwesenheit von  $H_3$  gebrochen, und die verbleibende  $U(1)$ -Symmetrie wird durch diejenige Untergruppe der  $SU(2)$  beschrieben, die den Drehungen um die Achse

des Magnetfeldes entspricht. Geben wir dem B-Feld die Richtung der 3-Achse, so handelt es sich offenbar um die Gruppe

$$G = \left\{ \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} : 0 \leq \alpha < 2\pi \right\} \cong U(1)$$

Da  $G$  eine abelsche Gruppe ist, sind die irreduziblen Darstellungen von  $G$  alle eindimensional:

$$d^n(\alpha) = e^{in\alpha} \quad n \in \mathbf{Z} \quad (4.45)$$

Setzt man in die Darstellungsmatrizen  $D^j$  der  $SU(2)$  die Elemente der Untergruppe  $G$  ein (siehe Gleichung 3.78), so erhält man<sup>14</sup>

$$D^j(\alpha)_{m'm} = e^{2im\alpha} \delta_{mm'} \quad (4.46)$$

Resultat: Bei Einschränkung (Subduktion) der Darstellung  $D^j$  der  $SU(2)$  auf die Untergruppe  $G$  zerfällt diese Darstellung in eine direkte Summe von  $2j + 1$  irreduziblen Darstellungen:

$$D^j|_G \cong \bigoplus_{m=-j}^j d^{2m} \quad (4.47)$$

Wir erläutern nun das Verhalten eines Atoms in schwachen und starken Magnetfeldern.

**Der Zeeman-Effekt.** Werden die Energieniveaus bei abgeschaltetem Magnetfeld gut durch das LS-Kopplungsschema beschrieben, so äußert sich die Anwesenheit eines schwachen Magnetfeldes in der Aufspaltung der durch  $\ell, s, j$  gekennzeichneten Niveaus: die  $(2j + 1)$ -fache Entartung wird aufgehoben. Entsprechend den in  $D^j$  enthaltenen Darstellungen  $d^{2m}$  von  $G$  entstehen äquidistante Subniveaus. Die Aufspaltung ist dem Magnetfeld proportional. Jedem Subniveau ist somit eine Quantenzahl  $m$  zugeordnet, die man aus diesem Grund die *magnetische* Quantenzahl nennt. Da die Darstellungen  $d^{2m}$  eindimensional sind, ist kein Subniveau entartet. Diese Vorstellung ist nur insoweit korrekt, als man annehmen darf, daß die Matrixelemente von  $\mathbf{S}$  zwischen Zuständen mit

<sup>14</sup>Wir schreiben vereinfachend  $D^j(\alpha)$  anstelle von  $D^j(u_3(-2\alpha))$ .

verschiedenem  $j$  vernachlässigbar sind. In der Praxis der Störungsrechnung erreicht man dies durch den (nur als Näherung gedachten) Ansatz  $\mathbf{S} = r\mathbf{J}$ , wobei  $r$  eine für jedes  $(\ell sj)$ -Niveau charakteristische reelle Zahl ist, die man leicht bestimmen kann:

$$\begin{aligned} 2rj(j+1) &= 2r\mathbf{J}^2 = 2\mathbf{J}\mathbf{S} = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - (\mathbf{J} - \mathbf{S})^2 \\ &= \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2 = j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1) \end{aligned}$$

Der Operator  $H_3$  erhält (mit  $g = 2$ ) die Form  $\mu_B|B|(J_3 + S_3) = \mu_B|B|(1+r)J_3$ . Bezeichnen wir die Eigenwerte von  $J_3$  mit  $m$ , so ergeben sich die Energieniveaus zu

$$E_{\ell sjm} = E_{\ell sj} + \mu_B|B|g_{\ell sj}m \quad (4.48)$$

$$g_{\ell sj} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)} \quad (4.49)$$

Die Konstante  $g_{\ell sj}$  wird *Landé-Faktor* genannt.

**Der Paschen-Back-Effekt.** In starken Magnetfeldern entsprechen die beobachteten Niveaus eher den Eigenwerten von  $H_0 + H_3$  mit einer durch  $H_2$  verursachten Feinstruktur. Das Magnetfeld hebt die Entartung der Niveaus von  $H_0$  (ausgedrückt in den magnetischen Quantenzahlen  $m \in \{-\ell, \dots, \ell\}$  und  $\mu = \pm\frac{1}{2}$  der Valenzelektronen) auf. Bei den Alkali-Atomen erhielten wir so Energieniveaus

$$E_{\ell m\mu} = E_\ell + \mu_B|B|(m + g\mu)$$

In der Näherung  $g = 2$  sind hier im allgemeinen (d.h. wenn  $|m+2\mu| < \ell$ ) zwei der Energien gleich. Diese zweifache Entartung wird aber durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgehoben und wir erhalten ein Dublett-Termsystem.

# Kapitel 5

## Spezielle Potentiale

Im Jahre 1873 bewies J. Bertrand den folgenden Satz: Gegeben ein Punktteilchen, das sich gem den Gesetzen der klassischen Mechanik in einem rotationssymmetrischen Potential  $V(r)$  bewegt, wobei die Funktion  $V$  dreimal stetig differentierbar ist, angenommen werden soll, so erfüllen nur die beiden Potentialfunktionen  $ar^2$  und  $-a/r$  ( $a > 0$ ) die Bedingung, da jede beschränkte Bahn des Teilchens geschlossen ist<sup>1</sup>. Obwohl wir keine ähnliche Bedingung in der Quantenmechanik formulieren können, sind dennoch diese Potentiale auch hier in besonderer Weise ausgezeichnet: Sie führen zu Hamilton-Operatoren, die einen unerwartet hohen Grad an Symmetrie besitzen.

### 5.1 Das 1/r-Potential

#### 5.1.1 Bindungszustände

Als Grundlage für die Diskussion wählen wir das Modell des H-Atoms. Hierbei ist es bequem, grundsätzlich alle Energien und Längen in sogenannten atomaren Einheiten anzugeben:

$$mc^2\alpha^2 = e^2/a_0 = 27,21165 \text{ eV} \quad (2 \text{ Rydberg})$$

$$\frac{\hbar}{mc}\alpha^{-1} = a_0 = 0,529177 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (\text{Bohrscher Radius})$$

---

<sup>1</sup>Eine Bahn  $x(t)$  heißt *beschränkt*, wenn  $|x(t)| < R$  für ein  $R$  und alle  $t$  erfüllt ist. Sie heißt *geschlossen*, oder *periodisch*, wenn  $x(t+T) = x(t)$  für ein  $T$  und alle  $t$  gilt.

Bei dieser Wahl der Einheiten vereinfacht sich der Ausdruck für den Hamilton-Operator:

$$H \hat{=} -\Delta/2 - 1/r \quad (5.1)$$

Der Hilbertraum  $L^2(\mathbf{R}^3)$  kann als eine direkte Summe  $\mathcal{H}_- \oplus \mathcal{H}_+$  geschrieben werden, so da

$$\begin{aligned} \phi \in \mathcal{H}_- &\Rightarrow (\phi, H\phi) < 0 \\ \phi \in \mathcal{H}_+ &\Rightarrow (\phi, H\phi) > 0 \end{aligned}$$

gilt. Zugleich ist  $\mathcal{H}_-$  der kleinste abgeschlossene Teilraum von  $\mathcal{H}$ , der alle Bindungszustände enthält:  $\mathcal{H}_-$  ist der Raum des diskreten Spektrums von  $H$ . Im Gegensatz dazu enthält das orthogonale Komplement  $\mathcal{H}_+$  alle Streuzustände für die Streuung eines Elektrons an einem Proton-Target:  $\mathcal{H}_+$  ist der Raum des kontinuierlichen Spektrums von  $H$ .

Ein geeignetes System von orthonormierten Eigenfunktionen der Gestalt

$$\begin{aligned} \Phi_{\ell m}^n(x) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\Omega) & \quad \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ \ell &= 0, 1, \dots, n-1 \\ -\ell &\leq m \leq \ell \end{aligned} \end{aligned} \quad (5.2)$$

bildet eine Basis in  $\mathcal{H}_-$ . Dies sind

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} 1 = n^2$$

Funktionen für festes  $n$ , die *Hauptquantenzahl*. Nur von dieser Zahl hängen die Eigenwerte der Energie ab:

$$H\Phi_{\ell m}^n = E_n\Phi_{\ell m}^n \quad E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad (5.3)$$

Dies hat zur Konsequenz, da jedes Niveau  $n^2$ -fach entartet ist. Die Radialwellenfunktionen sind

$$R_{n\ell}(r) = (-1)^{n-\ell-1} \frac{2}{n^2} \left[ \frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!} \right]^{1/2} \mathcal{L}_{n\ell}(2r/n) \quad (5.4)$$

wobei

$$\mathcal{L}_{n\ell}(y) = e^{-y/2} y^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y) \quad (y \geq 0) \quad (5.5)$$

Es handelt sich bei den Funktionen  $L_n^\alpha(y)$  um Polynome vom Grad  $n$ , die unter dem Namen *zugeordnete Laguerresche Polynome* bekannt sind:

$$L_n^\alpha(y) = \frac{1}{n!} e^y y^{-\alpha} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y} y^{n+\alpha}) \quad (5.6)$$

$$= \sum_{k=0}^n \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{(-y)^k}{k!} \quad (5.7)$$

### 5.1.2 Der Lenz-Runge-Vektor

Für zwei Vektoroperatoren<sup>2</sup>  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  mit Komponenten  $A_i$  und  $B_i$  definieren wir ihr antisymmetrisches Produkt als

$$\mathbf{A} \wedge \mathbf{B} = \frac{1}{2} (\mathbf{A} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{A}) \quad (5.8)$$

Es hat die Eigenschaften:

1.  $\mathbf{A} \wedge \mathbf{B}$  ist wieder ein Vektoroperator, ist also insbesondere selbstadjungiert.
2.  $\mathbf{A} \wedge \mathbf{B} = -\mathbf{B} \wedge \mathbf{A}$ , insbesondere gilt  $\mathbf{A} \wedge \mathbf{A} = 0$ .
3. Kommutieren  $A_i$  und  $B_k$  für  $i \neq k$ , so folgt  $\mathbf{A} \wedge \mathbf{B} = \mathbf{A} \times \mathbf{B}$ .

