

Kapitel 8

Symmetrien in der Quantenmechanik

Symmetrie, ob man ihre Bedeutung weit oder eng faßt, ist eine Idee, vermöge derer der Mensch durch Jahrtausende seiner Geschichte versucht hat, Ordnung, Schönheit und Vollkommenheit zu begreifen und zu schaffen.

Hermann Weyl

In der Entwicklung der Physik passierte es oft, dass man die Dynamik eines Systems nicht genau kannte, die experimentellen Daten aber die Existenz einer erhaltenen Größe anzeigten. Erhaltene Größen verdanken ihre Existenz in den meisten Fällen einer Symmetrie des Systems, und die Kenntnis dieser Symmetrie kann hilfreich sein beim Auffinden der korrekten Bewegungsgleichungen. In den fundamentalen Theorien sind die Symmetrien meist evident und werden von Anfang an bei der Systembeschreibung implementiert. Zum Beispiel wird sich das Spektrum eines Atoms nicht ändern, wenn wir dieses in Weimar statt in Jena messen. Wir werden also fordern, dass bei einer Bewegung des physikalischen Systems die Übergangsamplituden oder Eigenwerte von Observablen nicht ändern.

Allgemein verstehen wir unter einer Symmetrie eine Abbildung Γ , welche

- eine 1 – 1 Beziehung zwischen den (physikalisch realisierbaren) reinen Zuständen, dargestellt durch Einheitsstrahlen im Hilbert-Raum, herstellt und
- Übergangswahrscheinlichkeiten erhält

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle \Gamma \phi | \Gamma \psi \rangle|^2.$$

Das wichtige *Theorem von Wigner* besagt nun, dass Γ entweder linear unitär oder antilinear antiunitär ist¹.

¹für die präzise Voraussetzungen des Theorems und dessen Beweis siehe Kapitel 7 in A. Galindo und

8.1 Raumspiegelungen

Unter einer *Raumspiegelung* P , auch Paritätsoperation genannt, ändert sich das Vorzeichen aller Koordinaten. Für ein Teilchen in drei Dimensionen bedeutet das

$$P : \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}. \quad (8.1)$$

Für N Teilchen müssen die Ortskoordinaten aller Teilchen umgekehrt werden.

$$P : \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \longrightarrow \{-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N\}.$$

Es gibt viele physikalische Systeme, bei denen die Raumspiegelung eine Symmetrietransformation ist, bei denen „rechts“ und „links“ völlig gleichberechtigt sind. Wenn es eine Spiegelungssymmetrie gibt, dann muss nach dem *Wignerschen Satz* ein (anti)unitären Operator $\Gamma(P)$ existieren, der die Symmetrietransformation implementiert,

$$|\psi'\rangle = \Gamma(P)|\psi\rangle \quad , \quad A' = \Gamma(P)A\Gamma(P)^{-1}.$$

Die Wirkung auf Ortseigenzustände ist $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \rightarrow |-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N\rangle$. Eine Wellenfunktion im Ortsraum geht daher bei einer Spiegelung über in

$$\psi'(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = (\Gamma(P)\psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N). \quad (8.2)$$

Der lineare Paritätsoperator ist unitär, wie man im Ortsraum leicht nachweist,

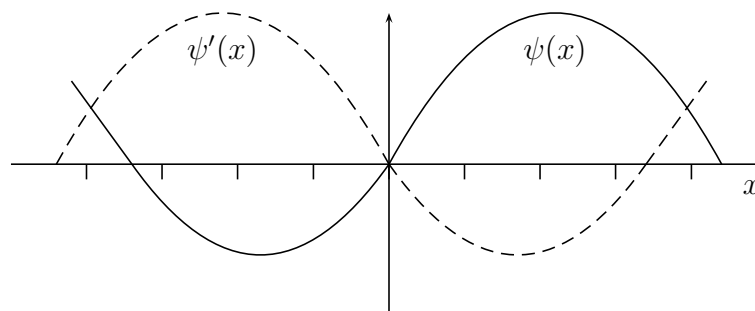


Abbildung 8.1: Die Spiegelung einer Wellenfunktion

$$\langle \phi' | \psi' \rangle = \int d^3x_1 \dots d^3x_N \bar{\phi}(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N) \psi(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N) = \langle \phi | \psi \rangle,$$

P. Pascual, Quantum Mechanics I, Springer 1990

A. Wipf, Quantenmechanik I

und $\Gamma^2 = \mathbb{1}$. Deshalb sind die Eigenwerte von $\Gamma(P)$ reine Phasen, die zu eins quadrieren, also 1 oder -1 . Die Eigenfunktionen zum Eigenwert 1 sind die geraden und diejenigen zum Eigenwert -1 die ungeraden Funktionen:

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) &= \psi(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N) = \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) && \text{gerade} \\ \psi'(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) &= \psi(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N) = -\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) && \text{ungerade.}\end{aligned}\quad (8.3)$$

Wir haben uns früher davon überzeugt, dass für den harmonischen Oszillator die Wellenfunktion des Grundzustandes $\psi_0(x)$ eine gerade Funktion ist, und diejenige des ersten angeregten Zustandes $\psi_1(x)$ ungerade. Weil a^\dagger eine Linearkombination der Ableitung nach x und Multiplikation mit x ist, ist $a^\dagger\psi$ eine ungerade Funktion, wenn ψ gerade ist und umgekehrt. Deshalb sind die ψ_n mit geradem n gerade Funktionen und diejenigen mit ungeradem n ungerade Funktionen.

Diese Eigenschaft der Eigenfunktionen von spiegelsymmetrischen Systemen gelten nicht nur für den harmonischen Oszillator. Wir werden beweisen, dass alle Eigenfunktionen eines Hamilton-Operators mit geradem Potential

$$V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = V(-\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N) \quad (8.4)$$

entweder gerade oder ungerade gewählt werden können. Dazu bestimmen wir den gespiegelten Hamilton-Operator. Impulse wechseln bei einer Raumspiegelung das Vorzeichen und es gilt

$$\Gamma(P)H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\Gamma(P)^{-1} = H(-\mathbf{p}_1, \dots, -\mathbf{p}_N, -\mathbf{x}_1, \dots, -\mathbf{x}_N).$$

Ein hermitescher Vielteilchen-Hamilton-Operator der Form

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (8.5)$$

vertauscht mit dem unitären Paritätsoperator genau dann, wenn das Potential wie in (8.4) gerade ist. Dann können wir H und $\Gamma(P)$ gleichzeitig diagonalisieren. Sind die Eigenwerte von H nicht entartet, wie beim eindimensionalen harmonischen Oszillator, dann sind seine Eigenfunktionen automatisch Eigenfunktionen von $\Gamma(P)$, d.h. entweder gerade oder ungerade. Andernfalls können die Eigenfunktionen von H immer gerade oder ungerade gewählt werden.

8.2 Translationen

Nach den Spiegelungen wenden wir uns den wohl einfachsten kontinuierlichen Symmetrien zu, nämlich den Verschiebungen im Raum. Die *Verschiebungen* oder *Translationen* des Ortes aller Teilchen,

$$\mathbf{x}_i \longrightarrow \mathbf{x}_i + \mathbf{a}, \quad i = 1, \dots, N \quad (8.6)$$

bilden eine dreidimensionale kontinuierliche Liegruppe. Zwei beliebige Translationen kommutieren und derartige Gruppen nennt man Abelsch. Die Translationsgruppe ist isomorph zum Vektorraum \mathbb{R}^3 .

Wie gewohnt transformieren Zustandsvektoren und Operatoren gemäß

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \Gamma(\mathbf{a})|\psi\rangle, \quad A \longrightarrow A' = \Gamma(\mathbf{a})A\Gamma(\mathbf{a})^{-1}, \quad (8.7)$$

mit unitären $\Gamma(\mathbf{a})$. Im Ortsraum ändert eine Wellenfunktionen wie erwartet,

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \longrightarrow (\Gamma(\mathbf{a})\psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{a}), \quad (8.8)$$

und die Unitarität der Γ ist manifest. Die Abbildung $\mathbf{a} \rightarrow \Gamma(\mathbf{a})$ ist eine Abbildung von der Gruppe \mathbb{R}^3 der Translationen in die Gruppe der unitären Operatoren auf dem Hilbert-Raum. Es handelt sich hier um einen Gruppenhomomorphismus,

$$\Gamma(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \Gamma(\mathbf{a})\Gamma(\mathbf{b}) = \Gamma(\mathbf{b})\Gamma(\mathbf{a}) \quad \text{und} \quad \Gamma^{-1}(\mathbf{a}) = \Gamma(-\mathbf{a}). \quad (8.9)$$

Man spricht in diesen Zusammenhang von einer *unitären Darstellung* der Translationen auf dem Hilbert-Raum. Die Darstellungseigenschaft impliziert, dass mit den Translationen auch die darstellenden Operatoren $\Gamma(\mathbf{a})$ untereinander vertauschen,

$$[\Gamma(\mathbf{a}), \Gamma(\mathbf{b})] = 0, \quad \forall \mathbf{a}, \mathbf{b}. \quad (8.10)$$

Sie können deshalb gleichzeitig diagonalisiert werden.

