VII.2 Addition und Kopplung von Drehimpulsen

In der klassischen Mechanik definiert man für ein System aus N Teilchen mit jeweiligen Drehimpulsen $\{\vec{L}^{(1)}, \vec{L}^{(2)}, \ldots, \vec{L}^{(n)}\}$ den Gesamtdrehimpuls $\vec{L}_{\rm tot} = \sum_a \vec{L}^{(a)}$. Wenn das System keinem äußeren Drehmoment unterliegt, ist dieser Gesamtdrehimpuls eine Konstante der Bewegung, obwohl die individuellen Drehimpulse nicht unbedingt erhalten bleiben.

VII.2.1 Addition von Drehimpulsen

Hiernach wird der Einfachheit halber die Addition von zwei Drehimpulsen $\hat{\vec{J}}^{(1)}$, $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ betrachtet, entsprechend einem Gesamtdrehimpulsoperator

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}, \tag{VII.10}$$

wobei die genauere Bedeutung dieser Definition in § VII.2.1 a weiter präzisiert wird.

Die Ergebnisse lassen sich dann problemlos auf drei Drehimpulsoperatoren oder mehr verallgemeinern.

VII.2.1 a Gesamtdrehimpulsoperator

Die Drehimpulsoperatoren $\hat{\vec{J}}^{(1)}$ und $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ wirken eigentlich auf die Vektoren zwei unterschiedlicher Hilbert-Räume $\mathscr{H}_1$, $\mathscr{H}_2$ — die isomorph zueinander sein können, nichtsdestotrotz mit unterschiedlichen Notationen bezeichnet werden. Dementsprechend ist die Addition der Operatoren (VII.10) streng genommen sinnlos, denn dabei werden Größen unterschiedlicher mathematischer Natur dargestellt.

In der Tat steht Gl. (VII.10) für

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2} + \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \hat{\vec{J}}^{(2)}, \tag{VII.11}$$

mit den Identitätsoperatoren $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_j}$ auf jedem Raum $\mathscr{H}_j$, wobei sowohl $\hat{\vec{J}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2}$ als $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \hat{\vec{J}}^{(2)}$ Operatoren auf dem Tensorraum $\mathscr{H} \equiv \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ sind. Dann ist die Addition wohldefiniert und $\hat{\vec{J}}$ ist auch ein Operator auf diesem Hilbert-Raum.

Da $\hat{\vec{J}}^{(1)}$ und $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ Drehimpulsoperatoren sind, folgert man aus der Definition (VII.11), dass $\hat{\vec{J}}$ der charakteristischen Vertauschungsrelation (V.42) eines Drehimpulsoperators genügt:

$$\big[\hat{J}_a, \hat{J}_b\big] = \mathrm{i}\hbar \sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc} \hat{J}_c \quad \forall a, b \in \{1, 2, 3\}. \tag{VII.12}$$

Unter Nutzung des Ergebnisses (V.58) sind dann die Eigenwerte von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$, die gleichzeitig diagonalisierbar sind, bekannt, und zwar jeweils der Form $J(J+1)\hbar^2$ bzw. $M\hbar$ mit J entweder halb- oder ganzzahlig und $M \in \{-J, -J+1, \ldots, J-1, J\}$.

Eine Aufgabe der nächsten Paragraphen wird sein, die physikalisch realisierbaren Werte von J bei gegebenen $\hat{\vec{J}}^{(1)}$, $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ zu bestimmen sowie die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ zu finden.

Der Kürze halber werden die Identitätsoperatoren $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1}$, $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2}$ hiernach nicht geschrieben. Somit stehen

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2 \ , \quad \hat{J}_z^{(1)} \ , \quad \big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2 \ , \quad \hat{J}_z^{(2)} \tag{VII.13a}$$

jeweils für

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2 \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2} = \big[\hat{\vec{J}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2}\big]^2 \ , \quad \hat{J}_z^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2} \ , \quad \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2 = \big[\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2 \ , \quad \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \hat{J}_z^{(2)}, \tag{VII.13b}$$

was sofort klar macht, warum z.B. die im Folgenden mit $\hat{J}_z^{(1)}$ und $\hat{J}_z^{(2)}$ bezeichneten Operatoren miteinander kommutieren.