Im Zusammenhang mit dem 1/r-Potential sind für uns die folgenden Vektoroperatoren von Interesse:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &\hat{=} -i\nabla & \mathbf{F} &\hat{=} -x/r^3 \\ \mathbf{L} &\hat{=} x \times (-i\nabla) & \mathbf{G} &\hat{=} x/r \end{aligned}$$

Für den durch (5.1) definierten Hamilton-Operator ergeben sich die Kommutatoren

$$\begin{aligned} i[H, \mathbf{L}] &= 0 \\ i[H, \mathbf{P}] &= \mathbf{F} \\ i[H, \mathbf{G}] &= \mathbf{F} \wedge \mathbf{L} \end{aligned}$$

---

<sup>2</sup>Der Begriff des Vektoroperators wurde im Abschnitt 4.4 diskutiert. Wir werden von nun an voraussetzen, da die Komponenten eines Vektoroperators selbstadjungierte Operatoren sind.

Unter anderem folgt nun

$$i[H, \mathbf{P} \wedge \mathbf{L}] = \mathbf{F} \wedge \mathbf{L}$$

so da der Vektoroperator

$$\mathbf{R} = \mathbf{P} \wedge \mathbf{L} - \mathbf{G} \quad (5.9)$$

mit  $H$  kommutiert und somit eine Erhaltungsgröße darstellt. Man nennt  $\mathbf{R}$  den *Lenz-Runge-Vektor*. Er geht in den klassischen Ausdruck für den LR-Vektor über, wenn man  $\mathbf{P}$  und  $\mathbf{L}$  durch ihre klassischen Ausdrücke ersetzt. Aus den Definitionen folgt die Beziehung  $\mathbf{L} \cdot (\mathbf{P} \wedge \mathbf{L}) = \frac{1}{2i}(\mathbf{L} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{L})$ . Andererseits gilt  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{G} = 0$ , so da

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{R} = 0 \quad (5.10)$$

erfüllt ist (gleichbedeutend mit  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = 0$ ).

Nachdem wir das antisymmetrische Produkt zweier Vektoroperatoren kennengelernt haben, wollen wir nun das *symmetrische* Produkt einführen. Es ist durch

$$\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \frac{1}{2i}(\mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{B} \times \mathbf{A}) \quad (5.11)$$

definiert und hat die folgenden Eigenschaften:

1.  $\mathbf{A} \circ \mathbf{B}$  ist wieder ein Vektoroperator (insbesondere selbstadjungiert).
2.  $\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \mathbf{B} \circ \mathbf{A}$
3.  $\mathbf{A} \circ \mathbf{A} = -i\mathbf{A} \times \mathbf{A}$
4. Kommutieren  $A_i$  und  $B_k$  für  $i \neq k$ , so ist dies gleichbedeutend mit  $\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = 0$ .
5. Die Gleichung  $\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \mathbf{C}$  ist äquivalent den Relationen

$$[A_j, B_k] + [B_j, A_k] = 2iC_\ell \quad j, k, \ell = 1, 2, 3 \text{ zyklisch}$$

Es ist nun bemerkenswert, da die Kommutatorrelationen für den Drehimpuls  $\mathbf{L}$  sich durch  $\mathbf{L} \circ \mathbf{L} = \mathbf{L}$  ausdrücken lassen. Darüberhinaus gilt: Ist  $\mathbf{A}$  ein Vektoroperator, so ist die Beziehung  $\mathbf{L} \circ \mathbf{A} = \mathbf{A}$  erfüllt. Insgesamt stellen wir fest, da der Drehimpuls und der Lenz-Runge-Vektor drei wichtige algebraische Relationen befriedigen,

$$\mathbf{L} \circ \mathbf{L} = \mathbf{L} \quad \mathbf{L} \circ \mathbf{R} = \mathbf{R} \quad \mathbf{R} \circ \mathbf{R} = -2H\mathbf{L}, \quad (5.12)$$

die nahelegen, auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}_-$  den Vektoroperator

$$\mathbf{M} = (-2H)^{-1/2}\mathbf{R} \quad (5.13)$$

einzuführen, um die Relationen symmetrischer zu gestalten:

$$\mathbf{L} \circ \mathbf{L} = \mathbf{L} \quad \mathbf{L} \circ \mathbf{M} = \mathbf{M} \quad \mathbf{M} \circ \mathbf{M} = \mathbf{L} \quad (5.14)$$

Durch Einführung der Linearkombinationen

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}) \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M})$$

erhalten wir schließlich

$$\mathbf{J} \circ \mathbf{J} = \mathbf{J} \quad \mathbf{K} \circ \mathbf{K} = \mathbf{K} \quad (5.15)$$

und  $[J_i, K_\ell] = 0$  für  $i, \ell = 1, 2, 3$ . Daraus ist ersichtlich, da sowohl die Komponenten von  $\mathbf{J}$  als auch die Komponenten von  $\mathbf{K}$  den Vertauschungsrelationen von Drehimpulsen genügen. Da  $\mathbf{J}$  und  $\mathbf{K}$  komponentenweise kommutieren, sind die so bestimmten sechs Operatoren die Erzeuger einer unitären Darstellung der Gruppe  $G = SU(2) \times SU(2)$  auf  $\mathcal{H}_-$ . Die Gruppe  $G$  ist eine Symmetriegruppe für den Teil des Hamilton-Operators, der durch Einschränkung von  $H$  auf den Teilraum  $\mathcal{H}_-$  entsteht. Die Existenz dieser Symmetriegruppe erklärt die  $n^2$ -fache Entartung eines jeden Niveaus  $E_n$  dadurch, da, wie noch zu beweisen ist, der zugehörige Eigenraum Träger einer  $n^2$ -dimensionalen irreduziblen Darstellung von  $G$  ist. Im Prinzip könnten alle irreduziblen Darstellungen  $(j, k)$  mit  $j, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$  und Darstellern

$$D^j(u) \otimes D^k(v) \quad u, v \in SU(2)$$

bei diesem Problem eine Rolle spielen, und  $(2j+1)(2k+1)$  wäre die Dimension des Darstellungsraumes. Wegen  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = 0$  gilt jedoch

$\mathbf{J}^2 = \mathbf{K}^2$ , also  $j = k$ , und nur Darstellungen vom Typ  $(j, j)$  können auftreten. Wir haben jetzt nur noch die Dimension  $(2j + 1)^2$  dieser Darstellung mit  $n^2$  gleichzusetzen, um die Beziehung zwischen  $j$  und der Hauptquantenzahl  $n$  zu bekommen:

$$n = 2j + 1 \quad (5.16)$$

Da  $\mathbf{L} = \mathbf{J} + \mathbf{K}$  ist, werden die gewöhnlichen Drehungen durch die Diagonalgruppe des Produktes  $SU(2) \times SU(2)$  beschrieben. Die Einschränkung (Subduktion) der Darstellung  $(j, j)$  auf die Diagonal- $SU(2)$  ergibt die reduzible Produktdarstellung

$$D^j \times D^j \cong \bigoplus_{\ell=0}^{2j} D^\ell$$

d.h. bei gegebenem  $n$  durchläuft die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  alle Werte zwischen 0 und  $n - 1$  in bereinstimmung mit dem Ergebnis der elementaren Analyse des Wasserstoffproblems. Da die Operatoren  $(-2H)^{-1}$  und  $4\mathbf{J}^2 + 1$  überall in  $\mathcal{H}_-$  den gleichen Eigenwert (nämlich  $n^2$ ) annehmen, müssen sie bereinstimmen. Die hierfür verantwortliche Relation

$$\mathbf{R}^2 = 1 + 2H(\mathbf{L}^2 + 1) \quad (5.17)$$

gilt überall in  $\mathcal{H}$  und lässt sich auch durch eine direkte Rechnung aus den Definitionen heraus bestätigen. Wie in der klassischen Mechanik gilt:

$$\mathbf{R}^2 < 1 \quad (\text{in } \mathcal{H}_-) \qquad \mathbf{R}^2 \geq 1 \quad (\text{in } \mathcal{H}_+)$$

Klassisch gilt  $\mathbf{R}^2 = \epsilon^2$  für elliptische Bahnen, wobei  $\epsilon$  die *numerische Exzentrizität* bezeichnet.