Es stellt sich sofort die Frage, wann die $\Gamma(\mathbf{a})$ mit H vertauschen. Der Hamilton-Operator (8.5) transformiert gemäß

$$\Gamma(\mathbf{a})H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\Gamma^{-1}(\mathbf{a}) = H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \mathbf{x}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{a}) \quad (8.11)$$

und ist genau dann translationsinvariant, wenn das Potential invariant ist,

$$V(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{a}) = V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (8.12)$$

Für derartige Potentiale können die Operatoren H und $\Gamma(\mathbf{a})$ simultan diagonalisiert werden. Die Translationen werden vom Gesamtimpuls des Systems erzeugt,

$$\Gamma(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_N, \quad (8.13)$$

und die Invarianz des Hamilton-Operators

$$H = e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar} H e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar} \quad (8.14)$$

impliziert, dass der gesamte Impuls mit dem Hamilton-Operator kommutiert, $[P_i, H] = 0$. Die Diagonalisierung der unitären Translationsoperatoren ist äquivalent zur Diagonalisierung des hermiteschen Gesamtimpulses. Genauso wie in der klassischen Mechanik ist für translationsinvariante Systeme der Gesamtimpuls eine zeitlich erhaltene Größe.

Hamilton-Operator mit Paar-Wechselwirkungen die nur von den Differenzvektoren zwischen den Teilchepaaren abhängen,

$$H = \sum \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i^2 + \sum_{i<j} V_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (8.15)$$

beschreiben translationsinvariante Systeme. Die Coulomb-Wechselwirkung ist von dieser Art. Für ein Teilchen in einem äußeren Potential ist die Invarianzbedingung $V(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{x})$ nur für konstante Potentiale erfüllt. Nur in Abwesenheit von äußeren Kräften ist der Hamilton-Operator für *ein* Teilchen translationsinvariant.

8.3 Periodische Potentiale

Zahlreiche physikalische Eigenschaften und Vorgänge in geordneten Festkörpern werden durch Elektronen beeinflusst oder gar verursacht. Um einen Festkörper zu verstehen stößt man auf die Schwierigkeit der Lösung eines komplizierten Vielkörperproblems. Eine wesentliche Vereinfachung verspricht - wie beim freien Atom - die Beschränkung der Diskussion auf ein einzelnes Elektron. Die Elektron-Elektron- und Elektron-Kern-Wechselwirkungen werden entweder vernachlässigt oder durch ein auf jedes Elektron gleichermaßen wirkendes gemittelttes effektives Elektron-Gitterpotential berücksichtigt.

Wenn wir noch weiter vereinfachen und das Gitter als unendlich annehmen, so mündet die angestrebte Reduzierung auf das Einteilchenproblem in der für ein Elektron gültigen Schrödingergleichung mit dem effektiven Gitterpotential

$$V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{a}), \quad (8.16)$$

wobei \mathbf{a} ein Gittervektor ist, also zwei beliebige Punkte des Gitters Λ verbindet. Das Gitter

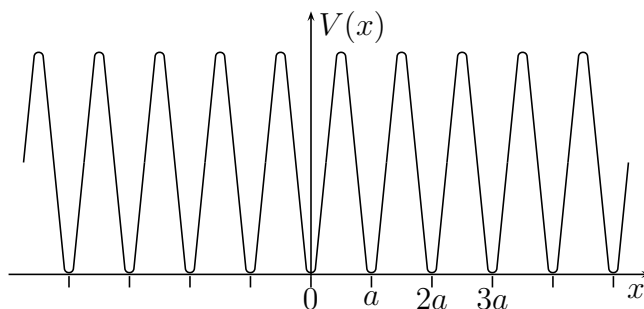


Abbildung 8.2: *Periodisches Potential*

werde von den Gittervektoren $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d$ erzeugt. Für ein d -dimensionales kubisches Gitter Λ wäre

$$\mathbf{a}_i = a \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{a} = \sum_i n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad (8.17)$$

wobei die \mathbf{e}_i eine Orthonormalbasis im \mathbb{R}^d bilden und a den Gitterabstand und damit die Translationsperiode bezeichnet. Das Verständnis des Energiespektrums im periodischen Potential führt zur Einsicht, warum einige Kristalle Isolatoren und andere Leiter sind.

Bei einer Verschiebung mit einem Gittervektor \mathbf{a} ändern sich die Wellenfunktionen im Ortsraum gemäß

$$\psi(\mathbf{x}) \longrightarrow (\Gamma(\mathbf{a})\psi)(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}), \quad \mathbf{a} \in \Lambda, \quad (8.18)$$

und der effektive Einteilchen-Hamilton-Operator

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$

vertauscht mit den Verschiebungsoperatoren, wenn das Gitterpotential periodisch ist,

$$V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{a}), \quad \mathbf{a} \in \Lambda. \quad (8.19)$$

Im Gegensatz zum vorigen Abschnitt betrachten wir hier nur Verschiebungen die das Kristallgitter in sich überführen. Diese Verschiebungen bilden eine diskrete Abelsche Gruppe und die $\Gamma(\mathbf{a})$ stellen diese Gruppe im Hilbertraum dar. Sie erben die *Gruppenstruktur* der Gittertranslationen und bilden eine *Gruppe von unitären kommutierenden Operato-*

ren. Wir haben es also mit einer *unitären Darstellung* der Abelschen Gruppe von Gittertranslationen auf dem Hilbertraum $L_2(\mathbb{R}^3)$ zu tun. Wegen (8.19) vertauschen für ein periodisches Potential alle Verschiebungsoperatoren mit dem Hamilton-Operator sowie untereinander. Deshalb können alle $\Gamma(\mathbf{a})$ gleichzeitig mit H diagonalisiert werden. Die Eigenwerte dieser unitären Operatoren sind reine Phasen.

8.3.1 Blochwellen

Wie sehen nun die gemeinsamen *Eigenfunktionen* der unitären Verschiebungsoperatoren aus? Wegen

$$(\Gamma(\mathbf{a})\psi)(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) + a^i \partial_i \psi(\mathbf{x}) + \dots = (e^{\mathbf{a} \cdot \nabla} \psi)(\mathbf{x}) \equiv (e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}/\hbar} \psi)(\mathbf{x})$$

haben die unitären Verschiebungsoperatoren die Form

$$\Gamma(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}/\hbar}, \quad \mathbf{a} \in \Lambda, \quad (8.20)$$

wobei \mathbf{p} der *Impulsoperator* ist. Die Eigenfunktionen der Verschiebungsoperatoren sind deshalb ebene Wellen,

$$\Gamma(\mathbf{a})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (8.21)$$

mit zugehörigen *Eigenwerten* $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}$. Offensichtlich ändern sich die Eigenwerte nicht, wenn wir den Wellenzahlvektor \mathbf{k} folgendermaßen ändern

$$\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k} + 2\pi \sum_i m_i \mathbf{a}_i^* \quad \text{mit} \quad (\mathbf{a}_i^*, \mathbf{a}_j) = \delta_{ij}.$$

Die Vektoren $\mathbf{a}_1^*, \dots, \mathbf{a}_d^*$ bilden die zu den Gittervektoren $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d$ duale Basis. Wir dürfen also annehmen, dass die Wellenzahlvektoren in der Elementarzelle des dualen Gitters liegen. Wegen

$$\Gamma(\mathbf{a})(\phi\psi) = (\Gamma(\mathbf{a})\phi)(\Gamma(\mathbf{a})\psi)$$

haben $\phi\psi$ und ψ denselben Eigenwert, falls ϕ periodisch ist, $\Gamma(\mathbf{a})\phi = \phi$. Deshalb sind die simultanen Eigenfunktionen der Verschiebungsoperatoren