VII.2.1 b Sätze von kommutierenden Observablen

Um die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ zu charakterisieren, sollten wir in der Lage sein, sie durch „bekannte" Vektoren des Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ auszudrücken. Dies motiviert die Suche nach Basen dieses Hilbert-Raums, und insbesondere nach Orthonormalbasen aus gemeinsamen Eigenzuständen von vollständigen Sätzen kommutierender Observablen. Dementsprechend werden solche Sätze gesucht.

Bemerkung: Hiernach wird angenommen, dass die Drehimpuls-Freiheitsgrade die Zustände komplett charakterisieren, d.h. dass die angegebenen Sätze von Observablen vollständig sind. Wenn das nicht der Fall ist, sind die Eigenzustände durch zusätzliche Quantenzahlen gekennzeichnet, um (bis auf einen Phasenfaktor) eindeutig definiert zu sein.

Ein erster möglicher vollständiger Satz von kommutierenden Observablen besteht aus $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$, deren gemeinsame Eigenzustände wir letztendlich bestimmen möchten, sowie aus den quadrierten Drehimpulsoperatoren $\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2$ und $\big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2$:

$$\Big\{\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2, \big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2, \hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z\Big\}. \tag{VII.14a}$$

Um zu prüfen, dass die Observablen vertauschen, muss man die korrekte Bedeutung (VII.13b) der zwei ersten Operatoren berücksichtigen.

Die zugehörigen gemeinsamen normierten Eigenzustände sind

$$\big\{|j_1, j_2, J, M\rangle\big\}, \tag{VII.14b}$$

wobei die vier Quantenzahlen j_1, j_2, J, M die jeweiligen Eigenwerte der Operatoren charakterisieren:

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2|j_1, j_2, J, M\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \tag{VII.14c}$$

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2|j_1, j_2, J, M\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \tag{VII.14d}$$

$$\hat{\vec{J}}^2|j_1, j_2, J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \tag{VII.14e}$$

$$\hat{J}_z|j_1, j_2, J, M\rangle = M\hbar|j_1, j_2, J, M\rangle. \tag{VII.14f}$$

Andererseits kommutieren auch die vier Observablen

$$\Big\{\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2, \hat{J}_z^{(1)}, \big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2, \hat{J}_z^{(2)}\Big\}. \tag{VII.15a}$$

Die gemeinsamen Eigenzustände sind Produktzustände aus den Eigenvektoren der Observablen auf dem Hilbert-Raum $\mathscr{H}_1$ mit den Eigenvektoren der Operatoren auf $\mathscr{H}_2$:

$$\big\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle\big\}. \tag{VII.15b}$$

Die zugehörigen Eigenwertgleichungen lauten jeweils

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{VII.15c}$$

$$\hat{J}_z^{(1)}|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = m_1\hbar|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{VII.15d}$$

$$\big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{VII.15e}$$

$$\hat{J}_z^{(2)}|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = m_2\hbar|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle. \tag{VII.15f}$$

Im Folgenden gilt die Basis (VII.15b) als bekannt, und das Ziel ist, die Basisvektoren (VII.14b) darauf zu zerlegen. Somit kann man unter Nutzung einer Vollständigkeitsrelation

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle\langle j_1, m_1; j_2, m_2|j_1, j_2, J, M\rangle \tag{VII.16}$$

schreiben, wobei die Summe über $m_1 \in \{-j_1, \ldots, j_1-1, j_1\}$ und $m_2 \in \{-j_2, \ldots, j_2-1, j_2\}$ läuft.

Diese Zerlegung lautet noch

$$\boxed{|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1,m_2} C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle} \tag{VII.17a}$$

mit den *Clebsch*[ag]*–Gordan*[ah]*-Koeffizienten*

$$\boxed{C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \equiv \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle,} \tag{VII.17b}$$

die die Koeffizienten des Basiswechsels sind.

Die Operatoren $\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2$ und $\big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2$ sind Teil der beiden Sätze (VII.15a) und (VII.14a). Dementsprechend sind die Basiszustände beider Basen (VII.14b) und (VII.14b) durch die gleichen Quantenzahlen j_1 und j_2 gekennzeichnet, die daher in der Notation der Clebsch–Gordan-Koeffizienten nur einmal auftreten.