### 5.1.3 Die $SO(4)$ -Symmetrie

Wir haben soeben die Erzeuger der Symmetriegruppe  $G = SU(2) \times SU(2)$  konstruiert und kennen somit die *infinitesimalen* Symmetrietransformationen. Es fehlt jedoch eine Beschreibung der *endlichen* Transformationen. Ihre Gestalt ist entscheidend für die Beantwortung der Frage, um welche Gruppe es sich in Wirklichkeit hierbei handelt. Denn wir

missen damit rechnen, da eine diskrete invariante Untergruppe  $K$  von  $G$  existiert, die trivial dargestellt wird, so da in Wahrheit  $H = G/K$  die gesuchte Symmetriegruppe ist, weil nur  $H$  und nicht  $G$  treu dargestellt ist. Wir bekommen leicht einen Überblick, wenn wir alle Möglichkeiten auflisten<sup>3</sup>:

$K$	$G/K$
(1,1)	$SU(2) \times SU(2)$
(1,1),(-1,1)	$SO(3) \times SU(2)$
(1,1),(1,-1)	$SU(2) \times SO(3)$
(1,1),(-1,-1)	$SO(4)$
(1,1),(-1,1),(1,-1),(-1,-1)	$SO(3) \times SO(3)$

Zur Entscheidung dieser Frage ist es notwendig, eine symmetriegerechte Basis in  $\mathcal{H}_-$  einzuführen. Wir gehen dabei von der Basis (5.2) aus und konstruieren mit Hilfe der CG-Koeffizienten die neue Basis als

$$\Psi_{m_1 m_2}^j = \sum_{\ell m} \begin{pmatrix} j & j & \ell \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \Phi_{\ell m}^{2j+1} \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (5.18)$$

Eine unitre Darstellung  $U : G \rightarrow \text{Aut}(\mathcal{H}_-)$  kann dann durch

$$U(u, v) \Psi_{m'_1 m'_2}^j = \sum_{m_1 m_2} \Psi_{m_1 m_2}^j D_{m_1 m'_1}^j(u) D_{m_2 m'_2}^j(v) \quad u, v \in SU(2) \quad (5.19)$$

definiert werden. Da die Eigenräume von  $H$  zugleich die invarianten Teilräume dieser Darstellung sind, ist  $G$  tatsächlich eine Symmetriegruppe. Da  $G$  auf jedem dieser Teilräume irreduzibel dargestellt ist, ist die Wirkung von  $G$  bis auf einen Isomorphismus eindeutig festgelegt. Wenn wir fordern, da Transformationen  $U(u, u)$  mit gewöhnlichen Drehungen zu identifizieren sind, so kann ein solcher Isomorphismus  $I : \mathcal{H}_- \rightarrow \mathcal{H}_-$  (unter Heranziehung des 2. Schurschen Lemmas) nur von der Form

$$I \Phi_{\ell m}^n = c_{n\ell} \Phi_{\ell m}^n \quad |c_{n\ell}| = 1$$

sein. Die gleiche Freiheit der Phasenwahl hatten wir bereits bei der Definition des Vektors  $\mathbf{M}$  in (5.13): anstelle von  $\mathbf{M}$  hätten wir eben-

---

<sup>3</sup>Hier bezeichnet  $1 \in SU(2)$  die  $2 \times 2$ -Einheitsmatrix. Die Liste enthält alle Lie-Gruppen, die zu der gleichen Lie-Algebra, d.h. zur Lie-Algebra der  $SU(2) \times SU(2)$  führen.

sogut  $IMI^{-1}$  einführen können. Aus diesem Grund ist keine Phasenauswahl in irgendeiner Weise ausgezeichnet. Die (5.4) eingeführte Phase  $c_{n\ell} = (-1)^{n-\ell-1}$  hat den Zweck, da (5.13) und (5.18) miteinander konsistent sind.

Die Darstellung  $U$  hat die folgenden Eigenschaften:

$$\begin{aligned} U(1, 1) &= U(-1, -1) = 1 \\ U(-1, 1) &= U(1, -1) = (-1)^{2j} \end{aligned}$$

Dies bedeutet, da es sich in Wahrheit um eine treue Darstellung der Symmetriegruppe  $SO(4)$  handelt.

Die Tatsache, da wir auf eine kompakte Symmetriegruppe geföhrt wurden, beruht entscheidend auf der Ungleichung  $H < 0$ , die nur auf den Bindungszuständen richtig ist. Die Relationen (5.12) sind dagegen überall auf  $\mathcal{H}$  korrekt. Auf  $\mathcal{H}_+$  wren wir jedoch gezwungen, den Vektor  $\mathbf{M}$  so zu definieren:

$$\mathbf{M} = (2H)^{-1/2}\mathbf{R}$$

In den Relationen (5.14) wre ein einziges Vorzeichen anders ausgefallen:

$$\mathbf{M} \circ \mathbf{M} = -\mathbf{L}$$

Dies sind nicht mehr die Strukturrelationen einer kompakten Lie-Gruppe. Vielmehr handelt es sich, wie eine Analyse zeigt, um die *pseudo-orthogonale* Gruppe  $SO(3, 1)$ .

## 5.2 Das $r^2$ -Potential

Glatte Potentiale  $V(r)$  können in der Nhe ihres Minimums, sofern es existiert, durch eine Parabel approximiert werden. Ein gebundenes Teilchen vollführt harmonische Schwingungen mit der klassischen Frequenz  $\omega$  in einem  $r^2$ -Potential; quantenmechanisch kann ein solches Teilchen verschiedene Bindungszustände eingehen, die den Eigenwerten des Hamilton-Operators

$$H \hat{=} -\frac{1}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (5.20)$$

auf

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$$

entsprechen. Zur Behandlung des Eigenwertproblems setzt man

$$a_i \hat{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x_i + \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (5.21)$$

erhlt die adjungierten Operatoren als

$$a_i^\dagger \hat{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x_i - \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x_i} \quad (5.22)$$

und findet so

$$H = \omega \sum_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}) \quad (5.23)$$

zusammen mit den kanonischen Vertauschungsrelationen (abgekürzt CCR vom englischen *canonical commutation relations*)

$$[a_i, a_k] = [a_i^\dagger, a_k^\dagger] = 0 \quad [a_i, a_k^\dagger] = \delta_{ik} \quad (5.24)$$

Der nichtentartete Grundzustand wird durch eine Gau-Funktion beschrieben:

$$\Omega(x) = N e^{-m\omega r^2/2}$$

Hierbei ist  $N$  eine geeignete Normierungskonstante. Diese Funktion lst simultan die drei Differentialgleichungen

$$a_i \Omega = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.25)$$

und minimiert aus diesem Grund die Energie; denn fr eine allgemeine normierte Wellenfunktion gilt  $(\phi, H\phi) = \omega \sum_i (\|a_i \phi\|^2 + \frac{1}{2})$ .

Fr beliebiges  $c = \{c_1, c_2, c_3\} \in \mathbf{C}^3$  setzen wir

$$a^\dagger(c) = \sum_i a_i^\dagger c_i$$

Den Hilbertraum, der von allen Vektoren der Form

$$a^\dagger(c^{(1)}) \cdots a^\dagger(c^{(n)})\Omega \quad c^{(i)} \in \mathbf{C}^3$$

aufgespannt wird, wollen wir mit  $\mathcal{H}_n$  bezeichnen. Auf jedem dieser Rume nimmt  $H$  einen Eigenwert  $E_n$  an, und zwar ist  $E_n = (n + 3/2)\omega$ . Dies zeigt man durch bloe Anwendung der CCR. Man findet leicht

$$\dim \mathcal{H}_n = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2),$$

und somit wchst die Entartung hnlich schnell an wie bei dem Coulomb-Potential. In der hier gewhlten Darstellung wurden die Eigenfunktionen abstrakt eingefhrt. Sie lassen sich natrlich auch als konkrete Funktionen, d.h. als Bessel-Hermite-Funktionen berechnen. Das System dieser Funktionen ist vollstndig in  $\mathcal{H}$ , und somit gilt

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n$$

Rotationsinvarianz allein kann die Entartung nicht erklren. Dennoch ist die Ursache der Entartung schnell gefunden: Sie liegt in einer  $U(3)$ -Invarianz des Modells. Es zeigt sich nmlich, da sowohl  $H$  als auch die CCR erhalten bleiben, wenn man die Operatoren  $a_i$  einer unitren Transformation unterwirft:

$$a'_i = \sum_k (u^{-1})_{ik} a_k \quad u \in U(3) \quad (5.26)$$

Denn es folgt

$$a'^{\dagger}_k = \sum_i a^{\dagger}_i u_{ik}$$

und damit beweist man auf direktem Wege die gewünschte Invarianz. Damit die Gruppe  $U(3)$  zur Symmetriegruppe des 3-dimensionalen Oszillators wird, ist notwendig, da wir eine unitre Darstellung  $U$  auf  $\mathcal{H}$  angeben knnen, so da

$$U(u)a^{\dagger}_k U(u)^{-1} = \sum_i a^{\dagger}_i u_{ik} \quad (5.27)$$

fr alle  $u \in U(3)$  gilt. Diese Forderung ist gleichbedeutend mit

$$U(u)a^{\dagger}(c) = a^{\dagger}(uc)U(u)$$

wobei wir die natrliche Wirkung von  $u$  auf  $\mathbf{C}^3$  benutzen. Auf dem Grundzustand soll die Gruppe trivial dargestellt sein:

$$U(u)\Omega = \Omega \quad (5.28)$$

Damit ist aber die Wirkung von  $U(u)$  auf  $\mathcal{H}$  bereits eindeutig festgelegt:

$$U(u)a^{\dagger}(c^{(1)}) \cdots a^{\dagger}(c^{(n)})\Omega = a^{\dagger}(uc^{(1)}) \cdots a^{\dagger}(uc^{(n)})\Omega \quad (5.29)$$