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad \text{mit periodischem} \quad \phi_{n,\mathbf{k}}. \quad (8.22)$$

Die zugehörigen Eigenwerte von $\Gamma(\mathbf{a})$ sind $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})$. Wir können die Eigenfunktionen von H also immer wie in (8.22) ansetzen, wobei die \mathbf{k} in der Elementarzelle des dualen Gitters liegen. Die Eigenfunktionen (8.22) sind die nach FELIX BLOCH benannten Wellen. Die Schrödingergleichung für ψ geht dann in folgende für die ϕ -Funktionen über:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + V \right) \phi_{n,\mathbf{k}} = E\phi_{n,\mathbf{k}}.$$

Es genügt, die Translationen $\Gamma(\mathbf{a}_i)$ in Richtung der Basisvektoren zu untersuchen, da diese alle anderen Gittertranslationen erzeugen,

$$\Gamma(\mathbf{a}) = \Gamma(\mathbf{a}_1)^{n_1} \dots \Gamma(\mathbf{a}_d)^{n_d}, \quad \text{falls } \mathbf{a} = \sum n_i \mathbf{a}_i$$

ist. Die Eigenwerte der erzeugenden Verschiebungsoperatoren

$$\Gamma(\mathbf{a}_i)\psi_{n,\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \psi_{n,\mathbf{k}}$$

hängen nur vom Wellenzahlvektor in der Elementarzelle des dualen Gitters ab. Wie wir gesehen haben, unterscheiden sich zwei Blochwellen $\psi_{n,\mathbf{k}}$ und $\psi_{n',\mathbf{k}}$ zum selben Wellenzahlvektor nur um eine periodische Funktion.

8.3.2 Kronig-Penney-Modell und Energiebänder

Als ein instruktives und lösbares Modell betrachten wir das *eindimensionale* periodische und unendlich ausgedehnte Gitter von Delta-Distributionen

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V\delta(x - na) \quad (a^* = 1/d). \quad (8.23)$$

In diesem primitiven Modell wird die Wechselwirkung mit den Gitteratomen durch extrem kurzreichweitige Delta-Distributionen am Orte der Atome modelliert. Gemäß der allgemeinen Theorie suchen wir Lösungen der Schrödingergleichung in Form von Bloch-Wellen,

$$\psi_{n,\mathbf{k}} = e^{ikx} \phi_{n,\mathbf{k}} \quad (8.24)$$

mit periodischen $\phi_{n,\mathbf{k}}$. Im einfachen 1-dimensionalen System ist die Elementarzelle des dualen Gitters $[-\pi/a, \pi/a]$ und

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (8.25)$$

Im Intervall $0 < x < a$ verschwindet das Potential und die Bloch-Wellen sind ebene Wellen,

$$\psi_{n,k} = \alpha e^{iqx} + \beta e^{-iqx}, \quad \text{mit} \quad \hbar q = \sqrt{2mE}. \quad (8.26)$$

Deshalb ist

$$\phi_{n,k}(x) = \alpha e^{i(q-k)x} + \beta e^{-i(q+k)x}.$$

Die Konstanten α, β und q sind bestimmt durch folgende Forderungen:

- Jede Lösung $\psi_{n,k}(x)$ muß stetig sein, da sonst an jeder Sprungstelle die zweite Ableitung proportional zur Ableitung der δ -Distribution wäre. Deshalb ist auch $\phi_{n,k}$ stetig

$$\phi_{n,k}(\epsilon) = \phi_{n,k}(-\epsilon) = \phi_{n,k}(a - \epsilon) \quad \text{für} \quad \epsilon \rightarrow 0,$$

wobei wir die Periodizität von $\phi_{n,k}$ benutzten, um wieder in das Intervall $[0, a]$ zu gelangen. Dies führt auf die erste Gleichung für die Konstanten

$$\alpha + \beta = \alpha e^{i(q-k)a} + \beta e^{-i(q+k)a}. \quad (8.27)$$

- Die Bloch-Wellen sollen die Schrödingergleichung lösen,

$$\psi_{n,k}'' = \frac{2mV}{\hbar^2} \sum_n \delta(x - na) \psi_{n,k} - \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{n,k}. \quad (8.28)$$

Offensichtlich muß $\psi'_{n,k}$ an den Gitterpunkten springen, damit die δ -Distribution in der Schrödingergleichung erzeugt wird. Wir erinnern daran, dass die Ableitung der Stufenfunktion $\theta(x)$ gleich der Delta-Distribution ist, $\theta'(x) = \delta(x)$. Deshalb muß gelten

$$\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) = \frac{2mV}{\hbar^2} \psi(0) \quad \text{für} \quad \epsilon \rightarrow 0.$$

Wegen der Periodizität von ϕ_k ist aber

$$e^{-ikx} \psi'(x) = e^{-ik(x+a)} \psi'(x+a).$$

Setzen wir hier $x = -\epsilon$, so impliziert die Schrödingergleichung eine zweite Gleichung

für die Konstanten,

$$iq \left[\alpha - \beta - \alpha e^{ia(q-k)} + \beta e^{-i(q+k)a} \right] = \frac{2mV}{\hbar^2} (\alpha + \beta). \quad (8.29)$$

Die Gleichungen (8.27,8.29) sind zwei homogene lineare Gleichungen für α und β . Daraus gewinnt man durch Elimination folgende Gleichung für die Konstante α in (8.26):

$$\left[\cos(ka) - \cos(qa) - \frac{mV}{q\hbar^2} \sin(qa) \right] \alpha = 0.$$

Der Koeffizient zwischen den eckigen Klammern muss offensichtlich verschwinden,

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{mVa}{\hbar^2} \frac{\sin(qa)}{qa}, \quad |k| \leq \frac{\pi}{a}, \quad E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}. \quad (8.30)$$

Die Lösungen dieser Gleichung diskutiert man am besten graphisch (siehe Fig.8.3): Die

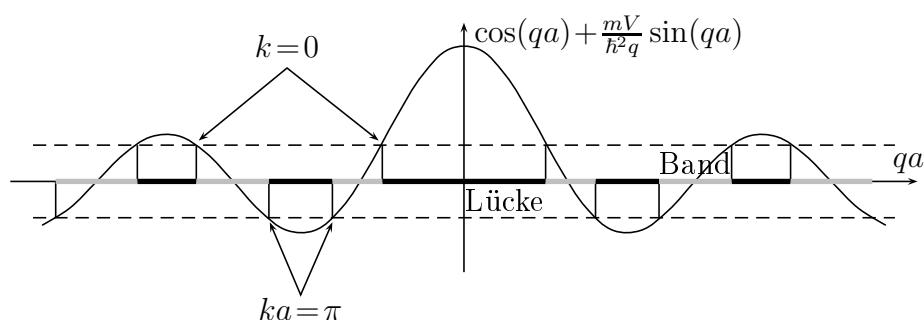
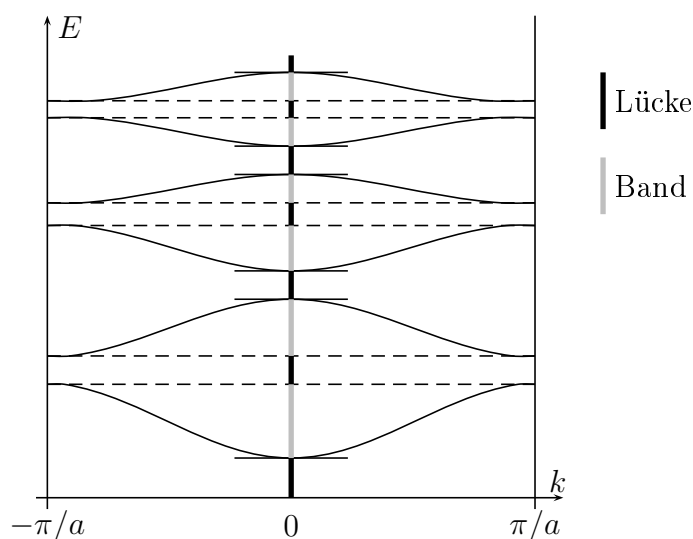


Abbildung 8.3: Erlaubte Werte für q

rechte Seite, interpretiert als Funktion von qa ist die Summe einer geraden periodischen Funktion und einer geraden gedämpften Schwingung. Für positive V überschießt diese Funktion 1, z.B ist die rechte Seite an der Stelle $qa = 0$ gleich $1 + mVa/\hbar^2$. Andererseits ist die linke Seite zwischen -1 und 1 . Deshalb kann qa immer nur Werte annehmen, für welche der Betrag der rechten Seite ≤ 1 ist. Andererseits gibt es für jedes k im Intervall $(-\pi/a, \pi/a]$ unendlich viele q , und damit wegen $E = \hbar^2 q^2/2m$ unendlich viele Energieeigenwerte. Als Funktionen von k sehen die Kurven $E(k)$ wie in Fig.8.4 aus und wir schliessen: Die erlaubten Energien liegen in einem Band, und zwischen den Bändern sind Energie-Lücken. Diese Bänderstruktur mit Lücken zwischen den Bändern ist typisch für alle periodischen Potentiale, auch in 3 Dimensionen.