Ab jetzt wird in einem Unterraum $\mathscr{H}_{j_1,j_2}$ des Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ gearbeitet, in dem j_1 und j_2 feste Werte annehmen. Dann können nur die Quantenzahlen m_1 und m_2 der Eigenzustände (VII.15b) variieren, d.h. es gibt genau $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ solche Basisvektoren, entsprechend der Dimension von $\mathscr{H}_{j_1,j_2}$.

VII.2.1 c Bestimmung der Eigenwerte von $\hat{\vec{J}}^2$

Nun wollen wir die Eigenwerte der Operatoren $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ finden, oder genauer, da ihre Form uns bekannt ist [Gl. (VII.14e)–(VII.14f)], die möglichen Werte von J und M in Abhängigkeit j_1 und j_2 bestimmen. Wie oben schon geschrieben wird M bei gegebener J die Werte

$$M \in \{-J, -J+1, \ldots, J-1, J\} \tag{VII.18}$$

annehmen, so dass die eigentliche Aufgabe ist, die möglichen Werte von J zu finden.

Aus $\hat{J}_z = \hat{J}^{(1)}_z + \hat{J}^{(2)}_z$ folgt offensichtlich

$$M = m_1 + m_2. \tag{VII.19}$$

Dann gelten $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ und $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$. Indem man $m_1 = M - m_2$ bzw. $m_2 = M - m_1$ schreibt, führen diese Ungleichungen zu

$$-j_1 \leq M - m_2 \leq j_1 \quad \text{und} \quad -j_2 \leq M - m_1 \leq j_2.$$

Setzt man $M = J$ und $m_2 = j_2$ und die erste bzw. $m_1 = j_1$ in die zweite Ungleichung ein, so ergeben sich

$$-j_1 \leq J - j_2 \leq j_1 \quad \text{und} \quad -j_2 \leq J - j_1 \leq j_2,$$

d.h. äquivalent

$$j_2 - j_1 \leq J \leq j_2 + j_1 \quad \text{und} \quad j_1 - j_2 \leq J \leq j_1 + j_2.$$

Zusammen lassen sich diese Ungleichungen als

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \tag{VII.20}$$

zusammenfassen.

Nun prüft man sofort, dass der (Basis)Zustand $|j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2\rangle$ auch Eigenzustand von $\hat{J}_z$ mit dem Eigenwert $(j_1 + j_2)\hbar$ ist:

$$\hat{J}_z |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle = (j_1 + j_2)\hbar |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle, \tag{VII.21}$$

d.h. M kann den Wert $j_1 + j_2$ annehmen, was mit Gl. (VII.18) bedeutet, dass das Maximum der Ungleichung (VII.20) erreicht wird. Dazu gibt es nur eine Möglichkeit — und zwar $m_1 = j_1$,

[ag] A. Clebsch, 1833–1872 [ah] P. Gordan, 1837–1912

$m_2 = j_2$ —, um dieses Maximum zu realisieren, d.h. $|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$ ist (bis auf einen Phasenfaktor, der konventionell gleich 1 genommen wird) auch der Eigenket $|j_1, j_2, J = j_1 + j_2, M = J = j_1 + j_2\rangle$:

$$|j_1, j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle. \tag{VII.22}$$

Ausgehend von diesem Zustand lassen sich mithilfe des Absteigeoperators

$$\hat{J}_- \equiv \hat{J}_x - \mathrm{i}\hat{J}_y = \hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)} \tag{VII.23}$$

alle Zustände $|j_1, j_2, J = j_1 + j_2, M\rangle$ mit $M \in \{-(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2\}$ konstruieren.

Betrachtet man nun die Eigenvektoren $|j_1, j_2, J, M\rangle$ mit $M = j_1 + j_2 - 1$, so findet man, dass sich dieser Wert für zwei Kombinationen der Quantenzahlen m_1, m_2 über Gl. (VII.19), und zwar für $(m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1)$ oder $(m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2)$ — wobei natürlich angenommen wird, dass j_1 und j_2 ungleich Null sind. Das heißt, dass der Eigenwert $(j_1 + j_2 - 1)\hbar$ des Operators $\hat{J}_z$ zweimal entartet ist.