Zugleich wird deutlich, daß für jedes  $n$  der Raum  $\mathcal{H}_n$  die Darstellung  $U$  reduziert. Mit etwas mehr Aufwand kann man sogar beweisen: die Teildarstellung  $U_n$  der  $U(3)$  auf  $\mathcal{H}_n$  mit der Dimension  $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$  ist irreduzibel und stimmt mit dem  $n$ -fachen symmetrischen Tensorprodukt der identischen Darstellung überein. Im Gegensatz zur Gruppe  $SU(2)$  sind nicht alle irreduziblen Darstellungen der  $U(3)$  oder der  $SU(3)$  in dieser Weise erhaltlich. Wie bei dem Coulomb-Potential ist es auch hier nicht möglich, die  $U(3)$  geometrisch, d.h. als Transformationsgruppe des 3-dimensionalen euklidischen Raumes zu deuten. Andererseits ist die Gruppe  $O(3)$ , die eine geometrische Interpretation besitzt, in natürlicher Weise in der  $U(3)$  als Untergruppe vorhanden. Die Zustände in  $\mathcal{H}_n$  lassen sich daher nach ihrem Drehimpuls und ihrer Parität klassifizieren. Die Parität ermitteln wir ohne Probleme:

$$U_n(-1) = (-1)^n$$

Durch Einschränkung der Darstellung  $U_n$  der Gruppe  $U(3)$  auf die Untergruppe  $SO(3)$  findet man die Zerlegung:

$$U_n|_{SO(3)} \cong \bigoplus D^\ell$$

wobei über alle  $\ell$  mit  $0 \leq \ell \leq n$  und  $n = \ell \pmod{2}$  zu summieren ist. Dies läßt sich zum Beispiel dadurch beweisen, daß man den Charakter der reduziblen Darstellung ermittelt und ihn nach primitiven Charakteren zerlegt. Man kann allerdings auch auf direktem Wege, nämlich durch den Separationsansatz

$$\Phi_{\ell m}^n(x) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\Omega)$$

und Lösen der Radialwellengleichung die Basis ermitteln, die der Symmetriegruppe  $SO(3)$  angepaßt ist. Man findet

$$R_{n\ell}(r) = (m\omega)^{3/4} \left[ \frac{2(\frac{n-\ell}{2})!}{?(\frac{n+\ell+3}{2})} \right]^{1/2} \mathcal{K}_{n\ell}(m\omega r^2)$$

mit

$$\mathcal{K}_{n\ell}(y) = e^{-y/2} y^{\ell/2} L_{(n-\ell)/2}^{\ell+1/2}(y) \quad (y \geq 0)$$

wobei wiederum die zugeordneten Laguerreschen Polynome auftreten, die in (5.6) definiert wurden. Auch bei Wahl dieser Basis sind nur solche Quantenzahlen  $n$  und  $\ell$  zugelassen, für die  $0 \leq \ell \leq n$  und  $n = \ell \pmod{2}$  gilt.



# Kapitel 6

## Strahlungsübergänge

In der Atom-, Molekül- und Kernphysik erhalten wir wichtige Informationen über die innere Struktur durch Beobachtung der Emission oder Absorption von Photonen. Will man die Strahlungsübergänge in Strenge beschreiben, so müßten alle Überlegungen auf der Basis der Quantenelektrodynamik durchgeführt werden. In der semiklassischen Approximation, bei der das Strahlungsfeld als klassisches Maxwell-Feld behandelt wird, macht man Gebrauch von dem Korrespondenzprinzip, das einem Photon mit dem Impuls  $\hbar k$  und der Energie  $\hbar\omega$  eine ebene Welle mit dem Wellenvektor  $k$  und der Frequenz  $\omega$  zuordnet. Unser erstes Ziel ist die Entwicklung von  $e^{ikx}$  nach Kugelwellen.

### 6.1 Die Rayleigh-Entwicklung

Sphärische Bessel-Funktionen werden durch ihre erzeugende Funktion eingeführt:

$$e^{iz \cos \vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) j_{\ell}(z) P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (6.1)$$

Eine solche Entwicklung der Exponentialfunktion ist immer möglich; denn eine Reihe nach steigenden Potenzen  $\cos^n \vartheta$  geordnet kann durch bloße Umordnung als eine Reihe in den Legendre-Polynomen  $P_{\ell}(\cos \vartheta)$  geschrieben werden. Im Gegensatz zu den gewöhnlichen Bessel-Funktionen existieren für die sphärischen Bessel-Funktionen sehr einfache geschlos-

sene Ausdrücke:

$$\begin{aligned} z j_0(z) &= \sin z \\ z^2 j_1(z) &= \sin z - z \cos z \\ z^3 j_2(z) &= (3 - z^2) \sin z - 3z \cos z \quad usw. \end{aligned}$$

In der Nähe von  $z = 0$  besitzen diese Funktionen das folgende Verhalten<sup>1</sup>:

$$j_\ell(z) = \frac{z^\ell}{(2\ell + 1)!!} + O(z^{\ell+2}) \quad (6.2)$$

Der folgende Satz beschreibt die Entwicklung einer ebenen Welle nach sphärischen Bessel-Funktionen und harmonischen Polynomen  $H_{\ell m}$ .

**Satz 27** (Rayleigh-Entwicklung) *Es seien  $\kappa$  und  $r$  die Beträge von  $k \in \mathbf{R}^3$  und  $x \in \mathbf{R}^3$ . Dann gilt*

$$e^{ikx} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (\kappa r)^{-\ell} j_\ell(\kappa r) \sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{H_{\ell m}(k)} H_{\ell m}(x) \quad (6.3)$$

Zum Beweis schreibt man  $k = \kappa e$ ,  $x = r e'$ ,  $z = \kappa r$  und  $e \cdot e' = \cos \vartheta$ . Aus (6.1), dem Additionstheorem für Kugelfunktionen (Satz 20) sowie aus (3.99) folgt dann das Resultat.  $\square$

Sind  $(\kappa, \Omega')$  und  $(r, \Omega)$  die Polarkoordinaten von  $k$  bzw.  $x$ , so können wir (6.3) auch in der folgenden Weise schreiben:

$$e^{ikx} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell j_\ell(\kappa r) \sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{Y_{\ell m}(\Omega')} Y_{\ell m}(\Omega) \quad (6.4)$$

Daraus folgt dann unmittelbar

$$j_\ell(\kappa r) Y_{\ell m}(\Omega) = \frac{i^{-\ell}}{4\pi} \int d\Omega' e^{ikx} Y_{\ell m}(\Omega') \quad (6.5)$$

Nun sei  $c$  die Lichtgeschwindigkeit und  $\omega = c\kappa$  die Frequenz. Da  $e^{i(kx - \omega t)}$  eine Lösung der Wellengleichung ist, folgt aus (6.5)

$$\left( \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta \right) j_\ell(\kappa r) Y_{\ell m}(\Omega) e^{-i\omega t} = 0 \quad c\kappa = \omega \quad (6.6)$$

<sup>1</sup>Man setzt  $(2\ell + 1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2\ell + 1)$

Die hierdurch konstruierten Lösungen der Wellengleichung bezeichnet man als Kugelwellen. Eliminieren wir die zeitabhängige Funktion  $e^{-i\omega t}$ , so erhalten wir

$$(\Delta + \kappa^2)j_\ell(\kappa r)Y_{\ell m}(\Omega) = 0 \quad (6.7)$$

oder auch, indem wir von (3.109) Gebrauch machen,

$$\left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \kappa^2 \right) j_\ell(\kappa r) = 0 \quad (6.8)$$

## 6.2 Die Wechselwirkung mit ebenen Wellen

Um auch die Spinfreiheitsgrade des Photons zu berücksichtigen, erweitern wir die Beschreibung der ebenen Welle so, daß sie als Lösungen der Maxwell-Gleichungen im Vakuum erscheinen. Hierfür ist notwendig, ein Viererpotential  $A_\mu = (A_0, -c\mathbf{A})$  anzugeben, das der Wellengleichung genügt. Wir können durch Wahl der Eichung erreichen, daß  $A_0 = 0$  und  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  gilt. Eine ebene Welle würde dann die Gestalt

$$\mathbf{A}(x, t) = \Re [\mathbf{a} e^{i(kx - \omega t)}]$$

annehmen, wobei  $k \in \mathbf{R}^3$ ,  $\mathbf{a} \in \mathbf{C}^3$  und

$$k \cdot \mathbf{a} = 0 \quad c|k| = \omega$$

gilt. Der komplexe Vektor  $\mathbf{a}$  enthält die Information über die Intensität und die Polarisierung der Welle und damit über den Spinzustand des Photons. Wir normieren die Intensität, indem wir

$$\bar{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{a} = 1 \quad (6.9)$$

setzen.