Abbildung 8.4: *Energiebänder*

Für einen endlichen Kristall der Länge $L = Na$ gibt es natürlich nur eine endliche Anzahl von Zuständen in einem Band. Mit den einfachen Randbedingungen

$$\psi(0) = \psi(L) \quad \text{und} \quad \psi'(0) = \psi'(L)$$

gelten dann für gerades N

$$\phi_k(0) = e^{ikL} \phi_k(L) \implies e^{ikL} = 1$$

und der Wellenzahlvektor nimmt diskrete Werte an,

$$k \in \frac{\pi}{a} \left\{ 1, 1 - \frac{2}{N}, \dots, \frac{2}{N} - 1 \right\}.$$

Wir erwarten also für ein 1-dimensionales Kristall mit N Atomen N verschiedene Zustände in jedem Band. Berücksichtigen wir das Pauli-Prinzip, nachdem zwei identische Elektronen nicht im gleichen Zustand sitzen können, und dass ein Elektron zwei Spinzustände hat, dann haben in jedem Band $2N$ Elektronen Platz. Im Grundzustand sind die tiefsten Zustände mit den N_e Elektronen besetzt. Falls nun genau eine bestimmte Anzahl Bänder besetzt und die anderen unbesetzt sind, dann verhält sich der Festkörper wie ein *Isolator*. Ist ein Band nur teilweise gefüllt, dann ist er ein elektrischer Leiter.

8.4 Drehungen

Nach den Spiegelungen und Gittertranslationen untersuchen wir eine dritte Klasse von wichtigen Symmetrien vieler physikalischer Systeme, die *Drehungen*. Im Gegensatz zu den Translationen vertauschen die zugehörigen unitären Operatoren im Allgemeinen nicht mehr und können deshalb nicht gleichzeitig diagonalisiert werden.

8.4.1 Unitäre Darstellung der Drehungen

Bei der Diskussion der Drehungen im Raum folge ich den entsprechenden Ausführungen in der Vorlesung „Theoretische Mechanik“, wie zum Beispiel in meinem Skript dargelegt². Drehungen im Raum

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = R\mathbf{x}, \quad (8.31)$$

lassen das Skalarprodukt zweier Vektoren invariant,

$$(R\mathbf{x}, R\mathbf{y}) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \implies R^t = R^{-1}, \quad (8.32)$$

und bilden die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$ der eigentlichen Drehungen im Raum. Die Wellenfunktion transformieren gemäß

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \longrightarrow \psi(R^{-1}\mathbf{x}_1, \dots, R^{-1}\mathbf{x}_N) \equiv (\Gamma(R)\psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (8.33)$$

Wie für alle Symmetrien ist $\Gamma(R)$ *unitär* (antiunitär wäre auch erlaubt), weil das Integrationsmaß im Skalarprodukt

$$(\psi, \phi) = \int d^3x_1 \dots d^3x_N \bar{\psi}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \phi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (8.34)$$

bei Drehungen der \mathbf{x}_i nicht ändert, da die Jakobi-Determinante der Transformation den Betrag Eins hat. Man überzeugt sich schnell, dass die Zuordnung $R \rightarrow \Gamma(R)$ eine Darstellung der Drehungen ist,

$$\Gamma(R_1 R_2) = \Gamma(R_1) \Gamma(R_2), \quad \Gamma(R^{-1}) = \Gamma^{-1}(R) \implies \Gamma(\mathbb{1}_3) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (8.35)$$

Es ist eine *unitäre Darstellung der Drehgruppe $SO(3)$* auf dem Hilbertraum $L_2(\mathbb{R}^3)$. Zwei Drehungen kommutieren im Allgemeinen nicht und deshalb werden zwei unitäre Operatoren $\Gamma(R_1)$ und $\Gamma(R_2)$ im Allgemeinen nicht vertauschen.

²Kapitel 2 des Skriptes auf der Seite <http://www.tpi.uni-jena.de/~wipf/lecturenotes.html>.

Da sich bei einer Drehung die Länge r_i von \mathbf{x}_i nicht ändert, dürfen wir annehmen, dass die r_i konstant sind und die \mathbf{x}_i auf Kugeloberflächen liegen. Dann wirken die Drehungen auf dem Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen auf $S^2 \times \dots \times S^2$,

$$(\Gamma(R)\psi)(\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N) = \psi(R^{-1}\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, R^{-1}\hat{\mathbf{x}}_N), \quad \hat{\mathbf{x}}_i = \frac{\mathbf{x}_i}{r_i}.$$

Wir wollen nun untersuchen, wann der Mehrteilchen-Hamilton-Operator (8.5) mit den Drehungen vertauscht. Der Operator im transformierten System lautet

$$\Gamma(R)H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{x}_1, \dots)\Gamma^{-1}(R) = H(R^{-1}\mathbf{p}_1, \dots, R^{-1}\mathbf{x}_1, \dots). \quad (8.36)$$

Die kinetischen Terme sind drehinvariant und H vertauscht mit den Drehungen wenn gilt,

$$V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = V(R^{-1}\mathbf{x}_1, \dots, R^{-1}\mathbf{x}_N). \quad (8.37)$$

Zum Beispiel sind Potentiale deren Paarwechselwirkungen nur von den Abständen der Teilchenpaare abhängt,

$$V = \sum_{i < j} V_{ij}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|), \quad (8.38)$$

drehinvariant. Das Coulomb-Potential ist in diesem Sinne drehinvariant.

8.4.2 Einteilchensysteme

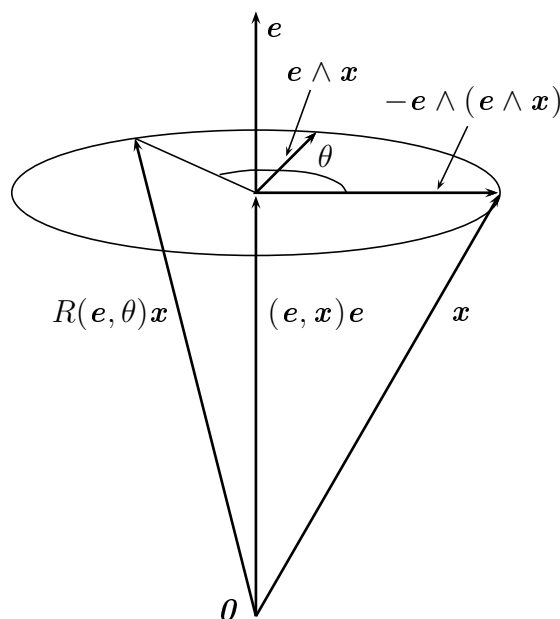
Für *ein* Teilchen ist das (dann äussere) Potential drehinvariant, wenn es nur vom Abstand $r = |\mathbf{x}|$ vom Ursprung abhängt,

$$\Gamma(R)H\Gamma(R)^{-1} = H \iff V(\mathbf{x}) = V(r). \quad (8.39)$$

Diesen einfachen Fall werden wir im Folgenden näher untersuchen. Die Verallgemeinerung der gewonnenen Resultate auf Mehrteilchensysteme ohne Spin ist dann relativ einfach.