Im zugehörigen Eigenraum gibt es somit den Eigenvektor $|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$, der sich aus der Anwendung des Absteigeoperators (VII.23) auf den Eigenket (VII.22) ergibt, und einen anderen Eigenket, der orthogonal dazu sein muss. Aus der Orthogonalitätsbedingung

$$\langle j_1, j_2, J', M' | j_1, j_2, J, M\rangle = \delta_{J'J}\,\delta_{M'M} \tag{VII.24}$$

folgert man, dass dieser zweite Eigenket der Vektor mit $M = J = j_1 + j_2 - 1$ ist — der somit existieren muss! Ausgehend von diesem Eigenvektor $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ findet man mithilfe des Operators $\hat{J}_-$ die ganze Familie von Zuständen mit $J = j_1 + j_2 - 1$ und beliebiger M.

Rekursiv findet man unter Nutzung der Entartung der Eigenräume von $\hat{J}_z$, dass die sukzessiven Eigenvektoren $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - k, j_1 + j_2 - k\rangle$ existieren müssen, zumindest so lange $j_1 + j_2 - k \geq |j_1 - j_2|$ gilt. Dann wird jeder dieser Eigenvektor durch die mithilfe von $\hat{J}_-$ generierten Eigenkets $\{|j_1, j_2, j_1 + j_2 - k, M\rangle\}$ begleitet, die den gleichen Eigenraum von $\hat{\vec{J}}^2$ aufspannen.

Angenommen, dass der minimale realisierte Wert von J in der Tat $|j_1 - j_2|$ ist, so würde die Summe der Dimensionen der gefundenen Eigenräume von $\hat{\vec{J}}^2$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J + 1)$$

betragen, wobei $2J + 1$ der Entartungsgrad des Eigenwerts $J(J + 1)\hbar^2$ ist. Die Berechnung liefert

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 2), \tag{VII.25}$$

d.h. genau die Dimension des Unterraums $\mathscr{H}_{j_1,j_2}$ mit festen Werten von j_1 und j_2. Somit haben wir das folgende Ergebnis gefunden:

Seien $\hat{\vec{J}}^{(1)}$, $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ zwei Drehimpulsoperatoren mit den jeweiligen Spinquantenzahlen j_1 und j_2.
Deren Summe $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}$ ist auch ein Drehimpulsoperator, und die Eigenwerte der Operatoren $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ sind $J(J + 1)\hbar^2$ und $M\hbar$ mit

$$J \in \{|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2\}$$

und bei gegebener J

$$M \in \{-J, -J + 1, \dots, J - 1, J\}.$$

Dabei wird jedes Paar von Werten (J, M) nur einmal realisiert. (VII.26)

Beweis der Gl. (VII.25):
Der Einfachheit halber wird $j_1 + j_2 \in \mathbb{N}$ angenommen — der Fall mit einem halbzahligen und einem ganzzahligen j_i lässt sich daraus kopieren. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man $j_1 \geq j_2$ annehmen. Es gilt dann offensichtlich

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = \sum_{J=0}^{j_1+j_2} (2J+1) - \sum_{J=0}^{j_1-j_2-1} (2J+1).$$

Dann kommt unter Nutzung der Gleichungen $\sum_{i=0}^{n} 1 = n+1$ und $\sum_{i=0}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}$

$$\sum_{J=0}^{j_1+j_2}(2J+1) - \sum_{J=0}^{j_1-_2|-1}(2J+1) = 2\frac{(j_1+j_2)(j_1+j_2+1)}{2} + (j_1+j_2+1) - \left[2\frac{(j_1-j_2-1)(j_1-j_2)}{2} + (j_1-j_2)\right],$$

d.h.

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (j_1+j_2+1)^2 - (j_1-j_2)^2 = 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1$$

entsprechend dem gesuchtem Resultat. □

VII.2.1 d Clebsch–Gordan-Koeffizienten

Können aus der Gl. (VII.23) bestimmt werden!
Erfüllen ein paar Eigenschaften.
Sind in Tabellen zu finden!