Der klassische Ausdruck für die Energie einer gegebenen Stromdichte  $\mathbf{j}(x, t)$  in Wechselwirkung mit der ebenen Welle ist

$$\begin{aligned} W(t) &= - \int d^3x \mathbf{A}(x, t) \cdot \mathbf{j}(x, t) \\ &= - \Re [\mathbf{a} \cdot \tilde{\mathbf{j}}(k, t) e^{-i\omega t}] \end{aligned} \quad (6.10)$$

Hierbei wurden wir auf die Fourier-Transformierte der Stromdichte geführt,

$$\tilde{\mathbf{j}}(k, t) = \int d^3x e^{ikx} \mathbf{j}(x, t), \quad (6.11)$$

die nun ihrerseits eine Rayleigh-Entwicklung gestattet:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{j}}(k, t) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \tilde{\mathbf{j}}_{\ell}(k, t) \\ \tilde{\mathbf{j}}_{\ell}(k, t) &= 4\pi i^{\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{H_{\ell m}(k)} \int d^3x (\kappa r)^{-\ell} j_{\ell}(\kappa r) H_{\ell m}(x) \mathbf{j}(x, t) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Bei Anwendungen, die wir im Auge haben, werden die elektrischen Ströme ausschließlich durch die Bewegung der Ladungsträger innerhalb eines Moleküls, eines Atoms oder Kernes verursacht. Gewöhnlich ist die Wellenlänge der Strahlung groß gegenüber den Lineardimensionen der Stromverteilung<sup>2</sup>. Wenn aber  $\kappa r \ll 1$  überall im Integrationsgebiet gilt, können wir von (6.2) Gebrauch machen und erhalten so näherungsweise:

$$\tilde{\mathbf{j}}_{\ell}(k, t) = \frac{4\pi i^{\ell}}{(2\ell + 1)!!} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{H_{\ell m}(k)} \int d^3x H_{\ell m}(x) \mathbf{j}(x, t) \quad (6.13)$$

In dieser Näherung werden wir auf die Multipolmomente der Stromverteilung geführt:

$$\mathbf{g}_{\ell m}(t) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \int d^3x H_{\ell m}(x) \mathbf{j}(x, t) \quad (6.14)$$

Für festes  $\ell$  sind die Momente  $\mathbf{g}_{\ell m}$ ,  $-\ell \leq m \leq \ell$ , (die Abhängigkeit von  $t$  wollen wir für den Augenblick unterdrücken) nicht irreduzibel unter der  $SO(3)$ , was man daran erkennt, daß  $\mathbf{g}_{\ell m}$  einerseits ein Vektor, andererseits aber auch ein Tensor vom Typ  $\ell$  ist. Dieser Charakter der Momente wird deutlicher, wenn wir eine Basistransformation vornehmen. Allgemein gesprochen, können wir jedem Vektor  $\mathbf{a} \in \mathbf{C}^3$  seine

<sup>2</sup>Nehmen wir die Kernphysik: die Kerne senden  $\gamma$ -Strahlen im MeV-Bereich aus, entsprechend einer Wellenlänge von  $\approx 10^{-10} \text{cm}$ . Der Kernradius ist dagegen nur  $\approx 10^{-13} \text{cm}$ . Oder die Atomphysik: alle charakteristischen Linien des Wasserstoffspektrums erfüllen die Bedingung  $\lambda > 4\pi\alpha^{-1}a_0$  mit  $\alpha^{-1} \approx 137$ , wobei  $a_0$  der Bohrsche Radius ist.

”sphärischen” Komponenten  $[a]_m$  ( $m = +1, 0, -1$ ) zuordnen<sup>3</sup>, indem wir setzen:

$$[\mathbf{a}]_m \stackrel{def}{=} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} H_{1m}(\mathbf{a}) = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + ia_2) & m = +1 \\ a_3 & m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 - ia_2) & m = -1 \end{cases} \quad (6.15)$$

Auf die Situation  $\mathbf{a} = \mathbf{g}_{\ell m}$  angewandt, liefert dies einen Tensor  $[\mathbf{g}_{\ell m_1}]_{m_2}$ , dessen Transformationseigenschaften durch die Produktdarstellung  $D^\ell \times D^1$  der  $SO(3)$  bestimmt sind: Im Teilchenbild stehen  $\ell$  und 1 für den Bahndrehimpuls bzw. Spin des Photons. Irreduzible Tensoren erhalten wir, sobald wir die Produktdarstellung nach dem bekannten Verfahren ausreduzieren:

$$D^\ell \times D^1 \cong \bigoplus_{j=\ell\pm 1} D^j \quad \ell \geq 1$$

Konkret heißt dies, daß wir mit Hilfe der CG-Koeffizienten zu den Komponenten

$$g_{jm}^\ell = \sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} \ell & 1 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) [\mathbf{g}_{\ell m_1}]_{m_2} \quad (6.16)$$

übergehen, die ebenfalls als Momente der Stromdichte interpretierbar sind. Andererseits ist nun  $g^\ell$  ein irreduzibler Tensor vom Typ  $j$ . Die Umkehrung dieser Transformation lautet:

$$[\mathbf{g}_{\ell m_1}]_{m_2} = \sum_{jm} \left( \begin{array}{cc|c} \ell & 1 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) g_{jm}^\ell \quad (6.17)$$

Ist  $\mathbf{a}$  die komplexe Amplitude der ebenen Welle mit der Information über die Polarisation, so sind wir aufgefordert das Produkt  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{g}_{\ell m}$  zu berechnen. Wir stellen zunächst fest, daß für beliebige Vektoren  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbf{C}^3$  gilt:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_m (-1)^m [\mathbf{a}]_{-m} [\mathbf{b}]_m$$

Folglich,

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{g}_{\ell m_1} = \sum_{j m m_2} (-1)^{m_2} [\mathbf{a}]_{-m_2} \sum_{jm} \left( \begin{array}{cc|c} \ell & 1 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) g_{jm}^\ell \quad (6.18)$$

---

<sup>3</sup>Gruppentheoretisch bedeutet dies natürlich, daß wir zu einer  $SO(2)$ -angepaßten Basis übergehen, wobei  $SO(2) \subset SO(3)$  alle Drehungen um die 3-Achse enthält.

Wir vereinbaren nun, daß der Impuls des Photons in die 3-Richtung weist:  $k = \{0, 0, \kappa\}$ . Aus der Transversalitätsbedingung  $k \cdot \mathbf{a} = 0$  folgt dann  $a_3 = [a]_0 = 0$ , und  $[a]_{+1}$  ist die Amplitude einer rechtszirkularen Welle (Spin und Impuls des Photons stehen parallel), während  $[a]_{-1}$  die Amplitude einer linkszirkularen Welle ist (Spin und Impuls des Photons stehen antiparallel). Man bezeichnet die Quantenzahl  $m$  in  $[\mathbf{a}]_m$  auch als die *Helizität* des Photons.

Wir geben nun die expliziten Ausdrücke für die einfachsten Momente der Stromdichte an:

$$g_{1m}^0(t) = \int d^3x [\mathbf{j}(x, t)]_m \quad (6.19)$$

$$g_{00}^1(t) = -\frac{1}{\sqrt{3}} \int d^3x x \cdot \mathbf{j}(x, t) \quad (6.20)$$

$$g_{1m}^1(t) = i \int d^3x [x \times \mathbf{j}(x, t)]_m \quad (6.21)$$

Hierbei machten wir von den allgemeinen Formeln

$$\sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 0 \\ m_1 & m_2 & 0 \end{array} \right) [\mathbf{a}]_{m_1} [\mathbf{b}]_{m_2} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 1 \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) [\mathbf{a}]_{m_1} [\mathbf{b}]_{m_2} = i[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_m$$

Gebrauch.

In der klassischen Elektrodynamik ist die Stromdichte grundsätzlich reell. Ferner kennt man ein Teilgebiet der Elektrodynamik, wo die Stromdichte als zeitlich konstant und divergenzfrei vorausgesetzt werden darf ("stationäre Ströme"). Sofern die stationäre Stromdichte  $\mathbf{j}(x)$  für große  $|x|$  hinreichend schnell gegen Null strebt, verschwinden viele Momente  $g_{jm}^\ell$  identisch als Folge des Satzes von Gauß, z.B. gilt

$$g_{1m}^0 = g_{00}^1 = g_{2m}^1 = 0$$

Die erste nichttriviale Größe ist dann das *magnetische Moment*  $\mathbf{m}$ , das durch

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \int d^3x x \times \mathbf{j}(x)$$

eingeführt wird und mit dem von uns definierten Moment für  $\ell = j = 1$  in einem einfachen Zusammenhang steht:  $g_{1m}^1 = 2i[\mathbf{m}]_m$ .