Jedes unitäre $\Gamma(R)$ kann als $\exp(-iL/\hbar)$ mit einem hermiteschen Operator L geschrieben werden. Für drehinvariante Potentiale kommutiert mit $\Gamma(R)$ auch L mit H und ist eine Konstante der Bewegung. Wir wollen nun untersuchen, was die zu den Drehungen gehörenden hermiteschen Operatoren sind. Dazu betrachten wir Drehungen um die Achse definiert durch den Einheitsvektor \mathbf{e} mit Winkel θ . Aus der Figur 8.5 entnimmt man, dass eine derartige Drehung folgende Form hat:

$$R(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x} = (\mathbf{e}, \mathbf{x})\mathbf{e} - \mathbf{e} \wedge (\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}) \cos \theta + \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \sin \theta$$

Abbildung 8.5: Drehung um e -Achse mit Winkel θ

$$= \mathbf{x} + \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \theta + O(\theta^2). \quad (8.40)$$

Die infinitesimale Drehung ist

$$\frac{d}{d\theta} R(\mathbf{e}, \theta) \mathbf{x} \Big|_{\theta=0} = \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \equiv \Omega_{\mathbf{e}} \mathbf{x}, \quad (8.41)$$

wobei wir die reelle und schiefsymmetrische Matrix

$$\Omega_{\mathbf{e}} = \begin{pmatrix} 0 & -e_3 & e_2 \\ e_3 & 0 & -e_1 \\ -e_2 & e_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.42)$$

eingeführt haben. Sie dreht Vektoren infinitesimal um die Drehachse. Da e ein Einheitsvektor ist, gelten die Identitäten:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{e}}^2 \mathbf{x} &= \mathbf{e} \wedge (\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}) = (\mathbf{e}, \mathbf{x}) \mathbf{e} - \mathbf{x} \\ \Omega_{\mathbf{e}}^3 \mathbf{x} &= -\mathbf{e} \wedge \mathbf{x} = -\Omega_{\mathbf{e}} \mathbf{x} \end{aligned}$$

und deshalb sind alle geraden Potenzen von $\Omega_{\mathbf{e}}$ proportional zu $\Omega_{\mathbf{e}}^2$ und alle ungeraden Potenzen proportional zu $\Omega_{\mathbf{e}}$,

$$\Omega_{\mathbf{e}}^{2n} = -(-)^n \Omega_{\mathbf{e}}^2, \quad \Omega_{\mathbf{e}}^{2n+1} = (-)^n \Omega_{\mathbf{e}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Damit können wir $\theta\Omega_e$ leicht exponentieren:

$$\begin{aligned} e^{\theta\Omega_e} &= 1 + \Omega_e \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots \right) + \Omega_e^2 \left(\frac{\theta^2}{2!} - \frac{\theta^4}{4!} + \dots \right) \\ &= (1 + \Omega_e^2) - \Omega_e^2 \cos \theta + \Omega_e \sin \theta. \end{aligned}$$

Es folgt dann für jeden Vektor

$$e^{\theta\Omega_e} \mathbf{x} = (\mathbf{e}, \mathbf{x}) \mathbf{e} - \mathbf{e} \wedge (\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}) \cos \theta + \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \sin \theta = R(\mathbf{e}, \theta) \mathbf{x}$$

und damit die Matrix-Identität

$$e^{\theta\Omega_e} = R(\mathbf{e}, \theta). \quad (8.43)$$

Die schiefsymmetrische Matrix Ω_e in (8.42) erzeugt also die Drehungen um die Achse \mathbf{e} .

8.4.3 Drehimpulsoperatoren

Nun suchen wir denjenigen hermiteschen Operator L_e , der die Drehungen um \mathbf{e} im Hilbertraum erzeugt,

$$\Gamma(e^{\theta\Omega_e}) = e^{-i\theta L_e/\hbar}. \quad (8.44)$$

Ausgewertet auf Wellenfunktionen im Ortsraum bedeutet dies

$$\psi(e^{-\theta\Omega_e} \mathbf{x}) = (e^{-i\theta L_e/\hbar} \psi)(\mathbf{x}). \quad (8.45)$$

Wir berechnen nun die Entwicklung der linken Seite in Potenzen von θ ,

$$\begin{aligned} \psi(e^{-\theta\Omega_e} \mathbf{x}) &= \psi(\mathbf{x}) - \theta \Omega_e \mathbf{x} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}) + \frac{\theta^2}{2!} (\Omega_e \mathbf{x} \cdot \nabla)^2 \psi(\mathbf{x}) + \dots \\ &= (e^{-\theta(\Omega_e \mathbf{x}) \cdot \nabla} \psi)(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Der Vergleich mit (8.45) ergibt folgende explizite Form für L_e ,

$$L_e = \frac{\hbar}{i} (\Omega_e \mathbf{x}) \cdot \nabla = (\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}) \cdot \mathbf{p} = \mathbf{e} \cdot (\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}).$$

Wir finden die Projektion des Drehimpuls-Operators auf die Drehachse, also

$$L_e = \mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$$

der *Drehimpulsoperator* ist. Fassen wir zusammen: Die Drehungen um die 3 Koordinatenachsen werden durch die 3 Drehimpulsoperatoren

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \quad (8.46)$$

im folgenden Sinn erzeugt: Ist $e^{\theta\Omega_e}$ die Drehung um e mit Winkel θ , dann ist

$$\psi(e^{-\theta\Omega_e} \mathbf{x}) = (e^{-i\theta \mathbf{e} \cdot \mathbf{L}/\hbar} \psi)(\mathbf{x}). \quad (8.47)$$

Insbesondere erzeugt (e, \mathbf{L}) eine infinitesimale Drehung um e ,

$$\frac{d}{d\theta} \psi(e^{-\theta\Omega_e} \mathbf{x}) \Big|_{\theta=0} = -\frac{i}{\hbar} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}) \psi(\mathbf{x}). \quad (8.48)$$

Ohne zu rechnen, wissen wir a priori, dass die L_i hermitesche Operatoren sein müssen.

Vertauschungsregeln: Wir wollen nun die Kommutatoren der Drehimpulsoperatoren mit den Orts- und Impulsoperatoren und mit sich selbst bestimmen. Wegen

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$$

findet man unter Benutzung der Derivationsregel:

$$\begin{aligned} [L_i, x_j] &= \epsilon_{ipq} [x_p p_q, x_j] = \epsilon_{ipq} x_p [p_q, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijp} x_p, \\ [L_i, p_j] &= \epsilon_{ipq} [x_p p_q, p_j] = \epsilon_{ipq} [x_p, p_j] p_q = i\hbar \epsilon_{ijq} p_q. \end{aligned}$$

Diese Kommutationsregeln kann man nun in den Vertauschungsregeln der Drehimpulsoperatoren untereinander verwenden

$$[L_i, L_j] = \epsilon_{jpk} [L_i, x_p p_k] = \epsilon_{jpk} (x_p [L_i, p_k] + [L_i, x_p] p_k) = i\hbar \epsilon_{jpk} \epsilon_{iks} (x_p p_s - x_s p_p).$$

Mit der nützlichen Identität

$$\epsilon_{abc} \epsilon_{ade} = \delta_{bd} \delta_{ce} - \delta_{be} \delta_{cd} \quad (8.49)$$

wird daraus

$$[L_i, L_j] = i\hbar (-\delta_{ji} \delta_{ps} + \delta_{js} \delta_{pi}) (x_p p_s - x_s p_p) = i\hbar (x_i p_j - x_j p_i),$$

was nichts anderes ist, als

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3, \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1, \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2 \iff [L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (8.50)$$

Die gefundenen Vertauschungsgesetze sind also

$$\begin{aligned} [\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{x}] &= -i\hbar \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \\ [\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{p}] &= -i\hbar \mathbf{e} \wedge \mathbf{p} \\ [\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] &= -i\hbar \mathbf{e} \wedge \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (8.51)$$

Für ein radialsymmetrisches Potential vertauschen alle drei Komponenten des Drehimpulsoperators mit H . Da die L_i nicht miteinander vertauschen, können sie nicht gleichzeitig diagonalisiert werden. Nur *eine* Drehimpulskomponente kann gleichzeitig mit H diagonalisiert werden.

Die Operatoren \mathbf{x} , \mathbf{p} und \mathbf{L} transformieren unter den Drehimpulsoperatoren alle gleich. Ich überlasse es Ihnen zu zeigen, dass die Kommutationsregeln (8.51) äquivalent sind zu

$$\Gamma(R) \mathbf{V} \Gamma(R^{-1}) = R^{-1} \mathbf{V}, \quad \mathbf{V} \in \{\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{L}\}. \quad (8.52)$$

Die Operatoren \mathbf{x} , \mathbf{p} und \mathbf{L} transformieren wie Vektoren unter Drehungen und heißen deshalb *Vektoroperatoren*. Dagegen ist

$$\Gamma(R) H \Gamma(R)^{-1} = H \quad \text{und} \quad \Gamma(R) (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}) \Gamma(R)^{-1} = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}),$$

woraus folgt, daß

$$[\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, H] = 0 \quad \text{und} \quad [\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}] = 0. \quad (8.53)$$

Drehinvariante Operatoren wie H und $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$ vertauschen mit dem Drehimpuls und heißen *skalare Operatoren*.