## 6.3 Übergangsströme

Oft ist die Annahme zutreffend, daß an der Emission oder Absorption eines Photons nur ein einziges geladenes Teilchen (Elektron, Proton usw.) beteiligt ist. Dennoch können wir weder in der Atomhülle noch im Kern ein solches Teilchen isoliert betrachten, weil es Teil eines größeren Verbandes ist, dessen mögliche Zustände durch Mehrteilchenwellenfunktionen beschrieben werden. Wir wollen annehmen, daß es sich hierbei um gleichartige Teilchen der Masse  $M$  und der Ladung  $q$  handelt, deren Wellenfunktionen  $\Phi, \Phi'$  usw. entweder symmetrisch oder antisymmetrisch unter der Vertauschung der Teilchenkoordinaten sind. Der Ladungsoperator  $Q(x, t)$  ist durch seine Matrixelemente auf folgende Weise bestimmt:

$$(\phi', Q(x, t)\phi) = q \int d\vec{x} \sum_{k=1}^n \delta(x^{(k)} - x) \overline{\Phi'(\vec{x}, t)} \Phi(\vec{x}, t)$$

Hier haben wir die Bezeichnungen  $\phi(\vec{x}) = \Phi(\vec{x}, 0)$ ,  $\phi'(\vec{x}) = \Phi'(\vec{x}, 0)$  und

$$d\vec{x} = d^3x^{(1)} \dots d^3x^{(n)}$$

$$\vec{x} = \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\}$$

eingeführt. Sucht man nun nach einem Vektorfeld  $\mathbf{J}(x, t)$ , das mit  $Q(x, t)$  zusammen die Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} Q(x, t) = 0$$

erfüllt, so bietet sich die Definition an:

$$(\phi', \mathbf{J}(x, t)\phi) = \frac{q}{2iM} \int d\vec{x} \sum_{k=1}^n \delta(x^{(k)} - x) \left\{ \overline{\Phi'(\vec{x}, t)} \nabla^{(k)} \Phi(\vec{x}, t) - \Phi(\vec{x}, t) \nabla^{(k)} \overline{\Phi'(\vec{x}, t)} \right\} \quad (6.22)$$

Dieser Ansatz berücksichtigt nicht einen etwa vorhandenen Spin der Teilchen und läßt Modifikationen außer acht, die aus der Dirac-Theorie für Spin-1/2-Teilchen folgen.

Für die Wechselwirkungsenergie einer ebenen Welle  $\mathbf{A}(x, t)$  schreiben wir in Anlehnung an den klassischen Ausdruck:

$$H_1(t) = - \int d^3x \mathbf{A}(x, t) \cdot \mathbf{J}(x, t) \quad (6.23)$$

Diese Energie, als Teil des Hamilton-Operators, soll störungstheoretisch in erster Ordnung berücksichtigt werden. Man beginnt also mit Lösungen der Schrödinger-Gleichung für das *ungestörte* Problem; wir wollen insbesondere annehmen, daß  $\Phi$  und  $\Phi'$  *stationäre* Lösungen sind:

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x}, t) &= \phi(\vec{x})e^{-iEt} \\ \Phi'(\vec{x}, t) &= \phi'(\vec{x})e^{-iE't} \end{aligned}$$

Zwischen zwei Zuständen dieser Art vermittelt die Wechselwirkung  $H_1(t)$  Übergänge  $\phi \rightarrow \phi'$ , für die man die Übergangsrates berechnen möchte. Der erste Schritt<sup>4</sup> in Richtung auf dieses Ziel ist die Bestimmung des Zeitintegrals

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} dt (\phi', H_1(t)\phi) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x \Re [\mathbf{a}e^{i(kx-\omega t)}] \cdot (\phi', \mathbf{J}(x, 0)\phi)e^{i(E'-E)t} \end{aligned}$$

Hierdurch erhält das Matrixelement

$$\mathbf{j}(x) = (\phi', \mathbf{J}(x, 0)\phi) \quad (6.24)$$

eine reale Bedeutung, obwohl  $\mathbf{j}(x)$  als komplexe Größe keinem klassischen Ausdruck mehr entspricht. Man nennt  $\mathbf{j}(x)$  den *Übergangstrom* für den Übergang  $\phi \rightarrow \phi'$ . Die Zeitintegration läßt sich ausführen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E'-E\mp\omega)t} = 2\pi\delta(E' - E \mp \omega)$$

Das Ergebnis drückt die Energie-Erhaltung aus. Wir unterscheiden zwei Fälle:

---

<sup>4</sup>In den Büchern der Quantenmechanik wird dieses Vorgehen unter dem Stichwort *Diracsche Störungstheorie* ausführlich diskutiert.

1.  $E' > E$ : Absorption von Photonen aus dem umgebenden Strahlungsfeld. In diesem Fall gilt

$$I = -\pi\delta(E' - E - \omega)\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{j}}(k) \quad (6.25)$$

2.  $E' < E$ : Eine durch das umgebende Strahlungsfeld induzierte Emission von Photonen. In diesem Fall gilt

$$I = -\pi\delta(E' - E + \omega)\bar{\mathbf{a}}\cdot\tilde{\mathbf{j}}(-k) \quad (6.26)$$

In beiden Fällen wurde eine Fourier-Transformation des Übergangstromes, wie in (6.11) beschrieben, durchgeführt. In beiden Fällen definiert man den *Wirkungsquerschnitt* als<sup>5</sup>

$$\sigma = \frac{\text{Zahl der Übergänge pro Zeit}}{\text{Zahl der einfallenden Photonen pro Fläche und Zeit}}$$

und findet<sup>6</sup> für die Absorption den Ausdruck

$$\sigma_1 = \frac{4\pi^2}{c\omega^2}|\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{j}}(k)|^2 \quad (6.27)$$

Der entsprechende Ausdruck für die induzierte Emission lautet:

$$\sigma_2 = \frac{4\pi^2}{c\omega^2}|\bar{\mathbf{a}}\cdot\tilde{\mathbf{j}}(-k)|^2 \quad (6.28)$$

Unter der Vertauschung von  $\phi$  und  $\phi'$  geht  $\tilde{\mathbf{j}}(k)$  in  $\overline{\tilde{\mathbf{j}}(-k)}$  über, sodaß, unter der Annahme  $E' > E$ , die beiden Prozesse

1.  $\phi \rightarrow \phi'$  (optisches Pumpen)
2.  $\phi' \rightarrow \phi$  (induzierte Emission)

den gleichen Wirkungsquerschnitt besitzen.

---

<sup>5</sup>Hierbei wird angenommen, daß alle Photonen den Impuls  $\hbar k$ , die Energie  $\hbar\omega$  und die Polarisierung  $\mathbf{a}$  haben.

<sup>6</sup>Siehe L.I.Schiff, *Quantum Mechanics*, Chap.X. Sec.35.

## 6.4 Elektrische Dipolübergänge

Eine in vielen Situationen brauchbare drastische Näherung besteht darin, in (6.11) die Exponentialfunktion  $e^{ikx}$  durch 1 zu ersetzen, wenn  $\mathbf{j}(x, t)$  der (komplexe) Übergangstrom ist. Im Rahmen der Rayleigh-Entwicklung bedeutet dies, daß wir nur den ersten Term, also den mit  $\ell = 0$ , berücksichtigen. In dieser Näherung müssen wir lediglich das Integral

$$\mathbf{g}_{00} = \int d^3x (\phi', \mathbf{J}(x, 0)\phi) \quad (6.29)$$

bestimmen. Wir bemühen uns um eine Vereinfachung dieses Ausdruckes. Ein Blick auf die Definition (6.22) des Stromoperators lehrt, daß es sich hier offenbar - bis auf den Faktor  $q/M$  - um ein Matrixelement des Gesamtimpulses  $\mathbf{P}$  handelt:

$$\mathbf{g}_{00} = (q/M)(\phi', \mathbf{P}\phi) \quad (6.30)$$

Für den ungestörten Hamilton-Operator  $H$ , der außer der kinetischen Energie nur Potentialterme enthält, trifft ein wichtiger Sachverhalt zu,

$$\mathbf{P}/M = i[H, \mathbf{Q}] \quad (6.31)$$

$$\mathbf{Q} \hat{=} x^{(1)} + \dots + x^{(n)}, \quad (6.32)$$

sodaß

$$\mathbf{g}_{00} = i(E' - E)(\phi', q\mathbf{Q}\phi) \quad (6.33)$$

Wir erinnern uns nun an die in (3.122) eingeführten Multipoloperatoren  $Q_{\ell m}$  und schreiben (für  $E' > E$ ) mit ihrer Hilfe das Ergebnis (6.33) um:

$$g_{1\mu}^0 = i\omega(\phi', Q_{1\mu}\phi) \quad \mu = -1, 0, +1 \quad (6.34)$$

Wir sehen so, daß  $g_{1\mu}^0$  einem elektrischen (Übergangs-) Dipolmoment proportional ist.

Anfangs- und Endzustand haben im allgemeinen einen definierten Drehimpuls aufgrund der  $SO(3)$ -Invarianz von  $H$ . Wir schreiben daher  $|jm\rangle$  anstelle von  $\phi$  und  $|j'm'\rangle$  anstelle von  $\phi'$ . Das Wigner-Eckart-Theorem erlaubt nun eine Darstellung durch reduzierte Matrixelemente:

$$\langle j'm'|Q_{1\mu}|jm\rangle = \begin{pmatrix} 1 & j & j' \\ \mu & m & m' \end{pmatrix} \langle j' || Q_1 || j \rangle \quad (6.35)$$

Dies begründet die

$$\mathbf{1. Auswahlregel:} \quad \delta(1jj') = 1$$

für solche Übergänge.

Anfangs- und Endzustand haben im allgemeinen eine definierte Parität aufgrund der  $O(3)$ -Invarianz von  $H$ . Da der Dipoloperator  $Q_{1\mu}$  die Parität  $-1$  besitzt und damit die Parität eines Zustandes umkehrt, finden wir die

$$\mathbf{2. Auswahlregel:}$$
 Anfang- und Endzustand haben entgegengesetzte Parität (Regel von Laporte).

Die experimentelle Situation ist oft dadurch charakterisiert, daß im Anfangszustand  $|jm\rangle$  alle Werte der Richtungsquantenzahl  $m$  gleichwahrscheinlich sind, ferner auch dadurch, daß im Endzustand  $|j'm'\rangle$  der Wert von  $m'$  nicht festgestellt wird. Wir werden deshalb den Wirkungsquerschnitt, der im Prinzip von  $m$  und  $m'$  abhängt, über  $m$  mitteln und über  $m'$  summieren und erreichen so eine Vereinfachung; denn

$$\sum_{mm'} \begin{pmatrix} 1 & j & j' \\ \mu & m & m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & j & j' \\ \mu' & m & m' \end{pmatrix} = \frac{2j'+1}{3} \delta_{\mu\mu'} \quad (6.36)$$

und der so bestimmte *totale* Wirkungsquerschnitt wird unabhängig von der Polarisation der elektromagnetischen Strahlung:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi^2}{3c} \frac{2j'+1}{2j+1} |\langle j' || Q_1 || j \rangle|^2 \quad (6.37)$$

## 6.5 Spontane Emission

Neben der induzierten Emission beobachtet man den Vorgang der spontanen Emission, bei dem das System unter Aussendung eines Photons einen Übergang  $E' \rightarrow E$  vollzieht, unabhängig davon, ob ein äußeres elektromagnetisches Feld vorhanden ist oder nicht. Auf diese Weise erhält jeder angeregte Zustand eine endliche Lebensdauer. Die Quantenelektrodynamik gibt eine Beschreibung auch dieses Vorganges, indem sie ihn, wie alle anderen Prozesse, auf die Wechselwirkung mit dem

quantisierten Photonfeld zurückführt. Es hat nicht an Versuchen gefehlt, die hierzu notwendige Rechnung auf semiklassischen Boden nachzuvollziehen, jedoch mit zweifelhaftem Erfolg: Die Ableitungen sind nebelhaft und keineswegs überzeugend.

Bereits 1917 hat A.Einstein gezeigt, daß die Wahrscheinlichkeiten für Absorption, induzierte und spontane Emission in einer festen Relation zueinander stehen müssen, wenn die Plancksche Strahlungsformel richtig ist. Wir wollen diesen Gedanken hier kurz erläutern und stellen uns vor, wir hätten einen Hohlraum, dessen Wände die einheitliche Temperatur  $T$  besitzen und sich im thermodynamischen Gleichgewicht mit der Strahlung im Hohlraum befinden. Wir nehmen weiter an, daß die Wände des Hohlraumes Teilchen der Masse  $M$  und der Ladung  $q$  enthalten, die sich in verschiedenen Bindungszuständen definierter Energie, Parität und definiertem Drehimpuls aufhalten. Von diesen Teilchen werden im Gleichgewicht pro Zeiteinheit gleichviel Photonen der Frequenz  $\omega$  emittiert wie absorbiert. Es können in unserem Modell natürlich nur solche Frequenzen auftreten, die einer möglichen Differenz  $E' - E$  von Bindungsenergien entsprechen. Wir fragen nach der Zahl  $I(\omega)$  der Photonen mit der Energie  $\hbar\omega$ , die pro Zeit und Fläche auf die Wand treffen und erhalten aus der Planckschen Theorie die Antwort

$$I(\omega) = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^2} (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1} \quad (6.38)$$

mit  $\beta = (k_B T)^{-1}$  und  $\hbar = 1$ . Ist  $N(E)$  die Anzahl der Teilchen in der Wand, die die Energie  $E$  besitzen, so ergibt sich die Rate (=Zahl der Ereignisse  $E \rightarrow E'$  pro Zeit) für die Absorption eines Photons der Energie  $\hbar\omega$  als das Produkt

$$R_a = \sigma_{tot} I(\omega) N(E)$$

wobei  $\sigma_{tot}$  der für den Übergang verantwortliche totale Wirkungsquerschnitt ist, dessen Dimension (Fläche)<sup>-1</sup> ist. Der gleiche Wirkungsquerschnitt beschreibt auch den induzierten Anteil der Emission:  $\sigma_{tot} I(\omega) N(E')$ . Hinzu kommt allerdings die Rate für den spontanen Prozeß,  $\tau^{-1} N(E')$ , wobei  $\tau$  die Lebensdauer des angeregten Niveaus  $E'$  bezeichnet<sup>7</sup>. Die Gesamtrate für die Emission eines Photons der Energie  $\hbar\omega$  ist deshalb

$$R_e = [\sigma_{tot} I(\omega) + \tau^{-1}] N(E')$$

---

<sup>7</sup>Genauer:  $\tau^{-1}$  ist die *partielle Breite*, die dem Übergang  $E' \rightarrow E$  entspricht.

Aus der Bedingung  $R_a = R_e$  folgt dann

$$\tau^{-1} = \sigma_{tot} I(\omega) \left( \frac{N(E)}{N(E')} - 1 \right) \quad \omega = E' - E \quad (6.39)$$

Wir wollen nun annehmen, daß die Teilchen in der Wand den Gesetzen der *klassischen* statistischen Mechanik genügen. Wir nehmen also, konkret gesprochen, an, die einzelnen Energieniveaus seien so besetzt, wie es die Boltzmann-Verteilung vorschreibt:

$$\frac{N(E)}{N(E')} = \frac{e^{-\beta E}}{e^{-\beta E'}}$$

Aus (6.38) und (6.39) folgt dann die Beziehung zwischen Lebensdauer und totalem Wirkungsquerschnitt:

$$\tau^{-1} = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^2} \sigma_{tot} \quad (6.40)$$

Die einfache Ableitung und das Ergebnis ist verblüffend, weil die Temperatur hierbei nur eine Hilfsrolle spielt und in der Endformel nicht mehr vorkommt<sup>8</sup>. Da wir auch keine speziellen Annahmen über  $\sigma_{tot}$  gemacht haben, gilt die Formel sogar allgemein. Benutzen wir nun für  $\sigma_{tot}$  die Dipolnäherung (6.37), so gelangen wir zu der Aussage

$$\tau^{-1} = \frac{4}{3} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \frac{2j' + 1}{2j + 1} |\langle j' || Q_1 || j \rangle|^2 \quad (6.41)$$

Es bleibt zu erwähnen, daß  $\hbar/\tau$  mit der natürlichen Linienbreite des Überganges  $E' \rightarrow E$  identifiziert werden kann.

---

Stehen nämlich verschiedene Zerfallskanäle  $E' \rightarrow E_i$  offen, so errechnet sich die Gesamtbreite als Summe der partiellen Breiten und die Lebensdauer als die inverse Gesamtbreite. Daß  $\tau^{-1}$  mit der Rate für die spontane Emission übereinstimmt, folgt aus dem exponentiellen Zerfallsgesetz.

<sup>8</sup>Die Temperaturunabhängigkeit der Lebensdauer ist nur so lange richtig, als wir mit klassischer Statistik der Teilchen in der Wand rechnen dürfen. Haben wir es dagegen mit einem entarteten Elektronengas zu tun, so tritt in unserer Rechnung die Fermiverteilung an die Stelle der Boltzmann-Verteilung. Hierdurch wird neben der Temperatur noch ein weiterer Parameter, nämlich die Fermi-Energie  $E_F$  eingeführt. Das Ergebnis der neuen Rechnung zeigt, daß die partielle Breite (6.40) durch einen zusätzlichen Faktor  $[\exp \beta(E_F - E) + 1]^{-1}$  vermindert ist, was plausibel erscheint, weil das Pauli-Prinzip den Übergang  $E' \rightarrow E$  behindert, und zwar umso stärker, je vollständiger das Niveau  $E$  besetzt ist. In solchen Situationen ist die Lebensdauer temperaturabhängig.

## 6.6 Verbotene Übergänge

Es ist denkbar, daß für gewisse stationäre Zustände  $\phi$  und  $\phi'$  das Matrixelement  $(\phi', Q_{1m}\phi)$  verschwindet, zum Beispiel dann, wenn die für elektrische Dipolübergänge gültigen Auswahlregeln verletzt sind. In einem solchen Fall tritt der Term mit  $\ell = 0$  in der Entwicklung (6.13) nicht auf, und es wäre dann zu prüfen, ob der der Folgeterm mit  $\ell = 1$  einen endlichen Beitrag liefert. Dann wäre dieser Beitrag zwar dominant, aber dennoch um eine Faktor  $\kappa a$  kleiner<sup>9</sup> als Beiträge mit  $\ell = 0$  normalerweise sein würden. Die Übergangsrate wäre somit um einen Faktor  $(\kappa a)^2$  kleiner, und der Übergang wäre weitgehend unterdrückt. Allgemein: Hat das emittierte oder absorbierte Photon einen Bahndrehimpuls  $\ell > 0$ , so enthält die Übergangsrate einen Unterdrückungsfaktor  $(\kappa a)^{2\ell}$  ("Drehimpulsbarriere"), und man spricht von einem *verbotenen* Übergang.