Die Verallgemeinerung auf N spinlose Teilchen ist nicht schwierig. Anstelle von (8.47) tritt

$$\psi(e^{-\theta \Omega_e} \mathbf{x}_1, \dots, e^{-\theta \Omega_e} \mathbf{x}_N) = (e^{-i\theta \mathbf{e} \cdot \mathbf{L}/\hbar} \psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (8.54)$$

Die Entwicklung für kleine θ bestimmt den hermiteschen Generator $\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}$ der Drehungen der Zustandsvektoren um die \mathbf{e} -Achse. \mathbf{L} ist der gesamte Bahndrehimpuls des Systems,

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{L}_i, \quad \mathbf{L}_i = \mathbf{x}_i \wedge \mathbf{p}_i \quad (8.55)$$

und die Komponenten von \mathbf{L} erfüllen die Kommutationsregeln (8.50).

8.5 Eigenvektoren/werte des Drehimpulses

Neben dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} gibt andere Drehimpulse, zum Beispiel der Teilchenspin oder der gesamte Drehimpuls eines zusammengesetzten Systems. Wird der Drehimpuls nicht näher spezifiziert, dann bezeichnen wir ihn mit \mathbf{J} . Allen Drehimpulsen gemeinsam sind die Vertauschungsrelationen (8.50) und die Hermizität,

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \quad \text{und} \quad J_i^\dagger = J_i. \quad (8.56)$$

Wir werden die Eigenfunktionen und Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren konstruieren, wobei wir nur diese Vertauschungsrelationen und die Hermizität benutzen werden. Deshalb gelten die folgenden Resultate für alle Drehimpulse (Bahndrehimpulse, Spins, gesamte Drehimpulse) gleichermassen.

Wir werden versuchen J_3 zu diagonalisieren (dann werden J_1, J_2 notwendigerweise nichtdiagonal sein). Dafür wird es hilfreich sein, anstelle von J_1 und J_2 die sogenannten *Leiteroperatoren* bzw. *Auf- und Absteigeoperatoren*

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2, \quad \text{mit} \quad J_-^\dagger = J_+ \quad (8.57)$$

einzuführen. Die Leiteroperatoren und J_3 erfüllen die folgenden Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned} [J_3, J_\pm] &= [J_3, J_1] \pm i[J_3, J_2] = i\hbar J_2 \pm \hbar J_1 = \pm\hbar(J_1 \pm iJ_2) = \pm\hbar J_\pm, \\ [J_+, J_-] &= i[J_2, J_1] - i[J_1, J_2] = 2\hbar J_3. \end{aligned}$$

Diese Relationen werden eine wichtige Rolle spielen, und wir wollen sie hervorheben:

$$[J_3, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_3. \quad (8.58)$$

Die Leiteroperatoren J_\pm sind nicht hermitesch und entsprechen keinen Observablen.

Zuerst bemerken wir, daß \mathbf{J}^2 ein skalarer Operator ist und mit den J_i vertauscht,

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{J}^2 = \sum J_i^2. \quad (8.59)$$

Wir können also \mathbf{J}^2 gleichzeitig mit einer Komponente des Drehimpulses diagonalisieren. Üblicherweise wählt man die Komponente J_3 , und wir wollen uns dieser Tradition anschließen. Da das Quadrat jedes hermiteschen Operators nicht-negativ ist,

$$\langle \psi | J_i^2 | \psi \rangle = \langle J_i \psi | J_i \psi \rangle \geq 0,$$

ist \mathbf{J}^2 als Summe von solchen Operatoren selbst nicht-negativ. Ist $|\psi\rangle$ eine Eigenfunktion von \mathbf{J}^2 mit Eigenwert λ , dann ist also

$$\langle\psi|\mathbf{J}^2|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \geq 0. \quad (8.60)$$

Den nichtnegativen Eigenwert λ können wir als $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ schreiben mit $j \geq 0$. Da der Drehimpuls die Dimension $[\hbar]$ hat, ist j eine dimensionslose Zahl. Später wird sich zeigen, daß $2j \in \{0, 1, 2, \dots\}$ gelten muss. Die Quantenzahl j heißt *Drehimpulsquantenzahl* oder im Wasserstoffatom auch *Nebenquantenzahl* (um sie von der Hauptquantenzahl zu unterscheiden). Die Eigenwerte von J_3 seien $\hbar j_3$, das dimensionslose j_3 ist die *magnetische Quantenzahl* (sie gibt Auskunft über die Energie eines Elektrons im äußeren Magnetfeld), und die gemeinsamen *normierten Eigenfunktionen* von \mathbf{J}^2 und J_3 seien $|jj_3\rangle$,

$$\mathbf{J}^2|jj_3\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jj_3\rangle \quad \text{und} \quad J_3|jj_3\rangle = \hbar j_3|jj_3\rangle. \quad (8.61)$$

Im Folgenden brauchen wir noch die Umformung des Produktes $J_{\pm}J_{\mp}$:

$$J_{\pm}J_{\mp} = J_1^2 + J_2^2 \mp i(J_1J_2 - J_2J_1) = \mathbf{J}^2 - J_3^2 \pm \hbar J_3. \quad (8.62)$$

Wegen $J_{-}^{\dagger} = J_{+}$ gilt auch

$$\langle jj_3|J_{\pm}J_{\mp}|jj_3\rangle = \langle J_{\mp}jj_3|J_{\mp}jj_3\rangle \geq 0,$$

worin wir die linke Seite mit Hilfe von (8.62) leicht ausrechnen können,

$$\langle jj_3|J_{\mp}J_{\pm}|jj_3\rangle = \langle jj_3|(\mathbf{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar J_3)|jj_3\rangle = \hbar^2 c_{\pm}(j, j_3)\langle jj_3|jj_3\rangle. \quad (8.63)$$

mit Konstanten

$$c_{\pm}(j, j_3) = j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1) \quad (8.64)$$

Die linke Seite von (8.63) ist nur wie gefordert nicht-negativ für

$$c_{\pm}(j, j_3) \geq 0 \iff \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \geq \left(j_3 \mp \frac{1}{2}\right)^2. \quad (8.65)$$

Diese beiden Ungleichungen implizieren

$$-j \leq j_3 \leq j. \quad (8.66)$$

Nun benützen wir ähnliche Argumente wie bei der Bestimmung der Eigenfunktionen und

Eigenwerte des harmonischen Oszillators mittels der Auf- und Absteigeoperatoren. Wegen (8.58) gilt

$$J_3 J_{\pm} |jj_3\rangle = J_{\pm} (J_3 \pm \hbar) |jj_3\rangle = \hbar J_{\pm} (j_3 \pm 1) |jj_3\rangle = \hbar (j_3 \pm 1) J_{\pm} |jj_3\rangle.$$

Damit hat $J_{\pm} |jj_3\rangle$ den J_3 -Eigenwert $\hbar(j_3 \pm 1)$. Allerdings brauchen diese Zustände nicht normiert zu sein, und wir können nur schließen

$$J_{\pm} |jj_3\rangle = c_{\pm} |j, j_3 \pm 1\rangle,$$

mit j und j_3 -abhängigen Normierungskonstanten c_{\pm} . Wir wollen diese Konstanten so wählen, dass die $|jj_3\rangle$ alle Norm Eins haben. Wegen

$$\langle jj_3 | J_{\mp} J_{\pm} |jj_3\rangle = |c_{\pm}|^2 \langle j, j_3 \pm 1 | j, j_3 \pm 1\rangle \stackrel{(8.63)}{=} \hbar^2 c_{\pm}(j, j_3) \langle jj_3 | jj_3\rangle$$

gilt nach geeigneter Wahl der Phasen der Eigenfunktionen die nützliche Beziehung

$$J_{\pm} |jj_3\rangle = \hbar \sqrt{c_{\pm}(j, j_3)} |j, j_3 \pm 1\rangle \quad (8.67)$$

zwischen den gleich normierten Eigenfunktionen. Ist $\hbar j_3$ Eigenwert von J_3 , so sind es auch $\hbar(j_3 \pm 1)$, es sei denn, die Wurzeln in (8.67) verschwinden. In der Tat, wegen (8.66) muss j_3 kleiner gleich j sein und deshalb muss für ein $j_3 \leq j$ gelten

$$c_+(j, j_3) = 0 \iff j_3 = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}.$$