Um einen verbotenen Übergang näher zu analysieren, müssen Matrixelemente eines für den Übergang charakteristischen Tensoroperators berechnet werden. Alle hierfür notwendigen Tensoroperatoren leiten sich von dem Stromoperator ab. Die Konstruktion vollziehen wir in zwei Schritten, die den Formeln (6.14) und (6.16) entsprechen. Erster Schritt:

$$\mathbf{G}_{\ell m} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \int d^3x H_{\ell m}(x) \mathbf{J}(x, 0) \quad (6.42)$$

Zweiter Schritt:

$$G_{jm}^\ell = \sum_{m_1 m_2} \left( \begin{array}{cc|c} \ell & 1 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) [\mathbf{G}_{\ell m_1}]_{m_2} \quad (6.43)$$

Wir wollen die Struktur der hier eingeführten Operatoren näher untersuchen, indem wir von der Formel (6.22) für den Stromoperator ausgehen. Damit die entstehenden Ausdrücke nicht unübersichtlich werden, wollen wir einige Definitionen treffen.

**Definition 18** Das  $\ell$ -fache Tensorprodukt eines Vektoroperators  $\mathbf{P} = \{P_1, P_2, P_3\}$  mit sich selbst ist ein Tensoroperator vom Typ  $\ell$  mit den

---

<sup>9</sup>Hier ist  $\kappa = \omega/c$  und  $a$  der Ladungsradius, den man durch  $nqa^2 = \int d^3x \rho(x)|x|^2$  definiert, wobei  $\rho(x)$  durch (3.120) gegeben ist.

Komponenten

$$[\mathbf{P}]_{\ell m} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} H_{\ell m}(\mathbf{P}) \quad (6.44)$$

**Definition 19** Es seien  $A_{j_1}$  und  $B_{j_2}$  Tensoroperatoren vom Typ  $j_1$  bzw.  $j_2$  mit den Komponenten  $A_{j_1 m_1}$  und  $B_{j_2 m_2}$ . Für jedes  $j$  mit  $\delta(j_1 j_2 j) = 1$  ist das symmetrische Tensorprodukt  $(A_{j_1} \circ A_{j_2})_j$  vom Typ  $j$  ein Tensoroperator mit den Komponenten

$$(A_{j_1} \circ A_{j_2})_{jm} = \sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \frac{1}{2} \{A_{j_1 m_1}, B_{j_2 m_2}\} \quad (6.45)$$

wobei  $\{A, B\} = AB + BA$  den Antikommutator bezeichnet.

Die Schrödinger-Theorie eines einzelnen Teilchens benötigt nur den Ortsoperator  $\mathbf{Q}$  und den Impulsoperator  $\mathbf{P}$  als Bausteine, mit deren Hilfe alle Observablen von Interesse konstruiert werden können. Unsere Definitionen benutzend, können wir einem solchen Teilchen eine Reihe von Tensoroperatoren zuordnen,

$$([\mathbf{Q}]_{\ell_1} \circ [\mathbf{P}]_{\ell_2})_{\ell m} ,$$

von denen einige physikalische Bedeutung besitzen, z.B. erhalten wir die Drehimpulskomponenten als

$$([\mathbf{Q}]_1 \circ [\mathbf{P}]_1)_{1m} = i[\mathbf{Q} \times \mathbf{P}]_{1m}$$

Wir erinnern an die im Abschnitt 6.3 beschriebene Situation von  $n$  gleichartigen Teilchen der Masse  $M$  und der Ladung  $q$ , mit Ortsoperatoren  $\mathbf{Q}^{(k)}$  und Impulsoperatoren  $\mathbf{P}^{(k)}$ ,  $k = 1, \dots, n$ . Aus (6.22) und (6.42) folgt zunächst

$$\mathbf{G}_{\ell m} = \frac{q}{2M} \sum_{k=1}^n \left( [\mathbf{Q}^{(k)}]_{\ell m} \mathbf{P}^{(k)} + \mathbf{P}^{(k)} [\mathbf{Q}^{(k)}]_{\ell m} \right) \quad (6.46)$$

und somit

$$[\mathbf{G}_{\ell m_1}]_{m_2} = \frac{q}{2M} \sum_{k=1}^n \left\{ [\mathbf{Q}^{(k)}]_{\ell m_1} , [\mathbf{P}^{(k)}]_{1 m_2} \right\} \quad (6.47)$$

Schließlich folgt aus (6.43) und (6.45)

$$G_{jm}^\ell = \frac{q}{M} \sum_{k=1}^n \left( [\mathbf{Q}^{(k)}]_\ell \circ [\mathbf{P}^{(k)}]_1 \right)_{jm} \quad (6.48)$$

Insbesondere erkennen wir in

$$G_{1m}^0 = (q/M)[\mathbf{P}^{(1)} + \dots + \mathbf{P}^{(n)}]_{1m}$$

den Operator, der für die elektrischen Dipolübergänge verantwortlich ist. Unter den Operatoren (6.47) befinden sich auch - von einem Faktor  $2i$  abgesehen - die sphärischen Komponenten des Operators  $\mathbf{M}$  des magnetischen Momentes:

$$G_{1m}^1 = 2i[\mathbf{M}]_{1m} \quad (6.49)$$

$$\mathbf{M} = \frac{q}{2M} \sum_{k=1}^n \mathbf{L}^{(k)} \quad \mathbf{L}^{(k)} = \mathbf{Q}^{(k)} \times \mathbf{P}^{(k)} \quad (6.50)$$

Strahlungsübergänge  $\phi \rightarrow \phi'$ , die durch  $(\phi', G_{1m}^1 \phi)$  dominiert werden, bezeichnet man daher auch als *magnetische Dipolübergänge*. Allgemein werden Übergänge, die durch  $G_{jm}^\ell$  mit  $\ell = j$  vermittelt werden, als *magnetische* Übergänge, alle anderen als *elektrische* Übergänge bezeichnet.

Eine gesonderte Betrachtung erfordert der Fall  $\ell = 1, j = 0$ : Es gibt keine Strahlungsübergänge, die durch den Operator  $G_{00}^1$  vermittelt werden, selbst dann nicht, wenn  $(\phi', G_{00}^1 \phi) \neq 0$  gilt. Wir erhalten nämlich einen Gradienten als Beitrag dieses Matrixelementes zum Übergangstrom  $\mathbf{j}(x)$ . Anders ausgedrückt, der Beitrag<sup>10</sup> zur Fourier-Transformierten  $\tilde{\mathbf{j}}(k)$  hat die Form  $ck$ . Ist  $\mathbf{a}$  der Polarisationsvektor des Photons und  $k$  sein Impuls, so gilt  $\mathbf{a} \cdot k = 0$  (Transversalitätsbedingung), so daß wir auf diese Weise keinen Beitrag zu  $\mathbf{a} \cdot \tilde{\mathbf{j}}(k)$  bekommen, und damit kann  $G_{00}^1$  keinen Beitrag zu den Wirkungsquerschnitten (6.27-28) liefern. Diese Überlegung hat gezeigt, daß keine Photonzustände

<sup>10</sup>Eine einfache Rechnung zeigt, daß dieser Beitrag zu  $\tilde{\mathbf{j}}(k)$  sich explizit als

$$(i/3)k \int d^3x (\phi', x \cdot \mathbf{J}(x) \phi) = -(i/\sqrt{3})k (\phi', G_{00}^1 \phi)$$

schreiben läßt.

produziert werden können, bei denen das Photon den Bahndrehimpuls  $\ell = 1$ , gleichzeitig aber den Gesamtdrehimpuls  $j = 0$  besitzt (antiparallele Stellung von Spin und Bahndrehimpuls).

Das Wigner-Eckart-Theorem erlaubt die Darstellung

$$\langle j_f m_f | G_{jm}^\ell | j_i m_i \rangle = \begin{pmatrix} j & j_i & j_f \\ m & m_i & m_f \end{pmatrix} \langle j_f || G_j^\ell || j_i \rangle$$

sobald Anfangs- und Endzustand einen definierten Drehimpuls besitzen. Beachten wir darüberhinaus noch die Parität der durch (6.47) eingeführten Operatoren,

$$P G_{jm}^\ell P = (-1)^{\ell+1} G_{jm}^\ell, \quad (6.51)$$

so erhalten wir die Auswahlregeln, die auch die verbotenen Übergänge mit einschließen.

- **Magnetische Übergänge:**  $j_i \rightarrow j_f$  mit  $\delta(j j_i j_f) = 1$  und  $j \geq 1$ . Die relative Parität von Anfangs- und Endzustand ist  $(-1)^{j+1}$ .
- **Elektrische Übergänge:**  $j_i \rightarrow j_f$  mit  $\delta(j j_i j_f) = 1$  und  $j \geq 1$ . Die relative Parität von Anfangs- und Endzustand ist  $(-1)^j$ .

Ein Übergang heißt *strikt verboten*, wenn er die allgemein gültigen Auswahlregeln verletzt. Dies ist für jeden Übergang  $j_i = 0 \rightarrow j_f = 0$  der Fall, ungeachtet ob Anfangs- und Endzustand die gleiche Parität besitzen oder nicht. Übergänge der Art  $0 \rightarrow 0$  werden erst in höheren Ordnungen der Störungstheorie möglich. An einem solchen Prozeß sind dann (mindestens) *zwei* Photonen beteiligt, wobei drei Fälle unterschieden werden können:

1. Zwei Photonen werden in einem Elementarprozeß absorbiert.
2. Ein Photon wird absorbiert unter gleichzeitiger Aussendung eines anderen Photons (inelastische Streuung).
3. Zwei Photonen werden in einem Elementarprozeß emittiert.