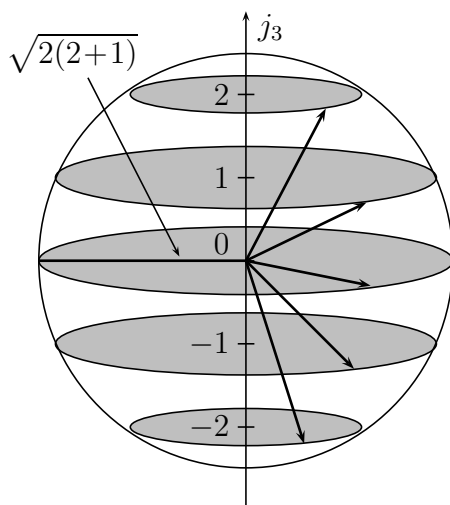
Von den zwei Lösungen dieser Gleichung ist wegen (8.66) nur diejenige mit $j_3 = j$ erlaubt. Am anderen Ende des Spektrums sollte für ein $j_3 \geq -j$ gelten

$$c_-(j, j_3) = 0 \iff j_3 = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2},$$

damit j_3 nicht kleiner als $-j$ wird. Die mit (8.66) verträgliche Lösung ist $j_3 = -j$. Damit die Ungleichungen (8.66) erfüllt sind, müssen also $\hbar j$ und $-\hbar j$ Eigenwerte von J_3 sein. Da aber die Differenz zweier Eigenwerte von J_3 ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar ist, muss $j - (-j) = 2j$ eine ganze Zahl sein:

$$j = \text{ganz oder halbganz}, \quad j_3 = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j. \quad (8.68)$$

Für jede Nebenquantenzahl j gibt es dann $2j + 1$ verschiedene magnetische Quantenzahlen j_3 und die Entartung von j ist $2j + 1$. Da die $|jj_3\rangle$ normierte Eigenfunktionen der

Abbildung 8.6: Illustration zum quantenmechanischen Drehimpuls für $j = 2$.

hermiteschen Operatoren \mathbf{J}^2 und J_3 sind, bilden sie ein Orthonormalsystem,

$$\langle jj_3 | j' j'_3 \rangle = \delta_{jj'} \delta_{j_3 j'_3}, \quad (8.69)$$

Wir haben also folgendes Bild vor Augen: Im Zustand $|jj_3\rangle$ ist die dritte Komponente des Spins gleich $\hbar j_3$. Die Länge des Drehimpulsvektors ist $\hbar\{j(j+1)\}^{1/2}$. Die transversale Komponente des Drehimpulses, $(J_1^2 + J_2^2)^{1/2} = (\mathbf{J}^2 - J_3^2)^{1/2}$ hat die Länge $\hbar\{j(j+1) - j_3^2\}^{1/2}$. Allerdings kennen wir die Richtung des transversalen Drehimpulses nicht, da J_1, J_2 nicht gleichzeitig mit J_3 scharf sein können (die Drehimpulskomponenten kommutieren nicht). In der Tat, mit der Heisenbergschen Unschärferelation folgt

$$\langle jj_3 | (\Delta J_1)^2 | jj_3 \rangle \langle jj_3 | (\Delta J_2)^2 | jj_3 \rangle \geq \left(\frac{\hbar j_3}{2} \right)^2. \quad (8.70)$$

Im nächsten Abschnitt werden wir sehen, dass für den Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ die magnetische Quantenzahl und damit auch die Nebenquantenzahl immer ganzzahlig sein muss. Dies folgt aus der Forderung, daß die Wellenfunktion einfachwertig sein soll. Üblicherweise bezeichnet man den Bahndrehimpuls mit \mathbf{L} , seine magnetische Quantenzahl j_3 mit m und seine Nebenquantenzahl j mit ℓ .

Der Spinoperator eines Teilchens mit Spin $\frac{1}{2}$, zum Beispiel eines Elektrons, Myons, Quarks oder Protons, lautet

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad (8.71)$$

und erfüllt ebenfalls die Kommutationsregeln $\mathbf{S} \wedge \mathbf{S} = i\hbar\mathbf{S}$. Wegen

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

sind die möglichen Eigenwerte von S_3 gleich $\pm\frac{1}{2}\hbar$.

8.5.1 Kugelflächenfunktionen

Nun wollen wir die Eigenfunktionen $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}) \in L_2(S^2)$ des Bahndrehimpulses für ein Einteilchensystem in der Ortsdarstellung explizit konstruieren, ähnlich den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Wir wählen Kugelkoordinaten

$$\mathbf{x} = r\hat{\mathbf{x}}, \quad \hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}. \quad (8.72)$$

Dann ist die dritte Komponente des Drehimpulses in der Ortsdarstellung

$$L_3 = \frac{\hbar}{i}(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \quad (8.73)$$

Die Lösungen der Eigenwertgleichung $L_3Y_{\ell m} = \hbar mY_{\ell m}$ sind Exponentialfunktionen in φ ,

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi}P_{\ell m}(\theta), \quad (8.74)$$

wobei die $P_{\ell m}$ noch unbestimmte Funktionen sind. Die verbleibenden zwei Drehimpulse lauten in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} L_1 &= x_2p_3 - x_3p_2 = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \\ L_2 &= x_3p_1 - x_1p_3 = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right). \end{aligned}$$

Daraus folgt die explizite Form für die Leiteroperatoren:

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right). \quad (8.75)$$

Explizite Form der Kugelflächenfunktionen.

Wir bestimmen zuerst die Eigenfunktion $Y_{\ell\ell} = e^{i\ell\varphi}P_{\ell\ell}(\theta)$ mit maximaler magnetischer

Quantenzahl $m = \ell$. Diese werden vom Aufsteigeoperator L_+ annihiliert,

$$\begin{aligned} L_+ Y_{\ell\ell} &= \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\ell\varphi} P_{\ell\ell} \\ &= \hbar e^{i(\ell+1)\varphi} \left(\partial_\theta P_{\ell\ell} - \frac{\ell \cos \theta}{\sin \theta} P_{\ell\ell} \right) = 0. \end{aligned}$$

Damit wird

$$Y_{\ell\ell} = c e^{i\ell\varphi} \sin^\ell(\theta),$$

mit einer Konstante c . Nun können wir die Eigenfunktionen $Y_{\ell m}$ durch mehrmaliges Anwenden des Leiteroperators L_- generieren,

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = c_{\ell m} (L_-)^{\ell-m} Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi).$$

Die Normierungsbedingung für die Kugelflächenfunktionen lauten

$$\int d\Omega \bar{Y}_{\ell m}(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \bar{Y}_{\ell m}(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$

Mit Hilfe des Integrals

$$\int_0^\pi (\sin \theta)^{2\ell+1} d\theta = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(2^\ell \ell!)^2}{(2\ell)!} \quad (8.76)$$

ergeben sich die normierten Eigenfunktionen mit maximaler magnetischer Quantenzahl,

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}} (2\ell)! \sin^\ell \theta e^{i\ell\varphi}, \quad (8.77)$$

wobei der Phasenfaktor $(-1)^\ell$ der üblichen Konvention entspricht. Die anderen Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ können vermittelt

$$Y_{\ell, m-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}} e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\varphi) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

aus $Y_{\ell\ell}$ berechnet werden. Diese rekursive Definition führt zu folgendem orthonormierten System ($u = \cos \theta$):

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^{\ell-m}}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{\sin^m \theta} \left(\frac{d}{du}\right)^{\ell-m} (1-u^2)^{\ell}. \quad (8.78)$$

Die Funktionen bis $\ell = 2$ sind:

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, & Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), & Y_{2\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}$$

Nur Y_{00} ist kugelsymmetrisch. Für $m = \ell$, also „Parallelstellung“ von Bahndrehimpuls und 3-Achse, würde sich klassisch das Elektron auf einer Kreisbahn in der $(1, 2)$ -Ebene bewegen. Quantenmechanisch ergibt sich eine keulenförmige Verteilung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\sim |Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi)|^2$, die um so schlanker wird, je größer ℓ wird. Für $m = 0$ ist der Drehimpuls irgendwo senkrecht zur 3-Achse. Wenn man sich das Teilchen auf einer die 3-Achse enthaltende Bahnebene denkt und dann die Ebene um diese Achse dreht, sieht man, dass die größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\sim |Y_{\ell 0}|^2$ bei den Polen liegt.

Eigenschaften: Die Kugelfunktionen mit m und $-m$ sind, bis auf eine Phase, komplex konjugiert:

$$Y_{\ell, -m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \bar{Y}_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Da für ein kugelsymmetrisches Potential neben L_3 und L^2 auch der Paritätsoperator mit H vertauscht, sollten wir nachprüfen, wie die Wellenfunktionen unter der Paritätsoperation $\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(-\mathbf{x})$ transformieren: In Kugelkoordinaten ist eine Spiegelung

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

und damit

$$e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi}, \quad \sin \theta \rightarrow \sin \theta, \quad \cos \theta \rightarrow -\cos \theta.$$

Aus (8.78) folgt dann, dass

$$(PY_{\ell m})(\theta, \varphi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (8.79)$$

gilt. Die Zustände mit gerader Nebenquantenzahl sind gerade und diejenigen mit ungerader Nebenquantenzahl ungerade.

Die Operatoren L_3, \mathbf{L}^2 sind auf $L_2(S^2)$, dem Raum der quadratintegriblen Funktionen auf der Kugeloberfläche, selbstadjungiert. Die Eigenfunktionen $Y_{\ell m}$ bilden deshalb ein vollständiges Orthonormalsystem auf diesem Raum. Jede Funktion $f(\theta, \varphi) \in L_2(S^2)$ kann als Linearkombination der $Y_{\ell m}$ dargestellt werden:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell, m} \alpha_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Die Koeffizienten berechnen sich dann gemäß

$$\alpha_{\ell m} = \int d\Omega \bar{Y}_{\ell m}(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi).$$

Diese Vollständigkeit ist äquivalent zur Relation $\sum |\ell m\rangle \langle \ell m| = \mathbb{1}$, die in der Ortsdarstellung folgende Form hat

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \bar{Y}_{\ell m}(\theta', \varphi') Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \theta - \cos \theta').$$

Wir notieren noch, dass die Kugelfunktionen folgende *Summenregel* erfüllen:

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi}.$$

Betrachtet man die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen als Störung, dann ist die folgende „Faktorisierung“ des Coulombpotentials nützlich

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{1}{2\ell + 1} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} \bar{Y}_{\ell m}(\theta', \varphi') Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

wobei $r_{<}$ ($r_{>}$) den kleineren (größeren) der Radien r und r' bezeichnet.

8.6 Darstellung der Drehungen

Wir haben uns früher davon überzeugt, dass die Operatoren

$$(\Gamma(\boldsymbol{\alpha})\psi)(\mathbf{x}) = (e^{-i\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{L}/\hbar}\psi)(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{x}), \quad \boldsymbol{\alpha} = \theta\mathbf{e}$$

eine unitäre Darstellung der Drehgruppe auf dem Hilbertraum $L_2(S^2)$ der auf S^2 quadratintegriblen Funktionen definieren,

$$R(\boldsymbol{\gamma}) = R(\boldsymbol{\beta})R(\boldsymbol{\alpha}) \implies \Gamma(\boldsymbol{\gamma}) = \Gamma(\boldsymbol{\beta})\Gamma(\boldsymbol{\alpha}). \quad (8.80)$$

Der $(2\ell + 1)$ -dimensionale Unterraum

$$\mathcal{Y}_\ell = \text{Span}\{Y_{\ell m} | m = -\ell, \dots, \ell\} \subset L_2(S^2) \quad (8.81)$$

wird durch die Operatoren L_3, L_\pm und damit durch die Drehimpulsoperatoren L_i auf sich abgebildet. Damit ist jedes \mathcal{Y}_ℓ in der orthogonalen Zerlegung

$$L_2(S^2) = \mathcal{Y}_0 \oplus \mathcal{Y}_1 \oplus \mathcal{Y}_2 \oplus \dots = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} \mathcal{Y}_\ell$$

invariant unter jeder Potenz von $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L}$ und damit unter jeder Drehung $\Gamma(\boldsymbol{\alpha})$,

$$\Gamma(\boldsymbol{\alpha}) : \mathcal{Y}_\ell \longrightarrow \mathcal{Y}_\ell, \quad \Gamma(\boldsymbol{\alpha})|\ell m\rangle = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} |\ell m'\rangle D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (8.82)$$

mit $(2\ell + 1)$ -dimensionaler unitärer Matrix

$$D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle \ell m' | \Gamma(\boldsymbol{\alpha}) | \ell m \rangle. \quad (8.83)$$

Diese Formeln sind äquivalent zu

$$Y_{\ell m}(R^{-1}(\boldsymbol{\alpha})\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m'}(\hat{\mathbf{x}}) D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}). \quad (8.84)$$

Wir wollen uns nun überzeugen, daß

$$R(\boldsymbol{\alpha}) \longrightarrow D^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (8.85)$$

eine $(2\ell + 1)$ -dimensionale unitäre Darstellung der Drehgruppe definiert.

Die Matrix $D^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha})$ ist die Einschränkung des unitären $\Gamma(\boldsymbol{\alpha})$ auf den invarianten Teilraum \mathcal{Y}_ℓ und ist deshalb unitär. Seien nun

$$D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle \ell m' | \Gamma(\boldsymbol{\alpha}) | \ell m \rangle \quad \text{und} \quad D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\beta}) = \langle \ell m' | \Gamma(\boldsymbol{\beta}) | \ell m \rangle$$

die den Drehungen $R(\boldsymbol{\alpha})$ und $R(\boldsymbol{\beta})$ zugeordneten Matrizen und $\Gamma(\boldsymbol{\gamma})$ wie in (8.80) definiert. Dann ist

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(\ell)}(\boldsymbol{\gamma}) &= \langle \ell m' | \Gamma(\boldsymbol{\beta}) \Gamma(\boldsymbol{\alpha}) | \ell m \rangle = \sum_{m''} \langle \ell m' | \Gamma(\boldsymbol{\beta}) | \ell m'' \rangle \langle \ell m'' | \Gamma(\boldsymbol{\alpha}) | \ell m \rangle \\ &= \sum_{m''} D_{m'm''}^{(\ell)}(\boldsymbol{\beta}) D_{m''m}^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}), \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$D^{(\ell)}(\boldsymbol{\gamma}) = D^{(\ell)}(\boldsymbol{\beta}) D^{(\ell)}(\boldsymbol{\alpha}). \quad (8.86)$$

Da zusätzlich $D^{(\ell)}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{1}$ gilt haben wir bewiesen, dass (8.85) eine $(2\ell + 1)$ -dimensionale Darstellung der Drehgruppe $SO(3)$ ist. Diese Darstellungen sind irreduzibel, da mittels der Leiteroperatoren jeder Zustand im invarianten Unterraum auf jeden anderen Zustand in diesem Unterraum abgebildet werden kann.

Wir wollen noch die *Charakteren* dieser irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ bestimmen. Wir können als z -Achse unseres Koordinatensystems immer die Drehachse wählen. Also ist die Drehung um \mathbf{e} mit Winkel θ äquivalent zu der Drehung um die z -Achse mit demselben Winkel,

$$R(\theta, \mathbf{e}) \sim R(\theta, \mathbf{e}_3) = e^{\theta \Omega_3} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8.87)$$

Die zugehörige Darstellungsmatrix

$$D_{m'm}^{(\ell)}(\theta) = \langle \ell m' | e^{-i\theta L_3/\hbar} | \ell m \rangle = e^{-im\theta} \delta_{mm'}$$

ist diagonal. Damit ist der Charakter χ_ℓ der Darstellung $R \rightarrow D^{(\ell)}$ gleich

$$\chi_\ell(\theta) = \text{Sp} (D^{(\ell)}(\theta)) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{-im\theta} = \frac{\sin(2\ell + 1)\theta}{\sin \theta}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (8.88)$$

Diese Charakteren sind uns aus der Vorlesung *Mathematischen Methoden der Physik* wohlbekannt. Es sind die Charakteren der irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$. Die

Darstellungsmatrizen $D^{(\ell)}$ können mit unseren bisherigen Resultaten berechnet werden. Aus Zeitgründen muss ich allerdings auf die Literatur verweisen.